

Vers une meilleure assimilation des observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles météorologique et chimique

Olivier Coopmann

▶ **To cite this version:**

Olivier Coopmann. Vers une meilleure assimilation des observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles météorologique et chimique. Météorologie. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2019. Français. ⟨NNT : 2019TOU30303⟩. ⟨tel-03122029⟩

HAL Id: tel-03122029

https://theses.hal.science/tel-03122029v1

Submitted on 26 Jan 2021

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.



HAL Authorization

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)*

Présentée et soutenue le *13/09/2019* **par :**

OLIVIER COOPMANN

Vers une meilleure assimilation des observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles météorologique et chimique.

JURY

SYLVAIN COQUILLAT	Professeur
SÉBASTIEN PAYAN	Professeur
VIRGINIE MARECAL	Directrice de Recherche
VINCENT CASSÉ	Chercheur
GAËLLE DUFOUR	Directrice de Recherche
FRÉDÉRIC CHEVALLIER	Chercheur
VINCENT GUIDARD	Chercheur
NADIA FOURRIÉ	Chargée de Recherche

École doctorale et spécialité :
SDU2E : Océan, Atmosphère et Surfaces Continentales

Unité de Recherche :
CNRM, Université de Toulouse, Météo-France & CNRS (UMR3589)

Directeur(s) de Thèse :
Vincent GUIDARD et *Nadia FOURRIÉ*

Rapporteurs :
Gaëlle DUFOUR et *Frédéric CHEVALLIER*

“ *La sagesse, c'est d'avoir des rêves suffisamment grands pour ne pas les perdre de vue lorsqu'on les poursuit.* ”

Oscar Wilde

Remerciements

La thèse de doctorat représente un travail s'inscrivant dans la durée. Elle n'est pas le fruit d'un travail individuel mais collectif et s'enrichit à mesure qu'elle se déroule. La passion de la météorologie était déjà acquise mais l'amour de la recherche s'est construit à partir de ce sujet de thèse.

Mes premiers remerciements vont bien évidemment vers Vincent Guidard, mon directeur de thèse, qui m'a accordé sa confiance et m'a donné l'opportunité de réaliser un parcours extraordinaire. Cette aventure a commencé grâce à lui en 2015 par la réalisation d'un stage de Master 1 au sein du GMAP[1] au CNRM[2] de Météo-France, puis d'un stage complémentaire pendant l'été qui a suivi et d'un stage de Master 2 en 2016. Enfin il m'a donné la chance de réaliser cette thèse. Il n'est pas seulement un encadrant en or, c'est aussi une personne ayant de rares qualités humaines. Il m'a soutenu dans les moments de doute et m'a poussé à aller toujours plus loin, à toujours faire mieux. C'est une personne brillante qui a su me transmettre des qualités qui me seront bénéfiques pour la suite de ma carrière scientifique. Je lui suis reconnaissant pour son expertise connue et reconnue, sa grande disponibilité, son incroyable gentillesse qui lui a permis d'être très patient avec moi. J'ai appris énormément à ses côté et je lui doit beaucoup. Je souhaite sincèrement aux prochaines générations de doctorants d'avoir un encadrant aussi exceptionnel que Vincent.

Mes remerciements se tournent ensuite naturellement vers Nadia Fourrié, ma co-directrice de thèse, qui a été d'un soutien sans faille tout au long de ces années. De part sa grande pédagogie, Nadia m'a aidé à garder le cap scientifique de ma thèse lorsque je pouvais m'en détourner. Sa patience et sa rigueur m'ont permis de considérablement progresser. Elle m'a également accompagné lors de mes précédents stages jusqu'à la fin de cette thèse et son enthousiasme, sa sympathie et sa générosité ont été d'un grand réconfort dans les moments difficiles. Nadia est d'une rare humanité, elle sait faire ressortir le meilleur de chacun et m'a permis de croire en moi. Au delà de l'aspect professionnel, j'ai grandement apprécié partager des moments de vie avec Nadia : pique-niques, séminaires, conférences, etc. Nadia a su m'encourager pour que je puisse donner le meilleur de moi-même et je lui en serai éternellement reconnaissant. Elle est également une incroyable encadrante et je la remercie pour tout ce qu'elle a fait pour moi.

Je remercie chaleureusement l'équipe de direction du CNRM : Marc Pontaud, Directeur du CNRM, Claire Doubremelle, Directrice adjointe et Philippe Dandin, Directeur adjoint scientifique pour leur accueil au sein du laboratoire et pour leur disponibilité et également l'équipe administrative et informatique pour l'accompagnement et leur aide précieuse toute au long de ces années. Plus largement je remercie le GMAP et son directeur, Alain Joly et François Bouyssel, son directeur adjoint, ainsi que Jean-François Mahfouf, responsable de l'équipe OBS d'avoir suivi avec intérêt mon travail tout au long des 3 années de thèse. Merci de m'avoir accueilli dans cette équipe de travail conviviale.

[1] Groupe de Modélisation et d'Assimilation pour la Prévision
[2] Centre National de Recherche Météorologiques

Je remercie particulièrement Camille Birman pour son précieux soutien et sa gentillesse ainsi que Philippe Chambon, Patrick Moll, Cécile Loo, Florian Suzat, Béatrice Josse, Matthieu Plu, Jean Maziejewski et bien d'autres pour leur bonne humeur et leur précieux conseils scientifiques et techniques m'ayant aidé à surmonter certains obstacles au cours de la thèse. Je remercie l'ensemble des doctorants et des non-permanents qui ont su m'entourer, me soutenir et m'éclairer dans les moments les plus sombres, je pense particulièrement à Léo Ducongé qui a été mon binôme lors du premier stage de Master 1 à Météo-France et pour qui j'ai une profonde amitié. Je pense également à Niama, Imane, Francesca, Guillaume, Bruna, Anne-Lise, Antoine, Matic ... Merci à eux pour leur présence et leur soutien.

Je tiens à remercier particulièrement les membres de mon comité de thèse, Virginie Marécal et Sébastien Payan, pour avoir suivi avec attention mon travail de recherche et m'avoir donné de précieux conseils. Je remercie également Gaëlle Dufour et Frédéric Chevallier d'avoir accepté la lourde tâche de relire mon manuscrit (et c'est pas une mince affaire), ainsi que Sylvain Coquillat et Vincent Cassé d'avoir accepté d'être examinateur lors de ma soutenance de thèse.

Mes remerciements se tournent également vers l'ensemble des personnes avec lesquelles j'ai pu interagir pendant cette thèse lors de conférences, de séminaires, campagne de mesure, du séjour scientifique au CEPMMT[3] et qui ont, de près ou de loin, participé à l'amélioration de mon travail de thèse. Je pense à Dieter Klaes, Dorothee Coppens, Thomas August et Bertrand Theodore à EUMETSAT[4], Cathy Clerbaux et Maya George au LATMOS[5], Carole Larigauderie, Carole Deniel, Pierre Tabary, Myriana Lozach et Éric Péquignot au CNES[6], Sébastien Massart et Patricia De Rosnay au CEPMMT, Diane Tzanos, Joel Barrie et Éric Moulin de l'équipe 4M à Météo-France, Lilian Joly et toute son équipe au GSMA[7] de l'Université de Reims et tellement d'autres personnes qui m'ont aidé à la réussite de cette thèse.

Je remercie avec amour la personne qui m'a supportée, du baccalauréat jusqu'à cette thèse sans jamais faillir, ainsi que mes parents, ma sœur et l'ensemble de ma famille qui m'ont rendu fier du travail effectué. La passion m'a fait parfois oublier la patience avec laquelle la famille et les amis ont pu m'écouter pendant de longues minutes parfois des heures parler de mes recherches... Je les remercie de tout cœur d'avoir acquiescé sans faiblir. Je remercie toutes les personnes que je n'ai pas citées, plutôt par maladresse que par ma volonté.

Enfin, je vais terminer en remerciant les co-financeurs de cette thèse sans qui ce travail n'aurait pu avoir lieu, le CNES et la Région Occitanie.

[3]Centre Européen de Prévision Météorologique à Moyen Terme
[4]EUropean Organisation for the Exploitation of METeorological SATellites
[5]Laboratoire Atmosphères, Milieux, Observations Spatiales
[6]Centre National d'Études spatiales
[7]Groupe de Spectrométrie Moléculaire Atmosphérique

Résumé

Le sondeur infrarouge hyperspectral IASI (Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge) est l'instrument qui fournit le plus d'observations satellitaires au modèle de Prévision Numérique du Temps (PNT) ARPEGE (Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle) à Météo-France. Ce capteur a été développé conjointement entre le CNES (Centre National d'Études Spatiales) et EUMETSAT (European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites) et est embarqué à bord des satellites défilants Metop-A, B et C. L'assimilation de ces observations requiert l'utilisation d'un Modèle de Transfert Radiatif (MTR) qui s'appelle RTTOV à Météo-France. Ce dernier utilise une connaissance *a priori* de l'état thermodynamique et chimique de l'atmosphère le plus probable pour simuler les observations IASI. À Météo-France, les champs d'ébauche thermodynamiques proviennent d'une prévision à courte échéance fournie par ARPEGE. Les ébauches de la composition chimique de l'atmosphère sont issues d'un unique profil vertical de référence pour chaque espèce chimique fourni par RTTOV. Cette approximation a un impact important sur la qualité des simulations et l'utilisation des observations satellitaires infrarouges pour la PNT. Les Modèles de Chimie Transport (MCT) sont capables de fournir des prévisions de la composition chimique de l'atmosphère. À Météo-France, ce MCT s'appelle MOCAGE. Ce travail de thèse propose une méthode permettant une meilleure assimilation des observations satellitaires infrarouges par un couplage des modèles météorologique et chimique.

La première partie du travail consiste à évaluer la sensibilité des observations infrarouges à la chimie atmosphérique. Pour cela nous avons participé à la campagne de mesure APOGEE (Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs) qui nous a permis de mesurer des profils *in situ* de CO_2, CH_4 et O_3. Ces données ont été utilisées à la fois pour valider la qualité de nos simulations et comme données de vérification pour évaluer les prévisions de composition chimique atmosphérique issus de MCT. Nous avons par la suite encadré deux stagiaires de Master 1 pour réaliser une climatologie évolutive de CO_2 afin d'améliorer l'utilisation des observations satellitaires infrarouges. De ces études, il ressort que la qualité des simulations dépend de la précision de l'ébauche chimique utilisée et que le constituant chimique ayant l'impact le plus important sur les simulations est l'ozone. La suite du travail de thèse s'est donc articulée autour de l'ozone. Une première étape a consisté à préparer l'assimilation de canaux IASI sensibles à l'ozone. Ce travail a montré à la fois que l'utilisation d'une ébauche réaliste d'ozone issue d'un MCT permet de mieux simuler les observations sensibles à l'ozone et d'apporter de l'information supplémentaire, améliorant simultanément les analyses de température, d'humidité et d'ozone [Coopmann et al., 2018]. Puis une nouvelle sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone a mis évidence 15 canaux permettant également d'améliorer les analyses thermodynamiques et chimiques. Enfin cette sélection de canaux a été utilisée dans le système d'assimilation de données quadri-dimensionnel variationnel (4D-Var) et un couplage a été réalisé entre les modèles ARPEGE et MOCAGE pour les champs d'ozone. Les résultats montrent que l'utilisation de l'ozone de MOCAGE permet une meilleure utilisation des observations satellitaires infrarouges et a un impact positif sur la qualité des analyses thermodynamiques et d'ozone mais également sur les prévisions météorologiques.

Abstract

The Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI) is the instrument that provides the most satellite observations to the ARPEGE (Action de Recherche Petite Échelle Grande Scale) Numerical Weather Prediction (NWP) model at Météo-France. This sensor was developed jointly by CNES (Centre National d'Études Spatiales) and EUMETSAT (European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites) and is carried on board the Metop-A, B and C polar orbiting satellites. The assimilation of these observations requires the use of a Radiative Transfer Model (RTM) called RTTOV at Météo-France. The latter uses an *a priori* knowledge of the most likely thermodynamic and chemical state of the atmosphere to simulate IASI observations. At Meteo-France, the background thermodynamic fields come from a short-term forecast provided by ARPEGE but the information on the chemical composition of the atmosphere comes from a single vertical reference profile for each chemical species, provided by RTTOV. However, this approximation has a significant impact on the quality of simulations and the use of infrared satellite observations for NWP. Chemistry Transport Models (CTM) are able to provide forecasts of the chemical composition of the atmosphere. At Météo-France, this CTM is called MOCAGE. This thesis therefore proposes a method toward a better assimilation of infrared satellite observations by coupling meteorological and chemical models.

The first part of the work was to evaluate the sensitivity of infrared observations to some atmospheric compounds. To do so, we participated in the APOGEE (Atmospheric Profiles Of GreenhousE gases) measurement campaign, which enabled us to measure *in situ* profiles of CO_2, CH_4 and O_3. These data were used both to validate the quality of our simulations and as verification data to assess atmospheric chemical composition derived from CTM. We then supervised two Master 1 trainees to carry out an evolving climatology of CO_2 in order to improve the use of infrared satellite observations. From these studies, it appears that the quality of the simulations depends on the accuracy of the chemical information used and the chemical component with the greatest impact on the simulations is ozone. Thus, the rest of the thesis work was therefore focused on ozone. A first step was to prepare the assimilation of ozone-sensitive IASI channels. This work has shown both that the use of realistic ozone information from a CTM can better simulate ozone-sensitive observations and provide additional information, simultaneously improving temperature, humidity and ozone analyses [Coopmann et al., 2018]. Then a new channel selection of IASI ozone-sensitive highlighted 15 channels that also improve thermodynamic and chemical analyses. Finally, this channel selection was used in the four-dimensional data assimilation system (4D-Var) and a coupling was performed between the ARPEGE and MOCAGE models for ozone fields. The results show that the use of ozone from MOCAGE allows a better use of infrared satellite observations and has a positive impact on the quality of thermodynamic and ozone analyses but also on weather forecasts.

Table des matières

i

Remerciements iii

Résumé v

Abstract vii

Table des matières ix

Introduction générale 3

I Outils théoriques et concepts 17

1 Physico-chimie de l'atmosphère 19
1.1 L'atmosphère terrestre . . . 20
1.2 Chimie atmosphérique . . . 26
1.3 Processus Physico-chimiques . . . 33
1.4 L'essentiel du Chapitre 1 . . . 51

2 Rayonnement et transfert radiatif 53
2.1 Le rayonnement électromagnétique . . . 54
2.2 Interaction rayonnement-matière . . . 56
2.3 L'émission et l'absorption . . . 57
2.4 Le transfert radiatif dans l'atmosphère . . . 59
2.5 Modèle de Transfert Radiatif . . . 65
2.6 L'essentiel du Chapitre 2 . . . 71

3 Les observations satellitaires 73
3.1 Les satellites géostationnaires . . . 74
3.2 Les satellites défilants . . . 76
3.3 Le sondeur infrarouge hyperspectral IASI . . . 77
3.4 L'essentiel du Chapitre 3 . . . 83

4 Système global de Prévision Numérique du Temps 85
4.1 L'assimilation de données . . . 86
4.2 Le modèle global ARPEGE . . . 95
4.3 Étapes vers une analyse objective . . . 107
4.4 Assimilation des données IASI . . . 116
4.5 L'essentiel du Chapitre 4 . . . 120

5 Modèle de Chimie Transport **121**
5.1 Description . . . 122
5.2 Le modèle MOCAGE . . . 125
5.3 L'essentiel du Chapitre 5 . . . 128

II Travaux scientifiques **129**

Objectifs scientifiques de la thèse **133**

6 Sensibilité des observations infrarouges à la chimie **135**
6.1 Introduction et objectifs de ce chapitre . . . 136
6.2 La campagne de mesure APOGEE . . . 137
6.3 L'article : The evolution of AMULSE (Atmospheric Measurements by Ultra-Light Spectrometer) and its interest in atmospheric applications.Results of the Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs (APOGEE) weather balloon release campaign for satellite retrieval validation . . . 154
6.4 Élaboration d'une climatologie évolutive de CO_2 pour améliorer l'utilisation des sondeurs infrarouges . . . 174

7 Préparation à l'assimilation des canaux O_3 IASI **189**
7.1 Introduction et objectifs de ce chapitre . . . 190
7.2 Résumé de l'article . . . 191
7.3 L'article : Assimilation of IASI ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models . . . 197
7.4 Application de la méthode à la campagne APOGEE . . . 220

8 Nouvelle sélection de canaux O_3 IASI pour la PNT **227**
8.1 Introduction et objectifs de ce chapitre . . . 228
8.2 Résumé de l'article . . . 229
8.3 L'article : Ozone-sensitive channel selection over IASI full spectrum with correlated observation errors for NWP . . . 241

9 Vers le couplage ARPEGE - MOCAGE pour O_3 **259**
9.1 Introduction et objectifs de ce chapitre . . . 260
9.2 Cadre expérimental . . . 262
9.3 Étape 1 : Utilisation d'un champ d'ozone réaliste dans $\mathcal{H}$ . . . 263
9.4 Étape 2 : Ajout de la sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone . . . 287
9.5 Étape 3 : Ajout de l'ozone à la variable de contrôle ARPEGE . . . 290
9.6 Conclusion et discussion . . . 296

Conclusions, discussions, perspectives et apports personnels **301**

Annexes **319**

Bibliographie **348**

Liste des acronymes et abréviations **349**

Table des figures **355**

Liste des tableaux **367**

Introduction générale

• Contexte actuel

Chaque jour dans le monde, les centres de Prévision Numérique du Temps (PNT) réalisent de nouvelles prévisions sur les 4 à 10 jours à venir. Les cartes météorologiques, si populaires, présentées par les médias, sont issues de plusieurs processus complexes. Pour réaliser des prévisions, il faut déjà observer l'état actuel de l'atmosphère. Pour ce faire, nous disposons d'une très grande quantité de mesures dites « conventionnelles » sur l'ensemble du globe. Il s'agit pour la plupart de mesures réalisées dans des stations météorologiques terrestres, par des radiosondages ou à bord de navires et d'avions. On réalise également des mesures sur les océans à l'aide de bouées fixes ou dérivantes. Cependant, toutes ces observations ne représentent que 10 % des données utilisées à Météo-France par exemple. La majorité des observations proviennent des instruments satellitaires qui sont à bord de satellites dits « géostationnaires » ou « défilants ». Les satellites géostationnaires se situent à environ 36000 km d'altitude. Ils tournent à la même vitesse que la Terre et observent toujours la même partie du globe. Ils sont indispensables à la surveillance des formations de nuages orageux. Les satellites défilants sont à des altitudes plus basses (environ 840 km), leur permettant de tourner plus vite autour de la Terre (une révolution en 1h40). Ils ne passent au-dessus d'un même point, en dehors des pôles, que deux fois par jour. Les instruments à bord de ces satellites sont capables de réaliser différents types de mesures : imagerie visible de jour, imagerie infrarouge de jour et de nuit, radiométrie dans différentes longueurs d'onde (ultraviolet, visible, infrarouge, micro-onde), issues de radar-diffusiomètres mesurant la hauteur des vagues desquelles on peut déduire le vent à la surface des océans, etc.

Pour analyser cette importante quantité de données, les météorologues utilisent des modèles numériques qui, à l'aide de super-calculateurs, analysent l'ensemble des mesures météorologiques et simulent l'évolution future de l'atmosphère. Les prévisionnistes interviennent ensuite pour interpréter les champs prévus en sortie des modèles et ainsi fournir des prévisions sur mesure aux différents usagers.

Les modèles utilisés sont en réalité d'énormes programmes informatiques de plusieurs millions de lignes de code. Le point de départ est relativement simple et réside dans les 4 équations de base de la météorologie qui sont : les lois des gaz parfaits, de la thermodynamique, de continuité et du mouvement. La difficulté commence au niveau de choix de la finesse à laquelle on souhaite prévoir l'évolution de l'atmosphère. La puissance de calcul nécessaire pour simuler l'état réel de l'atmosphère n'existe actuellement pas. Pour réduire le coût informatique, la résolution des modèles a été bornée en découpant l'atmosphère horizontalement et verticalement en plusieurs petits cubes représentant la grille du modèle. Ainsi, la prévision de l'évolution des paramètres météorologiques est réalisée en chacun de ces cubes. Il faut ensuite paramétrer de nombreux phénomènes qui sont souvent à des échelles plus fines que la grille du modèle : les nuages, les précipitations, l'humidité des sols, la couverture neigeuse, etc. Ces simplifications ne rendent pas pour autant le problème moins complexe, puisque les calculs doivent être effectués à chaque pas de temps prévu, pour chaque point de la grille (des centaines de milliers de points) et sur chaque niveau vertical.

Comme tout modèle mathématique, le modèle météorologique doit être initialisé. À Météo-France le modèle global de PNT ARPEGE (Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle) est initialisé par l'assimilation de données. Cette méthode consiste à faire le compromis entre deux sources d'informations : une « ébauche » issue d'une prévision météorologique à courte échéance représentant un état *a priori* de l'atmosphère et les « observations » conventionnelles et satellitaires.

En prenant en compte les erreurs respectives de chacune des informations, le principe de l'assimilation de données consiste à déduire une estimation la plus probable de l'atmosphère à un instant donné que l'on nomme « analyse ».

Dans le cas où les observations seraient parfaites et que l'ensemble des variables seraient connues dans le modèle, il suffirait alors de substituer les valeurs observées dans l'état du modèle pour produire une analyse. En réalité, les observations et les modèles s'accompagnent d'erreurs. En effet, la position des observations satellittaires coïncident rarement avec la grille du modèle. De plus, les observations satellitaires ne mesurent pas directement les paramètres géophysiques du modèle. Or, une des étapes importantes dans le calcul de l'analyse réside dans la comparaison entre les observations et le modèle. Pour ce faire, il est nécessaire de passer de l'espace du modèle aux observations. Cette opération est réalisée par un opérateur mathématique nommé « opérateur d'observation ». Cet opérateur permet de simuler les observations à partir d'une connaissance de l'état de l'atmosphère à l'endroit et au moment de la mesure. L'écart entre les observations réelles et simulées est nommé « innovation » et représente une source d'information essentielle au processus d'assimilation de données et au calcul de l'analyse.

À Météo-France, les sondeurs infrarouges représentent à eux seuls 75 % des observations satellitaires utilisées pour estimer les analyses. La majorité de ces observations provient de l'Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge (IASI). Cet instrument à bord des satellites défilants européens Metop-A, B et C, mesure le rayonnement infrarouge au sommet de l'atmosphère dans une large bande spectrale de 645 à 2760 cm^{-1} (8461 longueurs d'onde ou canaux) avec une résolution spectrale de 0,25 cm^{-1}. Ces caractéristiques font de IASI l'un des sondeurs infrarouges les plus précis et les plus performants de sa génération pour la PNT. Effectivement, à partir du rayonnement mesuré par IASI, nous sommes capables d'en déduire des informations indirectes sur les profils de température, d'humidité, des caractéristiques nuageuses et de surface, la distribution des aérosols et la composition chimique de l'atmosphère.

Ces observations représentent une quantité immense d'information qu'il est nécessaire de réduire pour limiter le coût de calcul dans les modèles. Ainsi, les centres de PNT trient les données fournies par ces sondeurs en ne sélectionnant que quelques canaux sur l'ensemble des spectres disponibles. À Météo-France, sur les 8461 canaux IASI, 314 sont « monitorés », c'est à dire dont l'évolution est suivie en continu mais seulement 123 participent aux calculs des analyses (Figure 1). Parmi ces canaux, 99 sont sensibles au CO_2 et permettent d'obtenir de l'information sur la température atmosphérique, 20 sont sensibles à la vapeur d'eau et apportent de l'information sur l'humidité atmosphérique. S'ajoutent 4 canaux dits « fenêtre » car le rayonnement terrestre traverse l'intégralité de la colonne atmosphérique jusqu'au capteur sans absorption. Ces canaux ont la capacité de fournir de l'information sur les propriétés de surface.

Cette sélection de canaux IASI a réduit son utilisation à seulement 1,5 % des canaux que peut fournir cet instrument. Or, de nombreuses autres bandes spectrales ont la capacité de fournir des informations supplémentaires qui seraient bénéfiques pour améliorer la qualité des analyses. C'est le cas des canaux sensibles à l'ozone par exemple. L'utilisation de nouvelles observations est un enjeu important pour la PNT mais représente un travail de recherche complexe.

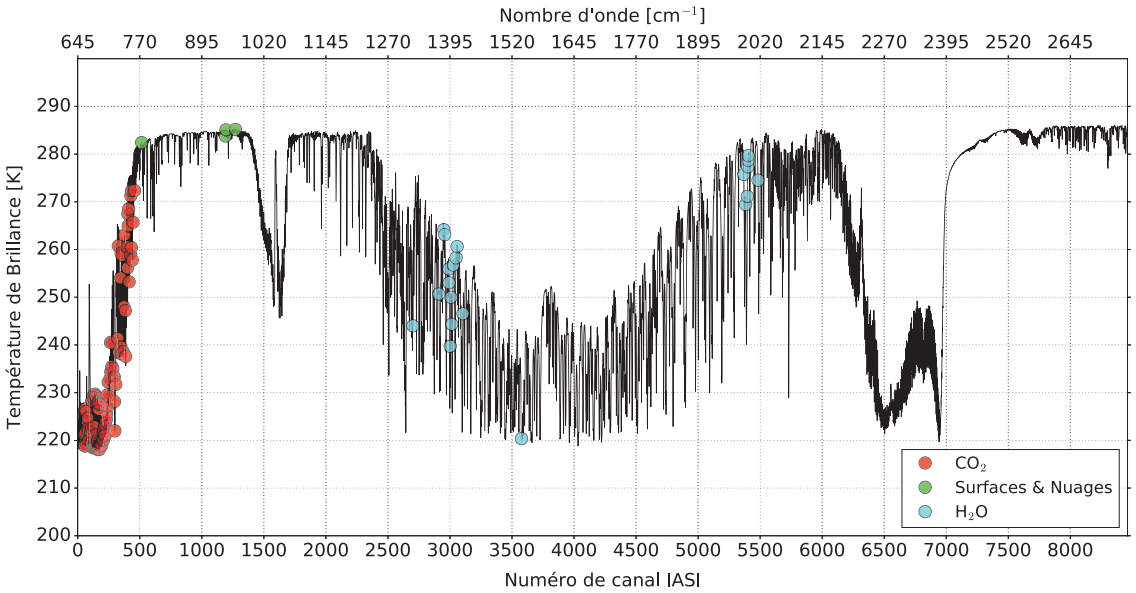


FIGURE 1: Spectre de IASI en température de brillance en fonction des numéros de canal et des nombres d'onde, simulé avec un profil standard de moyenne latitude. Les points rouges représentent les canaux sensibles au CO_2, en vert les canaux sensibles aux surfaces et en bleu les canaux sensibles à la vapeur d'eau, utilisés en opérationnel à Météo-France au début de cette étude.

En effet, pour utiliser efficacement ces observations et en tirer des informations utiles à la PNT, nous utilisons à Météo-France un Modèle de Transfert Radiatif (MTR) nommé RTTOV qui, à l'aide de l'équation du transfert radiatif, de l'opérateur d'observation et d'un état *a priori* de l'atmosphère, simule l'ensemble des observations satellitaires. Comme nous l'avons évoqué, de la qualité des simulations dépendra la qualité de l'analyse. L'ébauche de l'atmosphère du point de vue thermodynamique (température, humidité, paramètres de surface) fournie à RTTOV provient de la prévision ARPEGE à courte échéance, tandis que l'ébauche de la composition chimique de l'atmosphère est issue d'un unique profil de référence, variable selon la verticale, disponible dans RTTOV pour les principales espèces chimiques. Dans la suite du manuscrit, nous parlerons de profils chimiques de référence, invariants dans le temps et l'espace puisque ces profils n'ont pas de dépendance temporelle et sont les mêmes quelque soit la position géographique. Cependant, la composition chimique est spatialement et temporellement très variable dans l'atmosphère. L'utilisation de profils chimiques constants est alors une approximation très importante, particulièrement pour la simulation d'observations infrarouges telles que IASI. Cette imprécision se répercute alors sur la finesse des simulations, donc sur la qualité des analyses et en aval sur les prévisions météorologiques.

Afin de mieux utiliser les observations satellitaires infrarouges et d'améliorer les analyses météorologiques, il semble nécessaire d'apporter à RTTOV une connaissance *a priori* de la composition chimique de l'atmosphère plus réaliste. Il existe principalement deux sources pouvant fournir des ébauches plus précises sur la chimie de l'atmosphère : les climatologies chimiques et les Modèles de Chimie-Transport (MCT). Les MCT sont des modèles qui simulent la formation, le transport, les sources et les puits des principaux composés chimiques de l'atmosphère. Ils prennent en compte une grande quantité de réactions chimiques en phase gazeuse, hétérogène et homogène et sont généralement forcés par les paramètres thermodynamiques d'un modèle météorologique « mode forcé ou off-line ». C'est le cas du MCT MOCAGE (Modèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle) à Météo-France qui peut être forcé par les données du modèle global ARPEGE, par exemple. Actuellement, le modèle MOCAGE n'est pas initialisé au jour le jour par une assimilation de données. Il part d'états initiaux chimiques climatologiques de temps à autres.

Que ce soit pour la météorologie ou pour la chimie, l'amélioration de la qualité des prévisions est une priorité. Les enjeux sont multiples comme lorsqu'il s'agit d'avertir les pouvoir publics et la population pour la sécurité des personnes et des biens en cas de phénomènes extrêmes et dangereux (orages, inondations, canicules, épisode de pollution à l'ozone, aux particules fines, etc.). Ces enjeux peuvent également être de nature économique (agriculture, tourisme, entreprise, etc.). La recherche permet de réaliser des prévisions de plus en plus fiables grâce au développement d'outils toujours plus performants. Dans le cadre de la PNT, les modèles se sont perfectionnés grâce aux aspects suivant :

- des observations disponibles plus nombreuses, plus variées et plus fines (avec une couverture temporelle et spatiale améliorée) ;
- des algorithmes mathématiques de plus en plus sophistiqués pour assimiler toutes ces observations et mieux simuler l'état initial du modèle et des paramètres météorologiques clés (température, pression, vent et humidité) ;
- des puissances de calculs de plus en plus importantes ;
- des représentations plus fines des phénomènes physiques complexes (les échanges d'énergie et d'eau avec les surfaces et la végétation, les effets de la chimie atmosphérique et des aérosols, le brouillard, le comportement des nuages, des mouvements turbulents dus au relief, etc.) ;
- des résolutions des modèles de plus en plus fines.

Pour ce dernier aspect, l'augmentation de la résolution des modèles est principalement liée à l'augmentation de la puissance des calculateurs. L'évolution rapide des ordinateurs a été déterminante pour les progrès de la PNT. Avant 2014, Météo-France disposait d'une puissance de calcul d'environ 41,8 Teraflops [8] puis s'est doté de deux nouveaux calculateurs d'une puissance de 1 Petaflops[9], soit une puissance de calcul réelle multipliée par 12. De nouvelles évolutions en 2016 ont permis de porter cette puissance de calcul à plus de 5 Pétaflops. Enfin, le renouvellement du calculateur prévu pour 2020 vise une puissance de calcul de 10,39 Pétaflops soit un facteur de gain de puissance de calcul de 5,6. Ce facteur de gain représente le ratio de performances entre nouvelle et ancienne configuration mesuré sur les applications de PNT.

Les travaux visant à accroître la résolution spatio-temporelle des modèles a permis de réaliser d'importantes améliorations dans la finesse des prévisions en augmentant la prise en compte de phénomènes locaux. La résolution horizontale du modèle global ARPEGE est passé de 19,1 km avant les années 2000 à 5,1 km aujourd'hui. La résolution verticale a elle aussi été affinée (105 niveaux verticaux actuellement) afin de décrire plus précisément des phénomènes météorologiques dans les couches les plus basses de l'atmosphère et autour de la tropopause (les rafales de vent, le brouillard, etc.). Évidemment certains phénomènes météorologiques de petite échelle passent entre les « mailles du filet ». Ainsi, les modélisateurs contournent ces problèmes à l'aide d'algorithmes qui rendent compte de l'impact de ces phénomènes « sous-maille ». Ces méthodes dites de « paramétrisations » permettent d'augmenter le réalisme des modèles. Ainsi, la justesse des prévisions météorologiques dépend largement de la qualité des paramétrisations.

Les satellites ont également permis une véritable révolution dans l'amélioration des prévisions météorologiques en augmentant significativement le nombre d'observations disponibles sur l'ensemble du globe et surtout au-dessus des zones non ou mal couvertes par les instruments de mesure *in situ* en surface et sur la verticale. À Météo-France, le nombre d'observations utilisées a été multiplié par 100 entre le début des années 2000 et aujourd'hui.

[8] Puissance de mille milliards d'opérations par seconde
[9] Puissance d'un million de milliards d'opérations par seconde

Actuellement, les observations satellitaires représentent plus de 90 % des données utilisées dans le modèle global ARPEGE. Des avancées scientifiques et techniques ont également été réalisées dans le domaine de l'assimilation de données afin d'utiliser de manière optimale cette grande quantité d'observations. Ces progrès ont permis d'améliorer les analyses des variables d'intérêt que sont la température, la pression, le vent et l'humidité et ainsi les prévisions météorologiques.

L'ensemble de ces améliorations a conduit à gagner un jour tous les 10 ans de qualité des prévisions ARPEGE sur les trente dernières années. Pour contrôler la qualité des prévisions, des protocoles d'évaluation des prévisions ont été édictés par l'OMM[10]. L'objectif est de permettre aux différents centres de PNT de comparer leurs résultats. La mesure la plus souvent utilisée est l'erreur quadratique moyenne (EQM) de la prévision de la hauteur géopotentielle Z de la surface iso-pression de 500 hPa. Les données de référence sont issues des mesures de cette quantité fournies par les radiosondages. Cette quantité varie au cours du temps en fonction de la saison mais aussi des perturbations synoptiques. De plus, les EQM sont généralement plus importantes l'hiver que l'été sur l'Europe en raison de l'activité synoptique plus intense (défilements des dépressions). On peut alors moyenner les EQM sur une fenêtre temporelle de 12 mois pour filtrer ces effets saisonniers et mettre en évidence le signal des changements apportés à un modèle [Stein et al., 2015].

La Figure 2 représente justement l'évolution temporelle des EQM de la prévisions à 24 h d'échéance du réseau de 00 UTC du géopotentiel à 500 hPa par rapport aux mesures des radiosondages sur l'hémisphère nord de 1998 à 2019 pour les modèles globaux opérationnels en France, CEPMMT, Angleterre, États-Unis, Canada, Allemagne et Japons.

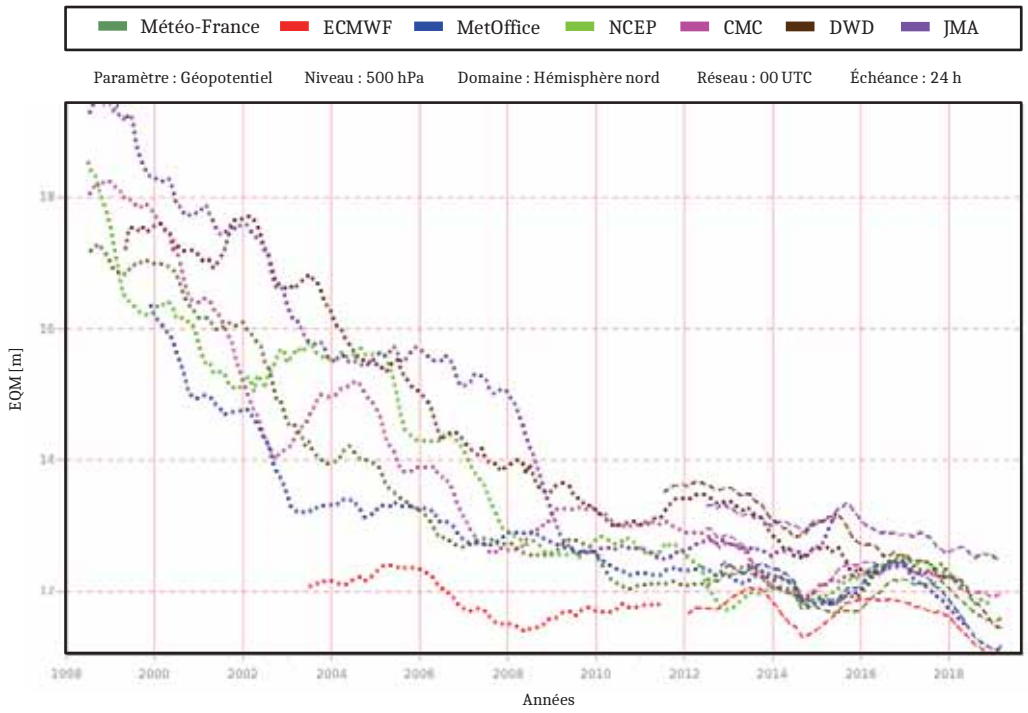


FIGURE 2: Évolutions temporelles des erreurs quadratiques moyennes annuelles (EQM) (moyennes glissantes) de la prévision à 24 h d'échéance du réseau de 00 UTC du géopotentiel à 500 hPa (m) par rapport aux mesures des radiosondages sur l'hémisphère nord de 1998 à 2019 pour différents modèles globaux : Français (en kaki), CEPMMT (en rouge), Anglais (en bleu), Américain (en vert), Canadien (en rose), Allemand (en marron) et Japonais (en violet). [D'après ECMWF (`https://apps.ecmwf.int/wmolcdnv/scores/time_series/msl`)].

[10]Organisation Météorologique Mondiale

La tendance générale que montre la Figure 2 est une amélioration progressive des modèles globaux au cours des années. On remarque d'importantes améliorations des prévisions entre la fin des années 1990 et 2004 des principaux modèles de PNT. Ces progrès résultent principalement de l'augmentation des résolutions des modèles, de l'assimilation des observations satellitaires « brutes » (luminance spectrale) et de la mise en place de l'assimilation de données variationnelle quadri-dimensionnelle (4D-Var). Dans cette méthode d'assimilation, la trajectoire du modèle est contrainte sur une fenêtre temporelle, avec une meilleure prise en compte spatiale et temporelle des observations notamment satellitaires permettant d'avoir des analyses plus exactes.

La deuxième vague d'amélioration des prévisions entre 2004 et 2010 est également due à l'augmentation des résolutions des modèles mais aussi à l'arrivée des nouveaux instruments satellitaires hyperspectraux (AIRS[11] [Auligné et al., 2003] , IASI [Guidard et al., 2011], etc.), de la multiplication du nombre d'observations micro-ondes (AMSU-A[12], AMSU-B[13] [Karbou et al., 2006]) et à l'utilisation de nouvelles méthodes d'assimilation d'ensemble, comme par exemple le 4D-EN-Var permettant d'estimer de manière plus précise les erreurs d'ébauche des modèles de PNT. Cette approche est fondée sur la combinaison entre les observations et des ensembles de prévisions courtes obtenues pour des états initiaux légèrement différents les uns des autres. Ainsi, l'accès à des informations plus précises sur les incertitudes des modèles a permis d'améliorer la qualité des analyses et des prévisions.

De 2010 à aujourd'hui, on observe que les écarts entre les différents modèles se sont fortement réduits mais surtout que les améliorations ne se manifestent plus de façon aussi spectaculaire mais au contraire régulière au fil des années. Ce seuil indique un niveau de performance des système de prévision jamais atteint par les modèles et l'ajout de nouvelles observations, des changements dans les résolutions, techniques numériques et paramétrisations physiques ne suffisent pas à obtenir des sauts d'améliorations telles qu'obtenus avant 2010. Actuellement à Météo-France, les améliorations apportées au système de PNT pour le modèle global ARPEGE sont ajoutées en opérationnel si l'impact sur les prévisions des variables critiques (température, humidité, vent, géopotentiel) est neutre à positif pour au moins une des variables.

De nos jours, le défi est de travailler à la réalisation de modèles encore plus réalistes prenant en compte les phénomènes extérieurs à l'atmosphère météorologique en profitant de l'accroissement de la puissance des calculateurs. En effet, la tendance générale est à l'inclusion de plus en plus de processus issus de milieux connexes mais liés tels que : océan, surface continentale, végétation, biogéochimie marine, chimie de la troposphère et de la stratosphère, glace de mer, etc. Pour se faire, deux approches différentes sont possibles :

- le Système Terre Couplé (STC) utilisant un modèle de PNT couplé à d'autres systèmes qui modélisent indépendamment l'océan, la surface, la chimie etc. ;
- le Système Terre Intégré (STI) utilisant un unique modèle capable de modéliser plusieurs composantes du système Terre et des processus d'interaction.

[11] Atmospheric InfraRed Sounder
[12] Advanced Microwave Sounding Unit-A
[13] Advanced Microwave Sounding Unit-B

Pour ce dernier système, il ne s'agit plus de PNT. Lorsqu'il modélise l'ensemble des composantes, il s'agit en réalité de modèle climatique que l'on nomme « Modèle de Circulation Générale (MCG) ou STI » [Flato, 2011]. Il existe plusieurs de ces modèles à travers le monde dont deux en France (CNRM-CM5 développé conjointement entre le CNRM et le CERFACS[14] [Voldoire et al., 2013] et IPSL-CM5 développé à l'IPSL[15] [Dufresne et al., 2013]). À Météo France, le STI CNRM-CM5 inclut le modèle atmosphérique ARPEGE-Climat, le modèle de surfaces continentales SURFEX[16] [Le Moigne et al., 2018], le modèle d'océan NEMO[17] [Madec et al., 2015], le modèle de glaces GELATO[18] [Salas y Melia, 2002] et les écoulement des fleuves TRIP[19] [Oki and Sud, 1998]. Les espèces gazeuses et les aérosols sont des variables pronostiques du modèle qui prend en compte les rétroactions de la composition atmosphérique sur le climat. Enfin, l'outil OASIS[20] [Craig et al., 2017] est utilisé pour simuler les échanges entre l'océan et l'atmosphère. Ainsi, le modèle CNRM-CM5 permet de simuler le climat passé et actuel et de créer des projections futures. Ce modèle fait partie de ceux qui servent de base aux rapports du groupe d'experts du GIEC.

Du fait de cette complexité et de l'étendue des processus physiques et chimiques représentés dans ces STI, ces derniers sont intégrés sur des périodes de temps plus importantes que celles des prévisions météorologiques, et la quantité de calculs nécessaires impose une résolution spatiale bien plus faible. De plus, une des différences les plus importantes résulte du fait que l'on ne s'intéresse pas dans l'étude du climat à l'état de l'atmosphère à un instant particulier, mais à des quantités statistiques (moyennes, variances, corrélation, etc.) calculées sur plusieurs années ou plus. Ainsi, contrairement à ce qui se passe pour les prévisions météorologiques, on ne cherche pas à définir aux STI des conditions initiales très précises et un état climatique moyen initial est souvent considéré comme suffisant [Olivier Talagrand, 2018]. Même si les recherches en cours permettent à ces modèles de gagner en précision et en robustesse, ils ne peuvent actuellement pas être utilisés pour réaliser des prévisions météorologiques.

Pour trouver un système moins gourmand en puissance de calcul, on peut alors se tourner vers le Système Terre Couplé (STC). Contrairement au STI représentant un unique modèle, le STC est composé de plusieurs modèles distincts, qui ensemble, fourni une image précise des conditions météorologiques globales et des systèmes associés. Ces modèles peuvent être initialisés par différentes méthodes d'assimilation de données ou par des climatologies. Cette approche est utilisée par beaucoup de grands centres de PNT comme par exemple :

- Le STC Américain a pour base le modèle atmosphérique GFS[21] qui est couplé à 3 modèles distincts (un modèle océanique, de surface continentale et de glace de mer) ;
- Le STC Anglais a pour base le modèle atmosphérique UKMO[22] qui est couplé à 3 modèles distincts (un modèle océanique, de vague et de glace de mer) ;
- Le STC du CEPMMT a pour base le modèle atmosphérique IFS[23] qui est couplé à 4 modèles distincts (un modèle océanique, de surface continentale, de glace de mer et de vague).

[14] Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique
[15] Institut Pierre et Simon Laplace
[16] SURFace EXternalisée
[17] Nucleus for European Modelling of the Ocean
[18] Global Experimental Leads and ice for ATmosphere and Ocean
[19] Total Runoff Integrating Pathways
[20] Ocean Atmosphere Sea Ice Soil
[21] Global Forecasting System
[22] UK Met Office
[23] Integrated Forecasting System

À Météo-France, le STC a pour base le modèle atmosphérique ARPEGE qui est actuellement couplé au modèle de surface continentale SURFEX. Des recherches sont activement menées pour intégrer prochainement le modèle de glace de mer GELATO. Qu'elles soient couplées ou intégrées, ces nouvelles approches représentent un challenge important pour l'amélioration des prévisions météorologiques et l'ajout d'une composante supplémentaire au système de PNT permet d'augmenter le réalisme dans la modélisation de l'atmosphère et du système Terre.

L'une des composantes clés pour l'atmosphère et l'amélioration des prévisions météorologiques est la composition chimique. En effet, les processus tels que les orages, le rayonnement, la visibilité, la formation des nuages, les précipitations ou encore la structure de la couche limite planétaire sont tous affectés par les différentes espèces chimiques et les aérosols dans l'atmosphère. De plus, la météorologie a un fort impact sur la qualité de l'air qui en retour peut fortement influencer le temps. C'est pour cela que la Commission des Sciences Atmosphériques de l'OMM s'efforce de faire converger les recherches sur la composition de l'atmosphère, la météorologie et le climat afin d'obtenir une description et une compréhension complètes du système terrestre.

Le Programme de la Veille de l'Atmosphère Globale (VAG) a relevé le défi de promouvoir une plus grande importance accordée à la modélisation de la composition atmosphérique dans le cadre de la VAG, et la collaboration accrue avec le Programme mondial de recherche météorologique (WWRP) est un élément important pour y parvenir [Baklanov et al., 2017] et [Baklanov et al., 2015].

Les grands centres de PNT disposent donc des deux approches, intégrée ou couplée, pour réaliser ce couplage Météo - Chimie dans le cadre du système Terre avec pour objectifs l'amélioration des prévisions météorologiques et chimiques. Les STI ou STC qui associent la météorologie, la chimie atmosphérique et la dynamique des aérosols font l'objet d'études récentes et ont connu une évolution rapide ces dernières années. Au vu de la complexité de ces systèmes, les recherches s'orientent vers différents axes selon les pays.

L'un des avantages techniques des STI est la réduction de la quantité de travail nécessaire pour maintenir et développer le modèle, puisque des processus comme l'advection ou la diffusion peuvent être calculés avec les mêmes méthodes. Cependant, dans certains cas, les STC nécessitent moins de ressources informatiques, notamment lorsque le modèle de Chimie-Transport utilisé n'assimile pas d'observations. Chacune de ces méthodes possèdent des avantages et des inconvénients qui sont résumés dans l'étude de [Grell and Baklanov, 2011].

L'une des premières applications de l'assimilation de données avec un STC a été initié par [Semane et al., 2009] en assimilant dans un cadre 4D-Var, des profils verticaux d'ozone restitués à partir des observations issues de l'instrument satellitaire MLS[24] dans un système couplant les modèles ARPEGE et MOCAGE. Dans cette étude, ARPEGE simulait le transport de l'ozone puis les concentrations d'ozone étaient modifiées aux étapes temporelles prescrites avec les champs d'ozone prévus par MOCAGE afin de tenir compte de la chimie de l'ozone. Ce couplage avec l'ozone a permis d'améliorer les prévisions des champs de vent dans la basse stratosphère.

[24]Microwave Limb Sounder

Le CEPMMT[25] s'est doté d'un STI Météo - Chimie nommé C-IFS dans le cadre du programme CAMS[26] prenant en compte la chimie réactive ([Flemming et al., 2009], [Inness et al., 2009]), les aérosols ([Benedetti et al., 2009], [Morcrette et al., 2009]) et les gaz à effet de serre [Engelen et al., 2009]. Ce modèle utilise un système d'assimilation de données 4D-Var.

C'est à ce modèle que [Flemming et al., 2011] a couplé trois mécanismes chimiques distincts de l'ozone, dont une chimie linéaire, la chimie du MCT MOZART[27]3 ([Kinnison et al., 2007], [Horowitz et al., 2003]) et la chimie du MCT TM5[28] [Krol et al., 2005]. Dans cette étude, l'assimilation de l'ozone restitué à partir des instruments satellitaires OMI[29], SCIAMACHY[30], MLS et SBUV-2[31] dans C-IFS a permis d'améliorer la simulation du trou d'ozone stratosphérique en 2008.

Dans le cadre des travaux de [Inness et al., 2013], le modèle C-IFS couplé au MCT MOZART3 a été utilisé afin de produire une nouvelle analyse des concentrations atmosphérique de monoxyde de carbone (CO), oxyde d'azote (NO_x), ozone (O_3) et de formaldéhyde (HCHO) sur une période de 8 ans. L'assimilation de données à partir de huit instruments satellitaires a permis d'améliorer le CO et l'ozone.

L'étude de [Flemming and Inness, 2013] a adapté C-IFS pour simuler un panache de dioxyde de soufre (SO_2) dans le cadre d'une éruption volcanique en assimilant les données de SO_2 restituées par l'instrument GOME-2[32].

[Engelen and Bauer, 2014] s'attaque à une approximation largement utilisée dans le cadre de l'assimilation des données satellitaires qui est l'utilisation de profils chimiques constants (c'est à dire dont la concentration est invariante dans le temps et l'espace) pour simuler les observations satellitaires par l'intermédiaire d'un MTR. Ainsi, l'utilisation d'un champ de dioxyde de carbone (CO_2) réaliste dans un STI pour l'assimilation des instruments AIRS et IASI permet de mieux simuler les canaux sensibles au CO_2 et d'améliorer la qualité des analyses et des prévisions de température notamment aux Tropiques dans la stratosphère.

D'autres études ont été menées pour d'autres espèces chimiques et pour les aérosols dans d'autres grands centres de PNT. Les travaux de [Bocquet et al., 2015] proposent un résumé des recherches dans ce domaine ainsi que les progrès réalisés par les MCT en particulier grâce à l'assimilation de données. On peut noter que l'assimilation de données joue un rôle central dans les STI ou STC notamment dans le cadre de l'assimilation d'observations satellitaires infrarouges particulièrement sensibles à la composition atmosphérique. On remarque également que l'ozone est souvent la première espèce chimique utilisée pour initier le couplage Météo - Chimie. En effet, l'ozone produit dans la stratosphère par réaction photochimique avec le rayonnement solaire, libère beaucoup d'énergie et est responsable de l'augmentation de la température dans cette partie de l'atmosphère. Ainsi, l'influence radiative de l'ozone a des impact significatifs sur la thermodynamique atmosphérique.

[25] Centre Européen de Prévision Météorologique à Moyen Terme
[26] Copernicus Atmospheric Monitoring Services
[27] Model for OZone And Related chemical Tracers
[28] Tracer Model version 5
[29] Ozone Monitoring Instrument
[30] SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CartograpHY
[31] Solar Backscatter UltraViolet-2
[32] Global Ozone Monitoring Experiment-2

Depuis juin 2019, le centre Canadien de PNT ECCC[33] travaille sur un STI pour l'ozone qui fonctionne en temps réel et assimile l'ozone restitué des instruments GOME-2, OMI, SBUV-2, OMPS-NP[34]. Il utilise le même modèle linéaire de l'ozone que C-IFS pour fournir des prévisions de l'indice UV. L'ozone est une variable pronostique de ce modèle et est utilisé par la PNT pour calculer les taux de chauffage radiatif.

Le couplage Météo - Chimie semble être une approche intéressante pour l'amélioration des analyses et prévisions météorologiques et chimiques. Cependant pour appliquer cette méthode, il est important de connaitre les potentielles limitations.

L'assimilation de données dans le cadre des STC et STI Météo - Chimie est récente et se limite généralement à l'assimilation de données chimiques pour améliorer les prévisions chimiques et dans quelques cas, météorologiques. L'une des plus importantes difficultés dans ces approches est l'impact de l'assimilation conjointe de variables météorologiques et chimiques sur les prévisions météorologiques et chimiques. En effet, dans le cas des STI, les rétroactions entre la chimie et la météo peuvent être très importantes, or cela n'a été étudié que dans quelques cas spécifiques comme par exemple l'effet de l'assimilation de l'ozone stratosphérique sur le vent [Semane et al., 2009].

Cependant, l'assimilation conjointe des données météorologiques (la température, l'humidité, le vent, le géopotentiel) et chimiques a été peu étudiée et il demeure d'importantes incertitudes dans les interactions qui pourraient se produire entre les variables météorologiques et chimiques. De plus, l'assimilation conjointe de toutes ces variables nécessite la prise en compte de l'ensemble de leurs erreurs et surtout des corrélations croisées d'erreur entre les différentes variables (exemple : température - ozone, NO_x - O_3, etc.). Une estimation la plus réaliste possible de ces erreurs est déterminante dans le processus d'assimilation de donnés afin de répartir l'information issue des observations de manière plus cohérente entre les différentes variables dans le but d'améliorer précisément leurs analyses. Des méthodes d'estimation dynamique à l'aide de l'EnKF (Filtre de Kalman d'ensemble) ou d'autres méthodes basées sur des ensembles d'assimilation pourraient être utilisées.

En attendant de résoudre l'ensemble de ces problèmes concernant les STI, l'utilisation des STC Météo - Chimie semble être un compromis intéressant. De nos jours, l'assimilation de données dans les modèles météorologiques est bien maîtrisée est celle dans les modèles chimiques atteint des niveaux de qualité de plus en plus élevés. En effet, plusieurs MCT ont menés des assimilations de données multi-espèces avec succès en utilisant des données satellitaires et de surface. De la même manière, l'estimation des erreurs et des corrélations croisées d'erreurs chimiques est un enjeu majeur. Cependant, l'une des plus importante limitation de l'assimilation de données dans les MCT est probablement le manque de données chimiques notamment selon la verticale car les données mesurées *in situ* se situent majoritairement en surface et les données satellitaires ont une résolution verticale et temporelle insuffisantes. L'article de [Bocquet et al., 2015] donne une synthèse de ce qui se fait en termes d'assimilation de données (chimie et aérosols) dans les MCT ainsi qu'un état des lieux et des perspectives des travaux réalisés dans le cadre des STI et STC Météo - Chimie.

[33] Environnement et Changement Climatique Canada
[34] Ozone Mapping and Profiling Suite - Nadir Profiler

• Objectifs et problématiques de la thèse

Ce travail de thèse a pour principal objectif de proposer de nouveaux développements scientifiques et techniques permettant d'améliorer l'utilisation des observations satellitaires infrarouges dans le cadre d'un STC par le couplage des modèles météorologique et chimique. Une partie importante du travail consiste à remplacer en entrée du MTR et de l'assimilation de données les profils chimiques constants (Figure 3.a) par des ébauches chimiques plus réalistes (Figure 3.b). Ces études ont pour but *in fine* d'améliorer la simulation des observations et la qualité des analyses et des prévisions météorologiques.

L'initialisation du couplage des modèles de PNT et MCT dans le cadre de cette étude, ouvre la voie à la chimie « en ligne » dans un STI Météo - Chimie. Cette méthode consiste à s'affranchir totalement des MCT, en ajoutant les différents modules chimiques directement dans le modèle météorologique pour réaliser lui-même les prévisions de la composition chimique de l'atmosphère. Il s'agit d'un couplage complet entre la dynamique et la chimie mais qui nécessite un coût numérique plus élevé ; c'est le cas par exemple du modèle Méso-NH-Chimie, développé au CNRM à Météo-France. Ce couplage représente l'une des pierres angulaires du Système Terre. Dans cette étude nous avons principalement travaillé avec les données du modèle global de PNT ARPEGE et du modèle global de Chimie-Transport MOCAGE. Nous nous sommes avant tout intéressé aux observations issues du capteur hyperspectral infrarouge IASI.

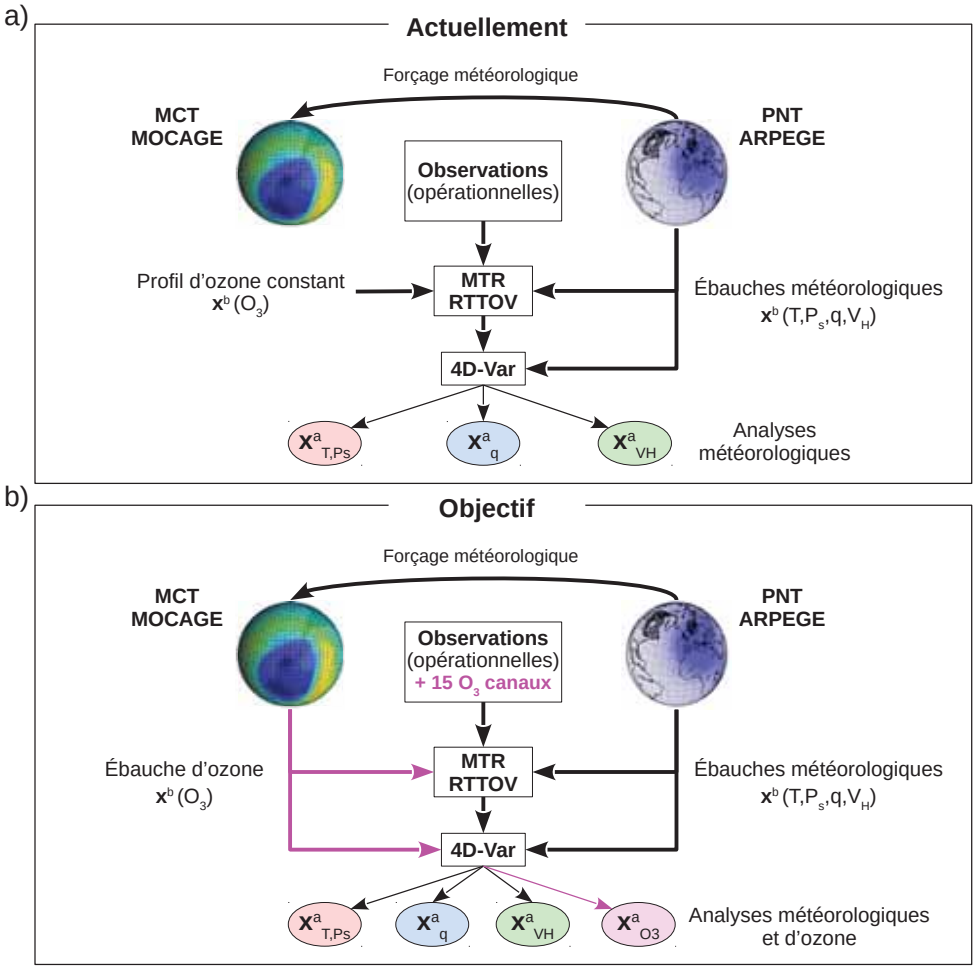


FIGURE 3: Schéma de synthèse résumant le contexte actuel de l'étude (a) et l'objectif de la thèse (b).

L'un des premiers objectifs est d'évaluer la sensibilité des observations satellitaires infrarouges aux différentes ébauches chimiques telles que des profils chimiques constants, issus de climatologies, de MCT ou mesurés *in situ*. Nous pourrons ainsi quantifier l'impact de ces différentes ébauches chimiques sur la qualité des simulations. L'une des premières difficultés est de trouver des mesures chimiques réalisées *in situ* capables de servir de données de vérification dans nos études de simulations. La sensibilité des sondeurs infrarouges sur l'ensemble de la colonne atmosphérique rend nécessaire l'utilisation de profils verticaux. Or, les mesures *in situ* de profils chimiques selon la verticale sont rares.

La partie du spectre IASI sensible à l'ozone semble être une bonne candidate dans son potentiel à contenir de l'information supplémentaire bénéfique à la PNT. Ainsi, un second objectif sera de tester et d'évaluer l'utilisation de canaux IASI sensibles à l'ozone (actuellement monitorés) dans un système d'assimilation simplifié permettant de préparer au couplage des modèles météorologique et chimique. Le but est d'identifier les différentes caractéristiques techniques indispensables à la réalisation de ce travail. L'assimilation de nouvelles observations implique la prise en compte de leurs erreurs (matrice de covariance d'erreur d'observation). De même, le couplage ARPEGE - MOCAGE qui fait intervenir l'ozone comme nouvelle variable dans le processus d'assimilation, possède lui aussi des erreurs qu'il faut quantifier (matrice de covariance d'erreur d'ébauche). La détermination de ces erreurs est un enjeu majeur et d'une importance capitale dans le processus d'assimilation puisque ces dernières jouent le rôle de pondération dans l'analyse entre les observations et l'ébauche. Indirectement, ce travail permettra également d'analyser l'ozone comme nouvelle variable.

Nous avons détaillé la grande quantité de canaux que possède IASI mais pour réduire l'information, une sélection de canaux a été faite. Elle a conduit à ne monitorer que 314 canaux à l'aide de caractéristiques qui ne correspondent pas complètement à l'utilisation que l'on souhaite réaliser dans ce travail de thèse. C'est pour cela que le troisième objectif est de réaliser une nouvelle sélection des canaux sensibles à l'ozone dans la bande spectrale identifiée précédemment et ce, sur le spectre complet. L'étude précédente permettra d'améliorer significativement l'estimation des erreurs d'observation et d'ébauche. La grande quantité d'information à traiter représente une difficulté technique importante.

Enfin, l'objectif principal de cette thèse est d'ajouter cette nouvelle sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone dans le système global de PNT ARPEGE par un couplage entre ce dernier et les champs d'ozone de MOCAGE dans le cadre d'un STC Météo - Chimie. Dans un premier temps, le but sera d'évaluer l'impact de l'ajout seul du champ d'ozone dans ARPEGE, à la fois sur les simulations de l'ensemble des observations et sur les analyses thermodynamiques. Finalement, nous évaluerons les conséquences de l'ajout de nouveaux canaux IASI sensibles à l'ozone conjointement à l'ajout de l'ozone comme nouvelle variable de contrôle dans le modèle ARPEGE. La complexité technique de ce travail est importante puisque l'ajout de nouvelles observations et d'une nouvelle variable dans un cadre d'assimilation opérationnelle s'accompagne forcément de nouvelles réactions dans le modèle.

• Organisation de la thèse

Après cette introduction générale, ce manuscrit comporte deux parties principales et se termine par des conclusions et perspectives.

La partie I traite des différents concepts et outils théoriques qu'il est indispensable d'avoir à l'esprit pour aborder au mieux cette thèse. Le Chapitre 1 résume une grande partie des connaissances acquises jusqu'ici de la physico-chimie de l'atmosphère terrestre. Le Chapitre 2 présente l'ensemble des concepts théoriques relatifs au rayonnement et au transfert radiatif dans l'atmosphère et décrit le principe de fonctionnement des modèles de transfert radiatif utiles aux systèmes de PNT. Le Chapitre 3, propose une description des différents satellites météorologiques utilisés actuellement et décrit plus précisément les caractéristiques techniques du sondeur infrarouge hyperspectral IASI. Le Chapitre 4 expose en détail les différents aspects du système global de PNT en explicitant la théorie de l'assimilation de données, les caractéristiques du modèle global ARPEGE, les étapes qui conduisent à l'élaboration d'une analyse objective et l'explication technique de l'utilisation des observations IASI dans le système de PNT. Enfin, le Chapitre 5 présente une description des modèles de chimie-transport et une explication technique du modèle MOCAGE.

La partie II contient l'essentiel du travail de thèse réalisé pendant ces trois années. Cette partie a pour objectif d'apporter des connaissances et des compétences afin de mieux assimiler des observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles météorologique et chimique.

Le Chapitre 6 traite de la sensibilité des observations satellitaires infrarouges à la chimie atmosphérique. Dans un premier temps, nous présentons les résultats obtenus dans le cadre d'une campagne de mesures à laquelle j'ai participé en collaboration avec le Groupe de Spectrométrie Moléculaire Atmosphérique (GSMA) de l'Université de Reims. L'objectif de cette campagne a été de réaliser des radiosondages de mesures chimiques (CO_2, CH_4 et O_3) sous ballons météorologiques jusque 30 km d'altitude en collocalisation avec des sondeurs infrarouges. Ces profils ont servi de données de vérification pour évaluer les simulations des observations mais également de données de vérification par rapport à des profils d'ébauche issus de MCT. Cette étude a fait l'objet d'un article écrit en collaboration avec le GSMA et soumis au journal international « Atmospheric Measurement Techniques ». Nous avons également démontré l'impact positif de l'utilisation d'une source d'ozone réaliste en entrée du MTR sur les simulations des observations IASI. La base de données de profils d'ozone utilisée pour ce travail contient un ensemble de 345 profils verticaux d'ozone issus de radiosondages réalisés sur l'ensemble du globe pendant une période d'un an. Dans un deuxième temps, j'ai proposé un stage de Master 1, réalisé par deux étudiants que j'ai co-encadrés. L'objectif du stage était d'élaborer une climatologie évolutive de CO_2 pour améliorer l'utilisation des sondeurs infrarouges. Cette étude présente la technique mise en place pour construire cette climatologie et sa capacité à être utilisable dans le temps a été évaluée à partir de profils de CO_2 mesurés *in situ*. Enfin, l'utilisation de cette climatologie pour simuler les observations infrarouges a été testée pour l'instrument IASI.

Le Chapitre 7 présente une étude préparant l'assimilation d'observations satellitaires infrarouges supplémentaires sensibles à l'ozone conjointement au couplage des modèles de PNT et MCT. Ce travail a été réalisé dans un cadre d'assimilation uni-dimensionnelle en utilisant 15 canaux IASI sensibles à l'ozone disponibles à Météo-France. Les profils d'ébauche d'ozone ont été extraits du MCT MOCAGE. L'ensemble de ces activités a fait l'object d'un article publié en octobre 2018 dans le journal international « Journal of Geophysical Research Atmospheres ». Puis, la méthode mise au point dans cette étude a été appliquée aux données de la campagne de mesure décrite dans le Chapitre précédent.

Le Chapitre 8 propose une méthode pour réaliser une nouvelle sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone à partir du spectre complet, en utilisant des estimations précises à la fois des erreurs d'observations et des erreurs d'ébauche, particulièrement autour de l'ozone. Cette sélection a été réalisée dans le but d'être utilisée dans le modèle de PNT ARPEGE pour améliorer les analyses de température et d'humidité. Ces travaux ont fait l'objet d'un article soumis au journal international « Atmospheric Measurement Techniques ». Après révision de l'article, celui-ci a profondément été modifié.

Le Chapitre 9 est l'aboutissement de l'ensemble des travaux scientifiques réalisés jusqu'ici afin de préparer au mieux l'assimilation de nouvelles observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles météorologique et chimique. Dans le cadre de cette thèse nous nous sommes intéressés principalement au cas de l'ozone. Ainsi, l'objectif de ce Chapitre est d'ajouter la nouvelle sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone réalisée en amont, conjointement à l'utilisation des champs d'ozone de MOCAGE dans le modèle global ARPEGE. L'ensemble des caractéristiques techniques ainsi que les différentes étapes pour réaliser ce travail (ozone de MOCAGE dans l'opérateur d'observation, l'ajout de canaux IASI sensibles à l'ozone, l'ajout de l'ozone dans la variable de contrôle ARPEGE) sont exposées dans ce Chapitre. Les premiers impacts du couplage ARPEGE - MOCAGE par l'ozone seul dans l'opérateur d'observation ont été évalués par les simulations des observations, les analyses en température, humidité et vent et les scores de prévisions. Cette première étape a fait l'objet d'un article soumis au journal international « Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society » Puis, l'impact du couplage conjointement à l'ajout de nouveaux canaux IASI sensibles à l'ozone a été évalué sur les analyses et les scores de prévisions. Finalement, l'impact de la configuration complète du STC faisant intervenir les nouvelles observations IASI sensibles à l'ozone et l'ajout de l'ozone comme nouvelle variable du modèle ARPEGE a été examiné en termes d'analyse et de scores de prévisions. Il est important de noter qu'au vu de la complexité du problème, les temps de calculs de ces expériences sont particulièrement longs. C'est pour cela que les premières expériences illustrent des exemples sur des périodes différentes (estivale et hivernale) sur deux mois d'étude chacune. Le second jeu d'expériences se concentre sur la période estivale d'une durée de 1 mois et demi. Enfin, les dernières expériences portent sur la période estivale d'une durée d'environ vingt jours.

Pour terminer, ce manuscrit présente les principales conclusions à tirer de cette étude et propose des perspectives objectives à court et moyen terme.

Première partie

Outils théoriques et concepts

Chapitre 1

Physico-chimie de l'atmosphère

« J'ai besoin de l'air que tu respires comme de la seule atmosphère où je puisse vivre. »

Benjamin Constant

Sommaire

1.1 L'atmosphère terrestre 20
1.1.1 Généralités 20
1.1.2 Le système climatique 21
1.1.3 La structure verticale 22
1.1.4 Dynamique atmosphérique 24
1.2 Chimie atmosphérique 26
1.2.1 Description générale 27
1.2.2 Distributions des constituants atmosphériques 30
1.2.2.1 Temps caractéristiques moyens de transport horizontal et vertical 30
1.2.2.2 Distributions verticales des constituants atmosphériques 31
1.2.2.3 Variabilité spatiale et temporelle 31
1.2.3 Contribution énergétique 32
1.3 Processus Physico-chimiques 33
1.3.1 Le système chimique stratosphérique 33
1.3.1.1 L'équilibre de l'ozone stratosphérique 33
1.3.1.2 L'ozone dans les régions polaires 37
1.3.2 Le système chimique troposphérique 40
1.3.2.1 La vapeur d'eau 40
1.3.2.2 Le dioxyde de carbone 40
1.3.2.3 Le méthane 41
1.3.2.4 Le monoxyde de carbone 43
1.3.2.5 Les oxydes d'azote 44
1.3.2.6 L'ozone 45
1.3.3 Région d'interaction - UTLS 49
1.4 L'essentiel du Chapitre 1 51

1.1 L'atmosphère terrestre

L'atmosphère terrestre est l'enveloppe gazeuse qui entoure notre planète. Il y a environ 4,5 milliards d'années, la température de la Terre est retombée en deçà de 100 °C permettant à la vapeur d'eau de se condenser pour former les océans. Le gaz carbonique s'est alors combiné à des minéraux et fut absorbé par les océans pour ensuite être utilisé par les premiers êtres vivants. Ayant une très faible solubilité dans l'eau, l'azote est resté dans l'atmosphère. Il y a 3 milliards d'années, l'atmosphère contenait encore peu d'oxygène. Des réactions chimiques compliquées entre le méthane, l'ammoniac, l'eau et le rayonnement solaire donnèrent naissance à une couche d'ozone. Cette dernière joue un rôle important dans l'évolution de la vie sur Terre, car elle empêche une grande partie des rayons solaires ultraviolets, rayons nuisibles à la vie, d'atteindre le sol.

Les premières plantes apparurent il y a 2 milliards d'années et transformèrent une grande partie du gaz carbonique en oxygène. Cependant, le dioxygène n'a commencé à s'accumuler dans l'atmosphère que vers -600 millions d'années. La présence de vapeur d'eau, et de dioxyde de carbone dans l'atmosphère produit un effet de serre naturel permettant une température de surface moyenne de 288 K (15 °C). Ce fragile équilibre est fortement perturbé par l'action de l'homme, qui a altéré la couche d'ozone et rejeté une très grande quantité de gaz à effet de serre de manière additionnelle. C'est pour cela que le développement des sciences atmosphériques est un enjeu sociétal majeur pour comprendre les différents processus intervenant dans l'atmosphère afin de trouver des solutions pour l'avenir. Dans ce chapitre, nous allons essayer de comprendre de manière globale le fonctionnement de notre atmosphère et ses interaction avec le système Terre. Pour cela, nous allons décrire sa structure, sa dynamique, sa composition ainsi que les différents processus physico-chimiques intervenant en son sein.

1.1.1 Généralités

L'atmosphère terrestre est un ensemble de couches gazeuses entourant la Terre, que l'on appelle air. L'air sec se compose de 78,087 % de diazote « N_2 », 20,95 % de dioxygène « O_2 », 0,93 % d'argon « Ar », 0,04 % de dioxyde de carbone « CO_2 » et de traces d'autres gaz. La vapeur d'eau contenue dans l'air humide représente en moyenne 0,25 % de masse totale de l'atmosphère terrestre. Cette atmosphère réchauffe également la surface terrestre par la rétention de chaleur, à l'aide du processus bien connu d'effet de serre et réduit ainsi les écarts de température entre le jour et la nuit. Elle assure ainsi la distribution des échanges thermiques entre les zones froides et les zones chaudes du globe. Elle est composée d'un ensemble de molécules. Pour la plupart des phénomènes étudiés, le suivi des comportements individuels de chacune des molécules composant l'atmosphère est impossible. On ne peut s'intéresser qu'aux effets de comportement d'ensemble, ou moyen. Les principales variables thermodynamiques utilisées pour décrire l'atmosphère terrestre sont des grandeurs « intensives », c'est à dire qu'elles ne dépendent pas de la quantité de matière en présence dans le système considéré.

La température T est exprimée en Kelvin (K) dans le système international. Il s'agit d'un paramètre macroscopique qui représente l'agitation thermique des molécules microscopiques. Les mesures de température usuelles font parfois référence à des quantités en degrée Celsius (°C), auxquelles il faut ajouter la valeur 273,15 pour convertir en Kelvin.

La pression P est exprimée en Pascal (Pa) dans le système international. Elle fait référence à une force par unité de surface (1 Pa correspond à l'unité $N.m^{-2}$). Ce paramètre macroscopique est relié à la quantité de mouvement des molécules microscopiques subissant des chocs sur une surface donnée. En météorologie, la pression est souvent exprimée en hPa ou mbar. Ces deux unités sont équivalentes (1 bar = 10^5 Pa).

La pression atmosphérique vaut en moyenne 1013,25 hPa au niveau de la mer sur Terre. On utilise parfois l'unité d'1 atm correspondant à cette valeur de 101325 Pa.

La masse volumique ou densité (ρ) est exprimée en kg.m^{-3} dans le système international et représente une quantité de matière par unité de volume. La densité de l'air vaut environ 1,217 kg.m^{-3} proche de la surface sur Terre. Ces trois paramètres varient plus significativement selon la verticale que l'horizontale. On peut donc définir une structure moyenne en fonction de l'altitude.

1.1.2 Le système climatique

L'atmosphère terrestre fait partie d'un système thermo-hydrodynamique non isolé qui sous l'effet du rayonnement solaire, détermine le climat de la planète. On parle de *système climatique* (Figure 1.1), comme étant l'ensemble des interactions entre :

- **L'atmosphère** : l'air, les nuages, la chimie, les aérosols ...
- **L'hydrosphère** : les précipitations, les rivières, les lacs, les océans ...
- **La lithosphère** : Les sols, les terres immergées ...
- **La biosphère** : Les organismes vivants ...
- **La cryosphère** : La neige, la glace, les glaciers, les banquises ...
- **L'anthroposphère** : L'activité humaine ...

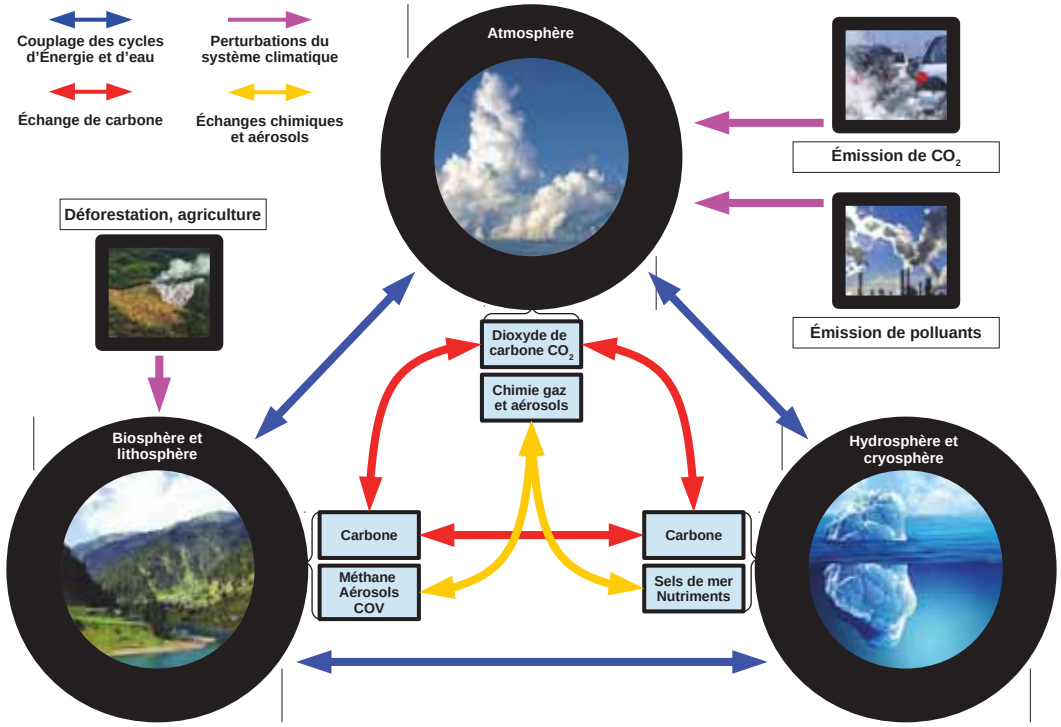


FIGURE 1.1: Schéma du système climatique présentant les différentes composantes du système : atmosphère, hydrosphère, biosphère, lithosphère, cryosphère et anthroposphère, ainsi que leurs interactions en termes d'échanges d'énergie, d'eau et de carbone. Les perturbateurs du système y sont aussi représentés.

La lumière issue du soleil est la seule source d'énergie apportée au système climatique. Les différentes composantes du système interagissent entre elles par des échanges d'eau, de chaleur, de mouvement ou encore de composés chimiques. Le rayonnement solaire réchauffe la Terre et l'atmosphère. Cette énergie est redistribuée des Tropiques vers les pôles par de grands courants aériens. Une partie de cette énergie parvient également aux océans qui participent aussi à la redistribution de la chaleur, comme par exemple le courant du Gulf Stream qui prend sa source entre la Floride et les Bahamas et se mélange aux eaux de l'océan Atlantique vers la longitude du Groenland après avoir longé les côtes européennes et induit un climat tempéré en Europe de l'ouest. Le sol et les océans se refroidissent par évaporation mais aussi par transpiration des végétaux sur les surfaces terrestres. Cette perte d'énergie est regagnée par l'atmosphère lorsque la vapeur d'eau se condense. Puis l'eau retourne à la Terre par les précipitations et à l'océan par les rivières et les fleuves. Le rôle de la neige et la glace est important puisque plus la superficie du manteau neigeux, des glaciers ou de la banquise diminue, plus les rayons du soleil chauffent la Terre ou les océans, provocant une augmentation de la température. Selon sa nature (forêts, prairies, cultures), la végétation stocke ou rejette plus ou moins de chaleur, d'eau, de dioxyde de carbone et d'autres gaz. Enfin, plus de 66 % de l'énergie provenant du soleil est absorbée par l'atmosphère, les sols et l'océan. Le reste est directement réfléchi vers l'espace par les nuages, les aérosols, l'atmosphère et la surface terrestre. L'atmosphère et le sols émettent en retour un rayonnement infrarouge que les nuages et les gaz à effet de serre (H_2O, CH_4, CO_2, O_3 ...) absorbent et retournent majoritairement vers la surface terrestre. La chaleur ainsi piégée définit ce que l'on appelle l'effet de serre.

Sur tout le globe, le climat résulte de l'interaction de tous ces échanges. Sans changement de l'intensité du soleil, de la composition chimique de l'atmosphère ou du volcanisme, le climat varie de manière annuelle ou suivant des cycles pluriannuels tels que El Ninõ dans le Pacifique sud, l'oscillation Nord-Atlantique, etc. Cependant, le comportement de l'ensemble du système climatique est influencé ou contraint par l'évolution de certains paramètres extérieurs que l'on appelle forçages externes. On distingue des mécanismes naturels tels que l'activité volcanique ou la variation de l'énergie solaire reçue par la Terre et des mécanismes liés aux activités humaines. Ces pertubations sont répertoriées dans ce que l'on appelle l'anthroposphère. Elles résultent des industries, transports, élevages, villes, déforestation, etc.. Ces forçages émettent des gaz qui accentuent l'effet de serre naturel. Ils émettent également des aérosols qui peuvent atténuer le rayonnement solaire et modifier les propriétés des nuages, contribuant ainsi à refroidir l'atmosphère. Enfin, ils peuvent également modifier la nature des sols et donc leur capacité à s'échauffer ou se refroidir et à retenir l'eau ou la laisser ruisseler [Météo-France, 2019].

1.1.3 La structure verticale

L'atmosphère n'est pas homogène mais possède plusieurs couches successives où la température subit des variations verticales bien différentes des variations de pression ou encore de densité. Cette structure verticale de température est comprise entre 200 et 300 K et permet de diviser l'atmosphère en cinq couches aux propriétés hétérogènes (Figure 1.2).

- **La troposphère** : Elle s'étend de la surface terrestre jusqu'à environ 11 km d'altitude et contient 80 % de la masse atmosphérique. La température y décroit en moyenne de 6,5 °C/km. Il s'agit d'une couche relativement bien mélangée sur la verticale dans laquelle a lieu la majorité des phénomènes météorologiques. Le bas de la troposphère contient la *couche limite atmosphérique* (CLA) située au-dessus de la surface. Son épaisseur varie de quelques mètres à 3 km et est définie comme la partie de l'atmosphère influencée par la surface sur de courtes échelles de temps (cycle diurne). La CLA est le siège de mouvements turbulents organisés au cours de l'après-midi qui opèrent le mélange des espèces chimiques qui y sont émises.

- **La tropopause** : C'est la frontière entre la troposphère et la stratosphère au-dessus. Il s'agit d'une couche plus ou moins épaisse dans laquelle la température est stable alors qu'on observe une décroissance dans l'atmosphère à partir du sol et une augmentation par la suite dans la stratosphère du fait de l'absorption des rayons ultraviolets par l'ozone. La tropopause est ainsi la partie la plus froide de la basse atmosphère. La tropopause est plus élevée pendant l'été que l'hiver car la température au sol est plus élevée. Pour la même raison, elle varie avec la latitude, allant de 8 km aux pôles à 18 km à l'équateur, avec une altitude moyenne de 11 km.
- **La stratosphère** : Située au-dessus de la troposphère, elle contient peu de vapeur d'eau mais la majorité de l'ozone. L'absorption du rayonnement solaire ultraviolet par l'ozone, explique que le profil de température dans la stratosphère est d'abord isotherme puis augmente avec l'altitude jusqu'à un maximum à la stratopause. Sa structure stable inhibe fortement les mouvements verticaux, expliquant son organisation en couches horizontales. Le temps de résidence des particules dans cette couche est très long à cause de l'absence de nuages et de précipitations.
- **La stratopause** : Elle forme une couche de quelques kilomètres d'épaisseur généralement située entre 50 et 55 km d'altitude, et constitue donc à la fois la limite supérieure de la stratosphère et la limite inférieure de la mésosphère. La moyenne globale de la température de l'air y reste légèrement inférieure à 0 °C et passe par un maximum au printemps et à l'automne.

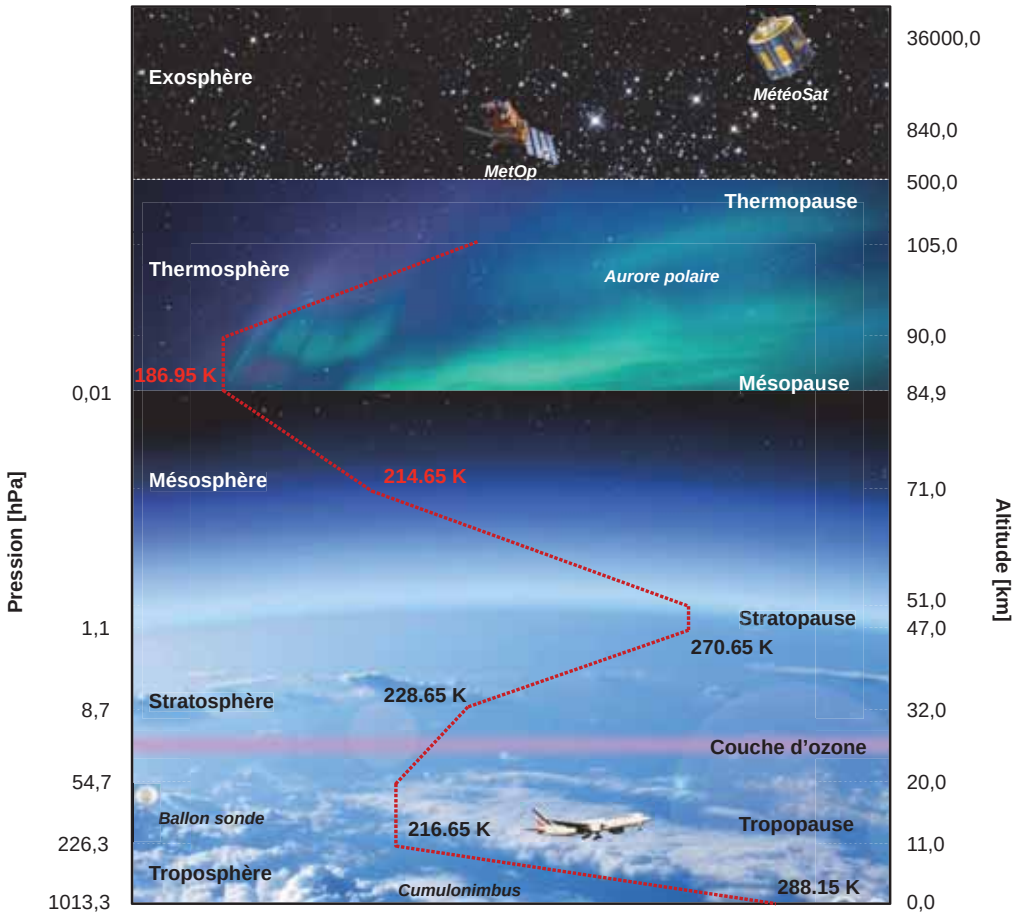


FIGURE 1.2: Schéma de la structure verticale de l'atmosphère et du profil de température idéalisés en fonction de la pression atmosphérique et de l'altitude correspondant au profil global moyenné annuellement.

- **La mésosphère** : Sa température décroit selon la verticale et contrairement à la troposphère, elle ne contient pas de vapeur d'eau et contrairement à la stratosphère elle ne contient que très peu d'ozone. Elle se situe à des altitudes entre 50 et 85 km.

- **La mésopause** : Elle est la limite entre la mésosphère et la thermosphère. Elle possède souvent le point le plus froid de l'atmosphère terrestre. La température peut y atteindre des valeur aussi basses que 130 K.

- **La thermosphère** : Elle s'étend jusqu'à des altitudes très élevées et voit sa température contrôlée par l'absorption du rayonnement solaire ultraviolet. Sa température varie souvent d'un facteur deux suivant l'activité solaire et le cycle diurne. Les aurores polaires surviennent dans cette couche. Les missions spatiales dites « d'orbite basse » telles que la Station Spatiale Internationale sont localisées au milieu de la thermosphère.

- **L'exosphère** : Située au-dessus de la thermosphère, elle est la zone où l'atmosphère subit un « échappement », les molécules peuvent s'échapper vers l'espace sans que les chocs avec d'autres molécules ne les renvoient dans l'atmosphère. Cette couche constitue la dernière zone de transition entre l'atmosphère et l'espace.

1.1.4 Dynamique atmosphérique

Le bilan radiatif du système Terre/Atmosphère est déséquilibré entre les pôles et l'équateur. En effet, l'énergie radiative solaire reçue est maximale à l'équateur et minimale aux pôles. D'autre part, un déséquilibre vertical existe également entre la surface et la tropopause avec des basses couches plus chaudes que des hautes couches de l'atmosphère. Ces déséquilibres sont corrigés par une redistribution énergétique des régions excédentaires vers les régions déficitaires par des circulations atmosphériques et océaniques. Nous allons nous intéresser ici aux circulations atmosphériques et décrire quels types de circulations sont capables de redistribuer efficacement l'énergie afin d'équilibrer le système.

Comme nous venons de le voir, l'atmosphère est le siège d'un déséquilibre radiatif sur la verticale qui nécessite un transport d'énergie de la surface vers la haute atmosphère. En effet, la majeure partie du rayonnement solaire entrant est absorbée par la surface et les basses couches de l'atmosphère, tandis que les plus hautes couches de l'atmosphère émettent de l'énergie radiative infrarouge vers l'espace rendant le bilan radiatif net de ces dernières négatif. Afin d'assurer une partie du mélange vertical d'énergie, des mouvements verticaux de petite échelle se mettent en place par l'ascendance d'air chaud et humide qu'on appelle convection. Une autre partie du mélange vertical est issue des circulations de grande échelle, également impliquées dans le mélange méridien de l'équateur vers les pôles.

La Figure 1.3 représente une coupe méridienne schématisant la circulation et le transport par de grandes cellules troposphériques et stratosphériques. À l'équateur, le phénomène de convection transporte des masses d'air troposphériques chaudes et humides qui peuvent entrer dans la stratosphère via la tropopause tropicale. La zone de convergence des alizés en basses couches s'appelle la zone de convergence intertropicale (ZCIT). Dans cette zone, les mouvements convectifs donnent lieu à la mise en place de nuages orageux élevés de type cumulonimbus responsables d'événements fortement précipitants (mousson) ou de cellules convectives à la base de certains cyclone tropicaux. On observe deux cellules troposphériques de part et d'autre de l'équateur avec deux branches convectives situées en moyenne vers $\pm$ 5° de latitude. Les branches subsidentes de ces cellules sont situées en moyenne vers $\pm$ 25° de latitude.

Ces circulations fermées, nommées cellules de Hadley, participent au transport d'énergie vers les hautes latitudes. Il est à noter que les zones de circulation de ces

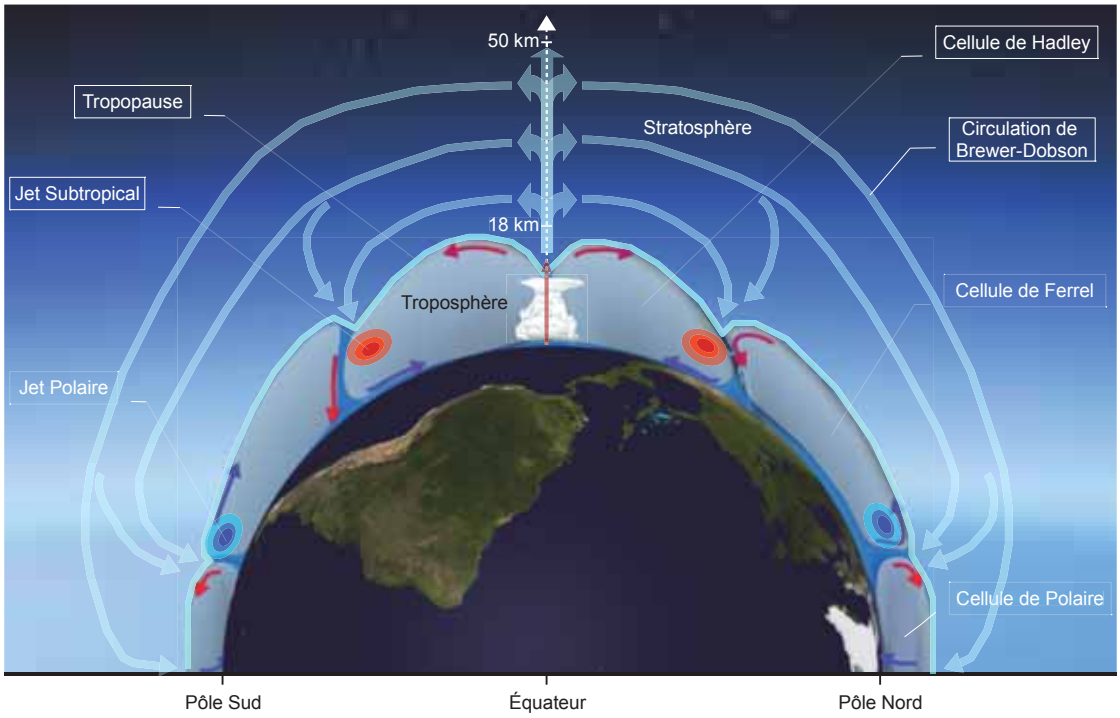


FIGURE 1.3: Coupe méridienne de l'atmosphère terrestre représentant la circulation et le transport dans les grandes cellules troposphériques et stratosphériques.

cellules varient avec les saisons. Les cellules de Hadley transportent des quantités très importantes d'air avec une vitesse méridienne de l'ordre du $m.s^{-1}$. Typiquement, une particule atmosphérique peut mettre environ entre 70 à 80 jours pour effectuer un parcours complet de la cellule. On observe sur la Figure 1.3 le courant-jet subtropical (en rouge) désignant un noyau de vents d'ouest très forts au niveau de la tropopause vers $\pm$ 30° de latitude. Ces noyaux peuvent atteindre des vents de l'ordre de 40 $m.s^{-1}$ dans chaque hémisphère.

Il existe une circulation fermée de moyenne latitude moins intense et dans le sens opposé à celui des cellules de Hadley. Ces cellules que l'on nomme cellules de Ferrel se composent au nord comme au sud d'anticyclones et de dépressions situés dans les perturbations de moyennes latitudes. Aux hautes latitudes, vers 60°, l'air chaud et humide rencontrant l'air plus froid doit s'élever non pas par convection mais par forçage dynamique ce qui crée un mouvement vertical synoptique ascendant aidé par la présence d'un courant-jet polaire (en bleu sur la Figure 1.3) vers $\pm$ 60° de latitude. Ce mouvement doit être compensé en amont et en aval par un mouvement vertical descendant. Il y a subsidence d'air relativement chaud aux basses latitudes vers $\pm$ 30°. Ceci crée donc une succession d'anticyclones et de dépressions. Ce sont donc les flux de quantité de mouvement et de chaleur transportés par les perturbations de moyennes latitudes qui pilotent la circulation de Ferrel.

Finalement, la Figure 1.3 présente une dernière cellule, nommée la cellule Polaire. Elle possède un système identique à la cellule de Hadley. L'air est plus sec et froid au-dessus du 60^e parallèle. Le parcours de l'air s'effectue sous les 8 km d'altitude car la tropopause n'y dépasse pas ce niveau dans cette région. L'air descendant est très sec ce qui explique que les pôles soient des déserts froids. Les anticyclones semi-permanents sur la Sibérie, les îles arctiques et l'Antarctique sont une conséquence directe de la cellule Polaire ce qui fait que la météorologie de ces régions est relativement stable, contrairement aux dépressions à répétition qui affectent les latitudes moyennes.

La circulation polaire interagit avec l'environnement pour donner des ondes planétaires appelées ondes de Rossby. Ces dernières ont un rôle important dans la trajectoire du courant-jet polaire qui sépare la cellule Polaire de celle de Ferrel. L'énergie solaire venant de l'équateur est transférée à la cellule Polaire par ces mécanismes et elle peut finalement être distribuée jusqu'aux pôles.

Bien qu'il s'agisse d'un milieu où les recherches sont encore très actives tant du point de vue dynamique que chimique, la stratosphère est une zone fondamentale pour appréhender les phénomènes d'interaction à grande et petite échelle entre cette dernière et la troposphère. En effet, même si la tropopause assure son rôle de couvercle, il arrive que certains échanges soient rendus possibles. Ces échanges sont cependant lents. Par exemple, un échange dans le sens troposphère - stratosphère peut s'effectuer avec un temps caractéristique de 5 à 10 ans, tandis qu'un échange dans le sens stratosphère - troposphère peut s'effectuer selon un temps caractéristique de 1 à 2 ans. Les phénomènes responsables d'échanges plus rapides peuvent être liés respectivement à un overshoot causé par un nuage fortement convectif et à une foliation de tropopause due à une intrusion d'air stratosphérique à fort tourbillon potentiel dans la troposphère.

La stratosphère est une région dans laquelle survient d'intenses processus radiatifs, dynamiques et chimiques. Les particules peuvent être rapidement transportées dans le plan horizontal par des vents appelés strato-jets. Les systèmes de vents dans la stratosphère sont cependant très différents de ceux de la troposphère. Une circulation méridienne a été proposée en 1940 par Brewer-Dobson. Cette circulation particulière décrit une ascendance de l'air au niveau des Tropiques (Figure 1.3), se déplaçant jusqu'aux pôles et descendant en altitude vers la tropopause aux hautes latitudes. Les ondes de Rossby jouent un rôle très important dans la dynamique de la stratosphère des moyennes latitudes. Enfin, au niveau de la stratosphère tropicale, il existe deux oscillations du vent zonal, l'oscillation quasi-biennalle (OQB) (observée dans la basse et moyenne stratosphère) et l'oscillation semi-annuelle (présente à des altitudes plus hautes). L'OQB est à l'origine d'une circulation secondaire qui est déterminante pour le transport stratosphérique global de l'ozone et de la vapeur d'eau. L'OQB contribue au mélange des couches supérieures de la stratosphère, et influe aussi sur le taux de déplétion de la couche d'ozone au-dessus des zones polaires.

1.2 Chimie atmosphérique

La chimie atmosphérique est une discipline à part entière des sciences de l'atmosphère terrestre mais également d'autres planètes. Son champ de recherche est interdisciplinaire et implique entre autres l'étude de la chimie environnementale (pollution de l'air et aérosols), de la physique (photochimie, instrumentation, observations *in-situ*, télédétection), de la météorologie, de l'océanographie, de la géologie, du volcanisme, de la biosphère ou encore de la modélisation des réactions à fine échelle jusqu'à la modélisation planétaire. L'étude de la composition et de la chimie de l'atmosphère est très importante pour comprendre l'interaction entre l'atmosphère et les organismes vivants sur Terre. La composition de l'atmosphère terrestre est en constante évolution du fait de processus naturels tels que l'intensité du rayonnement solaire, la foudre qui produit localement des NO_x ou encore les émissions volcaniques. Mais elle change également du fait de l'activité humaine depuis l'ère de la révolution industrielle (l'Anthropocène) qui aurait débuté selon le météorologue et chimiste de l'atmosphère Paul Josef Crutzen (prix Nobel de chimie en 1995), à la fin du XVIII^{e} siècle. Certains de ces changements sont dangereux pour la santé humaine, pour l'agriculture, les écosystèmes et de manière générale pour le vivant. On compte parmi ces problèmes les pluies acides, la dégradation de la qualité de l'air, la destruction de la couche d'ozone ou encore l'augmentation des gaz à effet de serre conduisant au changement climatique.

1.2.1 Description générale

Nous avons vu que l'environnement terrestre peut être divisé en plusieurs composantes entre lesquelles ont lieu des échanges. Ces composantes constituent le système climatique. Certains de ces échanges agissent sur la composition chimique de l'atmosphère constituant les cycles biogéochimiques. Des constituants chimiques peuvent être émis de la surface des continents et océans qui, une fois dans l'atmosphère, subissent des transformations importantes. Ces changements résultent de phénomènes de diffusion turbulente, de transports, de réactions photochimiques initiées par le rayonnement solaire et d'autres réactions chimiques en phases hétérogène, homogène ou aqueuse. Ils peuvent enfin être éliminés du réservoir atmosphérique par des processus de dépôts sec ou humide. Les sources naturelles qui contribuent à la composition chimique de l'atmosphère non perturbée sont issues majoritairement des sols, océans, végétation et volcans. Cependant, ces cycles sont largement perturbés par les activités humaines conduisant à l'émission dans l'atmosphère d'une grande quantité de constituants mineurs gazeux et de particules.

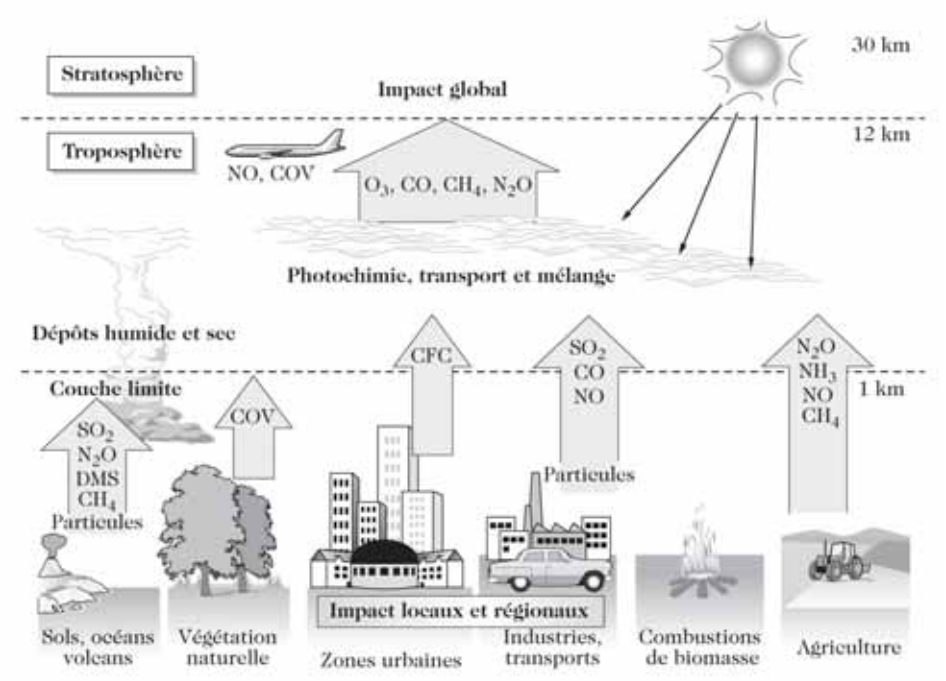


FIGURE 1.4: Schéma représentant les principaux processus de la chimie atmosphérique. Source : [Delmas et al., 2005].

La Figure 1.4 décrit l'ensemble des mécanismes d'émission, de transformation et de dépôt. On remarque que les constituants mineurs, émis naturellement ou non, subissent un transport vertical et horizontal. Ils peuvent subir des transformations physico-chimiques sous l'effet du rayonnement solaire en phase gazeuse ou liquide. Les espèces chimiques à courte durée de vie auront un impact local et génèreront des phénomènes de pollution atmosphérique dans des zones urbaines ou industrielles. Tandis que des espèces à longue durée de vie seront transportées sur de longues distances et/ou à des altitudes élevées ayant ainsi un impact à l'échelle climatique ou, par exemple, sur la couche d'ozone stratosphérique. Les sources naturelles émettent principalement des Composés Organiques Volatiles (COV), du dioxyde de soufre (SO_2), du dioxyde d'azote (N_2O), du méthane (CH_4), du sulfure de diméthyle (DMS) et des particules. Les sources anthropiques ajoutent en plus de ces dernières du monoxyde de carbone (CO), des oxydes d'azote (NO_x), de l'ammoniac (NH_3) et des halocarbures types chlorofluorocarbures (CFC) par exemple. Il est à noter que les activités anthropiques et les feux sont également sources de COV. Les principales caractéristiques de ces constituants sont détaillées dans le Tableau 1.1.

Afin de quantifier la concentration des constituants chimiques, on utilise différentes unités. Pour simplifier notre propos et pour la suite, nous exprimerons les mesures de concentrations de ces constituants par leur rapport de mélange (fraction molaire - mixing ratio). Le rapport de mélange d'un gaz X, noté C_X, représente le nombre de moles de ce gaz par mole d'air (unité mole/mole). Si la pression est suffisamment faible, comme c'est le cas de la pression atmosphérique, on peut alors utiliser la loi des gaz parfaits. Ainsi, dans cette description simplifiée, le volume occupé par un gaz parfait est proportionnel au nombre de molécules contenues dans ce volume. Le rapport de mélange représente donc également le volume occupé par le gaz X dans le volume d'air considéré (unité volume/volume). Il est important de noter qu'il s'agit d'une simplification et que l'on suppose que les molécules de gaz ne sont pas trop proches les unes des autres, qu'elles ne s'influences pas et qu'elles vont toutes à la même vitesse. Si la pression était trop forte, il faudrait utiliser la loi des gaz réels qui prendrait en compte les influences entre les molécules.

L'adimensionnalité de cette unité a l'avantage de donner directement l'abondance relative des espèces et le rapport de mélange reste constant même si la température et la pression varient. Les constituants présentés dans le Tableau 1.1 ont pour unité le pourcentage en volume par rapport à l'air sec. Les systèmes d'unité pour l'expression des rapports de mélange sont tels que :

- 1 % - une partie pour 100 (10^{-2} v/v)
- 1 ppmv - une partie pour 10^6 (10^{-6} v/v)
- 1 ppbv - une partie pour 10^9 (10^{-9} v/v)
- 1 pptv - une partie pour 10^{12} (10^{-12} v/v)

On remarque dans le Tableau 1.1 que certains constituants ont de faibles concentrations de l'ordre du ppmv à quelques dizaines de pptv. On les appelle des constituants mineurs. Cependant, malgré une infime concentration, ces derniers jouent un rôle majeur sur le système Terre. En effet, ces constituants influent sur le bilan radiatif de la Terre par l'effet de serre et le refroidissement radiatif dû aux aérosols, sur la qualité de l'air et des précipitations (pluies acides).

Parmi les constituants mineurs, on distingue plusieurs catégories :

- Les **gaz à effet de serre** se caractérisent par leur capacité à absorber le rayonnement infrarouge et donc à impacter le bilan radiatif terrestre. Le premier gaz à effet de serre est la vapeur d'eau qui est responsable à environ 72 % de l'effet de serre total. Outre la vapeur d'eau, le CO_2 émis, produit par l'activité humaine, représente les 3/4 des gaz responsables de l'effet de serre. On distingue d'autres gaz à effet de serre tels que le méthane (CH_4), le protoxyde d'azote N_2O, l'ozone O_3 et les hydrocarbures (les chlorofluorocarbures (CFC), les hydrochlorofluorocarbures, comme le HCFC-22 (un fréon), les hydrofluorocarbures (HFC), le tétrafluorométhane (CF_4), etc.), majoritairement d'origine anthropique à l'exception du chlorure de méthyl (CH_3Cl).
- Les **gaz réactifs** sont majoritairement formés de carbone, d'azote ou de soufre tels que le méthane, le monoxyde de carbone, les composés organiques volatils, les oxydes d'azote, l'ammoniac, le sulfure d'hydrogène, les hydrocarbures, etc. Ces gaz peuvent contribuer à la formation photochimique d'ozone et peuvent s'oxyder en phase gazeuse ou aqueuse acidifiant les précipitations.

- Les **oxydants** dans l'atmosphère peuvent être sous forme atomique ou moléculaire tels que l'ozone (O_3) ou les radicaux (OH, NO_3 ...). Le radical hydroxyle OH est le principal agent des transformations dans l'atmosphère. En effet, un radical est une espèce chimique possédant un ou plusieurs électrons non appariés sur sa couche externe. La présence d'un électron célibataire confère à cette molécule une grande instabilité, ce qui la rend apte à réagir avec beaucoup de constituants, et de manière très rapide, puisqu'elle cherche à se compléter à l'aide d'autres molécules présentes dans l'air. Le radical OH est très réactif et est capable de réagir avec la majorité des constituants atmosphériques. Seuls quelques rares constituants n'interagissent pas ou peu avec le radical OH tels que le CO_2, le N_2O et les CFC, permettant ainsi à la concentration de ces gaz à effet de serre de croître dans l'atmosphère.

Constituant	Formule chimique	Masse moléculaire	Pourcentage en volume par rapport à l'air sec [10^{-2}.v/v]	Masse totale dans l'atmosphère [g]	Temps de résidence moyen dans l'atmosphère	Origine
Atmosphère totale				$5{,}136.10^{21}$		
Air sec		28,9644	100,0	$5{,}119.10^{21}$		
Vapeur d'eau	H_2O	18,0153	variable	$0{,}017.10^{21}$	6 à 15 jours	Processus physiques
Diazote	N_2	28,0340	78,084	$3{,}866.10^{21}$	15.10^6 ans	Biologique
Dioxygène	O_2	31,9988	20,948	$1{,}185.10^{21}$	8.10^3 ans	Biologique
Argon	Ar	39,9480	0,934	$6{,}59.10^{19}$	infini	Inerte
Dioxyde de carbone	CO_2	44,0099	0,0370	$2{,}72.10^{18}$	15 ans	Combustions, océan, biosphère et anthropique
Néon	Ne	20,1830	$1{,}818.10^{-3}$	$6.48.10^{16}$	infini	Inerte
Hélium	He	4,0099	$5{,}2.10^{-4}$	$3{,}71.10^{15}$	infini	Inerte
Méthane	CH_4	16,0430	$\approx 1{,}7.10^{-4}$	$\approx 4{,}3.10^{15}$	9 ans	Biogénique et anthropique
Hydrogène	H_2	2,0159	$\approx 5{,}0.10^{-5}$	$\approx 1{,}8.10^{14}$	10 ans	Biogénique
Protoxyde d'azote	N_2O	44,0128	$\approx 3{,}1.10^{-5}$	$\approx 2{,}3.10^{15}$	150 ans	Biogénique et anthropique
Monoxyde de carbone	CO	28,0106	$\approx 1{,}2.10^{-5}$	$\approx 5{,}9.10^{14}$	2 mois	Photochimique et anthropique
Ozone	O_3	47,9982	2 - 200.10^{-6}	$\approx 3{,}3.10^{15}$	1 à 2 mois	Photochimique
Ammoniac	NH_3	17,0306	$\approx 0{,}1$ à 1.10^{-6}	$\approx 3{,}0.10^{13}$	20 jours	Photochimique
Dioxyde d'azote	NO_2	46,0055	$\approx 1.10^{-7}$	$\approx 8.10^{12}$	1 jour	Photochimique
Composés Organiques Volatils (COV)	$C_XH_YO_Z$	variable	$\approx 0{,}1$ à 1.10^{-6}	$\approx 10^{14}$	heures - jours	Biogénique et anthropique
Halocarbures	CFC, etc.	variable	$\approx 3{,}8.10^{-6}$		années	Anthropique
Dioxyde de soufre	SO_2	64,063	$\approx 2.10^{-8}$	$\approx 2{,}3.10^{12}$	1 jour	Photochimique, volcanique et anthropique
Sulfure d'hydrogène	H_2S	34,080	$\approx 2.10^{-8}$	$\approx 1{,}2.10^{12}$	1 jour	Biogénique et anthropique
Sulfure de diméthyle (DMS)	C_2H_6S	62,134	≈ 1 à 100.10^{-12}		1 jour	Biogénique
Radical hydroxyle	OH	17.007	≈ 0.1 à 10.10^{-12}		seconde	Photochimique

TABLE 1.1: Tableau des caractéristiques des principaux constituants chimiques gazeux de l'atmosphère terrestre. D'après [Delmas et al., 2005].

1.2.2 Distributions des constituants atmosphériques

1.2.2.1 Temps caractéristiques moyens de transport horizontal et vertical

Nous avons décrit précédemment les principaux mouvements de l'air régissant la dynamique atmosphérique. Les origines de ces mouvements sont l'instabilité thermique verticale, l'inhomogénéité de la distribution de l'énergie solaire, avec un maximum à l'équateur et un minimum aux pôles, et le mouvement de rotation de la Terre autour de son axe. La troposphère contient 90 % de la masse totale de l'atmosphère, c'est pour cela que les échanges verticaux et horizontaux y sont intenses. Afin de comprendre les mécanismes de transport des constituants chimiques, il est important de prendre en considération à la fois les temps caractéristiques moyens des échanges horizontaux et verticaux et également les temps de résidence moyens de ces constituants dans l'atmosphère. On retrouve ces temps de résidence moyens dans le Tableau 1.1. Ainsi, nous pouvons décrire les distributions verticales et horizontales des constituants atmosphériques gazeux évoqués précédemment.

La Figure 1.5 illustre les temps caractéristiques moyens des transport horizontaux (a) et verticaux (b), des constituants chimiques dans l'atmosphère. On remarque sur la Figure 1.5.a, un maximum de un an du temps caractéristique moyen pour un transport vers l'hémisphère sud. Si le temps de résidence du gaz est supérieur à ce maximum (de l'ordre de la centaine d'année) alors la distribution de celui-ci sera homogène sur l'ensemble de globe. C'est le cas par exemple du protoxyde d'azote (N_2O) et des CFC. Pour des gaz ayant un temps de résidence moyen de l'ordre de la centaine ou de la dizaine d'années, leur distribution sera quasi-homogène avec un gradient de concentration entre l'hémisphère nord et sud. Ce gradient est dû à un nombre de sources plus important dans l'hémisphère nord. Le CO_2 et le CH_4 ont des distributions quasi-homogènes.

Les gaz ayant un temps de résidence de l'ordre du mois et donc inférieur à la durée caractéristique moyenne du transport, ont des distributions inhomogènes. On peut citer l'O_3 et le CO qui sont dans ce cas. Enfin si les gaz ont un temps de résidence très court de par leur réactivité par exemple, alors leur distribution sera hétérogène et leur concentration dépendra de la proximité des sources (les NO_x, les COV). De la même manière, les gaz à longue durée de vie auront une distribution verticale homogène. En effet, on note un maximum de 10 ans du temps caractéristique moyen pour un transport vertical de la surface jusqu'au sommet de la stratosphère (Figure 1.5.b). Au contraire, les constituants ayant une courte durée de vie auront une distribution hétérogène et généralement concentrée au niveau de la couche limite atmosphérique proche des sources de surface.

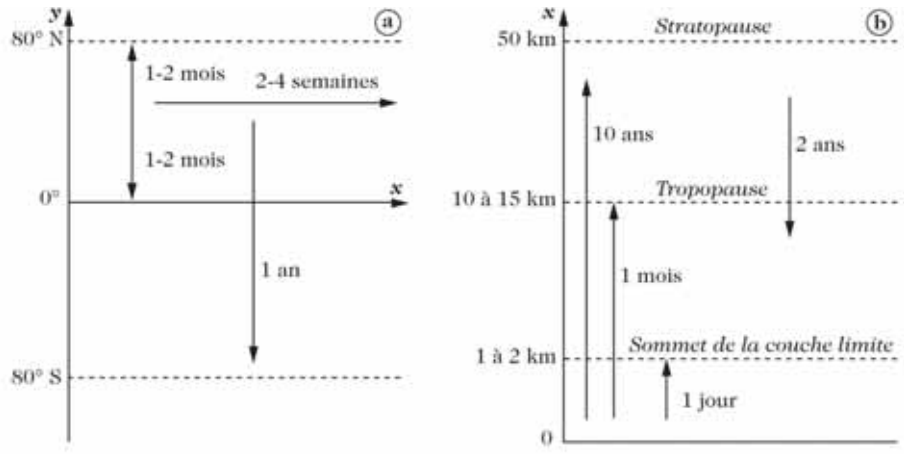


FIGURE 1.5: Représentation schématique des temps caractéristiques moyens des transports (a) horizontaux et (b) verticaux des constituants chimiques dans l'atmosphère. Source : [Delmas et al., 2005].

1.2.2.2 Distributions verticales des constituants atmosphériques

Les distributions absolues selon la verticale sont plus complexes car elles obéissent à la loi des gaz parfaits. En effet, on note un gradient de pression et un gradient de température selon la verticale. Ainsi, les profils verticaux de concentrations absolues (Figure 1.6.a) des gaz ayant une durée de vie plus longue que le temps caractéristique des transports verticaux suivront la loi de décroissance logarithmique de la pression. Sont concernés par cette décroissance, les constituants majeurs tels que O_2, N_2 et les constituants à très longue durée de vie comme le N_2O. Cette relation quasi-linéaire entre l'altitude et le logarithme de la concentration s'applique aussi au CO_2 mais bien moins au CH_4. La vapeur d'eau ne suit pas cette tendance car son profil est principalement fonction de la température. Enfin, l'ozone est un cas particulier puisque sa source principale se situe dans la stratosphère.

La caractéristique linéaire en fonction de l'altitude des constituants ayant une longue durée de vie (O_2, N_2, CO_2) se caractérise en rapport de mélange par une droite dans ce cas particulier (Figure 1.6.b). Plus le temps de résidence dans l'atmosphère du constituant est faible plus son profil vertical va diminuer rapidement en fonction de l'altitude (H_2, CH_4, N_2O ...). On retrouve ce profil particulier pour l'ozone avec un maximum dans la stratosphère. La couche d'ozone qui contient 90 % de l'ozone atmosphérique est d'ailleurs la caractéristique majeure de cette zone de l'atmosphère.

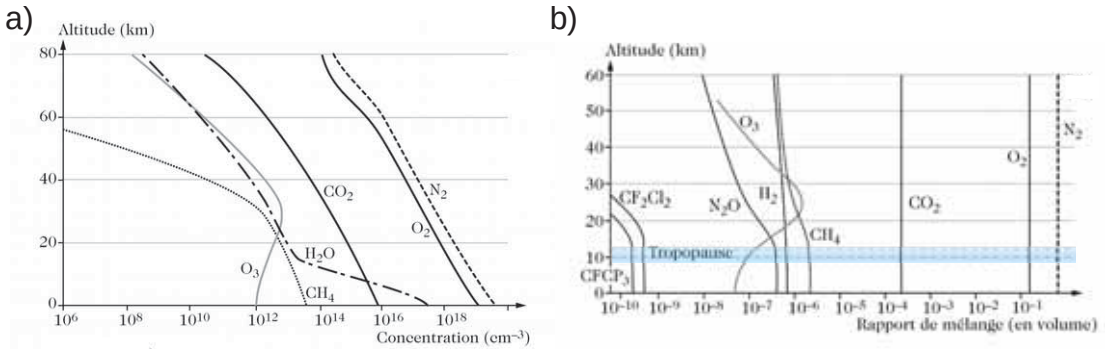


FIGURE 1.6: Représentation schématique de la distribution verticale des principaux constituants gazeux atmosphériques en concentration en molécules (a) et en rapport de mélange (b). Source : [Delmas et al., 2005].

1.2.2.3 Variabilité spatiale et temporelle

La connaissance du temps de résidence et du temps caractéristique moyen de transport horizontal et vertical des constituants atmosphériques nous permet de suivre la variabilité spatio-temporelle probable de ces composés. Cela s'avère très utile pour la compréhension des processus contrôlant la variabilité des différentes espèces atmosphériques. Ce lien approximatif entre échelle spatiale et temps de vie est pratique pour modéliser l'évolution des constituants atmosphériques à l'aide de modèles de chimie-transport (voir Chapitre 5).

La Figure 1.7 représente schématiquement la comparaison entre des temps de vie et des échelles spatiales pour quelques constituants atmosphériques. On remarque par exemple que le temps de vie de l'ozone troposphérique est du même ordre de grandeur que le temps nécessaire au mélange intra-hémisphère. Cependant, ce même constituant a un temps de vie plus faible que le temps de mélange inter-hémisphère. Cela implique que la variabilité méridienne de l'ozone troposphérique dans chacun des hémisphères est faible comparée à sa variabilité entre l'hémisphère nord et sud. Le méthane a un temps de vie important dans la troposphère devant le temps nécessaire au mélange à l'échelle du globe. Ainsi, le méthane est une espèce bien mélangée dans la troposphère avec une faible variabilité dans le temps.

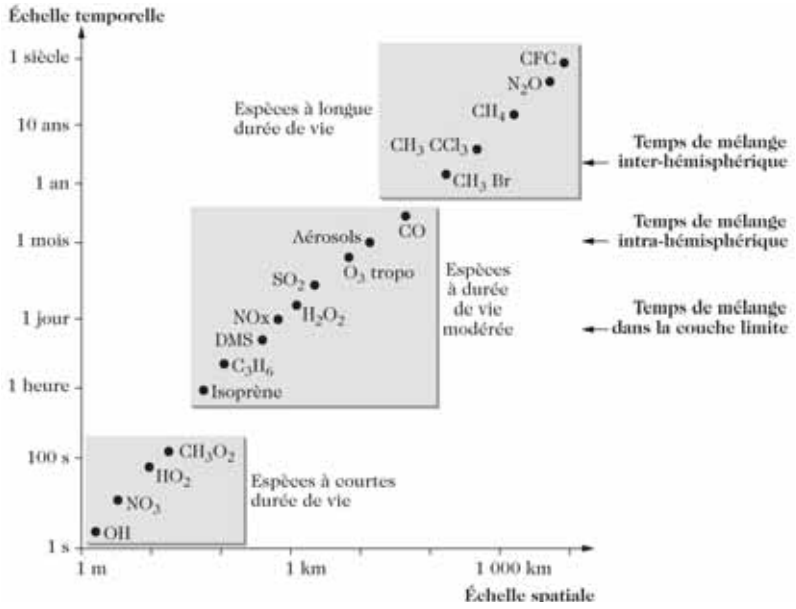


FIGURE 1.7: Schéma comparant des temps de vie et des échelles spatiales pour quelques constituants atmosphériques. Source : [Delmas et al., 2005].

1.2.3 Contribution énergétique

Nous avons montré que l'énergie radiative en provenance du soleil joue un rôle fondamental dans la dynamique horizontale et verticale des masses d'air à grande et petite échelle. Ce même rayonnement est utilisé dans des processus physico-chimiques de certains constituants atmosphériques. De plus, l'énergie radiative peut être absorbée par ces constituants et convertie en énergie interne pour l'atmosphère. Cette énergie interne est égale à l'énergie cinétique des molécules dans le cas d'un gaz parfait. Le rayonnement solaire peut être absorbé par l'O_3, l'O_2 et la vapeur d'eau dans ce qu'on appelle les courtes longueurs d'ondes (ultraviolet et visible). Le CO_2, le CH_4, le N_2O, l'O_3 et la vapeur d'eau sont capables d'absorber le rayonnement dans les longues longueurs d'ondes (infrarouge et micro-onde). Le rayonnement incident peut aussi être diffusé par certains constituants atmosphériques. Ces phénomènes sont responsables de la différence d'énergie radiative reçue au sommet de l'atmosphère et à la surface terrestre.

La chimie atmosphérique participe aux différents échanges d'énergie de manière directe (réactions chimiques exothermiques ou endothermiques qui respectivement dégagent de l'énergie sous forme de chaleur ou utilisent de l'énergie) ou indirecte. Ce caractère indirect, s'explique par les différents couplages associés à la chimie atmosphérique. Pour illustrer ceci, prenons l'exemple de l'ozone qui contribue à la conversion de l'énergie radiative en énergie interne par l'intermédiaire des processus photochimiques, puis des réactions chimiques et photochimiques modifient la composition atmosphérique des espèces minoritaires telles que l'ozone qui possède un rôle radiatif majeur. De plus, les espèces qui réagissent peuvent être transportées par les vents. Enfin, la cinétique chimique dépend de la température atmosphérique qui elle-même est influencée par les échanges d'énergie sous forme radiative, mécanique ou latente. Tous ces phénomènes font de la chimie atmosphérique un domaine complexe nécessitant une connaissance précise. En effet, les processus faisant intervenir la chimie participent à beaucoup d'échanges entre les différentes composantes qui constituent le système climatique. L'équilibre entre ces composantes est fragile et l'augmentation de certains constituants dans l'atmosphère due à l'activité humaine déséquilibre les couplages naturels entre les différentes branches du système. Ce dérèglement participe largement au changement climatique et à la pollution atmosphérique qui ont un impact sur les écosystèmes et la santé.

1.3 Processus Physico-chimiques

Nous avons constaté que la troposphère et la stratosphère, séparées par la tropopause, se distinguent l'une de l'autre par bien des domaines : du point de vue thermique, dynamique mais également chimique. La troposphère possède une grande variabilité dans sa composition chimique, étant à proximité directe des sources d'émission de surface. De plus, les phénomènes météorologiques particuliers à cette couche du fait de son instabilité thermique participent à une redistribution fréquente des espèces en son sein. Tandis que la stratosphère est au contraire une couche stratifiée et stable grâce à un gradient positif de température avec l'altitude. L'origine de ce chauffage réside dans le processus de formation de la couche d'ozone. En effet 90 % de l'ozone atmosphérique est contenu dans cette partie de l'atmosphère.

La connaissance et la surveillance de la chimie de l'ozone stratosphérique est très importante car la couche d'ozone est fondamentale au maintien de la vie sur Terre. L'ensemble des constituants atmosphériques, qu'ils soient présents dans la troposphère ou la stratosphère sont issus de processus physico-chimiques complexes faisant intervenir de l'énergie ou d'autres espèces. Nous allons décrire les principaux processus naturels de la chimie troposphérique et stratosphérique et analyser les perturbations en lien avec les activités humaines. Ces différents processus sont décrits en détail dans [Moh, 2008] et [Delmas et al., 2005].

1.3.1 Le système chimique stratosphérique

1.3.1.1 L'équilibre de l'ozone stratosphérique

La couche d'ozone dans la stratosphère possède une efficacité d'absorption du rayonnement solaire ultraviolet entre 240 et 320 nm. Cela dépend également du nombre de molécules d'ozone présent le long de la traversée du rayonnement. Ce nombre de molécules représente une épaisseur locale que l'on appelle colonne totale d'ozone et représente la quantité totale d'ozone dans une hypothétique colonne d'air s'étendant de la surface au sommet de l'atmosphère. Cette colonne est souvent exprimée en unité Dobson (DU) où 1 DU = 1 centième de millimètre dans des conditions standards (T = 273 K et P = 1 atm). En moyenne globale sur une année, la colonne d'ozone vaut environ 300 DU = 3 mm. La concentration de l'ozone est relativement faible dans l'atmosphère, elle augmente jusqu'à la tropopause pour atteindre son maximum dans la stratosphère entre 15 et 20 km au niveau des pôles et entre 25 et 30 km à l'équateur en rapport avec l'altitude de la tropopause.

Enfin, une fois son maximum atteint, la concentration en ozone diminue exponentiellement avec l'altitude. Son temps de vie diminue rapidement en fonction de l'altitude en présence de soleil. Il est d'environ 1 mois au-dessus de 30 km, quelques jours au-dessus de 40 km et quelques heures au-dessus de 70 km. Cette distribution verticale est unique par rapport aux autres constituants atmosphériques qui possèdent un maximum au niveau de la surface. Ceci résulte de l'existence d'une source d'ozone située dans la stratosphère.

L'ozone est principalement produit aux régions équatoriales, là où le maximum de rayonnement solaire est situé. On comprend assez rapidement que la distribution spatio-temporelle de l'ozone est complexe et n'est pas uniquement déterminée par des processus de formation et destruction.

La Figure 1.8 présente les moyennes zonales du rapport de mélange d'ozone en ppv en janvier (a) et en juillet (b) pour des champs d'ozone modélisées par le modèle de chimie-transport MOCAGE de Météo-France. On observe que les valeurs maximales du rapport de mélange d'ozone tendent vers les hautes latitudes en été (en janvier dans l'hémisphère sud et en juillet dans l'hémisphère nord). Même si les valeurs maximales du rapport de mélange d'ozone se situent bien à l'endroit où il est produit entre 30 et 40 km d'altitude au niveau des Tropiques, la concentration est maximale vers 20 km d'altitude aux hautes latitudes.

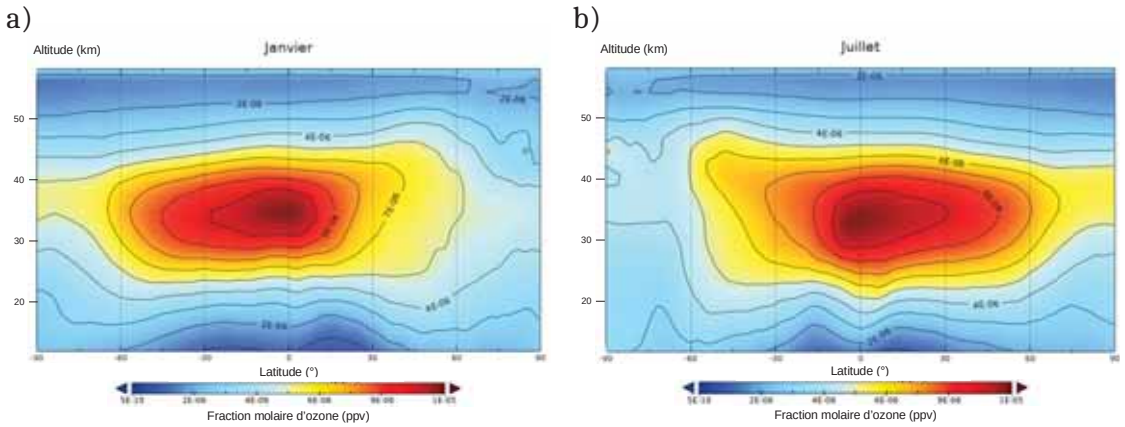


FIGURE 1.8: Moyennes zonales du rapport de mélange d'ozone (en ppv) en janvier (a) et juillet (b) 2017 modélisées par le modèle de chimie transport MOCAGE de Météo-France.

En fait, l'ozone ne se trouve pas là où il est produit. Effectivement, en moyenne, la concentrations de la colonne totale d'ozone est maximale près des hautes latitudes comme le montre le Figure 1.9. Les valeurs maximales aux moyennes et hautes latitudes ne sont pas en phase avec le maximum d'insolation. Les valeurs maximales de colonnes totales sont relevées à la fin de l'hiver et au printemps et les minimales en automne. Ainsi, la dynamique va jouer un rôle important dans le transport des masses d'air stratosphériques chargées d'ozone. La circulation méridienne s'accompagne d'un mouvement de subsidence faisant décroitre l'altitude du maximum d'ozone au fur et à mesure que l'on se rapproche des régions polaires.

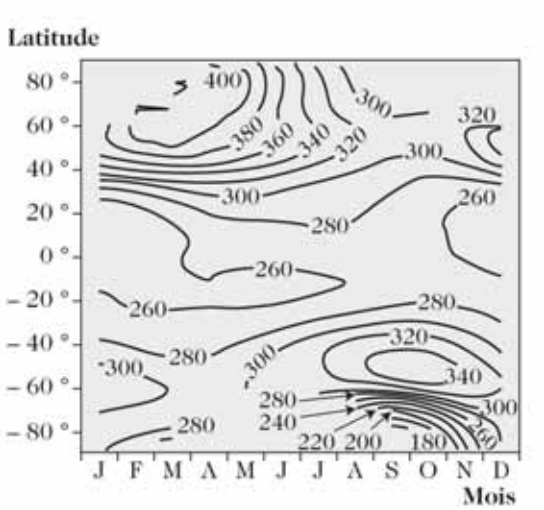


FIGURE 1.9: Colonne totale d'ozone (en unités Dobson, ou DU) en fonction de la latitude et du mois. Ces valeurs sont issues des mesures de l'instrument satellitaire TOMS (Total Ozone Mapping Spectrometer), moyennées sur les années 1997 à 2001. Source : [Delmas et al., 2005]

Comme nous l'avons dit précédemment, l'ozone stratosphérique est produit à l'aide du rayonnement solaire ultraviolet pas un processus physico-chimique que l'on nomme photodissociation de l'oxygène moléculaire suivi de la recombinaison entre les atomes d'oxygène formés et l'oxygène moléculaire (O_2). Pour décrire ces processus, Sydney Chapman propose en 1930, une théorie qui considère l'équilibre entre la formation et la destruction de l'ozone. Cette théorie utilise l'hypothèse d'une atmosphère d'oxygène pur d'où les réactions conduisent à un cycle de l'ozone stratosphérique nommé cycle de Chapman. Une première étape de ce cycle implique la photodissociation de l'oxygène moléculaire pour des longueurs d'onde inférieures à 242 nm où $h\nu$ représente l'énergie du photon :

$$O_2 + h\nu \quad \rightarrow \quad O + O \quad (\lambda < 242 \text{ nm}) \tag{1.1}$$

Cette réaction est suivie par la formation de l'ozone à partir des atomes d'oxygène formés et d'un tiers corps noté M. Ce tiers corps participe à la réaction uniquement par transfert d'énergie lors des collisions. Il s'agit le plus souvent des molécules N_2 ou O_2. La production d'ozone entraîne également une libération de chaleur de l'ordre de $\Delta Q = 24$ kcal pour chaque mole d'ozone formée :

$$O + O_2 + M \quad \rightarrow \quad \mathbf{O_3} + M + \Delta Q \tag{1.2}$$

L'oxygène atomique est capable de se recombiner selon une réaction à trois corps. Mais cette réaction est négligeable par rapport à la précédente (1.2) qui est très rapide, de l'ordre de quelques fractions de secondes.

$$O + O + M \quad \rightarrow \quad O_2 + M \tag{1.3}$$

Puis l'oxygène atomique et l'ozone peuvent être simultanément détruits par la réaction :

$$O + \mathbf{O_3} \quad \rightarrow \quad O_2 + O_2 \tag{1.4}$$

Enfin, l'ozone est à son tour photodissocié suivant le processus :

$$\mathbf{O_3} + h\nu \quad \rightarrow \quad O_2 + O \quad (\lambda < 310 \text{ nm}) \tag{1.5}$$

À partir de ces réactions on peut établir un bilan de l'équilibre de l'ozone et de l'oxygène atomique dans la stratosphère ne considérant que les espèces oxygénées. Ce bilan explique en partie l'existence de la couche d'ozone stratosphérique. L'ensemble de ces processus est représenté schématiquement sur la Figure 1.10. Cependant, le cycle de Chapman à lui seul surestime la concentration d'ozone réellement observée dans la stratosphère. En effet, seule la réaction 1.3 est responsable d'un processus de perte d'oxygène impairs O_x ($O_x = O + O_3$) or cette réaction est lente et n'explique à elle seule qu'au maximum 20 % de la destruction de O_x nécessaire pour équilibrer la production par le rayonnement solaire.

Il devient évident que d'autres mécanismes chimiques de disparition des oxygènes impairs doivent exister. Ces processus font intervenir des constituants mineurs de l'atmosphère dont le rôle dans l'équilibre de l'ozone repose sur le concept de catalyse chimique. Des cycles catalytiques de destruction de l'ozone faisant intervenir : OH, HO_2, NO, NO_2, Cl, ClO, Br, BrO, et d'autres, ont été découverts entre les années 1950 et 1970.

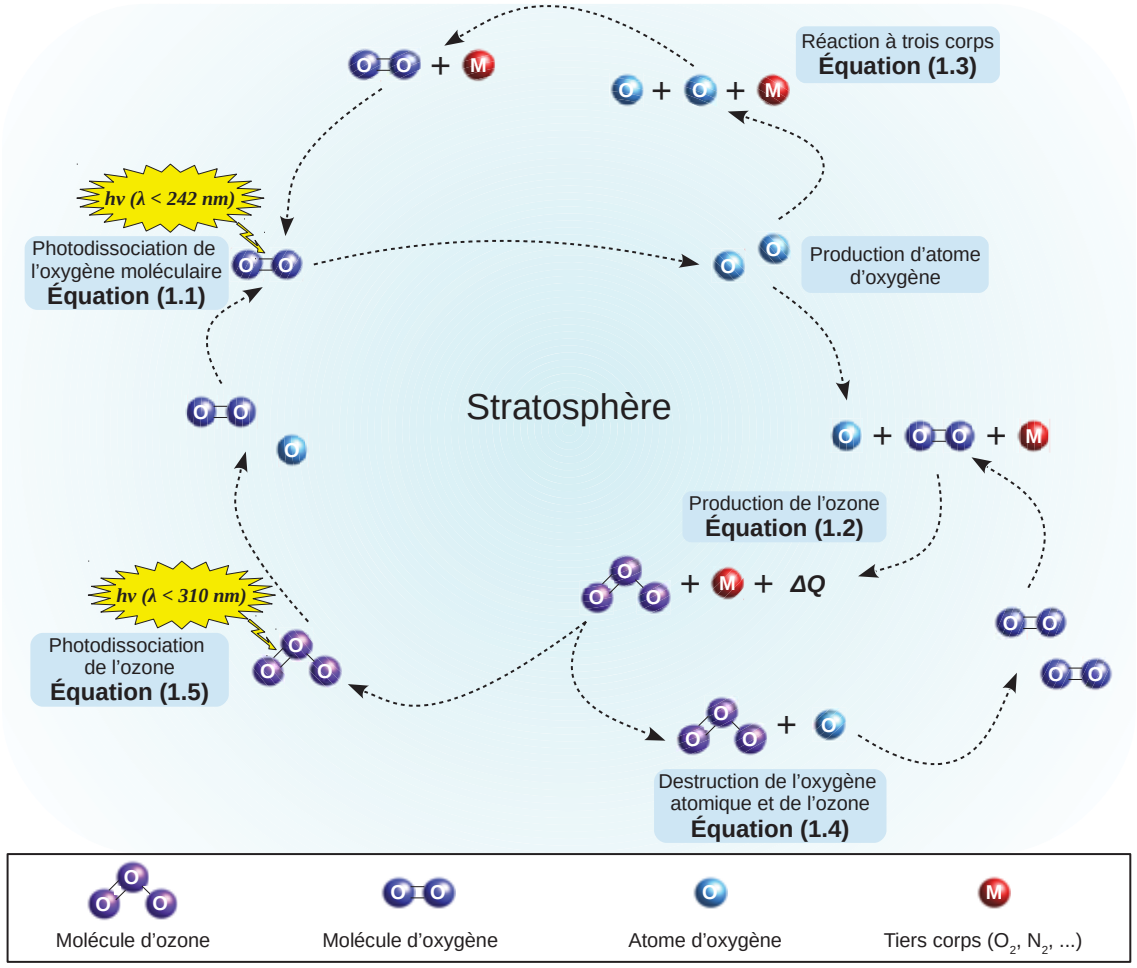


FIGURE 1.10: Schéma de l'équilibre naturel de production et destruction de l'ozone stratosphérique ne considérant que les espèces oxygénées.

Ainsi, dans le cas de l'ozone, la majorité des cycles catalytiques faisant intervenir le catalyseur (X) sont du type :

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{X} + \mathbf{O_3} & \rightarrow & \mathrm{XO} + \mathrm{O_2} \\ \mathrm{XO} + \mathrm{O} & \rightarrow & \mathrm{X} + \mathrm{O_2} \\ \hline \mathbf{O_3} + \mathrm{O} & \rightarrow & 2\mathrm{O_2} \end{array} \qquad (1.6) \qquad \begin{array}{rcl} \mathbf{O_3} + \mathrm{X} & \rightarrow & \mathrm{XO} + \mathrm{O_2} \\ \mathrm{XO} + \mathbf{O_3} & \rightarrow & \mathrm{X} + 2\mathrm{O_2} \\ \hline \mathbf{O_3} + \mathbf{O_3} & \rightarrow & 3\mathrm{O_2} \end{array} \qquad (1.7)$$

Même si ces catalyseurs de la destruction des O_x sont produits à nouveau à la fin de chaque cycle, ces derniers ne possèdent pas une durée de vie infinie dans la stratosphère. Certains peuvent être transformés en molécules moins réactives nommées espèces réservoirs limitant l'efficacité de la destruction catalytique de l'ozone. Par exemple pour le chlore et les oxydes d'azote, cette transformation peut mener à des espèces telles que l'acide chlorhydrique (HCl), le nitrate de chlore ($ClONO_2$), l'acide hypochloreux (HOCl) ou encore le pentoxyde d'azote (N_2O_5). Elles présentent également la particularité d'être solubles dans l'eau se traduisant par un puits irréversible pour ces espèces réservoirs lorsqu'elles sont transportées dans la troposphère et éliminées par les pluies.

On appréhende rapidement la complexité de l'équilibre du cycle de l'ozone dans la stratosphère. On comprend que le moindre déséquilibre dans ce système complexe peut avoir un impact important dans les processus de production et de destruction de l'ozone. C'est malheureusement ce qui s'est passé avec l'arrivée de l'activité humaine qui a profondément perturbé ce cycle naturel de l'ozone stratosphérique menant à un déséquilibre anthropique.

1.3.1.2 L'ozone dans les régions polaires

En plus des processus chimiques décrits précédemment, les régions polaires possèdent une particularité supplémentaire dans leur chimie stratosphérique due à l'apport d'ozone résultant du mouvement de subsidence hivernale qui tend à accumuler l'ozone aux hautes latitude. Depuis la fin des années 1970, la colonne totale d'ozone a régulièrement été mesurée aux régions polaires. On pouvait y observer un maximum d'ozone dont la moyenne sur le mois d'octobre était de l'ordre de 350 DU au printemps austral (région antarctique) et sur le mois de mars de l'ordre de 450 DU au printemps boréal (région arctique).

À partir des années 1980, il a été observé à chaque printemps une diminution rapide de la colonne totale d'ozone au-dessus de l'Antarctique avec des minimums sur la fin des années 1990 pouvant aller à moins de 100 DU soit près de 70 % de disparition de la quantité totale d'ozone par rapport à celle mesurée vingt ans plus tôt (Figure 1.11.a). Bien que moins accrue, cette tendance a été mesurée également en Arctique et l'arrivée des instruments d'observations satellitaires a non seulement confirmé cette tendance mais a montré également son extension géographique sur un vaste domaine circulaire.

On peut également observer cette déplétion d'ozone selon la verticale à l'aide de mesure de profils verticaux d'ozone issus de radiosondages comme le présente la Figure 1.11.b. On remarque que la destruction d'ozone intervient au niveau d'altitude où la concentration en ozone est maximale. Par exemple on remarque que environ 80 % de l'ozone disparaît à cette altitude en octobre au niveau de l'Antarctique, lorsque l'on compare la moyenne des profils mesurés entre (1962 - 1971) et (1992 - 2001). Cette destruction d'ozone peut être totale comme pour l'exemple du profil mesuré au pôle Sud le 2 octobre 2001 ou l'on remarque une concentration d'ozone nulle sur une épaisseur de plus de 5 km. Même si cette tendance est observée en Arctique, la différence entre la moyenne des profils mesurés entre (1988 - 1997) et le profil mesuré le 30 mars 1996 ne montre pas une destruction de l'ozone aussi extrême. De plus, la destruction de l'ozone dans cette région est bien plus variable d'une année sur l'autre.

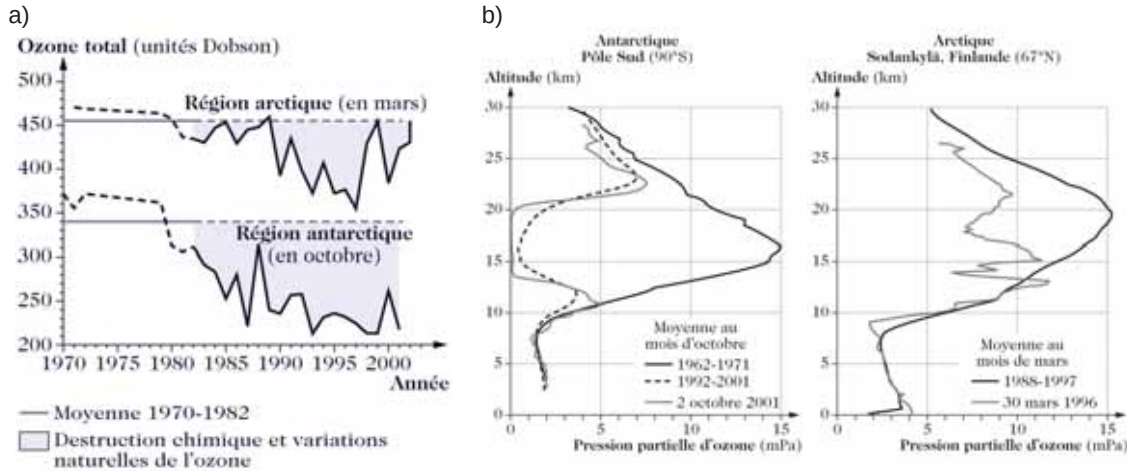


FIGURE 1.11: Courbes de l'évolution de la moyenne mensuelle de la colonne totale d'ozone mesurée par satellite aux régions polaires (données moyennées sur les latitudes supérieur à 63°), pour le mois de mars dans l'hémisphère nord, et le mois d'octobre dans l'hémisphère sud (a). Évolution du profil vertical d'ozone mesuré par radiosondage sous ballon en octobre au-dessus du pôle Sud, et en mars à la station arctique de Sodankylä (67°N) (b). Source : [Delmas et al., 2005].

Ce phénomène inquiétant a été nommé « trou d'ozone ». Il a d'abord été démontré que ce phénomène de diminution de l'ozone stratosphérique commençait dans l'hémisphère sud début juillet au moment ou les rayons du soleil font leur retour au bord du vortex polaire jusqu'en novembre, au moment où ce même vortex se disloque. À la fin de cette période, les colonnes totales d'ozone antarctique remontent pour atteindre des valeurs normales à la fin de décembre. Ce même type de phénomène a été observé dans l'hémisphère nord avec toutefois quelques différences dues à la forte variabilité météorologique à ces latitudes. De plus, une diminution à long terme de l'épaisseur de la couche d'ozone à toutes les latitudes a été observée [Stolarski et al., 1991].

Une fois que ce constat inquiétant a été mis en évidence, il a fallu comprendre la cause de cette diminution de notre couche protectrice. En effet, les cycles catalytiques de destruction décrits précédemment ne peuvent pas à eux seuls expliquer cette forte diminution. La plupart de ces cycles font appel à l'oxygène atomique qui n'est présent qu'en très faible quantité au niveau d'altitude où l'on observe cette disparition de l'ozone. Très rapidement, en 1985, l'équipe du British Antarctic Survey a mis en évidence le rôle du chlore pouvant expliquer ce phénomène [Farman et al., 1985]. Il a été observée une croissance quasi-exponentielle de la concentration de chlore dans l'atmosphère depuis les années 1950. Ces années marquent la démocratisation des appareils ménagers dits "froids" tels que les réfrigérateurs, climatiseurs, etc. et le développement des bombes d'aérosols. On assiste ainsi à l'explosion de l'utilisation des halocarbures (composés d'halogènes et de carbone).

Dès 1986, [Solomon et al., 1986] et [McElroy et al., 1986] expliquent cette destruction de l'ozone polaire au printemps par l'existence de processus de chimie hétérogène propres à ces régions, intervenant à la surface de nuages stratosphériques polaires. En effet, durant la nuit polaire et suite à l'isolement de la stratosphère par le vortex polaire, des températures très basses peuvent être mesurées, de l'ordre de 190 K en Arctique et jusqu'a 180 K en Antarctique. On peut alors observer la formation de nuages stratosphériques polaires (PSC, Polar Stratospheric Clouds). Ils peuvent être de plusieurs types en fonction de leur altitude et de leur composition.

Les PSC se forment à partir des centres de nucléation des molécules d'acide sulfurique. En dessous de 196K à 50 hPa, un premier type de PSC se forme. Ils sont constitués d'acide nitrique tri-hydraté (NAT « *nitric acid trihydrate* », HNO_3-$3H_2O$). À des températures inférieures à 189K à 50 hPa, des PSC apparaissent également, constitués cette fois-ci de molécules d'eau cristallisées. Les nuages stratosphériques polaires catalysent des réactions chimiques dites hétéorogènes, qui résultent d'intéractions entre des espèces en phase gazeuse et d'autres en phase liquide ou solide. Ces réactions hétérogènes se produisent à la surface des cristaux ou particules formant les PSC. Les plus importantes pour la chimie stratosphérique polaire se produisent en hiver et sont les suivantes :

$$\begin{array}{rcl} ClONO_2 + H_2O & \xrightarrow{PSC} & HNO_3 + HOCl \\ ClONO_2 + HCl & \xrightarrow{PSC} & HNO_3 + Cl_2 \end{array} \tag{1.8}$$

Notons que le HNO_3 reste dans le PSC. Au printemps, dès le retour du soleil sur le vortex, les espèces chlorées instables HOCl et Cl_2 sont rapidement photodissociées :

$$\begin{array}{rcl} Cl_2 + h\nu & \rightarrow & Cl + Cl \\ HOCl + h\nu & \rightarrow & ClO + H \\ HOCl + h\nu & \rightarrow & Cl + OH \end{array} \tag{1.9}$$

Comme nous l'avons évoqué précédemment, le taux d'oxygène atomique est limité dans la basse stratosphère, de ce fait les cycles globaux de destruction de l'ozone par le chlore présentés jusqu'ici sont inefficaces. Cependant la forte concentration en ClO induit par les réactions hétérogènes provoque des réactions entre lui-même, initiant un cycle de destruction catalytique de l'ozone propre à l'hiver polaire et responsable jusqu'à 70 % de la destruction de l'ozone :

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{ClO} + \mathrm{ClO} + \mathrm{M} & \rightarrow & \mathrm{Cl_2O_2} + \mathrm{M} \\ \mathrm{Cl_2O_2} + \mathrm{h}\nu & \rightarrow & \mathrm{Cl} + \mathrm{ClO_2} \\ \mathrm{ClO_2} + \mathrm{M} & \rightarrow & \mathrm{Cl} + \mathrm{O_2} \\ 2(\mathrm{Cl} + \mathbf{O_3} & \rightarrow & \mathrm{ClO} + \mathrm{O_2}) \\ \hline 2\mathbf{O_3} & \rightarrow & 3\mathrm{O_2} \end{array} \tag{1.10}$$

Ces cycles se produisent jusqu'au réchauffement du vortex polaire qui met fin aux PSC. La concentration des radicaux chlorés diminue alors rapidement. Le caractère anthropique de cette déplétion d'ozone polaire a donc été établi et l'augmentation de la concentration en chlore s'est rapidement accrue au cours des dernières décennies.

La communauté internationale s'est réunie pour la première fois à Vienne en 1985 afin de démontrer la nécessité d'une coopération internationale pour limiter les risques liés aux activités humaines et les conséquences sur la destruction de l'ozone stratosphérique. Deux ans plus tard, le protocole de Montréal a été négocié par les pays producteurs. Les premières mesures avaient pour but de diminuer de 30 % la production de CFC d'ici 2020 mais le protocole a été amendé à de nombreuses reprises. Ainsi, il a été décidé d'interdire totalement la production des halons en 1994 et des produits chlorés en 1996. Un délai de 10 à 15 ans a été accordé pour les pays en voie de développement. Le protocole de Montréal est considéré à ce jour comme la plus efficace mobilisation internationale en matière d'environnement passant de 24 pays en 1989 à 197 en 2017 l'ayant ratifié. De plus, les signataires du protocole se réunissent annuellement afin de réfléchir et de mettre en place de nouvelles mesures visant à supprimer la production des produits nuisibles à la couche d'ozone et à les remplacer par des produits moins offensifs. L'application de ce protocole a conduit à la stabilisation de la charge totale en chlore atmosphérique dès 1990. Ces mesures ont conduit à la reconstruction de la couche d'ozone à un rythme de 1 à 3 % par décennie et on estime un retour à un niveau antérieur à l'apparition de la déplétion d'ozone vers 2050 [Solomon et al., 2016] et [Clerbaux et al., 2007].

Malgré cet optimiste constat, les hydrofluorocarbures (HFC), qui remplacent les CFC et qui ne contiennent plus d'atome de chlore, sont certes moins nuisibles pour l'ozone stratosphérique mais ils contribuent à renforcer l'effet de serre. En effet, parallèlement à l'augmentation de l'utilisation de ces composés, l'émission des gaz à effet de serre tels que le CO_2, le CH_4 et le N_2O continue d'augmenter de manière inquiétante dans la troposphère. Des recherches actuelles tendent à montrer que cette croissance entraînerait un réchauffement de la surface terrestre qui s'accompagnerait d'un refroidissement de la stratosphère. Dans la haute stratosphère, ce refroidissement entraînerait une augmentation de l'ozone tandis que dans la basse stratosphère l'effet inverse serait constaté car la baisse des température à cette altitude favoriserait la formation de PSC. Ces hypothèses impliquent que l'étude et la surveillance des phénomènes chimiques dans la troposphère sont également indispensables pour appréhender l'évolution à long terme de la couche d'ozone. L'évolution de l'ozone stratosphérique sera de plus en plus liée à celles des émissions de gaz à effet de serre et au changement climatique principalement ressenti dans la troposphère.

1.3.2 Le système chimique troposphérique

1.3.2.1 La vapeur d'eau

La vapeur d'eau a un fort pouvoir d'absorption du rayonnement infrarouge faisant de lui le premier gaz à effet de serre. La vapeur d'eau est responsable à elle seule de la grande majorité de l'effet de serre naturel. Elle a également un effet de rétroaction important sur le changement climatique. En effet, lorsque la température augmente, l'évaporation augmente et la quantité de vapeur d'eau relâchée dans l'atmosphère aussi, accélérant encore le réchauffement. La majorité de la vapeur d'eau atmosphérique se trouve dans la troposphère. Sa concentration décroît rapidement avec l'altitude (Figure 1.6.a). Cette dernière participe au cycle de l'eau et est issue principalement de l'évaporation des océans ($\approx$ 425 000 km^3). Cependant, sa concentration dans la troposphère provient de sources naturelles et les émissions anthropiques directes sont négligeables. Elle ne peut donc pas être considérée comme responsable du changement climatique au même titre que les gaz à effet de serre ajoutés dans l'atmosphère par les activités humaines.

Malgré cela, la réponse de la vapeur d'eau au changement climatique est déterminante pour la modélisation du système climatique. En effet, l'augmentation de la température atmosphérique participe à la hausse de la température de surface des océans pouvant accroître la quantité de vapeur d'eau dans l'atmosphère et ainsi accélérer fortement le réchauffement climatique. Néanmoins, la vapeur d'eau a une très forte variabilité dans la troposphère et les observations n'ont pas encore permis de démontrer cette tendance. La quantité de vapeur d'eau est très importante pour la chimie atmosphérique, puisque associée à la photolyse de l'ozone, elle représente la principale source des radicaux OH dans l'atmosphère. De plus, les précipitations sont le principal vecteur d'élimination des composants chimiques les plus solubles de l'atmosphère.

1.3.2.2 Le dioxyde de carbone

Le CO_2 est le deuxième gaz à effet de serre le plus important dans l'atmosphère après la vapeur d'eau. Il est émis par des processus de combustion et de respiration. Avant l'ère industrielle, la concentration de dioxyde de carbone dans l'atmosphère était de l'ordre de 280 ppmv puis, elle a augmenté de manière exponentielle vers 1870, à la seconde révolution industrielle, pour atteindre en 2017 une valeur de l'ordre de 405,5 ppmv. Le caractère anthropique ne fait plus de doute d'un point de vue scientifique et cette augmentation résulte principalement de l'utilisation massive des combustibles fossiles. La durée de vie du CO_2 dans l'atmosphère lui permet d'être mélangé de manière homogène dans la troposphère et la stratosphère en dehors des couches proches des sources d'émissions et nous avons vu que sa concentration diminue avec l'altitude (Figure 1.6).

La Figure 1.12 présente un graphique de l'évolution de la concentration de dioxyde de carbone mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa à Hawaii depuis 1958. En effet, Charles Keeling fut le premier à mesurer les concentrations de CO_2 de manière régulière à Mauna Loa, nous permettant d'observer la plus longue série temporelle de mesures « in-situ » de dioxyde de carbone. On retrouve cette tendance exponentielle d'augmentation de la concentration avec la courbe rouge. La moyenne mensuelle représentée par la courbe noire présente une variation annuelle due essentiellement à l'influence de la biosphère terrestre. La production de CO_2 par la respiration des végétaux a lieu toute l'année, tandis que la consommation de CO_2 par la photosynthèse est minimale en hiver et maximale en été. Ainsi on observe dans l'hémisphère nord un maximum de CO_2 au printemps et un minimum à la fin de l'été. Ces variation saisonnières ont une amplitude beaucoup plus grande dans l'hémisphère nord où les surfaces continentales sont plus importantes que dans l'hémisphère sud [Papaud and Poisson, 1985].

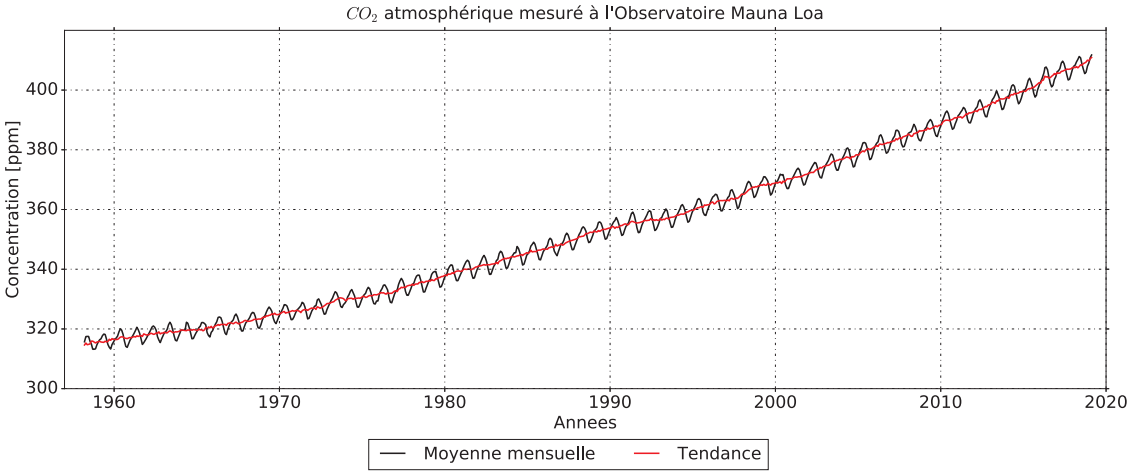


FIGURE 1.12: Moyenne mensuelle (courbe noire) et tendance (courbe rouge) de la concentration de CO_2 mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï de 1958 à 2019. Données disponibles : Dr. Pieter Tans, NOAA/ESRL (www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends/) and Dr. Ralph Keeling, Scripps Institution of Oceanography (scrippsco2.ucsd.edu/).

Le CO_2 est un gaz à effet de serre bien connu pour sa capacité d'absorption dans le domaine infrarouge, de sorte qu'il tend à bloquer la réémission vers l'espace de l'énergie thermique reçue au sol sous l'effet du rayonnement solaire ; il serait responsable de 26 % de l'effet de serre à l'œuvre dans notre atmosphère [Kiehl and Trenberth, 1997]. Le réchauffement climatique qui résulte de l'augmentation du CO_2 n'est pas le seul impact à l'échelle du globe. En effet, l'acidification des océans résultant de la dissolution du dioxyde de carbone atmosphérique pourrait compromettre la survie de nombreux organismes marins [Talmage and Gobler, 2010]. En parallèle, de récentes études tendent à montrer l'impact négatif de cette croissance de concentration de CO_2 sur la végétation [Morgan et al., 2004].

Afin de permettre aux décideurs de disposer d'éléments de comparaisons sur les effets climatiques des divers gaz intervenant dans le mécanisme de l'effet de serre additionnel, le GIEC[1] a élaborer plusieurs indicateurs d'impact. Le Potentiel de Réchauffement Global (PRG) représente l'un de ces indices. Le PRP est une mesure qui permet d'examiner la capacité de chaque gaz à effet de serre à piéger la chaleur dans l'atmosphère, par rapport au CO_2. Il mesure cette capacité sur une échelle de temps particulière (20, 50, 100 ou 500 ans). Il est exprimé en « équivalent CO_2 » (noté CO2e). Par définition, l'effet de serre attribué au CO_2 est fixé à 1 et celui des autres gaz relativement au CO_2. Par exemple, l'émission de 1 g d'un gaz à effet de serre ayant un PRG de 20 est équivalent à l'émission de 20 g de CO_2. On parle alors de kilogramme équivalent CO_2 (kgCO2e). Il est important de noter que les PRG des différents gaz évoluent au fil des rapports du GIEC pour des raisons techniques liés à la modélisation du changement climatique et pour des raisons physiques liées à la corrélation entre le PRG et la concentration des gaz à effet de serre déjà émis dans l'atmosphère.

1.3.2.3 Le méthane

Le méthane (CH_4) est un composant naturel émis dans l'atmosphère. Il est émis lors de la fermentation de matières organiques (animales ou végétales) en milieu anaérobie et principalement par la fermentation en milieu aquatique dans les marais, les mangroves tropicales, les rizières, etc. Il est également le principal composant du gaz naturel et est aussi produit par la digestion incomplète des ruminants.

[1] Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat

Il est émis en moins grande quantité dans l'atmosphère que le dioxyde de carbone ; environ 530.10^9 kg.an^{-1} contre 37.10^{12} kg.an^{-1} pour le CO_2. Cependant son potentiel de réchauffement global (PRG) est 25 fois plus puissant que celui du dioxyde de carbone [Stocker et al., 2013] et de la même manière que le CO_2 il absorbe une partie du rayonnement infrarouge émis par la Terre, et l'empêche ainsi de s'échapper vers l'espace. Sa durée de vie est d'environ 9 ans, il est donc mélangé de manière quasi-homogène et en dehors des zones d'émission proches du sol, son rapport de mélange varie peu avec l'altitude.

Le méthane joue un rôle important dans la chimie troposphérique. Il participe indirectement à la formation d'ozone en présence d'oxydes d'azote et est ainsi considéré comme un gaz précurseur d'ozone. Son seul puits troposphérique est par sa réaction avec OH :

$$CH_4 + OH \quad \rightarrow \quad CH_3O_2 + H_2O \tag{1.11}$$

Bien que la vitesse de cette réaction soit modérée, du point de vue atmosphérique elle permet d'éliminer jusqu'à 510.10^9 kg.an^{-1} dans la troposphère et de 10 à 50^9 kg.an^{-1} dans la stratosphère. Ce puits détruit environ 90 % du méthane émis chaque année. Malgré cela, sa concentration dans l'atmosphère a plus que doublé depuis le début de l'ère industrielle pour atteindre des valeur moyennes actuelles de l'ordre de 1,75 ppmv dans l'hémisphère nord et 1,65 ppmv dans l'hémisphère sud. Cette variation de concentration entre les deux hémisphères traduit la prédominance des sources au Nord. Comme l'illustre la Figure 1.13, l'augmentation de la quantité de méthane dans l'atmosphère a été rapide jusqu'à la fin des années 1980. Elle a ensuite ralenti, pour arriver à une stabilisation de la concentration au début des années 2000. On a constaté une nouvelle augmentation de la concentration moyenne à partir de 2007 qui continue encore aujourd'hui.

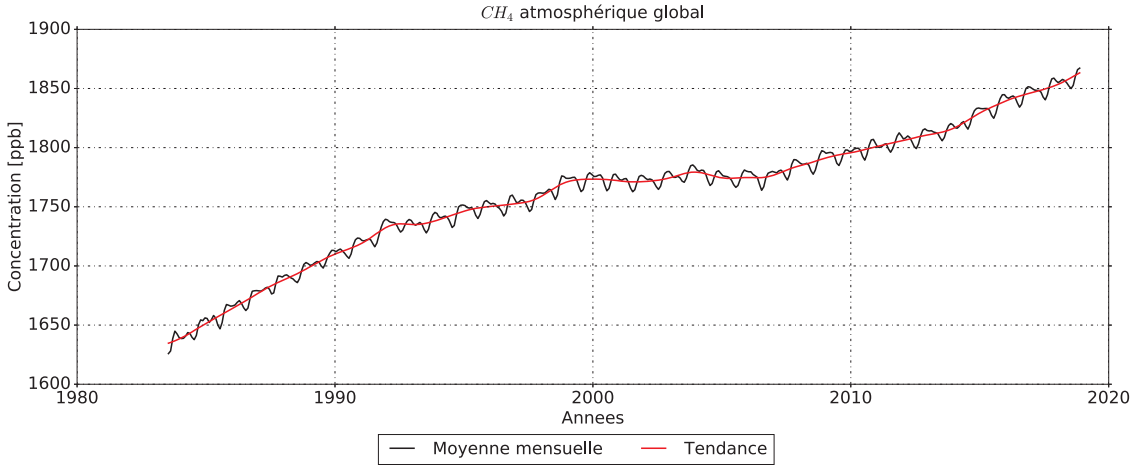


FIGURE 1.13: Moyenne mensuelle (courbe noire) et tendance (courbe rouge) de la concentration de CH_4 mesurée à partir du réseau mondial de sites d'échantillonnage de l'air depuis 1983. Données disponibles : Ed Dlugokencky, NOAA/ESRL (`www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends_ch4/`).

L'augmentation de la quantité de méthane dans l'atmosphère a fait l'objet de beaucoup de recherche et est principalement attribuée à l'élevage intensif des ruminants, aux cultures massives de riz, aux décharges, à l'enfouissement des ordures ménagères, aux fuites de gaz naturel lors de son extraction, de son transport, de son traitement et de sa distribution. La stabilisation de sa concentration au début des années 2000 a plusieurs hypothèses dont des changements dans les sources d'énergie fossile, les zones humides, les sources agricoles, les puits d'hydroxyle ou encore les sources microbiennes dans l'hémisphère nord [Kai et al., 2011]. Cependant, de nombreuses incertitudes perdurent ni la stabilisation ni la croissance récente ne sont encore bien comprises, comme en témoignent les multiples hypothèses contradictoires [Turner et al., 2017].

La fonte du permafrost et le dégel des tourbières boréales dus au changement climatique pourraient encore augmenter les quantités de méthane émises dans l'atmosphère. L'étude et la surveillance de ce composé est un enjeu majeur car encore actuellement nous sommes incapables de quantifier toutes les sources de méthane sur le globe [Christensen et al., 2004].

1.3.2.4 Le monoxyde de carbone

Gaz inodore, incolore et inflammable, le monoxyde de carbone CO se forme lors de la combustion incomplète de matières organiques (gaz, charbon, fioul ou bois, carburants), il est donc essentiellement formé de manière anthropique. Il n'est pas un gaz à effet de serre. Toutefois, il influe sur le pouvoir d'oxydation de l'atmosphère terrestre et participe également aux mécanismes de formation de l'ozone troposphérique. Dans l'atmosphère, il se transforme en dioxyde de carbone CO_2 et contribue ainsi à l'effet de serre. Sa réaction avec le radical hydroxyle OH représente le principal puits de CO dans la troposphère.

$$CO + OH \quad \rightarrow \quad H + CO_2 \tag{1.12}$$

Le taux de destruction du CO dans l'atmosphère est de l'ordre de 2400^{9} kg.an^{-1} et comme la constante de vitesse de la réaction 1.12 est 20 fois plus rapide que l'oxydation du méthane, son rapport de mélange dans la troposphère est bien plus faible, environ 90 ppb. Sa durée de vie est de deux mois et la variabilité spatiale des concentrations est très grande puisque le CO peut atteindre des valeurs cinq à dix fois plus élevées au voisinage des sources de combustions. Le monoxyde de carbone est donc un très bon traceur des sources d'hydrocarbures lorsque ces derniers sont brûlés. Du point de vue environnemental, de part sa réaction avec OH, le monoxyde de carbone participe ainsi à l'acidification des précipitations, des sols et des cours d'eau via le CO_2, ce qui affecte les écosystèmes.

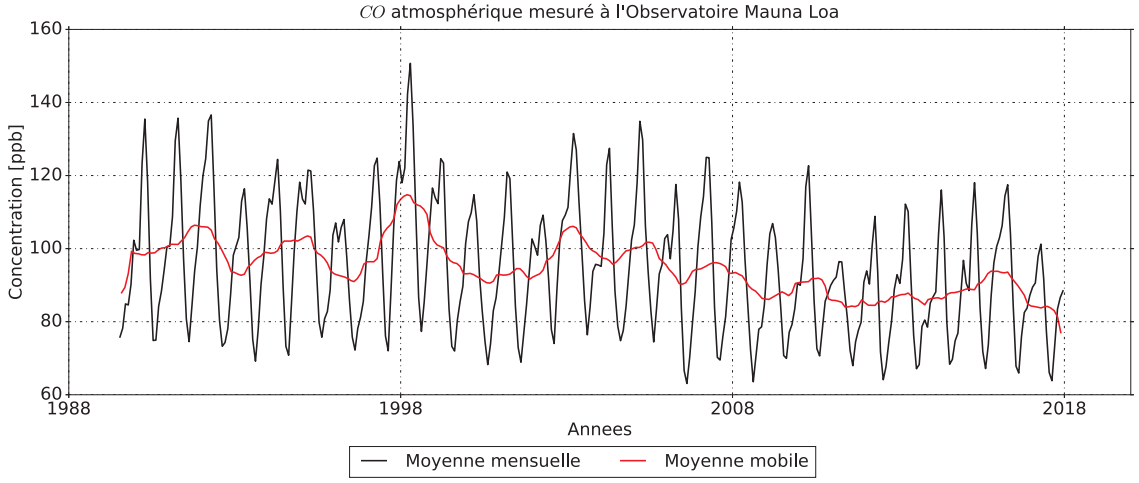


FIGURE 1.14: Moyenne mensuelle (courbe noire) et moyenne mobile (courbe rouge) de la concentration de CO mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï à partir de 1989. Données disponibles : (www.esrl.noaa.gov/gmd).

La Figure 1.14 présente les moyennes mensuelle (courbe noire) et mobiles (courbe rouge), de la concentration de CO mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï à partir de 1989. On remarque des fluctuations importantes liées aux variations saisonnières associées aux principales régions sources. En effet lors d'épisodes intenses de feux de biomasse, ces panaches se dispersent dans la couche limite des régions touchées et sont transportés plus haut jusque dans la troposphère libre où des vents plus forts les dispersent plus largement, et où ils peuvent persister un certain temps. Ces maximums de concentration sont observés sur la période hivernale caractérisée par de plus importantes émissions.

On remarque également une baisse de la concentration depuis le début des années 2000. Cette baisse a été observée sur l'ensemble du globe et plus particulièrement dans l'hémisphère nord. La plupart des spécialistes de la qualité de l'air attribuent cette diminution aux innovations technologiques et réglementaires qui font que les véhicules et les industries polluent moins qu'auparavant [Parrish et al., 2002]. D'autres recherches attribuent cette baisse du CO atmosphérique à une réduction de la combustion de la biomasse tropicale [Khalil and Rasmussen, 1994].

1.3.2.5 Les oxydes d'azote

L'azote est présent abondamment dans l'atmosphère et peut se fixer sur la végétation ou les sols par l'intermédiaire de bactéries. Il peut également se fixer à l'oxygène de l'air à l'aide de processus de combustion ou de décharges électriques lors d'orages par exemple. Le protoxyde d'azote (N_2O) est l'oxyde d'azote le plus abondant dans l'atmosphère. Il est émis à la surface par des processus de décomposition bactérienne dans les sols tropicaux et tempérés. Une faible proportion provient également de l'activité bactérienne océanique et de l'activité industrielle.

Son rapport de mélange est de l'ordre de 300 ppb et environ 20.10^9 kg.an^{-1} sont émis au niveau de la surface sans mécanisme de destruction photochimique dans la troposphère, d'où un temps de vie d'environ 150 ans. En effet, il est principalement détruit dans la stratosphère où il joue un rôle important sur l'équilibre de l'ozone stratosphérique. Néanmoins, bien qu'il régisse peu la chimie troposphérique, il représente un puissant gaz à effet de serre car son efficacité est environ 100 fois plus importante que celle du CO_2 à concentration égale.

Même s'il s'accumule dans l'atmosphère (Figure 1.15) par l'utilisation massive des engrais en agriculture, la déforestation et la combustion des carburants fossiles, sa faible concentration lui confère uniquement la quatrième place des gaz à effet de serre, après la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone et le méthane.

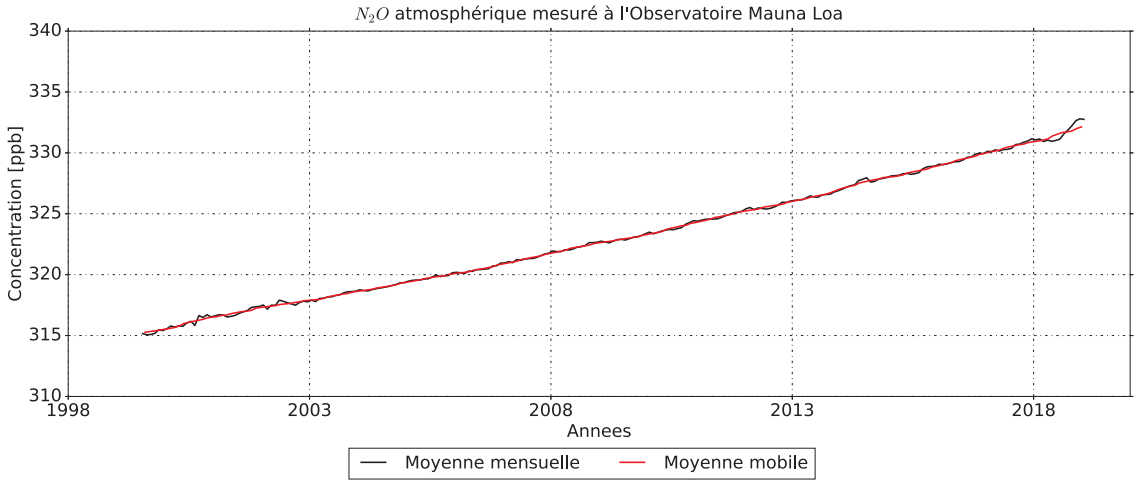


FIGURE 1.15: Moyenne mensuelle (courbe noire) et moyenne mobile (courbe rouge) de la concentration de N_2O mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï à partir de 1989. Données disponibles : (www.esrl.noaa.gov/gmd).

Les oxydes d'azote les plus importants dans la chimie troposphérique sont le NO et NO_2. Ces composés réactifs sont produits lors de combustion et d'activité biologique dans les sols. Leur rapport de mélange varie entre 10 ppt et 1 ppb dans la troposphère et peuvent atteindre jusqu'à 10 ppb en zone urbaine. Ils réagissent rapidement par photodissociation de NO_2 produisant un atome d'oxygène qui va participer à la production d'une molécule d'ozone qui va à son tour réagir avec NO :

$$\begin{aligned} NO_2 + h\nu &\rightarrow NO + O \\ O + O_2 + M &\rightarrow O_3 + M \\ NO + O_3 &\rightarrow NO_2 + O_2 \end{aligned} \tag{1.13}$$

Ce cycle a donc un bilan nul. Les oxydes d'azote NO et NO_2 sont souvent regroupés dans la famille des NO_x. La proportion relative des NO_x est déterminée par l'ozone et la température. C'est pour cela qu'on observe une grande variabilité entre le jour et la nuit de ces constituants. À l'échelle du globe, il a été observé à l'aide des instruments satellitaires que les concentrations maximales de NO_2 sont relevées dans les zones de fortes activités industrielles et les zones tropicales influencées par les feux de biomasse.

1.3.2.6 L'ozone

Nous venons de voir précédemment les différents processus qui régissent l'ozone stratosphérique et particulièrement sa production par la recombinaison entre un atome d'oxygène et O_2 (Équation 1.2). Ce mécanisme existe également dans la troposphère où l'ozone est un produit secondaire, c'est-à-dire qu'il n'est pas émis directement dans l'air ambiant mais formé à l'aide de précurseurs : monoxyde de carbone (CO), oxydes d'azote (NO_x), méthane (CH_4), hydrocarbures supérieurs, ou NMHC pour hydrocarbures non métalliques et des composés organiques volatils (COV).

Les émissions de ces constituants en surface ou dans l'atmosphère conduisent à la production photochimique de l'ozone dans les régions polluées. C'est le cas par exemple dans les zones de transport aéroporté où les avions émettent des NO_x. Une faible proportion provient également de la descente de l'ozone stratosphérique. La production d'ozone par photodissociation de l'oxygène moléculaire par le rayonnement de longueur d'onde inférieure à 250 nm est impossible dans la troposphère puisque ce rayonnement ne pénètre pas. L'ozone troposphérique est formé par photodissociation de NO_2 dans le visible. L'oxygène atomique ainsi formé réagit alors avec les molécules d'oxygène pour former de l'ozone (Équation 1.13).

Cependant l'équilibre entre formation et destruction d'ozone est perturbé par le fait que le NO est en partie oxydé en NO_2 dans des réactions avec des produits réactionnels de dégradation des composés organiques volatils (COV). Dans ce cas, le NO n'est pas disponible pour réaliser le processus de destruction de l'ozone et le NO_2 formé peut quant à lui de nouveau être scindé sous l'influence du rayonnement ultraviolet et produire ainsi de l'ozone. Ce processus peut entraîner une formation d'ozone excédentaire, même dans le cas où les précurseurs seraient présents en faible concentration. En cas d'insolation insuffisante, le méthane se retrouve être un précurseur efficace dans la troposphère. En effet, le radical issu de l'oxydation du méthane se combine avec le monoxyde d'azote (NO) pour former du NO_2. Enfin, le monoxyde de carbone CO réagit de son côté avec l'hydroxyle (OH) pour former du dioxyde de carbone (CO_2) et de l'hydrogène (Équation 1.12). Ce dernier va réagir avec le NO pour former du NO_2 qui à son tour va pouvoir être utilisé dans le processus de formation de l'ozone troposphérique.

La production d'ozone troposphérique résulte de la combinaison de plusieurs paramètres chimiques et dynamiques. En effet, l'ozone troposphérique dépend de l'équilibre entre les oxydes d'azote et les composés organiques volatiles (COV). Les deux doivent être présents en quantité suffisante pour former de l'ozone. Cependant, les NO_x et les COV ont des régions d'émission différentes puisque qu'en majorité les oxydes d'azote sont produits dans les villes alors que les COV sont produits dans des zones fortement végétalisées. Intervient alors la dynamique qui permet à des masses d'air chargées en NO_x ou en COV de se rencontrer pour former de l'ozone. Ainsi, la formation d'ozone est un phénomène non linéaire qui peut être mis en évidence sur un diagramme dit « isoplèthe » (Figure 1.16).

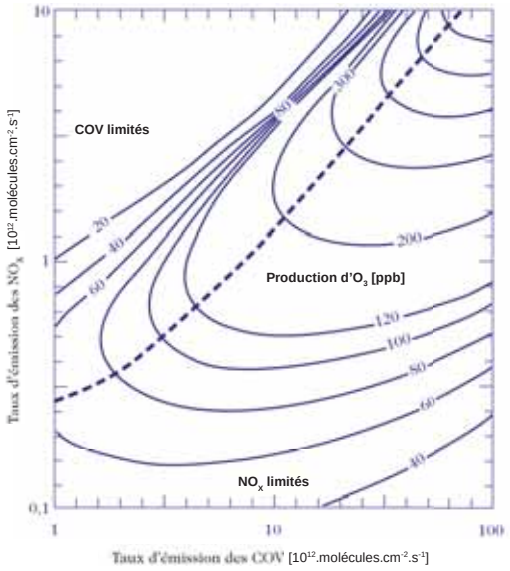


FIGURE 1.16: Diagramme d'isoplèthe d'ozone [ppb] en fonction du taux moyen d'émission de NO_x et de COV en $[10^{12}.\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}]$. D'après [Delmas et al., 2005].

Ce diagramme représenté par la Figure 1.16, représente les isoplèthes d'ozone en fonction du taux moyen d'émission de NO_x et de COV. On distingue 3 domaines de variation de concentration en ozone en fonction des variations de concentration en NO_x et/ou en COV :

- Si le rapport $\text{COV}/NO_x < 4$; alors le régime est limité en COV ; les concentrations en oxyde d'azote sont élevées et les niveaux de concentration en ozone diminuent lorsque ceux en NO_x augmentent. C'est le cas par exemple dans les zones plutôt urbaines.
- Si le rapport $\text{COV}/NO_x \approx 8$: alors le régime est standard ; la production d'ozone dépend à la fois des concentrations de NO_x et de COV. Si l'un et/ou l'autre diminue alors la concentration en ozone diminuera également.
- Si le rapport $\text{COV}/NO_x > 15$, alors le régime est limité en NO_x ; les concentrations en oxyde d'azote sont faibles et les niveaux de concentration en ozone augmentent avec ceux des NO_x de manière quasi-linéaire et sont peu perturbés par les variations en COV. C'est le cas par exemple dans les milieux ruraux.

Ces processus sont indispensables à la compréhension des mécanismes de la production de pollution photochimique. La distribution de l'ozone troposphérique est donc très variable dans l'espace et le temps et fait apparaître un caractère saisonnier marqué et une distribution géographique hétérogène.

Pour illustrer cette variabilité, la Figure 1.17 présente des moyennes journalières de colonnes totales d'ozone mesurées à l'Observatoire de Mauna Loa à Hawaï à partir de 1963. D'autres données ont récemment été rendues disponibles par le rapport d'évaluation de l'ozone troposphérique (TOAR[2]) (http://wwwigacproject.org/activities/TOAR) [Schultz et al., 2017].

L'allure de la courbe sur la Figure 1.17 confirme le caractère saisonnier de l'ozone. On ne remarque aucune tendance d'augmentation ou de diminution de la concentration en ozone sur les mesures de colonne totale depuis 1963 dans cette zone. Ceci peut s'expliquer simplement par le fait que l'Observatoire de Mauna Loa est situé en plein milieu de l'océan Pacifique et relativement éloigné des sources d'émission de NO_x.

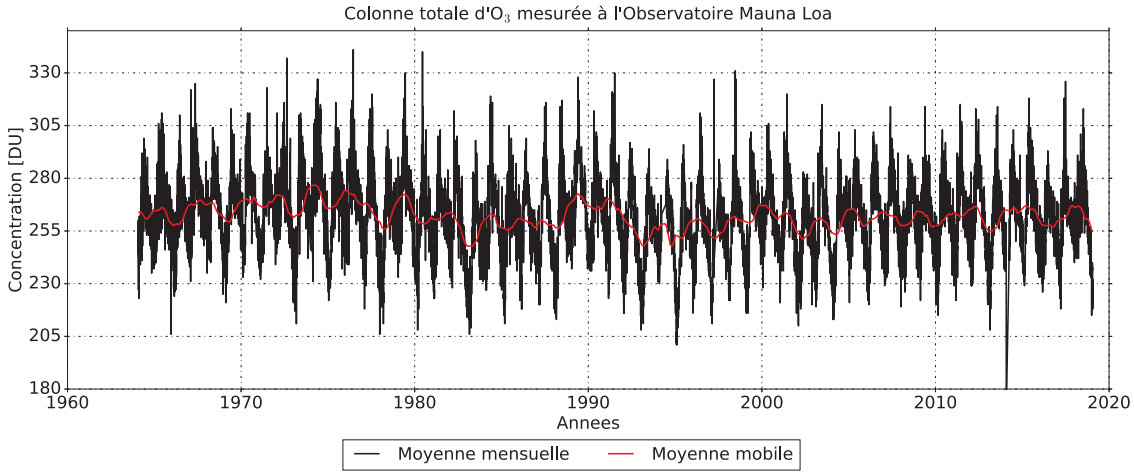


FIGURE 1.17: Moyenne journalière de colonne totale d'ozone en unité Dobson [DU] mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï à partir de 1963. Données disponibles : (www.esrl.noaa.gov/gmd).

Cependant, les travaux réalisés par [Gaudel et al., 2018] pour l'ozone troposphérique, montrent au contraire une très forte tendance positive avec une augmentation de 14 % de la concentration d'ozone dans les masses d'air sec depuis 2000, comme le montre la Figure 1.18. L'augmentation de l'ozone dans ces masses d'air sec est très probablement due à l'augmentation de l'ozone observée en Asie du Sud et de l'Est.

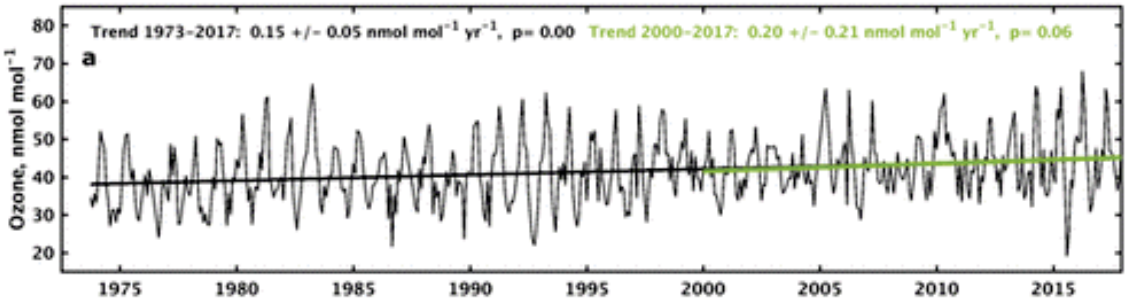


FIGURE 1.18: Valeurs médianes mensuelles de l'ozone troposphérique nocture mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï d'octobre 1973 à décembre 2017. Les valeurs médianes mensuelles sont calculées avec toutes les données disponibles pour les mois pour lesquels au moins 50 % des données sont disponibles. Les tendances de cette figure sont basées sur une régression linéaire par les moindres carrés ajustée aux valeurs médianes mensuelles, et rapportées avec des intervalles de confiance et des valeurs p de 95 %. Figure extraite des travaux de [Gaudel et al., 2018].

[2]The Tropospheric Ozone Assessment Report

La Figure 1.19 nous permet d'illustrer la variabilité de l'ozone à l'aide de cartes des moyennes mensuelles de colonne d'ozone troposphérique en unité Dobson [DU] entre 0 et 6 km d'altitude pour les mois de janvier, avril, juillet et octobre 2010. Ces données sont issues de l'assimilation simultanée de profils d'ozone obtenus à l'aide des instruments satellitaires GOME-2 (Global Ozone Monitoring Experiment 2) et OMI[3] utilisant un Filtre de Kalman étendu dans le modèle global de chimie-transport TM5 (Tracer Model, version 5) [Van Peet et al., 2018].

On remarque que l'hémisphère nord connaît ses valeurs maximales d'ozone au printemps et à l'été boréal, respectivement Figure 1.19.b et Figure 1.19.c. Ces fortes concentrations sont dues à l'ensoleillement et aux émissions anthropiques des précurseurs de l'ozone en surface et donc à une production photochimique d'ozone intense.

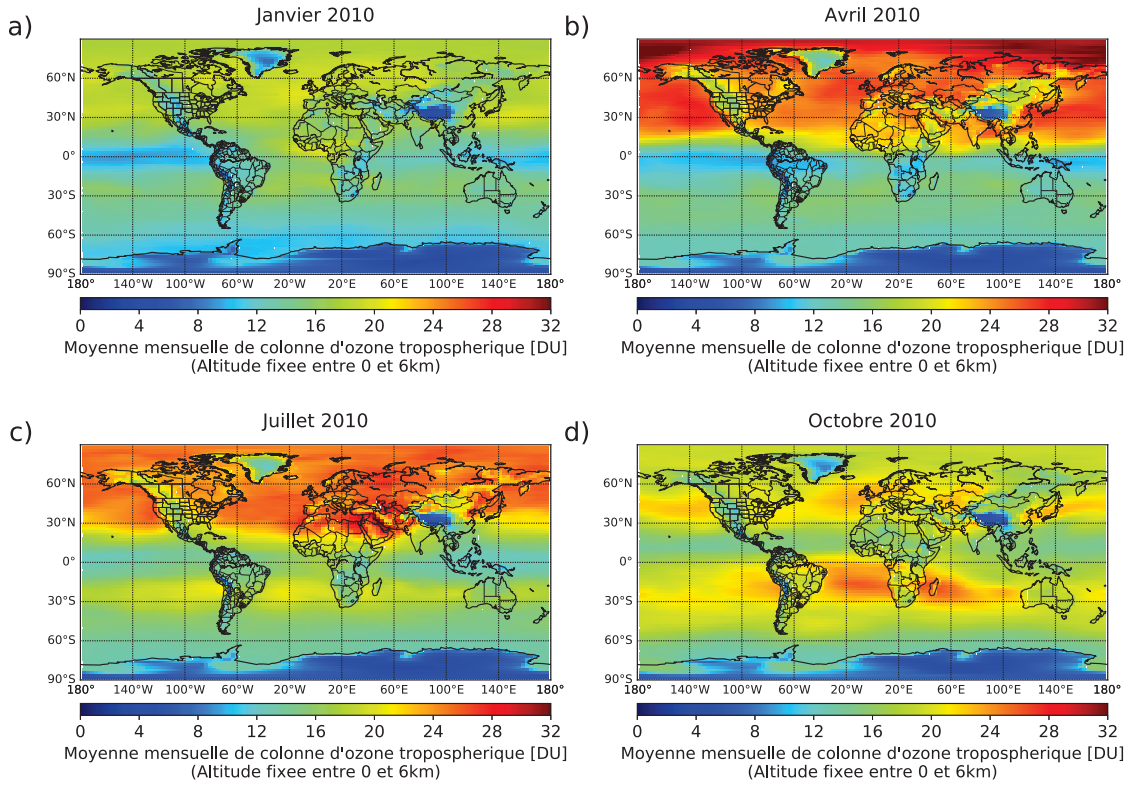


FIGURE 1.19: Moyenne mensuelle de colonne d'ozone troposphérique en unité Dobson [DU] entre 0 et 6 km d'altitude pour les mois de janvier (a), avril (b), juillet (c) et octobre (d) 2010. Données disponibles : http://www.temis.nl/protocols/tropo.html.

Le temps de vie de l'ozone troposphérique permet à celui-ci de se faire transporter par la dynamique atmosphérique. On peut ainsi observer des concentrations élevées au-dessus des océans alors qu'on n'y trouve aucune source de précurseurs de l'ozone. La plus forte concentration d'ozone troposphérique dans l'hémisphère sud est observée au printemps austral, comme l'illustre la Figure 1.19.d, dans une large zone géographique qui s'étend de l'est de l'Amérique du Sud à l'est de l'Australie en passant par l'Afrique australe en octobre. Cette production d'ozone est liée au feux de biomasse dans la zone intertropicale durant la saison sèche.

[3]Ozone Monitoring Instrument

En considérant les différentes régions géographiques, l'observation à retenir est la grande différence de production d'ozone entre les zones continentales et océaniques et entre l'hémisphère nord et sud. Cela est principalement dû aux fortes concentrations de NO_x en zones peuplées sur les continents. L'influence des sources anthropiques fait apparaître une dissymétrie dans la distribution des sources puisque environ 80 % des précurseurs polluants sont émis dans l'hémisphère nord et dans les régions tropicales.

Même si l'ozone troposphérique ne représente que 10 % de l'ozone atmosphérique total, ce dernier est toxique pour les humains et la végétation. Du fait de l'augmentation croissante des activités anthropiques et du développement des pays du tiers monde, la quantité d'ozone troposphérique tend à s'élever de manière préoccupante au même titre que les constituants photo-oxydants qui lui sont liés. La pollution d'origine urbaine peut donner lieu à des épisodes de très fortes concentrations en ozone dans la basse troposphère. L'ozone représente le premier indicateur de qualité de l'air tant son impact sur la santé et l'environnement est important. En effet, sa toxicité varie en fonction de sa concentration. S'il est présent en quantité anormalement élevée, il peut causer de graves problèmes sanitaires (diminution des fonctions respiratoires, migraines, irritations des yeux, de la gorge) à partir de concentrations de l'ordre de 150 à 200 μm^{-3}.

Les humains ne sont pas les seuls à subir cette pollution, les animaux en général y sont sensibles ainsi que les cultures, les forêts et de nombreux matériaux qui peuvent être dégradés. Les enjeux environnementaux sur l'ensemble du globe sont nombreux, l'effet de serre, la déplétion de la couche d'ozone, une troposphère aux propriétés de plus en plus oxydantes. Les conséquences directes de l'augmentation de l'ozone troposphérique ont clairement été mises en évidence et pourtant les incertitudes restent très importantes. En effet, il demeure une difficulté à établir des bilans précis de l'ozone et de ses précurseurs.

De plus, les processus physico-chimiques qui régissent l'équilibre de l'ozone troposphérique ne sont pas totalement compris encore aujourd'hui, c'est pour cela qu'il est difficile de quantifier les rétroactions entre les processus chimiques et climatiques dans l'atmosphère. Ainsi, les recherches autour de la mesure, de la surveillance et de la modélisation des différents constituants doivent continuer afin de comprendre les différents processus qui participent à l'équilibre du système Terre [Megie et al., 1994].

1.3.3 Région d'interaction - UTLS

Une zone de l'atmosphère est particulièrement importante d'un point de vue interactions physico-chimiques, il s'agit de l'UTLS (Upper Troposphere Lower Stratosphere) qui représente une région s'étendant de la haute troposphère à la basse stratosphère de part et d'autre de la tropopause. Son altitude varie au même titre que la tropopause selon la saison et la latitude. Il s'agit d'une région de l'atmosphère fondamentale en terme d'interaction entre la chimie et le climat. En effet, des gaz à effet de serre tels que la vapeur d'eau ou l'ozone ont un forçage radiatif particulièrement sensible à des modifications dans leur distribution au sein de cette région. Ceci est associé au minimum de température atteint au niveau de la tropopause.

Dans cette zone, les masses d'airs troposphériques et stratosphériques se mélangent. Comme l'illustre la Figure 1.20, il peut parfois y avoir des échanges de masses d'air avec, par exemple, des injections de vapeur d'eau dans la stratosphère au niveau des « overshoots » tropicaux résultant de la convection profonde de cellules orageuses. Des injections de constituants chlorés ou bromés peuvent également être transportées dans la stratosphère contribuant ainsi à la destruction catalytique de l'ozone. Dans le sens inverse, l'ozone et des oxydes d'azote peuvent également passer du réservoir stratosphérique vers la troposphère lors de phénomènes de foliation de tropopause par exemple.

La chimie dans la basse stratosphère est sensible aux perturbations de température conditionnant la présence de PSC. Comme nous l'avons vu, l'ozone dans cette zone et la température sont étroitement liés ce qui représente un important couplage entre la chimie et le climat. Des radiosondages mesurant l'ozone ont également montré une zone de transition des concentrations au niveau de l'UTLS avec une tendance positive dans la haute troposphère et négative dans la basse stratosphère, un effet de feuilletage principalement dû aux transport isentropiques.

Il est évident que cette région est directement influencée par les perturbations anthropiques issues de la surface ou des émissions aéroportées. En effet, les systèmes convectifs et le transport vertical dans la zone de convergence intertropicale transportent très rapidement les masses d'air contenant différents polluants jusque dans la haute troposphère.

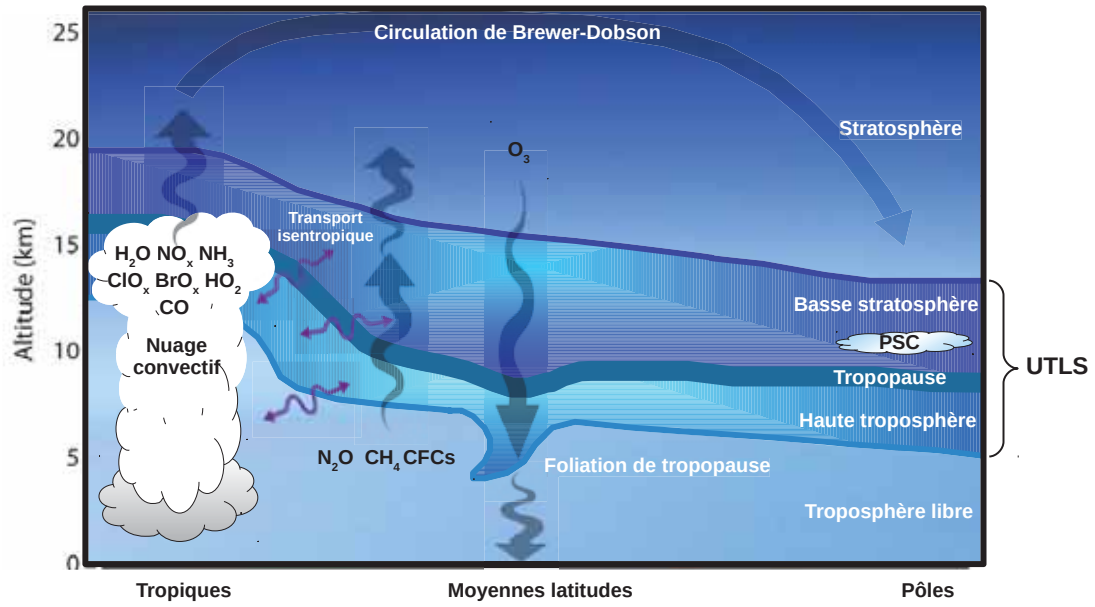


FIGURE 1.20: Schéma représentant la haute troposphère et la basse stratosphère (UTLS) et les principaux échanges chimique entre ces deux réservoirs.

La recherche autour de la modélisation précise de l'UTLS, tant au point de vue thermodynamique que chimique est un enjeu majeur pour comprendre et prédire les impacts des activités anthropiques sur cette région. En effet, les conséquences sur le forçage radiatif de cette zone, nous montrent à quel point il est important de comprendre les différents processus qui déterminent le couplage chimie-climat.

1.4 L'essentiel du Chapitre 1

- L'atmosphère terrestre est un ensemble de couches gazeuses composées à 78,087 % de diazote N_2, à 20.95 % de dioxygène O_2, à 0.93 % d'argon Ar, à 0.04 % de dioxyde de carbone CO_2, et d'autres gaz traces.

- Le système climatique représente un système thermo-hydrodynamique au sein duquel des interactions s'effectuent entre l'atmosphère, l'hydrosphère, la lithosphère, la biosphère, la cryosphère et l'anthroposphère.

- L'atmosphère est inhomogène et est composée de plusieurs couches successives subissant une importante variabilité verticale de la température, pression et densité. La couche dans laquelle nous vivons, la troposphère, contient 80 % de la masse totale de l'atmosphère.

- L'énergie radiative solaire reçue par le système Terre/Atmosphère est maximale à l'équateur provoquant un déséquilibre horizontal et vertical. La redistribution énergétique dans la troposphère selon la verticale est garantie par la convection, tandis que le mélange méridien assurant le transport d'énergie des régions excédentaires aux régions déficitaires est assuré par les cellules troposphériques de Hadley, Ferrel et Polaire. Bien que les mouvements au sein de la stratosphère soient moins bien connus, une circulation méridienne à grande échelle a été mise en évidence par Brewer-Dobson présentant une ascendance au niveau des Tropiques et des subsidences au niveau des moyennes latitudes et des pôles.

- La chimie atmosphérique influence certains échanges entre les différentes composantes du système climatique. L'atmosphère est composée de constituants mineurs catégorisés par les gaz à effet de serre, les gaz réactifs et les oxydants, qui influent sur le bilan radiatif de la Terre. L'augmentation de ces constituants résultant des activités anthropiques provoque un déséquilibre dans le système responsable de catastrophes écologiques.

- La connaissance du temps de résidence et du temps caractéristique moyen de transport horizontal et vertical de ces constituants dans l'atmosphère est essentiel afin de pouvoir suivre la variabilité spatio-temporelle de ces composés et d'en prévoir l'évolution probable.

- La stratosphère contient 90 % de l'ozone atmosphérique totale, représentant la couche d'ozone qui absorbe le rayonnement solaire ultraviolet protégeant ainsi les êtres vivants. L'ozone stratosphérique résulte d'un équilibre entre formation et destruction. Ce processus physico-chimique nommé photodissociation de l'oxygène moléculaire et expliqué par le cycle de Chapman.

- Le trou de la couche d'ozone a été mis en lumière au début des années 80 démontrant une diminution rapide de la colonne totale d'ozone à chaque printemps au-dessus dans l'Antarctique et de l'Arctique. Dans les années 90, des minimums locaux pouvaient représenter 70 % de disparition de l'ozone au-dessus de l'Antarctique. Dès lors, une diminution à long terme de l'épaisseur totale de la couche d'ozone a été démontré à toutes les latitudes. Le protocole de Montréal établi en 1987 et interdisant la production des halons et des produits chlorés responsables de la destruction additionnelle de l'ozone stratosphérique a été depuis ratifié par 197 pays. L'application de ce protocole est à ce jour la mobilisation internationale la plus efficace en matière d'écologie et a permis une reconstruction lente de la couche d'ozone à un rythme de 1 à 3 % par décennie.

- Le dioxyde de carbone est le deuxième gaz à effet de serre. Son pouvoir absorbant du rayonnement infrarouge serait responsable de 26 % de l'effet de serre global après la vapeur d'eau. Il augmente de manière exponentielle depuis 1870 principalement à cause de l'utilisation massive des combustibles fossiles, passant de 280 ppmv avant l'ère industrielle à plus de 405.5 ppmv aujourd'hui. Au delà de l'effet de serre, la concentration grandissante du CO_2 serait responsable de l'acidification des océans et aurait un impact négatif sur la végétation.

- Le méthane est en moins grande quantité dans l'atmosphère que le dioxyde de carbone mais son potentiel de réchauffement global est 25 fois plus puissant que celui du CO_2. Il est produit naturellement par la décomposition organique mais sa concentration augmente de manière inquiétante depuis le début des années 80 à cause de l'élevage intensif des ruminants et de la culture massive du riz. Sa concentration a subi une stabilisation au début des années 2000 et a vite ré-augmentée à partir de 2007 pour atteindre environ 1.85 ppmv dans l'hémisphère nord.

- Le monoxyde de carbone n'est pas un gaz à effet de serre mais il peut former du CO_2 via OH, contribuant ainsi à l'effet de serre global. De plus, il participe à la formation d'ozone troposphérique. Sa concentration diminue depuis le début des années 2000 du fait des innovations technologiques et réglementaires.

- Le N_2O est l'oxyde d'azote le plus présent dans l'atmosphère. Il est principalement détruit dans la stratosphère participant ainsi à l'équilibre de l'ozone stratosphérique. C'est un gaz à effet de serre très puisant puisque sont efficacité est 100 fois plus importante que celle du CO_2 à concentration égale. Sa concentration est en constante augmentation depuis les années 90.

- Le NO et NO_2 regroupés dans la famille des NO_x, représentent les oxydes d'azote les plus importants dans la chimie troposphérique puisqu'ils participent à la production d'ozone.

- L'ozone troposphérique est un polluant secondaire. Il n'est pas émis directement mais est formé à l'aide de précurseurs tels que le CO, CH_4, NO_x, COV, etc.. Cet ozone représente 10 % de l'ozone atmosphérique total mais sont augmentation croissante font de lui un indicateur important de la qualité de l'air. Son impact négatif sur la santé et l'environnement a été démontré.

- L'UTLS (Upper Troposphere Lower Stratosphere) représente la région comprise entre la haute troposphère et la basse stratosphère s'étendant de part et d'autre de la tropopause. Cette région est fondamentale car ses processus physico-chimiques influencent le climat.

Chapitre 2

Rayonnement et transfert radiatif

« Aucune matière ne peut être intelligible sans ombre et lumière. Ombre et lumière sont issues de la lumière. »

Léonard De Vinci

Sommaire

2.1 Le rayonnement électromagnétique 54
2.1.1 Spectre électromagnétique 54
2.1.2 Grandeurs caractéristiques 55
2.1.2.1 Notion d'angle solide 55
2.1.2.2 Luminance monochromatique 55
2.2 Interaction rayonnement-matière 56
2.3 L'émission et l'absorption 57
2.3.1 Théorie du corps noir 57
2.3.1.1 L'équilibre thermodynamique local (ETL) 57
2.3.1.2 Loi de Planck 57
2.3.1.3 La Température de Brillance (T_b) 58
2.3.1.4 Loi de Wien 58
2.3.1.5 Loi de Stefan-Boltzmann 59
2.3.1.6 Loi de Kirchhoff 59
2.3.2 Théorie du corps gris 59
2.4 Le transfert radiatif dans l'atmosphère 59
2.4.1 Principes fondamentaux 60
2.4.1.1 Transmittance 60
2.4.1.2 Fonction de poids 61
2.4.1.3 Jacobiens 62
2.4.2 Équation du transfert radiatif 63
2.4.2.1 Bilan radiatif à travers un élément de volume 63
2.4.2.2 L'équation du transfert radiatif 64
2.5 Modèle de Transfert Radiatif 65
2.5.1 Description 65
2.5.2 Le modèle RTTOV 67
2.5.2.1 RTTOV en ciel clair 69
2.5.2.2 RTTOV en conditions nuageuses 69
2.6 L'essentiel du Chapitre 2 71

2.1 Le rayonnement électromagnétique

L'énergie solaire ou radiative transmise à la Terre, principalement au moyen du rayonnement électromagnétique détermine les processus dynamiques, physiques et chimiques dans l'atmosphère. Le rayonnement électromagnétique possède un large spectre mais ce sont dans les domaines de longueurs d'onde de l'ultraviolet à l'infrarouge en passant par le visible qu'il joue un rôle important dans les différents processus atmosphériques. Pour des fréquences particulières, il peut avoir un impact sur le changement climatique et les réactions photochimiques. Ces réactions chimiques influencent à leur tour la distribution d'autres composés atmosphériques dont les interactions avec le rayonnement, par des processus d'absorption, d'émission et de diffusion ont un effet sur le système climatique. Cette interaction entre rayonnement et matière est à la base des techniques de télédétection et de certaines mesures *in situ* des espèces chimiques gazeuses et des aérosols. Ce chapitre a pour objectif d'introduire les principaux processus radiatifs en termes de chimie atmosphérique et télédétection, ainsi que les principes nécessaires à la modélisation du transfert de rayonnement électromagnétique dans l'atmosphère. Cette partie théorique s'inspire des livres [Delmas et al., 2005] et [Malardel, 2005].

2.1.1 Spectre électromagnétique

Le spectre électromagnétique se présente sous la forme d'ondes de champ électromagnétique. Il est composé d'une superposition d'ondes monochromatiques de longueur d'onde λ se propageant dans le vide à la même vitesse que la lumière ($c = 3.10^8$ m.s^{-1}). Ces ondes peuvent être caractérisées par leur :

- Longueur d'onde λ
- Fréquence $\nu = \frac{c}{\lambda}$
- Nombre d'onde $\sigma = \frac{1}{\lambda}$

L'œil humain est uniquement sensible au rayonnement visible (couleurs de l'arc en ciel) mais le rayonnement électromagnétique couvre un spectre bien plus large du domaine des rayons gamma aux ondes radio longues en passant par les rayons X, l'ultraviolet, l'infrarouge, les micro-ondes et les ondes radio (Figure 2.1). Les trois principales plages de rayonnement qui dominent les différents échanges énergétiques sont l'ultraviolet, le visible et l'infrarouge.

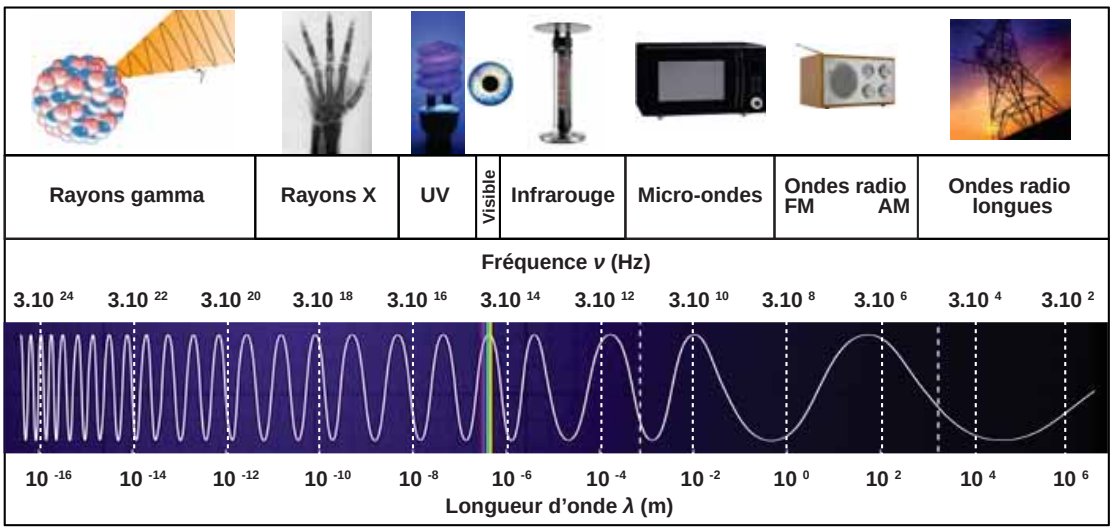


FIGURE 2.1: Schéma illustrant le spectre électromagnétique en longueur d'onde (en m) et en fréquence (en Hz).

2.1.2 Grandeurs caractéristiques

2.1.2.1 Notion d'angle solide

Le rayonnement total arrivant sur un élément de surface *ds* situé en un point M de l'espace peut être décomposé comme la somme de rayonnements élémentaires issus de chacune des directions de l'espace. Un angle solide ω est défini à partir d'une sphère de rayon unité centrée sur un point O (Figure 2.2) et est exprimé en stéradian (sr). L'angle solide élémentaire, défini en coordonnées sphériques par sa direction (O, θ, ϕ) et les angles élémentaires dθ, dϕ vaut :

$$\mathrm{d}\omega = \sin\theta.\mathrm{d}\theta.\mathrm{d}\phi \tag{2.1}$$

Si l'angle solide est complet, c'est à dire qu'il englobe toutes les directions de l'espace, alors l'angle dθ varie de 0 à π et l'angle ϕ de 0 à 2π, ainsi l'angle solide vaut :

$$\omega = \int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \sin\theta.\mathrm{d}\theta.\mathrm{d}\phi = 4\pi \tag{2.2}$$

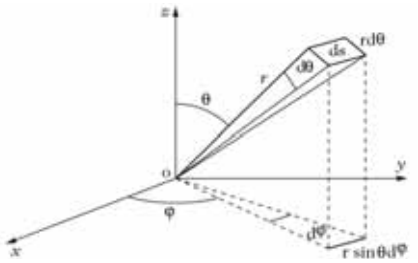


FIGURE 2.2: Schéma d'un angle solide élémentaire. Source : [Delmas et al., 2005].

2.1.2.2 Luminance monochromatique

La luminance monochromatique $\mathrm{L}_\nu(\theta, \phi)$ est une grandeur de base pour modéliser le transfert radiatif. Il s'agit de la puissance électromagnétique d'un rayon de fréquence ν se propageant dans un angle solide repéré par la direction (θ, ϕ), par unité de surface perpendiculaire à ce rayon. La luminance est une quantité d'énergie par unité d'angle solide, par unité de surface, par unité de fréquence ($\mathrm{W.m^{-2}.sr^{-1}.Hz^{-1}}$). Si le rayonnement se dirige vers dS (Figure 2.3) on parlera de luminance incidente $\mathrm{L}_\nu^\downarrow$, au contraire si celui-ci s'éloigne de dS on parlera de luminance émise $\mathrm{L}_\nu^\uparrow$. En intégrant toutes les fréquences, la luminance s'exprime par :

$$\mathrm{L} = \int_0^{+\infty} \mathrm{L}_\nu.\mathrm{d}\nu \tag{2.3}$$

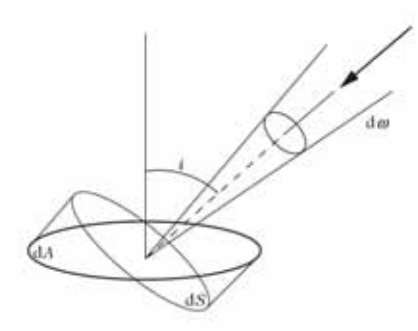


FIGURE 2.3: Schéma de la luminance provenant d'un angle solide élémentaire dω et traversant une surface élémentaire dS. Source : [Delmas et al., 2005].

2.2 Interaction rayonnement-matière

L'émission de rayonnement provient à l'origine de l'agitation thermique des molécules et des atomes. La lumière qui atteint notre œil ne provient généralement pas directement d'une source mais indirectement, après avoir subi des processus physiques fondamentaux tels que la réflexion, diffusion ou absorption (Figure 2.4). Une particule de matière est soumise à un rayonnement électromagnétique dans une longueur d'onde donnée λ de luminance L_λ.

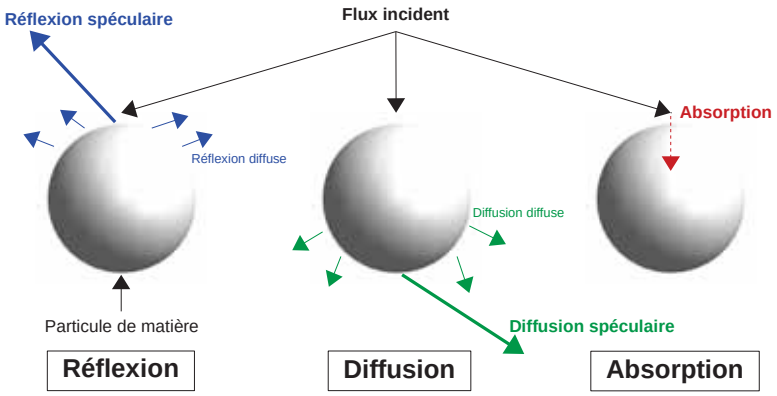


FIGURE 2.4: Schéma des interactions entre un rayonnement électromagnétique incident et une particule de matière.

Dans le cas de l'interface entre le système Terre/Atmosphère et l'espace, le rayonnement réfléchi est l'ensemble du rayonnement réfléchi et rétro-diffusé vers l'espace. Le rapport entre le rayonnement réfléchi/rétro-diffusé par une interface et le rayonnement incident dans une longueur d'onde particulière s'appelle le facteur de réflexion ou albédo monochromatique, noté α_λ. Lorsque un petit corps (molécules, aérosols, poussières, micro-gouttelettes d'eau) intercepte un rayonnement électromagnétique il peut se passer un processus de diffusion dans lequel le rayonnement intercepté est retransmis dans toutes les directions de l'espace sans modifier la longueur d'onde initiale. Le rapport entre la taille de la particule et le rayonnement électromagnétique déterminera la forme prise par la diffusion. La théorie de Rayleigh explique très bien ce processus de diffusion par les gaz, expliquant ainsi la couleur bleue du ciel, tandis que la diffusion de Mie explique la diffusion par de plus grosses particules comme des poussières. Enfin pour des particules plus grosses de type gouttes d'eau ou particules de glace, les lois de la réflexion spéculaire et de la réfraction de l'optique classique expliquent très bien les processus de formation de nombreux photo-météores tels que les arc-en-ciel ou encore les halos.

Une particule de matière peut également absorber un rayonnement électromagnétique. Dans ce cas, l'énergie du rayonnement est convertie en énergie d'agitation moléculaire. Ainsi, les caractéristiques thermodynamiques de la matière vont être modifiées. Le facteur d'absorption β dans une longueur d'onde λ est donné par le rapport entre le rayonnement absorbé et le rayonnement incident. Une proportion du rayonnement peut continuer à se propager dans le même sens que le rayonnement incident. Cette proportion est représentée par la somme entre le flux transmis directement sans avoir interagi avec la matière et le flux diffusé. Ainsi, le rapport entre le rayonnement total transmis et le rayonnement incident dans une longueur d'onde donnée λ fournit le facteur de transmission τ_λ. Enfin, le principe de conservation d'énergie nous permet de montrer que la somme des énergies du rayonnement absorbé, du rayonnement réfléchi et du rayonnement diffusé est égale à l'énergie du rayonnement incident :

$$\alpha_\lambda + \beta_\lambda + \tau_\lambda = 1 \tag{2.4}$$

2.3 L'émission et l'absorption

2.3.1 Théorie du corps noir

En 1860, Kirchhoff introduit la théorie du corps noir définissant un corps idéal en équilibre thermodynamique avec son environnement. Le corps noir absorbe l'intégralité du rayonnement qu'il reçoit et est considéré comme un émetteur parfait capable d'émettre le maximum d'énergie possible dans n'importe quelle longueur d'onde. Il s'agit évidemment d'un modèle assez éloigné d'un corps réel mais qui constitue une référence intéressante pour décrire l'émission et l'absorption dans de nombreux cas décrits par quatre lois physiques.

2.3.1.1 L'équilibre thermodynamique local (ETL)

On considère qu'un gaz est en équilibre thermodynamique lorsque la température est homogène en tout point de l'espace et reste constant dans le temps. Le rayonnement est alors isotrope. Il s'agit d'un état idéal et restrictif qui concerne la matière à l'intérieur d'une enceinte fermée sans échange avec l'extérieur.

Dans un cas réel comme l'atmosphère par exemple, la température varie. Il y a des échanges de chaleur, principalement par conduction thermique et par rayonnement, augmentant ainsi la température et rendant le système hors équilibre. Or les variables d'état d'un système ne sont toutes définies que s'il est à l'équilibre thermodynamique. Une façon de résoudre ce problème est de définir des sous-systèmes de taille infinitésimale, pour lesquels l'hypothèse d'équilibre thermodynamique est localement réalisée. C'est ce qu'on appelle l'équilibre thermodynamique local (ETL). Pour justifier cette hypothèse on suppose que dans le milieu le gradient de température, par exemple, est tel que la variation de cette quantité sur une distance microscopique représentative est petite devant la fluctuation statistique à l'équilibre de température. L'ETL est vérifié dans l'atmosphère et n'est mis en défaut que lorsqu'on s'intéresse à l'émission ou à l'absorption dans la mésosphère au dessus d'environ 60 km d'altitude. L'ETL permet d'utiliser comme fonction source d'émission, la fonction de Planck (décrit ci-dessous). Cette méthode est largement utiliser dans les calculs de transfert radiatif pour les observations satellitaires.

2.3.1.2 Loi de Planck

En 1901, Planck publie ses travaux théoriques montrant que la luminance monochromatique émise par un corps noir en équilibre thermodynamique avec son environnement est isotrope. Planck établit la relation qui donne la luminance B_λ du corps noir à la température T par :

$$B_\lambda(T) = \frac{2.h.c^2}{\lambda^5(e^{h.c/k.\lambda.T} - 1)} \tag{2.5}$$

Cette relation appelée fonction de Planck est exprimé en $W.m^{-2}.sr^{-1}.\mu m^{-1}$, où les valeurs des constantes sont h = $6{,}626.10^{-34}$ J.s (constante de Planck) et k = $1{,}38.10^{-23}$ $J.K^{-1}$ (constante de Boltzmann). La fonction de Planck montre que l'intensité du rayonnement d'un corps noir augmente pour une longueur d'onde donnée avec la température.

La Figure 2.5 illustre quelques fonctions de Planck pour différentes températures de corps noir. On remarque d'une part que les courbes ne se croisent pas mais surtout on observe une nette distinction entre les domaines de longueur d'onde correspondant aux émissions solaire (Figure 2.5.a) et terrestre (Figure 2.5.b). Pour des longueurs d'onde élevées, la fonction de Planck peut être réduite à l'approximation de Rayleigh-Jeans en λ^{-4} et est proportionnelle à la température, permettant d'exprimer le rayonnement directement sous la forme de température de brillance T_b.

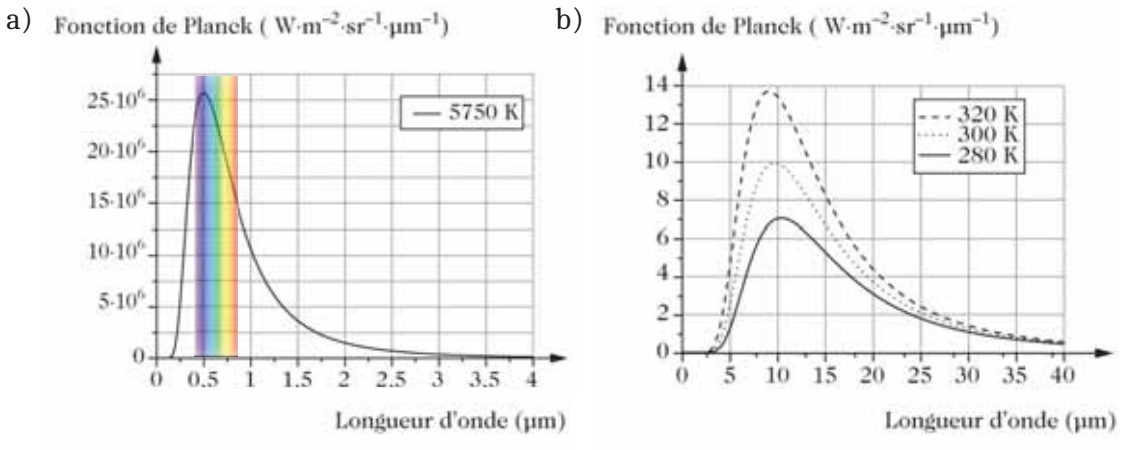


FIGURE 2.5: Représentation des fonctions de Planck pour quelques températures du corps noir. (a) Émission dans le domaine solaire pour une température de 5750 K. (b) Émission dans le domaine thermique pour des températures de 280, 300 et 320 K. Source : [Delmas et al., 2005].

2.3.1.3 La Température de Brillance (T_b)

La température de brillance T_b d'un objet est la température du corps noir émettant à la longueur d'onde λ une luminance égale à celle mesurée (par un instrument satellitaire par exemple). Si L_λ est la luminance mesurée, on définit la température de brillance par :

$$L_\lambda = B_\lambda(T_b) \tag{2.6}$$

Le principal intérêt de T_b réside dans l'interprétation des spectres thermiques issus d'un objet. En effet, en appliquant quelques hypothèses, la température de brillance correspond alors à la température du milieu situé à une profondeur optique égale à 1.

2.3.1.4 Loi de Wien

Pour chaque valeur de température, nous avons pu observer un maximum d'émission pour une longueur d'onde λ_{max}, qui est la valeur pour laquelle la dérivée de la fonction de Planck par rapport à la longueur d'onde s'annule. La forme de la dérivée $\partial B_\lambda/\partial\lambda$ nous indique que la longueur d'onde du maximum d'émission d'un corps noir est inversement proportionnelle à sa température. Cette dépendance se caractérise par la loi de déplacement de Wien avec a = 2897 μm.K :

$$\lambda_{max} = \frac{a}{T} \tag{2.7}$$

Le maximum d'émission pour le soleil (T = 6000 K) est associé à une longueur d'onde maximale de $\lambda_{max} = 0.48$ μm, située essentiellement dans le domaine du visible du côté de la lumière bleue. Le spectre solaire est principalement situé dans le domaine du visible et du proche infrarouge. Tandis que le rayonnement tellurique (Terre/Atmosphère) se situe largement dans le domaine de l'infrarouge, la température de surface de la Terre est d'environ 300 K et sa longueur d'onde maximale est de $\lambda_{max} = 9.6$ μm. Ces valeurs résultent du cas idéal ou la Terre rayonnerait comme un corps noir. Il n'en n'est rien, en réalité la Terre se comporte plutôt comme un corps gris (décrit plus bas).

2.3.1.5 Loi de Stefan-Boltzmann

La loi de Stefan-Boltzmann démontre qu'en intégrant les fonctions de Planck sur toutes les longueurs d'onde et dans toutes les directions d'un demi-espace, on peut définir l'émittance totale M du corps noir en fonction de la puissance quatrième de la température par :

$$\mathrm{M(T)} = \sigma.\mathrm{T}^4 \tag{2.8}$$

où $\sigma = 5{,}67.10^{-8}$ W.m^{-2}.K^{-4} est la constante de Stefan. Comme explicité précédemment, les corps réels ne sont jamais des corps noirs. Le rapport entre la quantité de rayonnement émise par un corps réel et celle qui serait émise par un corps noir à la même température et pour une longueur d'onde donnée s'appelle l'émissivité ε_λ.

2.3.1.6 Loi de Kirchhoff

La loi de Kirchhoff exprime qu'émission et absorption sont liées. Pour une longueur d'onde donnée, un corps en équilibre thermodynamique sera aussi efficace pour absorber que pour émettre, soit :

$$\beta_\lambda = \varepsilon_\lambda \tag{2.9}$$

Ainsi pour un corps noir, $\varepsilon_\lambda = 1$ donc $\beta_\lambda = 1$, en reprenant l'équation 2.4, on déduit que les facteurs de réflexion α_λ et de transmission τ_λ sont nuls.

2.3.2 Théorie du corps gris

Un corps noir est un modèle idéal d'absorbant. En réalité, on ne rencontre jamais d'absorbant parfait dans la nature, on parle alors de corps gris. Celui-ci n'absorbe qu'une partie du rayonnement incident, le reste étant réfléchi et/ou transmis. À température égale, un corps gris n'émet pas autant qu'un corps noir dans les mêmes conditions. Ainsi, la luminance spectrale d'un corps gris s'exprime à partir de celle du corps noir placé dans les mêmes conditions de température et de longueur d'onde à l'aide du coefficient d'émissivité ε_λ, introduit précédemment et compris entre 0 et 1, par :

$$\mathrm{L}_\lambda^{\text{Corps gris}} = \varepsilon_\lambda.\mathrm{L}_\lambda^{\text{Corps noir}} \tag{2.10}$$

L'émissivité d'une surface à une longueur d'onde donnée dépend de ses propriétés physico-chimique, de sa température ainsi que de la direction d'émission.

Il est possible de définir une émissivité totale intégrée permettant de calculer l'émittance M(T) d'un corps gris. L'expression 2.8 devient alors :

$$\mathrm{M}^{\text{Corps gris}}(\mathrm{T}) = \varepsilon.\sigma.\mathrm{T}^4 \tag{2.11}$$

2.4 Le transfert radiatif dans l'atmosphère

Le système Terre/Atmosphère reçoit en permanence le rayonnement solaire direct. Seulement 58 % du rayonnement incident parvient jusqu'à la surface terrestre. En effet, une partie de ce rayonnement est absorbé par l'atmosphère ou réfléchi par l'atmosphère et la surface (Figure 2.6). L'énergie absorbée par la surface terrestre est ré-émise sous la forme d'un rayonnement majoritairement infrarouge qui se décompose entre le rayonnement tellurique et les flux de chaleurs sensibles et latentes ; la chaleur sensible modifie la température d'une matière, par opposition à la chaleur latente qui modifie l'état physique d'une matière. Cette énergie est à son tour en partie absorbée par les nuages et les gaz à effet de serre, se cumulant ainsi au rayonnement incident déjà absorbé. Enfin, seulement 69 % du rayonnement sortant vers l'espace est issu de processus d'absorption et d'émission dûs à la surface, à l'atmosphère et ses constituants gazeux. Ces propriétés particulières du système nous permettent d'introduire les concepts de transmittance, de fonction de poids et de jacobiens, fondamentaux pour la mesure satellitaire.

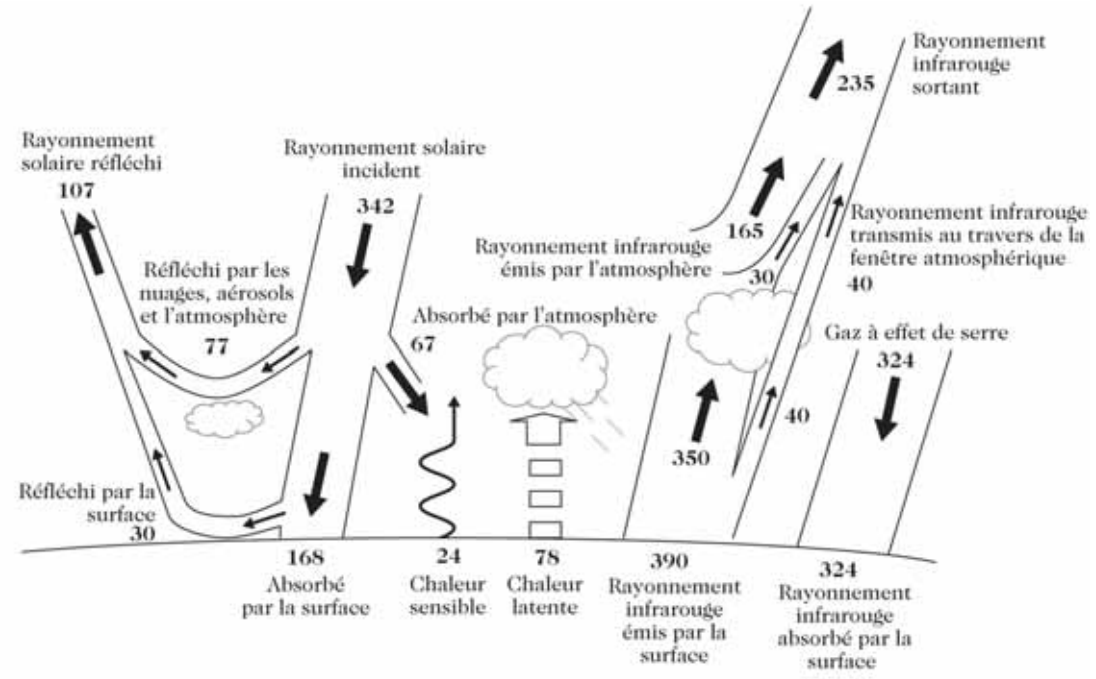


FIGURE 2.6: Bilan énergétique annuel terrestre moyen dans l'atmosphère terrestre en W.m^{-2} [Delmas et al., 2005].

2.4.1 Principes fondamentaux

La propagation des ondes électromagnétiques dans l'atmosphère est principalement influencée par la présence des composants gazeux, des hydrométéores et des aérosols. Les capacités d'absorption et d'émission des gaz dépendent fortement de la longueur d'onde. Les différents constituants de l'atmosphère sont ainsi plus ou moins transparents aux rayonnements électromagnétiques en fonction de leur longueur d'onde. Un intervalle de longueur d'onde pour lequel un gaz a une forte capacité d'absorption est nommé bande d'absorption. Selon les différents constituants et les différentes couches atmosphériques, la superposition des bandes d'absorption rend donc l'atmosphère relativement opaque au rayonnement. Il existe plusieurs intervalles de longueurs d'onde pour lesquels la majorité du rayonnement parvient jusqu'à la surface que l'on nomme fenêtres atmosphériques.

2.4.1.1 Transmittance

La transmission ou transmittance représente la fraction de l'énergie incidente qui traverse l'atmosphère et parvient à la surface. Elle dépend de la somme des différents effets d'absorption des composants atmosphériques. Dans le cas idéal d'une atmosphère plane et parallèle, hypothèse souvent utilisée en télédétection, la transmittance τ associée à un gaz donné, à une fréquence ν s'échappant de l'atmosphère vers l'espace avec un angle d'incidence θ à une altitude z, peut s'exprimer en fonction du profil de densité atmosphérique $\rho(z)$, du rapport de mélange de gaz absorbant c(z) et du coefficient d'absorption $k_\nu(z)$ par :

$$\tau_\nu(z,\theta) = \exp\Big[-\frac{1}{\cos(\theta)}.\int_z^\infty k_\nu(z).c(z).\rho(z).dz\Big] \tag{2.12}$$

La transmittance est un phénomène crucial dans le sondage atmosphérique et est fortement liée au pouvoir absorbant des composés atmosphériques. Certains instruments satellitaires sont capables d'interpréter les mesures radiométriques dans des intervalles spectraux spécifiques sensibles à certaines caractéristiques physiques de l'atmosphère. Ainsi le choix des plages fréquentielles de chaque instrument de mesure dépend de l'usage pour lequel il est destiné.

Ces plages sont représentées sur la Figure 2.7 pour des longueurs d'onde dans l'infrarouge entre 0 et 15 μm. On remarque que l'atmosphère est très opaque dans l'ultraviolet entre 0 et 0.4 μm, très transparente dans le domaine visible entre 0.4 et 0.75 μm et pratiquement opaque dans une bonne partie de l'infrarouge entre 0.75 et 15 μm excepté pour quelques fenêtres atmosphériques dans le proche infrarouge entre 0.75 et 1.5 μm et dans la fenêtre comprise entre 8.5 et 12.5 μm.

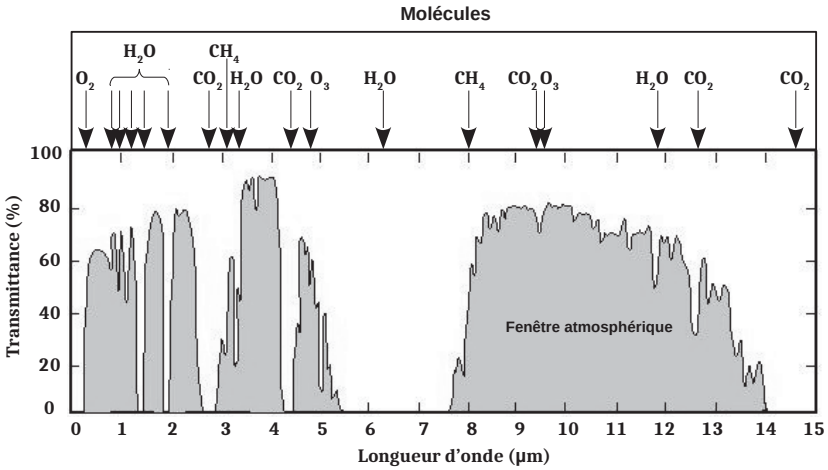


FIGURE 2.7: Transmittance atmosphérique (%) en fonction des longueurs d'onde comprises entre 0 et 15 μm et les bandes d'absorption associées aux principaux gaz atmosphériques. D'après [Malardel, 2005].

L'objectif premier des mesures satellitaires de ces transmissions est d'en déduire des informations sur la température, l'humidité ou encore la composition chimique de l'atmosphère. Les bandes d'absorption d'un gaz telles que celles du CO_2 dont la distribution est bien quantifiée dans l'atmosphère est un choix intéressant pour déduire de l'information sur le profil de température. En effet, différentes luminances spectrales (canaux) situées à des longueurs d'onde d'absorption plus ou moins forte permettent d'être sensible à différentes couches de l'atmosphère (fonctions de poids, explicitées après).

Pour des informations sur les profils d'humidité ou d'ozone par exemple, on choisira respectivement les bandes spectrales d'absorption de la vapeur d'eau et de l'ozone situées vers 5 et 9,6 μm. Pour ces gaz, la sensibilité verticale dépend de la quantité de gaz elle-même. Enfin les fenêtres atmosphériques nous permettent d'obtenir de l'information sur les surfaces nuageuses et terrestres. Pour les fenêtres atmosphériques, la transmittance vaut 1, tandis que dans le cas d'un signal absorbé dans sa totalité, la transmittance vaut 0.

2.4.1.2 Fonction de poids

Pour les couches supérieures de l'atmosphère, le rayonnement émis vers l'espace est limité en raison de la faible densité moléculaire à cette altitude. Même si les couches proches de la surface émettent davantage que les couches supérieures, leur rayonnement doit traverser une plus grande partie de l'atmosphère pour atteindre l'espace, et est ainsi fortement absorbé. Dans le cadre d'un système de sondage par télédétection passive, il est nécessaire de déterminer la couche d'origine du rayonnement observé.

Dans le cas particulier de l'infrarouge thermique, la luminance spectrale mesurée au sommet de l'atmosphère est une moyenne pondérée des valeurs prises par la luminance d'un corps noir dans les différentes couches émettrices.

Le poids associé à chaque couche combine à la fois les effets d'opacité de la couche, gouvernant sa capacité à émettre du rayonnement (Loi de Kirchhoff), et les effets d'atténuation du rayonnement émis par la couche entre son point de départ et le sommet de l'atmosphère [Cayla, 2001].

Ainsi pour une luminance spectrale donnée, la dérivée de la transmittance τ_ν en fonction de l'altitude z nous renseigne sur le poids associé à chaque couche élémentaire d'épaisseur dz (Figure 2.8). On appelle cette fonction, la fonction de poids et s'exprime par :

$$\mathrm{K}_\nu(\mathrm{z}) = \frac{\partial \tau_\nu(\mathrm{z}, \theta)}{\partial \mathrm{z}} \tag{2.13}$$

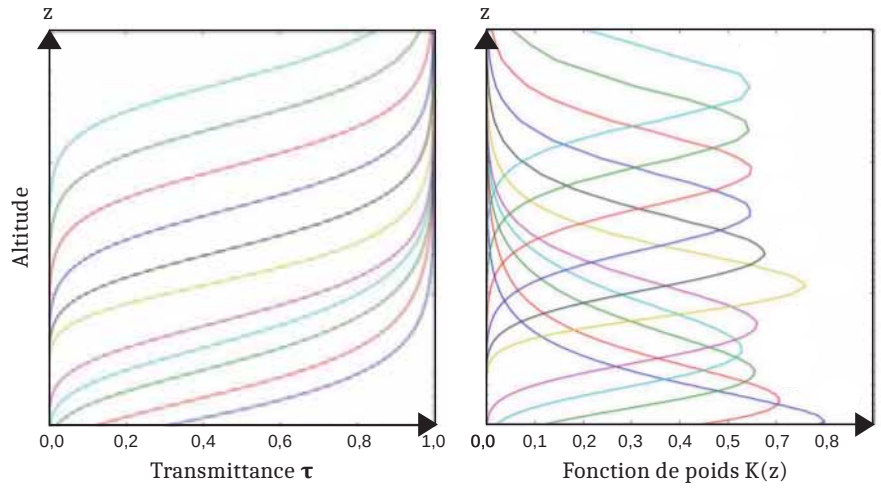


FIGURE 2.8: Schéma de plusieurs transmissions atmosphériques (τ) (à gauche) et des fonctions de poids (K(z)) associées (à droite) en fonction de l'altitude (z). [D'après les cours d'assimilation de données satellitaires dispensés par le CEPMMT]

Ces fonctions de poids possèdent des maximums de sensibilité à une ou plusieurs altitudes correspondant à des maximums d'absorption pour des paramètres physiques spécifiques.

2.4.1.3 Jacobiens

Par définition, le tangent linéaire de $\mathcal{H}$ à un paramètre de référence X, également appelé opérateur d'observation linéarisé $\mathbf{H}$, est la matrice jacobienne dans l'expansion de Taylor et est approximée en utilisant un schéma de différences finies non centré :

$$\mathbf{H} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathrm{X}} \tag{2.14}$$

Dans le cadre de l'assimilation de données en météorologie, le tangent linéaire de l'opérateur d'observation $\mathbf{H}$ est constitué des dérivées partielles de $\mathcal{H}$ par rapport à l'ensemble de ses entrées, exprimant les variations de $\mathcal{H}$ au voisinage de l'ébauche $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$. L'étude du jacobien met en évidence les sensibilités d'observation aux variables d'entrée du modèle à des points spécifiques. Ainsi, dans le cas d'observations satellitaires, les éléments de la matrice jacobienne $\mathbf{H}$ fournissent la variation de la luminance spectrale $\delta\mathbf{y}$ pour un changement de tout élément du vecteur d'état $\delta\mathbf{x}$ en supposant une relation linéaire sur un état atmosphérique donné $\mathbf{x}_0$:

$$\delta\mathbf{y} = \mathbf{H}(\mathbf{x}_0)\delta\mathbf{x} \tag{2.15}$$

Les éléments $H_{i,j}$ de $\mathbf{H}$ contiennent les dérivées partielles $\frac{\partial y_i}{\partial x_j}$, où l'indice i fait référence au numéro de canal et j à la position dans le vecteur d'état. Le jacobien donne le changement de luminance spectrale au sommet de l'atmosphère pour chaque canal à partir de chaque niveau du profil étant donné une perturbation unitaire à n'importe quel niveau des vecteurs du profil ou dans l'un des paramètres de surface/nuage. Il montre clairement, pour un profil donné, quels niveaux de l'atmosphère sont les plus sensibles aux changements de température et aux concentrations variables de gaz pour chaque canal.

Les jacobiens en température, humidité, température de surface, ozone, méthane, etc., de chacune des luminances spectrales fournit par un instrument satellitaire par exemple, peuvent être calculés à l'aide d'un modèle de transfert radiatif (décrit dans la section 2.5) en linéarisant son opérateur d'observation (décrit dans la Section 4.1.1.1). Les jacobiens ainsi calculés sont contenus dans une matrice de jacobien $\mathbf{H}$ ou appelé également modèle linéaire tangent. Le jacobien est un outil mathématique générique très important puisqu'il donne une information sur la sensibilité du spectre de luminance spectrale par rapport au paramètre qui lui est associé.

2.4.2 Équation du transfert radiatif

C'est lors de ses recherches en spectroscopie que Kirchhoff formula en 1859 la loi du rayonnement. Celle-ci fut le point de départ à la théorie des quanta introduit par Planck. Enfin, Einstein compléta cette théorie et initia la notion de photons, base de la physique quantique. Dès lors, le transfert radiatif fût largement utilisé dans d'innombrables domaines. Pour comprendre son utilisation pour la télédétection de l'atmosphère terrestre, nous allons tout d'abord expliciter de manière théorique le bilan du rayonnement à travers la matière.

2.4.2.1 Bilan radiatif à travers un élément de volume

Effectuons le bilan du rayonnement monochromatique se propageant suivant l'axe Ox dans un milieu absorbant et diffusant. Soit $L_\lambda(x_O)$ la luminance monochromatique à la longueur d'onde λ en un point O dans l'angle solide $d\omega$ centré sur la direction Ox. Sur la Figure 2.9 on considère un élément de volume cylindrique de surface dS et de longueur dx. Sur un axe le long de Ox, notons $L_\lambda(x_O)$ et $L_\lambda(x_O+dx)$ respectivement les luminances à l'entrée et à la sortie du cylindre. Les photons qui sortent du cylindre dans la direction Ox peuvent avoir trois origines :

- la proportion L_λ^{out} du flux incident $L_\lambda(x_O)$ qui n'a été ni absorbée, ni diffusée dans d'autres directions que celle de l'axe Ox par l'élément de volume situé entre x_O et x_O+dx, soit :
$$L_\lambda^{out} = L_\lambda(x_O) + dL_\lambda^{ext} \tag{2.16}$$
où dL_λ^{ext} représente l'extinction du flux incident avec $dL_\lambda^{ext} < 0$;
- le flux $dL_\lambda^{émi}$ émis par l'élément de volume situé entre x_O et x_O+dx dans la longueur d'onde λ ;
- la somme dL_λ^{dif} des flux qui sont entrés initialement dans l'élément de volume dans une direction différente de celle de l'axe Ox puis qui ont été diffusés dans la direction de l'axe Ox.

D'où le bilan :
$$L_\lambda(x_O + dx) - L_\lambda(x_O) = dL_\lambda^{ext} + dL_\lambda^{émi} + dL_\lambda^{dif} \tag{2.17}$$
Cette équation bilan est à la base des modèles de transfert radiatif utilisés en météorologie satellitaire et dans les modèles de prévision numérique.

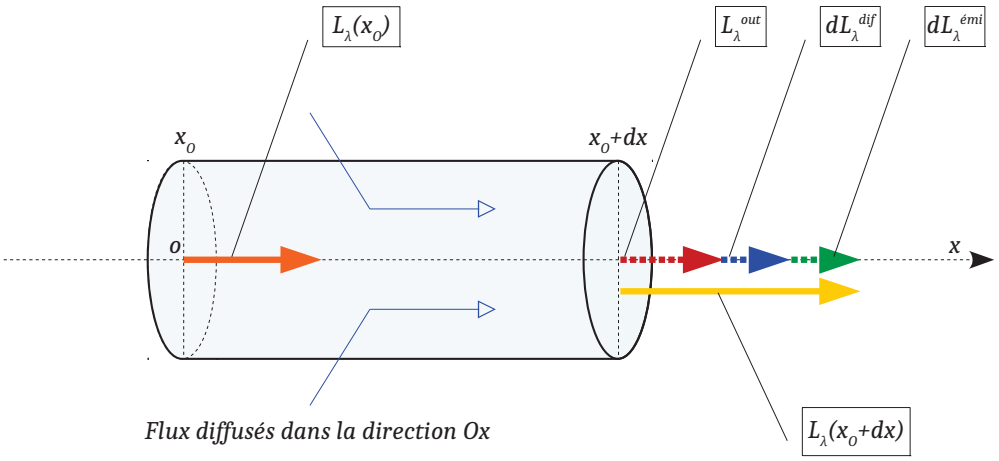


FIGURE 2.9: Bilan radiatif à travers un élément de volume.

2.4.2.2 L'équation du transfert radiatif

L'ensemble des notions abordées dans ce chapitre nous permettent d'appréhender le transfert radiatif qui représente la relation entre l'état de l'atmosphère et la luminance spectrale atteignant le sommet de l'atmosphère. Ainsi, nous avons vu qu'un rayonnement électromagnétique mesuré par le capteur d'un satellite par exemple, est affecté par l'absorption, l'émission, la réflexion et la diffusion subies tout au long de son parcours depuis la surface terrestre jusqu'au capteur. Cette luminance spectrale de fréquence ν quittant l'atmosphère avec un angle d'incidence θ (Figure 2.10) est calculée à partir de la fonction de Planck, de la transmittance, de la fonction de poids pour chacun des gaz traversés, nous permettant d'établir l'équation du transfert radiatif :

$$\mathrm{L}_\nu(\theta) = \varepsilon_\nu(\theta).\mathrm{B}_\nu[\mathrm{T}(\mathrm{z}_0)].\ \underbrace{\tau_\nu(\mathrm{z}_0,\theta)}_{\text{Transmittance}} + \int_{\mathrm{z}_0}^{\infty} \underbrace{\mathrm{B}_\nu[\mathrm{T}(\mathrm{z})]}_{\text{Fonction de Planck}} .\ \underbrace{\frac{\partial \tau_\nu(\mathrm{z},\theta)}{\partial \mathrm{z}}}_{\text{Fonction de poids}} + \Psi \quad (2.18)$$

où z_0 désigne l'altitude à la surface, ε_ν l'émissivité de la surface à la fréquence ν, $\mathrm{B}_\nu[T(z)]$ la fonction de Planck, $\tau_\nu(z,\theta)$ la transmittance à la fréquence ν entre la couche z et l'espace. L'ensemble des processus complexes de réflexion des rayonnements solaires et atmosphériques, d'atténuation par les nuages et de diffusion sont représentés par Ψ. En pratique, on néglige souvent ce terme.

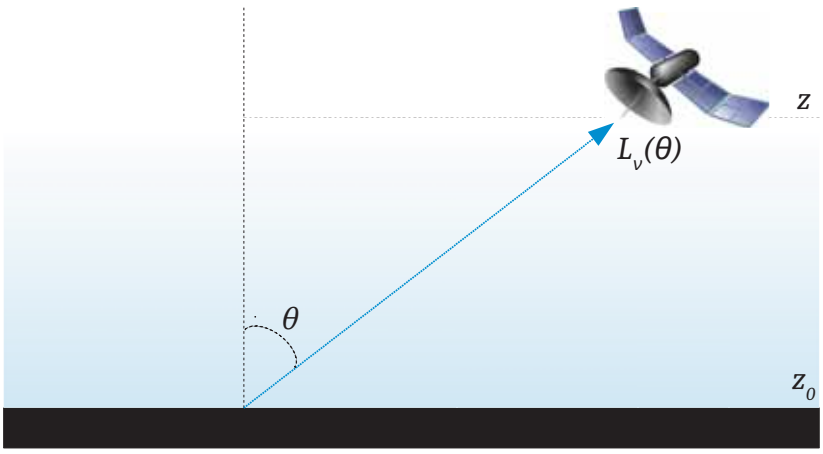


FIGURE 2.10: Schéma simplifié de la luminance spectrale quittant l'atmosphère vers un capteur satellitaire.

Il est à noter que les instruments satellitaires, ne mesurent pas des luminances spectrales monochromatiques mais la convolution du spectre émis par la Terre avec la fonction d'appareil du capteur. En effet, les capteur embarqués à bord de certains satellites mesurent souvent un ensemble de luminances spectrales (canaux) correspondant à un ensemble de fréquences (bande) sur laquelle il est nécessaire d'intégrer les contributions respectives de chaque fréquence. Ainsi, une luminance spectrale est caractérisée par une fréquence centrale et une fonction de réponse F_ν définie sur une bande de fréquence $\Delta\nu$ dont la largeur dépend de la résolution spectrale de l'instrument de mesure. La luminance spectrale totale observée depuis ces capteurs pour un canal donné s'exprime par :

$$L_{\text{Total}} = \frac{\int_{\Delta_\nu} L_\nu . F_\nu . d\nu}{\int_{\Delta_\nu} F_\nu . d\nu} \tag{2.19}$$

Ces principes fondamentaux permettent de nombreuses mesures spatiales de télédétection active ou passive, en visée au nadir ou au limbe à différentes longueurs d'onde selon des méthodes de mesures en émission, absorption ou en diffusion. Les techniques de télédétection passive permettent d'obtenir des informations sur les paramètres physiques du milieu sondé. Le rayonnement mesuré a auparavant traversé différentes couches atmosphériques, ce qui rend la mesure spatiale intimement lié à la chimie atmosphérique.

2.5 Modèle de Transfert Radiatif

2.5.1 Description

L'équation du transfert radiatif nous permet de calculer la luminance spectrale reçue par un capteur satellitaire connaissant l'état de l'atmosphère. Cette équation appelée « problème direct » ne répond que partiellement aux besoin de la prévision numérique du temps qui cherche à caractériser l'état de l'atmosphère à partir des luminances spectrales mesurées. La résolution de ce « problème inverse » a nécessité de développer des outils capables de réaliser des inversions de profils de température et d'humidité à partir des luminances spectrales observées en se basant sur l'équation du transfert radiatif. Cependant, le problème inverse est complexe puisque plusieurs profils atmosphériques peuvent conduire aux mêmes observations. C'est pourquoi, il est nécessaire de disposer d'une estimation de l'état de l'atmosphère le plus probable, résultant d'une prévision à courte échéance, appelée ébauche qui sera comparée aux luminances mesurées. Cette comparaison s'effectue à l'aide d'un opérateur d'observation (explicité plus largement dans le Chapitre 4) qui simule des observations à partir de variables géophysiques du modèle de prévision ou de profils *in-situ*. Cet opérateur d'observation utilise un modèle direct appelé Modèle de Transfert Radiatif (MTR) qui permet de décrire les échanges des flux Terre/Atmosphère ainsi que des interpolations horizontales et verticales pour passer de la représentation du modèle de prévision à la représentation des observations. La communauté scientifique utilise différents MTR qui se distinguent de part les hypothèses formulées et ainsi par les temps de calcul. Il existe deux grandes familles de MTR, les modèles dits « raie par raie » et les modèles dits « approchés » :

- les MTR « raie par raie » sont capables de représenter le spectre électromagnétique tel que l'observerait un spectromètre. Le spectre est discrétisé très finement et la transmittance τ_ν est calculée pour chacune de ces raies. Nous avons vu précédemment que la transmittance dépend du coefficient d'absorption k_ν de chaque espèce absorbante à une fréquence donnée. Ce coefficient dépend à la fois de l'épaisseur, de la forme et de la position de la raie d'absorption du constituant. Ainsi, le modèle « raie par raie » évalue la somme des contributions de toutes les raies d'absorption au coefficient d'absorption k_ν et répète ce processus pour chaque niveau vertical. On peut citer parmi ces modèles :

STRANSAC [Scott, 1974], 4A[1] [Scott and Chedin, 1981] et [Tournier et al., 1995], LOWTRAN[2] [Kneizys et al., 1988], LBLMTR[3] [Clough et al., 1992], GENLEN2[4] [Edwards, 1992] ou encore MODTRAN[5] [Berk et al., 1999] et [Berk et al., 2005]. Ces modèles utilisent des bases de données spectroscopiques comme GEISA[6] [Jacquinet-Husson et al., 2011] qui fournit des informations précises sur la position et la largeur des raies d'absorption. Ces modèles sont très précis mais aussi très couteux en temps de calcul. Leur utilisation n'est donc pas réellement adaptée pour la prévision opérationnelle. On les utilise toutefois dans la recherche pour la validation ou l'apprentissage (basée sur l'utilisation d'un jeu d'entrées/sorties) des modèle « directs » ;

- les MTR « approchés » évaluent les transmittances par bande spectrale et non par raie monochromatique. Ainsi, ces modèles considèrent une valeur moyenne de la transmittance pour chaque bande en faisant l'hypothèse que celle-ci varie peu sur toute la bande. Ces modèles sont efficaces et rapides.

  Les modèles « approchés » utilisent une paramétrisation de l'épaisseur optique d'absorption en fonction de coefficients de transmittance « approchés » et de prédicteurs (K valeurs). Pour un canal i au sommet de l'atmosphère à un niveau j, l'épaisseur optique d'absorption δ d'un gaz X s'exprime par :

$$\delta^{\mathrm{X}}_{\mathrm{i,j}} = \sum_{\mathrm{k=1}}^{\mathrm{K}} \mathrm{c}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{i,j,k}} \cdot \mathrm{p}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{i,k}} \tag{2.20}$$

  où les $c^{X}_{i,j,k}$ représentent les coefficients pré-calculés à partir d'un jeu d'entraînement de profils atmosphériques représentant la variabilité naturelle de l'atmosphère (obtenus à l'aide d'un modèle « raie par raie ») et p les prédicteurs qui sont des fonctions des variables atmosphériques (P, T, gaz) et de la sécante (cosinus inverse de l'angle zénithal). Enfin, la transmittance totale de l'atmosphère est obtenue en sommant l'impact de chaque couche et de tous les gaz atmosphériques pris en compte :

$$\tau = \exp\Big[- \sum_{\mathrm{j}} \cdot \sum_{\mathrm{X}} \delta^{\mathrm{X}}_{\mathrm{j}} \Big] \tag{2.21}$$

On peut citer les modèles HITRAN[7] [Rothman et al., 1987], AES-FAST [Turner, 1995], SARTA[8] [Strow et al., 2003], CMTR[9] [Han, 2006], OSS[10] [Moncet et al., 2008]. L'un des modèles les plus utilisé dans la communauté de la prévision numérique opérationnelle et à Météo-France et le modèle RTTOV[11] [Saunders et al., 2018].

[1] Atlas Automatisé des Absorptions Atmosphériques
[2] LOW resolution TRANsmittance code
[3] Line-By-Line Radiative Transfer Model
[4] General Line-by-Lyne Atmospheric Transmittance and Radiance Model
[5] MODerate resolution TRANsmittance code
[6] Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques
[7] HIgh Resolution TRANsmission molecular absorption database
[8] Stand Alone AIRS Radiative Transfer Algorithm
[9] Community Radiative Transfer Model
[10] Optimal Spectral Sampling
[11] Radiative Transfer for Tiros Operational Vertical sounder

2.5.2 Le modèle RTTOV

Le modèle de transfert radiatif RTTOV est développé et maintenu par le SAF[12] au sein du consortium d'EUMETSAT[13] Numerical Weather Prediction dont fait partie Météo-France, le MetOffice (Centre Météorologique Britannique), le CEPMMT[14] et le DWD (Centre Météorologique Allemand). Mis au point à l'origine au CEPMMT au début des années 90 [Eyre, 1991] pour TOVS[15], le code original a connu plusieurs développements, avec par exemple les contributions de [Saunders et al., 1999] et [Matricardi et al., 2004]. Le modèle permet des simulations rapides (environ 1 ms pour 40 canaux ATOVS[16] sur un PC de bureau) des luminances spectrales des instruments mesurant dans le visible, l'infrarouge ou les micro-ondes au nadir.

Pour le domaine visible/infrarouge, RTTOV possède une couverture spectrale comprise entre 0.4 et 50 μm (200 - 25000 cm^{-1}). Il s'inspire essentiellement des modèles « raie par raie » GENLEN2, KCARTA[17] [DeSouza-Machado et al., 1997] et LBLMTR. Pour le domaine des micro-ondes, la couverture spectrale est comprise entre 10 et 800 Ghz et elle est basée sur le modèle MPM[18] [Liebe, 1989]. Il utilise pour cela des caractéristiques de l'atmosphère et de la surface (détaillées plus bas). Des informations sur la géométrie des instruments de mesure ainsi que sur la plateforme satellitaire sur lesquels ils se trouvent sont également nécessaires.

Les coefficients pour RTTOV sont principalement basés sur les données d'un ensemble de profils atmosphériques variés. Dans le visible et l'infrarouge, pour chaque luminance spectrale, l'épaisseur optique est calculée à partir de régressions linéaires basées sur les variables d'entrée de RTTOV : profils de température, humidité, l'émissivité, la température de surface et les profils de concentration des espèces chimiques [Matricardi, 2005], [Matricardi et al., 2004] et [Matricardi, 2003]. Le seul gaz variable qui doit être fourni obligatoirement est la vapeur d'eau. L'ozone, le dioxyde de carbone, l'oxyde nitreux, le méthane, le monoxyde de carbone et le dioxyde de soufre sont optionnels et supposés constants en l'absence de profils fournis.

Actuellement, une base de données de divers profils typiques et extrêmes de température, vapeur d'eau et ozone sur 91 niveaux de pression est disponible dans RTTOV (Figure 2.12). Ces profils ont été extraits des champs réanalysés à partir du modèle du CEPMMT[19] [Chevallier et al., 2006].

Pour les gaz traces variables, des profils ont été extraits des champs chimiques réanalysés à partir du modèle du programme CAMS (Copernicus Atmospheric Monitoring Services) (https ://www.atmosphere.copernicus.eu/). Désormais, 83 profils atmosphériques sur 101 ou 54 niveaux de pression sont utilisés pour calculer l'épaisseur optique d'absorption d'une luminance spectrale i du sommet de l'atmosphère à un niveau j [Matricardi, 2008]. La Figure 2.11 présente un exemple de ces profils pour le CO_2, le CO, le CH_4 et le N_2O.

[12] Satellite Application Facility
[13] EUropean Organisation for the Exploitation of METeorological SATellites
[14] Centre Européen de Prévision Météorologique à Moyen Terme
[15] TIROS (Television Infra-Red Observation Satellites) Operational Vertical Sounder
[16] Advanced TOVS
[17] KCompressed Atmospheric Radiative Transfer Algorithm
[18] Millimeter-wave Propagation Model
[19] Centre Européen de Prévision Météorologique à Moyen Terme

Le calcul par des modèles « raie par raie » a été effectué pour plusieurs constituants mineurs qui ne varient pas selon la verticale et que l'on appelle « gaz fixes ». Dans la version 11, RTTOV inclut comme gaz fixes : O_2, NO, NO_2, HNO_3, OCS, N_2, CCL_4, CFC-11, CFC-12, CFC-14 et dans la version 12 ont été ajoutés : NH_3, OH, HF, HCl, HBr, HI, ClO, H_2CO, HOCl, HCN, CH_3Cl, H_2O_2, C_2H_2, C_2H_6 et PH_3. Le calcul « raie par raie » pour les micro-ondes n'inclut que les N_2, O_2 et O_3 comme gaz fixes. Enfin, les concentrations des profils proviennent de l'U.S. Standard Atmosphere (1976) [Saunders et al., 2018].

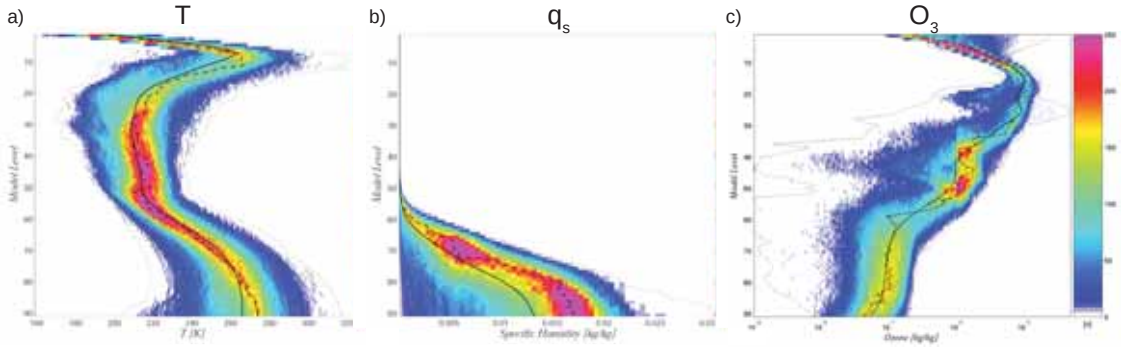


FIGURE 2.11: Histogrammes de fréquence des bases de données échantillonnées pour les profils de température (a), d'humidité spécifique (b), d'ozone (c) en fonction des niveaux modèle. Les Figures montrent également les profils composites du minimum (ligne pointillée de gauche), du maximum (ligne pointillée de droite), de la moyenne (ligne noire épaisse) et du mode (ligne discontinue) [D'après [Chevallier et al., 2006]].

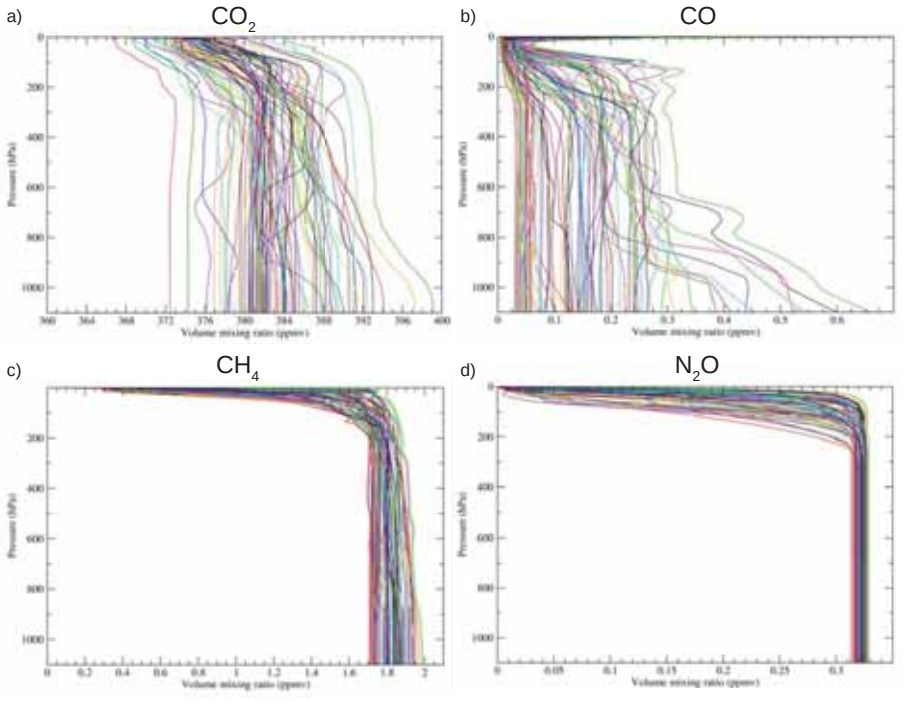


FIGURE 2.12: Représentation des 83 profils d'entraînement de la base de données pour le dioxyde de carbone (a), le monoxyde de carbone (b), le méthane (c) et le protoxyde d'azote (d) en fonction de la pression atmosphérique [D'après [Matricardi, 2008]]].

En opérationnel à Météo-France, des profils chimiques constants issus de la moyenne de ces profils typiques sont utilisés dans RTTOV pour le calcul du transfert radiatif. Au cours de cette thèse nous avons utilisé la version 11 de RTTOV (opérationnelle à Météo-France) ainsi que le dernière version disponible (version 12).

Par défaut, les émissivités de surface sont fixées à une valeur constante pour les points au-dessus de la terre. Il est possible d'utiliser des atlas d'émissivité plus réalistes tel que CAMEL[20] [Borbas et al., 2018]. Les modèles ISEM[21] [Sherlock and Saunders, 1999] et FASTEM[22] [English and Hewison, 1998] fournissent une émissivité de surface pour chaque angle de visée au-dessus de la mer respectivement dans l'infrarouge et les micro-ondes. RTTOV est un MTR robuste pour calculer les luminances spectrales au nadir et les adapter en fonction de l'angle de visée.

2.5.2.1 RTTOV en ciel clair

RTTOV a été initialement conçu pour simuler les luminances spectrales en ciel clair. Ainsi, dans RTTOV la luminance L_ν^{Clr} à une fréquence ν au sommet de l'atmosphère avec un angle de visée θ peut s'écrit :

$$\mathrm{L}_\nu^{\mathrm{Clr}} = \underbrace{\int_{\tau_\mathrm{s}}^{1} \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T}).\mathrm{d}\tau}_{1} + \underbrace{\tau_\mathrm{s}(\nu,\theta).\varepsilon_\mathrm{s}(\nu,\theta).\mathrm{B}_\nu(\mathrm{T_s})}_{2} + \underbrace{(1-\varepsilon_\mathrm{s}(\nu,\theta)).\tau_\mathrm{s}^2(\nu,\theta).\int_{\tau_\mathrm{s}}^{1} \frac{\mathrm{B}_\nu(\mathrm{T})}{\tau^2}.\mathrm{d}\tau}_{3} \tag{2.22}$$

où τ_s est la transmittance de la surface vers l'espace, ε_s, l'émissivité de surface, T_s, la température de surface, $\mathrm{B}_\nu(T)$ la fonction de Planck à une fréquence ν pour une température T. La première partie de l'équation (1) représente le rayonnement montant émis par les différentes couches atmosphériques, la deuxième partie (2) représente l'émission naturelle de la surface en partie atténuée par l'atmosphère et la troisième partie (3) représente le rayonnement descendant réfléchi par la surface et en partie atténué par l'atmosphère.

2.5.2.2 RTTOV en conditions nuageuses

Le modèle RTTOV est capable de simuler les luminances observées en conditions nuageuses par deux méthodes :

- RTTOV simule la présence d'un nuage monocouche opaque caractérisé par sa pression au sommet du nuage (PTOP) et sa fraction nuageuse effective (N_e). N_e est le produit de la fraction nuageuse N par l'émissivité de la couche nuageuse ε_c. Cette simplification permet le passage d'une atmosphère non-homogène horizontalement à une atmosphère homogène. Dans ce cas, le nuage est supposé absorber tout le rayonnement émis par les différentes couches atmosphériques sous le nuage qui est ensuite ré-émis par celui-ci. Dans cette hypothèse, le terme de réflexion est négligé puisque l'on considère que le nuage absorbe l'intégralité du rayonnement.

  La surface étant ramenée au niveau du nuage, la luminance spectrale nuageuse s'exprime par :

$$\mathrm{L}_\nu^{\mathrm{Cld}}(\theta) = \tau_\nu^{\mathrm{Cld}}(\theta).\mathrm{B}_\nu(\mathrm{T}^{\mathrm{Cld}}) + \int_{\tau^{\mathrm{Cld}}}^{1} \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T}).\mathrm{d}\tau \tag{2.23}$$

  où $\tau_\nu^{Cld}(\theta)$ est la transmittance au sommet du nuage vers l'espace et T^{Cld} la température au sommet du nuage. L'émissivité au sommet du nuage est supposée égale à 1.

[20] Combined ASTER MODIS Emissivity over Land
[21] Infrared Surface Emissivity Model
[22] FAST Emissivity Model

Cette hypothèse est tolérable pour un nuage composé d'eau et donc opaque au rayonnement infrarouge. En revanche, cette hypothèse n'est plus valable pour un nuage fin et pour tous types de nuages dans le spectre micro-onde. Suivant cette approximation, les luminances spectrales claires et nuageuses sont combinées afin de calculer la luminance effective au sommet de l'atmosphère telle que :

$$\mathrm{L}_\nu(\theta) = (1 - \mathrm{N_e}).\mathrm{L}_\nu^{\mathrm{Clr}}(\theta) + \mathrm{N_e}.\mathrm{L}_\nu^{\mathrm{Cld}}(\theta) \tag{2.24}$$

où L_ν^{Clr} et L_ν^{Cld} représentent respectivement les luminances émises au sommet de l'atmosphère en ciel clair et en ciel nuageux. Les paramètres de pression au sommet du nuage PTOP et de fraction nuageuse effective N_e doivent être fournis en entrée du modèle. Cette première approche rend difficile la détermination des paramètres PTOP et N_e dans les cas de nuages bas et semi-transparents mais aussi dans le cas de nuages multi-couches.

- Une deuxième méthode permet de diviser l'atmosphère en colonnes homogènes, chaque colonne contenant ainsi soit des couches claires soit des couches totalement nuageuses. Ce module appelé RTTOV-CLD [Chevallier et al., 2001] et [Chevallier et al., 2002], simule ainsi un nuage qui peut contenir différentes phases de l'eau nuageuse (liquide et glace), sur plusieurs niveaux verticaux. Il s'agit de paramétrisations multi-couches plus réalistes des nuages. Pour cela, il faut fournir en entrée du modèle des profils de température, d'humidité mais également des profils de paramètres nuageux tels que la couverture nuageuse et le contenu en eau et glace nuageuse. Ces paramètres peuvent être estimés à l'aide d'algorithmes de caractérisation des nuages ou à l'aide de schémas physiques de nuages. Cette méthode présente l'avantage d'être plus réaliste que la précédente.

Le MTR RTTOV est un outil rapide et efficace. En plus de sa capacité à simuler des observations satellitaires en luminance spectrale ou en température de brillance, il permet également de calculer des fonctions de poids et des jacobiens pour un canal donné et pour différents capteurs. Sa précision à simuler des observations aussi bien en ciel clair que nuageux, font de RTTOV un outil indispensable aux modèles de Prévision Numérique du Temps (PNT). RTTOV est utilisé en opérationnel dans le systèmes de PNT à Météo-France.

2.6 L'essentiel du Chapitre 2

- Le spectre électromagnétique se décompose en une multitude d'ondes monochromatiques de longueur d'onde λ se propageant dans le vide à la vitesse de la lumière.
- La puissance d'un rayonnement électromagnétique est caractérisée par la luminance monochromatique L_ν.
- Lorsqu'un élément de matière intercepte un rayonnement électromagnétique, l'interaction entre les deux peut s'exprimer par des phénomènes de réflexion, de diffusion et d'absorption.
- Seuls 58 % du rayonnement incident en provenance du soleil parviennent jusqu'à la surface terrestre. Une partie de ce rayonnement est absorbé par l'atmosphère ou réfléchi par l'atmosphère et la surface.
- Dans l'atmosphère terrestre, le phénomène de transmittance représente la fraction d'énergie incidente qui traverse l'atmosphère et parvient jusqu'à la surface et dépend de la somme des différents effets d'absorption des composants atmosphériques.
- Pour une luminance spectrale donnée, la fonction de poids nous renseigne sur la sensibilité de la longueur d'onde associée à chaque couche élémentaire de l'atmosphère.
- La matrice jacobienne est un outil mathématique important dans le cadre de l'assimilation de données pour la météorologie.
- L'équation du transfert radiatif permet d'établir une relation entre l'état de l'atmosphère et la luminance spectrale atteignant le sommet de l'atmosphère.
- Il existe des modèles de transfert radiatif (MTR), utilisés comme opérateur d'observation, capables de simuler des luminances spectrales observées à partir d'un état probable de l'atmosphère, déduit grâce aux variables géophysique d'un modèle de Prévision Numérique du Temps (PNT). L'opérateur d'observation convertit les variables géophysiques du modèle en simulations des observations. Cet opérateur permet également d'effectuer des interpolations verticales et horizontales pour se déplacer de la grille du modèle de prévision au point d'observation.
- La communauté dispose de deux types de MTR. Le premier dit « raie par raie » permet de simuler de manière très précise le spectre électromagnétique mais est très coûteux en temps de calcul. Le deuxième dit « approchés » considère une valeur moyenne de la transmittance pour chaque bande spectrale. Cette dernière technique est efficace, rapide et plus adaptée aux systèmes opérationnels de PNT.
- Le MTR RTTOV est largement utilisé dans le domaine de la prévision opérationnelle du temps du fait de sa capacité à simuler un très grand nombre de capteurs satellitaires dans différents domaine du spectre électromagnétique. Il permet également la simulation des luminances spectrales en ciel clair ou nuageux à l'aide de plusieurs hypothèses simplificatrices.

Chapitre 3

Les observations satellitaires

« Les nuages, les plantes et autres grenouilles seraient-ils les ancêtres des baromètres, thermomètres, hygromètres et autre satellite ? »

Antonin Perbosc

Sommaire

3.1 Les satellites géostationnaires 74
3.2 Les satellites défilants 76
3.3 Le sondeur infrarouge hyperspectral IASI 77
3.3.1 IASI une révolution scientifique 77
3.3.1.1 Metop et ses instruments 77
3.3.1.2 Le projet IASI 78
3.3.2 Un sondeur à haute résolution 79
3.3.2.1 La lumière à travers un interféromètre 79
3.3.2.2 Radiométrie et géométrie de IASI 80
3.4 L'essentiel du Chapitre 3 83

La révolution de l'observation satellitaire a commencé en 1960 avec le lancement du premier satellite météorologique TIROS[1]1 par les Américains sur une orbite elliptique (696 km × 756 km) d'une période de 98,3 minutes, inclinée de 48,4 ° par rapport au plan de l'équateur. Les premières images de l'atmosphère étaient très peu exploitables mais cela a été un tournant dans l'observation de l'atmosphère et de la Terre.

3.1 Les satellites géostationnaires

Suite au lancement du premier satellite météorologique, les Européens, les Russes, les Japonais, les Indiens, les Chinois et de nouveau les Américains, ont suivi avec les lancements respectifs des satellites météorologiques Meteosat, GOMS[2], GMS[3] puis MTSAT[4], INSAT[5], FY[6] et GEOS[7]. La particularité de ces satellites est qu'ils tournent autour de la Terre sur une orbite située dans le plan de l'équateur à une altitude d'environ 36.000 km (voir Figure 3.3). Étant synchronisés à la rotation de la Terre autour de l'axe des pôles, ces satellites observent toujours la même partie du globe. On appelle ces plateformes des satellites géostationnaires. Ils sont représentés sur le schéma de la Figure 3.2 par les écriteaux bleus. Les écriteaux rouges représentent les satellites défilants ou à orbite polaire dont nous expliciterons l'usage un peu plus loin. Actuellement, 14 satellites météorologiques géostationnaires sont opérationnels.



FIGURE 3.1: Image en couleur naturelle issue de Meteosat à 0°. Source : www.eumetsat.org.

Pour les applications en météorologie, ces satellites possèdent des instruments dit « passifs » ; qui mesurent directement le rayonnement émis par la Terre et l'atmosphère. L'un des principaux instruments passifs utilisés en météorologie est le radiomètre-imageur appelé **imageur**. Une image est obtenue en combinant la rotation du satellite sur lui même (environ 100 tours par minute pour Meteosat) et l'orientation de l'imageur suivant une direction perpendiculaire au plan de l'équateur. Actuellement, le satellite Européen MSG[8] permet de réaliser une image du globe toutes les 15 minutes (Figure 3.1). À titre d'exemple, l'imageur à son bord est capable de mesurer des luminances spectrales dans le visible, l'infrarouge permettant de suivre une grande partie des composantes atmosphériques telles que la température, l'humidité, les nuages, les aérosols ou encore l'ozone. Les observations issues de ces satellites sont indispensables puisqu'elles fournissent des données aussi bien de jour que de nuit. De plus, elles permettent une répartition homogène sur le globe des points d'observations. Les satellites géostationnaires nous permettent d'observer dans des zones pauvres en données *in situ*, particulièrement sur les océans, déserts et l'hémisphère sud. La couverture de ces données nous permet ainsi un suivi en temps réel des phénomènes météorologiques essentiel à la prévision numérique à courte échéance. Cependant, les instruments à bord de ces satellites ne peuvent pas observer les pôles. En effet, la mesure optimale se limite en dessous de 60 ° de latitudes nord et sud.

[1] Television Infra-Red Observation Satellites
[2] Geostationary Operational Meteorological Satellite
[3] Geostationary Meteorological Satellite
[4] Multifunctional Transport Satellite
[5] Indian National Satellite System
[6] Feng-Yun (Vents et Nuages en Chinois)
[7] Geostationary Operational Environmental Satellite
[8] Meteosat Second Generation

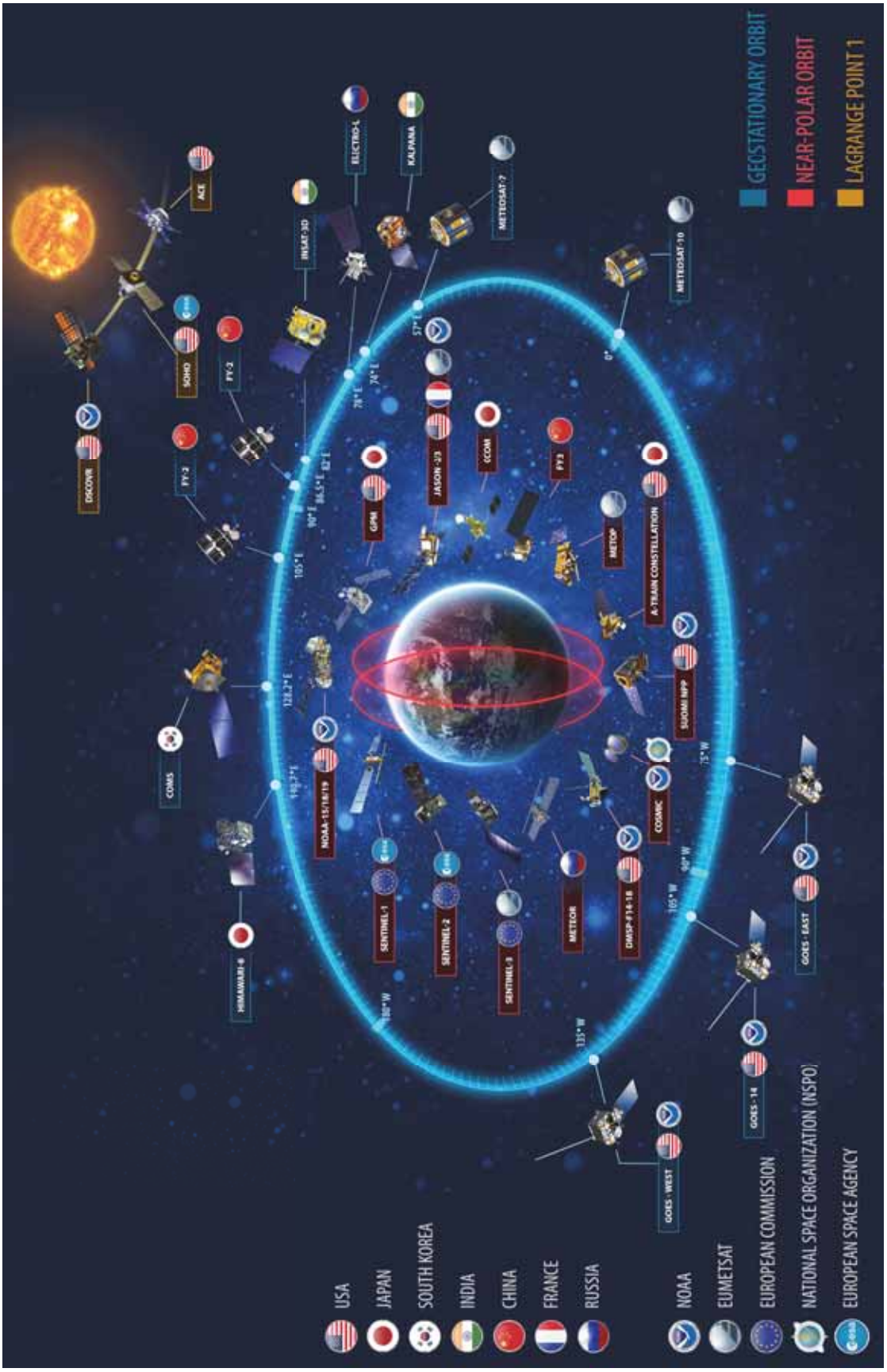


FIGURE 3.2: Schéma du réseau mondial d'observation opérationnelle des principaux satellites météorologiques. Source : www.nesdisia.noaa.gov/globaleocoordination.html.

3.2 Les satellites défilants

Pour pallier cette absence de mesure au niveau des pôles mais également afin d'augmenter la précision des mesures, des satellites dits polaires ou défilants ont été mis en orbite. Ces satellites tournent autour de la Terre sur une orbite quasi-circulaire en passant par les pôles à une altitude inférieure à 1.000 km comme l'illustre le schéma de la Figure 3.3. Ils sont le plus souvent héliosynchrones, c'est à dire que le plan de l'orbite suit le déplacement apparent du soleil autour de la Terre conduisant à survoler à la même heure solaire tous les points de la Terre situés sur un même parallèle. L'observation d'une partie de la Terre est réalisée en exploitant la progression du satellite sur son orbite et le balayage de l'instrument dans la direction perpendiculaire à sa trajectoire. Selon les instruments, le balayage peut être large avec un angle de demi-fauchée de 50° environ, soit un champ de vue (FOV : field of view, en anglais) de 100°. De ce cas, tout point de la Terre est vu au moins deux fois par jour. Pour d'autres, le champ de vue est très étroit et la fauchée au sol est de 60 km par exemple.

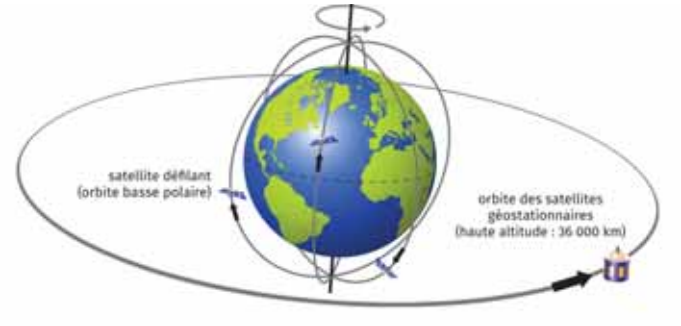


FIGURE 3.3: Schéma des orbites de satellites défilants passant par les pôles et de l'orbite des satellites géostationnaires. Source : Météo-France.

Comme pour les satellites géostationnaires, plusieurs pays ont lancé des programmes de satellites défilants ; les Américains disposent de 4 satellites défilants de la série NOAA[9], 5 de la série DMSP[10], un de la série Suomi-NPP[11] et des satellites de recherche à orbite non-héliosynchrones Terra, Aqua, Aura, etc. . Les Européens disposent de 3 satellites défilants de la série Metop[12] et également de satellites de recherche non-héliosynchrone des série JASON, Sentinel et ADM-Aeolus pour l'observation des surfaces océaniques et de la végétation, de la composition atmosphérique et des vents. Les Russes possèdent un satellite de la série METEOR-M et les Chinois en possèdent 3 de la série FY.

Ces satellites possèdent à leur bord une pléiade d'instruments de mesure pour le suivi, la surveillance du système Terre et la prévision météorologique. On y retrouve des imageurs comme sur les géostationnaires mais également des instruments dits « actifs » ; qui émettent une onde électromagnétique et mesurent le rayonnement réfléchi par les différentes surfaces possibles. Sur ces plateformes, les imageurs permettent de surveiller particulièrement les masses nuageuse des régions des haute latitude que nos imageurs sur géostationnaires ne peuvent voir. À ces latitudes, les satellites défilants effectues un passage toutes les une heure et demi permettant un suivi régulier des structures nuageuses. Mais l'intérêt de la communauté repose sur un autre instrument ; le radiomètre-sondeur appelé **sondeur**. Comme l'imageur, il mesure des luminances spectrales issues du rayonnement solaire, des surfaces et de l'atmosphère. Sa particularité est qu'il a la capacité d'analyser très finement la répartition du rayonnement selon la longueur d'onde.

[9]National Oceanic and Atmospheric Administration
[10]Defense Meteorological Satellite Program
[11]Suomi National Polar-orbiting Partnership
[12]Meteorological Operational

La précision et la finesse de ces mesures permet un échantillonnage spectral capables de sonder l'atmosphère. Nous sommes capables d'en déduire des profils verticaux de température ou d'humidité semblables à des radiosondages sur une large région géographique. Les mesures apportées par ces sondeurs sont d'une importance capitale pour la prévision numérique et parmi eux, un en particulier retient l'attention de toute la communauté scientifique : IASI[13]

3.3 Le sondeur infrarouge hyperspectral IASI

3.3.1 IASI une révolution scientifique

3.3.1.1 Metop et ses instruments

Les satellites Metop sont équipés d'un ensemble d'instruments de sondage et d'imagerie de pointe qui offrent aux météorologues et aux climatologues des capacités de télédétection améliorées. La série Metop fait partie de la constellation du système IJPS[14], avec les satellites NOAA-N et -N'. Metop-A a été lancé en 2006, Metop-B en 2012 et Metop-C en 2018. EUMETSAT Polar System (EPS) est donc la contribution Européenne à ce projet. Selon l'Accord initial sur le système polaire commun, EUMETSAT et la NOAA ont convenu de fournir des instruments pour leurs satellites respectifs. Le CNES est également partenaire du projet. Ils exploitent et contrôlent leurs satellites en orbite polaire et segments terrestres respectifs, mais les données recueillies par tous les satellites sont partagées et échangées. Les satellites Metop transportent une charge utile de huit instruments d'observation de la Terre, ainsi qu'une gamme de services de communication et de soutien comme l'illustre le schéma de la Figure 3.4 :

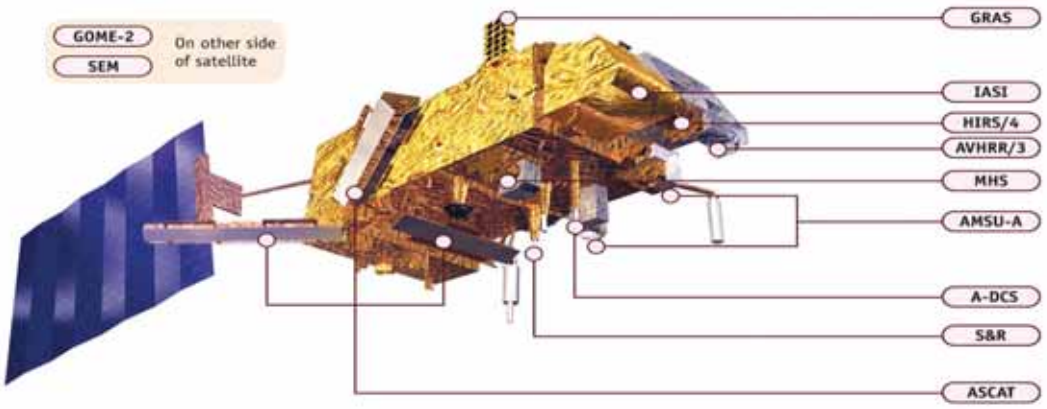


FIGURE 3.4: Schéma de la position des instruments sur le satellite Metop [source : www.eumetsat.int/website/home/Satellites/CurrentSatellites/Metop/MetopDesign/index.html].

- HIRS[15] : sondeur dans le domaine spectral visible et l'infrarouge capable de fournir des profils de température et d'humidité ;
- AVHRR[16] : imageur multispectral dans le domaine spectral visible et infrarouge capable de fournir des caractéristiques sur les nuages, la température de la mer, la couverture de glace, neige, végétation ... avec une résolution spatiale d'environ 1 km ;
- GRAS[17] : Sondeur atmosphérique capable de fournir des profils de température et d'humidité de la haute atmosphère se basant sur le principe de radio-occultation ;

[13] Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge
[14] Initial Joint Polar-Orbiting Operational Satellite System
[15] High-Resolution Infra-red Radiation Sounder
[16] Advanced Very High Resolution Radiometer
[17] Global Navigation System Satellite Receiver for Atmospheric Sounding

- AMSU-A[18] : sondeur micro-onde (bande d'oxygène à 50 GHz) capable de fournir des profils de température dans les zones nuageuses ;
- GOME-2[19] : spectromètre à balayage dans le domaine spectral du visible et de l'ultraviolet capable de fournir une mesure du contenu intégré en ozone ainsi que les oxydes d'azote NO, NO_2 et NO_3, les composés halogénés ClO, OCIO, l'oxyde de brome BrO, ainsi que les aérosols ;
- MHS[20] : sondeur micro-onde sensible à l'eau liquide dans les nuages notamment et capable de fournir une évaluation qualitative du taux de précipitation et de fournir des informations d'humidité par tous les temps ;
- ASCAT[21] : diffusiomètre capable de mesurer la vitesse du vent à la surface des océans ainsi que l'humidité des sols ;
- IASI : sondeur infrarouge capable de fournir des profils de température, d'humidité et bien d'autres informations en condition de ciel clair.

C'est ce dernier instrument qui va retenir toute notre attention pour le reste de notre propos. En effet, cet instrument a permis de réaliser une avancée incroyable de l'Europe sur le plan international grâce à des performances instrumentales inégalées et une précision dans les données qui font de IASI l'instrument le plus ambitieux de sa génération.

3.3.1.2 Le projet IASI

IASI est un sondeur infrarouge hyperspectral développé par le CNES en étroite collaboration avec EUMETSAT. Il est donc à bord des satellites défilants de la série Metop et est composé d'un interféromètre de Michelson (voir Figure 3.5) et d'un imageur infrarouge à large bande spectrale et à haute résolution spatiale IIS[22].

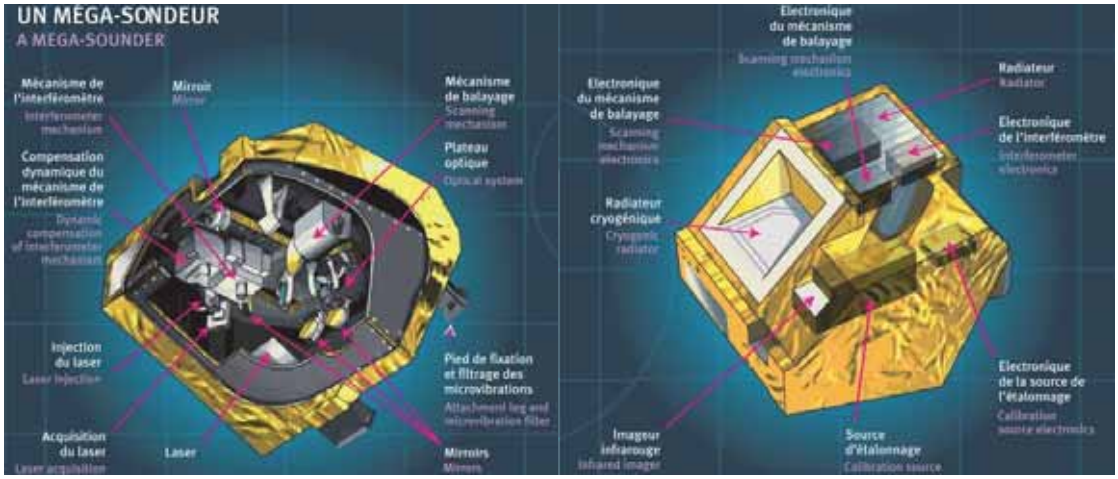


FIGURE 3.5: Schémas de l'interféromètre IASI vu de dessous et du dessus [source : http://www.meteo-spatiale.fr/src/profils_atmospheriques_iasi.php].

L'objectif de IASI est de fournir des sondages atmosphériques d'une très grande précision pour la communauté météorologique opérationnelle et la recherche afin d'améliorer les prévisions météorologiques. De plus, il s'est avéré être un instrument exceptionnel pour l'étude et la surveillance climatique ainsi que la mesure de la composition chimique de l'atmosphère. Les précisions attendues en condition de ciel clair sont :

[18] Advanced Microwave Sounding Unit-A
[19] Global Ozone Monitoring Experiment-2
[20] Microwave Humidity Sounder
[21] Advanced Scatterometer
[22] Integrated Imaging System

- pour la température, une précision absolue de 1 K avec une résolution verticale de 1 km et horizontale de 25 km ;
- pour l'humidité, une précision relative de 10 % avec une résolution verticale de 1 km et horizontale de 25 km ;
- pour l'ozone, une précision relative $\leqslant$ 5 % et une résolution horizontale de 25 km ;
- pour les autres gaz (CH_4, CO, N_2O, ...), une précision relative $\leqslant$ 10 % et une résolution horizontale de 100 km.

IASI nous fournit également des informations sur le couvert nuageux, la température au sommet des nuages, la température de surface de la mer et des terres émergées, ainsi que sur les aérosols. Chaque choix des matériels a été pensé pour une grande performance de l'instrument et une haute résolution des données.

3.3.2 Un sondeur à haute résolution

3.3.2.1 La lumière à travers un interféromètre

Le principe d'interférométrie est apparu en 1887 à travers l'expérience d'optique de Michelson et Morley ayant pour objectif de mesurer le déplacement absolu de la terre dans un fluide hypothétique appelé éther, supposé par erreur être le milieu de propagation des ondes lumineuses. Cette expérience a non seulement permis de démontrer l'inexistence de l'éther (remplacé par le concept de propagation des ondes électromagnétiques dans le vide) mais a surtout conduit à des découvertes scientifiques sans précédent, telles que la transformation de Lorentz et la théorie de la Relativité.

Un interféromètre de Michelson, illustré sur le schéma de la Figure 3.6, contient une lame semi-réfléchissante appelée aussi séparatrice, un miroir fixe et un miroir mobile. Le rayon incident issu de la source lumineuse est divisé en deux ondes d'amplitude équivalente par la lame semi-réfléchissante. La première onde (flèche rouge) est réfléchie vers le miroir fixe où elle est renvoyée vers la lame semi-réfléchissante puis vers le détecteur. La seconde (flèche bleue) est réfléchie vers le miroir mobile qui l'a réfléchi de nouveau vers la lame semi-réfléchissante puis vers le détecteur. Le miroir mobile peut être translaté afin d'engendrer une différence de chemin optique δ parcouru par les deux ondes avant d'atteindre le détecteur.

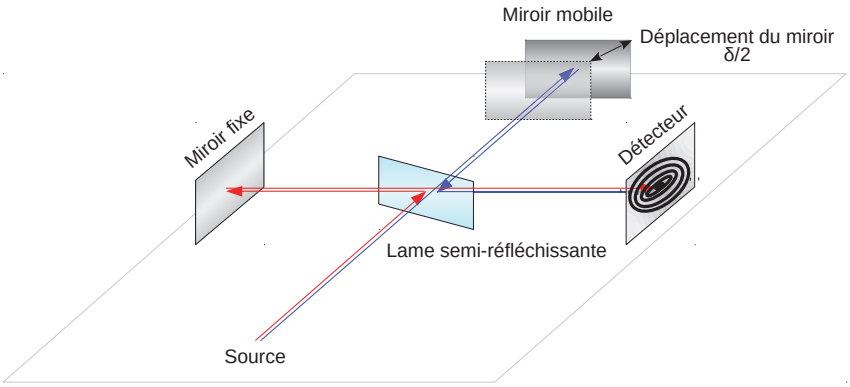


FIGURE 3.6: Schéma optique d'un interféromètre de Michelson.

La différence de chemin optique produit un déphasage entre ces deux ondes permettant l'obtention d'un interférogramme. Celui-ci représente l'intensité lumineuse de l'onde mesurée par le détecteur en fonction de la différence de chemin optique.

L'interférogramme I(δ) issu d'un rayonnement ayant un spectre continu S(ν), où ν est le nombre d'onde, s'obtient par la formule suivante :

$$\mathrm{I}(\delta) = \frac{1}{2} \int \mathrm{S}(\nu) \left(1 + \cos(2\pi\nu\delta)\right) .\mathrm{d}\nu \tag{3.1}$$

L'interférogramme I(δ) se compose d'un terme constant auquel s'ajoute la partie réelle de la transformée de Fourier du spectre S(ν). La variation de δ, possible grâce au miroir mobile, nous permet d'obtenir la transformée de Fourier du spectre S(ν). Le spectre en luminance spectrale est ensuite obtenu en calculant la transformée de Fourier inverse. En pratique, cette transformée de Fourier inverse ne peut pas être calculée avec un nombre infini de δ. En conséquence, le spectre résultant est échantillonné avec un pas de $1/(2\delta_{max})$. Le spectre instrumental enregistré est donc la convolution du spectre de luminance spectrale par la transformée de la fonction fenêtre. Cette fonction de convolution est un sinus cardinal et définit la Fonction de Réponse Spectrale de l'Instrument.

L'instrument IASI est un interféromètre de Michelson permettant de collecter le rayonnement infrarouge émis par la surface et l'atmosphère terrestre, en provenance du champ de visée, et à le transporter à travers l'interféromètre jusqu'au détecteur. IASI réalise ainsi de la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier permettant d'obtenir le spectre d'absorption, d'émission, la photoconductivité ou encore la diffusion Raman dans l'infrarouge. IASI couvre le domaine de l'infrarouge thermique et permet ainsi la mesure d'un grand nombre de constituants atmosphériques [Hilton et al., 2012], [Clerbaux et al., 2009] et [Cayla, 2001].

3.3.2.2 Radiométrie et géométrie de IASI

Caractéristiques radiométriques :

L'instrument IASI couvre un large domaine spectral qui s'étend de la limite de l'infrarouge thermique (2.760 cm^{-1}) jusqu'au pic de la bande d'absorption du CO_2 (645 cm^{-1}). Afin d'optimiser les performances de l'instrument, le domaine a été subdivisé en trois bandes spectrales respectivement comprises entre [645 - 1.210 cm^{-1}], [1.210 - 2.000 cm^{-1}] et [2.000 - 2.760 cm^{-1}] comme l'illustre la Figure 3.7.

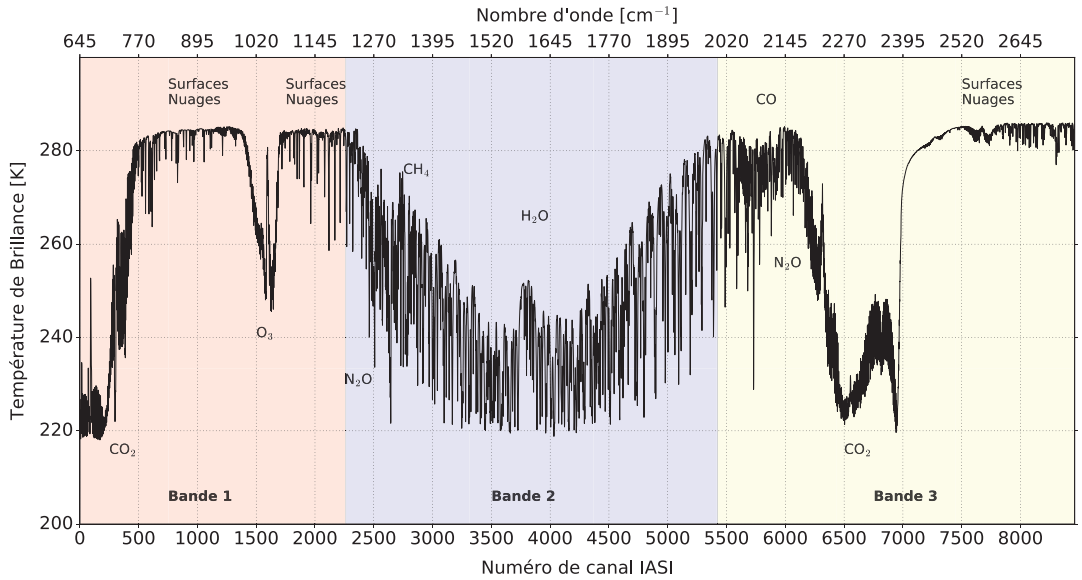


FIGURE 3.7: Exemple d'un spectre IASI en Température de Brillance [K] en fonction du numéro de canal IASI et du nombre d'onde.

La luminance spectrale est mesurée à l'aide de 8461 canaux d'une résolution spectrale de 0.5 cm^{-1} après apodisation (0.25 cm^{-1} avant). L'apodisation signifie littéralement « *suppression des pieds* », dans notre cas il s'agit de la suppression des pieds de la fonction de réponse spectrale en passant dans le domaine fréquentiel via une transformée de Fourier plus adaptée. La sensibilité radiométrique NEΔT (Noise Equivalent ΔT) représente la variation de température correspondant à une variation de la luminance spectrale du corps noir équivalente au bruit de la mesure. Elle dépend donc du nombre d'onde (ν) et de la température. Il a été choisi de spécifier cette température de manière indépendante du canal, à une référence de 280 K (T_{ref}) :

$$NE\Delta T\left(T_b(\nu)\right) = NE\Delta T(T_{ref,\nu}) \left(\frac{\frac{\partial B_\nu}{\partial T}(T_{ref})}{\frac{\partial B_\nu}{\partial T}(T_b(\nu))} \right) \tag{3.2}$$

où T_b est la température de brillance, ν le nombre d'onde et B la fonction de Planck explicitée dans le Chapitre précédent. Le bruit instumental de IASI est généralement compris entre 0.1 K et 0.4 K excepté pour les canaux au-dessus de 2300 cm^{-1} qui sont contaminés par le rayonnement solaire. L'ensemble des caractéristiques radiométriques de l'instrument IASI est résumé dans le Tableau 3.1.

Nom	Région spectrale [cm^{-1}]	Sensibilité radiométrique [K]	Principaux absorbants	Principales applications
R1	650 - 770	0.20	Bande d'absorption de CO_2	Profil de température
R2	790 - 980	0.24	Fenêtre atmosphérique	Propriétés des surfaces et des nuages
R3	1.000 - 1.070	0.20	Bande d'absorption de O_3	Profil d'ozone
R4	1.080 - 1.150	0.24	Fenêtre atmosphérique	Propriétés des surfaces et des nuages
R5	1.210 - 1.650	0.20	Bande d'absorption de H_2O	Profil d'humidité et contenu en CH_4 et N_2O
R6	2.100 - 2.150	0.36	Bande d'absorption de CO	Contenu en CO
R7	2.150 - 2.250	0.36	Bande d'absorption de N_2O et CO_2	Profil de température et contenu en N_2O
R8	2.350 - 2.420	0.36	Bande d'absorption de CO_2	Profil de température
R9	2.420 - 2.700	0.36	Fenêtre atmosphérique	Propriétés de surfaces et des nuages
R10	2.700 - 2.760	1.53	Bande d'absorption de CH_4	Contenu en CH_4

TABLE 3.1: Principales régions spectrales, sensibilités radiométriques et principales applications de l'instrument IASI.

Ainsi, le principe d'acquisition des données repose sur la mesure du rayonnement infrarouge émis par la surface terrestre et l'atmosphère via l'interféromètre vers le détecteur. Les données IASI sont envoyées vers les stations de réception au sol. Ces dernières traitent ainsi les données brutes et fournissent des produits de différents niveaux (L1, L2, etc.). L'interférogramme est alors transformé en spectre de luminance spectrale (L1) via une transformée de Fourier puis converti en Température de Brillance pour plus de commodité. Ces produits L1 permettent de déduire de l'information sur les profils de température et d'humidité, la couverture nuageuse, les aérosols, les propriétés de surface et évidemment sur la composition chimique de l'atmosphère (CO_2, CH_4, O_3, CO, N_2O, ...) [Clerbaux et al., 2009]. Les produits L2, plus élaborés, fournissent directement des paramètres géophysiques construits à partir des produits L1. EUMETSAT propose par exemple des profils de température et d'humidité, des champs d'émissivité et de température de surface, la fraction nuageuse, la température et la pression au sommet du nuage, le contenu en gaz (CO_2, CH_4, O_3, CO, N_2O), la covariance d'erreur et des indications sur la qualité du traitement et les incertitudes associées.

Caractéristiques géométriques :

Du point de vue géométrique, IASI a un axe optique qui balaie l'espace dans un plan perpendiculaire à la trace au sol du satellite. Comme le présente le schéma de la Figure 3.8, il y a 30 positions de visée sur la ligne de mesure. L'axe optique se déplace de ±47.85° par rapport au nadir. Le balayage d'une ligne dure 8 secondes et la longueur de la ligne au sol est de 2.400 km. À chaque visée, IASI mesure 4 champs de vision instantané (IFOV[23]) ou pixel de 12 km de diamètre par cellule de 50 km au point sous-satellite [August et al., 2012]. Ces pixels sont circulaires au nadir et deviennent de plus en plus elliptiques aux extrémités de la ligne de balayage où ils mesurent jusqu'à environ 39 km de longueur et 20 km de largeur.

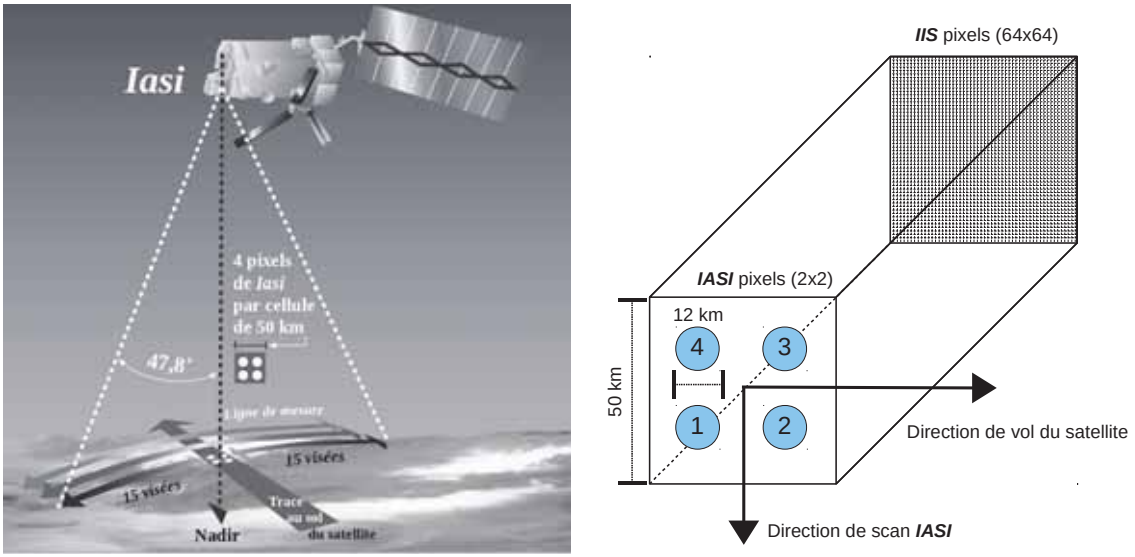


FIGURE 3.8: Schéma de la géométrie de balayage de IASI [Cayla, 2001] et orientation des pixels IASI et IIS.

Enfin, pour faciliter le traitement des régions nuageuses, IASI effectue ses mesures en synergie avec l'imageur AVHRR à l'aide de l'imageur IIS. Le champ de vision instantané de IIS est défini par une surface carrée de 3.4° de côté, couvrant 64 × 64 pixels. IIS possède une bande spectrale unique dans une fenêtre atmosphérique comprise entre 10.5 et 12.5 μm. Il est composé également d'une matrice de 64 x 64 détecteurs qui permet d'analyser un champ carré de 3.3° de côté, centré sur l'axe optique de IASI. Ainsi, chacun des détecteurs de l'imageur voit un pixel carré de 0.8 km de côté au point sous-satellite.

Cette haute résolution spatiale permet une collocalisation précise avec l'imageur AVHRR permettant une analyse fine des propriétés des nuages présents dans les champs de vision de IASI, une géo-localisation des sondages atmosphériques et une quantification de l'inhomogénéité de la scène pour la correction de la réponse spectrale de IASI. Dans le cadre du traitement IASI, les pixels AVHRR de chaque champ de vision IASI sont identifiés et divisés en sept groupes de « clusters ». Pour chacun de ces clusters, l'écart-type et la moyenne des luminances spectrales de chaque canal AVHRR sont fournis avec la couverture fractionnaire.

[23]IASI Field Of View

3.4 L'essentiel du Chapitre 3

- Un satellite géostationnaire est synchronisé à la rotation de la Terre observant toujours la même partie du globe. Son orbite est située sur le plan de l'équateur et il culmine à une altitude d'environ 36.000 km.
- Actuellement, 14 satellites météorologiques géostationnaires sont opérationnels avec à leur bord des imageurs capables de fournir des informations sur la température, l'humidité, les nuages, les aérosols ou encore l'ozone.
- Un satellite défilant ou à orbite polaire tourne autour de la Terre en passant par les pôles. Il observe chaque point de la surface au moins deux fois par jour et met environ 90 minutes à effectuer un tour complet de la Terre. Son altitude est inférieure à 1.000 km.
- Actuellement, 17 satellites météorologiques défilants sont opérationnels avec à leur bord des imageurs mais également des sondeurs capables de réaliser avec une grande précision des profils atmosphériques avec un grand nombre de canaux spectraux. Ces mesures permettent d'apporter une information essentielle à la prévision numérique.
- L'Europe possède trois satellites défilants Metop transportant une charge utile de huit instruments d'observation de la Terre : HIRS, AVHRR, GRAS, AMSU-A, GOME-2, MHS, ASCAT et IASI.
- IASI (Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge) est un interféromètre de Michelson capable de fournir avec une très grande précision des sondages atmosphériques en condition de ciel clair. Il réalise un balayage de 30 visées de 4 pixels en 8 secondes sur une ligne au sol d'environ 2.400 km. Il observe le rayonnement infrarouge émis par la surface et l'atmosphère terrestre et mesure la luminance spectrale à l'aide de 8461 canaux.
- On peut déduire des observations de IASI des informations sur les profils de température et d'humidité, la couverture nuageuse, les aérosols, les propriétés de surface et sur la composition chimique de l'atmosphère.

Chapitre 4

Système global de Prévision Numérique du Temps

« Se souvenir et savoir sont deux choses différentes. Se souvenir, c'est garder en mémoire. En revanche, savoir signifie assimiler sans dépendre d'un modèle. »

Lettres à Lucilius de Sénèque

Sommaire

4.1 L'assimilation de données 86
4.1.1 Concepts et formalisme 86
4.1.1.1 Définitions, notations et hypothèses 87
4.1.2 Techniques d'assimilation 90
4.1.2.1 Méthodes statistiques aux moindres carrés - BLUE . . 90
4.1.2.2 Méthodes variationnelles 90
4.2 Le modèle global ARPEGE 95
4.2.1 Dynamique et physique du modèle 95
4.2.2 L'analyse ARPEGE 96
4.2.3 Observations assimilées 98
4.2.3.1 Les observations conventionnelles 98
4.2.3.2 Les observations satellitaires 102
4.3 Étapes vers une analyse objective 107
4.3.1 Modélisation des erreurs 107
4.3.1.1 Les erreurs d'ébauche 107
4.3.1.2 Les erreurs d'observation 108
4.3.2 Diagnostique de Desroziers 110
4.3.3 Contrôle de qualité des observations 110
4.3.3.1 Correction de biais 111
4.3.3.2 Contrôle et filtrage des données - Screening/thinning . 113
4.3.3.3 Suivi des données - Monitoring 114
4.4 Assimilation des données IASI 116
4.4.1 Compression de l'information 117
4.4.1.1 Échantillonnage spatial 117
4.4.1.2 Sélection de canaux 117
4.4.2 Schéma de détection nuageux 118
4.5 L'essentiel du Chapitre 4 120

4.1 L'assimilation de données

4.1.1 Concepts et formalisme

L'Homme a toujours été fasciné par l'étude de l'atmosphère mais ce n'est qu'en 350 av. J.-C. que le terme « *météorologie* » est inventé par Aristote. Dès lors, d'innombrables et célèbres scientifiques n'ont cessé de faire évoluer la connaissance des phénomènes atmosphériques. L'Homme a cherché pendant très longtemps à prévoir le temps à venir, nous laissant comme héritage de nombreux dictons et proverbes. Des démarches plus scientifiques telles que la mise en place de classifications nuageuses et de réseaux météorologiques ont permis une grande avancée dans la prévision du temps. C'est avec la Prévision Numérique du Temps (PNT[1]) que la prévision a subi sa plus grande avancée de l'histoire de la météorologie avec l'idée d'utiliser des modèles numériques. C'est en 1904 que Vilhelm Bjerknes suggéra de considérer la prévision du comportement de l'atmosphère comme un problème physique et mathématique posé en fonction des conditions initiales [Bjerknes, 1904]. Puis, Lewis Fry Richardson, fonde en 1922, la discipline de la PNT par la publication du livre Weather Prediction by Numerical Process [F. Richardson, 1922]. Il faudra cependant attendre 1950 pour que Charney, Fjortoft et Von Neumann réalisent la première prévision numérique du temps par ordinateur.

Les modèles de PNT n'ont cessé de s'améliorer, visant une meilleure représentation de l'atmosphère à travers des équations dynamiques toujours plus précises. Pour réaliser des prévisions météorologiques, les modèles de PNT doivent être initialisés par l'état actuel de l'atmosphère. Déterminer globalement l'état « *vrai* » de l'atmosphère est impossible mais une représentation de l'état le plus probable de l'atmosphère à un instant donné peut être réalisée par le processus d'assimilation de données. Cette technique d'analyse permet de combiner de manière optimale les propriétés de l'évolution du système atmosphérique apportées par le modèle, appelé ébauche, et une séquence d'observations diverses, prenant en compte leurs erreurs associées. L'objectif est de trouver l'état du modèle qui minimise à la fois l'écart aux observations et l'écart à l'ébauche par la minimisation d'une fonction de coût J. La première technique d'assimilation de données a été proposée par Richardson en 1922 avec l'interpolation des observations [Richardson, 1922] suivie par l'analyse de Cressman dans les années 50 avec l'idée de pondération entre l'ébauche et les observations [Cressman, 1959].

Dans les années 70, est introduit le Nudging ou relaxation newtonienne, qui contraint les équations du modèle avec les observations, en leur ajoutant un terme de rappel aux observations [Lakshmivarahan and Lewis, 2013]. Les années 80-90 voient arriver les méthodes dites « *variationnelles* » avec l'interpolation optimale [Phillips, 1982] et les méthode variationnelles à 3 dimensions (3D-Var[2]), qui prennent en compte la distribution spatiale des observations ([Courtier et al., 1998], [Rabier et al., 1998] et [Andersson et al., 1998]). Enfin, dans les années 2000, la méthode variationnelle à 4 dimensions (4D-Var[3]), ajoutant à la distribution spatiale la dimension temporelle, a été mise en place dans la plupart des grands centres internationaux de PNT [Rabier et al., 2000], [Mahfouf and Rabier, 2000] et [Klinker et al., 2000]. Plus récemment, une nouvelle méthode d'assimilation dite « *ensembliste* » est explorée. Celle-ci est basée sur la combinaison entre les observations et des ensembles de prévisions courtes (au lieu d'une seule prévision) obtenues pour des états initiaux légèrement différents les uns des autres. Dans le cadre du 4D-Var, cette approche a été baptisée 4D-En-Var [4] et donne notamment accès à des informations plus fines sur les erreurs des modèles et des observations.

[1] Prévision Numérique du Temps
[2] Assimilation variationnelle tri-dimensionnelle
[3] Assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle
[4] Assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle 4D-Var, dans laquelle on utilise un ensemble de prévisions pour le calcul du gradient, à la place du modèle adjoint

4.1.1.1 Définitions, notations et hypothèses

Il est important d'avoir un formalisme précis d'espace de travail. Une notation internationale en assimilation de données a été introduite par [Ide et al., 1997]. Les concepts et méthodes abordés ici sont issus pour l'essentiel du cours de [Bouttier and Courtier, 1999].

Les vecteurs d'état

L'état du modèle est représenté par une liste de nombres équivalente à une matrice colonne appelée vecteur d'état $\mathbf{x}$. Les vecteurs d'état permettent de représenter une approximation de l'état de l'atmosphère :

- $\mathbf{x}^{\mathrm{t}}$: le vecteur d'état « *réel* » de l'état de l'atmosphère ;
- $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$: le vecteur de l'ébauche (background ou first guess), issu le plus souvent du modèle, d'une prévision antérieure, d'une climatologie ... ;
- $\mathbf{x}^{\mathrm{a}}$: le vecteur d'état analysé caractérisant l'analyse du modèle.

Variable de contrôle

Il n'est pas forcement aisé de résoudre le problème d'analyse dans l'espace complet du vecteur d'état. En effet, il est difficile d'estimer de manière cohérente certains paramètres tels que les nuages, la vitesse verticale, la concentration chimique dans un modèle atmosphérique comparé à certaines variables telles que la température, l'humidité ou le vent horizontal par exemple. C'est ainsi, qu'on préfèrera formuler le problème d'analyse comme la recherche d'une correction ou « *incrément* », de l'ébauche. Cette incrément $\delta\mathbf{x}$ appartient à un sous-espace appelé « *espace de contrôle* ». Soit la « *variable de contrôle* » $\delta\mathbf{x}$ telle que $\mathbf{x}^{\mathrm{a}}$ soit le plus proche possible de $\mathbf{x}^{\mathrm{t}}$:

$$\mathbf{x}^{\mathrm{a}} = \mathbf{x}^{\mathrm{b}} + \delta\mathbf{x} \tag{4.1}$$

Observations et opérateur d'observation

Les observations sont contenues dans le vecteur d'observation $\mathbf{y}$ qui représente l'ensemble des observations disponibles (stations terrestres et maritimes, bouées, avions, radars, radiosondages, instruments satellitaires). Tous les paramètres de l'espace de contrôle ne sont pas forcément observés. De manière générale, les observations ne sont pas des paramètres du modèle et ne sont pas disposées sur la même grille.

Afin de comparer les observations au modèle, on passe de la représentation du modèle vers la représentation des observations à l'aide d'un opérateur d'observation $\mathcal{H}$. L'opérateur d'observation est pour une mesure ponctuelle d'un paramètre du modèle en un point quelconque, l'interpolation verticale et horizontale des champs du modèle au point de mesure. Si $\mathcal{H}$ est linéaire, alors il existe une matrice $\mathbf{H}$ appelée opérateur d'observation linéarisé, tangent linéaire de l'opérateur d'observation ou matrice des jacobiens. Nous avons vu dans la Section 2.4.1.3 qu'il peut contenir les jacobiens et il permet d'obtenir l'écart de luminance spectrale $\delta\mathbf{y}$ obtenu après modification du profil d'entrée $\delta\mathbf{x}$. Chaque élément de $\mathbf{H}$ correspond à la dérivée partielle de la luminance spectrale simulée pour un canal par rapport à un élément du vecteur d'état, dérivée autour de l'ébauche $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$. La Figure 4.1 présente un exemple d'observations projetées dans la représentation du modèle à l'aide de l'opérateur d'observation pour quatre luminances spectrales (canaux) sensibles au CO_2 mesurées par l'instrument IASI[5] associé au profil vertical de température.

[5] Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge

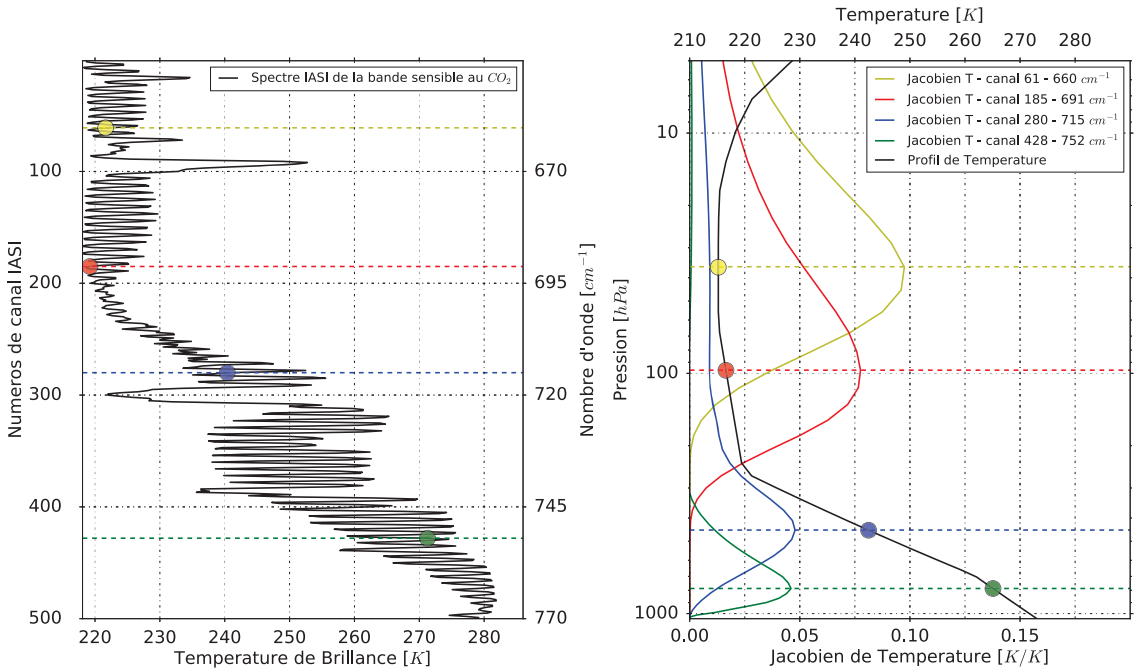


FIGURE 4.1: Illustration schématique d'observations projetées dans la représentation du modèle à l'aide de l'opérateur d'observation. À gauche un spectre IASI en Température de Brillance [K] dans la bande sensible au CO_2 et à droite les jacobiens de température pour 4 canaux IASI (en couleur) et le profil de température [K] associé (en noir).

Les erreurs

La prise en compte des incertitudes liées à la présence d'erreurs inconnues est essentielle en assimilation de données. On retrouve ces erreurs typiquement dans les observations, l'ébauche et l'analyse. Il existe des méthodes permettant de caractériser ces erreurs à l'aide de fonctions de densité de probabilité (PDF[6]) par exemple. En effet, même s'il est difficile de calculer exactement la valeur des erreurs, il est possible de connaître certaines statistiques de la PDF associée. On rappelle ainsi la définition des statistiques nécessaires pour l'estimation de ces erreurs pour un ensemble de i = 1 à n réalisations de variables scalaires (u et v) :

- La covariance : $\mathrm{cov(u,v)} = \frac{1}{\mathrm{n}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}} (\mathrm{u_i} - \bar{\mathrm{u}})(\mathrm{v_i} - \bar{\mathrm{v}})$
- La variance : $\mathrm{var(u)} = \frac{1}{\mathrm{n}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}} (\mathrm{u_i} - \bar{\mathrm{u}})^2$
- La corrélation : $\rho(\mathrm{u,v}) = \frac{\mathrm{cov(u,v)}}{\sigma(\mathrm{u})\sigma(\mathrm{v})}$
- La moyenne : $\bar{\mathrm{u}} = \frac{1}{\mathrm{n}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}} \mathrm{u_i}$
- L'écart-type : $\sigma(\mathrm{u}) = \sqrt{\mathrm{var(u)}}$

Les erreurs d'ébauche

Les erreurs d'ébauche représentent l'écart entre l'ébauche et l'état réel du système $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}} = \mathbf{x}^{\mathrm{b}} - \mathbf{x}^{\mathrm{t}}$. Si l'erreur est nulle, cela implique que l'ébauche est conservée sans tenir compte des observations. Ainsi la matrice de covariance d'erreur d'ébauche est représentée par :

$$\mathbf{B} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}\mathrm{T}}) = \overline{(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}}})(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}}})^{\mathrm{T}}} \tag{4.2}$$

où E représente l'espérance mathématique et l'exposant $^{\mathrm{T}}$ la transposition. Les variances d'erreur d'ébauche sont notées $(\boldsymbol{\sigma}^b)^2$.

[6]Probability Density Function

Les erreurs d'observation

Les erreurs d'observation représentent l'écart entre les observations et l'état correspondant dans l'espace des observations à la réalité $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}} = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{t}})$. Elles contiennent les erreurs du processus de mesure lui-même (erreurs instrumentales), les erreurs de modélisation de l'opérateur $\mathcal{H}$ et les erreurs de représentativité correspondant aux erreurs de discrétisation qui empêchent $\mathbf{x}^{\mathrm{t}}$ d'être une représentation parfaite de la réalité. Si les erreurs d'observation sont nulles, alors cela traduit que les observations sont fidèles à la réalité. La matrice de covariance d'erreur d'observation est représentée par :

$$\mathbf{R} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}\mathrm{T}}) = \overline{(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}}})(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}}})^{\mathrm{T}}} \tag{4.3}$$

où E représente l'espérance mathématique et l'exposant $^{\mathrm{T}}$ la transposition. Les variances d'erreur d'observation sont notées $(\boldsymbol{\sigma}^{o})^2$.

Les erreurs d'analyse

Les erreurs d'analyse représentent l'écart entre l'analyse et l'état réel du système $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}} = \mathbf{x}^{\mathrm{a}} - \mathbf{x}^{\mathrm{t}}$. Une assimilation optimale se traduit par une erreur d'analyse inférieure à l'erreur d'ébauche. Une mesure de l'amplitude $\overline{||\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}}}||}$ est fournie par la trace de la matrice de covariance d'erreur d'analyse $\mathbf{A}$, $\mathrm{Tr}(\mathbf{A}) = \overline{||\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}}}||^2}$:

$$\mathbf{A} = \mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}\mathrm{T}}) = \overline{(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}}})(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{a}}})^{\mathrm{T}}} \tag{4.4}$$

où E représente l'espérance mathématique et l'exposant ^{T} la transposition. Les variances d'erreur d'analyse sont notées $(\boldsymbol{\sigma}^{a})^2$.

Les hypothèses

Le concept d'assimilation de données repose également sur des hypothèses [Daley, 1994], [Lorenc, 1986] et [Ghil, 1989] telles que :

- la linéarisation de l'opérateur d'observation : les variables de l'opérateur d'observation au voisinage de l'ébauche sont supposées linéaires ; pour tout $\mathbf{x}$ suffisamment proche de $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$, alors $\mathcal{H}(\mathbf{x}) - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{b}}) = \mathbf{H}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}})$.
- les erreurs non triviales : Les matrices de covariances d'erreur d'ébauche $\mathbf{B}$ et d'observation $\mathbf{R}$ sont définies positives.
- des ébauches et observations non biaisées : $\mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{b}}) = \mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{o}}) = 0$.
- des erreurs d'ébauche et d'observation non biaisées : $\overline{\mathbf{x}^{\mathrm{b}} - \mathbf{x}^{\mathrm{t}}} = \overline{\mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{t}})} = 0$.
- des erreurs d'ébauche et d'observation décorrélées : $\overline{(\mathbf{x}^{\mathrm{b}} - \mathbf{x}^{\mathrm{t}})(\mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{t}}))^{\mathrm{T}}} = 0$.
- Une analyse linéaire : on cherche une analyse définie par des corrélations de l'ébauche qui dépendent linéairement des écarts entre observations et ébauche.
- Une analyse optimale : on cherche un état analysé aussi proche que possible de l'état réel au sens de la moyenne quadratique, soit une estimation de la variance d'erreur minimale.

4.1.2 Techniques d'assimilation

4.1.2.1 Méthodes statistiques aux moindres carrés - BLUE

Dans les grands centres de PNT, deux méthodes d'assimilation de données sont communément utilisées. L'une d'elles est une technique linéaire d'analyse objective, appelée BLUE[7]. Le meilleur estimateur linéaire non-biaisé cherche à prédire une correction linéaire de l'état du modèle à partir des observations. Ainsi le meilleur estimateur de $\mathbf{x}$ qui minimise la variance des erreurs d'analyse est donné par :

$$\mathbf{x}^{\mathrm{a}} = \mathbf{x}^{\mathrm{b}} + \mathbf{K}\mathbf{d}_{\mathrm{b}}^{\mathrm{o}} \tag{4.5}$$

dans lesquelles l'opérateur $\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1}$ s'appelle la matrice de gain. Pour tout $\mathbf{K}$, la matrice de covariance d'erreur d'analyse est :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}(\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})^{\mathrm{T}} + \mathbf{K}\mathbf{R}\mathbf{K}^{\mathrm{T}} \tag{4.6}$$

où $\mathbf{I}$ est la matrice identité. Si $\mathbf{K}$ est le gain optimal au sens des moindres carrés, la matrice de covariance d'erreur d'analyse vaut alors $\mathbf{A} = (\mathbf{I}$ - $\mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}$. L'analyse BLUE optimale est obtenue par solution du problème d'optimisation variationnelle. Cette méthode implique de connaître les covariances d'ébauche et d'analyse permettant de trouver les équations d'analyse par la minimisation des variances d'erreur d'analyse. Ceci conduit au calcul direct de la matrice de gain $\mathbf{K}$. Or cette matrice est très grande et donc coûteuse en temps de calcul, limitant ainsi l'utilisation de cette technique.

Pour résoudre le système linéaire sous-jacent, cette méthode doit restreindre le nombre d'observations utilisées pour l'analyse d'un volume donné de l'espace. De plus, le lien entre variable analysée et observations n'est plus nécessairement linéaire, en particulier dans le cadre des observations satellitaires.

Il existe une approche dite « variationnelle » qui permet de traiter globalement l'ensemble des observations disponibles et de mieux considérer les observations satellitaires [Eyre, 1989]. En effet, comme nous l'avons vu dans le Chapitre 2, le rayonnement mesuré par les instruments satellitaires est relié par l'équation non-linéaire du transfert radiatif aux variables analysées. Cette méthode repose sur la minimisation d'une fonction dite « coût » c'est à dire que l'on minimise une fonction quadratique qui quantifie les écarts aux différentes sources d'information (observations et ébauche), chacune d'elles étant pondérée par son écart-type d'erreur [Jazwinski, 1970].

Une fois la fonction de coût définie, le problème variationnel est complètement défini et sa solution existe. Il faut ainsi mettre en œuvre des techniques pour la trouver comme des méthodes de descente, demandant des calculs de gradient ou de « variations » de la fonction pour être mises en place, d'où le nom de méthodes variationnelles.

4.1.2.2 Méthodes variationnelles

En théorie, le problème d'assimilation de données repose sur des erreurs inconnues. La solution repose donc sur des statistiques de ces erreurs. Pour des raisons évidentes de simplification, on pose certaines hypothèses, comme citées précédemment. On suppose qu'elles suivent une loi gaussienne, qu'elles sont non-biaisées ou encore non corrélées entre elles.

[7] Best Linear Unbiased Estimator

Pour estimer l'état le plus probable de l'atmosphère, on cherche à minimiser une fonction de coût. [Lorenc, 1986] décrit qu'il est possible d'utiliser le concept de probabilité conditionnelle où l'on définit par $\mathrm{p}(\mathbf{x})$ la densité de probabilité « a priori » de l'état de l'atmosphère, pouvant s'écrire comme la probabilité d'un écart à l'ébauche $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$:

$$\mathrm{p}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi|\mathbf{B}|}}\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})} \tag{4.7}$$

où $|\mathbf{B}|$ représente le déterminant de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche. On définit également la densité de probabilité des observations $\mathbf{y}$ connaissant l'état de l'atmosphère $\mathbf{x}$ par :

$$\mathrm{p}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi|\mathbf{R}|}}\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathcal{H}(\mathbf{x}))^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}-\mathcal{H}(\mathbf{x}))} \tag{4.8}$$

avec $|\mathbf{R}|$ le déterminant de la matrice de covariance d'erreur d'observation.

Ayant une information « a priori » de l'état de l'atmosphère, la recherche de l'analyse revient à chercher l'état de l'atmosphère le plus probable connaissant les observations $\mathbf{y}$. Les travaux de [Bayes et al., 1763] et [De Laplace, 1774] permettent de trouver la solution de la probabilité conditionnelle $\mathrm{p}(\mathbf{y}|\mathbf{x})$:

$$\mathrm{p}(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{\mathrm{p}(\mathbf{y}|\mathbf{x})\mathrm{p}(\mathbf{x})}{\mathrm{p}(\mathbf{y})} \propto \mathrm{p}(\mathbf{y}|\mathbf{x})\mathrm{p}(\mathbf{x}) \tag{4.9}$$

où $\mathrm{p}(\mathbf{y})$ est la densité de probabilité des observations. Ainsi l'état le plus probable de l'atmosphère est celui qui maximise la densité de probabilité. Les équations 4.7 et 4.8 permettent de rechercher l'état $\mathbf{x}$ qui minimise la partie négative de l'exponentielle.

Assimilation variationnelle tri-dimensionnelle - 3D-Var

Cette approche variationnelle définit une fonction de coût $J(\mathbf{x})$ que l'on cherche à minimiser et qui mesure la distance de l'état de l'atmosphère par rapport à l'ébauche et aux observations. Chacune des distances fait intervenir des pondérations liées aux erreurs de chacune des sources d'information. On cherche un état $\mathbf{x}$ tel que la distance entre la trajectoire du modèle issue de $\mathbf{x}$ et les observations soit minimale :

$$\mathrm{J}(\mathbf{x}) = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})}_{\mathrm{J_b}(\mathbf{x})} + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathcal{H}(\mathbf{x}))^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}-\mathcal{H}(\mathbf{x}))}_{\mathrm{J_o}(\mathbf{x})} \tag{4.10}$$

où J_b est le terme d'écart à l'ébauche et J_o est le terme d'écart aux observations.

L'assimilation de données variationnelle requiert un certain degré de linéarité de $\mathcal{H}$ au voisinage de l'ébauche afin de minimiser la fonction de coût. Dans l'hypothèse où l'écart entre $\mathbf{x}$ et $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$ est suffisamment petit, on linéarise l'opérateur d'observation autour de l'ébauche :

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{b}}) + \mathbf{H}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}}) \tag{4.11}$$

On introduit le vecteur innovation $\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{b}} = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{b}})$ et la fonction de coût peut alors s'écrire :

$$\mathrm{J}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}}) + \frac{1}{2}(\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{b}} - \mathbf{H}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}}))^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{b}} - \mathbf{H}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})) \tag{4.12}$$

Cette écriture nous permet d'introduire la formulation incrémentale de l'assimilation explicitée par [Courtier et al., 1994]. On minimise ainsi la fonction de coût non plus par rapport à $\mathbf{x}$ mais par rapport à l'incrément $\delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}}$:

$$\mathrm{J}(\delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\delta\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\delta\mathbf{x}) + \frac{1}{2}(\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{b}} - \mathbf{H}\delta\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{b}} - \mathbf{H}\delta\mathbf{x}) \tag{4.13}$$

La formulation incrémentale permet une forte réduction du temps de calcul car on ne résout plus le problème sur des vecteurs complets mais sur la variation à ajouter aux champs de l'ébauche pour obtenir l'analyse. La minimisation de J peut ainsi être effectuée dans un sous-espace de dimension plus petite que l'espace modèle. La variable de contrôle utilisée lors de la minimisation devient le vecteur d'incrément par rapport à l'ébauche.

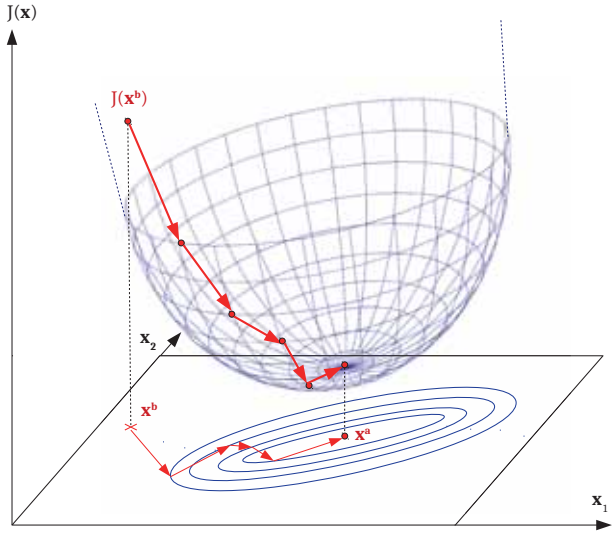


FIGURE 4.2: Représentation schématique de la minimisation variationnelle de la fonction de coût dans un espace à deux variables.

Le meilleur estimateur de l'état de l'atmosphère est alors obtenu en cherchant les zéros du gradient de J par rapport à $\delta\mathbf{x}$. La minimisation s'effectue par une méthode de descente dans la direction du gradient. La Figure 4.2 présente un exemple du processus de minimisation de J dans un espace à deux variables du modèle où la fonction quadratique a la forme d'un paraboloïde. Les flèches rouges sur la Figure 4.2 représentent les itérations successives du processus de minimisation qui font évoluer la variable de contrôle $\delta\mathbf{x}$. La valeur de l'état $\delta\mathbf{x}$ à l'itération n s'écrit en fonction de sa valeur à l'itération n-1 et de son gradient $\nabla \mathrm{J}(\delta\mathbf{x}_{n-1})$ tel que :

$$\delta\mathbf{x}_{\mathrm{n}} = \delta\mathbf{x}_{\mathrm{n-1}} + \gamma_{\mathrm{n}} \nabla \mathrm{J}(\delta\mathbf{x}_{\mathrm{n-1}}) \tag{4.14}$$

où γ_n représente le pas de descente qui minimise la fonctionnelle dans la direction de descente. Lorsque $\mathcal{H}$ est linéaire, le gradient est égal à :

$$\nabla \mathrm{J}(\delta\mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1}\delta\mathbf{x} + \mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{d}_{\mathrm{b}}^{\mathrm{o}} - \mathbf{H}\delta\mathbf{x}) \tag{4.15}$$

L'approximation tient ici dans le fait que seul un nombre fini (et faible) d'itérations sera réalisé dans l'algorithme de minimisation. En pratique, on utilise l'ébauche $\mathbf{x}^b$ comme point de départ de la minimisation. On utilise ensuite un algorithme de type Newton pour l'optimisation [Gilbert and Lemaréchal, 1989].

Les avantages de l'approche 3D-Var par rapport au BLUE sont multiples, comme l'absence de la matrice de gain, la possibilité de minimisation résolue à grande échelle, ainsi que l'utilisation d'un grand nombre d'observations de différent type. De plus, seule la linéarité de $\mathcal{H}$ au voisinage de $\mathbf{x}$ est exigée. Le modèle à aire limitée AROME[8] à Météo-France possède son propre système d'assimilation 3D-Var basé sur l'approche incrémentale décrite précédemment. La minimisation s'effectue dans un cadre où la dimension temporelle est négligée. On considère ainsi que toutes les observations assimilées ont été mesurées au centre de la « fenêtre d'assimilation[9] ». Cela permet d'économiser du temps de calcul.

[8] Applications de la Recherche à l'Opérationnel à Méso-Echelle
[9] Temps durant lequel des observations sont disponibles à différents instants

Assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle - 4D-Var

L'assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle 4D-Var est simplement l'extension temporelle du 3D-Var. Cette méthode ne vise pas à obtenir l'état optimal à un instant donné, mais la trajectoire optimale sur une fenêtre de temps donnée. Les observations sont donc prises en compte aussi bien dans leur distribution spatiale que temporelle. Le 4D-Var apporte un aspect temporel en plus car il propage l'information apportée par les observations à l'instant initial de la fenêtre d'assimilation. De ce fait, l'analyse obtenue doit permettre au modèle d'évolution d'avoir la trajectoire la plus proche possible de l'ensemble des observations utilisées (Figure 4.3). En pratique, cette période d'assimilation est de 6 h dans le modèle global ARPEGE[10] de Météo-France et 12 h dans le modèle global IFS[11] du CEPMMT[12].

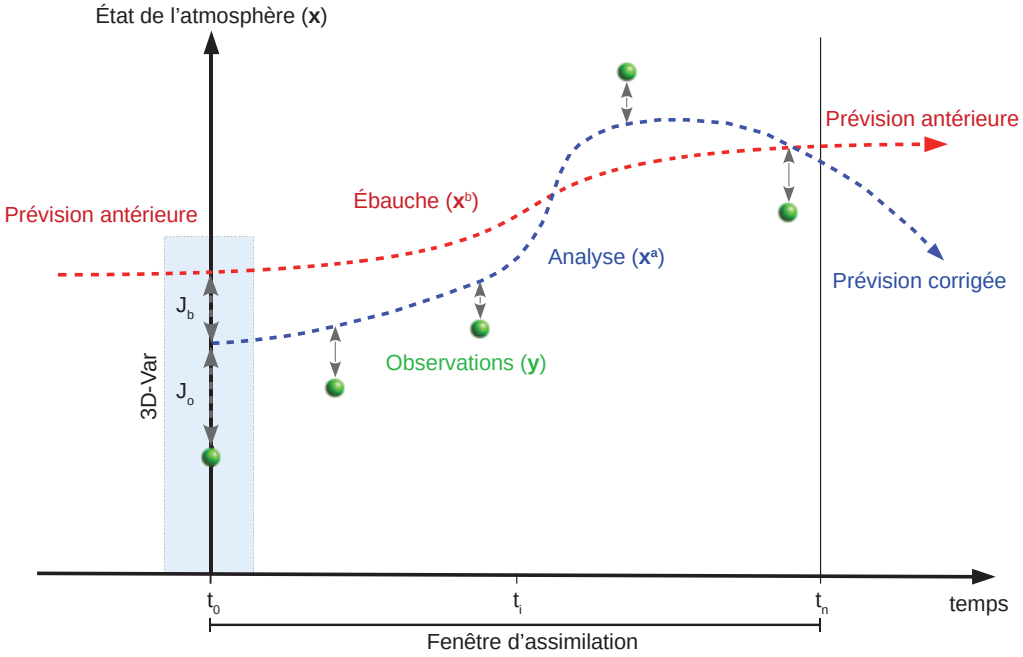


FIGURE 4.3: Représentation schématique de l'assimilation 4D-Var. On cherche à obtenir la trajectoire analysée du modèle (courbe en tireté bleu) qui soit à la fois proche des observations (cercles verts) et de l'ébauche fournie par une prévision antérieure (courbe en tiretés rouges).

Si la fenêtre d'assimilation est segmentée en n intervalles de temps, alors l'équation 4.10 peut s'écrire :

$$\mathrm{J}(\mathbf{x}) = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})}_{\mathrm{J_b}(\mathbf{x})} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}}(\mathbf{y}_{\mathrm{i}}-\mathcal{H}_{\mathrm{i}}[\mathbf{x}(\mathrm{t}_{\mathrm{i}})])^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_{\mathrm{i}}^{-1}(\mathbf{y}_{\mathrm{i}}-\mathcal{H}_{\mathrm{i}}[\mathbf{x}(\mathrm{t}_{\mathrm{i}})])}_{\mathrm{J_o}(\mathbf{x})} + \mathrm{J_c}(\mathbf{x}) \tag{4.16}$$

où n est le nombre d'instants t_i pour lesquels les observations sont présentes, $\mathbf{y}_i$ les observations pour l'intervalle i, $\mathcal{H}_i$ l'opérateur d'observation pour l'intervalle i, $\mathbf{x}(t_i)$ l'état du modèle au temps i et $\mathbf{R}_i$ la matrice de covariance d'erreur d'observation pour l'intervalle i. J_c est le terme de contrainte dynamique sur l'analyse (ou de pénalisation de la fonction de coût). Il est utilisé pour assurer un équilibre optimal aux incréments d'analyse. Il permet également de contrôler l'amplitude des ondes de gravité et de filtrer l'analyse afin d'obtenir des champs plus lisses.

[10] Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle
[11] Integrated Forecasting System
[12] Centre Européen de Prévision Météorologique à Moyen Terme

Pour un instant donné i, l'état du modèle $\mathbf{x}(t_i)$ résulte de la propagation de son état depuis l'instant initial $\mathrm{t_0}$ jusqu'à l'instant t_i par l'opérateur modèle de prévision « a priori » non linéaire $\mathcal{M}_{\mathrm{t_0}\rightarrow\mathrm{t_i}}$ tel que :

$$\mathbf{x}(\mathrm{t_i}) = \mathcal{M}_{\mathrm{t_0}\rightarrow\mathrm{t_i}}[\mathbf{x}(\mathrm{t_0})] \tag{4.17}$$

Le 4D-Var devient ainsi un problème d'optimisation contraint non linéaire qu'il est non trivial de résoudre. Heureusement, des hypothèses simplificatrices (causalité, tangent linéaire) permettent de simplifier le problème de minimisation général rendant la résolution numérique plus accessible. Cette propriété propre au 4D-Var représente un avantage certain, notamment dans l'assimilation des observations satellitaires ayant une distribution temporelle disparate, ce qui fait du 4D-Var un système d'assimilation robuste pour les modèles globaux et très utilisé dans la plupart des grands centres de PNT.

De la même manière que pour le 3D-Var, on introduit l'approche incrémentale $\delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}}$. La variable de contrôle utilisée pour réaliser la minimisation devient alors le vecteur d'incrément aux conditions initiales et la formulation incrémentale de la fonction de coût du 4D-Var devient :

$$\mathrm{J}(\delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\delta\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\delta\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}}\left(\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{bi}} - \mathbf{H}_{\mathrm{i}}[\delta\mathbf{x}(\mathrm{t_i})]\right)^{\mathrm{T}}{\mathbf{R}_{\mathrm{i}}}^{-1}\left(\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{bi}} - \mathbf{H}_{\mathrm{i}}[\delta\mathbf{x}(\mathrm{t_i})]\right) \tag{4.18}$$

où $\mathbf{d}^{\mathrm{o}}_{\mathrm{bi}}$ est l'innovation au temps i, $\mathbf{H}_i$ est le l'opérateur tangent linéaire linéarisé au voisinage de l'ébauche $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$ pour l'intervalle i, $\delta\mathbf{x}(\mathrm{t_i})$ est l'incrément d'analyse aux instants t_i. Une nouvelle fois l'approche incrémentale nous permet de réduire le coût de calcul. En effet, dans le cadre d'une assimilation 4D-Var classique, pour chaque itérations de minimisation de la fonction de coût, l'intégration du modèle direct non linéaire (NL) et de son adjoint linéarisé est fortement coûteuse en temps de calcul. Heureusement, l'approche incrémentale rend la fonction de coût quadratique, permettant une méthode en descente et l'identification d'un minimum. Cette approche pour l'assimilation variationnelle a permis de rendre le 4D-Var applicable de manière opérationnelle pour la PNT.

4.2 Le modèle global ARPEGE

Une prévision météorologique résulte d'un ensemble de quatre étapes fondamentales : l'observation de l'ensemble du globe 24 heures sur 24, 7 jours sur 7, l'assimilation de données comme explicitée précédemment, la modélisation de l'évolution de l'état de l'atmosphère et l'expertise humaine, indispensable pour analyser des quantités impressionnantes et complexes d'information et garantir ainsi la sécurité des personnes et des biens contre des phénomènes météorologiques dangereux. Dans cette partie nous allons nous attarder sur la modélisation de l'évolution de l'état de l'atmosphère à l'échelle globale.

À Météo-France, le modèle ARPEGE est le modèle global de PNT utilisé en opérationnel depuis le 06 décembre 1993. Le modèle fait partie intégrante du logiciel ARPEGE-IFS conçu, développé et maintenu en coopération avec le CEPMMT. Il possède une grille à maille variable qui couvre l'ensemble du globe et avec une résolution plus fine sur la métropole. Il permet de prévoir les évolutions des phénomènes atmosphériques de grande échelle (anticyclones, dépression, etc.) avec des prévisions jusqu'à 4 jours d'échéance sur les zones d'intérêt. Le système de PNT global ARPEGE figure parmi les premiers sur le rang international. Une grande partie des informations explicitées ici sont issues du groupe de Contrôle Monitoring Prévisibilité et Adaptations Statistiques (COMPAS) de la Direction des Opérations pour la Prévision (DirOp) de Météo-France.

4.2.1 Dynamique et physique du modèle

L'analyse issue de l'assimilation de données est l'état initial des modèles calculant l'évolution des paramètres météorologiques sur une grille à trois dimensions qui représente l'atmosphère. Ces modèles s'appuient sur diverses lois physiques telles que les lois de la mécanique des fluides, les lois des changements d'état de l'eau, la turbulence, le rayonnement ou encore les différentes interactions avec la surface, les océans, la composition atmosphérique, l'espace ...

ARPEGE est un modèle spectral hydrostatique représenté par des harmoniques sphériques correspondant à des fonctions invariantes par rotation permettant ainsi de décomposer un signal en ses diverses échelles. En pratique, le nombre d'ondes utilisé pour représenter un signal (troncature spectrale) est limité. La résolution d'un modèle spectral est souvent notée TXLYcC où X représente la troncature, Y le nombre de niveaux verticaux et C, le facteur d'étirement de la grille. ARPEGE a une troncature triangulaire T1198 avec un facteur d'étirement de C=2.2 dont le pôle d'étirement est situé à 46.5° de latitude nord et 2.6° de longitude est. La résolution horizontale sur la grille variable varie de T2635 sur la France avec une distance d'environ 7.5 km entre deux points de grille à T544 sur la Nouvelle-Zélande avec une distance d'environ 36 km entre deux points de grille (5 km à 24 km en juillet 2019). La verticale est décomposée en 105 niveaux verticaux dits « *hybrides* » de type « *sigma* » (Figure 4.4).

Pour faciliter l'exploitation des simulations issues du modèle, celles-ci sont interpolées horizontalement et verticalement sur 6 grilles régulières : EURAT01 à 0.1° par pas horaire, ATOURX01 à 0.1°, GLOB05 à 0.5° et GLOB025 à 0.25° par pas de 3 h, EUROC25 à 0.25° de 0 à 51 h par pas de 3 h puis par pas de 6 h et le domaine FABEC0125 à 0.125° disponible pour les quatre réseaux de 0 à 48 h d'échéance par pas de 1 heure.

Les variables (pronostiques) d'état du modèle pour la partie atmosphérique sont les composantes zonales (u) et méridiennes (v) du vent, la température (T), l'humidité spécifique (q), l'eau liquide (q_l), l'eau solide (q_i), la pluie (q_r), la neige (q_s), l'énergie turbulente sous-maille (ect), ainsi que les variables caractérisant les conditions de surface et du sol superficiel, etc.

ARPEGE utilise également des climatologies mensuelles pour décrire les propriétés physio-graphiques du sol et de la végétation, des aérosols ou encore de l'ozone.

Les paramétrisations physiques représentent l'influence des processus physiques et des phénomènes sous-mailles sur l'évolution des variables pronostiques du modèle. Le modèle traite la physique en chaque point de grille comme la thermodynamique, le rayonnement, la couche limite de surface, les ondes de relief, les précipitations résolues par le modèle et sous-maille, la modélisation du sol avec le schéma de surface SURFEX[13], l'interface océan/atmosphère avec le schéma ECUME[14], les champs de surface, l'orographie ou encore les nuages.

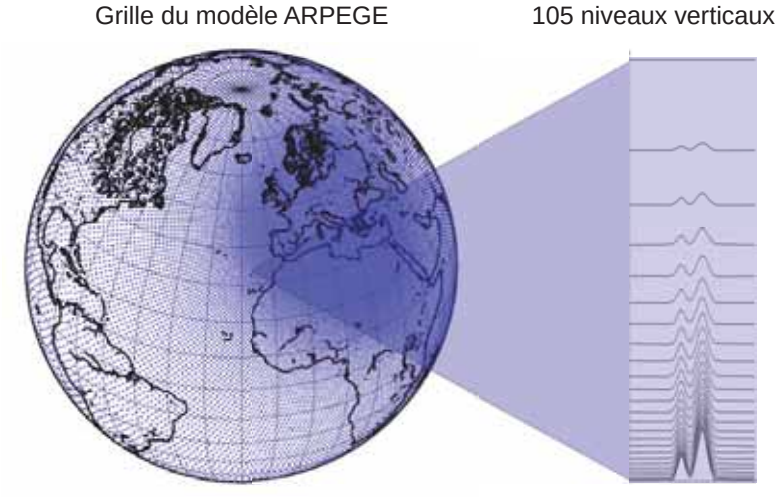


FIGURE 4.4: Représentation schématique de la résolution horizontale de la maille variable sur le globe et de la résolution verticale sur 105 niveaux du modèle global ARPEGE.

4.2.2 L'analyse ARPEGE

Le système global de PNT ARPEGE repose sur une assimilation 4D-Var dans sa version multi-incrémentale comprenant deux minimisations successives. Ces minimisations sont réalisées à basse résolution et sans étirement, respectivement T149L105c1.0 et T399L105c1.0 et utilisent des paramétrisations physiques simplifiées. Les innovations sont calculées à la résolution du modèle T1198L105c2.2. Les incréments fournis sont interpolés dans l'espace T1198L105c2.2 et ajoutés à l'ébauche pour constituer l'analyse d'altitude.

En surface, l'analyse de la température au sol et du réservoir d'eau du sol utilise l'interpolation optimale des champs de couche limite. Les champs analysés à 2 mètres sont issus de l'interpolation des analyses entre le niveau vertical le plus bas du modèle et le sol. L'analyse de la température de surface de la mer est faite par interpolation optimale des observations des bouées sur l'analyse OSTIA[15].

Les observations sont sélectionnées par une méthode d'écrémage dite « screening » qui consiste à rejeter les observations trop éloignées de l'ébauche et à réaliser un échantillonnage spatial des observations sélectionnées. Les observations sont regroupées par intervalle de 30 minutes pour le schéma d'assimilation 4D-Var.

[13] SURFace EXternalisée
[14] Exchange Coefficients from Unified Multi-campaigns Estimates
[15] Operational Sea Surface Temperature and Ice Analysis

La fenêtre temporelle pour l'analyse d'altitude est de ± 3 heures autour de l'heure de référence pour les observations en altitude et les paramètres vent à 10 mètres sur mer et pression de surface des observations de surface. Pour l'analyse de surface, la fenêtre temporelle est de ± 30 minutes autour de l'heure de référence pour les paramètres température et humidité relative à 2 mètres. Deux cycles opérationnels d'analyses-prévisions interagissent à Météo-France :

- **Le cycle de référence à coupure longue** : (Figure 4.5 au-dessus de la ligne jaune) Toutes les 6 heures, on réalise une assimilation avec une coupure longue pour les observations valables pour ce réseau. C'est à dire on laisse un délai de 4 à 5 heures selon les réseaux entre la fin de la fenêtre d'assimilation et le début de l'assimilation afin d'attendre les observations pouvant arriver en retard. On part de l'ébauche donnée par la prévision à 6 h d'échéance démarrant de l'analyse du réseau précédent de ce même cycle de référence. On réalise ensuite une nouvelle prévision 6 h à partir de cette analyse qui servira d'ébauche au réseau suivant. Ce cycle de référence sert de base pour le cycle de production fournissant les prévisions à longue échéance.

- **Le cycle de production** : (Figure 4.5 en dessous de la ligne jaune) Toutes les 6 h, pour fournir les prévisions longues en temps voulu on réalise une assimilation avec une coupure plus ou moins courte selon l'heure du réseau avec les observations valables pour ce réseau. L'analyse résultante intègre moins d'observations que celle réalisée plus tard pour le cycle de référence. On réalise, ensuite, une prévision de durée variable selon l'heure du réseau à partir de cette analyse.

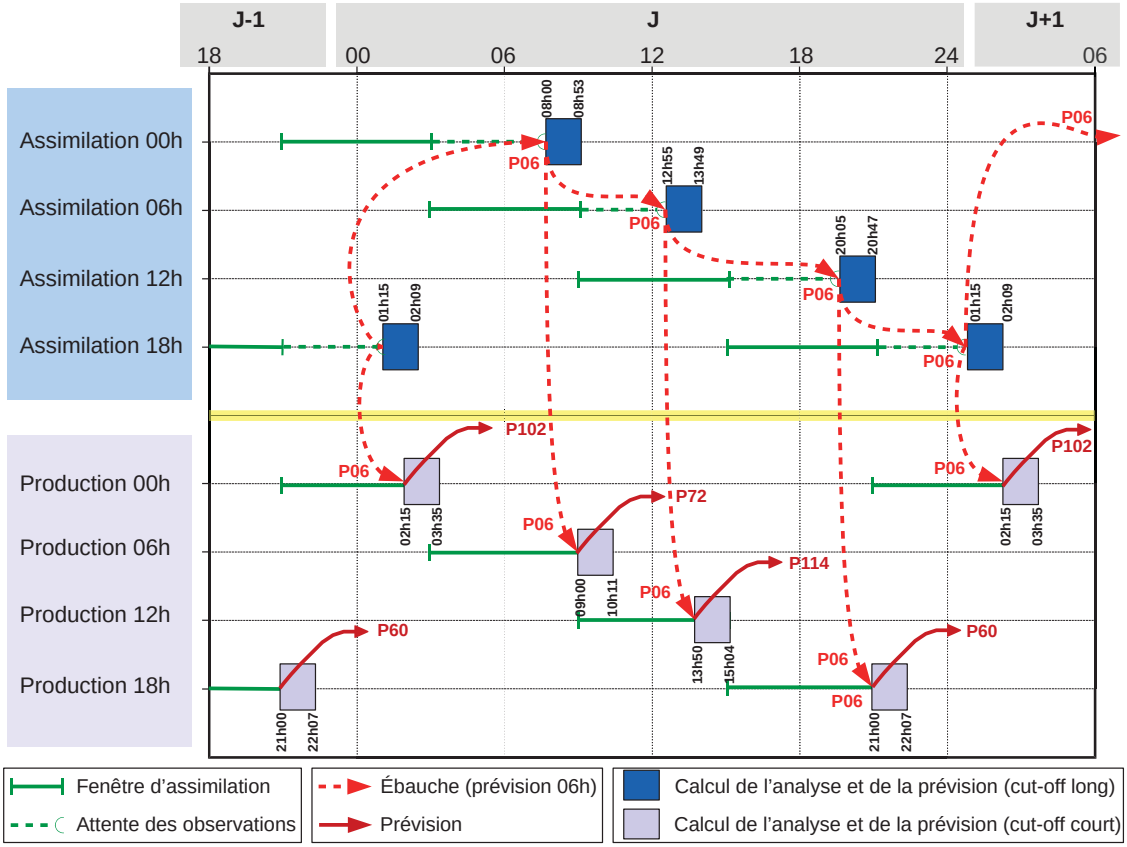


FIGURE 4.5: Représentation schématique de la chaîne opérationnelle pour ARPEGE.

4.2.3 Observations assimilées

Le système de PNT global ARPEGE utilise des observations conjointement aux ébauches provenant du modèle pour décrire l'atmosphère, servant ainsi d'état initial à une prévision. Ces observations sont de différentes natures et n'ont cessé d'évoluer depuis le premier thermoscope imaginé par Philon de Byzance en 280 av. J.-C., ancêtre du thermomètre. On distingue deux familles d'observations ; les observations conventionnelles avec des stations terrestres et maritimes, avions, bouées, radiosondages, etc., utilisées de longue date et les observations satellitaires mesurées à l'aide d'instruments embarqués à bord de plate-formes géostationnaires ou de satellites défilants. La force des modèles globaux des grands centres internationaux de PNT est que les données issues de ces observations sont échangées en temps réel entre centres météorologiques et fournies par les agences spatiales. Ces échanges permettent d'effectuer des prévisions météorologiques très rapidement. D'autres données non opérationnelles sont utilisées pour valider les modèles. Le CNRM collabore étroitement avec des agences spatiales telles que le CNES, ESA[16] et EUMETSAT[17] et participe aux services tel que le Numerical Weather Prediction Satellite Application Facility d'EUMETSAT en collaboration avec le CEPMMT.

4.2.3.1 Les observations conventionnelles

Les observations conventionnelles sont des mesures très fines dont la résolution est souvent inférieure aux phénomènes météorologiques décrits par les modèles. Ces observations sont néanmoins capitales car elles mesurent souvent les variables météorologiques désirées de manière directe (température, humidité, pression, vents).

Les dernières décennies ont vu un développement continu des mesures effectuées à partir des avions commerciaux (température et vent). La Figure 4.6 présente cette évolution avec en couleur verte, l'évolution du cumul mensuel d'observations par les avions entre 2002 et 2018.

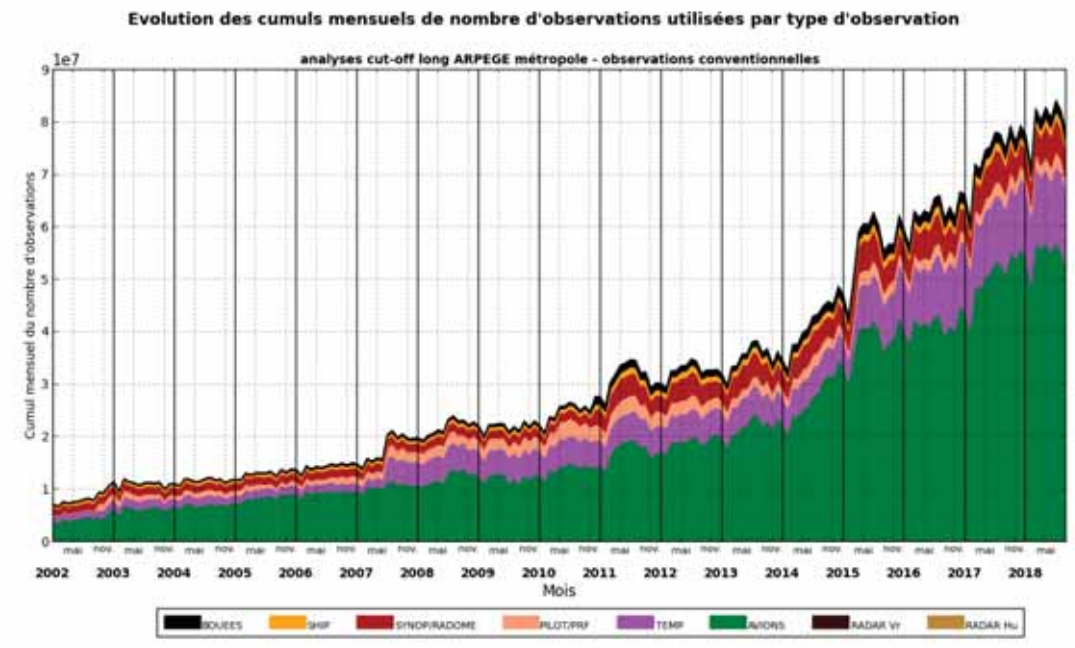


FIGURE 4.6: Représentation de l'évolution du nombre d'observations conventionnelles utilisées dans le modèle global ARPEGE depuis 2002.

[16]European Space Agency
[17]European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites

Les données d'avion sont maintenant aussi importantes que les radiosondages pour observer la troposphère et la zone de transition entre la troposphère et la stratosphère nommée UTLS[18]. On retrouve également sur la Figure 4.6, l'évolution du nombre de données de radiosondages (violet), des données issues des stations au sol (rouge) ou encore des bouées (noir) utilisées dans ARPEGE.

La liste (non-exhaustive) des principales observations conventionnelles utilisées dans le modèle global ARPEGE est la suivante :

- **SYNOP/SHIP** : données issues de stations d'observations terrestres (**SYNOP** ~ 22.000 = *nombre moyen d'observation conservé à chaque réseau d'assimilation*) ou à bord de navire (**SHIP** ~ 3.500) comprenant des mesures de température, d'humidité, de vent en surface et de température de surface de la mer le cas échéant. La Figure 4.7.a présente un exemple de couverture de ces stations sur le globe. On y remarque une répartition hétérogène avec une majorité des stations présentent dans l'hémisphère nord, au Brésil et en Australie.

- **BUOY** ~ 10.000 : données issues de bouées fixes ou dérivantes instrumentées pour fournir des données atmosphériques et sur l'océan superficiel (température, humidité, pression, vent, température de la surface de la mer, salinité). La Figure 4.7.b présente un exemple de la répartition de ces bouées sur l'ensemble des mers et océans. La disposition des bouées est globalement homogène sur l'ensemble des mers et océans.

- **AIREP**, **AMDAR**, **ACAR** ~ 180.000 : données aéroportées mesurant le vent et la température à différentes phases de vol d'un avion. La Figure 4.8.a présente un exemple de la répartition de ces données cohérente avec les trajectoires des principales lignes commerciales.

- **PILOT/PROFILEUR DE VENT** : données issues de ballons (**PILOT** ~ 200) ou de radars vent (**PROFILEUR DE VENT**) mesurant le vent à différents niveaux atmosphériques. La Figure 4.8.b présente un exemple de leurs répartitions spatiales sur le globe avec un maximum de profileur situés en Europe.

- **TEMP** ~ 600 : données issues de ballons-sondes mesurant la température, l'humidité, le vent, le géopotentiel et parfois l'ozone à différents niveaux de l'atmosphère. Un radiosondage peut être lancé à partir d'un navire (**TEMP-SHIP**), d'un avion (dropsonde) (**TEMP-DROP**) ou une station terrestre fixe ou mobile (**TEMP-MOBILE**).

- **GPS sol** ~ 23.000 : observations provenant de stations terrestres réceptionnant le signal GPS satellite.

[18] Upper Troposphere Lower Stratosphere

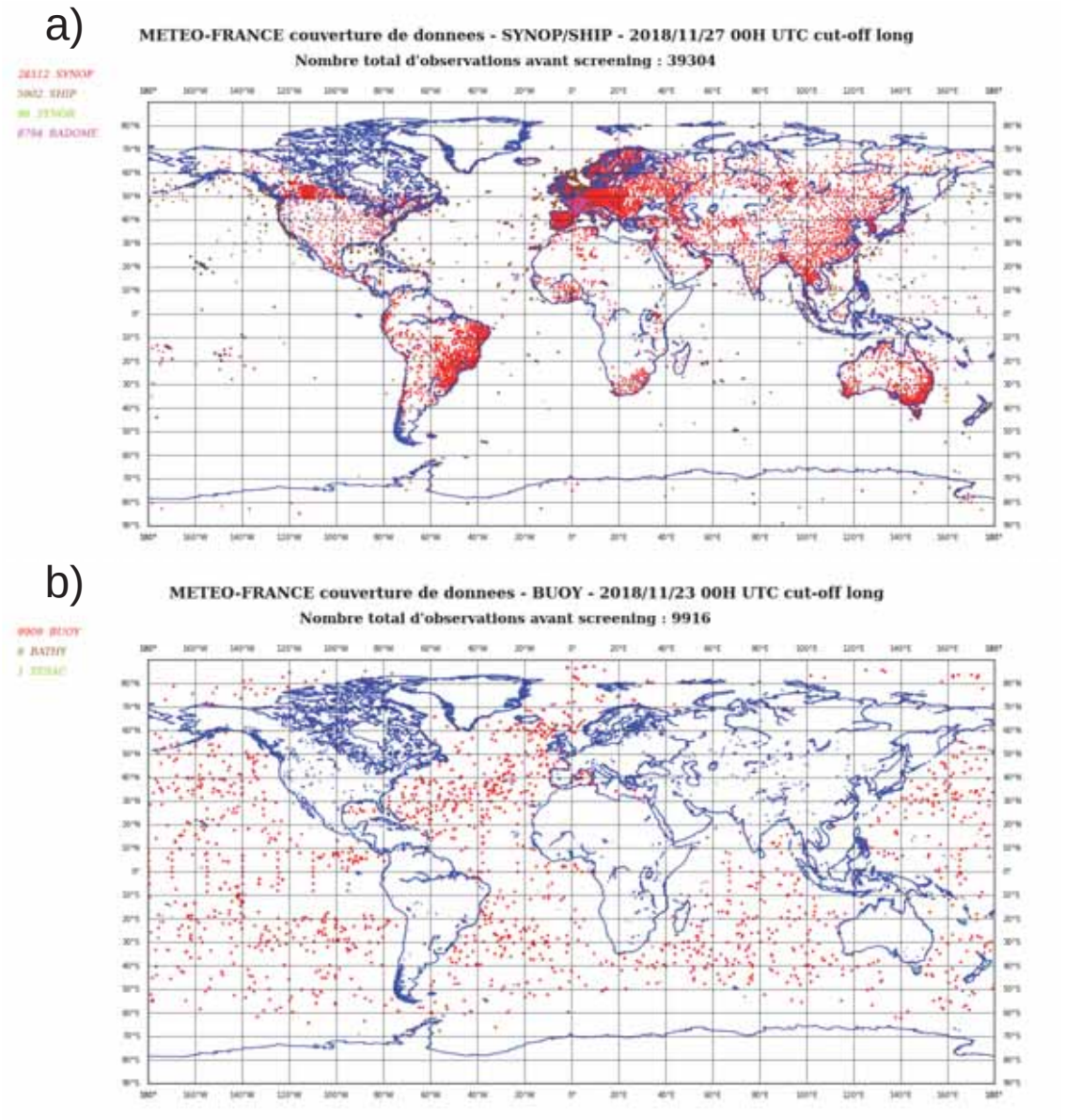


FIGURE 4.7: Cartes du pointage d'observations conventionnelles assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des stations au sol et à bord de navires (a) et des bouées (b).

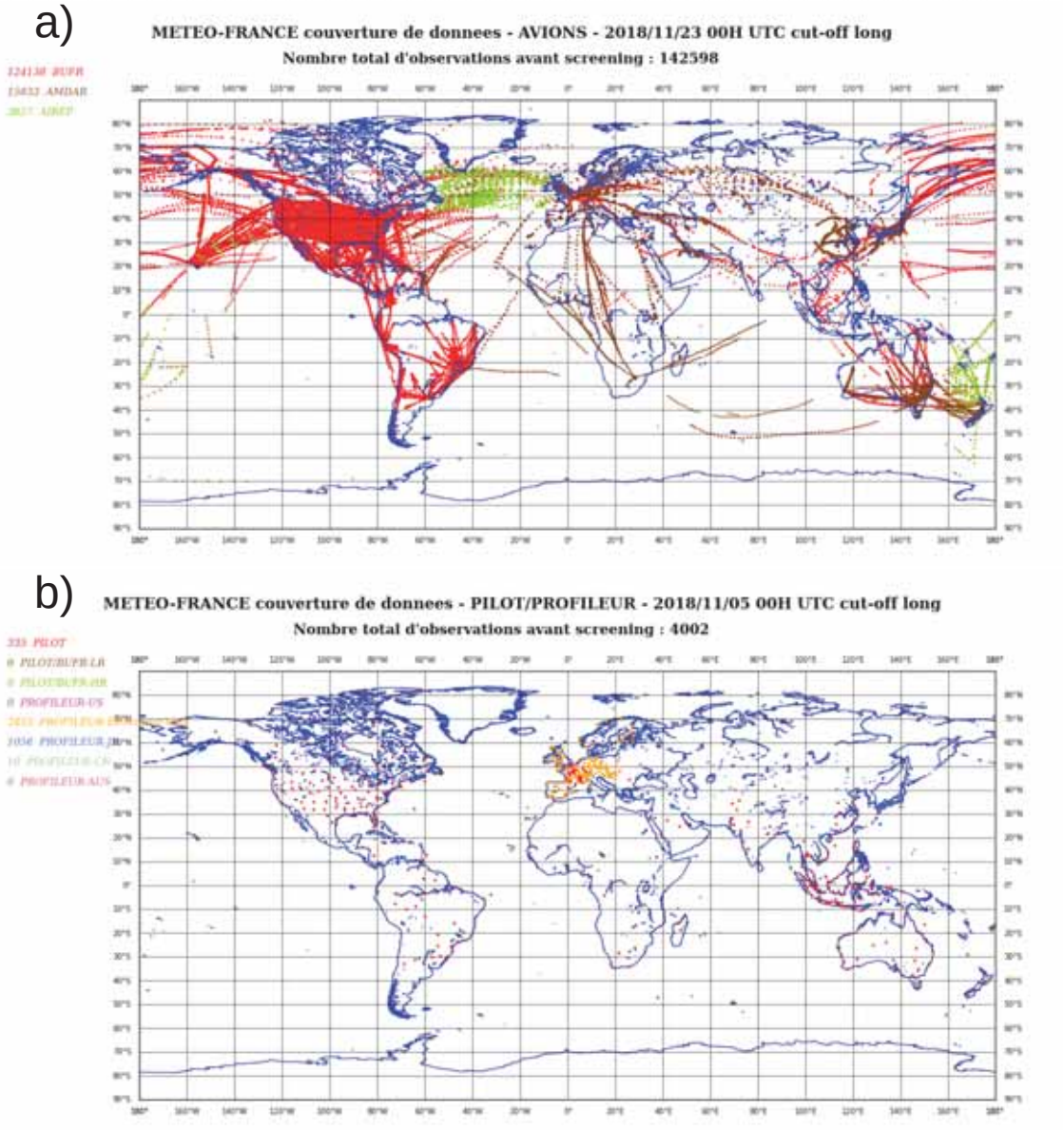


FIGURE 4.8: Cartes du pointage d'observations conventionnelles assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des données d'avions (a) et des profileurs de vent (b).

4.2.3.2 Les observations satellitaires

Dans les années 1960, l'arrivée des premiers satellites météorologiques représente une grande révolution dans le domaine de la prévision du temps. Ils sont en effet capables d'observer l'ensemble du globe avec divers instruments et donc à combler les lacunes des réseaux conventionnels (déserts, océans, etc.). Nous avons vu dans le Chapitre précédent qu'il existe deux grands types de satellites météorologiques : les satellites géostationnaires et les satellites défilants. Ils sont équipés d'une pléiade d'instruments dont des radiomètres imageurs ou sondeurs dans les longueurs d'onde visibles, infrarouges ou micro-ondes. Certains satellites défilants embarquent des radars diffusiométriques observant le vent à la surface de la mer. D'autres sont équipés de récepteurs afin d'utiliser le système de navigation GNSS[19]. Ce dernier permet d'extraire de l'information sur la température et l'humidité atmosphérique à l'aide du phénomène de réfraction atmosphérique d'un signal radio-électrique.

D'une manière générale l'observation du système climatique dans son ensemble tend à bénéficier d'une palette de plus en plus diverse d'instruments satellitaires conçus pour plusieurs disciplines des sciences de l'environnement : météorologie, chimie atmosphérique, océanographie, hydrologie, physique du globe, astrophysique, ... Dans les années 1975-1976, les grands centres de PNT assimilent les premiers profils de température obtenus à partir des données satellitaires. Ces profils étaient fabriqués par les Américains à partir de sondages infrarouges issus de l'instrument VTPR[20] embarqué sur les satellites NOAA[21]. Les vents sont déduits de l'observation du déplacement des nuages par les premiers satellites géostationnaires américains GOES[22] [Pailleux, 1996]. C'est dans les années 1990 que ARPEGE assimile les premières observations satellitaires issues du sondeur infrarouge HIRS[23] et du radiomètre micro-onde MSU[24] sous-ensemble du sondeur TOVS[25] à bord des satellites défilants NOAA. Cependant, il ne s'agissait pas encore d'assimiler les luminances spectrales brutes mais plutôt des luminances pré-traitées par le service américain NESDIS[26], un service de la NOAA.

Il faudra attendre l'arrivée du 4D-Var le 20 juin 2000 pour exploiter et améliorer la technique variationnelle, puis l'assimilation des luminances spectrales brutes du sondeur micro-onde AMSU-A[27] en 2002, puis du sondeur infrarouge HIRS en 2003. En 2004, ARPEGE a commencé à assimiler les mesures du diffusiomètre du satellite QUICKSCAT ainsi que du sondeur d'humidité AMSU-B[28]. La Figure 4.9 présente l'évolution des cumuls mensuels du nombre d'observations utilisées dans ARPEGE par type d'observation satellitaire de 2002 à aujourd'hui. On remarque une lente évolution du nombre d'observations assimilées de 2002 à mi 2008 puis une augmentation exponentielle du nombre d'observations utilisées avec des pics représentant l'arrivée de nouveaux instruments et l'augmentation du nombre de luminances spectrales (canaux) assimilées.

[19] Global Navigation Satellite System
[20] Vertical Temperature Profile Radiometer
[21] National Oceanic and Atmospheric Administration
[22] Geostationary Operational Environmental Satellite
[23] High Resolution Infrared Radiation Sounder
[24] Microwave Sounding Unit
[25] TIROS Operational Vertical Sounder
[26] National Environmental Satellite, Data, and Information Service
[27] Advanced Microwave Sounding Unit-A
[28] Advanced Microwave Sounding Unit-B

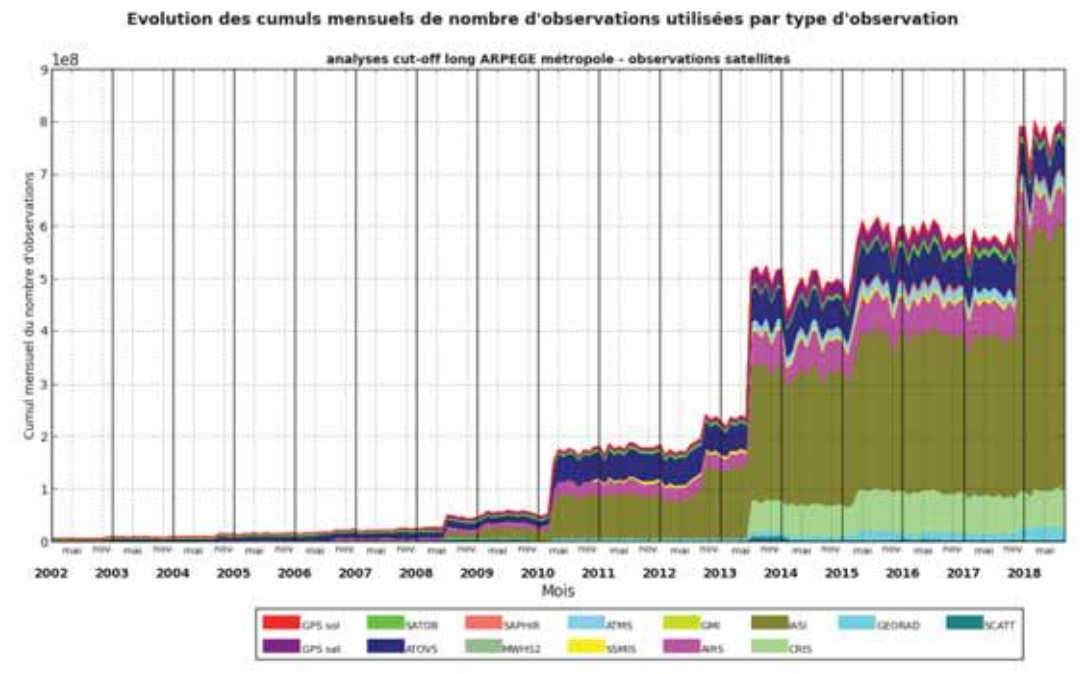


FIGURE 4.9: Représentation de l'évolution du nombre d'observations satellitaires utilisées de le modèle global ARPEGE depuis 2002.

La liste (non-exhaustive) des principales observations satellitaires utilisées actuellement dans le modèle global ARPEGE est la suivante :

- IASI ~ (57.000 = *nombre total d'observations*) : sondeur infrarouge (8461 canaux) fournissant des informations sur les profils verticaux de température et d'humidité, la couverture nuageuse, les surfaces, les aérosols mais également sur la composition chimique de l'atmosphère. L'instrument est à bord des satellites défilants Metop-A, B et C. Les observations sont pré-processées par EUMETSAT. La figure 4.10.a représente la couverture d'observation de IASI à bord de Metop-A en rouge et Metop-B en marron.

- GPS[29] Radio occultation ~ 100.000 : le calcul de l'indice de réfraction de l'air permet de restituer un profil vertical de température et d'humidité. Un exemple de localisation de ces profils est présenté sur la Figure 4.10.b.

- GEORAD[30] ~ 100.000 : mesure d'observations à partir d'instruments à bord de satellites géostationnaires tels que METEOSAT (rouge et marron), GOES (vert) et HIMAWARI (orange) dont la couverture d'observation est représentée sur la Figure 4.11.a.

- SSMI[31]/S ~ 13.000 : radiomètre imageur mesurant la température de brillance dans le domaine des micro-ondes (7 canaux), à bord des satellites défilants DMSP[32]. Données pré-processées et retransmises par le centre de la NESDIS. La Figure 4.11.b présente un exemple de couverture des données SSMI/S en rouge et marron.

- SATOB ~ 50.000 : Satellite Observation (nom du code de l'OMM qui sert à transmettre diverses observations de satellites), surtout utilisé pour désigner les vents déterminés à partir de satellite géostationnaire ou Atmospheric Motion Vector.

[29] Global Positioning System
[30] GEOstationary RADiances
[31] Special Sensor Microwave Imager
[32] Defense Meteorological Satellite Program

- ATOVS[33] AMSU-A ~ 56.000 : radiomètre à balayage opérant dans le domaine des micro-ondes (15 canaux) destiné à l'élaboration de profils atmosphériques de température et d'humidité, à bord des satellites NOAA, Aqua et Metop. Ces observations sont pré-processés et retransmises par les centres d'Exeter, d'EUMETSAT et du Centre de Météorologie Spatial (CMS) situé à Lannion.
- ATOVS AMSU-B MHS ~ 45.000 : radiomètre à balayage opérant dans le domaine des micro-ondes (5 canaux) destiné à l'élaboration de profils atmosphériques d'humidité.
- CrIS[34] ~ 16.000 : sondeur infrarouge (1305 canaux) fournissant des informations sur les profils verticaux de température et d'humidité mais également sur les gaz à effet de serre tels que l'ozone, le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone et le méthane. Il est à bord des satellites défilants SUOMI-NPP et NOAA-20.
- AIRS[35] ~ 9.000 : sondeur infrarouge (2378 canaux) fournissant des informations sur les profils verticaux de température et d'humidité mais également sur les gaz à effet de serre. Il est à bord des satellites défilants SUOMI-NNP et NOAA-20. Les observations sont pré-processées par le centre de la NESDIS.

Le nombre moyen d'observations conservées à chaque réseau d'assimilation est donné à titre indicatif. Pour obtenir le nombre total de données assimilées, il faut multiplier les chiffres par le nombre de paramètres mesurés, le nombre de niveaux verticaux ou le nombre de canaux le cas échéant.

[33] Advanced TOVS
[34] Cross-Track Infrared Sounder
[35] Atmospheric InfraRed Sounder

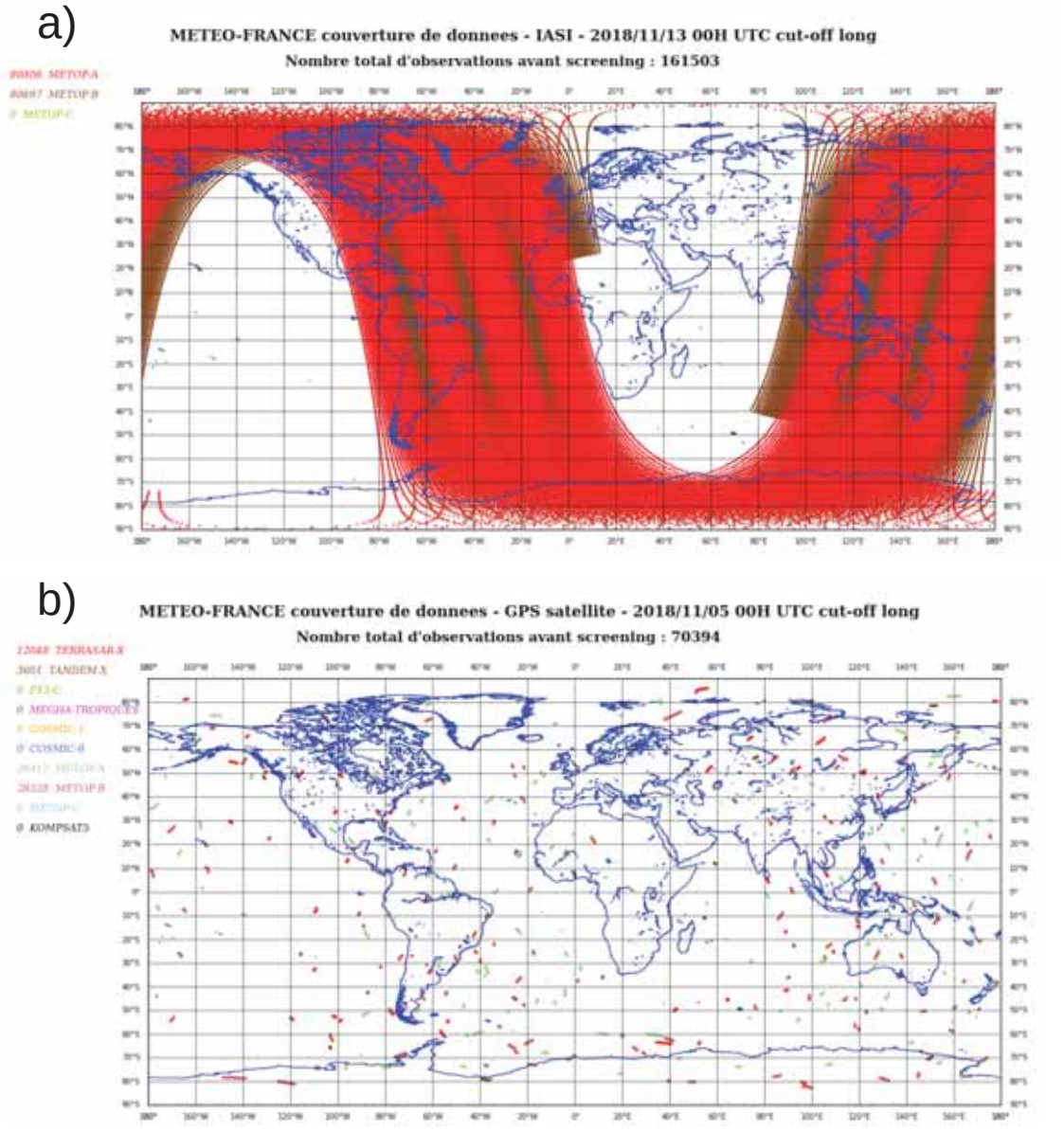


FIGURE 4.10: Cartes du pointage d'observations satellitaires assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des instruments IASI (a) et des diffusiomètres (b).

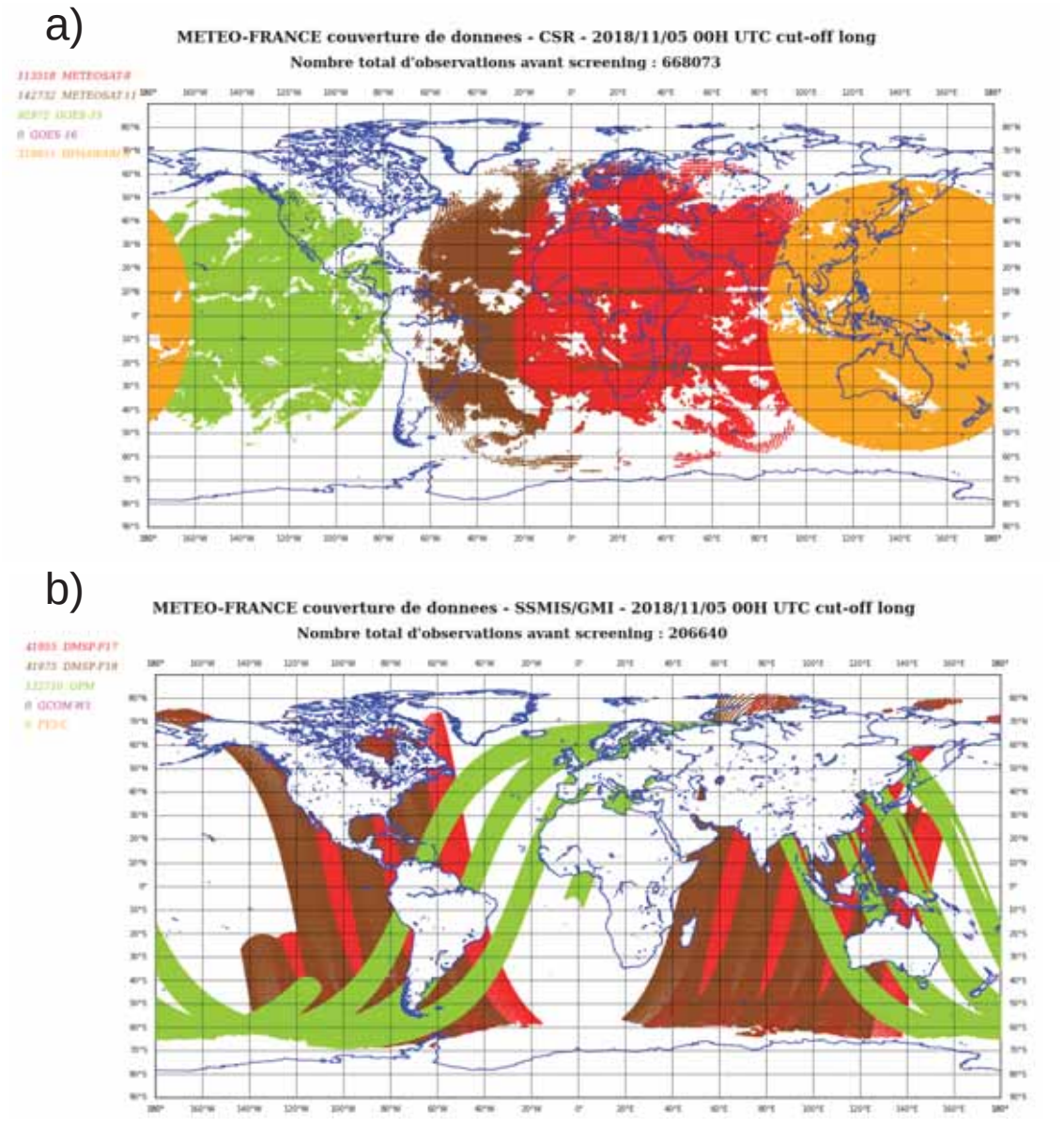


FIGURE 4.11: Cartes du pointage d'observations satellitaires assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des géostationnaires (a) et des imageurs micro-ondes (b).

4.3 Étapes vers une analyse objective

4.3.1 Modélisation des erreurs

Nous avons vu précédemment que l'assimilation de données permet de combiner de manière optimale les observations et l'ébauche et d'obtenir la meilleure description possible de l'état de l'atmosphère : l'analyse. Cependant, ces observations et l'ébauche utilisées pour calculer l'analyse sont imprécises. En effet, les observations possèdent des erreurs de mesure par exemple et l'ébauche est issue de modèle qui ne sont pas parfait.

Nous avons vu que la prise en compte de ces erreurs lors du processus d'assimilation de données par l'intermédiaire des matrices de covariance d'erreur d'observation et d'ébauche est primordiale. Elles permettent de pondérer le poids à apporter aux deux sources d'information et déterminent ainsi leurs contributions respectives à l'analyse. L'estimation précise de ces erreurs est un enjeu scientifique majeur et demeure actuellement un champ de recherche important dans les centres de PNT.

Il existe de nombreuses méthodes permettant d'estimer de manière pratique les covariances d'erreur comme l'hypothèse d'ergodicité, les techniques d'ensemble ou encore les techniques stochastiques. On peut citer une liste non exhaustive de techniques couramment utilisées, comme la colocation, la validation croisée, la méthode observationnelle [Hollingsworth and Lönnberg, 1986], [Lönnberg and Hollingsworth, 1986] et [Hollingsworth et al., 1986], les covariances gaussiennes homogènes isotropes ou encore la méthode NMC[36] [Parrish and Derber, 1992].

4.3.1.1 Les erreurs d'ébauche

Un modèle de PNT permet de calculer les valeurs que va prendre un ensemble de paramètres tels que la pression, la température, l'humidité ou le vent, en un très grand nombre de points. L'exemple présenté ici considère un modèle à quatre variables. L'erreur qui affecte l'ébauche est définie, pour chacune de ces variables, par l'écart entre l'ébauche $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$ et l'état vrai $\mathbf{x}^{\mathrm{t}}$ du système. Le vecteur d'erreur d'ébauche pour toutes ces variables, noté $\boldsymbol{\varepsilon}$, est donné par :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^{\mathrm{b}} - \mathbf{x}_1^{\mathrm{t}} \\ \mathbf{x}_2^{\mathrm{b}} - \mathbf{x}_2^{\mathrm{t}} \\ \mathbf{x}_3^{\mathrm{b}} - \mathbf{x}_3^{\mathrm{t}} \\ \mathbf{x}_4^{\mathrm{b}} - \mathbf{x}_4^{\mathrm{t}} \end{pmatrix} \tag{4.19}$$

Pour chaque variable, l'erreur est représentée par un vecteur de taille égale au nombre de points de grille. Par définition même de l'erreur, il n'est pas possible de connaître l'erreur exacte qui affecte l'ébauche utilisée mais on peut connaître les statistiques associées, notamment sa variance et ses covariances spatiales sous la forme de matrice de covariance d'erreur d'ébauche $\mathbf{B}$ donnée par l'équation 4.2.

La Figure 4.12 propose un schéma de la structure de la matrice $\mathbf{B}$ pour l'exemple du système à quatre variables. Les blocs diagonaux (en rouge), représentent les matrices d'auto-covariance spatiale des erreurs pour chacune des variables. Elles décrivent les covariances entre les erreurs à différents points de grille. Les diagonales (lignes en tiretée noirs) correspondent aux variances d'erreur d'ébauche en chaque point de grille et pour chaque variable et elles caractérisent l'amplitude attendue de l'erreur. Les blocs non diagonaux, représentent les covariances croisées (multivariées) entre deux variables différentes [Raynaud, 2013]. L'utilisation des covariances croisées est un domaine de recherche encore investigué dans les centres de PNT.

[36] National Meteorological Center

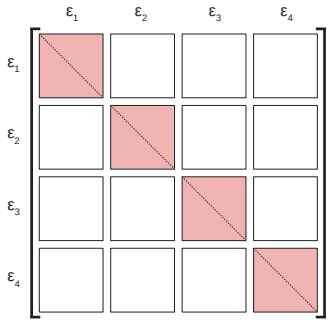


FIGURE 4.12: Représentation schématique de la structure de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche $\mathbf{B}$ pour l'exemple du système à quatre variables dont les erreurs sont notées $\boldsymbol{\varepsilon}_1$, $\boldsymbol{\varepsilon}_2$, $\boldsymbol{\varepsilon}_3$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_4$.

À Météo-France, la matrice $\mathbf{B}$ est déterminée à l'aide de l'approche ensembliste utilisant une série de prévisions effectuées à partir d'analyses assimilant des observations perturbées [Pereira and Berre, 2006]. Cette méthode vise à construire un ensemble composé d'une série de membre perturbés qui sont analysés et propagés de fenêtre d'assimilation en fenêtre d'assimilation. 25 membres ont été utilisés jusqu'à l'été 2019 puis 50 depuis. Chaque membre est ainsi traité individuellement permettant à n'importe quel instant de calculer les variances d'erreur associées par estimation statistique directe. Cette méthode permet d'estimer les erreurs d'ébauche de toutes les variables du modèle au cours du temps et d'obtenir une matrice $\mathbf{B}$ dynamique. Cependant, il est important de noter que si le système d'analyse est bruité, les statistiques le seront également. Si les variances d'erreur d'ébauche sont mal spécifiées, l'incrément d'analyse sera trop grand ou trop petit.

4.3.1.2 Les erreurs d'observation

Nous avons vu précédemment que les observations météorologiques résultent de la somme de l'état « vrai » projeté dans l'espace d'observation et des erreurs associées : $\mathbf{y} = \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{t}}) + \varepsilon^{\mathrm{o}}$. Pour obtenir une observation précise, il est donc important d'identifier les sources et de quantifier ces erreurs. Ces dernières peuvent provenir d'une mauvaise estimation humaine, d'un défaut d'un capteur, d'une panne, de la transmission et de la collecte des données dans le cadre de mesures *in-situ*. La mesure satellitaire rend l'estimation des erreurs encore plus complexe puisque les variables atmosphériques accessibles sont limitées, et la qualité des mesures est généralement moindre qu'avec des capteurs *in-situ*. En effet, nous avons vu que la mesure d'un paramètre se fait de manière indirecte par l'analyse d'un rayonnement électromagnétique capté par l'instrument.

L'analyse, que l'on appelle souvent « inversion » extrait l'information géophysique des propriétés du rayonnement détecté. La résolution de cette inversion est souvent non-linéaire, c'est pour cela que l'on applique plusieurs hypothèses qui peuvent ajouter des erreurs. De plus, les bruits de détection, qui ne peuvent jamais être totalement supprimés, peuvent conduire à des erreurs de mesures importantes et pas toujours maitrisables. Dans le cadre de l'assimilation de données, on distingue quatre types d'erreurs :

- les erreurs du processus de mesure (bruit instrumental des capteurs satellitaires) ;
- les erreurs dans la modélisation de l'opérateur $\mathcal{H}$ (ex : erreur dans le transfert radiatif) ;
- les erreurs de représentativité ou erreurs de discrétisation qui empêchent $\mathbf{x}^{\mathrm{t}}$ d'être une représentation parfaite de la réalité (point de mesure versus représentation dans le modèle) ;

- les erreurs dans le contrôle de qualité (ex : erreurs due à l'absence de certains nuages dans le schéma de détection nuageuse lors de l'assimilation des canaux en ciel clair).

En assimilation de données, ces erreurs sont représentées à l'aide de la matrice de covariance d'erreur d'observation **R**. Les variances d'erreur d'observation peuvent être estimées à l'aide des caractéristiques techniques des instruments de mesure (sondes des radiosondages, bouées, etc.). Mais certaines variances peuvent inclure des erreurs de représentativité (mesures satellitaires) qui sont loin d'être négligeables au vu du nombre de variables physiques qui ne sont pas représentées dans l'espace du modèle. Souvent les covariances d'erreur d'observation sont considérées comme nulles.

Cette hypothèse est acceptable dans le cas d'observations mesurées par différents instruments mais l'est beaucoup moins quand il s'agit de mesures obtenues par le même capteur (instruments satellitaires). De plus, les erreurs de représentativité sont corrélées par nature. Cependant, ces corrélations d'erreur d'observation sont très difficiles à estimer, c'est pour cela qu'en pratique les matrices **R** sont souvent diagonales. Enfin, il est très important de ne pas considérer un biais comme une contribution à l'erreur d'observation car cela, occasionnerait un biais dans l'incrément d'analyse. C'est pour cela qu'il est primordial de débiaiser les observations même si l'origine des biais est souvent difficile à déterminer.

À Météo-France, plusieurs hypothèses sont émises concernant la matrice **R** : les erreurs d'observations sont décorrélées entre elles et auto-corrélées dans le temps avec comme conséquence une matrice diagonale par blocs. Certains de ces blocs sont pleins, comme pour les observations issues des radiosondages (description des corrélations entre les erreurs d'observations à différentes altitudes). D'autres sont diagonaux avec pour seule information les variances d'erreur d'observation $(\sigma^o)^2$, pour les luminances spectrales par exemple (les corrélations croisées seront prochainement prises en compte en opérationnel). Dans le cadre des luminances spectrales (canaux), leurs écarts-types d'erreur d'observation σ^o, sont estimés empiriquement à l'aide du calcul des écarts-types des innovations (observation réelle - observation simulée) pour chaque canal. La Figure 4.13, représente un exemple des écarts-types d'erreur d'observation prescrits pour les canaux sensibles au CO_2 des sondeurs infrarouges AIRS (triangle fuchsia), IASI (cercle vert d'oie) et CrIS (étoile verte claire).

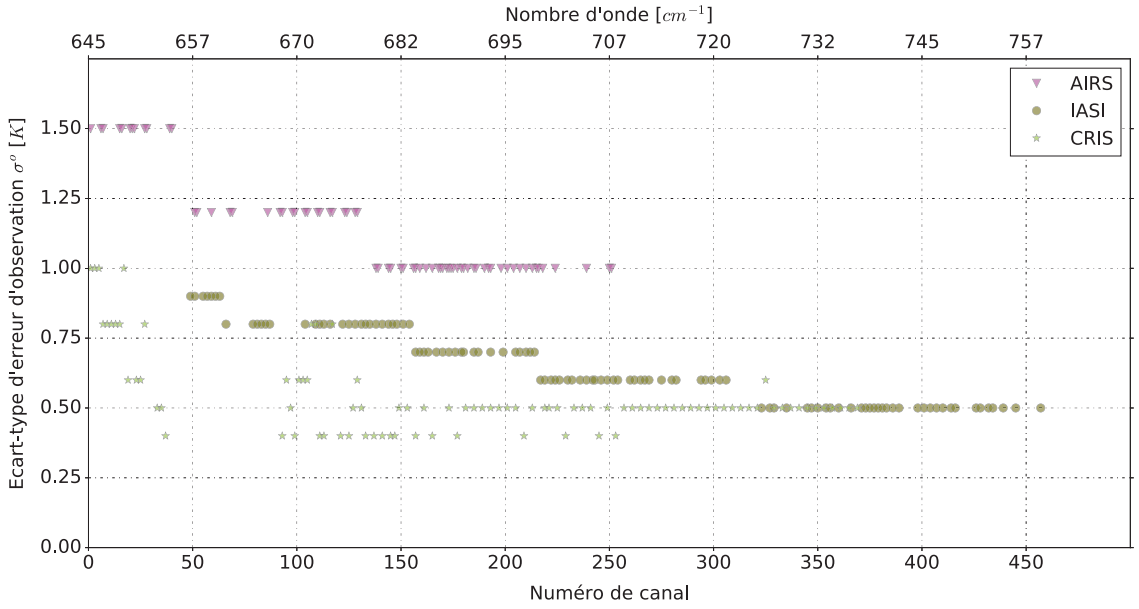


FIGURE 4.13: Écarts-types d'erreur d'observation σ^o prescrits pour les canaux sensibles au CO_2 des données des sondeurs infrarouges AIRS, IASI et CrIS.

4.3.2 Diagnostique de Desroziers

Pour estimer les covariances d'erreur d'observation, les grands centres de PNT, utilisent régulièrement la méthode dite de « *Desroziers* » [Desroziers et al., 2005]. Étant donné que l'état réel de l'atmosphère n'est pas connu, la méthode de Desroziers montre qu'il est possible d'estimer dans l'espace des observations, les matrices de covariances d'erreur d'ébauche et d'observation avec les écarts des observations à l'ébauche et à l'analyse. Ces matrices « *diagnostiques* » permettent de savoir si les matrices prescrites « a priori », avant analyse, sont bien spécifiées ou non.

Après analyse, les matrices obtenues par calcul, peuvent à leur tour être utilisées lors de l'assimilation. Cependant les matrices utilisées lors de la première analyse n'étant pas « *justes* », les nouvelles matrices ne le sont pas non plus mais une méthode itérative peut être une solution pour optimiser les matrices de covariances d'erreurs jusqu'à convergence des valeurs. Cette matrice de covariance d'erreur d'observation diagnostiquée se calcule de la manière suivante :

$$\mathbf{R} = \mathrm{E}[\mathbf{d}_{\mathrm{a}}^{\mathrm{o}}(\mathbf{d}_{\mathrm{b}}^{\mathrm{o}})^{\mathrm{T}}] \tag{4.20}$$

où $\mathbf{d}_{\mathrm{a}}^{\mathrm{o}} = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{a}})$ est le résidu représentant l'écart entre les observations et l'analyse et $\mathbf{d}_{\mathrm{b}}^{\mathrm{o}} = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{b}})$ l'innovation représentant l'écart entre les observations et l'ébauche.

Les travaux de [Desroziers et al., 2005] permettent également de diagnostiquer la matrice de covariance d'erreur d'ébauche $\mathbf{B}$ mais dans la représentation des observations telle que :

$$\mathbf{HBH}^{\mathrm{T}} = \mathrm{E}[\mathbf{d}_{\mathrm{b}}^{\mathrm{a}}(\mathbf{d}_{\mathrm{b}}^{\mathrm{o}})^{\mathrm{T}}] \tag{4.21}$$

où $\mathbf{d}_{\mathrm{b}}^{\mathrm{a}} = \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{a}}) - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{b}})$ représente la différence entre l'analyse et l'ébauche dans la représentation des observations.

Il est important de noter que pour réaliser ces calculs, deux hypothèses ont été formulées. La première indique que les erreurs d'observation et les erreurs d'ébauche sont indépendantes. La seconde que les matrices $\mathbf{R}$ et $\mathbf{B}$ utilisées pour produire l'analyse sont exactement correctes. Or dans l'application du diagnostic, cette dernière hypothèse n'est pas réalisée. De plus, les travaux de [Desroziers G, 2009] ont démontré que les observations et les erreurs d'ébauche doivent avoir des échelles suffisamment différentes pour que le diagnostic soit fiable. Une méthode itérative peut être une solution pour optimiser la qualité des matrices de covariances d'erreurs diagnostiquées.

4.3.3 Contrôle de qualité des observations

Le contrôle de la qualité des données est une étape indispensable. Il est réalisé avant le processus d'analyse et vise à détecter et rejeter les observations pouvant dégrader le système d'assimilation. En effet, les modèles atmosphériques sont très sensibles aux conditions initiales et l'assimilation d'observations trop éloignées de l'ébauche peut avoir un impact important sur la prévision. C'est pour cela que l'ensemble des observations échangées sur le réseau international est contrôlé. À Météo-France, toutes les observations assimilées pour la PNT sont contrôlées sur la base de statistiques relatives à la différence entre l'observation et le modèle. Ainsi, chaque observation disponible et utile au modèle ARPEGE est comparée à une prévision de 6h d'échéance (ébauche) interpolée au point d'observation et valide à la même date. Sont considérées comme suspectes les observations dont les statistiques s'écartent notamment du comportement moyen d'autres observations par rapport à une première estimation. Ce contrôle de qualité des observations est décrit dans la Section 4.3.2.2.

4.3.3.1 Correction de biais

Concepts

L'approche variationnelle du système de PNT utilisée pour ARPEGE, implique que les sources d'information doivent être non biaisées. En effet, une observation biaisée peut déstabiliser le processus d'assimilation rendant l'analyse non optimale et à terme dégrader la qualité de la prévision météorologique qui en découle. Ces biais sont des erreurs systématiques estimées par la moyenne des innovations et résultent de sources différentes :

- L'instrument satellitaire : mauvaise calibration, changements d'orbite, vieillissement, effets environnementaux, etc. ;
- Le Modèle de Transfert Radiatif (MTR) : processus non modélisés, connaissance limitée des paramètres de surface (T_{skin}, T_{surf}, q_{surf}, ε, ...), erreurs spectroscopiques, etc. ;
- Le pré-traitement des données : contamination nuageuse résiduelle, etc. ;
- Des erreurs systématiques dans l'ébauche fournie par ARPEGE (Température dans la haute stratosphère, ...).

Il est nécessaire de surveiller et de corriger les biais dans le système d'assimilation. En effet, l'étude de l'évolution des ces biais a démontré qu'ils n'étaient pas constants. Ils varient temporellement (cycle diurne, saisonnier, apériodique), géographiquement (masse d'air, type de surface, ...) et géométriquement (angle de visée de l'instrument satellitaire). C'est pour cela que le débiaisage des observations est primordial car cela peut faire la différence entre un réseau d'observations utiles ou au contraire nuisibles à la qualité des analyses.

Méthode statique

La correction de biais statique appliquée aux luminances spectrales d'instruments satellitaires, consiste en une correction variant géographiquement avec la masse d'air [Harris and Kelly, 2001]. La méthode statique utilise pour modéliser les biais des observations une régression linéaire multiple basée sur N prédicteurs $p_i(\mathbf{x})$ dépendants de l'état du modèle de PNT, avec leurs coefficients β_i associés.

Le choix a été fait d'utiliser des prédicteurs issus du modèle plutôt que des luminances spectrales observées afin de corriger entièrement les données observées et se rapprocher ainsi du modèle [Eyre, 1992]. Les prédicteurs utilisés sont les suivants :

- Une corrélation en fonction de l'angle de visée ;
- Une constante pour chaque canal (offset) ;
- Des prédicteurs de masse d'air variant géographiquement en fonction de la zone considérée.

L'apprentissage de la correction de biais consiste à trouver le vecteur des coefficients β permettant de minimiser l'écart entre l'ébauche et les observations. L'équivalent modèle est noté :

$$\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \beta) = \mathcal{H}(\mathbf{x}) + \sum_{\mathrm{i}=0}^{\mathrm{N}} [\beta_{\mathrm{i}} \mathrm{p}_{\mathrm{i}}(\mathbf{x})] \tag{4.22}$$

L'optimalité peut alors être obtenue en minimisant la nouvelle fonction de coût :

$$\mathrm{J}(\beta) = \frac{1}{2}[\mathbf{y} - \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \beta)]^{\mathrm{T}}[\mathbf{y} - \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \beta)] \tag{4.23}$$

Cette correction de biais statique permet de calculer le vecteur des coefficients β optimal pour un jeu d'observations supposées représentatives du véritable biais. La valeur de $\mathbf{x}$ choisie correspond généralement à l'ébauche $\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$ du modèle provenant d'une expérience de contrôle sur une période d'environ un mois. Les coefficients sont ensuite fixés et appliqués successivement dans toutes les analyses.

L'approche statique a été longtemps utilisée dans ARPEGE. Cependant les prédicteurs doivent être recalculés fréquemment afin d'identifier d'éventuelles dérives du biais. Ces dérives peuvent être dues à des problèmes instrumentaux, l'évolution du système d'assimilation, la modification du MTR. De plus, l'arrivée des sondeurs infrarouges hyperspectraux produisant une quantité impressionnante d'information rend la correction de biais statique difficile à maintenir. Une méthode adaptative appelée correction de biais variationnelle a donc été mise en place.

Méthode adaptative et variationnelle

L'arrivée des observations issues des sondeurs infrarouges hyperspectraux a changé la perspective de la correction de biais. En effet, ces sondeurs apportent une très grande quantité d'information issues d'instruments différents dont les biais instrumentaux peuvent ne pas être détectés. Pour pallier ce problème, une technique adaptative permettant de faire varier automatiquement la correction de biais pour chaque nouvelle analyse a été mise en place en opérationnel dans ARPEGE en février 2008 grâce aux travaux de [Auligné et al., 2007]. Cette approche s'adapte à toute évolution du biais et ajuste les paramètres de biais issus des prédicteurs à chaque nouveau cycle d'analyse. Cette technique nommée Correction de Biais Variationnelle (Var-BC) cherche à minimiser les innovations systématiques pour les luminances spectrales tout en préservant les écarts entre l'ébauche et les autres observations dans le système d'analyse.

Les coefficients de régression sont inclus dans la variable de contrôle du 4D-Var de manière à ce qu'ils soient ajustés en même temps que les autres variables de l'analyse à partir des informations disponibles. Si les incertitudes spécifiées pour les observations et pour l'ébauche sont respectées alors l'ajustement sera optimal. La fonction de coût est alors minimisée par rapport aux coefficients β et par rapport à l'état du modèle $\mathbf{x}$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{J}(\mathbf{x}, \beta) &= \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}})}_{J_b(\mathbf{x})} \\
&+ \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \widetilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \beta))^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \widetilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \beta))}_{J_o(\mathbf{x})} \\
&+ \underbrace{\frac{1}{2}(\beta - \beta^{\mathrm{b}})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}_{\beta}^{-1}(\beta - \beta^{\mathrm{b}})}_{J_\beta(\beta)} \\
&+ \mathrm{J_c}(\mathbf{x})
\end{aligned} \tag{4.24}$$

où $\mathrm{J}_o(\mathbf{x})$ est le terme de contrainte sur l'observation corrigée du biais, $\mathrm{J}_\beta(\beta)$ est le terme de contrainte sur l'ébauche pour β, $\mathbf{B}_\beta$ est la matrice de covariance d'erreur des coefficients de biais et β^b est le coefficient estimé à partir de l'analyse précédente. Cette technique gère les changements abruptes que peuvent avoir les biais et évite ainsi le rejet systématique de certaines données par le contrôle de qualité.

4.3.3.2 Contrôle et filtrage des données - Screening/thinning

Un premier contrôle (screening) consiste à représenter statistiquement les différences entre les observations $\mathbf{y}$ et leurs équivalents modèle $\mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{b}}, \beta)$. En supposant que les observations et l'ébauche ne sont pas biaisées, seules les observations ayant un écart raisonnable avec cette différence seront utilisées, les autres étant rejetées. Le seuil de rejet tient compte des covariances d'erreur d'observation et d'ébauche et la valeur absolue de l'innovation doit être inférieure à ce seuil :

$$|\mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^{\mathrm{b}}, \beta)| \leqslant \alpha \sqrt{(\sigma^{\mathrm{b}})^2 + (\sigma^{\mathrm{o}})^2} \tag{4.25}$$

où α représente une constance fixée empiriquement pour chaque type d'observation.

Afin de réaliser cette opération, la matrice de covariance d'erreur d'ébauche $\mathbf{B}$ dont sont issues les écarts-types des erreurs d'ébauche, doit être projetée dans l'espace des observations. Dans le cas de matrices de dimension (i,j), cela revient à additionner la diagonale de la matrice $\mathbf{R}$ et de la matrice $\mathbf{B}$ dans l'espace des observations :

$$(\sigma^{\mathrm{o}})^2 + (\sigma^{\mathrm{b}})^2 \propto \mathbf{R}_{\mathrm{i,i}} + \mathbf{H}\mathbf{B}_{\mathrm{i,i}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} \tag{4.26}$$

La densité des données dépend de la résolution du modèle mais si celles-ci sont trop denses, il y a possibilté de filtrage (thinning) vertical et horizontal des observations. En effet, les données sont supposées non corrélées horizontalement permettant de limiter l'échantillonnage spatial des observations par exemple. La Figure 4.14 illustre le fitrage des données par le contrôle de quatité (screening) pour les observations issues de IASI du réseau 00 UTC avant (a) et après (b) le screening. Dans cette exemple, environ 65 % des observations sont rejetées.

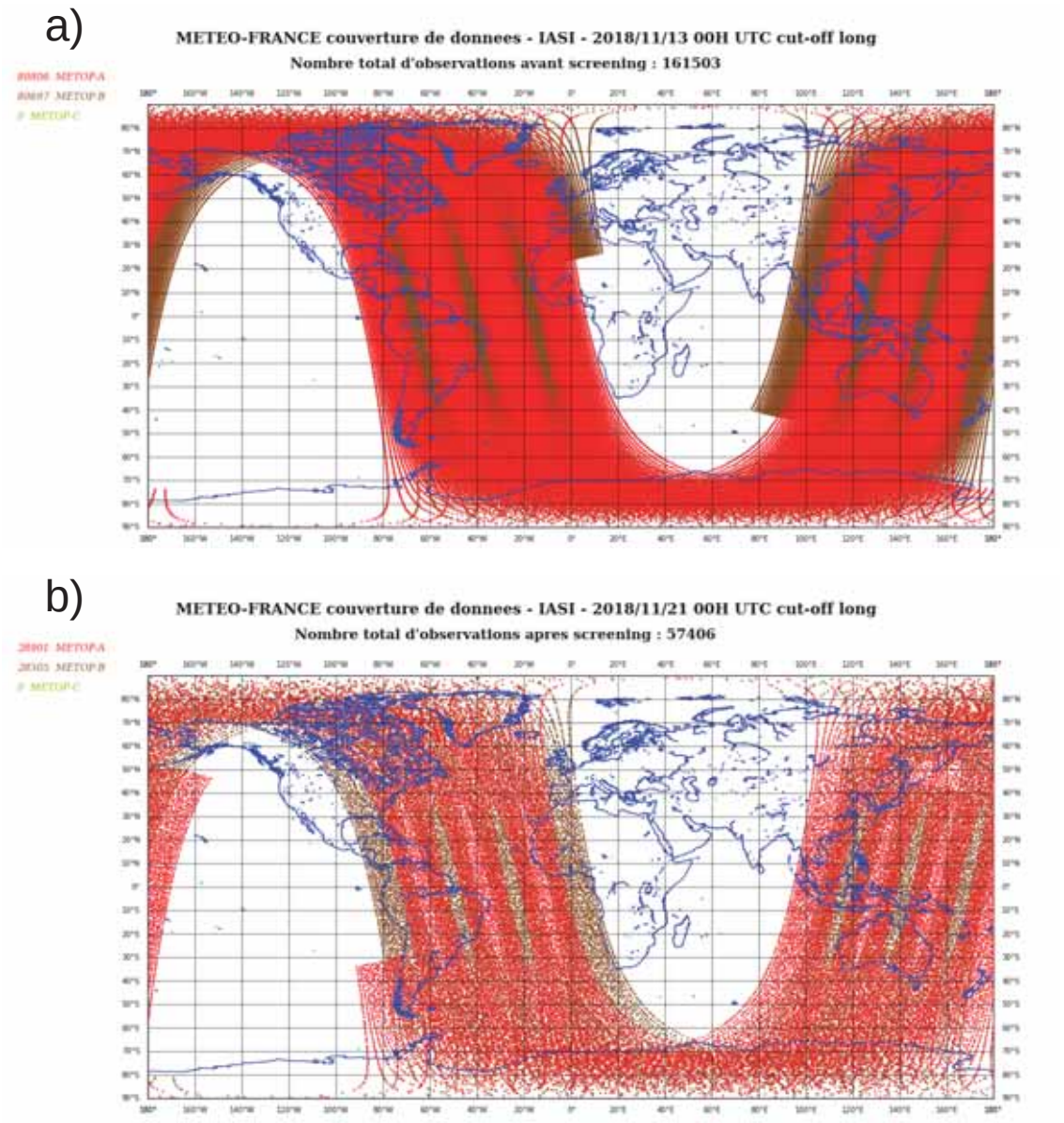


FIGURE 4.14: Cartes du pointage d'observations satellitaires pour le réseau 00 UTC de l'instrument IASI avant screening (a) et après screening (b).

4.3.3.3 Suivi des données - Monitoring

De la qualité des observations dépend la qualité des prévisions. C'est pour cela que Météo-France assure un suivi précis (monitoring) de toutes les données. Ce monitoring permet d'avoir accès aux statistiques journalières et mensuelles des innovations et résidus. Ce suivi permet entre autre de pouvoir interagir avec les producteurs de données mais également d'échanger sur les résultats avec d'autres grands centres de PNT.

Les Figures 4.15 et 4.16 illustre un exemple de monitoring des observations satellitaires issues des instruments présentés par les Figures 4.10 et 4.11. On retrouve sur ces 2 mois de monitoring les statistiques d'innovation du canal 49 (657 cm^{-1}) de l'instrument IASI à bord de Metop-A (Figure 4.15.a), l'intégration verticale des données de radio-occulation GPS à bord de Metop-A (Figure 4.15.b) et les statistiques d'innovation du canal 2 (6,25 μm) de l'instrument SEVIRI[37] à bord de Meteosat 8 (Figure 4.16.a) et du canal 5 (55,5 GHz) de l'instrument SSMI/S à bord de DMSP (Figure 4.16.b).

[37]Spinning Enhanced Visible and InfraRed Imager

Les courbes vertes représentent le biais corrigé, en rose le biais non corrigé, en bleu le biais corrigé plus ou moins de l'écart-type. Les barres oranges indiquent le nombre d'observations utilisées, bleu clair le nombre d'observations rejetées et en rouge de nombres d'observations supérieures au seuil de rejet. Le graphique (b) représente 2 mois de monitoring des statistiques d'innovation et de résidu de l'intégration verticale des données de radio-occultation GPS à bord de Metop-A. La courbe verte indique le biais de l'innovation, en rose le biais du résidu, en bleu l'écart-type de l'innovation et en marron l'écart-type du résidu. On remarque que quelque soit les types d'observations, le Var-BC permet de réaliser une correction de biais qui s'adapte à la variabilité spatio-temporelle des innovations. Un recul sur plusieurs années de monitoring a permis de mettre en évidence des améliorations de réduction des écarts entre les innovations et les résidus, principalement dues à l'utilisation du Var-BC, des changements dans la physique d'ARPEGE, d'ajout de canaux IASI supplémentaires, de l'augmentation de la densité d'observations assimilées dans les analyses, de l'augmentation de la résolution horizontale et verticale du modèle et de l'utilisation de nouvelles versions du MTR RTTOV.

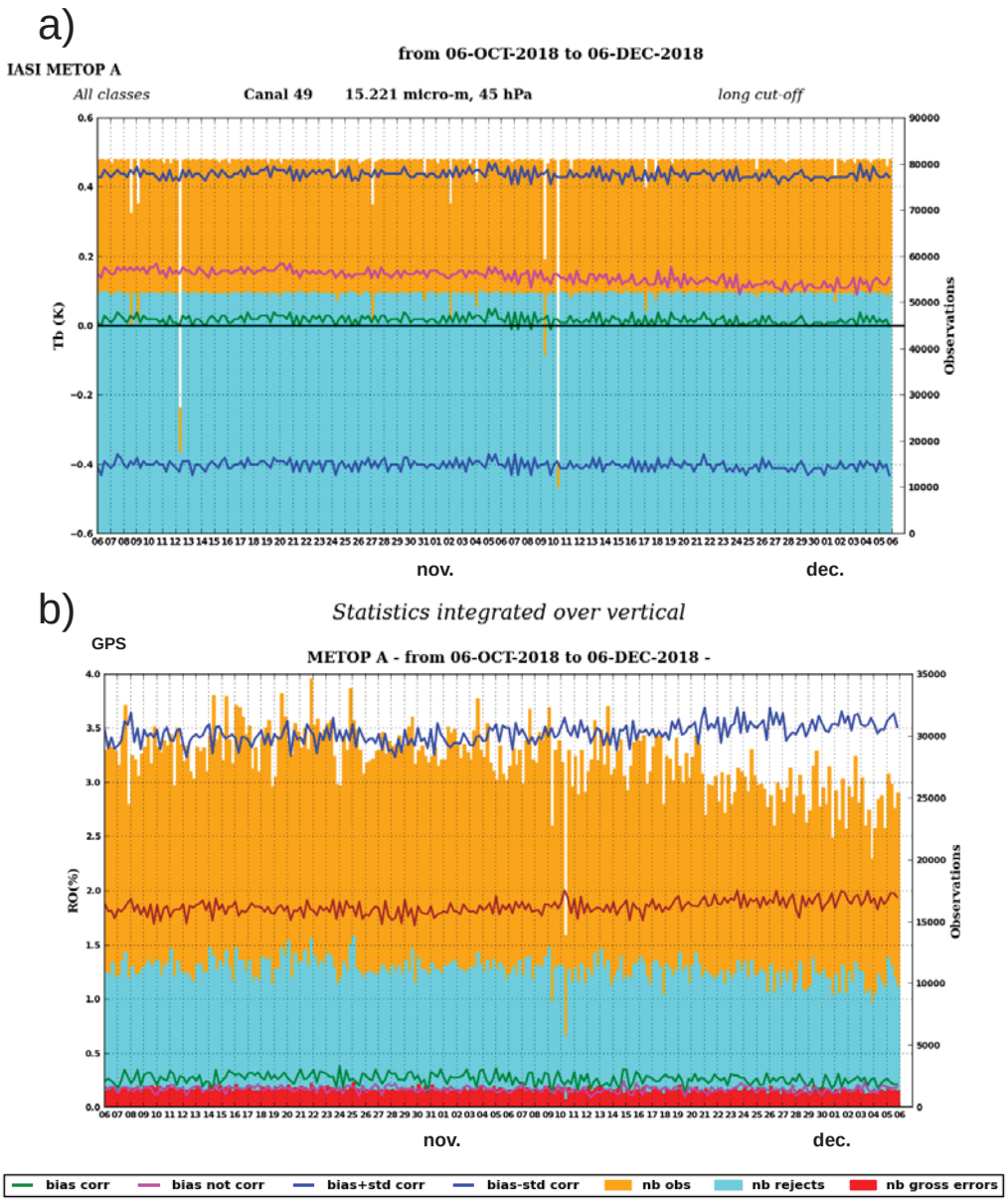


FIGURE 4.15: Monitoring des statistiques d'innovation du canal 49 (657 cm^{-1}) de l'instrument IASI à bord de Metop-A (a) et de l'intégration verticale des données de radio-occultation GPS à bord de Metop-A (b) sur deux mois de données (novembre et décembre 2018).

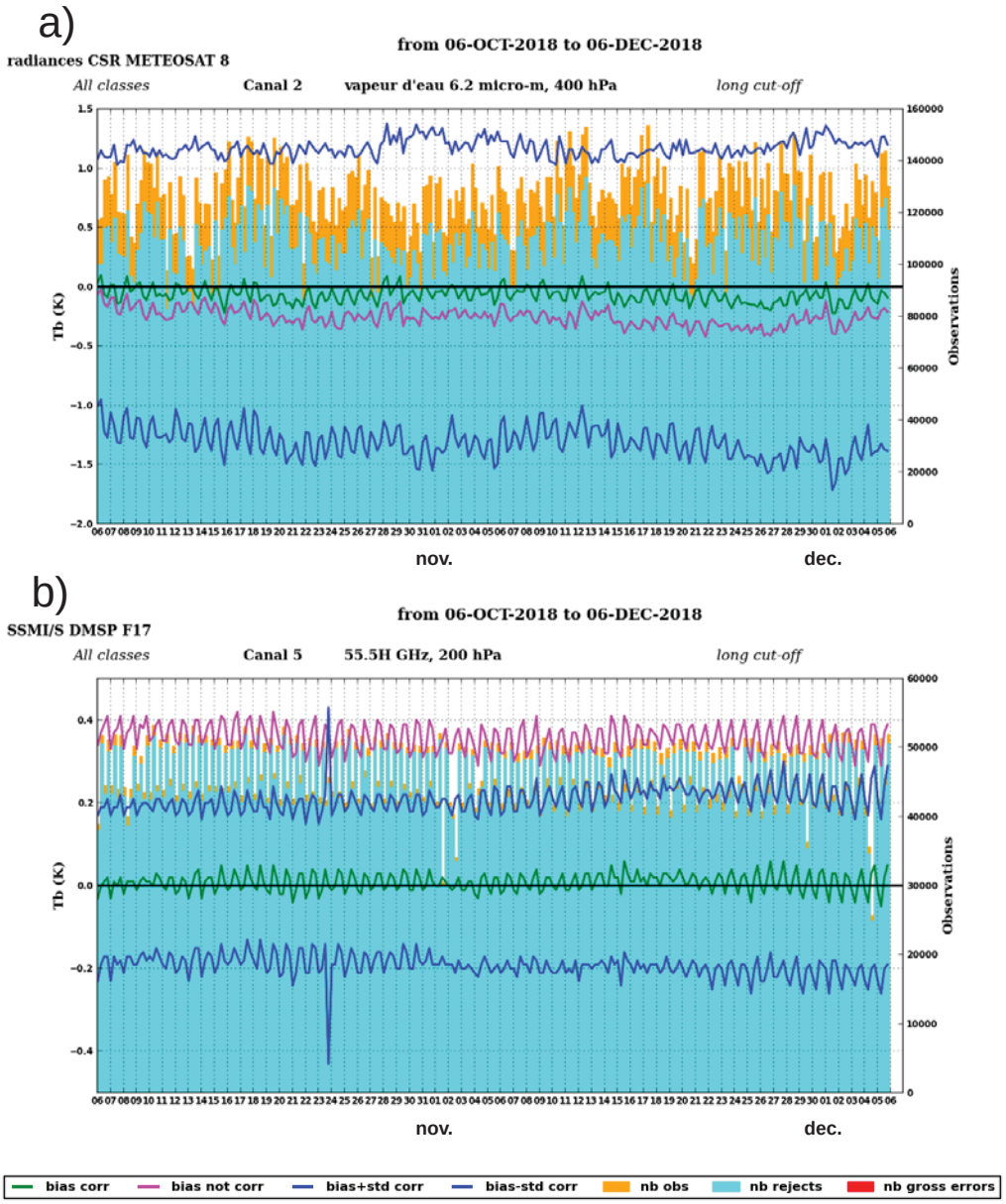


FIGURE 4.16: Monitoring des statistiques d'innovation du canal 2 (6,25 μm) de l'instrument SEVIRI à bord de Meteosat 8 (a) et du canal 5 (55,5 GHz) de l'instrument SSMI/S à bord de DMSP (d) sur deux mois de données (novembre et décembre 2018).

4.4 Assimilation des données IASI

L'assimilation des sondeurs infrarouges et particulièrement de IASI dans le modèle de PNT permet d'étudier l'atmosphère avec une meilleure résolution verticale notamment. En contrepartie, l'utilisation de ces données requiert des étapes de traitements supplémentaires du fait du volume immense d'information apporté. Le temps et le coût de calcul n'étant pas illimités, une compression et une sélection de l'information devient nécessaire. Par ailleurs, il demeure une faiblesse et pas des moindres dans l'assimilation d'observations infrarouges : les nuages. Nous allons donc expliciter les moyens mis en œuvre pour la prise en compte de l'effet des nuages dans le processus d'analyse.

4.4.1 Compression de l'information

4.4.1.1 Échantillonnage spatial

L'échantillonnage des observations satellitaires issues du sondeur infrarouge hyperspectral IASI a pour objectif de réduire leur densité horizontale et ainsi de diminuer le coût de calcul. Il permet également d'optimiser leur utilisation dans le processus d'assimilation. En effet, les travaux de [Liu and Rabier, 2002] ont montré que tout système d'assimilation possède un seuil au-dessus duquel la densité des observations n'apporte plus d'informations à l'analyse. De plus, contrairement à ce qu'il a été supposé précédemment, les observations présentent des erreurs corrélées horizontalement pouvant induire des dégradations sur l'analyse si celles-ci ne sont pas correctement représentées.

Le filtrage horizontal des observations de IASI consiste à ne sélectionner qu'un seul pixel par boîte géographique d'une taille donnée. En opérationnel dans ARPEGE, on utilise une boîte carrée de 100 km de côté.

4.4.1.2 Sélection de canaux

Comme nous l'avons vu dans la description de IASI, celui-ci mesure un nombre important de canaux (8461) impossible à assimiler dans sa globalité. L'échantillonnage spatial permet une première réduction de la quantité d'information mais elle n'est pas suffisante. La réduction du nombre de canaux utilisés est également nécessaire. Cette sélection de canaux doit être menée de manière à sélectionner les canaux les plus informatifs et de mettre de côté la redondance d'information. Selon l'état du système d'analyse, de nombreux canaux sont rejetés. En effet, les canaux IASI au-dessus du numéro 6463 sont rejetés car ils sont contaminés par la réflexion solaire le jour. Les canaux sensibles au niveau du toit du modèle, pointant donc très haut, sont également rejetés car leur écart à l'ébauche est trop grand. Sont également rejetés les canaux sensibles aux espèces chimiques dont les profils d'ébauche sont mal décrits. Finalement, les grands centres de PNT, utilisent la sélection de canaux effectuée par [Collard, 2007]. Cette sélection est composée de 300 canaux dont certains sont des canaux fenêtre (surface/nuage) et d'autres sont sensibles au dioxyde de carbone, à l'ozone et à la vapeur d'eau. À la demande du CNES, 14 canaux ont été ajoutés à cette sélection pour le suivi climatique.

À Météo-France, 123 canaux IASI parmi les 314 monitorés, étaient assimilés en opérationnel dans le système global de PNT ARPEGE au début de cette étude. Parmi ces canaux, 99 sont sensibles au CO_2 permettant de restituer de l'information sur les profils de température (voir Figure 4.1), 20 sensibles à la vapeur d'eau pour restituer de l'information sur les profils d'humidité et 4 canaux fenêtres pour obtenir de l'information sur la surface ou les nuages (1 canal sensible à la vapeur d'eau et 5 canaux sensibles à l'ozone ont été ajoutés depuis). Les 123 canaux sont assimilés sur mer mais seulement 80 le sont sur terre. En effet, pour s'affranchir des incertitudes sur l'émissivité et les paramètres de surface, seuls les canaux stratosphériques, de haute et moyenne troposphère sont donc assimilés sur terre. Ainsi sur la Figure 4.17.a sont représentés les 99 canaux sensibles au CO_2 (courbes noires), 20 canaux sensibles à H_2O (courbes bleues) et 4 canaux fenêtres (courbes rouges) assimilés sur mer. La Figure 4.17.b représente les 72 canaux sensibles au CO_2 (courbes noires) et les 8 canaux sensibles à H_2O (courbes bleues) assimilés sur terre.

Une autre approche permet de compresser l'information à l'aide de l'analyse en composantes principales (ACP). Celle-ci consiste à rechercher les directions de l'espace représentant au mieux les corrélations entre les différents canaux. Cette approche géométrique et statistique va ainsi former des groupes de canaux et proposer un nouveau jeu de canaux artificiels décorrélés entre eux et significativement réduits par rapport au nombre de canaux initiaux.

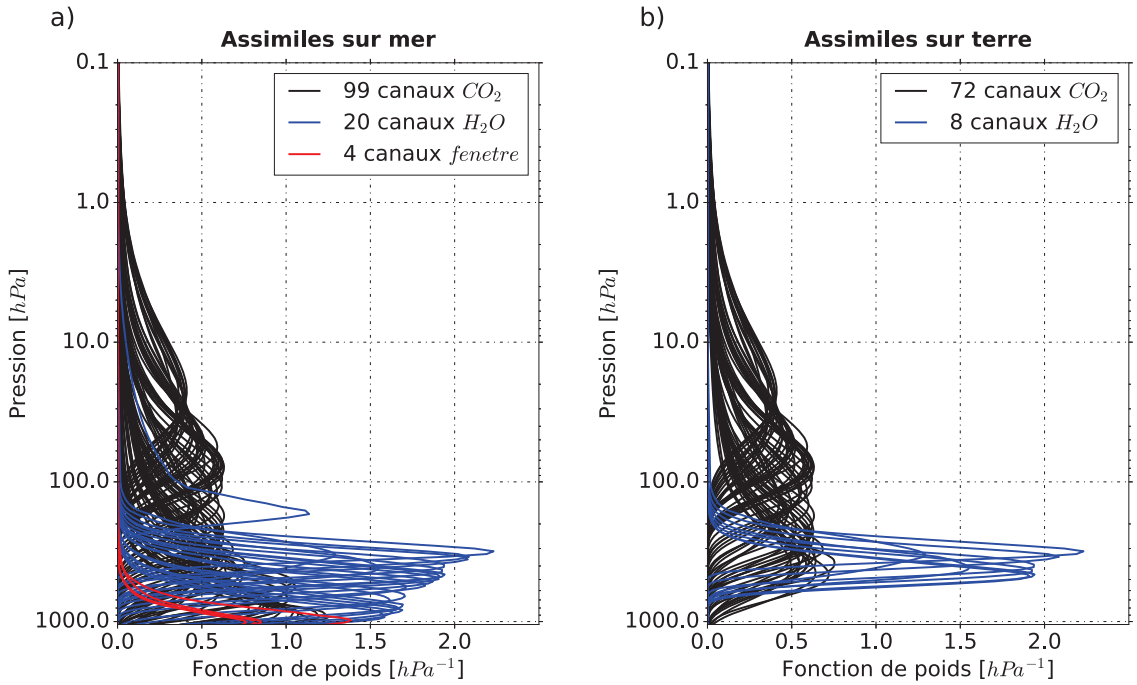


FIGURE 4.17: Fonctions de poids des canaux IASI assimilés en opérationnel dans le modèle de PNT global ARPEGE sur mer (a) et sur terre (b). En noir les canaux sensibles au CO_2, en bleu ceux de la bande sensible à la vapeur d'eau et en rouge les canaux fenêtres.

4.4.2 Schéma de détection nuageux

Les observations de l'instrument IASI ont permis d'améliorer significativement nos modèles globaux mais il demeure une limitation et non des moindres au sondage infrarouge, comme le schématise la Figure 4.18 : les nuages ! En effet, une grande majorité des observations satellitaires est contaminées par des nuages. C'est pour cela que dans un premier temps les grands centres de PNT ont uniquement assimilé les pixels clairs [English et al., 1999]. Le rejet des observations contaminées par les nuages s'explique par la complexité à prendre en compte l'influence nuageuse sur les observations. Cependant, [Fourrié and Rabier, 2004] ont montré que 90 % des pixels de IASI sont totalement ou partiellement contaminés par les nuages conduisant à une sous-exploitation importante de ces observations. De plus, de nombreuses études ont montré que de petites erreurs dans les conditions initiales de certaines zones nuageuses peuvent conduire à de très importantes erreurs de prévision [McNally, 2002].

Les techniques variationnelles, les améliorations en termes de modélisation nuageuse et de transfert radiatif, nous ont permis une meilleure utilisation des pixels nuageux. Actuellement à Météo-France, l'assimilation des luminances spectrales nuageuses repose sur plusieurs schémas :

- Le schéma de détection nuageuse [McNally and Watts, 2003] permet de diagnostiquer les pixels clairs et nuageux ;
- La méthode de caractérisation nuageuse dite du « CO_2 *Slicing* » permet de calculer une pression de sommet de nuage PTOP et une fraction nuageuse effective N_e. Ces deux paramètres sont fournis au MTR RTTOV et permettent de modéliser l'impact radiatif du nuage sous forme de nuages monocouches d'émissivité égale à 1 [Guidard et al., 2011].

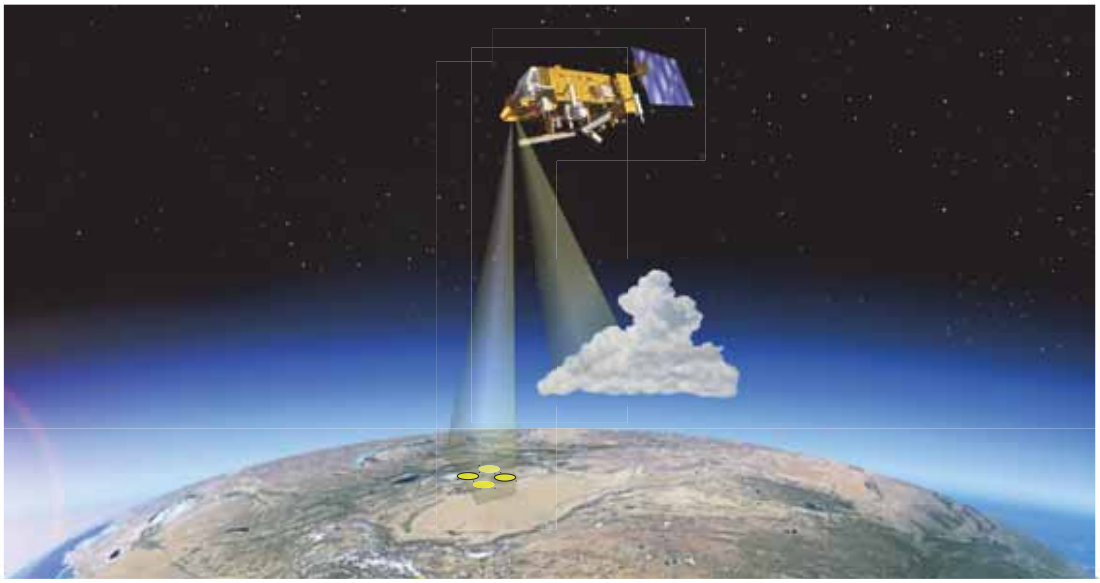


FIGURE 4.18: Schéma du sondage infrarouge reçu par l'instrument IASI en ciel clair et nuageux.

Si la valeur de la couverture nuageuse issue de l'AVHRR dans le pixel IASI vaut 100 %, que la pression de sommet de nuage PTOP est comprise entre 900 et 650 hPa et que la fraction nuageuse effective N_e est égale à 1, alors on assimile les canaux affectés par les nuages, rejetés précédemment par le schéma de détection. Dans ces canaux nuageux, seuls les canaux sensibles au CO_2 pointant dans la stratosphère et haute troposphère sont retenus. Cela ne représente qu'un gain d'environ 1 % de canaux supplémentaires tant les critères sont restrictifs. De nombreuses études sont actuellement en cours dans les grands centres de PNT afin de pouvoir assimiler de manière optimale ces canaux nuageux.

Malgré toutes ces compressions et limitations de l'information, IASI fournit la plus grande proportion du nombre d'observations assimilées pour le système global de PNT ARPEGE comme l'illustre le schéma de la Figure 4.19. Celui-ci représente le cumul mensuel des observations conventionnelles et satellitaires utilisées dans ARPEGE. Actuellement, les observations IASI représentent environ 58 % de toutes les observations utilisées. De plus, on remarque que les observations issues des sondeurs infrarouges hyperspectraux correspondent à environ 75 % des données apportées au système d'assimilation.

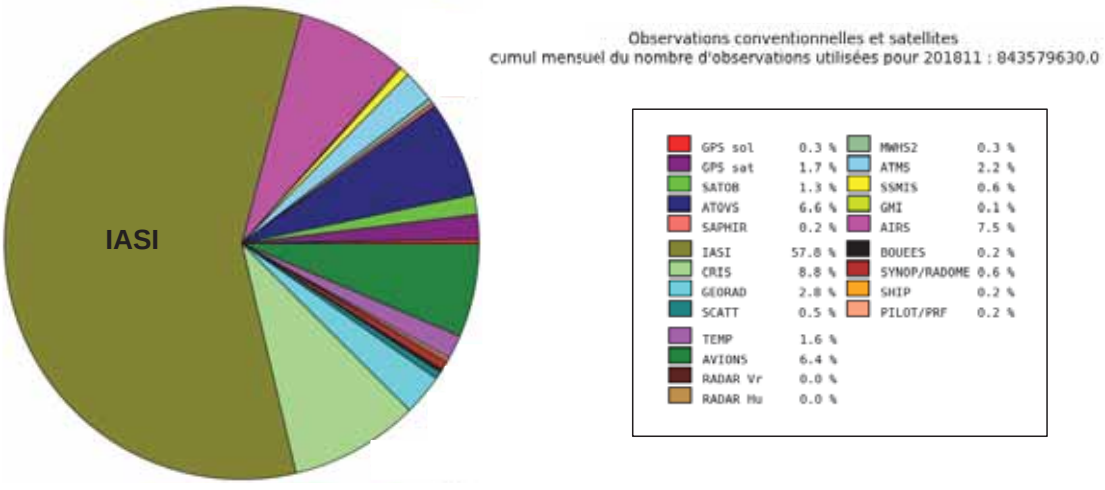


FIGURE 4.19: Schéma de la répartition du nombre d'observations (conventionnelles et satellitaires) utilisées en novembre 2018 dans le système global de PNT ARPEGE.

4.5 L'essentiel du Chapitre 4

- L'assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle 4D-Var permet d'estimer l'état le plus probable de l'atmosphère, nommé analyse, à travers une trajectoire optimale sur une fenêtre de temps donnée. Cet état est utilisé comme condition initiale au modèle global ARPEGE à Météo-France. L'analyse est obtenue en minimisant la fonction de coût J qui mesure la distance de l'état de l'atmosphère par rapport à l'ébauche, aux observations et aux contraintes dynamiques sur l'analyse :

$$\mathrm{J}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{\mathrm{b}}) + \frac{1}{2}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}}(\mathbf{y}_{\mathrm{i}}-\mathcal{H}_{\mathrm{i}}[\mathbf{x}(\mathrm{t}_{\mathrm{i}})])^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_{\mathrm{i}}^{-1}(\mathbf{y}_{\mathrm{i}}-\mathcal{H}_{\mathrm{i}}[\mathbf{x}(\mathrm{t}_{\mathrm{i}})]) + \mathrm{J}_{\mathrm{c}}(\mathbf{x})$$

- Les matrices de covariances d'erreur d'ébauche $\mathbf{B}$ et d'observation $\mathbf{R}$ sont essentielles, elles permettent de pondérer le poids à apporter aux deux sources d'information et déterminent ainsi leurs contributions respectives à l'analyse.

- Le modèle global ARPEGE est un modèle spectral hydrostatique possédant une grille variable de 7.5 km sur la France et 36 km aux antipodes. Il possède 105 niveaux verticaux hybrides. Il est couplé à un cycle d'assimilation 4D-Var pour les conditions initiales du système de PNT. Il exécute deux cycles opérationnels d'analyses-prévisions.

- Une grande quantité d'observations (conventionnelles et satellitaires) est assimilée dans ARPEGE. Les sondeurs infrarouges hyperspectraux apportent environ 75 % des données assimilées, tandis que IASI en apporte 58 %, toutes observations confondues.

- Un contrôle de qualité des observations est réalisé par une évaluation de la différence entre les observations et l'ébauche permettant de rejeter les différences supérieures à un seuil de rejet déterminé pour chaque observation. Les observations sont débiaisées en amont par une méthode adaptative et variationnelle nommée Var-BC.

- Le suivi des données depuis la mise en place de l'assimilation 4D-Var (monitoring), permet de mettre en évidence les avancées significatives dans la réduction des écarts entre les ébauches, les observations et les analyses du modèle.

- Les observations issues du sondeur infrarouge hyperspectral IASI apportent une quantité incroyable d'information avec ses 8461 canaux sur 4 pixels. Une réduction de l'information a conduit à la sélection de 123 canaux IASI en opérationnel dans ARPEGE et à l'utilisation d'un seul pixel sur les quatre disponibles. Un nombre différent de canaux est assimilé sur mer (123) et sur terre (80).

- Les nuages représentent une limitation importante dans l'utilisation des canaux issus des sondeurs infrarouges hyperspectraux. À Météo-France, un schéma de détection nuageuse (McNally et Watts, 2003) et une méthode de caractérisation des nuages (CO_2 slicing) permettent de détecter et de prendre en compte les pixels nuageux.

Chapitre 5

Modèle de Chimie Transport

« L'amour, c'est de la physique, le mariage c'est de la chimie. »

Alexandre Dumas fils

Sommaire

5.1 Description 122
5.2 Le modèle MOCAGE 125
5.3 L'essentiel du Chapitre 5 128

5.1 Description

Nous venons de montrer que la modélisation numérique est un outil fondamental pour la recherche et les prévisions météorologiques. Il s'agit d'un domaine complexe nécessitant un ensemble de connaissances et/ou d'hypothèses, traduits sous la forme d'équations mathématiques ou de relations empiriques, résolues généralement de façon approchée à l'aide de moyens de calculs en constante évolution. La théorie de la modélisation de l'atmosphère remonte déjà à plus d'un siècle et a toujours été étroitement liée à la puissance de calcul des ordinateurs.

La modélisation dans le domaine de la physico-chimie de l'atmosphère est plus récente. En effet, les premiers modèles tridimensionnels globaux ont vu le jour il y a une vingtaine d'années, en particulier les Modèles de Chimie Transport. Ces modèles sont plus connus sous leur nom anglais « Chemistry Transport Model » (MCT) et sont capables de calculer les champs d'espèces chimiques en prenant en compte les paramètres thermodynamiques adéquats. Ils utilisent comme forçage des conditions initiales, la thermodynamique (rayonnement, vent, température, pression, humidité, précipitations) provenant d'autres systèmes de modélisation (ARPEGE, IFS, etc.). Les informations sur les sources d'émissions chimiques proviennent de cadastres qui évoluent dans le temps (de l'heure au mois selon l'espèce chimique). Le fait d'utiliser ces paramètres thermodynamiques sans les recalculer s'appelle le « mode off-line » et permet aux MCT d'être relativement rapides.

Modéliser l'atmosphère et sa composition est un problème qui ne dispose pas de solution analytique, rendant ainsi sa résolution difficile. Seules des méthodes de discrétisation permettent d'établir des équations compatibles avec les moyens de calculs numériques actuels. Ainsi, selon ce que le modélisateur va vouloir étudier, des choix techniques devront être pris afin de simplifier le modèle numérique tel que : la sélection du domaine géographique, de l'altitude, les résolutions horizontale et verticale, les processus physiques et chimiques pris en compte etc.. Malheureusement, toutes ces simplifications apportent des erreurs et des incertitudes sur la qualité des simulations. Or, les objectifs scientifiques résultant de ces modélisations demandent une qualité de plus en plus précise. En effet, une des finalités de la modélisation, notamment pour la recherche, est la vérification des hypothèses et de la connaissance de l'état de l'art, par confrontation des simulations numériques avec la réalité observée, à savoir des mesures satellitaires ou *in-situ*.

Une autre finalité est d'utiliser les MCT à des fins de prévisions plus ou moins lointaines : prévision de la composition chimique à quelques jours pour la qualité de l'air, jusqu'à la prévision sur plusieurs décennies pour le changement climatique. Enfin, les résultats des MCT sont également utilisés par les décideurs afin de mettre en place des solutions aux problèmes de pollution urbaine, par exemple. Il existe une large variété de MCT à différentes échelles spatiales (liste non-exhaustive) :

- à l'échelle globale : MOZART[1] [Emmons et al., 2010] développé au NCAR[2], TM5[3] [Huijnen et al., 2010] développé au KNMI[4] et MOCAGE[5] [Bousserez et al., 2007] développé au CNRM de Météo-France.

- à l'échelle continentale : TGM[6] [Peters et al., 1995] pour les États-Unis, CHIMERE [Menut et al., 2014] et MOCAGE [Guth et al., 2016] pour l'Europe.

[1] Model for OZone And Related chemical Tracers
[2] National Center for Atmospheric Research
[3] Tracer Model version 5
[4] Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut
[5] Modèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle
[6] Third Generation Models

- à l'échelle régionale : SMOG[7] [Lu et al., 1997] sur Los-Angeles (USA), MESO-NH-C[8] [Tulet et al., 2000] sur Toulouse (France) et CHIMERE [Vautard et al., 2001] sur Paris (France).

Ces derniers modèles à l'échelle régionale sont dédiés à l'étude et la prévision de la pollution urbaine. Ils permettent également de réaliser des comparaisons par rapport aux observations afin d'établir des quantifications plus précises des incertitudes de modélisation. Ils sont utilisés pour prévoir l'évolution des concentrations des polluants et sont un outil indispensable à la prise de décision des pouvoirs publics dans les alertes et les plans d'action de réduction des émissions. Le développement de ces modèles a permis de comprendre que l'échelle spatiale des épisodes de pollution photochimique dépassent les limites régionales d'où la nécessité de modèles pouvant simuler à de plus grande échelles. En effet, comme nous l'avons expliqué précédemment, la pollution dans les basses couches de l'atmosphère est souvent observée à proximité des sources de composés primaires. Cependant, une partie de la pollution photochimique provient également du transport à longue distance de polluants tels que l'ozone et d'autres précurseurs, qui viennent s'ajouter à la pollution locale. C'est pour cela que des modèles à l'échelle continentale ont été développés tels que le MCT MOCAGE.

Les MCT nous permettent de réaliser des simulations réalistes de la composition et du transport chimique pour différents polluants photochimiques. Néanmoins, l'élaboration de ces modèles demeure compliquée tant les phénomènes étudiés sont complexes. En effet, la variabilité spatiale et temporelle des émissions de polluants est tellement importante que la simulation parfaite des concentrations est impossible. De plus, la qualité et la précision des MCT est souvent en lien avec la connaissance scientifique du moment, tant du point de vue modélisation physique et chimique que des avancées sur la modélisation des émissions, des types de sol, etc.. De ce fait, il suffit qu'un seul des paramètres d'entrée soit mal décrit pour que des erreurs s'accumulent, dégradant ainsi la qualité des champs de concentration des polluants simulés.

Enfin, pour limiter le coût de calcul induit par ces simulations, le modélisateur peut choisir intentionnellement de réduire la précision de son modèle en réduisant par exemple le nombre de composés à simuler, d'équations photochimiques, la résolution verticale et/ou horizontale, etc. De plus, il est important d'identifier toutes les incertitudes et les erreurs du modèle à l'aide d'observations. Enfin, dans un contexte croissant d'urbanisation, il est essentiel de réaliser des simulations, des études et prévisions de scénarios possibles d'évolution des émissions anthropiques afin de limiter l'impact sanitaire des épisodes de pollution et d'exposition des populations.

La modélisation numérique de la composition chimique de l'atmosphère est en fait indissociable de celle de la météorologie. En effet, nous avons vu dans le Chapitre 1 que la chimie participe à différents échanges au sein des composantes qui contituent le système climatique, l'importance de la chimie dans les simulations des observations satellitaires par l'intermédiaire des MTR a été explicitée dans le Chapitre 2, la sensibilité des luminances spectrales mesurées, à la composition chimique de l'atmosphère dans le Chapitre 3 et l'impact de ces luminances dans les modèles météorologiques décrit dans le Chapitre 4. Alors, une deuxième solution est d'avoir un modèle qui traite non seulement de la composition chimique de l'atmosphère, mais également de la thermodynamique météorologique. On nomme ce type de modèle, le mode « on-line ». Contrairement aux MCT en mode « off-line », on peut prendre en compte les rétroactions de la chimie sur les conditions météorologiques. Ce type de modèle permet, par exemple, de réaliser des études sur l'impact des différents processus physico-chimiques sur la météorologie.

[7] The Surface Meteorology and Ozone Generation
[8] MESOscale Non-Hydrostatic numerical model and Chemistry

Ils permettent également de réaliser des simulations climatiques prenant en compte les rétroactions des gaz et aérosols sur le climat [Ramanathan et al., 1987]. Les modèles C-IFS[9] développé au CEP [Flemming et al., 2015] et WRF-CHEM[10] développé au NOAA/ESRL[11] [Grell et al., 2005] sont des exemples de modèles « on-line » qui ont intégré la chimie en mode couplé leur permettant de réaliser des prévisions numériques du temps et de la composition chimique de l'atmosphère. Ces modèles ont le désavantage d'avoir un coût numérique très important par rapport aux MCT « off-line » et nécessitent des connaissances précises sur les processus complexes d'interactions.

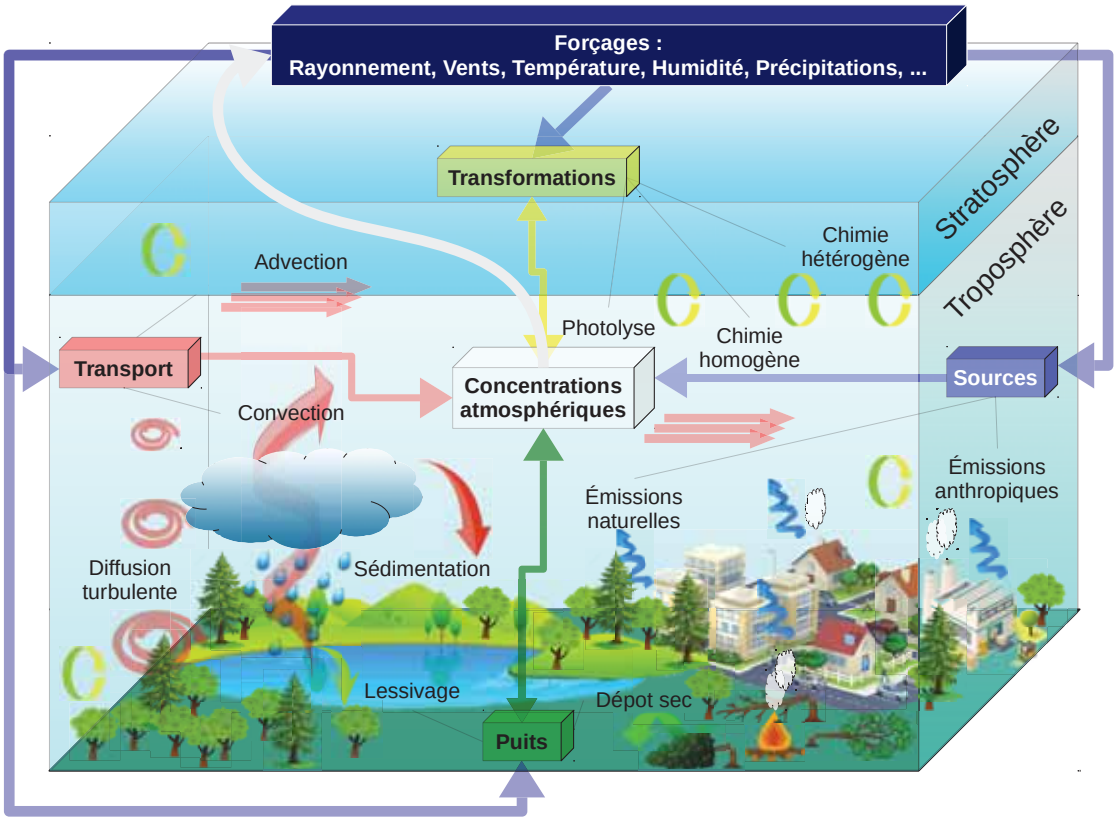


FIGURE 5.1: Illustration des principaux processus physico-chimiques impliqués dans l'évolution spatiale et temporelle des distributions d'espèces chimiques dans l'atmosphère.

Afin d'appréhender la complexité des interactions entre les différents processus physico-chimiques, nous avons synthétisé sur la Figure 5.1 l'ensemble des principaux processus impliqués dans l'évolution des concentrations d'espèces chimiques ou de particules. On remarque que la **concentration atmosphérique** est susceptible de jouer un rôle sur l'injection de composés dans l'atmosphère (**Sources** en bleu), sur leur transport et leur dispersion dans l'atmosphère (**Transport** en rouge), sur les différentes transformations physico-chimiques (**Transformations** en jaune) et sur leur retrait de l'atmosphère (**Puits** en vert). Les sources d'émission d'espèces chimiques dans l'atmosphère sont d'origines humaines et naturelles : respiration des végétaux, éclairs, aviation, cheminées, industrie, feux de biomasse, etc.. Ces émission varient dans le temps sous l'effet des processus de transports verticaux et horizontaux tels que la convection, la diffusion turbulente, l'advection et la sédimentation.

[9]Composition Integrated Forecasting System
[10]Weather Research and Forecasting/Chemistry
[11]Earth System Research Laboratory

Simultanément à ces derniers processus, les composés sont soumis à des transformations physico-chimiques telles que la photolyse et d'autres réactions chimiques en phase homogène et hétérogène. Finalement, les puits d'espèces chimiques sont présents à la fois dans l'atmosphère par l'intermédiaire du lessivage dans les nuages et sous les nuages pour les composés hydrosolubles, et à la surface par des dépôts secs. Ces processus sont eux-même influencés par des forçages météorologiques (**Forçages** en bleu foncé), qui peuvent provenir d'un modèle de prévision numérique du temps ou d'un modèle de climat. Tous ces processus ont pour vocation de faire évoluer les concentrations des espèces chimiques spatialement et temporellement. De plus, la concentration de ces espèces peut exercer des rétroactions sur les forçages météorologiques par l'équation de transfert radiatif (Chapitre 2) ou éventuellement modification du cycle hydrologique. Comme nous l'avons dit, le plus souvent ces rétroactions sont négligées amenant à travailler avec des modèles « off-line ». C'est le cas au CNRM de Météo-France avec le MCT MOCAGE.

5.2 Le modèle MOCAGE

En France, nous avons à notre disposition trois MCT ; le modèle INCA[12] couplé au modèle de circulation générale du LMD[13] et développé au LSCE[14] en collaboration avec l'IPSL[15], le modèle CHIMERE et MOCAGE. Ces deux derniers MCT sont utilisés en mode opérationnel et en mode recherche et fournissent des prévisions journalières des champs d'espèces chimiques pour la surveillance de la qualité de l'air (O_3, N_2O, ect.). Ces modèles ont un fonctionnement similaire et ici nous allons nous intéresser particulièrement au MCT MOCAGE.

MOCAGE (Modèle de Chimie Atmosphérique de Grande Échelle) est le MCT du CNRM de Météo-France. C'est un modèle global tridimensionnel en point de grille (Figure 5.2).

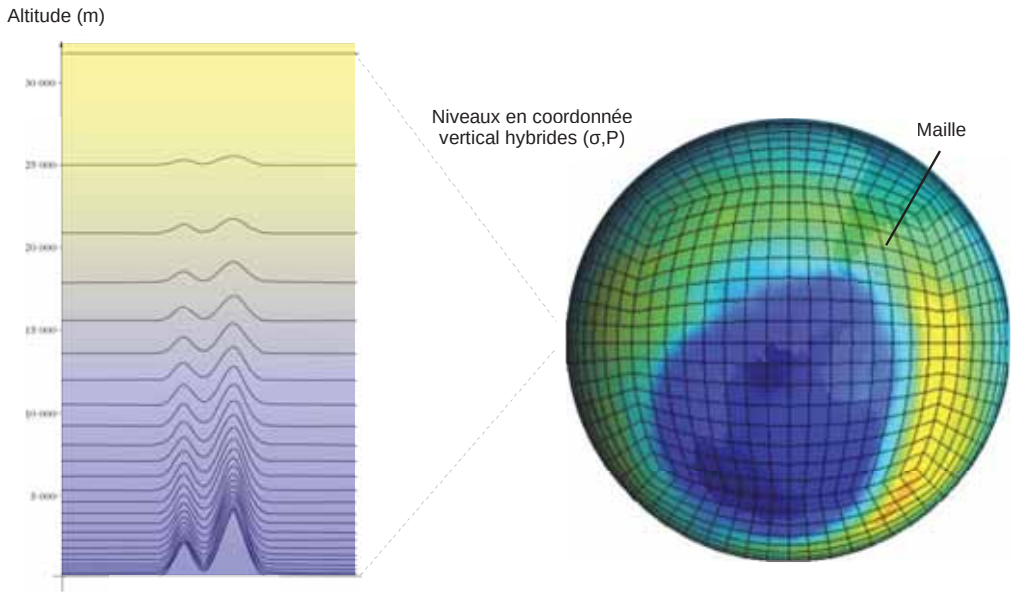


FIGURE 5.2: Schéma représentant un exemple d'architecture 3D qu'utilise le modèle MOCAGE pour réaliser des simulations numériques de la composition de l'atmosphère et sa structure verticale utilisant une coordonnée verticale hybride (σ,P).

[12] INteraction avec la Chimie et les Aérosols
[13] Laboratoire de Météorologie Dynamique
[14] Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement
[15] Institut Pierre et Simon Laplace

Il est capable de simuler les interactions entre dynamique, physique et chimie dans la basse stratosphère et la troposphère, en prenant en compte de manière détaillée les processus photochimiques et le transport des espèces à plus longues durées de vie. Il permet de traiter jusqu'à 4 niveaux de grilles imbriquées à double sens, la définition des différents domaines étant flexible. En effet, il peut être appliqué à l'échelle uniquement globale avec une résolution horizontale de 1° (100 km) ou sur des domaines plus fins à haute résolution, environ 10 km. Ainsi, une configuration est couramment utilisée pour la prévision des concentrations chimiques, à raison d'un calcul quotidien délivrant des prévisions sur 4 jours d'échéance, sur trois domaines imbriqués, elle est constituée d'un domaine global à 1° (GLOB10), d'un domaine européen à 0.5° (GEMS05) et d'un sur la France à 0.1° (FRAN01). Sur la verticale, une coordonnée hybride σ (Figure 5.2) permet de s'adapter au relief près du sol puis de tendre vers des niveaux isobares. Dans la configuration courante, 47 niveaux se répartissent en 7 niveaux dans la couche limite atmosphérique, 20 dans la troposphère et 20 dans la stratosphère, pour un dernier niveau à 5 hPa. Une version étendue en mode recherche à 60 niveaux atteint 0.07 hPa.

La configuration multi-échelle permet de couvrir un spectre très large d'applications depuis l'étude ou la prévision de la qualité de l'air quotidienne, à la fois pour les constituants gazeux et les aérosols jusqu'aux études d'impact du changement climatique, en passant par le suivi de nuages de cendres volcaniques. Le MCT MOCAGE est en mode « off-line » et utilise des champs météorologiques archivés issus de modèles de prévisions du temps tels que ARPEGE, AROME, IFS, ou de modèles de climat. La fréquence d'alimentation en données météorologiques est actuellement de 1h pour les plus petits domaines, basée sur des analyse AROME. La vitesse verticale du vent est recalculée par MOCAGE pour s'assurer de la non divergence, et ainsi conserver la masse des constituants chimiques. MOCAGE recalcule également la nébulosité si elle n'est pas disponible en 3D dans les forçages et l'humidité dans la stratosphère pour tenir compte des transformations chimiques. La plupart des émissions sont également des données d'entrée du modèle, basées sur des inventaires réalisés par d'autres organismes, à différentes échelles spatio-temporelles. Les émissions de certaines espèces sont toutefois décrites de manière dynamique, par exemple il est absolument nécessaire que la quantité de poussières désertiques injectée dans l'atmosphère soit directement reliée au vent. Ainsi MOCAGE prend en compte plusieurs processus tels que :

- l'injection des composés chimiques dans l'atmosphère, au sol et en altitude,
- les transformations de ces composés par réactions chimiques,
- le transport de grande échelle, résolu explicitement par le modèle, ainsi que le transport sous-maille tels que la convection et la turbulence, pour lesquelles une paramétrisation est nécessaire ; l'advection s'appuie sur un schéma de transport semi-lagragien,
- l'élimination par dépôt sec en surface, par dépôt humide et par la sédimentation.

Dans la version pour la qualité de l'air, MOCAGE prend en compte 373 réactions chimiques, 118 espèces chimiques et 6 espèces d'aérosols primaires (poussières désertiques, sels marin, carbone-suie, carbone organique, particules anthropiques, pollens de bouleau) réparties en 6 classes de taille et des aérosols secondaires inorganiques. Pour la chimie gazeuse, le schéma chimique complet utilisé est baptisé RACMOBUS, constitué du regroupement des schémas troposphériques RACM (Regional Atmospheric Chemistry Mechanism) [Stockwell et al., 1997] et REPROBUS (Reactive Processes Ruling the Ozone Budget in the Stratosphere) [Lefevre et al., 1994]. L'ensemble de ces schémas chimiques permet de décrire aussi bien la pollution urbaine de basses couches que l'évolution de la couche d'ozone antarctique.

L'interaction entre les gaz et les particules primaires, pour former des aérosols secondaires, est aujourd'hui traitée pour les aérosols inorganiques via le module ISORROPIA [Fountoukis and Nenes, 2007], permettant notamment de décrire les nitrates et les sulfates. L'introduction des aérosols organiques secondaires est prévue à court terme. Voici une liste non-exhaustive de paramètres archivés :

- O_3, NO_2, NO, HNO_3, CH_4, HCHO, PAN (peroxyacetylnitrate), SO_2, CO, C_2H_6, C_2H_4, NH_3, AMMONI, SULFAT, NITRAT, ORGANC, alcènes, regroupement d'alcanes alcools esters et alcynes, aromatiques principaux (toluène, xylène, crésol, etc.), isoprène, terpènes (α-pinène, d-limonène et hydroxy-cétones, poussières désertiques et leur épaisseur optique, sels marin, aérosols carbonés, aérosols carbonés anthropiques et particules (PM10 et PM2.5).

Il existe également une version de MOCAGE sans transformations chimiques, baptisée MOCAGE-Accident, qui décrit en quelques minutes l'évolution sur le globe d'un rejet ponctuel de composé dans l'atmosphère. Cette version peut également être utilisée en mode inverse pour déterminer l'origine d'un polluant. La version complète et la version accident de MOCAGE sont pleinement opérationnelles à Météo-France. Ainsi, MOCAGE-Accident a été abondamment utilisé lors de l'éruption de l'Eyjafjallajokull en 2010, et de l'accident de Fukushima en 2011. MOCAGE est utilisé quotidiennement depuis 2005 pour alimenter Prev'Air, la plate-forme française de prévision de la qualité de l'air (`http://www2.prevair.org/`) qui propose des prévisions quotidiennes des concentrations de différents polluants [Rouil et al., 2009]. Il participe également à la prévision opérationnelle d'ensemble des modèles de qualité de l'air sur l'Europe de la plate-forme MACC (`http://www.regional.atmosphere.copernicus.eu/`).

Les applications dans le domaine de la recherche sont bien sûr très nombreuses. Dans le domaine de la qualité de l'air, MOCAGE a été utilisé de longue date : depuis la campagne ESCOMPTE en 2001 jusque, plus récemment, pour les campagnes TRAQA-CHARMEX (2012-2013). Il a également été partie prenante des différents projets de recherche GEMS puis MACC qui s'appelle maintenant CAMS. À plus grande échelle, les interactions entre la composition chimique de l'atmosphère et la mousson africaine ont été étudiées dans le cadre de la campagne AMMA. Une autre application est l'étude de l'impact du changement climatique sur la composition chimique de l'atmosphère. A l'échelle globale, MOCAGE est impliqué dans les projets ACCMIP et CCM-I. Le projet européen interdisciplinaire IMPACT2C s'est attaché à décrire les différentes facettes d'un monde où la température serait de 2 degrés supérieure à l'ère pré-industrielle. MOCAGE y a participé en décrivant l'évolution de la qualité de l'air. MOCAGE possède également un système d'assimilation de type variationnel (MOCAGE-Valentina) développé en étroite collaboration avec le CERFACS [Lahoz et al., 2007] qui est utilisé pour assimiler des observations satellitaires de composition de l'air, des observations in situ de qualité de l'air et pour préparer de futures missions satellitaires via la technique des OSSE (Observing System Simulation Experiment) (Source : `https://www.umr-cnrm.fr/spip.php?article128`).

5.3 L'essentiel du Chapitre 5

- Les modèles de chimie transport que l'on nomme souvent par leur nom anglais « Chemistry Transport Model » (MCT), sont capables de calculer les champs d'espèces chimiques en prenant en compte les paramètres thermodynamiques et des informations sur les sources d'émissions et les puits chimiques qui évoluent dans le temps. Ils permettent de prévoir à plus ou moins long terme la composition chimique pour la qualité de l'air (quelques jours) ou pour le changement climatique (plusieurs décennies).
- Il existe plusieurs MCT à différentes échelles spatiales, globale, continentale ou régionale.
- Le mode de modélisation « off-line » simule les concentrations chimiques de l'atmosphère sans recalculer les paramètres thermodynamiques utilisés en entrée du MCT. Il permet au MCT d'être relativement rapide.
- Le mode de modélisation « in-line » traite non seulement de la composition chimique atmosphérique, mais également de la thermodynamique météorologique lui permettant de prendre en compte les rétroactions entre les processus chimiques et physiques et d'étudier l'impact de ces processus sur la météorologie. Ce mode permet également de réaliser des simulations climatiques plus réalistes en prenant en compte des rétroactions des gaz et aérosols sur le climat.
- Les principaux processus qui régissent les interactions physico-chimiques sont les concentrations atmosphériques, les sources, les transformations, les puits, les transports et les forçages.
- Le MCT MOCAGE (Modèle de Chimie Atmosphérique de Grande Échelle) est le modèle chimique « off-line » du CNRM de Météo-France. C'est un modèle global tridimentionnel capable de simuler les interactions entre dynamique, physique, chimie dans l'atmosphère en prenant en compte de manière détaillée les processus photochimiques et le transport des espèces.
- Le modèle MOCAGE prend en compte 373 réactions chimiques, 118 espèces chimiques différentes et 6 espèces d'aérosols primaires.
- MOCAGE est utilisé en mode recherche et en mode opérationnel pour l'étude et la prévision de la qualité de l'air quotidienne en alimentant la plate-forme française Prev'Air. Il est également utilisé pour l'étude du changement climatique et le suivi des nuages de cendres volcaniques.

Deuxième partie

Travaux scientifiques

Objectifs scientifiques de la thèse

L'objectif de cette thèse est de renforcer l'assimilation de nouvelles observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles ARPEGE et MOCAGE. Ce couplage sera réalisé *in fine* par des méthodes d'assimilation couplée qui sera un point de départ à la chimie « en ligne » dans ARPEGE. Ce travail a pour objectif principal d'améliorer significativement les analyses thermodynamiques et chimiques et de ce fait les prévisions météorologiques et chimiques.

La première étape de cette étude exposée dans le Chapitre 6 consiste à évaluer l'impact de l'utilisation de différentes sources de chimie atmosphérique sur les simulations des observations satellitaires infrarouges. Ce travail de vérification s'appuiera sur les données chimiques mesurées lors d'une campagne de mesure, sur les données de profils d'ozone mesurés *in situ* du réseau international ainsi qu'une climatologie élaborée dans le cadre d'un stage de Master 1 que j'ai co-encadré. Les profils chimiques mesurés lors de la campagne de mesure serviront également de données de vérification des ébauches chimiques issues des modèles de chimie-transport.

Le Chapitre 7 a pour objectif de préparer l'assimilation d'observations satellitaires infrarouges supplémentaires, en l'occurrence des observations IASI sensibles à l'ozone, par le couplage des modèles ARPEGE et MOCAGE. Les expériences d'assimilation de données seront conduites dans un cadre simplifié uni-dimensionnel (1D-Var). Cette partie de l'étude a également pour but de poser les méthodes et techniques nécessaires pour mener à bien ce travail de thèse. Ce chapitre sera l'occasion d'évoquer les premiers travaux d'estimation des matrices de covariances d'erreur d'observations diagnostiquées et d'ébauche en ozone. Les premiers résultats de l'assimilation d'observations IASI sensibles à l'ozone par le couplage ARPEGE-MOCAGE seront évalués à l'aide de données de vérifications *in situ*, et confrontés aux analyses.

Le sous-ensemble des observations IASI sensibles à l'ozone utilisées dans l'étude précédente n'est pas forcément le plus optimal pour notre travail de thèse. Ainsi, le Chapitre 8 présente une nouvelle sélection des observations sensibles à l'ozone à partir du spectre complet de IASI en utilisant des configurations ambitieuses en terme d'erreur d'observation et d'ébauche en ozone. L'objectif de cette étude est d'obtenir une sélection des observations IASI sensibles à l'ozone les plus informatives en température, humidité, ozone et température de surface afin d'améliorer simultanément les analyses thermodynamiques et chimiques.

Enfin, l'ensemble des travaux réalisés permettra d'utiliser les champs 3D d'ozone issus de MOCAGE directement dans le système du 4D-Var ARPEGE et d'ajouter à la fois la nouvelle sélection d'observations IASI sensibles à l'ozone déterminée dans le Chapitre 8 et l'ozone à la variable de contrôle du 4D-Var pour obtenir les premières analyses d'ozone dans ARPEGE. L'objectif de ce travail est de montrer que l'utilisation de champs d'ozone réalistes dans le processus d'assimilation 4D-Var a un impact positif sur l'utilisation des différentes observations (satellitaires et conventionnelles) et sur les analyses thermodynamiques. Toutes ces modifications dans le 4D-Var seront évaluées via leur impact sur l'assimilation des autres observations, la modification des analyses et de la qualité des prévisions qui en découlent.

Finalement, nous terminerons ce manuscrit par une conclusion générale et évoquerons les perspectives qu'ouvrent cette thèse, pour une réalisation à court et moyen termes.

Chapitre 6

Sensibilité des observations satellitaires infrarouges à la chimie atmosphérique

« L'observation est l'investigation d'un phénomène naturel, et l'expérience est l'investigation d'un phénomène modifié par l'investigateur. »

Claude Bernard

Sommaire

6.1 Introduction et objectifs de ce chapitre 136
6.2 La campagne de mesure APOGEE 137
6.2.1 Cadre et objectifs de la campagne 137
6.2.2 Résumé de l'article et étude complémentaire 145
6.2.3 Conclusion et discussion 153
6.3 L'article : The evolution of AMULSE (Atmospheric Measurements by Ultra-Light Spectrometer) and its interest in atmospheric applications.Results of the Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs (APOGEE) weather balloon release campaign for satellite retrieval validation 154
6.4 Élaboration d'une climatologie évolutive de CO_2 pour améliorer l'utilisation des sondeurs infrarouges 174
6.4.1 Cadre et objectifs du stage 174
6.4.2 Climatologie évolutive de CO_2 à partir de réanalyses 175
6.4.2.1 Analyses des champs MACC-III 175
6.4.2.2 Construction de la climatologie évolutive de CO_2 177
6.4.3 Sensibilité des observations IASI aux ébauches en CO_2 184
6.4.4 Conclusion et discussion 187

6.1 Introduction et objectifs de ce chapitre

Nous avons montré dans le Chapitre 2 que les simulations des observations satellitaires requièrent une connaissance *a priori* de l'état de l'atmosphère le plus probable. Dans le modèle global de PNT ARPEGE, le MTR RTTOV utilise des champs thermodynamiques d'ébauche issus de prévisions à courte échéance. Cependant les ébauches de la composition chimique de l'atmosphère proviennent de profils chimiques de référence invariants dans le temps et l'espace. Or, une grande partie des observations satellitaires assimilées dans les modèles de PNT sont sensibles à la chimie atmosphérique et particulièrement les luminances spectrales sensibles au rayonnement infrarouge. Cette approximation a donc un impact important sur le processus d'assimilation des observations et de ce fait sur la qualité des analyses et prévisions météorologiques. Effectivement, nous avons présenté dans le Chapitre 4, l'opérateur d'observation linéarisé **H** qui permet de projeter les luminances spectrales dans l'espace du modèle. Cet opérateur est déterminé à l'aide des ébauches thermodynamiques et chimiques.

De ce fait, l'utilisation de profils chimiques constants, là ou logiquement, la composition chimique de l'atmosphère est très variable, représente une large approximation qui peut avoir un impact négatif sur le réalisme des simulations des observations satellitaires infrarouges et se projeter en erreur dans le modèle en dégradant la qualité des inversions. De plus, même si la méthode du Var-BC, détaillée dans le Chapitre 4 permet de débiaiser les observations, il est toujours préférable de réduire les biais en amont grâce à une meilleure simulation des observations. En effet, comme le montrent [Engelen and Bauer, 2014], l'utilisation d'une ébauche de CO_2 plus réaliste dans le MTR RTTOV au lieu du profil chimique constant, permet de mieux simuler les canaux AIRS et IASI sensibles au dioxyde de carbone. Ces améliorations ont un impact positif sur la qualité des analyses et des prévisions particulièrement aux Tropiques et dans la stratosphère, dans leur études.

Les observations satellitaires représentent la majorité des données utilisées dans les systèmes de PNT. À Météo-France, les données satellitaires représentent environ 90 % des observations assimilées dans le 4D-Var. Au-delà des approximations chimiques utilisées dans le MTR RTTOV, il est primordial d'évaluer précisément la qualité des différentes mesures spatiales afin de déterminer d'éventuelles incertitudes et biais. Ces études de vérification sont réalisées le plus souvent à l'aide de mesures *in situ* pour la validation et l'inter-comparaison avec les observations satellitaires. En effet, valider la précision des observations satellitaires par comparaison avec des mesures indépendantes réalisées dans l'atmosphère ou en surface est cruciale pour les modèles de PNT et les modèles de Chimie-Transports qui assimilent ces observations mais également pour la surveillance et le suivi de l'évolution des principaux gaz à effet de serre dans l'atmosphère. Le réseau de mesures conventionnelles thermodynamiques (température, humidité, etc.) dispose d'une grande quantité d'information que ce soit en surface (stations au sol, bouées, etc.) ou sur la verticale (radiosondages, avions, etc.). Ces mesures représentent une base de données très utile aux études de validation et inter-comparaison des observations satellitaires. Cependant, le réseau de mesures conventionnelles chimiques est bien moins développé et représente actuellement une limite pour ces études de vérification, particulièrement sur la verticale atmosphérique. En effet, il existe quelques stations de mesures chimiques au sol, des campagnes de mesures aéroportées, des radiosondages mesurant l'ozone mais il n'existe pas de réseaux de radiosondages capables de mesurer plusieurs gaz atmosphériques sur la verticale, aussi développés que ceux mesurant la température et l'humidité sur l'ensemble du globe. Or, pour évaluer des observations satellitaires, sensibles du sommet de l'atmosphère jusqu'à la surface, une connaissance précise de la concentration des différents gaz atmosphériques selon la verticale est indispensable.

En attendant un réseau robuste de profils verticaux de mesure *in situ* des différents gaz à effet de serre sur l'ensemble du globe, une des solution est l'élaboration de climatologie synthétisant la composition chimique de l'atmosphère en atlas pouvant être séparé spatialement et temporellement. Pour ce faire, les données issues des stations de mesure en surface en complément des réanalyses chimiques, sont très utiles. La méthode de réanalyse consiste à réanalyser objectivement les données globales de surface et d'altitude (météorologiques ou chimiques) prises sur une période s'étendant sur plusieurs décennies en utilisant l'assimilation de données dans les modèles de PNT et MCT. Les informations issues de ces réanalyses ne représentent pas la réalité mais sont bien plus réalistes que des profils invariant dans le temps et l'espace.

Depuis quelques années, des instruments perfectionnés capables de mesurer précisément certains gaz atmosphériques ont été développés. Le premier atout de ces nouveaux outils et qu'ils peuvent être embarqués sous ballons météorologiques afin de réaliser des mesures selon la verticale atmosphérique. L'un de ces instruments capables de mesurer le dioxyde de carbone, le méthane et la vapeur d'eau a été utilisé dans le cadre d'une campagne de mesure à laquelle nous avons participé et ajouté la mesure de profils *in situ* d'ozone. Dans cette étude les objectifs ont été multiples. Ainsi dans ce Chapitre, nous avons dans une première partie évalué la sensibilité des observations satellitaires infrarouges des instruments IASI et CrIS à la chimie atmosphérique et particulièrement au CO_2, CH_4 et O_3. Nous avons donc comparé les simulations réalisées à partir du MTR RTTOV en utilisant soit les profils chimiques constants soit les profils mesurés *in situ* dans le cadre de la campagne. Ensuite, pour évaluer globalement l'impact que peut avoir l'utilisation d'une ébauche chimique réaliste ou non sur les simulations des observations satellitaires, nous avons échantillonné plusieurs profils d'ozone mesurés sur l'ensemble du globe sur une période d'un an issus d'une base de données internationale. Ces profils ont été utilisés pour réaliser des simulations des observations IASI qui ont été comparées aux simulations réalisées avec le profil d'ozone constant. Puis, la mesure de profils de CH_4 et O_3 réalisée dans le cadre de cette campagne nous a également permis d'évaluer la qualité des profils chimiques modélisés par les MCT, dans notre cas MOCAGE et CAMS. Enfin, les profils d'ozone mesurés *in situ* ont été utilisés comme données de vérification dans le cadre d'expérience d'assimilation permettant de restituer des profils d'ozone. L'ensemble des résultats obtenus lors de cette étude a fait l'objet d'un article soumis au journal scientifique international Atmospheric Measurement Techniques (AMT) en collaboration avec l'équipe du Groupe de Spectrométrie Moléculaire Atmosphérique (GSMA) de l'Université de Reims (contribution à retrouver dans la Section 5 de l'article). La deuxième partie de ce Chapitre explore une autre voie dans l'estimation réaliste de la composition chimique de l'atmosphère et présente les résultats de l'élaboration d'une climatologie évolutive de CO_2 pour améliorer l'utilisation des sondeurs infrarouges. Ce travail a été réalisé par Tétena Boinariziki et Quentin Lagarde dans le cadre d'un stage de Master 1 que j'ai co-encadré avec mes directeurs de thèse.

6.2 La campagne de mesure APOGEE

6.2.1 Cadre et objectifs de la campagne

Le Chapitre 1 nous a montré à quel point l'activité anthropique a généré un déséquilibre dans le système climatique naturel. En effet, les activités humaines et industrielles ont ajouté artificiellement dans l'atmosphère un certain nombre de composants chimiques, augmentant ainsi l'effet de serre. Parmi les principaux gaz rejetés dans l'atmosphère, on compte le dioxyde de carbone (CO_2), le méthane (CH_4) et des oxydes d'azotes. Les deux premiers font partie des gaz qui contribuent le plus au réchauffement climatique. C'est pour cette raison qu'il est important de surveiller leur évolution spatio-temporelle.

Actuellement, les données issues des instruments satellitaires nous permettent de surveiller globalement la composition chimique de l'atmosphère. Cependant, ces observations fournissent soit de l'information intégrée sur toute la colonne atmosphérique, typiquement entre 0 et 40 km, soit uniquement sur une partie de la colonne suivant l'instrument satellitaire utilisé. Même si la résolution spatiale de ces capteurs est de plus en plus fine, elle ne permet pas la mesure en un point précis mais plutôt en une zone moyennée qui modifie l'information apportée par les observations, diminuant ainsi leur précision. C'est pour cela que nous avons besoin de mesures *in situ* directes capables de compléter notre besoin d'observations sur la verticale le long de la colonne atmosphérique. Plusieurs méthodes existent permettant la mesure de la concentration de certains composants chimiques atmosphériques, notamment les observations aéroportées (avions, ballons, drones) et en surface avec des stations de mesures au sol.

L'observation des composants chimiques sur la verticale, principalement de la surface au sommet de la stratosphère, est un enjeu majeur pour préciser nos connaissances sur leur distribution et leur transport. La mesure *in situ* à l'aide de ballons météorologiques se révèle être un outil idéal pour explorer la distribution de nombreux paramètres thermodynamiques et chimiques dans l'atmosphère entre la surface et 30 km d'altitude. Ces mesures offrent également une opportunité d'analyse des processus physico-chimiques restant encore peu étudiés dans la stratosphère et à l'UTLS. C'est ainsi que depuis 2016, les chercheurs du GSMA[1] de l'Université de Reims, en collaboration le LSCE ont développé un spectromètre à diode laser, nommé AMULSE[2].

Cette instrument est capable de mesurer le CO_2 [Joly et al., 2016], le CH_4 [El Khair et al., 2017] et H_2O. L'instrument est compact et léger (< 3.0 kg), donc facilement transportable sous différents porteurs tels que les ballons météorologiques (coût faible). Cette flexibilité permet à l'instrument AMULSE d'effectuer des sondages à échéance régulière de manière précise (< 1.0 %) et rapide (< 1 s), fournissant des mesures spatio-temporelles fiables. Comme l'illustre la Figure 6.1, AMULSE est capable de fournir un suivi temporel intéressant en réalisant à la suite plusieurs petit radiosondages, ici dans le cadre d'une campagne de mesure sous ballon captif réalisée sur le site de Total à Lacq (France) pendant l'été 2017. Il est capable également d'effectuer des mesures à des altitudes bien plus élevées (40 km).

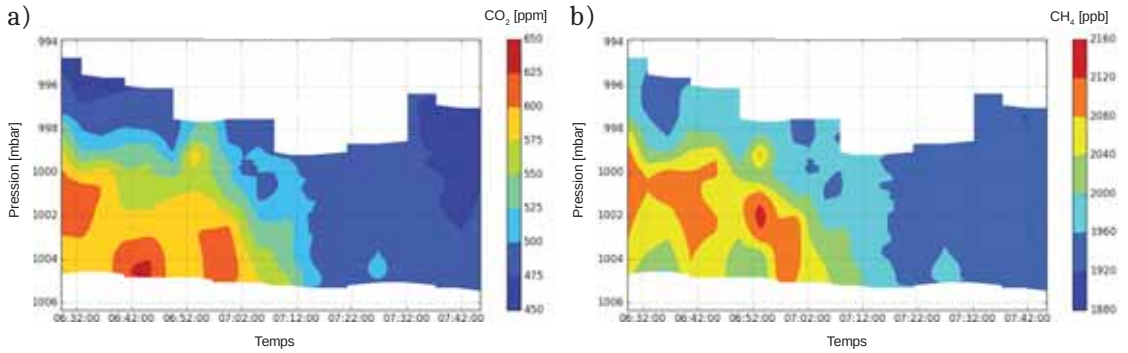


FIGURE 6.1: Évolution de la concentration en CO_2 (a) et de CH_4 mesurée par AMULSE sous ballon captif dans la couche limite atmosphérique (21 profils) en fonction du temps. Campagne réalisée sur le site de Total à Lacq (France) pendant l'été 2017. Source : GSMA.

[1] Groupe de Spectrométrie Moléculaire Atmosphérique
[2] Atmospheric Measurement Ultralight SpEctrometer

Parmi les objectifs scientifiques autour de ces mesures, on compte une meilleure identification des sources chimiques, une meilleure quantification de la répartition régionale entre émissions anthropogéniques, sources et puits naturels ou encore l'identification des causes récentes de variation du CH_4 atmosphérique. De plus, une quantification précise du CO_2 et du CH_4 nous permettra d'approfondir nos connaissances, notamment sur le cycle du carbone, la dynamique atmosphérique mais également de participer à l'amélioration de nos MCT et de l'utilisation des observations satellitaires. C'est particulièrement ce dernier objectif qui nous a conduit à réaliser une collaboration avec le GSMA dans le cadre de la campagne de mesure APOGEE[3].

La campagne s'est opérée en trois phases, été 2017, automne 2017 et printemps 2018, au cours desquelles nous avons effectué plusieurs lâchers de ballons météorologiques pour la mesure de profils jusqu'à 30 km d'altitude. Deux types de mesures (Figure 6.2) ont été réalisés : des radiosondages avec une sonde Vaisala type RS41 mesurant la température et l'humidité couplée à une sonde ozone type cellule électrochimique mesurant l'O_3 et des radiosondages avec l'instrument AMULSE mesurant des profils de température, d'humidité, de CO_2, de CH_4 et H_2O. Les caractéristiques techniques de ces instruments sont résumées dans le Tableau 6.1.

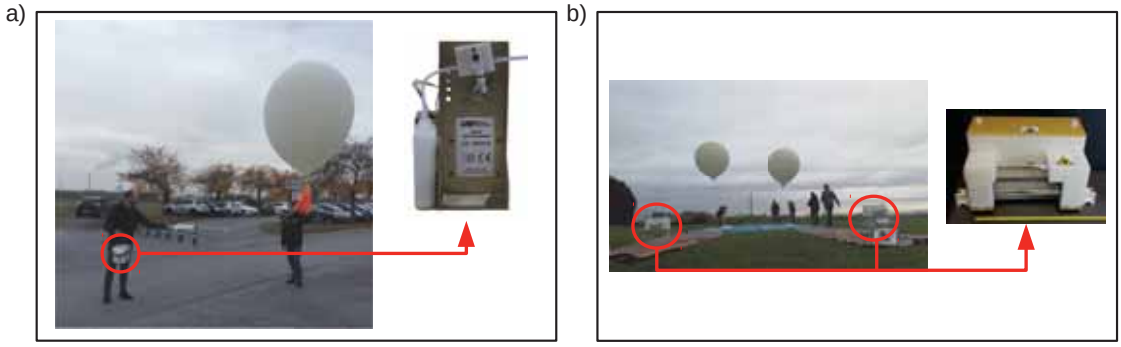


FIGURE 6.2: Image d'un radiosondage d'ozone (image de gauche) et d'une sonde OZONE (a). Image d'un radiosondage avec l'instrument AMULSE (image de droite) et de l'instrument AMULSE (b) sur le Campus de l'Université de Reims.

Instruments	AMULSE	SONDE RS41 + OZONE
Poids	<2.9 kg	<1.0 kg
Précisions	Mesures spectrométriques : 1 % et 1 s	Température : <0.5 °C et 0.5 s Humidité : <4 % HR et <10 s Ozone : <5 % et <200 bytes/s
Condition aux limites	Pression : de 1100 à 1 hPa Température : de -100 à 50 °C	Pression : de 1100 à 3 hPa Température : de -95 à 60 °C
Mesures chimiques	CO_2, CH_4	O_3
Mesures additionnelles	GPS, pression, température, humidité relative	Pression, température, humidité relative, vents

TABLE 6.1: Caractéristiques techniques des instruments AMULSE et RS41 + OZONE.

En plus des objectifs techniques poursuivis par le GSMA lors de cette campagne, j'ai voulu réaliser ces radiosondages au même moment que le passage de capteurs satellitaires au-dessus du point de lâcher afin d'effectuer ces mesures en collocalisation avec les pixels de ces instruments.

[3]Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs

Le but est par la suite d'évaluer l'impact de l'utilisation de ces profils chimiques réalistes sur les simulations des observations infrarouges de ces instruments. Autant que possible, les radiosondages AMULSE et OZONE ont été réalisés quasi-simultanément afin d'obtenir une cohérence temporelle entre les profils mesurés. Les conditions météorologiques représentaient l'une des premières difficultés. En effet, l'objectif étant de réaliser les radiosondages en collocalisation avec des observations satellitaires infrarouges, le ciel devait être clair pour éviter les problèmes liés à l'opacité des nuages au rayonnement infrarouge. Lors de la campagne APOGEE, pour chaque jour de mesure, les principales étapes ont été :

- la préparation de la cellule électrochimique (solution cathodique, anodique), étalonnage de la sonde OZONE, ... (pour plus d'informations techniques [Thompson et al., 2019]) ;
- l'étude des conditions de vent plusieurs jours à l'avance pour la prévision des trajectoires ;
- la mise en place de la cellule électrochimique sur le support de pompe, branchement de la pompe à la sonde RS41, branchement de l'alimentation (piles), renforcement du contenant (boîte en polystyrène) ;
- la préparation de l'instrument AMULSE par l'équipe du GSMA ;
- le gonflement des ballons et mise en place de la chaîne de vol ;
- l'étalonnage des bancs de mesures Vaisala, pour la réception et les traitement des données (sondes RS41 et OZONE) ;
- la demande d'autorisation à l'aviation civile pour les lâchers ;
- la mesure des paramètres au sol, préparation aux lâchers et lancement des radiosondages ;
- l'intégration en temps réel des vents mesurés par ces radiosondages pour affiner les prévisions de trajectoires ;
- le suivi spatial en temps réel des radiosondages ;
- la mise en place d'une équipe dédiée à la récupération des instruments à leur atterrissage et à la collecte et le traitement des données.

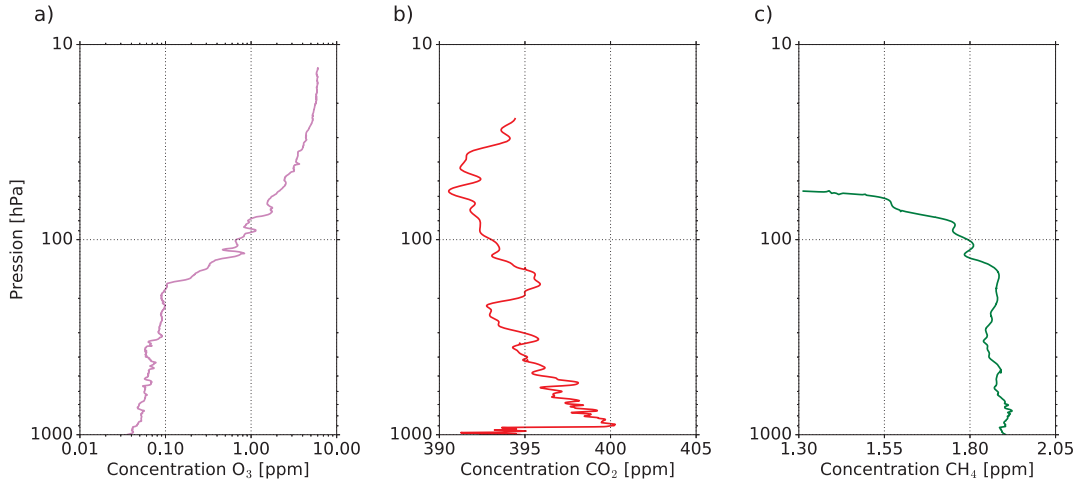


FIGURE 6.3: Profil d'ozone (a), de dioxyde de carbone (b) et de méthane (c) mesurés pendant la campagne APOGEE le 17 avril 2018 à 10 UTC, à Reims, France

L'objectif de cette partie est d'évaluer la sensibilité des observations satellitaires infrarouges simulées à la chimie atmosphérique. Pour cela, les profils de CO_2, CH_4 et O_3 issus de la campagne APOGEE représentent une opportunité intéressante de données de comparaison. Pour illustrer cette étude, nous avons utilisé les profils issus des radiosondages du 17 avril 2018 à 10 UTC comme cas d'étude (Figure 6.3). Afin de simuler les observations satellitaires infrarouges, nous avons utilisé le MTR RTTOV. La simulation à l'aide de RTTOV requiert un pré-traitement important dont nous allons lister les étapes :

- Les profils thermodynamiques sur 105 niveaux (T et q) et paramètres de surface (P_{surf}, T_{surf}, q_{surf}, T_{skin}, u et v) fournis en entrée de RTTOV ont été extraits du modèle global ARPEGE aux mêmes horaires et coordonnées que le radiosondage (les deux radiosondages AMULSE et OZONE ont été effectués au même moment et au même endroit). Le fichier de coefficients utilisé lors du processus de simulation dans RTTOV étant sur 101 niveaux, les profils thermodynamiques d'ARPEGE ont été interpolés sur ces mêmes niveaux.

- Afin d'évaluer l'impact de l'ébauche chimique fournie à RTTOV sur les simulations des observations satellitaires infrarouges, nous avons utilisé deux sources de chimie différentes : la première étant les profils de CO_2, CH_4 et O_3 de référence (REF) invariants dans le temps et l'espace fournis par RTTOV et la deuxième étant les profils *in situ* mesurés par les radiosondages (SONDE). Les profils de référence sont déjà sur 101 niveaux, les profils mesurés *in situ* n'ont pas dépassé les 5 hPa. Or RTTOV doit disposer des données sur l'ensemble de ses niveaux pour effectuer correctement ses calculs de transfert radiatif. Ainsi les profils *in situ* ont été complétés avec les profils de référence au-dessus des niveaux manquants. C'est ce qu'illustre la Figure 6.4 avec les profils de référence en pointillés noirs de O_3 (a), CO_2 (b) et CH_4 utilisés par défaut dans le MTR RTTOV et les profils mesurés par radiosondage de O_3 en violet (a), CO_2 en rouge (b) et CH_4 en vert complétés avec les profils de références à partir du niveau où les données sont manquantes. L'altitude maximale de mesure de l'ozone est atteinte vers 6 hPa, 25 hPa pour le CO_2 et 45 hPa pour le CH_4. Les zones grisées représentent les niveaux RTTOV pour lesquelles les données mesurées sont manquantes. La concentration des espèces chimiques est donnée en [ppmv].

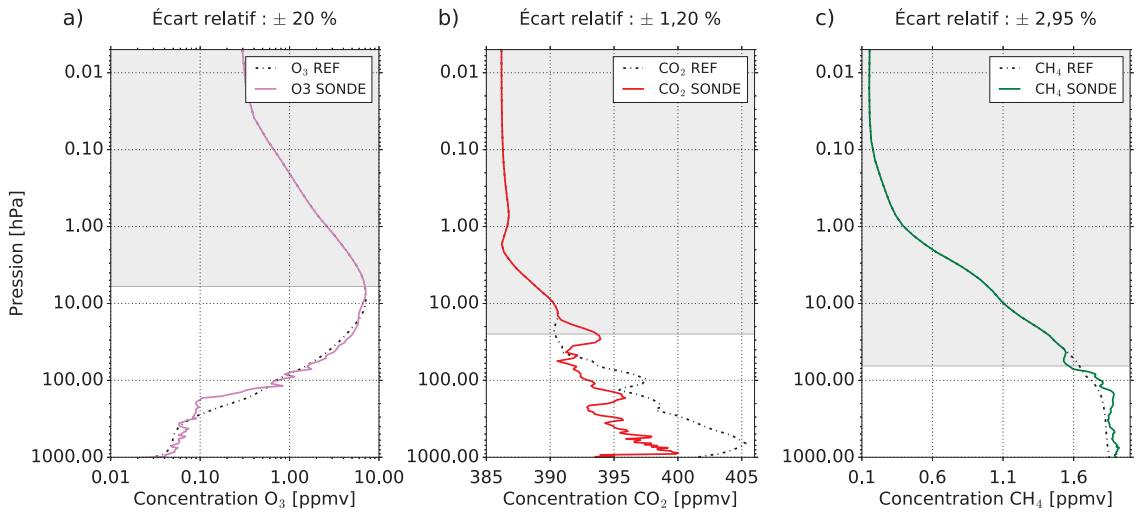


FIGURE 6.4: Représentation des profils de références en pointillés noirs de O_3 (a), CO_2 (b) et CH_4 utilisés par défauts dans le MTR RTTOV et des profils mesurés par radiosondage de O_3 en violet (a), CO_2 en rouge (b) et CH_4 en vert (c). Les zones grisées représentent les niveaux RTTOV pour lesquels les données mesurées sont manquantes. L'unité de concentration des espèces chimiques est donnée en [ppmv] le 17 avril 2018 à 10 UTC.

On remarque que le profil d'ozone de référence et le profil *in situ* sont proches dans la stratosphère entre 100 et 10 hPa. Les concentrations d'ozone du profil de référence sont toutefois sur-estimées dans l'UTLS et sous-estimées dans la troposphère par rapport aux concentrations du profil d'ozone *in situ* et l'écart relatif entre les deux profils est d'environ ± 20 %. On observe également des différences entre le profil de CO_2 de référence et le profil *in situ* sur l'ensemble du profil vertical mesuré avec un écart relatif entre les deux profils d'environ ± 1,20 %. Globalement, les concentrations de dioxyde de carbone du profil de référence sont sur-estimées par rapport aux concentrations du profil *in situ* avec des différences pouvant atteindre 8 ppmv. Toutefois, si on ramenait l'axe des abscisses de la concentration de CO_2 à zéro, la différence semblerait bien plus faible. Enfin, on note une légère sous-estimation de la concentration de méthane du profil de référence par rapport au profil *in situ* et l'écart relatif entre les deux profils est d'environ ± 2,95 %. Les différences observées ne sont pas négligeables, surtout pour l'ozone, avec un impact probable sur la qualité des simulations.

- Dans cette étude, nous avons réalisé les simulations d'observations satellitaires provenant de deux instruments infrarouges : IASI et CrIS. Afin d'évaluer la qualité de nos simulations, nous avons cherché à collocaliser spatialement et temporellement les pixels de IASI et de CrIS au plus proche des radiosondages. Pour éviter les problèmes liés aux nuages, nous avons réalisé les lâchers ce jour-là en ciel clair. La Figure 6.5.a représente le tracé des pixels IASI utilisés pour l'assimilation opérationnelle dans AROME le 17 avril 2018 à 10 UTC sur le nord de la France en fonction de la couverture nuageuse de l'AVHRR (Cloud Cover) qui différencie les observations contaminées par 100 % de nuages (en noir), entre 1 et 99 % de nuages (en gris) et par 0 % de nuages (en blanc).

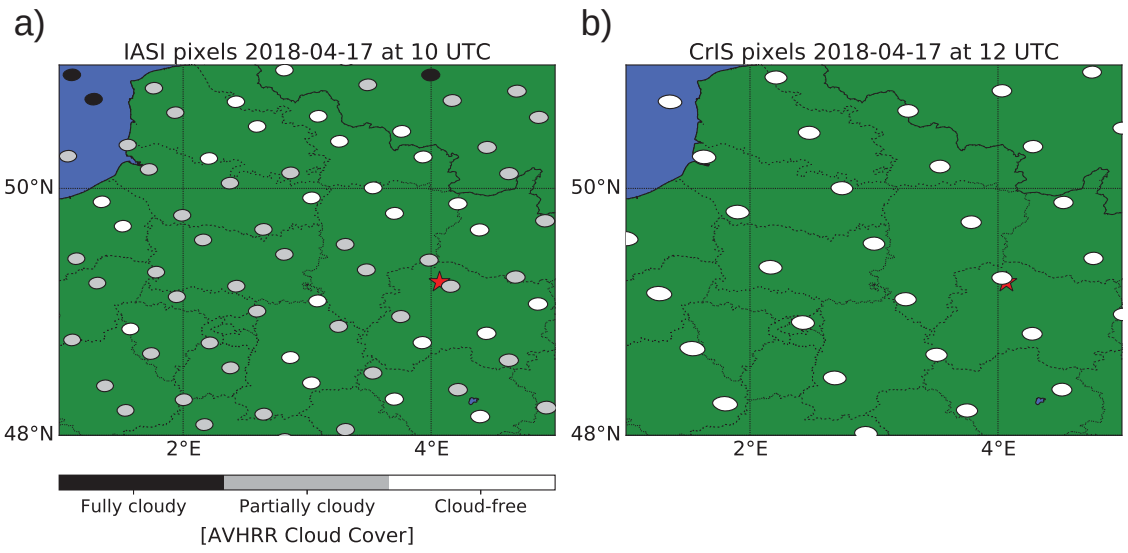


FIGURE 6.5: Tracé des pixels de IASI le 17 avril 2018 à 10 UTC dans le nord de la France (Point de lâcher : étoile rouge) en fonction de la couverture nuageuse AVHRR (Blanc : ciel clair, gris : ciel partiellement clair, noir : ciel nuageux) (a) et tracé des pixels de CrIS le 17 avril 2018 à 12 UTC sur la même zone que précédemment (b).

L'étoile rouge représente le point de lâcher des radiosondages. Pour les expériences de simulation avec RTTOV, on retient les informations du pixel IASI le plus proche du point de lâcher coloré en gris (AVHRR = 5 %). Nous avons réalisé la même opération avec les pixels de CrIS, comme l'illustre la Figure 6.5.b. Le pré-échantillonage opérationnel n'utilise que 1/2 des pixels IASI et 1/9 des pixels CrIS. La plateforme sur laquelle est présent l'instrument CrIS possède également un imageur (VIIRS) qui pourrait fournir une information sur la couverture nuageuse dans le pixel CrIS mais cette dernière n'est pas encore transmise dans les fichiers d'observations CrIS.

- Afin de confirmer que les lâchers ont bien été réalisés en ciel clair, nous avons également tracé sur la Figure 6.6 les pixels (1 sur 5) de SEVIRI en fonction du type de nuage pour le 17 avril 2018 à 10 UTC (a) et à 12 UTC (b). Dans le cadre du SAF (Satellite Application Facility) NWC (NoWCasting) d'EUMETSAT, le CEMS (Centre d'Études en Météorologie Satellitaire) de Météo-France élabore des produits de Classification Nuageuse (CT : Cloud Type) à partir des observations SEVIRI. Cette classification est composée de 15 classes basées sur un algorithme de seuillages de combinaisons de canaux SEVIRI appliqué à l'échelle d'un pixel (`http://www.nwcsaf.org/ct_description`). Les pixels de couleur verte correspondent à des zones parfaitement claires. Les pixels de couleur violet foncé représentent le passage d'un nuage fractionnaire. À l'aide de la classification nuageuse de SEVIRI on remarque que les pixels IASI et CrIS utilisés dans notre étude sont proches de pixels SEVIRI identifiés comme clairs.

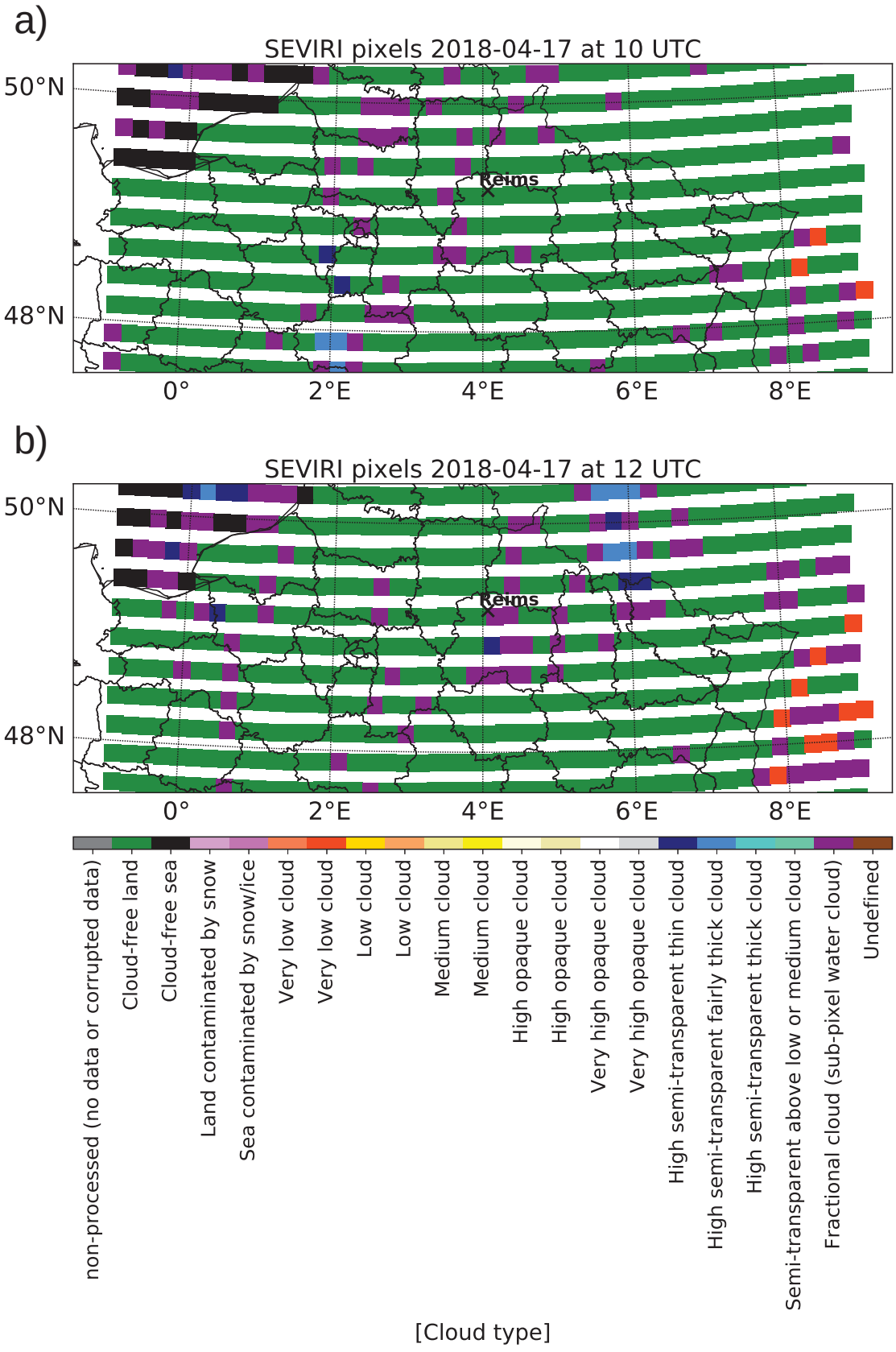


FIGURE 6.6: Tracés des pixels de SEVIRI le 17 avril 2018 à 10 UTC (a) et 12 UTC (b) autour de la zone de lâcher en fonction du type de nuage. La croix noire indique le point de lâcher du radiosondage.

6.2.2 Résumé de l'article et étude complémentaire

La première partie de l'article a été réalisée par l'équipe du GSMA de l'Université de Reims et consiste dans un premier temps à établir un panorama des mesures et de l'observation des principaux gaz à effet de serre. Puis, une description plus précise des caractéristiques techniques du spectromètre AMULSE a été réalisée afin d'évaluer ses mesures par comparaisons avec d'autres instruments. Enfin, les applications de l'instrument ont été illustrées à l'aide de la campagne de mesure APOGEE.

Notre contribution à l'article a consisté à utiliser les données de la campagne de mesure pour différentes études. La première a été d'évaluer la sensibilité des observations satellitaires infrarouges aux ébauches en CO_2, CH_4 et O_3. En effet, pour simuler précisément les observations satellitaires infrarouges, une connaissance probable de l'état de l'atmosphère est requise. Ainsi, des champs de prévisions en température, humidité et autres paramètres de surface sont fournis au MTR RTTOV pour réaliser ces simulations. De plus, RTTOV requiert une connaissance précise de la composition chimique de l'atmosphère, particulièrement pour les observations infrarouges qui, par définition, sont extrêmement sensibles aux différentes molécules.

Cependant, RTTOV est utilise des profils chimiques de référence invariants dans le temps et l'espace en opérationnel à Météo-France. Il est impossible, compte tenu des puissances de calculs actuelles de remplacer l'ensemble des profils de référence par des champs chimiques plus réalistes issus de MCT dans les modèles de PNT par un mode « in line ». Évidemment, cette grande approximation de la chimie atmosphérique peut avoir un impact négatif sur la simulations des observations. C'est pourquoi la qualité des simulations doit être régulièrement évaluée et les profils chimiques *in situ* mesurés pendant la campagne de mesure APOGEE représentent des données de vérification intéressantes.

Pour illustrer l'impact que peut avoir l'ébauche chimique sur les simulations d'observations infrarouges, nous avons réalisé une première expérience à l'aide du MTR RTTOV. Nous avons simulé les observations des instruments IASI et CrIS en perturbant les profils chimiques de référence à renseigner en entrée de RTTOV et pour évaluer l'impact sur les simulations. Pour s'affranchir des incertitudes de simulation liées aux imprécisions de la température de surface (T_{skin}) essentiellement sur la surface terrestre, nous avons restitué la température de surface à partir de l'inversion de l'équation de transfert radiatif en utilisant le canal fenêtre IASI 1194 (943,25 cm^{-1}) ([Boukachaba, 2017] et [Vincensini, 2013]) pour chaque pixel IASI et avec le canal CrIS 469 (942.5 cm^{-1}) pour chaque pixel CrIS. Cette température de surface pour chaque cas d'étude a été calculée en utilisant les valeurs d'émissivité sur les surfaces terrestres issues de l'atlas d'émissivité CAMEL (The Combined ASTER MODIS Emissivity over Land) [Borbas et al., 2018]. Nous avons calculé la différence de température de brillance (T_b) [K] due à la perturbation des profils d'ozone, de dioxyde de carbone et de méthane pour l'ensemble des canaux contenus dans les spectres de IASI (a) et CrIS (b) en comparaison à des simulations utilisant des profils chimiques non perturbés (Figure 6.7) tels que :

$$\text{EXP } O_3 = T_b^{simul}[\mathbf{O_3^{REF}} * \mathbf{10}\ \% + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}] - T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}]$$

$$\text{EXP } CO_2 = T_b^{simul}[O_3^{REF} + \mathbf{CO_2^{REF}} * \mathbf{10}\ \% + CH_4^{REF}] - T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}]$$

$$\text{EXP } CH_4 = T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + \mathbf{CH_4^{REF}} * \mathbf{10}\ \%] - T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}]$$

Cette première expérience nous a permis de mettre en évidence qu'une erreur de 10 % sur le profil d'ozone engendre une différence de T_b simulée allant jusqu'à 2 K, que ce soit sur les observations issues de IASI (a) ou de CrIS (b). De la même manière, on note une différence de T_b allant jusqu'à 1,4 K pour le dioxyde de carbone et le méthane pour les deux instruments. Plus précisément, la perturbation en ozone touche les canaux situés entre [710 à 760 cm^{-1}], [980 à 1150 cm^{-1}] et [2060 à 2135 cm^{-1}]. La perturbation du profil de CO_2 touche une plus grande partie des spectres avec des intervalles spectraux compris entre [645 à 820 cm^{-1}], [930 à 980 cm^{-1}], [1030 à 1085 cm^{-1}], [1900 à 1940 cm^{-1}], [2010 à 2120 cm^{-1}] et [2200 à 2440 cm^{-1}]. Enfin, la perturbation du profil de CH_4 se répercute sur les spectres entre [1200 à 1380 cm^{-1}] et plus faiblement entre [2200 à 2440 cm^{-1}].

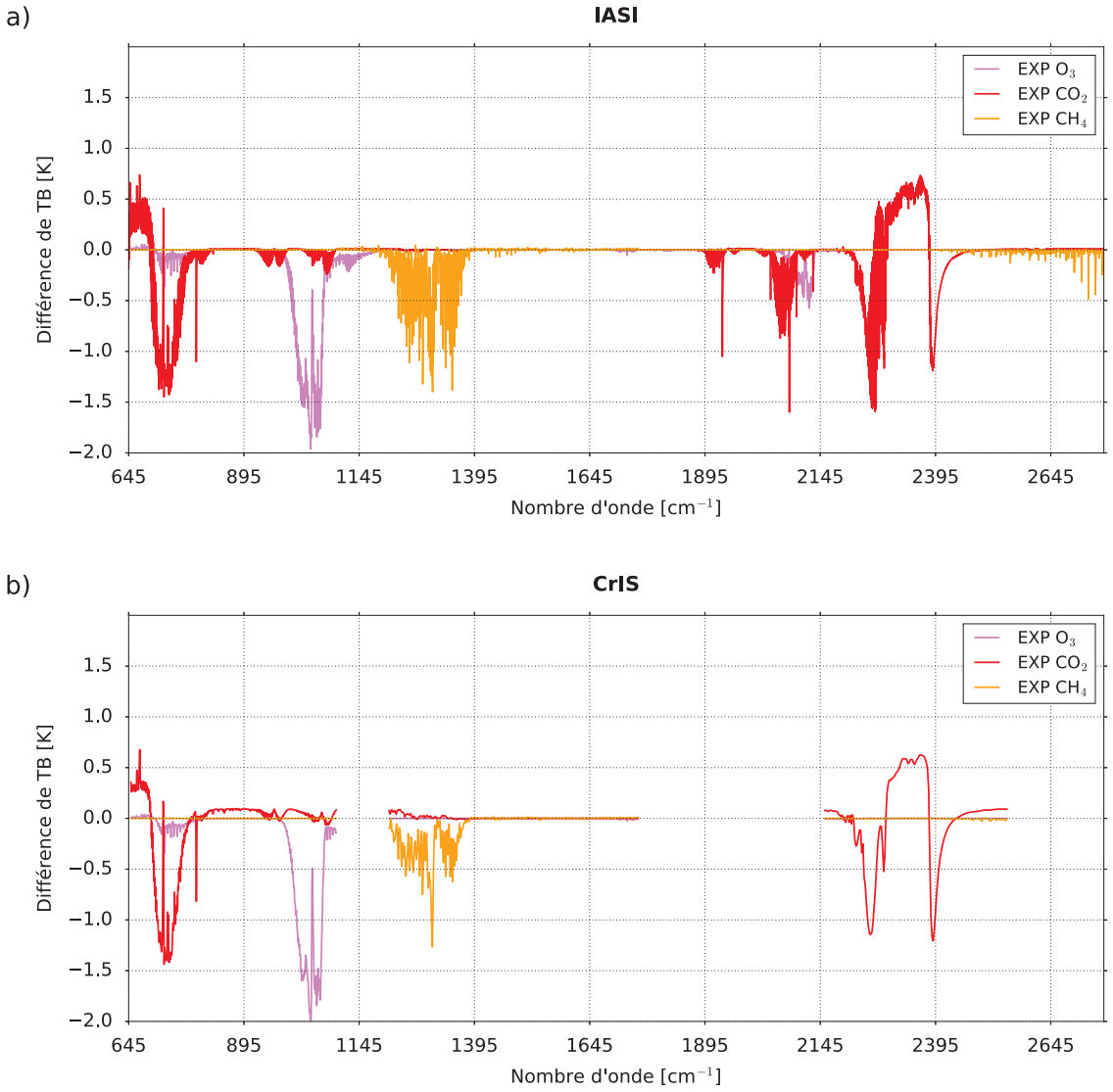


FIGURE 6.7: Différence de température de brillance (T_b) [K] due à la perturbation des profils d'ozone (courbes en violet), de dioxyde de carbone (courbes en rouge) et de méthane (courbes en orange) pour l'ensemble des canaux contenus dans les spectres de IASI (a) et CrIS (b). Dans cette expérience les profils chimiques ont subi une perturbation de 10 %.

Cette expérience illustre parfaitement l'importance que peut avoir une bonne précision des profils chimiques en entrée du MTR sur la qualité des simulations résultantes. Ces différences sont loin d'être négligeables pour l'utilisation de ces observations infrarouges dans le système variationnel d'assimilation de données. En effet, nous avons discuté précédemment de l'utilisation des innovations (Observation - Simulation) pour inverser des paramètres géophysiques et chimiques. Une mauvaise simulation peut avoir un impact sur le problème inverse et donc sur la qualité de l'inversion.

De plus, le Var-BC permet de corriger des biais systématiques qui peuvent dépendre de la géométrie de scan ou de la situation météorologique. Il peut donc corriger des biais dûs à une sous-estimation de la concentration de CO_2 qui augmente dans l'atmosphère. Toutefois, même si le Var-BC est capable de corriger ces biais systématiques, il n'a pas vocation à pouvoir corriger une variabilité géographique mal représentée. Or, la variabilité spatio-temporelle de la chimie atmosphérique est très importante, surtout pour l'ozone. De plus, des différences de T_b trop importantes en CO_2 ont un impact direct sur la qualité des prévisions de température, puisque nous utilisons les canaux sensibles à cette espèce pour restituer les profils de température.

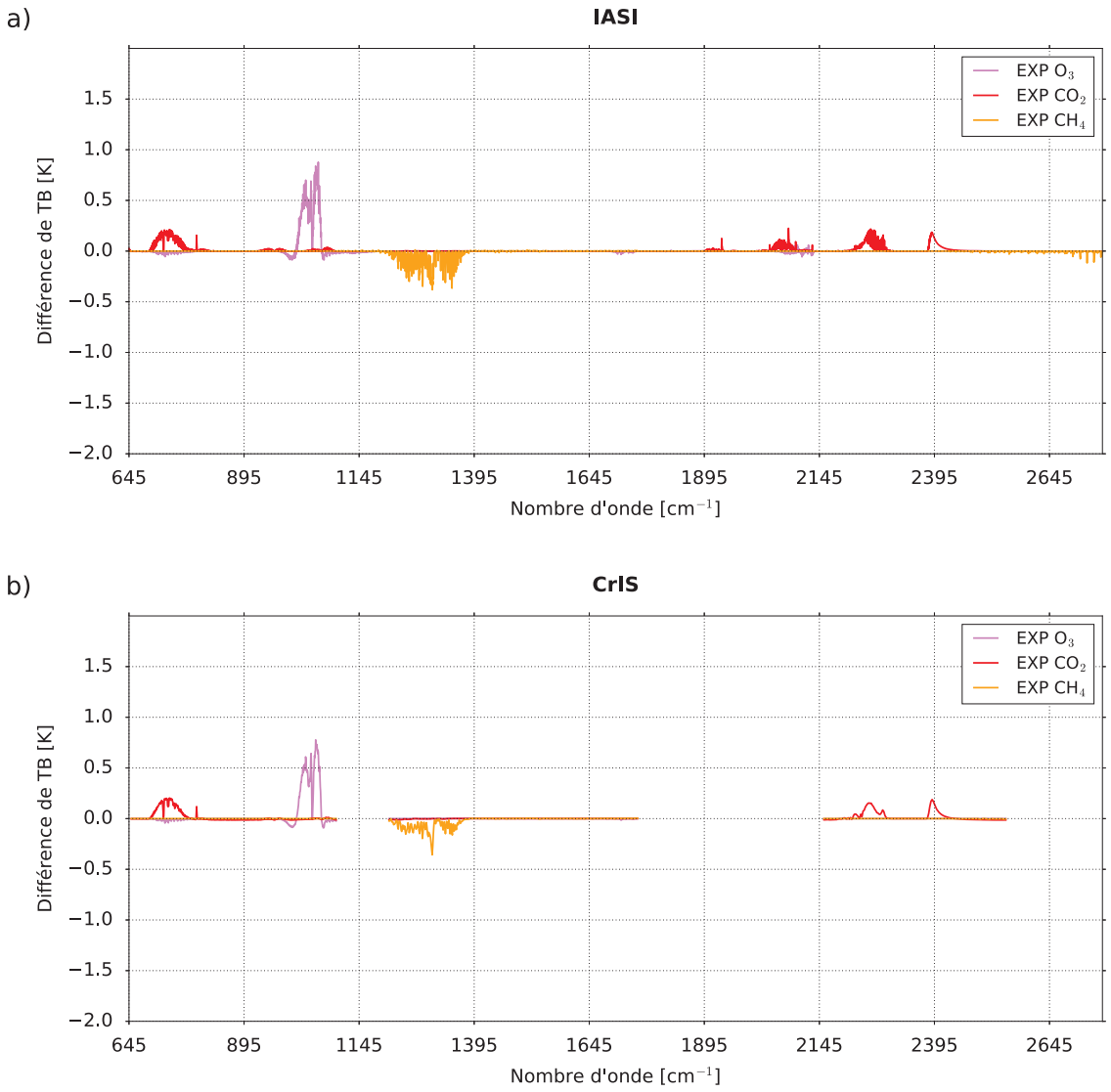


FIGURE 6.8: Différence de température de brillance (T_b) [K] due à l'utilisation des profils *in situ* d'ozone (courbes en violet), de dioxyde de carbone (courbes en rouge) et de méthane (courbes en orange) pour l'ensemble des canaux contenus dans les spectres de IASI (a) et CrIS (b).

Dans une seconde expérience nous avons évalué l'impact sur les simulations des observations IASI et CrIS en utilisant les ébauches chimiques issues des mesures *in situ* en entrée de RTTOV.

De la même manière que précédemment, nous avons calculé la différence T_b due à l'utilisation des profils *in situ* d'ozone, de dioxyde de carbone et de méthane pour l'ensemble des canaux contenus dans les spectre de IASI (a) et CrIS (b) en comparaison à des simulations utilisant des profils chimiques de référence (Figure 6.8) tels que :

$$\text{EXP O}_3 = T_b^{simul}[\mathbf{O_3^{SONDE}} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}] - T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}]$$

$$\text{EXP CO}_2 = T_b^{simul}[O_3^{REF} + \mathbf{CO_2^{AMULSE}} + CH_4^{REF}] - T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}]$$

$$\text{EXP CH}_4 = T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + \mathbf{CH_4^{AMULSE}}] - T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}]$$

Sur cette deuxième expérience, nous avons remarqué que les différences de T_b se situent aux mêmes endroits que précédemment sur les spectres IASI et CrIS. On note des différences maximales de T_b des canaux sensibles à l'ozone, au dioxyde de carbone et méthane pouvant atteindre respectivement 0,9 K, 0,2 K et 0,4 K. Ces différences de T_b ont des valeurs plus faibles que dans l'expérience précédente particulièrement pour les bandes spectrales sensibles au CO_2 et CH_4. Ceci s'explique dans un premier temps par le fait qu'une perturbation de 10 % du profil d'ozone dans la première expérience est cohérente en ordre de grandeur avec l'écart relatif mesuré entre les profils *in situ* et constant. Cependant, perturber les profils de dioxyde de carbone et de méthane de 10 % semble moins réaliste au vu de leur écarts relatifs respectivement de 1,20 % et 2,95 %. D'ailleurs, [Gambacorta and Barnet, 2012] perturbent le CO_2 et le CH_4 respectivement de 2 et 3 % pour leur étude. Deuxièmement, il est important de noter que les profils sont identiques au-dessus de 6 hPa pour l'ozone, 25 hPa pour le dioxyde de carbone et 45 hPa pour le méthane, limitant ainsi les différences éventuelles entre les profils et donc l'impact sur les simulations. De plus, les différences entre les profils de CO_2 et CH_4 se situent dans les basses couches, là où les instruments IASI et CrIS y sont moins sensibles.

Finalement, pour évaluer la qualité des simulations des observations infrarouges, actuellement réalisées avec la configuration opérationnelle, nous avons calculé dans une troisième expérience la différence de T_b (O-B) entre les observations réelles et simulées en utilisant le profil chimique de référence (EXP REF) et les profils chimiques *in situ* (EXP SONDE) pour les 314 canaux IASI et les 330 canaux CrIS monitorés en opérationnel à Météo-France, pour le cas d'étude du 17 avril 2018 à 10 UTC (Figure 6.9) tels que :

$$\text{EXP REF} = T_b^{réelle} - T_b^{simul}[O_3^{REF} + CO_2^{REF} + CH_4^{REF}]$$

$$\text{EXP SONDE} = T_b^{réelle} - T_b^{simul}[\mathbf{O_3^{SONDE}} + \mathbf{CO_2^{AMULSE}} + \mathbf{CH_4^{AMULSE}}]$$

Nous avons mis en évidence d'importantes similitudes entre les valeurs issues de EXP REF et EXP SONDE. On note de très légères différences, principalement sur les canaux sensibles au CO_2 entre 650 et 770 cm^{-1} pour IASI et CrIS. On remarque également de légères différences sur les canaux CrIS sensibles au CH_4 entre 1.210 et 1.390 cm^{-1}. La plus grande différence entre EXP REF et EXP SONDE est observée pour les canaux sensibles à l'ozone entre 1.000 et 1.070 cm^{-1} pour IASI et CrIS. On remarque un biais moins important pour ces canaux en utilisant l'ozone de référence.

Globalement, on remarque que les bandes spectrales sensibles à l'ozone semblent être les plus impactées par les sources chimiques utilisées pour simuler les observations. Ceci peut s'expliquer par une variabilité spatio-temporelle plus importante de l'ozone, principalement dans la stratosphère, là où les observations de IASI et CrIS sont les plus sensibles à ce composant.

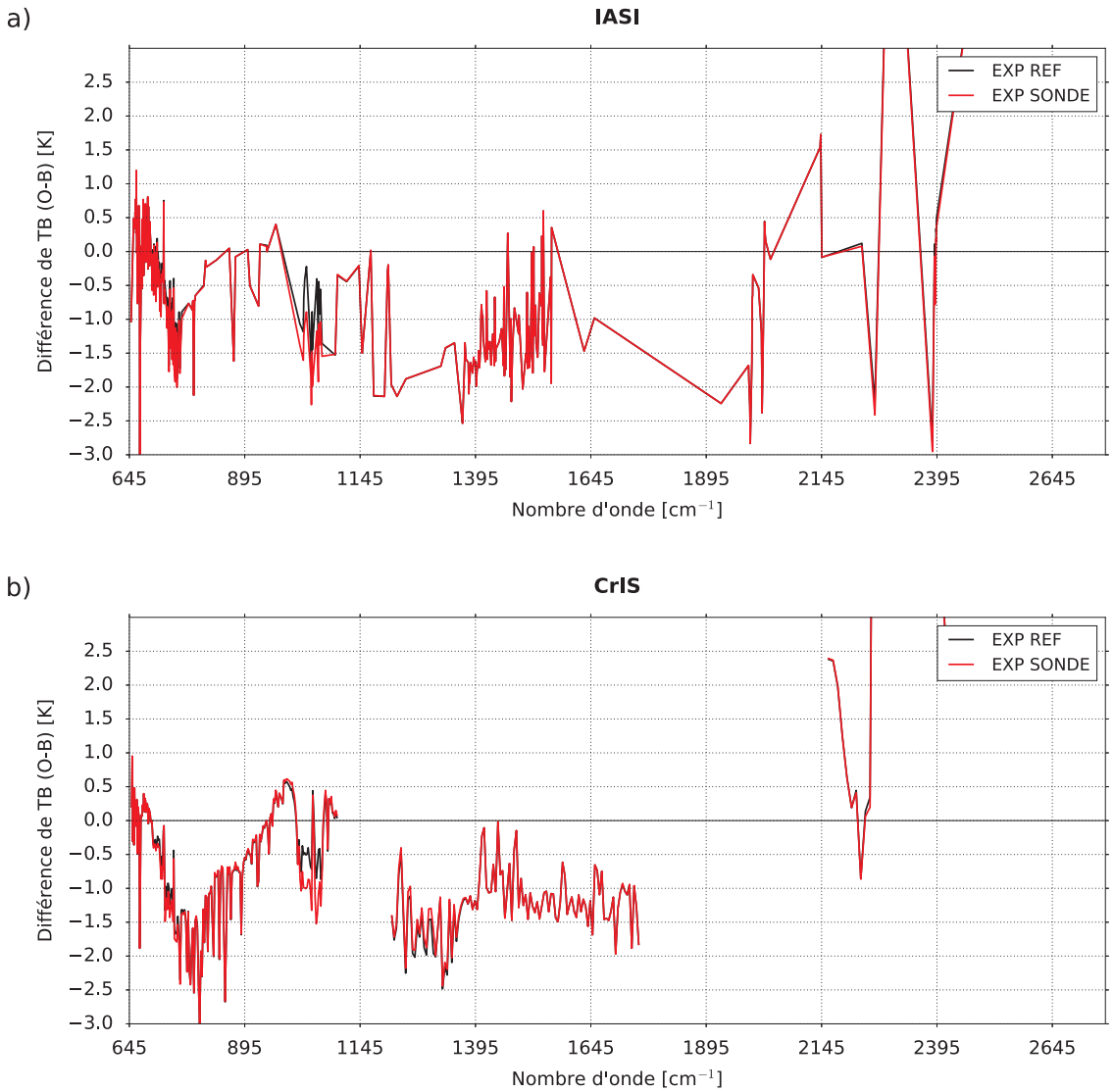


FIGURE 6.9: Différences de Température de Brillance entre les observations réelles et simulées utilisant les profils chimiques de référence (en noir) et les profils chimiques *in situ* (en rouge) pour les 314 canaux IASI et les 330 canaux CrIS monitorés en opérationnel à Météo-France pour le cas d'étude du 17 avril 2018 à 10 UTC.

Les profils *in situ* d'ozone, de dioxyde de carbone et de méthane s'avèrent être des données intéressantes pour évaluer l'impact des différentes sources chimiques sur la qualité des simulations des observations IASI et CrIS. Cependant, il est compliqué de tirer des conclusions générales à partir de l'utilisation d'un seul cas d'étude compte tenu de la variabilité spatio-temporelle du CO_2, CH_4 et O_3. Actuellement, peu de profils verticaux *in situ* de CO_2 et de CH_4 sont mesurés. De plus, ces profils sont souvent mesurés lors de campagnes de mesure disparates dans le temps et l'espace ne permettant pas de réaliser une base de données avec des radiosondages disponibles tous les jours sur l'ensemble du globe, d'où l'intérêt de développer ces instruments mesurant verticalement la composition chimique dans l'atmosphère et surtout de les rendre plus automatiques.

Heureusement, depuis plusieurs décennies, nous disposons de nombreuses bases de données de radiosondages d'ozone sur l'ensemble du globe. Ainsi, nous avons évalué l'impact de l'utilisation d'une source d'ozone réaliste à la place du profil de référence sur les simulations des observations IASI. Cette étude ne fait pas partie des résultats présentés dans l'article.

Parmi les bases de données disponibles on peut citer WOUDC[4] (http://www.woudc.org) et SHADOZ[5] (https://tropo.gsfc.nasa.gov/shadoz/) par exemple. Ainsi, nous avons extrait 345 radiosondages lâchés de 40 stations sur l'ensemble du globe sur un an de mars 2016 à mars 2017 (Figure 6.10) pour prendre en compte la variabilité spatio-temporelle de l'ozone. Pour simuler des observations IASI en utilisant ces profils d'ozone mesurés *in situ*, nous avons collocalisé chacun de ces radiosondages avec un pixel de IASI et extrait les paramètres thermodynamiques du modèle global ARPEGE aux mêmes coordonnées.

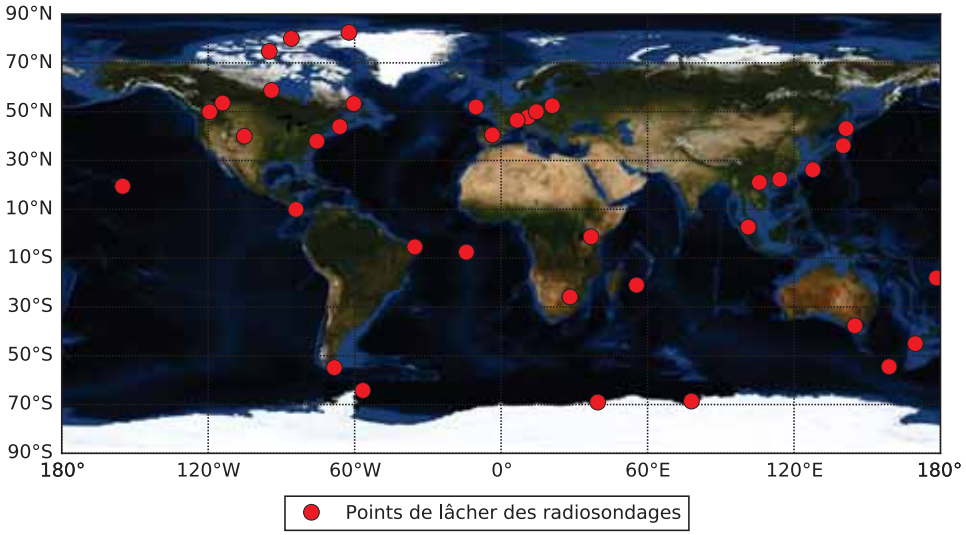


FIGURE 6.10: Carte des 40 stations (points rouges) des 345 lâchers des radiosondages d'ozone.

Nous avons réalisé une quatrième expérience de simulation et avons calculé les moyennes et écarts-types des différences de T_b entre les 345 observations IASI réelles et les 345 observations IASI simulées en utilisant le profil d'ozone de référence (EXPO3 REF) ou les 345 profils d'ozone mesurés *in situ* (EXPO3 SONDE) pour les 5500 premiers canaux de IASI (bandes spectrales 1 et 2) de 645 à 2020 cm^{-1} (Figure 6.11) tels que :

$$\text{EXPO3 REF} = T_b^{\text{réelle}} - T_b^{\text{simul}}[O_3^{\text{REF}}]$$

$$\text{EXPO3 SONDE} = T_b^{\text{réelle}} - T_b^{\text{simul}}[O_3^{\text{SONDE}}]$$

On observe que les différentes sources d'ozone ont un impact sur les différences de T_b dans la bande spectrale sensible à l'ozone entre 1000 et 1070 cm^{-1}. L'utilisation du profil d'ozone constant (en noir) pour les simulations conduit à des biais pour les canaux IASI sensibles à l'ozone pouvant atteindre 2,7 K et des écarts-types jusqu'à 6,0 K. Tandis que l'utilisation des profils d'ozone mesurés *in situ* pour les simulations permet de réduire les biais des canaux IASI sensibles à l'ozone à environ - 0,75 K avec des écarts-types à 1,0 K. On remarque que l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste a également un impact sur d'autres canaux sensibles au dioxyde de carbone avec une réduction du biais et des écarts-types entre 705 et 720 cm^{-1}.

[4]World Ozone and Ultraviolet Data Center
[5]Southern Hemisphere Additional OZonesondes

La réduction des biais et des écarts-types en utilisant les profils d'ozone mesurés *in situ* nous indique que l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste en entrée du modèle de transfert radiatif permet d'améliorer le réalisme des simulations des canaux IASI sensibles à l'ozone. Or, nous avons vu dans le Chapitre 4 que des observations correctement simulées permettent d'apporter des informations supplémentaires utiles aux systèmes d'assimilation de données conduisant à une meilleure estimation de l'état de l'atmosphère et ainsi à une amélioration des prévisions météorologiques.

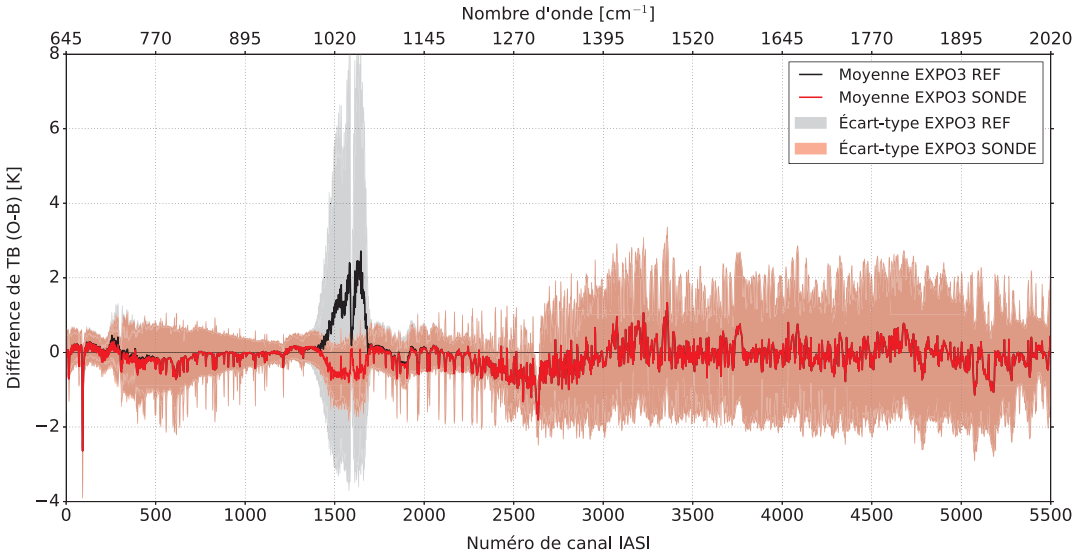


FIGURE 6.11: Moyennes plus ou moins les écarts-types des différences de Température de Brillance entre les observations réelles et simulées utilisant le profil d'ozone de référence (en noir) et les profils d'ozone mesurés *in situ* (en rouge) pour les 5500 (645 à 2020 cm^{-1}) premiers canaux IASI.

La deuxième partie de l'étude a consisté à utiliser les profils chimiques *in situ* comme données de vérifications des profils d'ébauche issus des MCT. Nous avons ainsi extrait des profils d'ozone et de méthane issus de prévisions réalisées par le MCT MOCAGE et C-IFS du programme CAMS. Le CO_2 n'est pas simulé dans MOCAGE et n'était pas disponible dans CAMS au moment de l'étude. Les deux modèles se distinguent par leur assimilation. En effet, les prévisions d'ozone issues du modèle MOCAGE utilisé dans cette étude ne communiquent pas avec la chaîne d'assimilation du modèle MOCAGE-Valentina, tandis que le modèle C-IFS assimile plusieurs produits de niveaux 2 (profils, colonne partielle ou totale, ...). L'ozone et le méthane assimilés sont restitués respectivement à partir des instruments (MLS, OMI, GOME-2A,B, SBUV-2 et OMPS) et (TANSO et IASI). Les profils d'ébauche de O_3 et CH_4 ont été extraits aux mêmes coordonnées et horaires que le cas d'étude du 17 avril 2018 à 10 UTC. Ces profils ont donc pu être confrontés aux profils *in situ* et de référence (Figure 6.12).

Les résultats montrent que globalement, les deux MCT simulent plutôt bien le profil d'ozone, dans la basse troposphère pour CAMS et l'UTLS et dans la stratosphère pour MOCAGE. Nous montrons une nouvelle fois que le profil d'ozone de référence représente correctement l'allure du profil d'ozone. Cependant, les limites de la modélisation seule sont mises en évidence pour le cas du méthane pour lequel l'ensemble du profil issu de MOCAGE est sous-estimé de 0,5 ppmv. Ceci peut s'expliquer par le fait que lors de cette étude, MOCAGE utilisait une climatologie de CH_4 des émissions en surface qu'au début de l'expérience. Le méthane est ensuite dispersé dans l'atmosphère et réagit avec les molécules OH. Il n'y a donc pas de mise à jour des émissions de surface dans le temps, ce qui peut expliquer cette sous-estimation de la concentration par rapport au profil mesuré *in situ*. Depuis, les émissions de méthane en surface sont mises à jour toutes les heures par la climatologie en opérationnel dans MOCAGE.

Le profil issu de CAMS représente particulièrement bien le profil de méthane en basse troposphère et sous-estime également les valeurs de concentration dans l'UTLS. L'assimilation de méthane restitué dans le cadre de CAMS explique le bon accord entre l'ébauche et le profil mesuré dans la troposphère. Le profil de référence est globalement en bon accord avec le profil *in situ*. Ces résultats nous montrent l'importance de ces profils *in situ* pour évaluer la qualité des simulations de la composition atmosphérique et particulièrement pour des gaz difficiles à modéliser tel que le méthane.

Cependant, cet unique cas ne permet pas de tirer des conclusions générales et une évaluation sur plusieurs cas d'étude prenant en compte une variabilité spatio-temporelle plus importante est nécessaire. En effet, l'évaluation des prévisions chimiques issues des MCT est une activité importante. Par exemple en France, les prévisions de qualité de l'air issues des modèles CHIMERE et MOCAGE dans le cadre de Prév'air (`www.prevair.org`) sont surveillées et évaluées en temps réel à l'aide du réseau des observations de qualité de l'air mesurées sur l'ensemble du territoire par l'AASQA[6] et récoltées par l'ADEME[7]. Ces stations réalisent des mesures uniquement en surface, or il est important d'avoir des informations chimiques selon la verticale pour comprendre précisément les différentes interactions physico-chimiques qui peuvent intervenir dans les processus de pollution atmosphérique dans la troposphère et particulièrement dans la couche de mélange [Geiß et al., 2017].

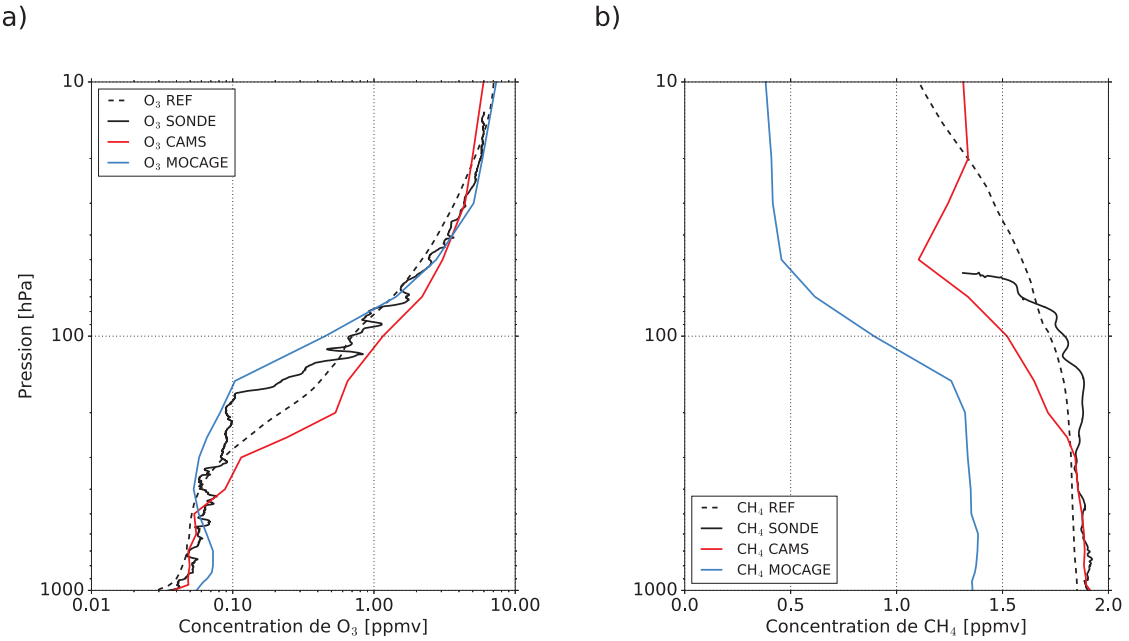


FIGURE 6.12: Profils d'ozone (a) et de méthane (b) issus des mesures *in situ* (ligne noire) comparé aux profils d'ébauche de O_3 et CH_4 issus de CAMS (ligne rouge) et de MOCAGE (ligne bleue) pour le cas d'étude du 17 avril 2018 à 10 UTC. Les profils de O_3 et CH_4 de référence sont représentés en tireté noir.

Une dernière partie de l'article utilise les profils mesurés pendant la campagne comme données de vérification dans le cadre de la restitution de profils d'ozone à l'aide de l'assimilation de données variationnelle uni-dimensionnelle (1D-Var).

[6] Associations Agréées Surveillance Qualité de l'Air
[7] Agence De l'Environnement et de la Maîtrise de l'Énergie

Cette étude a été réalisée à l'aide de différents radiosondages effectués lors de la campagne de mesure pour deux types d'instruments satellitaires infrarouges : IASI et CrIS, ainsi qu'en utilisant deux différentes ébauches d'ozone issues des MCT MOCAGE et CAMS. Une partie des résultats sur l'ozone est présente dans cet article et montre que l'assimilation de données permet de restituer des profils d'ozone bien plus proches des profils *in situ* que les profils d'ozone issus de MOCAGE et CAMS. L'ensemble des configurations techniques et des résultats sont expliqués dans le Chapitre 7.

6.2.3 Conclusion et discussion

L'objectif principal de cette étude a été d'évaluer la sensibilité des observations satellitaires infrarouges à l'ébauche chimique. Pour cette étude, nous avons utilisé les profils de dioxyde de carbone, de méthane et d'ozone mesurés dans le cadre de la campagne de mesure APOGEE pour comparer la qualité des simulations des observations infrarouges issues de IASI et CrIS entre l'utilisation d'une source chimique réaliste ou constante. Les profils *in situ* ont été mesurés pour l'ozone à l'aide d'une cellule électrochimique et les profils de CO_2 et de CH_4 en utilisant l'instrument AMULSE. Ces instruments ont été placés sous des ballons météorologiques pour réaliser des profils verticaux jusqu'à 30 km d'altitude. Pour compléter cette étude nous avons utilisé une base de données plus importante de profils verticaux d'ozone mesurés sur l'ensemble du globe afin de prendre en compte la variabilité spatio-temporelle dans les expériences de simulation. Enfin, nous avons montré l'importance des mesures verticales chimiques dans l'évaluation de la qualité des prévisions chimiques issues des MCT.

Les expériences pour une étude de cas nous ont montré que les observations infrarouges sont extrêmement sensibles aux changements des concentrations chimiques. Le MTR RTTOV nous a permis d'effectuer plusieurs simulations d'observations infrarouges sous plusieurs configurations de profils chimiques d'ébauche fournis en entrée. C'est ainsi que nous avons pu mettre en évidence les différences de simulation entre l'utilisation des profils *in situ* et de référence. Malgré ces différences, nous avons montré peu d'impact sur les différences entre les observations réelles et les observations simulées en utilisant soit les profils chimiques de référence, soit les profils *in situ* sauf pour l'ozone. En effet, ce dernier réagit différemment dans l'atmosphère et est bien plus variable que le CO_2 et CH_4. Les données mesurées par l'instrument AMULSE sont précieuses pour évaluer la qualité de nos simulations mais un seul cas d'étude ne suffit pas à tirer des conclusions générales. Ainsi, nous avons réalisé les mêmes expériences de simulation pour l'ozone en utilisant un nombre de mesure *in situ* plus important et représentatif de la variabilité spatio-temporelle de cette variable atmosphérique. Les résultats nous montrent que l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste en entrée du MTR à la place du profil d'ozone de référence permet de simuler de manière plus réaliste les températures de brillance des canaux IASI sensibles à l'ozone en réduisant les biais de ces canaux d'environ 2,0 K et les écarts-types de 5,0 K. On note également une réduction des biais et écarts-types pour d'autres canaux sensibles au dioxyde de carbone.

Deuxièmement, les profils mesurés dans le cadre de APOGEE sont également utiles pour la comparaison avec les profils chimiques modélisés issus des MCT. Ainsi, nous avons extrait les profils d'ozone et de méthane des MCT MOCAGE et CAMS pour le même cas d'étude que pour les simulations. Cette comparaison avec les profils mesurés nous a montré que les MCT représentent assez bien l'ozone atmosphérique, surtout dans la stratosphère pour MOCAGE et dans la troposphère pour CAMS. Il est important d'avoir de bonnes concentrations de produits chimiques dans la troposphère pour CAMS, puisque ce dernier réalise des prévisions pour la qualité de l'air. Nous avons également montré que le méthane est très bien simulé par CAMS dans la troposphère mais sous-estimé de 0,5 ppmv par MOCAGE en raison de configurations différentes entre les deux modèles.

La différence est principalement due au fait que le modèle C-IFS assimile des produits de niveau 2 comparativement à MOCAGE qui n'assimile aucune observation chimique. Même si une nouvelle fois, il est compliqué de tirer des conclusions générales sur un unique cas d'étude, nous montrons l'importance que représentent ces profils *in situ* pour la comparaison et la vérification des prévisions chimiques issues des MCT.

Enfin, une méthode permettant d'obtenir des profils chimiques plus précis a été utilisée. Dans ce cas, les profils d'ozone ont été restitués à l'aide de l'assimilation de données variationnelle uni-dimensionnelle (1D-Var) en utilisant les observations de IASI et CrIS et les profils d'ébauche d'ozone de MOCAGE et CAMS pour quatre radiosondages effectués lors de la campagne de mesure. Les profils *in situ* nous ont permis de mettre en évidence des résultats très encourageants puisque la méthode utilisée dans cette étude nous permet de restituer des profils d'ozone très proches des profils d'ozone mesurés, notamment dans l'UTLS qui reste un partie de l'atmosphère difficile à modéliser par les MCT. Nous avons également montré que certains profils d'ozone restitués, simulent très bien les structures complexes que peuvent avoir certains profils d'ozone mesurés. Ces structures sont souvent générées par le transport isentropique dans l'UTLS. L'ensemble des résultats de cette dernière partie de l'étude sont présentés dans le Chapitre suivant.

6.3 L'article : The evolution of AMULSE (Atmospheric Measurements by Ultra-Light Spectrometer) and its interest in atmospheric applications.Results of the Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs (APOGEE) weather balloon release campaign for satellite retrieval validation

The development of the Atmospheric Measurements by Ultra-Light Spectrometer (AMULSE) greenhouse gas profiling system and application for satellite retrieval validation

Lilian Joly[1], Olivier Coopmann[2], Vincent Guidard[2], Thomas Decarpenterie[1], Nicolas Dumelié[1], Julien Cousin[1], Jéremie Burgalat[1], Nicolas Chauvin[1], Grégory Albora[1], Rabih Maamary[1], Zineb Miftah El Khair[1], Diane Tzanos[3], Joël Barrié[3], Éric Moulin[3], Patrick Aressy[3], and Anne Belleudy[3]

[1]GSMA, UMR CNRS 7331, Université de Reims, U.F.R. Sciences Exactes et Naturelles, Reims, France
[2]CNRM, Université de Toulouse, Météo-France, CNRS, Toulouse, France (NWP team)
[3]CNRM, Université de Toulouse, Météo-France, CNRS, Toulouse, France (Instrumentation team)

Correspondence: L. Joly, GSMA, UMR CNRS 7331, Université de Reims, U.F.R. Sciences Exactes et Naturelles, Reims, France (lilian.joly@univ-reims.fr); O. Coopmann, Météo-France, CNRM/GMAP/OBS, 42 Avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex, France (olivier.coopmann@umr-cnrm.fr);

Abstract.

We report in this paper the development of an embedded ultralight spectrometer (< 3 kg) based on tuneable diode laser absorption spectroscopy (with a sampling rate of 24 Hz) in the mid-infrared spectral region. This instrument is dedicated to in-situ measurements of the vertical profile concentrations of three main greenhouse gases: carbon dioxide (CO_2), methane (CH_4) and water vapour (H_2O) via standard weather and tethered balloons. The plug and play instrument is compact, robust, cost-effective, and autonomous. The instrument also has a low power consumption and is non-intrusive.

It was first calibrated during an *in situ* experiment on an ICOS (Integrated Carbon Observation System) site for several days, then used in a two experiments with several balloon flights up to 30 km altitude in the Reims-France in 2017-2018 in collaboration with Météo-France/CNRM Centre National de Recherches Météorologiques.

This paper shows the valuable interest of the data measured by AMULSE (Atmospheric Measurements by Ultra-Light SpEctrometer) instrument during the APOGEE (Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs) measurement experiment, specifically for the vertical profiles of CO_2 and CH_4, which remain very sparse. We have carried out several experiments showing that the measured profiles have several applications: for the validation of simulations of infrared satellite observations, for evaluating the quality of chemical profiles from Chemistry Transport Models (CTM) and for evaluating the quality of retrieved chemical profiles from the assimilation of infrared satellite observations. The results show that the simulations of infrared satellite observations from IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) and CrIS (Cross-Track Infrared Sounder) instruments performed in operational mode for Numerical Weather Prediction (NWP) by the Radiative Transfer Model (RTM) RTTOV (Radiative Transfer for TIROS Operational Vertical sounder) are of good quality. We also show that the MOCAGE (MOdèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle) and CAMS (Copernicus Atmospheric Monitoring Service) CTMs modeled ozone profiles fairly accurately and that the CAMS CTM represents the methane in the troposphere well compared to MOCAGE. Finally, the measured *in situ* ozone profiles allowed us to show the good quality of the retrieved ozone profiles by assimilating ozone-sensitive infrared spectral radiances from IASI and CrIS.

Keywords. greenhouse gases; atmosphere; ultralight; spectrometer; balloons; in-situ; vertical; Radiative Transfer Model; Numerical Weather Prediction, Chemistry Transport Model, IASI, CrIS, CAMS, MOCAGE

Copyright statement. TEXT

1 Introduction

l

The climate of the Earth currently undergoes a quick change.During the last decades, evidence has been accumulated that this climate change is directly related to the human activates (Stocker et al., 2013) 2019 IPCC Report and 2019 AMS State of the Climate. The abrupt acceleration of technological progress, the explosion of the industrial activities and agricultural, as well as the multiplication of the means of transport, create a profound change of our environment, gradually modifying the chemical composition on the atmosphere at a global level. In particular, the minority chemical compounds in the atmosphere have a fundamental impact on the regulation of the radiative balance of the planet. Indeed, certain gases have the property to absorb a part of the terrestrial infrared radiation. These gases called "GreenHouse Gas" (GHG) are naturally present in the atmosphere (water vapor (H_2O), carbon dioxide (CO_2), methane (CH_4), nitrogen oxide (NO_x), ...). The energy that they collect is then returned in all the directions, at the same time towards space, but also towards the surface and the various layers of the atmosphere. It is the natural greenhouse effect which makes it possible to have average surface temperature of approximately 15°C instead of -18°C if the atmosphere were transparent with the terrestrial radiation. Any modification of the atmospheric concentration of a GHG induces a modification of the climatic equilibrium. Thus, the atmosphere is certainly the medium most rapidly affected by the disturbances of the equilibrium of the environment, whether natural, as during major climate cycles or linked to human activities. The main greenhouse gases related to the human activities are CO_2, CH_4 and N_2O.

The satellite observations have brought information of thermodynamic structure and atmospheric composition using the hyperspectral infrared sounders such as IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer), CrIS (Cross-Track Infrared Sounder) or AIRS (Atmospheric InfraRed Sounder). It is important to assess the quality of the atmospheric information provided by these instruments. Thus, several works were carried out in order to validate the atmospheric profile retrievals (temperature, humidity, trace gases, etc.) from infrared satellite observations. As for IASI (Hilton et al., 2012), CrIS ((Nalli et al., 2017a), (Nalli et al., 2017b)), AIRS ((Susskind et al., 2003), (Chahine et al., 2005)) or the work of (Liang et al., 2017) that evaluated XCO2 satellite retrievals obtained from the Greenhouse Gases Observing Satellite (GOSAT) and Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) instruments by comparison with total carbon dioxide column observations measured by the international Total Carbon Column observing Network (TCCON).

These observations are crucial to the study, understanding and follow-up of the atmospheric compounds to monitor the greenhouse gases. Météo-France operational Numerical Weather Prediction (NWP) systems use RTTOV (Radiative Transfer for TIROS Operational Vertical sounder) as a Radiative Transfer Model (RTM) during data assimilation, as many other NWP centers. In order to assimilate the satellite sounder observations, the actual observations have to be compared to the simulation from the model state with a RTM. Simulating infrared satellite observations from a RTM requires an *a priori* knowledge of the state of the atmosphere and its chemical composition. RTTOV uses chemical reference profiles that are constant in time and in space. This approximation may lead to possible errors in the simulations. The quality of simulations is essential since the information extracted from these models is then used in data assimilation systems for weather forecasting. Which is why there is a need to assess the quality of chemical profiles with *in situ* measurements.

In addition to the NWP models, Chemistry Transport Models (CTM) are available. Indeed, air pollution is a public health issue especially in big cities and would be responsible for 790000 deaths per year just in Europe (Lelieveld et al., 2019). One of the main pollutants in the troposphere is ozone which increases the death rate during pollution episodes. At large scales, the effect of the global change continues to be important due to the increase of GHG whose main contributors are carbon dioxide and methane. CTM such as MOCAGE (MOdèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle) at Météo-France and C-IFS (atmospheric Chemistry in the Integrated Forecasting System) of CAMS (Copernicus Atmospheric Monitoring Service) at ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) allow to produce high-quality forecast of chemistry field in the stratosphere and upper troposphere but forecast quality is weaker in the UTLS (Upper Troposphere Lower Stratosphere). However, satellite sounding in the atmospheric boundary layer is more difficult, especially for infrared sensors because of cloud and aerosols that interfere with the signal; land surface emissivity and temperature uncertainties also are part of the problem. The data assimilation of satellite observations sensitive to atmospheric composition allows to obtain accurate chemical description of the atmosphere especially in the UTLS. Presently, C-IFS assimilates Level 2 products from several satellite instruments. To assess the quality of the CTM forecasts of chemical fields, we need to have accurate measurements of these compounds on the atmospheric column. Despite many chemistry measurements at ground stations, information on chemistry is not widely available at high altitudes. To overcome this lack of data, many projects have been started such as the APOGEE (Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs) experiment. APOGEE experiment derives from a collaboration between GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique) at Reims Universiy in France, LSCE (Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement) in France and CNRM (Centre National de Recherches Météorologiques)

at Météo-France. The objective of APOGEE experiment is to realize measurements of pressure, temperature, humidity and main atmospheric chemical vertical profiles (CO_2, CH_4, O_3 and H_2O) up to 30 km included atmospheric boundary layer. Ozone profile is measured using Vaisala *in situ* soundings with electrochemical cell. CO_2, CH_4 and H_2O are measured using AMULSE (Atmospheric Measurement Ultralight SpEctrometer) instrument developed by GSMA.

In Section 2, we will identify some ways to measure the chemical composition of the atmosphere. Then in Section 3, we will describe the different characteristics of the AMULSE instrument as well as comparisons with another instrument. Finally, we will use the data from the APOGEE measurement experiment on one study case to evaluate the sensitivity of infrared observation simulations on CO_2, CH_4 and O_3 information and we will use the *in situ* profiles to evaluate *a priori* profiles from the CTMs and retrieval profiles by 1D assimilation experiments.

2 Atmospheric composition measurements

2.1 Molecules of interest

CO_2 and CH_4 are long-lived gases. Atmospheric residence time is a few decades for CH_4 whose reactivity makes it an important player in atmospheric chemistry (Voulgarakis et al., 2013) and a few hundred to thousands of years for the CO_2 that is inert to it in the atmosphere from a chemical point of view (Archer and Brovkin, 2008; Eby et al., 2009). The increase of these gases in the atmosphere is conditioned by their anthropogenic emissions which add up to an active natural cycle. The CO_2 cycle is the carbon cycle as this gas dominates the atmospheric composition of carbon compounds in terms of mass (nearly 215 times higher than that of methane). However, the effectiveness of CH_4 in absorbing infrared radiation is much greater than that of carbon dioxide. Since the beginning of the industrial era in 1750, the mixing ratio of atmospheric CO_2 has increased from around 280 ppm to 401 ppm till October 2016, an increase of more than 40%. The increases in the CO_2 and CH_4 levels along with the uncertainty of the H_2O at high altitudes upset the radiative balance of the planet. Therefore, having information and data about the vertical distribution of these three GHG is very useful to improve our knowledge of the future of our climate. Hence, we should improve the knowledge and estimation of the regional anthropogenic GHG natural sinks and emission sources for a better quantification : 1) by enhancing the atmospheric chemistry-transport models that are used to link the sources and the sinks to the atmospheric concentrations; 2) by increasing the atmospheric observation and measurements.

2.2 GHG atmospheric observations

The goal of atmospheric observations of GHG is to follow the evolution of these gases. According to the IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change), it is necessary to be able to determine both the long-term trend related to global emissions, a seasonal cycle linked to vegetation activity or the availability of OH, and a synoptic variability linked to the transport of air masses over periods of time from few hours to few days. Typically, in one year, the air of the Northern Hemisphere is mixed with that of the Southern Hemisphere and vice versa. At mid-latitudes in the northern hemisphere, emissions are transported around the Earth in a few days by a zonal circulation of air masses that is much more efficient than mixing at latitudes. By nature, in-situ measurements, therefore, require continuous and diversified observation means on a global scale: ground measurements (ICOS , WMO , ...), airborne measurements (CAMMAS et al., 2008; Filges et al., 2015; Nédélec et al., 2015; Petzold et al., 2015), satellite observations (Crevoisier et al., 2013; Thompson et al., 2012; Wecht et al., 2014) and vertical measurements using balloons (Ghysels et al., 2016). Tethered balloons measurements can be used up to 800 meters altitude and they are cheap and allowed in France. They do not require a lot of preparation and logistics while they offer controlled travelling speed as well as fixed point measurements along with good payload options. On the other hand, weather balloon offers high altitude measurements (up to 30 km) but the fixed point measurement cannot be realized. In our previous papers (Joly et al., 2016; Khair et al., 2017) we discussed the advantages and disadvantages of the different ground and airborne measurement techniques as well as the need for observations on the vertical along the atmospheric column in order to complete the spatial measurements. To complement the current observational system, stratospheric balloons are unique scientific research tools for accessing the stratosphere, an area inaccessible to airborne measurements. The information provided by the satellites is an integrated average over all or part of the atmospheric column with the exception of a few measurements taken at the limb which provide information with a low vertical resolution. The balloons' ability to access the profiles, makes them an ideal tool to explore the distribution of many atmospheric parameters between the surface and 40 km of altitude in a strategic zone where the masses of air mix a large number of particles and chemical compounds emitted from the Earth. We report in this paper the development of a lightweight instrument called AMULSE (for Atmospheric Measurements by UltraLight SpEctrometer) that fulfills the requirements for weather balloons flights in order to increase the atmospheric GHG measurements. This instrument was first tested at ground level during an intercomparison with PICARRO's instrument of the LSCE laboratory in Paris member in the ICOS network. It was then deployed into *in situ* measurements on tethered balloons and on weather balloon up to the

stratosphere at about 30 km altitude for CO_2 and CH_4 while we measured simultaneously the H_2O up to 10 km altitude in order to calculate the mixing ratios in dry air column. High precision measurements and vertical resolution of 5-7 meters in-situ concentration profiles is achieved by using diode-laser spectroscopic technique (Durry and Megie, 1999a; Joly et al., 2007, 2016) combined with weather balloon and tethered balloons. The developed optical sensor is then based on mid-infrared absorption spectroscopy which provides a compact, cost-effective, fully autonomous, low-power consumption and non-intrusive probe to measure the targeted gases in the atmosphere using an open-path multipass cell.

3 AMULSE

In recent years, the AMULSE instrument has evolved in order to offer a single-gas CO_2 version in 2014, a single-gas CH_4 version in 2015, a dual-gases version in 2016 (CO_2/CH_4) and a tri-gases version (CO_2/CH_4/H_2O) in 2017, still weighing less than 3 kg. We are also working to improve the accuracy and robustness of the instrument.

3.1 Principle

The high selectivity and sensitivity in the gases detection realized using the diode laser absorption spectroscopy is considered as the most advantageous technique for measuring atmospheric gas concentrations (Durry and Megie, 1999b). It is based on semiconductor diode lasers because they offer a continuous mode emission, they are tunable and have a relatively low noise amplitude. The diodes used in this work emit in the near infrared spectral region (NIR) where most atmospheric pollutant molecules feature suitable absorption lines. Direct Absorption Spectroscopy is the simplest application of this technique and it is well adapted to in-situ measurements. It requires that the tunable laser beam with an intensity of I_0 passes through the gas sample on a distance L and then measured using a detector. When the frequency of the emitted light is close to a molecular transition ν_0 of the gaseous sample, the light is then absorbed and the transmitted intensity $I(\nu)$ decreases. The concentration of the absorbing species in the gas mixture is then calculated according to Beer's law.

3.2 Technical description

Its architecture is similar to that used in our previous papers (Joly et al., 2016; El Khair et al., 2017).This new version is equipped with two lasers (purchased from nanoplus GmbH, Gerbrunn, Germany). The first one is a GaSb-based distributed feedback (DFB) semiconductor diode emitting at 2.004 μm . A simple change on its scanning ramp allows us to target the CO_2 (4992.51 cm-1) and H_2O (4992.94 cm-1) molecules simultaneously on the same scanning window. The second laser is an interband cascade laser (ICL) DFB diode emitting at 3.24 μm detailed by (El Khair et al., 2017) used to target the CH_4 molecules (R(6) transition at 3085.86 cm-1). The lasers driving current is ramped at 24 Hz (42 ms) ensuring a good spatial resolution (1-20 m) depending on the ascent and decent flight speed. After collimation, the laser beams pass then into a home-made open-path Herriott multipass cell achieving an optical path-length of 16 m on the CO_2/H_2O channel and 18 m on the CH_4 channel. The mirrors are heated in order to avoid the condensation on their surfaces using 2 W heaters.

At the output of the cell, both laser beams are focalized onto the two photodetectors (purchased from Teledyne Judson Technologies, Montgomeryville, PA, USA). The central processing unit (National Instrument real time) records all data (spectra, pressure, temperature and humidity (PTU) and GPS from the on-board meteorological *in situ* sounding). The spectrometer weighs less than 3 kg in flight-ready condition and power supplies ensuring about 6h of operation. When operated under weather balloons, the spectrometer is equipped with a satellite communication system based on an Iridium element. The Iridium module sends various datas such as meteorological parameters and GPS localisation as well as monitoring parameters of the instrument during the flights. Under a tethered balloon, a Wi-Fi module replaces the Iridium, allowing to send to a ground station the recorded spectra in order to achieve nearly real-time data processing and hence determine the position and the concentration of the plume.

3.3 AMULSE compared to Picarro (2015-2018)

Each time AMUSLE evolved, we made different comparisons with measurements from an ICOS site in order to characterize the impact of instrumental modifications. The table shows the improvement in sensitivity between 2015 and 2018 (Table 1). This improvement comes from the optimization of the optical cell, electronics and spectroscopy.

Table 1. Evolution bewteen 2015 (with two single-gas versions CO_2 and CH_4) and 2018 of AMULSE sensitivities with respect to years and measurable molecular species. It highlights an increasing improvement in the performance of the instrument.

	2015	2017	2018
CH_4	97 ppb	14 ppb	2.7 ppb
CO_2	1.4 ppm	2.6 ppm	0.5 ppm
H_2O		50 ppm	18 ppm

In order to better understand the values in this table, we will describe the last comparison measurement experiment that acheived in February 2018. It took place at the LSCE on their ICOS site where a Picarro's instruments (model G1301, Picarro Inc., Santa Clara, CA, USA) is installed. All Picarro's concentration are calibrated (every 6 hours) with a WMO (World Meteorological Organization) standard gas. The analyser pulled air continuously at few centimeters from the AMULSE about more than three continuous days. Figure

1 shows the intercomparison between the two instruments with Picarro's data plotted in green and AMULSE's data in blue. Insets (a), (b) and (c) in Figure 1 correspond to a zoom on 10 minute. The results show a good correlation between the two instruments for the three measured species. The average absolute difference between the two instruments for the CO_2 channel is equal to 0.01 ppm with a standard deviation of 0.5 ppm (0.2 %), 0.1 ppb with a standard deviation of 2.7 ppb (0.2 %) for the CH_4 channel and 2 ppm with a standard deviation of 18 ppm (0.05 %)for the H_2O channel.

4 Atmospheric applications

Once the validation of the instrument was realized with the help of the PICARRO's, several atmospheric measurement experiments were carried out.

4.1 Tethered balloons application (2017)

Tethered balloons offer great opportunities in order to characterize the temporal atmospheric evolution of the three measured species up to 800 m altitude. In such application we can control the motion speed of the balloon, we can have a bigger payload (which depends on the type of the balloon used), we can even acquire data from a fixed stationary point. Tethered balloon is a carrier that allows measurements to be made between a fixed tower and under-aircraft measurements. The costs of a tethered balloon are much lower than the installations mentioned above.

A experiment was conducted to monitor the evolution of the atmospheric boundary layer early in the morning at sunrise. We carried out 21 ascents/descents (up to 50 metres above sea level). The time of an ascent is about 6 minutes, which results in a vertical resolution of between 20 and 50 cm.

These results were first interpolated over all the heights so that we visualized the spatio-temporal evolution of the boundary layer that morning (Figure 2). the evolution of concentrations and temperature is consistent with what has previously been observed by (K.H. Reid, 1997) AMULSE simultaneously records the concentration of CO_2 (top left), CH_4 (top right), H_2O (bottom left) and temperature (bottom right).

This illustrates the interest of this instrument on board a tethered balloon, as it allows the study of CO_2, CH_4 and H_2O of the boundary layer.

4.2 APOGEE experiment (2017-2018)

4.2.1 Objectives

One of the goals is to carry out weather balloon measurements in co-location with the IASI satellite, in orbit around the earth, developed jointly by CNES (Centre National d'Etude Spatiale) and EUMETSAT (European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites). The measurement made by AMULSE instrument will provide comparative data that can be used to validate CNRM/Météo France meteorological models. In addition, the combination of all these measures offers an opportunity to analyse physico-chemical processes that have not yet been studied in the stratosphere and the interface between the troposphere and the stratosphere, commonly known as UTLS (Upper Troposphere - Lower Stratosphere). To achieve these objectives, we carried out measurements from the site of our laboratory using meteorological balloon for the measurements of CO_2, CH_4, H_2O, O_3, P, T, U in co-location with Metop A, Metop B and Suomi-NPP.

To measure all these parameters, the instruments used were as follows:

- Vaisala RS92-SGP *in situ* soundings (pressure, temperature, relative humidity and GPS location measurement every second with a real time transmission)
- Electrochemical concentration cell (ECC) ozonesondes from Science Pump Corporation, models 5A and 6A with Vaisala RS-92 interfacing (ozone concentration measurement every second with a real time transmission)
- The AMULSE instrument presented above

4.2.2 Description of the flight chain

Flight chain is composed of a carrier balloon, a parachute and the payload (AMULSE and *in situ* sounding) (Figure 3a). Balloon is inflated using a tare to ensure good repeatability of ascent speed. A wire is connected to both parachute and AMULSE release system; the carrier ballon is hooked up to the wire using a sliding ring. Balloon is released when the wire is cutted and it can be triggered either at a specific atmospheric pressure (fixed before the launch), or via a satellite communication system based on an Iridium modem embedded on the AMULSE electronic board or at a specific timeout fixed in advance. When the carrier balloon is released, the wire slides out of the ring and the instrumentation descends with the parachute at a speed lower than 5m/s (Figure 3b). A meteorological *in situ* sounding with a GPS probe fixed on the instrumentation and connected to a ground station allows the determination of the landing site which helps recovery of the instrumentation. A flight simulation software is used to estimate the trajectories and the landing point of the probe. This estimation is based on the wind forecasts from both Météo-France operational numerical weather prediction models: the mesoscale model AROME (Applications de la Recherche à l'Opérationnel à Méso-Echelle) (Seity et al., 2011; Brousseau et al., 2016) and the global model ARPEGE (Action de Recherche Petite Echelle Grande Echelle)(Courtier and Geleyn, 1988; Déqué et al., 1994). Hypothesis are made on both ascending/descending speed of the

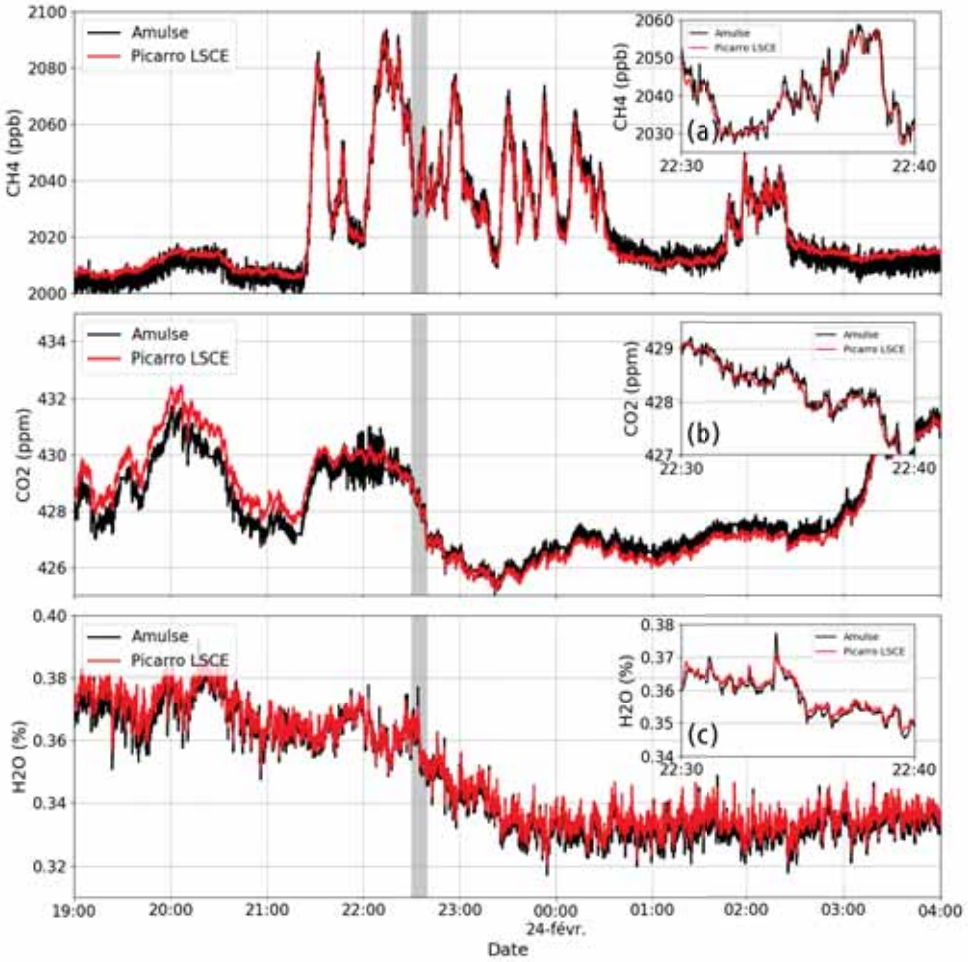


Figure 1. Intercomparsion between AMULSE's concentration (in black) and Picarro's concentration calibrated with WMO gases (in red) during 9 hours for CO_2, CH_4 and H_2O. Gray areas correspond to the zoomed views.

system and the release of the carrier balloon in order to run a first simulation. A measured vertical profile of horizontal winds by the recent sounding can also be used. The trajectories of the balloon are updated in real time by the rawinsonde RS92 measured wind. As the trajectories are adjusted in real-time and AMULSE release system can be remotely triggered, landing area can be optimized in order to maximize safety landings.

4.2.3 Performed Flights

The measurement experiment was held in France in the Champagne - Ardenne region. The launching site was located at the Campus Moulin de la Housse, in Reims (49°14'29.608" N, 4°4'4.709" E). The flights took place over the period from November 2017 to April 2018 (Table 2) and was carried out either by day or night. Several launches could be done at the same time (Figure 4).

Flight	Date	Max altitude (m)
1	07/11/2017 13:48 UTC	19,121
2	08/11/2017 11:50 UTC	25,460
3	15/11/2017 12:02 UTC	31,156
4	15/11/2017 12:09 UTC	31,388
5	15/11/2017 12:06 UTC	31,110
6	13/04/2018 12:06 UTC	29,490
7	17/04/2018 10:15 UTC	25,000
8	17/04/2018 20:12 UTC	19,660

Table 2. List of flights between November 2017 and April 2018

Figure 5 shows examples of vertical concentrations profiles of CO_2, CH_4, H_2O obtained from the flights and we

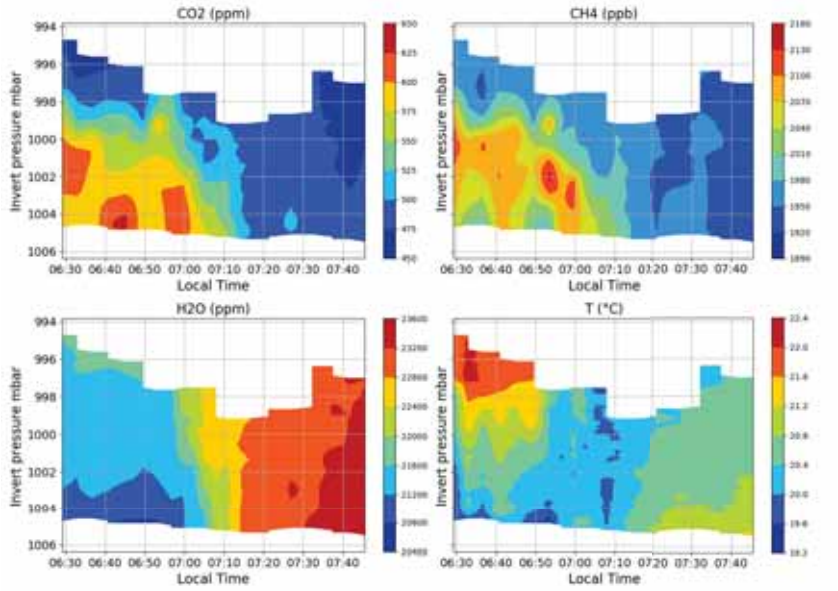


Figure 2. Atmospheric boundary layer evolution. Here is an example of the results of the AMULSE measurements under tethered balloon, it allows to measure simultaneously as a function of time and altitude, the concentration of CO_2 (top left), CH_4 (top right), H_2O (bottom left) and temperature (bottom right)

added temperature for identification of the tropopause. The concentration of CO_2 on the ground can vary greatly, depending on the time of measurement because the boundary layer is enriched with CO_2 when flying close to night (plant respiration - (Schmidt et al., 2014). Concerning CH_4, we see that there is a slight difference but the decrease always occurs at the tropopause level. Its decrease is due to its oxidation with the OH radical. For water measurements, we are currently using the "Imet 1" *in situ* sounding. The measurements are consistent below 10 km altitude but above this altitude we consider that the measurements are biased. For this reason, one of the goals for the year 2020 is tomake water vapour measurements by laser diode spectrometry more accurate in the stratosphere. It should also be taken into account that we generally see an increase in water vapour concentration above 10 km, this is due to the degassing of water from the instrument and the balloon during the ascent. For this reason, water measurements in the stratosphere are only possible during descents.

5 Use of data from the APOGEE measurement experiment

The data produced during the APOGEE measurement experiment have different applications. Initially, they were used as satellite validation data for the IASI and CrIS infrared sounders. They were then used to evaluate the quality of vertical ozone and methane profiles extracted from the MOCAGE and CAMS Chemistry Transport Models. Finally, they were used as verification data to compare the ozone profiles returned in one-dimensional variational assimilation experiments (1D-Var) with the *a priori* ozone profiles from MOCAGE and CAMS.

5.1 Sensitivity of infrared satellite sensors to CO_2, CH_4 and O_3 information

5.1.1 IASI and CrIS sensors

IASI is flying on board 3 European polar-orbitting satellites Metop-A, B and C, respectively launched in 2006, 2012 and 2018. The IASI spectrum covers the range between 645 and 2760 cm^{-1}, with as spectral sampling of 0.25 cm^{-1} and spectral resolution of 0.5 cm^{-1} after apodisation. CrIS is part of the payload of the US polar-orbitting satellites S-NPP and NOAA-20, respectively launched in 2011 and 2017. Only the so-called CrIS Normal Spectral Resolution data are used in this study, leaving the CrIS spectrum divided into three parts: between 650 and 1095 cm^{-1} with a spectral resolution of 0.625 cm^{-1}, between 1210 and 1750^{-1} (1.25 cm^{-1} spectral resolution) and between 2155 and 2550 cm^{-1} (2.5 cm^{-1} spectral resolution).

5.1.2 Radiative Tranfer Model

During the assimilation process within the NWP analysis step, a compromise is found between a priori knowledge of the atmospheric state (a short-range forecast, in gen-

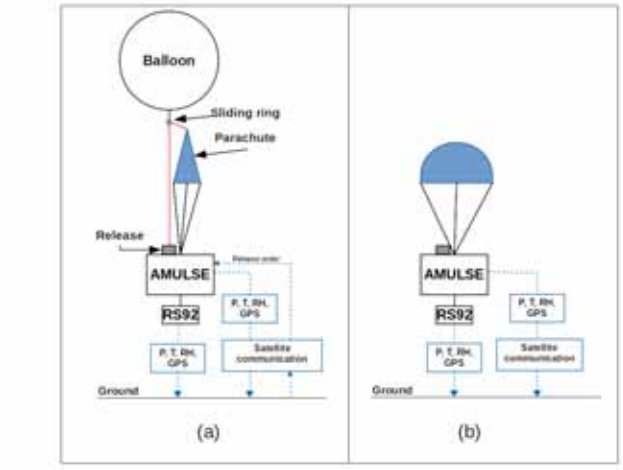


Figure 3. A schematic diagram of the flight chain during (a) ascent and (b) descent. Transmission and reception of the information during the flight is done using both satellite and radio communications. A Vaisala *in situ* sounding RS92 is connected which measures and transmits instantaneous P, T, relative humidity and GPS data to a ground mobile station to inject those data in the trajectory model and hence ensure the tracking/recovery of the instrument. Note that the trigger release system can be controlled by either home-made smartphone application or web application using Iridium satellite communication system. Theses applications can also track AMULSE position as the latter transmits its GPS position, pressure and temperature data every 5 min ensuring redundant retrieval system.



Figure 4. Launching site (a) at day and (b) at night, ready for multiple launches.

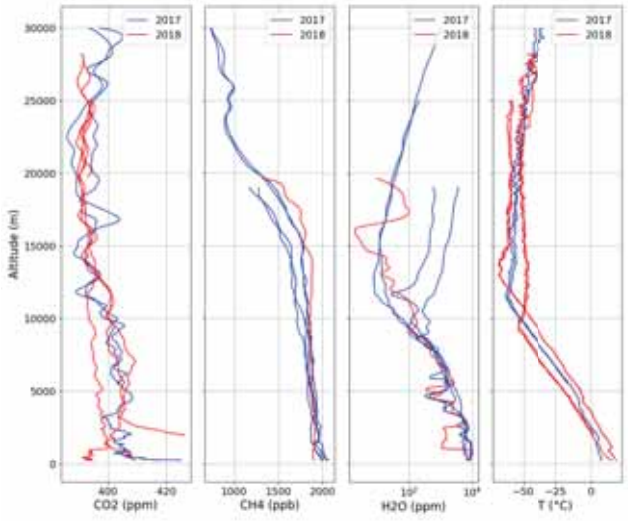


Figure 5. Balloon measurement : CO_2, CH_4, H_2O, temperature vertical concentration profiles between November 2017 and April 2018

eral) and various observations, including radiosoudings, aircraft measurements, ground stations, space-borne passive sounders both in the microwave and in the infrared, among others. When assimilating satellite radiances, eg. infrared radiances, a radiative transfer model is needed in several ways. Firstly, the observations have to be compared to the prior atmospheric state: simulations of radiances are made using the temperature and humidity profiles and surface parameters from that state. The differences between observations and simulations are called innovations or first-guess departures. Then, the information contained in the first-guess departures is used to modify the atmospheric state so that the analyzed atmospheric state is a compromise between all sources of information. To achieve this inverse problem, the RTM has to either have tangent linear and adjoint codes or compute the jacobians (the Jacobians of IASI channels are described in Section 5.1.3). At Météo-France, the RTM used in the operational assimilation software is the fast radiative transfer model RTTOV (Saunders et al., 2018) developed and maintained by the NWP-SAF (Satellite Application Facility) of EUMETSAT (EUropean Organisation for the Exploitation of METeorological SATellites).

For infrared sensor simulation, RTTOV requires not only temperature and humidity profiles, but also a knowledge of the atmospheric composition. As few NWP models have inline atmospheric composition yet or are coupled to a CTM, RTTOV also provides the users with average chemical profiles that are invariant in time and space, hereafter referenced as REF profiles. These REF profiles are plotted on Figure 7 for O_3 (a), CO_2 (b) and CH_4 (c). In this study, we use RTTOV version 12, with coefficients for IASI and CrIS on 101 fixed pressure levels.

5.1.3 Theoretical sensitivity of IASI and CrIS spectra to GHG

Infrared satellite observations measured by IASI and CrIS instruments are sensitive to atmospheric temperature and humidity, skin temperature but also atmospheric chemistry. To identify the channels sensitive to the different parameters, RTTOV offers the possibility to calculate the jacobians which represent the sensitivity of the brightness temperature to the variation of a thermodynamic or chemical parameter. Thus we have represented in Figure 6, the jacobians in tem-

perature (a), humidity (b), skin temperature (c), ozone (d), carbon dioxide (e) and methane (f) for the 8461 IASI channels using the reference chemical profiles for our case study according to the 101 RTM levels. It should be noted that temperature jacobians are sensitive over a large part of the spectrum but at different altitudes. Indeed, channels between 650 to 770 cm^{-1} describe a temperature sensitivity from the top of the stratosphere to the surface. There are also high sensitivity near the surface to window channels between 790 to 980 cm^{-1} and 1080 to 1150 cm^{-1}. There is a sensitivity over the entire atmosphere for channels between 1000 to 1070 cm^{-1}. Then, temperature jacobians are sensitive in the troposphere between 1210 to 1650 cm^{-1}. Humidity jacobians are surface sensitive for channels between 650 to 770 cm^{-1} and 1080 to 1150 cm^{-1} and in the troposphere between 650 to 1150 cm^{-1}. Jacobians of skin temperature have essentially high values for window channels between 790 to 980 cm^{-1} and 1080 to 1150 cm^{-1}. Ozone jacobians are slightly sensitive between 650 to 770 cm^{-1} and have a sensitivity over the entire atmosphere between 1000 to 1070 cm^{-1}. We note that carbon dioxide jacobians have high values over the entire atmospheric column for channels between 650 to 770 cm^{-1}. Finally, methane jacobians have high sensitivities for channels between 1210 to 1650 cm^{-1}.

5.1.4 Pre-processing of APOGEE measurements

We selected the sounding from 2018-04-17 at 10 UTC for which ozone, carbon dioxide and methane are measured. The profiles are plotted in Figure 7. The ozone profile is available up to 6 hPa (TBC), the carbon dioxide up to 25 hPa (TBC) and the methane up to 65 hPa (TBC). There are few differences between the reference and *in situ* profiles for ozone and methane, except around the tropopause. Unlike carbon dioxide, where the difference can be as much as 10 ppmv in the lower troposphere.

In order to assess the impact of using the *in situ* chemical information instead of the reference profiles, we have interpolated the in-situ profiles on the 101 fixed pressure levels by making layer averages centred on these levels. Moreover, the measured profiles do not reach the highest fixed pressure level. Thus a polynomial function was used to link the *in situ* profiles to the reference profiles from the levels where the data are missing. Shaded areas in Figure 7 represent parts or profiles *in situ* are linked to reference profiles to replace missing data.

Then, modeled atmospheric profiles of temperature, humidity, surface temperature, surface humidity, surface pressure, zonal and meridian wind come from the global model ARPEGE forecasts (every 3 hr), which have been extracted for the same period and location as for the *in situ* sounding. The coefficient file used during the simulation process in RTTOV being on 101 fixed pressure levels, the thermodynamic profiles of ARPEGE were interpolated on these same levels.

In this study we simulated satellite observations from two types of infrared instruments: IASI and CrIS. In order to evaluate the quality of our simulations, we sought to spatially and temporally co-locate the IASI (MetOp-B) and CrIS (Suomi-NPP) pixels as close as possible to the *in situ* soundings. To avoid problems related to clouds, we carried out the April 17, 2018 release at 10 UTC in clear sky. Thus, Figure 8 represents the brightness temperature spectrum of the IASI observations simulations in black and CrIS in red with respect to the wave number using as RTTOV input the reference profiles of O_3, CO_2 and CH_4 for the *in situ* sounding from 2018-04-17 to 10 UTC. There is a good agreement between the simulated IASI and CrIS spectrum except for the window channels. The difference seen between the simulated IASI and CrIS window channels is due to the temporal and spatial differences between the selected pixels, which implies a different skin temperature used in RTTOV. However, the skin temperature has an obvious impact on the simulation of infrared observations sensitive to the surface, hence these differences.

5.1.5 Impacts on simulations

We evaluated the impact on the simulations of IASI and CrIS observations of using chemical information from *in situ* measurements as input to RTTOV in replacement of the constant profiles. Figure 9 shows the difference between simulated brightness temperature (BT^S) with O_3 in purple (resp. CO_2 in red or CH_4 in green) *in situ* measurement profiles (X^M) and simulated brightness temperature with O_3 (resp. CO_2 or CH_4) reference profiles (X^R) for *in situ* sounding from 2018-04-17 at 10 UTC for all channels contained in the IASI (a) and CrIS (b) spectrum, where EXP means experiment (for example, EXPO3 means experiment for ozone case, etc.), such as:

$$\begin{aligned}
\mathrm{EXPO_3} &= \mathrm{BT^S[O_3^M + CO_2^R + CH_4^R]} \\
&\quad - \mathrm{BT^S[O_3^R + CO_2^R + CH_4^R]} \\
\mathrm{EXPCO_2} &= \mathrm{BT^S[O_3^R + CO_2^M + CH_4^R]} \\
&\quad - \mathrm{BT^S[O_3^R + CO_2^R + CH_4^R]} \\
\mathrm{EXPCH_4} &= \mathrm{BT^S[O_3^R + CO_2^R + CH_4^M]} \\
&\quad - \mathrm{BT^S[O_3^R + CO_2^R + CH_4^R]}
\end{aligned}$$

The differences of BT affects ozone-sensitive channels located between 710 to 760 cm^{-1}, 980 to 1150 cm^{-1} and 2060 to 2135 cm^{-1} (for IASI). Then, the differences of BT affects a larger part of the spectrum especially the CO_2 sensitive channels with spectral intervals between: 645 to 820

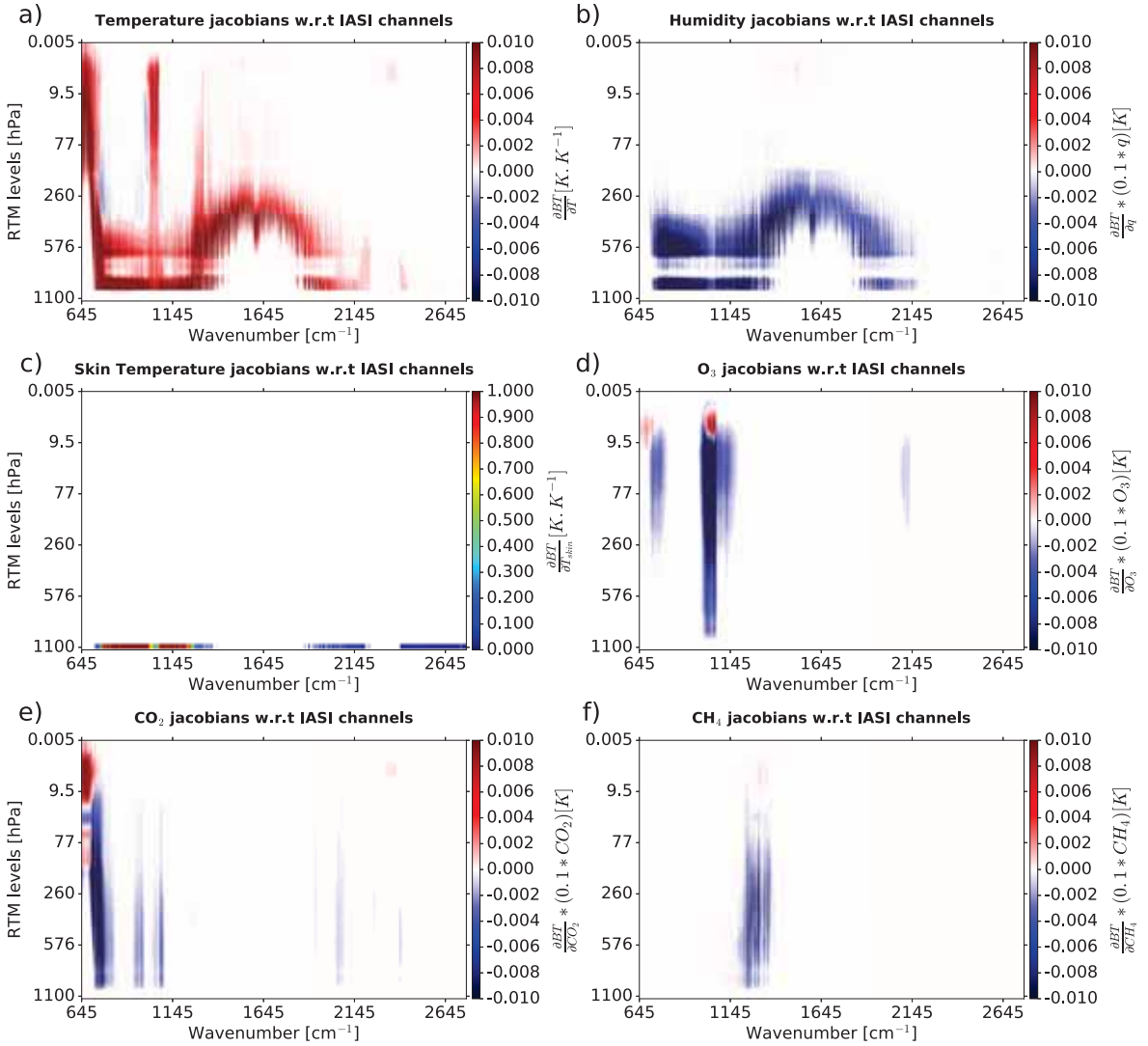


Figure 6. Jacobians of temperature (a), humidity (b), skin temperature (c), ozone (d), carbon dioxide (e) and methane (f) for 8461 IASI channels w.r.t. 101 RTM levels.

cm^{-1}, 930 to 980 cm^{-1}, 1030 to 1085 cm^{-1}, 1900 to 1940 cm^{-1} (for IASI), 2010 to 2120 cm^{-1} (for IASI) and 2200 to 2440 cm^{-1}. Finally, the differences of BT affects CH_4 sensitive channels located between 1200 to 1380 cm^{-1} and less so between 2650 to 2760 cm^{-1}.

The maximum difference values of BT for CO_2 sensitive channels are around 0.2 K and for CH_4 sensitive channels around -0.4 K for both instruments. The maximum difference values of BT for ozone sensitive channels are around 0.9 K for IASI and 0.75 K for CrIS. The differences in ΔBT values between the two instruments can be explained by the difference in spectral resolution.

Even if the reference profile is close to the *in situ* profile, as for example for ozone, this does not necessarily imply small differences between the simulations. However, the spatial and temporal variability of atmospheric composition is very important, especially for ozone. In addition, differences in BT too large in CO_2 to have a direct impact on the quality of temperature forecasts, since we use channels sensitive to this species to retrieved temperature profiles.

Finally, in order to assess the quality of our simulations of infrared satellite observations for IASI and CrIS instruments using the reference profiles provided by RTTOV, we calculated the difference between real and simulated observations

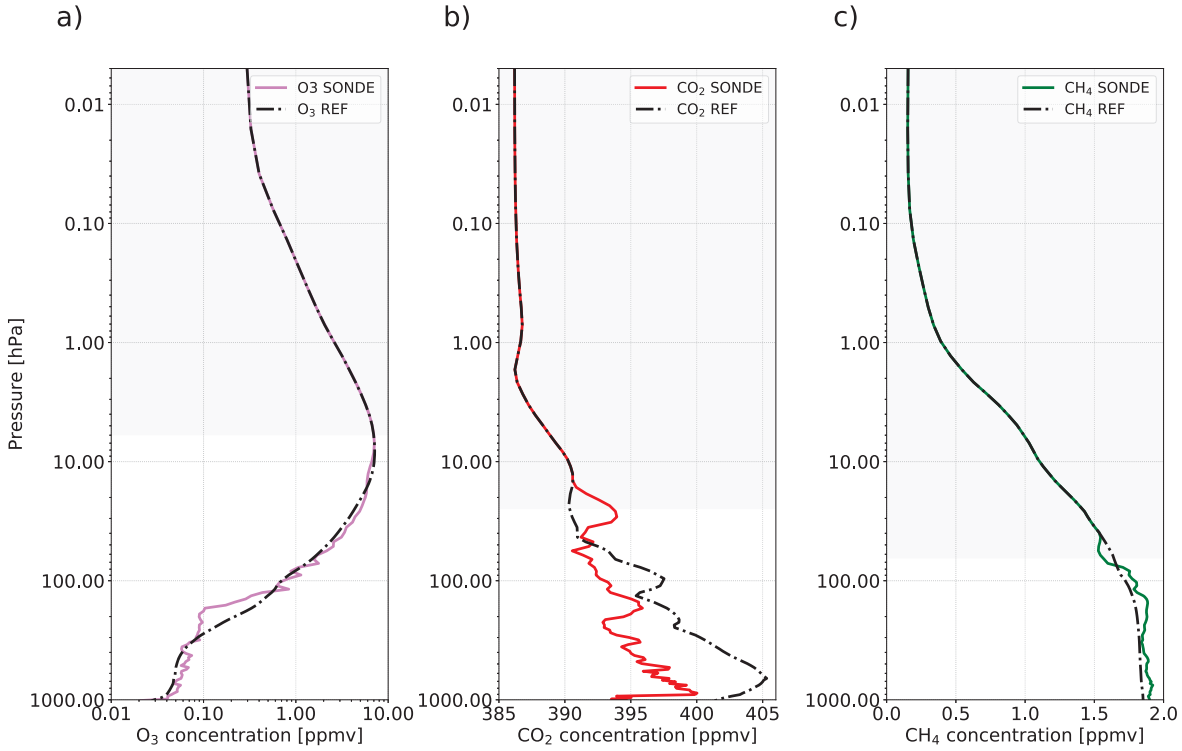


Figure 7. Representation of reference profiles (black dotted lines) of O_3 (a), CO_2 (b) and CH_4 (c) and profiles measured by *in situ* sounding and convoluted with reference profiles of O_3 in violet (a), CO_2 in red (b) and CH_4 in green (c).

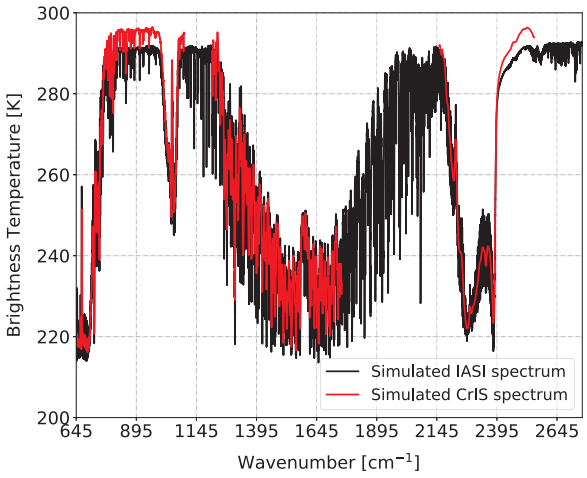


Figure 8. Brightness Temperature spectrum of simulated IASI (in black) and CrIS (in blue) observations w.r.t wavenumbers using O_3, CO_2 and CH_4 reference profiles for *in situ* sounding from 2018-04-17 at 10 UTC.

(O-B) using chemical information from reference profiles (black line) and from *in situ* profiles (red line) with respect to IASI (Figure 10.a) and CrIS (10.b) monitored channels for *in situ* sounding from 2018-04-17 at 10 UTC. IASI and CrIS has respectively 314 and 330 monitored channels. For this case study the differences (O-B) using reference chemical profiles (REF) and simulations using *in situ* chemical profiles (SONDE) are small over all IASI (a) and CrIS (b) spectrum. However, there are significant differences for ozone-sensitive channels with (O-B) values closer to zero when using the reference ozone. This could be explained by a smaller accuracy of ozone measurement with ozone-sondes than with the AMULSE instrument. Another possibility is the existence of other biases (eg. depending on the scan position) which are compensated for by bias of the opposite sign in the case of REF. The same experiments were performed on other *in situ* sounding data with generally the same results (not shown here). For the case of 2018-04-07, it can be seen in Figure 9 that our static reference profiles of carbon dioxide and methane lead to realistic simulations, as for *in situ* profiles. However, it is more difficult to accurately simulate ozone-sensitive channels. Indeed, ozone differs from CO_2 and CH_4 because it has a very high spatial and temporal variability. Hopefully in the future, chemical measurements of this type

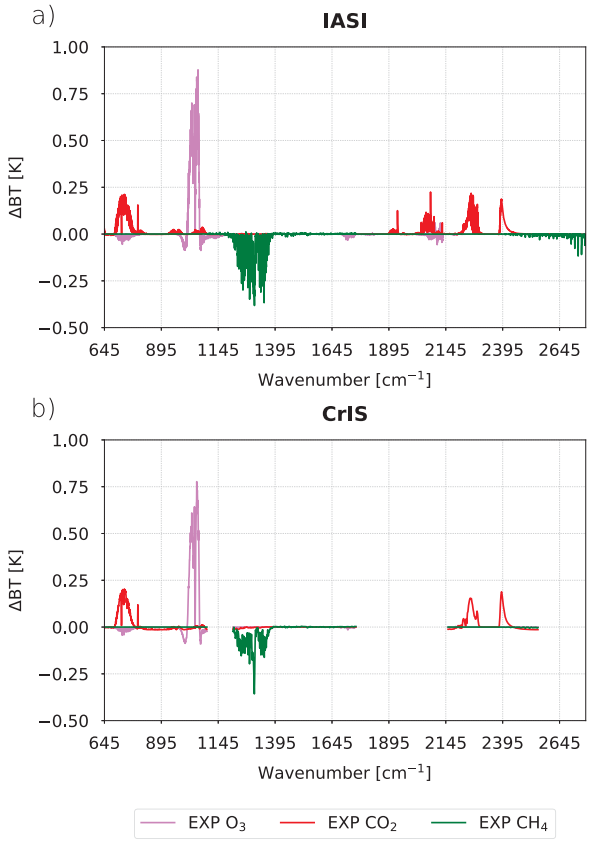


Figure 9. Difference between simulated brightness temperature (BT) with O_3 in purple (resp. CO_2 in red or CH_4 in green) *in situ* profiles from SONDE and AMULSE and simulated brightness temperature with O_3 (resp. CO_2 or CH_4) reference profiles for *in situ* sounding from 2018-04-17 at 10 UTC for all channels contained in the IASI (a) and CrIS (b) spectrum.

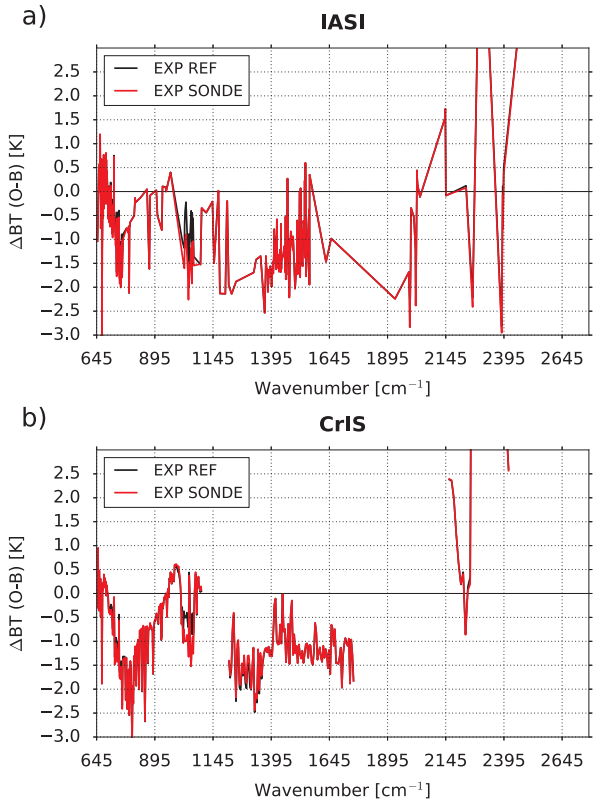


Figure 10. Difference between real and simulated observations (O-B) using chemical information from reference profiles (black line) and from *in situ* profiles (red line) with respect to IASI (a) and CrIS (b) monitored channels for *in situ* sounding from 2018-04-17 at 10 UTC.

will be carried out on a more regular basis across the globe allowing for more robust assessments.

5.2 Comparison between *a priori*, *retrieval* and *in situ* chemical profiles

In situ chemical profiles can directly be used as verification data for modeled profiles or retrievals from satellite sensors. In this section, two possible usages are illustrated on APOGEE data.

5.2.1 Forecasts of atmospheric composition

One possible use of these *in situ* profiles of CO_2, CH_4 and O_3 is to use them as comparison data to the *a priori* chemical profiles from the Chemistry Transport Models (CTM). As part of our study, we compared our measured data against the profiles extracted from the CTM MOCAGE and C-IFS. These two models differ in that the global version fo the MOCAGE model does not assimilate any observation in operation, while C-IFS assimilates Level-2 products from several instruments such as MLS, OMI, SBUV-2, GOME-2A/2B, IASI, MOPITT, OMPS and PMAp (Basart et al., 2018). C-IFS provides analyses and 5-day forecasts of atmospheric composition at regional and global scales in near-real time. MOCAGE is an off-line global three-dimensional chemistry transport model (Guth et al., 2016). It provides the time evolution of the chemical air composition from the surface to the stratosphere. MOCAGE is used for operational daily forecasts and also for research studies. Thus, we extracted the profiles *a priori* from CH_4 and O_3 from the CTM MOCAGE and C-IFS for our case study of the *in situ* sounding from 2018-04-17 to 10 UTC. These profiles could therefore be compared to the *in situ* and reference profiles available in RTTOV. We have shown in Figure 11 the ozone (a) and methane (b) *in situ* profiles in black line compared to O_3 and CH_4 *a priori* profiles from CAMS in red line and MOCAGE in blue line and compared

to O_3 and CH_4 reference profiles in dotted.

In Figure 11.a we notice that the reference ozone profile is relatively in good agreement with the *in situ* profile except in the upper troposphere between 300 and 150 hPa. The ozone values of the reference profile are slightly higher than the *in situ* profile in the lower troposphere between 1000 and 350 hPa and in the lower stratosphere between 60 and 20 hPa. Then, we observe that the *a priori* profile of ozone from MOCAGE is very close to the profile measured over the entire lower stratosphere. The MOCAGE ozone profile follows the profile measured in the upper troposphere between 500 and 80 hPa, with lower values. The MOCAGE ozone values are overestimated compared to the profile measured in the lower troposphere between 1000 and 500 hPa. Finally, the ozone profile from CAMS is in very good agreement with the profile measured in the lower troposphere between 1000 and 450 hPa and in the lower stratosphere between 45 and 15 hPa. However, CAMS ozone profile overestimates the values compared to the profile measured over a large part of the atmosphere between 500 and 50 hPa. Overall, the different ozone profiles are more or less close to the measured profile. The CTMs are able to simulate the shape of ozone profiles relatively well with good values for MOCAGE in the stratosphere and in the lower troposphere for CAMS. The reference profile seems to be a good compromise on this particular case.

Methane simulation is a much more difficult task in the field of CTMs. Indeed, there are major scientific questions about the increase in atmospheric methane concentration and its hypothetical sources (Archibald et al. 2020; Houweling et al. 2017; Naik et al. 2013). That is why assimilation into CTMs for this species is very useful. We notice again in Figure 11.b that the reference methane profile is rather good with the profile measured between 1000 and 70 hPa. Indeed, above 70 hPa, there is a faster decrease in the measured concentration than the values of the reference profile. This decrease is simulated by the profile from MOCAGE but with a large underestimation over the entire profile of about 0.5 ppmv. This difference can be explained by a missing source in the model and/or too many OH molecules that are the main methane sink. Assimilation can solve this problem, so there is a very good agreement between CAMS methane profile and the measured profile in the lower troposphere between 1000 and 300 hPa. Then the values of the CAMS profile are underestimated compared to the measured profile between 300 and 45 hPa.

Such *in situ* chemical profiles can be very useful in assessing the quality of simulations of atmospheric composition from CTMs, especially if they can be made on a regular basis within a network. For our study case, we note the rate and concentration of ozone are relatively well simulated by MOCAGE and CAMS, while methane is largely underestimated in MOCAGE and very well represented in the troposphere by CAMS.

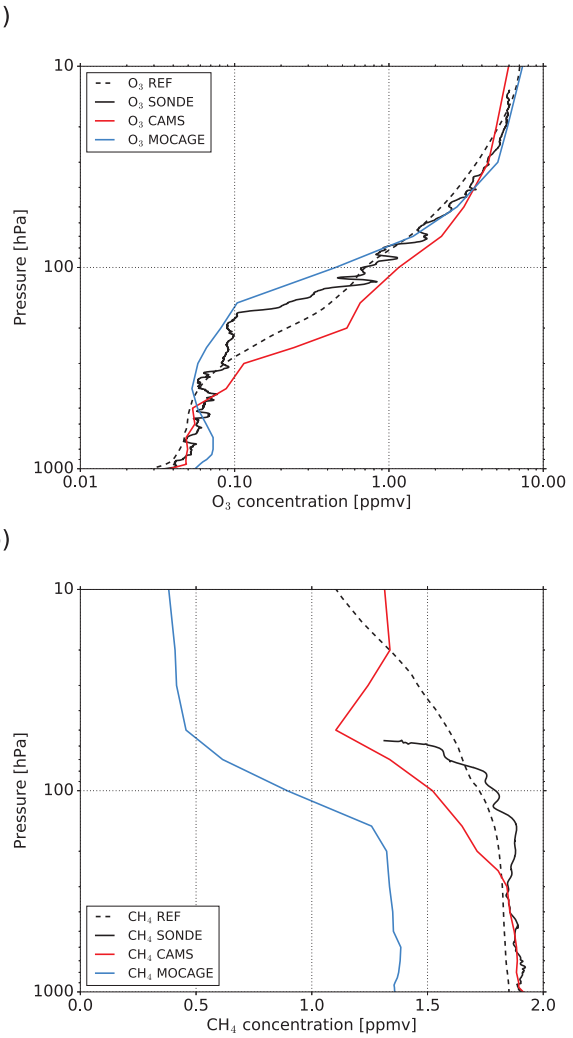


Figure 11. Ozone (a) and methane (b) *in situ* profiles in black line compared to O_3 and CH_4 *a priori* profiles from CAMS in red line and MOCAGE in blue line and compared to O_3 and CH_4 reference profiles in dotted for *in situ* sounding from 2018-04-17 at 10 UTC.

5.2.2 Ozone retrieval from 1D assimilation

Profiles of various atmospheric compounds can be retrieved from satellite data. Among them, hyperspectral infrared sounders like AIRS, CrIS and IASI have the ability to be used both in NWP models and for atmospheric composition purposes, which could be used in combining meteorological and chemistry transport models to achieve a so-called coupled assimilation. A precursor way is to add some chemical variable to the control variable of NWP models. This is the

case, for example, for ozone in the IFS model of ECMWF, which assimilates 16 IASI ozone-sensitive channels in operational near-real time providing ozone analysis (Han and McNally, 2010). Such an approach can also be used at the pixel level to retrieve profiles or from cloud-cleared spectra as done by the AIRS and NUCAPS systems ((Susskind et al., 2003); (Smith and Barnet, 2019)). Indeed, (Coopmann et al., 2018) study shows that the assimilation of 15 ozone sensitive IASI channels makes it possible to simultaneously improve temperature, humidity and ozone retrievals. In both cases, it is also important to assess the quality of ozone analyses using independent comparative data. For ozone, this can be done almost in any region around the world since there are several stations that perform *in situ* soundings measuring ozone (Nalli et al., 2017b). However, if methane or carbon dioxide analyses are to be retrieved, *in situ* vertical profiles of these compounds are much sparse. This is why the data measured by the AMULSE instrument can be valuable when these compounds are reproduced by meteorological models. As part of the APOGEE measurement experiment, we carried out several assimilation experiments in a simplified one-dimensional framework (1D-Var) where we retrieved ozone. The NWP SAF (Satellite Application Facilities) 1D-Var algorithm (Pavelin et al., 2008) is based on the Optimal Estimation Method (OEM) (Rodgers, 2009). This method makes it possible in a simplified way to get closer to what is done operationally in large NWP centres using variational assimilation methods. There are other methods of retrieval such as the Piece-Wise Linear Regression used at EUMETSAT (IASI, 2014) or the NOAA Unique CrIS/ATMS processing System (NUCAPS) for the infrared physical retrieval based on a regularized iterated least square minimization ((Gambacorta et al., 2012); (Nalli et al., 2013)).

The measured *in situ* ozone profiles could be used as comparative data to evaluate the quality of our retrievals. In this study we conducted these experiments using observations from IASI and CrIS, focusing on simultaneous retrieval of temperature, humidity and ozone, taking ozone background/*a priori* from MOCAGE or CAMS. Similar work on the validation of ozone restitution from IASI is presented in (Dufour et al., 2012) and for CrIS in (Nalli et al., 2017b). Soundings of 2017-06-01 to 10 UTC, 2017-07-04 to 02 UTC, 2017-07-04 to 09 UTC and 2017-07-04 to 12 UTC are selected for that case study. The methodology and techniques used in this study are the same as those used in (Coopmann et al., 2018). To retrieve ozone using observations from IASI, we assimilated 123 channels used in operations at Météo-France plus 15 ozone-sensitive channels, using a full observation error covariance matrix diagnosed from the method described by (Desroziers et al., 2005). Based on CrIS observations, we assimilated 68 channels used in operations at Météo-France and 14 ozone-sensitive channels, using a diagonal observation error covariance matrix whose values are derived from the operational settings at Météo-France. IASI and CrIS observations were collocated with *in situ* soundings. The ozone background errors available in the background error covariance matrix were calculated using ozone-sondes based on the method described in the work of (Coopmann et al., 2018). Finally, the thermodynamic *a priori* profiles and surface parameters were extracted from the global model ARPEGE and were extracted at the same coordinates and time as the *in situ* soundings, same for the ozone *a priori* profiles from MOCAGE and CAMS.

Figure 12 represent the ozone *in situ* profile in black compared to O_3 *a priori* profile from MOCAGE in red and O_3 *retrieval* profile from CrIS in blue for *in situ* sounding from 2017-07-04 at 02 UTC (a) and 2017-07-04 at 12 UTC (c) and ozone *in situ* profile in black compared to O_3 *a priori* profile from CAMS in orange and O_3 *retrieval* profile from CrIS in cyan for *in situ* sounding from 2017-07-04 at 02 UTC (b) and 2017-07-04 at 12 UTC (d). In Figure 12.a, we notice that overall the MOCAGE *a priori* profile underestimates the ozone concentration compared to the measured profile except in the lower troposphere and above 25 hPa. In this case, the ozone *retrieval* profile is very close to the measured profile. In Figure 12.b, the CAMS *a priori* profile is generally closer to the measured profile than the MOCAGE *a priori* profile. However, there are some overestimation of CAMS ozone concentration between 300 - 200 hPa and 150 - 50 hPa. We note that with this *a priori* profile, the ozone *retrieval* profile is less modified than previously. In the same way as the previous *in situ* sounding, we notice in Figure 12.c that the MOCAGE *a priori* profile underestimates the ozone concentration compared to the measured profile except in the lower troposphere. The ozone *retrieval* profile is again of very good quality. Finally, we note in Figure 12.d that CAMS's *a priori* profile underestimates the concentration of ozone in the lower troposphere compared to the measured profile and overestimates it between 500 - 20 hPa. In this experiment, the ozone *retrieval* profile is very close to the measured profile except in the lower troposphere.

Figure 13 represent ozone *in situ* profile in black compared to O_3 *a priori* profile from MOCAGE in red and O_3 *retrieval* profile from IASI in blue for *in situ* sounding from 2017-06-01 at 10 UTC (a) and 2017-07-04 at 09 UTC (c) and ozone *in situ* profile in black compared to O_3 *a priori* profile from CAMS in orange and O_3 *retrieval* profile from IASI in cyan for *in situ* sounding from 2017-06-01 at 10 UTC (b) and 2017-07-04 at 09 UTC (d). Figure 13.a shows that the *a priori* from MOCAGE underestimates the ozone concentration compared to the measured profile except in the lower troposphere. This experiment makes it possible to retrieve a profile very close to the measured profile except above 50 hPa where the latter remains close to the *a priori*. In Figure 13.b, the *a priori* from CAMS is generally close to the measured profile except at the UTLS where there is an overestimation of the ozone concentration. It can be seen that with this *a*

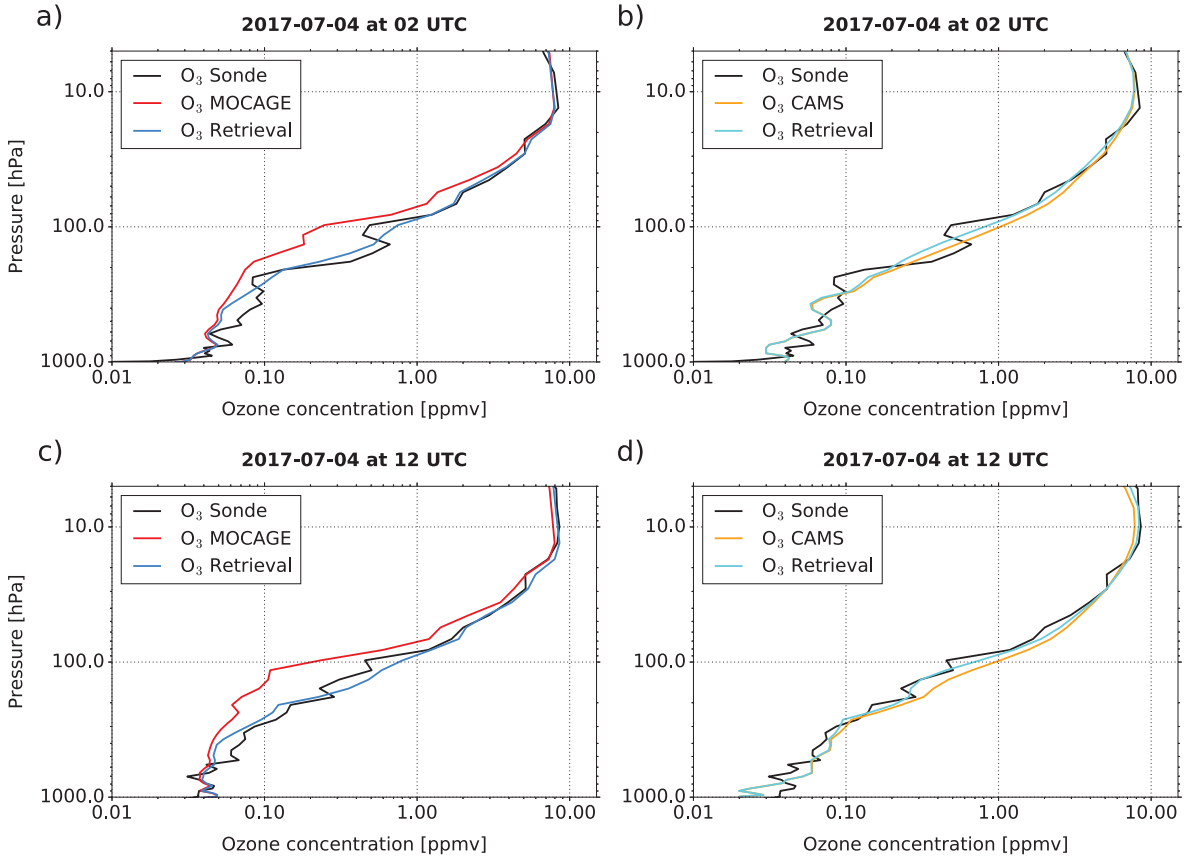


Figure 12. Ozone *in situ* profile in black compared to O_3 *a priori* profile from MOCAGE in red and O_3 *retrieval* profile from CrIS in blue for *in situ* sounding from 2017-07-04 at 02 UTC (a) and 2017-07-04 at 12 UTC (c). Ozone *in situ* profile in black compared to O_3 *a priori* profile from CAMS in orange and O_3 *retrieval* profile from CrIS in cyan for *in situ* sounding from 2017-07-04 at 02 UTC (b) and 2017-07-04 at 12 UTC (d).

priori profile, the *retrieval* profile approaches the measured profile and shows the same structure as the measured profile in the UTLS. Then Figure 13.c shows that the *a priori* profile from MOCAGE underestimates the ozone concentration compared to the profile measured in this case except in the lower troposphere and above 25 hPa. The *retrieval* profile is also of good quality. Finally, we note in Figure 13.d that the *a priori* profile from CAMS underestimates ozone concentration in the lower troposphere compared to the measured profile and overestimates it by 150 - 40 hPa. This last experiment allows to retrieve an ozone profile very close to the measured profile except between 300 - 150 hPa.

6 Conclusions

This article shows the interest and possibilities of the AMULSE instrument for the fast and accurate measurement of CO_2, CH_4 and H_2O in the atmosphere. The APOGEE measurement experiment was an opportunity to highlight the various benefits of the data from the AMULSE instrument for different research projects: satellite validation, model comparison, verification data, etc. The measurements will continue with monthly radiosoundings on the Reims site to get more consistent data sets.

The prime aim of this study was to assess the sensitivity of infrared satellite observations to chemical information. The objective was to use carbon dioxide, methane and ozone profiles measured as part of the APOGEE measurement experiment to validate the quality of IASI and CrIS observation simulations. The *in situ* profiles were measured for ozone using an electrochemical cell and the CO_2 and CH_4 profiles using the AMULSE instrument. These instruments were placed under meteorological balloons to produce vertical profiles up to 30 km in altitude. Experiments for one case study showed us that infrared observations are extremely sensitive to changes in chemical concentrations. The RTM

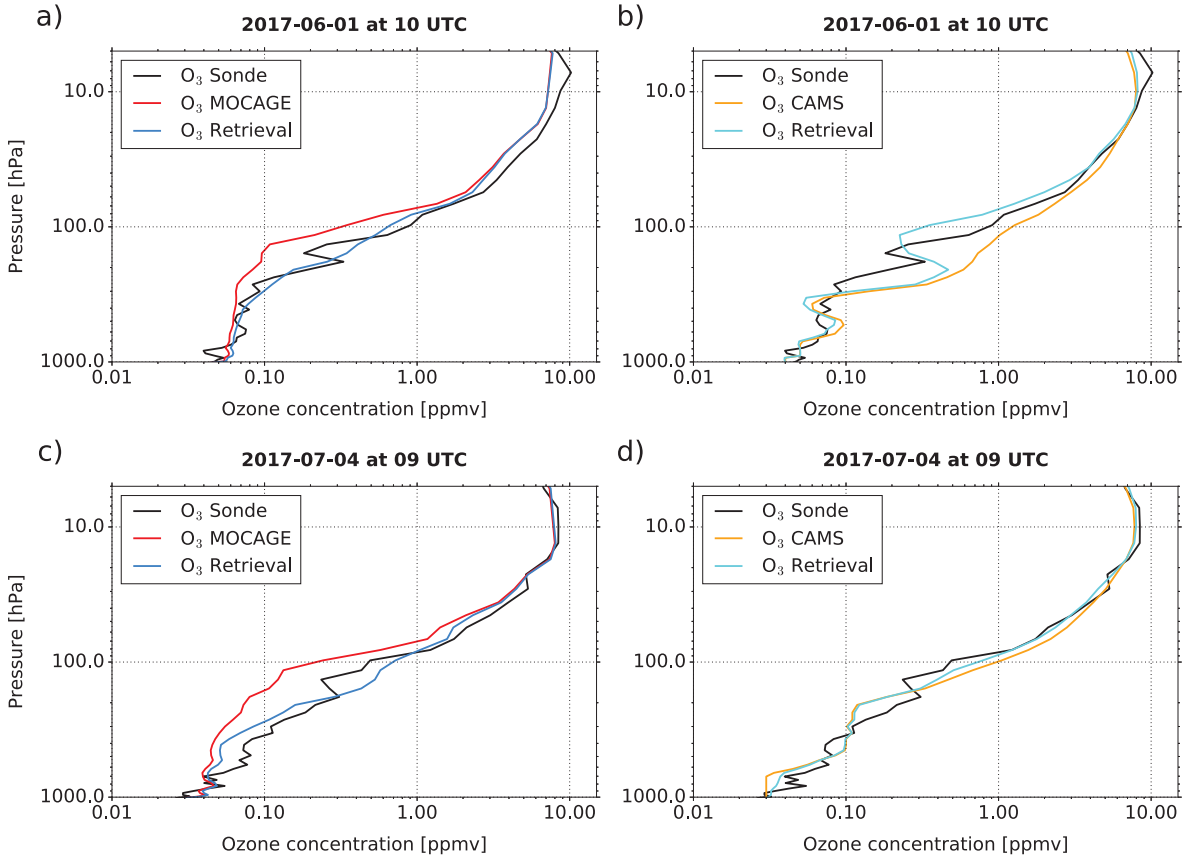


Figure 13. As Figure 12, except for IASI for *in situ* sounding from 2017-06-01 at 10 UTC (b) and 2017-07-04 at 09 UTC (d).

RTTOV model allowed us to perform several simulations of infrared observations under several configurations of chemical *a priori* profiles provided as input. This is how we were able to highlight differences in simulation between the use of the *in situ* and reference profiles. However, despite these differences, we have shown little impact in differences between the real and simulate observations using either the reference chemical profiles or the *in situ* profiles except for ozone. Indeed, the latter reacts differently in the atmosphere and is highly variable compared to CO_2 and CH_4. The data measured by the AMULSE instrument are valuable to evaluate the quality of our simulations, which is essential for NWP models. Indeed, as mentioned above, the a priori information of gases provided to RTTOV is invariant in time and space. In reality these gases such as CO_2, CH_4, O_3 or CO show significant variability, both temporarily and spatially in the atmosphere. In addition, carbon dioxide sensitive channels are often used to extract information on atmospheric temperature. However, the approximation of using a fixed CO_2 for the simulation of infrared satellite observations can have a negative impact on the quality of temperature retrieval as shown by the work of (Engelen et al., 2001) from the AIRS instrument. Finally, data assimilation systems have a bias correction method called VarBC (Auligné et al., 2007). However, this method can correct systematic biases that do not necessarily take into account the specificity of the variability of certain gases. Thus, it is preferable to correct biases at the source through an improvement of simulations in Radiative Transfer Models and will improve the analysis of temperature, humidity and wind in global model assimilations.

Secondly, the measured profiles in the APOGEE framework were also valuable for comparison with the chemical profiles derived from the CTMs. Thus, we extracted ozone and methane profiles from the MOCAGE and CAMS CTMs for a case study. This comparison with the measured profiles showed us that the CTMs represent atmospheric ozone rather well, especially in the stratosphere for MOCAGE and in the troposphere for CAMS. Having good chemical concentrations in the troposphere for CAMS is important as it also provides air quality forecasts. We also showed that

methane is very well simulated by the CTM CAMS in the troposphere but underestimated by 0.5 ppmv by the CTM MOCAGE. The difference is mainly due to the fact that CAMS's C-IFS model assimilates level 2 products compared to MOCAGE which does not assimilate anything. Once again, we can see the importance of these *in situ* profiles for the comparison and validation of chemical predictions from CTMs.

Finally, a method to obtain more accurate chemical profiles was used. In this case, ozone profiles were retrieved using one-dimensional assimilation (1D-Var) using observations from IASI and CrIS and *a priori* ozone profiles from MOCAGE and CAMS for 4 *in situ* soundings. The *in situ* profiles have allowed us to highlight very encouraging results since, the method used in this study allows us to retrieve ozone profiles very close to the measured ozone profiles, particularly in the UTLS which remains an area difficult to model by CTMs. We have also shown that some retrieved ozone profiles simulate very well the complex structures that some measured ozone profiles generated by isentropic transport in the UTLS can have.

AMULSE regularly evolves in terms of performance, weight and number of detectable gas molecules. Different perspectives are possible, such as the measurement of other molecular species of atmospheric interest in tethered balloons or weather balloons for measurements in the stratosphere. Thus, the data measured by the AMULSE instrument are useful for many scientific studies. However, the small number of measurements performed remains an important limitation in making conclusions from comparisons with satellite observations or chemical fields from models. Therefore, it would be interesting to extend these chemical measurements on a regular basis over the whole globe in the same way as is done with the ozone measurement networks.

Acknowledgements. This research based on data from the APOGEE measurement experiment has been conducted within the framework of O. Coopmann's PhD thesis, which funded by CNES (Centre National d'Études Spatiales) and the Région Occitanie. Thanks to Michel Ramonet (from LSCE) and his team for allowing us to perform the measurements on their ICOS site.

Code availability. Codes of the Radiative Transfer Model RTTOV and the uni-dimensional data assimilation system 1D-Var used is this study are all available on (https://www.nwpsaf.eu/site/software/rttov/download/).

Data availability. IASI data are available from EUMETSAT or AERIS: (https://www.aeris-data.fr/). Copernicus Atmosphere Monitoring Service data are available from: (https://atmosphere.copernicus.eu/catalogue#/) implemented by ECMWF as part of The Copernicus Programme. Model data are available upon request.

Competing interests. The authors declare that they have no conflict of interest.

References

Archer, D. and Brovkin, V.: The millennial atmospheric lifetime of anthropogenic CO2, Climatic Change, 90, 283–297, https://doi.org/10.1007/s10584-008-9413-1, http://link.springer.com/10.1007/s10584-008-9413-1, 2008.

Archibald, A. T., O'Connor, F., Abraham, N. L., Archer-Nicholls, S., Chipperfield, M., Dalvi, M., Folberth, G., Dennison, F., Dhomse, S., Griffiths, P. T., et al.: Description and evaluation of the UKCA stratosphere–troposphere chemistry scheme (StratTrop vn 1.0) implemented in UKESM1, Geoscientific Model Development, 13, 1223–1266, 2020.

Auligné, T., McNally, A., and Dee, D.: Adaptive bias correction for satellite data in a numerical weather prediction system, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 133, 631–642, 2007.

Basart, S., Benedictow, A., Bennouna, Y., Blechschmidt, A.-M., Chabrillat, S., Christophe, Y., Clark, H., Cuevas, E., Eskes, H., Hansen, K. M., et al.: Addendum to: Upgrade verification note for the CAMS near-real time global atmospheric composition service Evaluation of the e-suite experiment gu42, 2018.

Brousseau, P., Seity, Y., Ricard, D., and Léger, J.: Improvement of the forecast of convective activity from the AROME-France system, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 142, 2231–2243, https://doi.org/10.1002/qj.2822, https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qj.2822, 2016.

CAMMAS, J.-P., ATHIER, G., Boulanger, D., Chéroux, F., Cousin, J.-M., Girod, F., Karcher, F., Law, K., Nédélec, P., Peuch, V.-H., Smit, H., Stoll, M., Texier, D., Thouret, V., Volz-Thomas, A., and Zbinden, R.: Les programmes aéroportés Mozaic et Iagos (1994-2008), La Météorologie, 8, 18, https://doi.org/10.4267/2042/19172, http://hdl.handle.net/2042/19172, 2008.

Chahine, M., Barnet, C., Olsen, E., Chen, L., and Maddy, E.: On the determination of atmospheric minor gases by the method of vanishing partial derivatives with application to CO2, Geophysical research letters, 32, 2005.

Coopmann, O., Guidard, V., Fourrié, N., and Plu, M.: Assimilation of IASI ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2018.

Courtier, P. and Geleyn, J.-F.: A global numerical weather prediction model with variable resolution: Application to the shallow-water equations, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 114, 1321–1346, https://doi.org/10.1002/qj.49711448309, https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qj.49711448309, 1988.

Crevoisier, C., Nobileau, D., Armante, R., Crépeau, L., Machida, T., Sawa, Y., Matsueda, H., Schuck, T., Thonat, T., Pernin,

J., Scott, N. A., and Chédin, A.: The 2007–2011 evolution of tropical methane in the mid-troposphere as seen from space by MetOp-A/IASI, Atmospheric Chemistry and Physics, 13, 4279–4289, https://doi.org/10.5194/acp-13-4279-2013, https://www.atmos-chem-phys.net/13/4279/2013/, 2013.

Déqué, M., Dreveton, C., Braun, A., and Cariolle, D.: The ARPEGE/IFS atmosphere model: a contribution to the French community climate modelling, Climate Dynamics, 10, 249–266, https://doi.org/10.1007/BF00208992, https://doi.org/10.1007/BF00208992, 1994.

Desroziers, G., Berre, L., Chapnik, B., and Poli, P.: Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 131, 3385–3396, 2005.

Dufour, G., Eremenko, M., Griesfeller, A., Barret, B., LeFlochmoën, E., Clerbaux, C., Hadji-Lazaro, J., Coheur, P.-F., and Hurtmans, D.: Validation of three different scientific ozone products retrieved from IASI spectra using ozonesondes, Atmospheric Measurement Techniques, 5, 611–630, 2012.

Durry, G. and Megie, G.: Atmospheric CH_4 and H_2O monitoring with near-infrared InGaAs laser diodes by the SDLA, a balloonborne spectrometer for tropospheric and stratospheric in situ measurements, Applied Optics, 38, 7342, https://doi.org/10.1364/AO.38.007342, https://www.osapublishing.org/abstract.cfm?URI=ao-38-36-7342, 1999a.

Durry, G. and Megie, G.: Atmospheric CH 4 and H 2 O monitoring with near-infrared InGaAs laser diodes by the SDLA, a balloonborne spectrometer for tropospheric and stratospheric in situ measurements, Applied optics, 38, 7342–7354, 1999b.

Eby, M., Zickfeld, K., Montenegro, A., Archer, D., Meissner, K. J., Weaver, A. J., Eby, M., Zickfeld, K., Montenegro, A., Archer, D., Meissner, K. J., and Weaver, A. J.: Lifetime of Anthropogenic Climate Change: Millennial Time Scales of Potential CO ₂ and Surface Temperature Perturbations, Journal of Climate, 22, 2501–2511, https://doi.org/10.1175/2008JCLI2554.1, http://journals.ametsoc.org/doi/abs/10.1175/2008JCLI2554.1, 2009.

El Khair, Z. M., Joly, L., Cousin, J., Decarpenterie, T., Dumelié, N., Maamary, R., Chauvin, N., and Durry, G.: In situ measurements of methane in the troposphere and the stratosphere by the Ultra Light SpEctrometer Amulse, Applied Physics B, 123, 281, 2017.

Engelen, R. J., Stephens, G. L., and Denning, A. S.: The effect of CO2 variability on the retrieval of atmospheric temperatures, Geophysical research letters, 28, 3259–3262, 2001.

Filges, A., Gerbig, C., Chen, H., Franke, H., Klaus, C., and Jordan, A.: The IAGOS-core greenhouse gas package: a measurement system for continuous airborne observations of CO ₂ , CH ₄ , H ₂ O and CO, Tellus B: Chemical and Physical Meteorology, 67, 27 989, https://doi.org/10.3402/tellusb.v67.27989, https://www.tandfonline.com/doi/full/10.3402/tellusb.v67.27989, 2015.

Gambacorta, A., Barnet, C., Wolf, W., Goldberg, M., King, T., Nalli, N., Maddy, E., Xiong, X., and Divakarla, M.: The NOAA unique CrIS/ATMS processing system (NUCAPS): First light retrieval results, in: Proceedings of the ITWG meeting, ITWG, Toulouse, France, 2012.

Ghysels, M., Riviere, E. D., Khaykin, S., Stoeffler, C., Amarouche, N., Pommereau, J.-P., Held, G., and Durry, G.: Intercomparison of in situ water vapor balloon-borne measurements from Pico-SDLA H₂O and FLASH-B in the tropical UTLS, Atmospheric Measurement Techniques, 9, 1207–1219, https://doi.org/10.5194/amt-9-1207-2016, https://www.atmos-meas-tech.net/9/1207/2016/, 2016.

Guth, J., Josse, B., Marécal, V., Joly, M., and Hamer, P.: First implementation of secondary inorganic aerosols in the MOCAGE version R2.15.0 chemistry transport model, Geoscientific Model Development, 9, 137–160, https://doi.org/10.5194/gmd-9-137-2016, https://www.geosci-model-dev.net/9/137/2016/, 2016.

Han, W. and McNally, A.: The 4D-Var assimilation of ozone-sensitive infrared radiances measured by IASI, QJ Roy. Meteor. Soc., 136, 2025–2037, 2010.

Hilton, F., Armante, R., August, T., Barnet, C., Bouchard, A., Camy-Peyret, C., Capelle, V., Clarisse, L., Clerbaux, C., Coheur, P.-F., et al.: Hyperspectral Earth observation from IASI: Five years of accomplishments, Bulletin of the American Meteorological Society, 93, 347–370, 2012.

Houweling, S., Bergamaschi, P., Chevallier, F., Heimann, M., Kaminski, T., Krol, M., Michalak, A. M., and Patra, P. K.: Global inverse modeling of CH4 sources and sinks: an overview of methods, Atmospheric chemistry and physics, 17, 235–256, 2017.

IASI, L.: PPF v6: Validation Report, EUMETSAT, Tech. rep., EUM/TSS/REP/14/776443, v4C. 13 October, 2014.

Joly, L., Parvitte, B., Zeninari, V., and Durry, G.: Development of a compact CO2 sensor open to the atmosphere and based on near-infrared laser technology at 2.68 μm, Applied Physics B, 86, 743–748, https://doi.org/10.1007/s00340-006-2568-4, http://link.springer.com/10.1007/s00340-006-2568-4, 2007.

Joly, L., Maamary, R., Decarpenterie, T., Cousin, J., Dumelié, N., Chauvin, N., Legain, D., Tzanos, D., Durry, G., Joly, L., Maamary, R., Decarpenterie, T., Cousin, J., Dumelié, N., Chauvin, N., Legain, D., Tzanos, D., and Durry, G.: Atmospheric Measurements by Ultra-Light SpEctrometer (AMULSE) Dedicated to Vertical Profile in Situ Measurements of Carbon Dioxide (CO2) Under Weather Balloons: Instrumental Development and Field Application, Sensors, 16, 1609, https://doi.org/10.3390/s16101609, http://www.mdpi.com/1424-8220/16/10/1609, 2016.

K.H. Reid, D. S.: Diurnal variations of boundary layer carbon dioxide in a coastal city–observations and comparison with model, Atmospheric Environment, 31, 3101–3114, 1997.

Khair, Z. M. E., Joly, L., Cousin, J., Decarpenterie, T., Dumelié, N., Maamary, R., Chauvin, N., and Durry, G.: In situ measurements of methane in the troposphere and the stratosphere by the Ultra Light SpEctrometer Amulse, Applied Physics B, 123, 281, https://doi.org/10.1007/s00340-017-6850-4, http://link.springer.com/10.1007/s00340-017-6850-4, 2017.

Lelieveld, J., Klingmüller, K., Pozzer, A., Pöschl, U., Fnais, M., Daiber, A., and Münzel, T.: Cardiovascular disease burden from ambient air pollution in Europe reassessed using novel hazard ratio functions, European heart journal, 2019.

Liang, A., Gong, W., Han, G., and Xiang, C.: Comparison of satellite-observed XCO2 from GOSAT, OCO-2, and ground-based TCCON, Remote Sensing, 9, 1033, 2017.

Naik, V., Voulgarakis, A., Fiore, A. M., Horowitz, L. W., Lamarque, J.-F., Lin, M., Prather, M. J., Young, P., Bergmann, D., Cameron-Smith, P., et al.: Preindustrial to present-day changes in tropo-

spheric hydroxyl radical and methane lifetime from the Atmospheric Chemistry and Climate Model Intercomparison Project (ACCMIP), Atmospheric Chemistry and Physics, 13, 5277–5298, 2013.

Nalli, N. R., Barnet, C. D., Reale, A., Tobin, D., Gambacorta, A., Maddy, E. S., Joseph, E., Sun, B., Borg, L., Mollner, A. K., et al.: Validation of satellite sounder environmental data records: Application to the Cross-track Infrared Microwave Sounder Suite, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 118, 13–628, 2013.

Nalli, N. R., Gambacorta, A., Liu, Q., Barnet, C. D., Tan, C., Iturbide-Sanchez, F., Reale, T., Sun, B., Wilson, M., Borg, L., et al.: Validation of atmospheric profile retrievals from the SNPP NOAA-unique combined atmospheric processing system. Part 1: Temperature and moisture, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 56, 180–190, 2017a.

Nalli, N. R., Gambacorta, A., Liu, Q., Tan, C., Iturbide-Sanchez, F., Barnet, C. D., Joseph, E., Morris, V. R., Oyola, M., and Smith, J. W.: Validation of Atmospheric Profile Retrievals from the SNPP NOAA-Unique Combined Atmospheric Processing System. Part 2: Ozone, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 56, 598–607, 2017b.

Nédélec, P., Blot, R., Boulanger, D., Athier, G., Cousin, J.-M., Gautron, B., Petzold, A., Volz-Thomas, A., and Thouret, V.: Instrumentation on commercial aircraft for monitoring the atmospheric composition on a global scale: the IAGOS system, technical overview of ozone and carbon monoxide measurements, Tellus B: Chemical and Physical Meteorology, 67, 27 791, https://doi.org/10.3402/tellusb.v67.27791, https://www.tandfonline.com/doi/full/10.3402/tellusb.v67.27791, 2015.

Pavelin, E., English, S., and Eyre, J.: The assimilation of cloud-affected infrared satellite radiances for numerical weather prediction, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography, 134, 737–749, 2008.

Petzold, A., Thouret, V., Gerbig, C., Zahn, A., Brenninkmeijer, C. A. M., Gallagher, M., Hermann, M., Pontaud, M., Ziereis, H., Boulanger, D., Marshall, J., Nédélec, P., Smit, H. G. J., Friess, U., Flaud, J.-M., Wahner, A., Cammas, J.-P., Volz-Thomas, A., and TEAM, I.: Global-scale atmosphere monitoring by in-service aircraft – current achievements and future prospects of the European Research Infrastructure IAGOS, Tellus B: Chemical and Physical Meteorology, 67, 28 452, https://doi.org/10.3402/tellusb.v67.28452, https://www.tandfonline.com/doi/full/10.3402/tellusb.v67.28452, 2015.

Rodgers, C. D.: Inverse methods for atmospheric sounding: theory and practice, Sigapore: World Scientific Rothman LS, Gordon IE, Barbe A, et al, 2009.

Saunders, R., Hocking, J., Turner, E., Rayer, P., Rundle, D., Brunel, P., Vidot, J., Roquet, P., Matricardi, M., Geer, A., et al.: An update on the RTTOV fast radiative transfer model (currently at version 12), Geoscientific Model Development, 11, 2717–2737, 2018.

Schmidt, M., Lopez, M., Kwok, C. Y., Messager, C., Ramonet, M., Wastine, B., Vuillemin, C., Truong, F., Gal, B., Parmentier, E., Cloué, O., and Ciais, P.: High-precision quasi-continuous atmospheric greenhouse gas measurements at Trainou tower (Orléans forest, France), Atmospheric Measurement Techniques, 7, 2283–2296, 2014.

Seity, Y., Brousseau, P., Malardel, S., Hello, G., Bénard, P., Bouttier, F., Lac, C., and Masson, V.: The AROME-France Convective-Scale Operational Model, Monthly Weather Review, 139, 976–991, https://doi.org/10.1175/2010MWR3425.1, https://doi.org/10.1175/2010MWR3425.1, 2011.

Smith, N. and Barnet, C. D.: Uncertainty Characterization and Propagation in the Community Long-Term Infrared Microwave Combined Atmospheric Product System (CLIMCAPS), Remote Sensing, 11, 1227, 2019.

Stocker, T., Intergovernmental Panel on Climate Change., and Intergovernmental Panel on Climate Change. Working Group I.: Climate change 2013 : the physical science basis : Working Group I contribution to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, 2013.

Susskind, J., Barnet, C. D., and Blaisdell, J. M.: Retrieval of atmospheric and surface parameters from AIRS/AMSU/HSB data in the presence of clouds, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 41, 390–409, 2003.

Thompson, D. R., Chris Benner, D., Brown, L. R., Crisp, D., Malathy Devi, V., Jiang, Y., Natraj, V., Oyafuso, F., Sung, K., Wunch, D., Castaño, R., and Miller, C. E.: Atmospheric validation of high accuracy CO2 absorption coefficients for the OCO-2 mission, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 113, 2265–2276, https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.05.021, https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022407312002804, 2012.

Voulgarakis, A., Naik, V., Lamarque, J.-F., Shindell, D. T., Young, P. J., Prather, M. J., Wild, O., Field, R. D., Bergmann, D., Cameron-Smith, P., Cionni, I., Collins, W. J., Dalsøren, S. B., Doherty, R. M., Eyring, V., Faluvegi, G., Folberth, G. A., Horowitz, L. W., Josse, B., MacKenzie, I. A., Nagashima, T., Plummer, D. A., Righi, M., Rumbold, S. T., Stevenson, D. S., Strode, S. A., Sudo, K., Szopa, S., and Zeng, G.: Analysis of present day and future OH and methane lifetime in the ACCMIP simulations, Atmospheric Chemistry and Physics, 13, 2563–2587, https://doi.org/10.5194/acp-13-2563-2013, https://www.atmos-chem-phys.net/13/2563/2013/, 2013.

Wecht, K. J., Jacob, D. J., Frankenberg, C., Jiang, Z., and Blake, D. R.: Mapping of North American methane emissions with high spatial resolution by inversion of SCIAMACHY satellite data, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 119, 7741–7756, https://doi.org/10.1002/2014JD021551, http://doi.wiley.com/10.1002/2014JD021551, 2014.

6.4 Élaboration d'une climatologie évolutive de CO_2 pour améliorer l'utilisation des sondeurs infrarouges

6.4.1 Cadre et objectifs du stage

Le CO_2 est en constante augmentation et est en interaction avec la surface, la végétation et l'océan définissant ainsi le cycle du carbone. Il existe ainsi une grande variabilité spatio-temporelle des sources et des puits de CO_2 auxquels on peut ajouter les perturbations anthropiques. Les sources sont principalement des zones d'important rejet de CO_2 anthropique (feux de biomasses, chauffage domestique, industries, transport routier) tandis que les puits sont plutôt des zones de forte absorption d'origine naturelle (forêt, océan froid). Comme nous l'avons vu dans le Chapitre 1, le CO_2 est l'un des plus importants gaz à effet de serre. Sa concentration et sa distribution dans l'atmosphère ont toujours été importantes dans l'étude du cycle du carbone et de l'effet de serre. Nous avons montré précédemment que les mesures *in situ* et spécialement selon la verticale atmosphérique sont rares. Pour pallier ce manque d'information, l'observation satellitaire s'avère être un outil efficace pour suivre et surveiller l'évolution de la concentration de CO_2 atmosphérique sur l'ensemble du globe en temps réel.

Actuellement, l'observation du CO_2 atmosphérique repose principalement sur des instruments passifs à bord de satellites défilants dont le satellite japonnais GOSAT[8] lancé en 2009 mesurant les gaz à effet de serre dont le CO_2. Puis en 2014 se fut au tour du satellite américain de la NASA, OCO-2[9] avec pour objectif de relever la distribution géographique des sources de dioxyde de carbone et des puits de carbone naturels à une échelle régionale. Enfin, ces satellites ont été rejoint par le satellite chinois TanSat en 2016. Depuis la mise en orbite de ces satellites, plusieurs équipes de chercheurs ont travaillé à la restitution indépendante, à partir de ces observations satellitaires, du rapport de mélange moyen du CO_2 par colonne atmosphérique (XCO_2). Nous avons également vu qu'il est important d'évaluer la qualité de ces observations. Ainsi, plusieurs études de validation et d'inter comparaison ont été réalisées. Les travaux de [Liang et al., 2017] ont permis d'évaluer les restitutions satellitaires de XCO_2 obtenues à partir des instruments GOSAT et OCO-2 par comparaison avec les observations de colonne totale de CO_2 mesurées par le réseau international TCCON[10].

Actuellement, comme pour les autres composants chimiques, un profil de CO_2 de référence est utilisé dans le système global d'assimilation de données à Météo-France. Au vu de la variabilité du dioxyde de carbone, l'irréalisme d'un profil constant a un impact sur les simulations des observations satellitaires infrarouges dans des bandes spectrales sensibles au CO_2. Lors de cette thèse, j'ai proposé un stage de Master 1, effectué par Téténa Boinariziki et Quentin Lagarde, que j'ai co-encadré avec mes directeurs de thèse. L'objectif de cette étude a été l'élaboration d'une climatologie évolutive de dioxyde de carbone afin d'améliorer l'utilisation des sondeurs infrarouges. En effet, nous avons montré précédemment l'importance d'utiliser en entrée du MTR, des ébauches chimiques précises. Néanmoins, n'ayant accès qu'à très peu d'observations *in situ* telles que les mesures fournies par l'instrument AMULSE, la construction d'une climatologie évolutive se rapprochant d'un état réaliste de la concentration en CO_2 atmosphérique semble être un bon compromis. De plus, contrairement à l'ozone et au méthane, l'accès à des modélisations en temps réel du CO_2 atmosphérique est plus compliqué et n'est pas simulé dans le MCT MOCAGE.

[8] Greenhouse Gases Observing Satellite
[9] Orbiting Carbon Observatory 2
[10] Total Carbon Column Observing Network

Nous nous sommes intéressés aux simulations des observations issues du sondeur IASI. Pour réaliser une climatologie réaliste, nous avons utilisé les champs 3D de CO_2 issus des réanalyses MACC-III[11] (précurseur de CAMS) fournies par le CEPMMT sur une période allant de 1994 à 2014.

6.4.2 Climatologie évolutive de CO_2 à partir de réanalyses

6.4.2.1 Analyses des champs MACC-III

Afin d'effectuer une climatologie évolutive de CO_2 robuste, nous avons utilisé les champs 3D de dioxyde de carbone issues de réanalyses MACC-III. Ce projet avait pour objectif de développer un système pré-opérationnel de réanalyses et de prévisions de la composition chimique de l'atmosphère. Ce projet est la version antérieure du service actuel CAMS. Ces réanalyses ont été réalisées à l'aide d'une méthode d'inversion globale de la concentration de dioxyde de carbone dans le modèle de circulation générale LMDZ[12] [Hourdin et al., 2006], sur une période allant de 1994 à 2014. Ces champs sont répartis sur une grille régulière de 3,75° de longitude et 2,5° de latitude [Chevallier et al., 2010]. Les champs de CO_2 sont fournis sur 39 niveaux verticaux hybrides de la surface jusqu'au sommet de l'atmosphère, toutes les 3 heures à l'échelle globale. Cette réanalyse prend en compte différentes sources dont les données issues de EDGAR3.2 pour les émissions de dioxyde de carbone issues des carburants fossiles et une climatologie de différence de pression partielle de CO_2 pour les échanges de flux air/mer [Takahashi et al., 2009]. Les principaux processus de la biosphère continentale qui influencent les échanges de flux entre le CO_2 et l'atmosphère sont simulés par le modèle ORCHIDEE[13] [Krinner et al., 2005]. Une base de données des feux naturels de biomasses est également pris en compte GFEDv2[14] [Randerson et al., 2007].

Enfin, cette réanalyse utilise un grand nombre d'observations *in situ* de CO_2 en surface parmi 128 stations disséminées sur le globe. Les données proviennent de nombreux laboratoires parmis les archives du ESRL[15] de la NOAA, les archives atmosphériques du projet CarboEurope IP, les archives du WDCGG[16] et les archives de 3 stations du LSCE. Ces mesures s'effectuent par échantillonnage d'air par des stations fixes sur terre ou mobiles (navires de commerce) sur mer. Les inversions de CO_2 ont été évaluées et validées par des données aéroportées. Toutefois, il a été mis en évidence une sur-estimation du flux de biosphère-atmosphère et une sous-estimation des échanges de flux air-mer ([Takahashi et al., 2009] et [Krinner et al., 2005]). Dans cette étude les champs de dioxyde de carbone issus de ces réanalyses sont appelés **REACO$_2$**.

Nous avons représenté sur la Figure 6.13, les profils verticaux des moyennes globales annuelles de la concentration de CO_2 des données de REACO$_2$ en fonction de la pression. Nous avons également tracé le profil de CO_2 de référence (tireté noire) issu de la version 11 du MTR RTTOV utilisé en opérationnel dans le modèle global de PNT à Météo-France. On remarque une augmentation constante de la concentration en dioxyde de carbone en fonction des années et ce, sur l'ensemble de la colonne atmosphérique. Ces résultats sont cohérents avec ceux présentés dans le Chapitre 1. On note également que le profil de référence, nommé pour la suite de l'étude : **REFCO$_2$** à des valeurs proches de celle du profil de REACO$_2$ de 2007 en troposphère et de 2009 en stratosphère.

[11] Monitoring Atmospheric Composition Climate-III
[12] Laboratoire de Météorologie Dynamique Zoom
[13] Organazing Carbon and Hydrology in Dynamic Ecosystems
[14] Global Fire of Emission Database version 2
[15] Earth System Research Laboratory
[16] World Data Centre for Greenhouse Gases

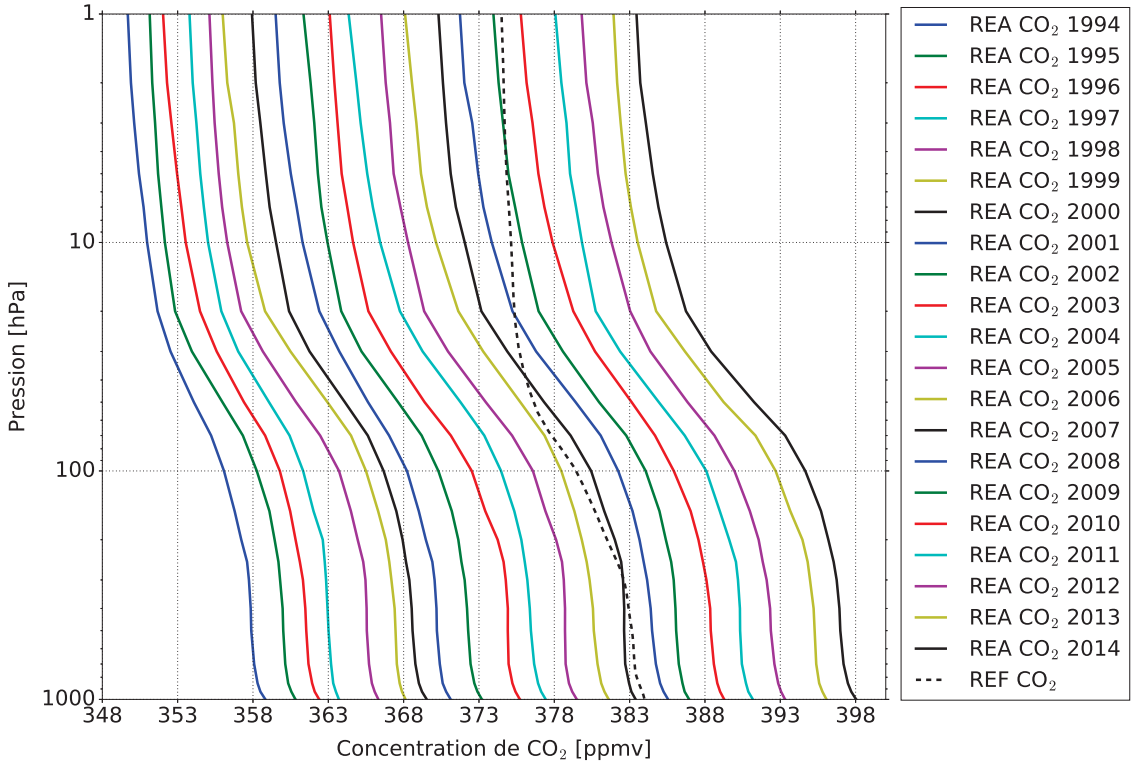


FIGURE 6.13: Profils verticaux des moyennes globales annuelles de la concentration de CO_2 issus de $REACO_2$ et le profil vertical issu de $REFCO_2$ en fonction de la pression.

Avant de réaliser une climatologie de CO_2, un pré-traitement a été réalisé sur les données issus de $REACO_2$. Ces dernières ont été moyennées mensuellement pour les 21 années et interpolées sur 21 niveaux de pression fixe de 1000 à 1 hPa. Cette vision globale mensuelle nous permet de conserver la variabilité spatiale et temporelle de $REACO_2$. Ainsi, nous avons représenté sur la Figure 6.14 des cartes des moyennes mensuelles de CO_2 pour les mois de février (a) et août (b) sur une période allant de 1994 à 2014 issues des données post-traitées de $REACO_2$ à 1000 hPa. Les zones de couleur violette correspondent aux reliefs pour lesquels il n'y a pas de valeur de dioxyde de carbone atmosphérique.

La Figure 6.14.a met en évidence l'hiver boréal (été austral) pour le mois de février. On remarque une relative homogénéité entre chaque hémisphère avec toutefois une plus importante concentration de CO_2 observée dans l'hémisphère nord. Cette différence d'environ 10 ppmv entre les deux hémisphères s'explique par l'utilisation du chauffage domestique et à l'industrialisation plus développée dans le Nord. Ces résultats sont en accord avec la distribution quasi-homogène du CO_2 discutés dans la Section 1.2.2.1. On observe également des zones dont la concentration en CO_2 est plus importante d'environ 5 ppmv vers le Benelux-Allemagne, la Chine et l'est des États-Unis.

Enfin, on relève une forte concentration de CO_2 en Afrique centrale, entre -10 ° et 10 ° qui s'étend vers l'ouest. Cette source de CO_2 d'environ 10 à 20 ppmv s'explique par la libération de dioxyde de carbone issue des feux de biomasse. Ces flux de dioxyde de carbone peuvent s'étendre verticalement jusqu'à 2000 m d'altitude et être transportés par les Alizés. L'Amérique du sud représente plutôt une zone de puits de CO_2 au niveau des grandes forêts tropicales où la végétation capte le dioxyde de carbone pour effectuer la photosynthèse.

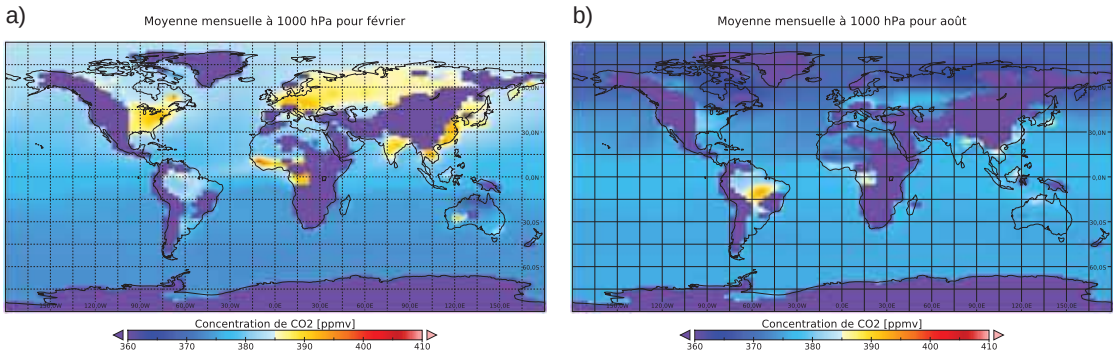


FIGURE 6.14: Cartes des moyennes mensuelles de CO_2 pour les mois de février (a) et août (b) sur une période allant de 1994 à 2014 issue de $REACO_2$ à 1000 hPa.

L'inversion de répartition du CO_2 atmosphérique entre les deux hémisphères est significative lorsque l'on passe en hiver austral au mois d'août, représenté sur la Figure 6.14.b. Cependant, la différence de concentration est moins marquée car le chauffage domestique est clairement moins répandu dans l'hémisphère sud. En effet, cette partie du globe possède une plus faible densité continentale et donc une population réduit. Les sources et les puits décrits précédemment sont toujours présents mais de manière inversée.

6.4.2.2 Construction de la climatologie évolutive de CO_2

Dans un premier temps, afin de construire une climatologie évolutive de CO_2 ($CLIMCO_2$), fidèle aux données issues de $REACO_2$, un travail de synthèse de l'information a été effectué. Les stagiaires ont ainsi moyenné les champs issus de $REACO_2$ par bandes de 20° de latitude pour les 21 niveaux de pression fixe. C'est ce qui est présenté sur la Figure 6.15 par des coupes latitudinales des moyennes de CO_2 par bande de 20° pour les mois de février 2014 (a) et août 2014 (c) en fonction de la pression et des coupes latitudinales des écarts-types de CO_2 par bande de 20° pour les mois de février 2014 (b) et août 2014 (d) en fonction de la pression. On retrouve la différence de concentration entre les deux hémisphères avec des concentrations de CO_2 plus importantes dans l'hémisphère nord en février et inversement en août.

On remarque également que la concentration dans l'hémisphère sud en août est moins importante que celle de l'hémisphère nord en février. La majorité de la concentration en dioxyde de carbone est contenue dans la troposphère entre 1000 et 100 hPa et on remarque une zone tampon qui est représentée par l'UTLS. On note également que le sommet du maximum de concentration dans la troposphère suit la variation latitudinale de la tropopause avec une altitude maximale au niveau de l'équateur.

Puis la concentration de CO_2 diminue au fur et à mesure que l'on monte dans la stratosphère. On observe que les écarts-types ont globalement de faibles valeurs sur l'ensemble des colonnes atmosphériques (1 ppmv) nous permettant d'être confiants sur la qualité de la synthèse d'information. Toutefois, on note des écarts-types dont les valeurs sont plus importantes en surface essentiellement dans l'hémisphère nord et aux Tropiques en février et uniquement dans l'hémisphère nord en août. Ces valeurs s'expliquent par le fait que l'incertitude en surface des sources et des puits est bien plus importante dans l'hémisphère nord. De plus, ces sources et ces puits ont des variabilités spatiales et temporelles fines qui ont été moyennées mensuellement et latitudinalement. Globalement, le traitement des données issues de $REACO_2$ nous permet de synthétiser les champs de CO_2 sans trop perdre d'information.

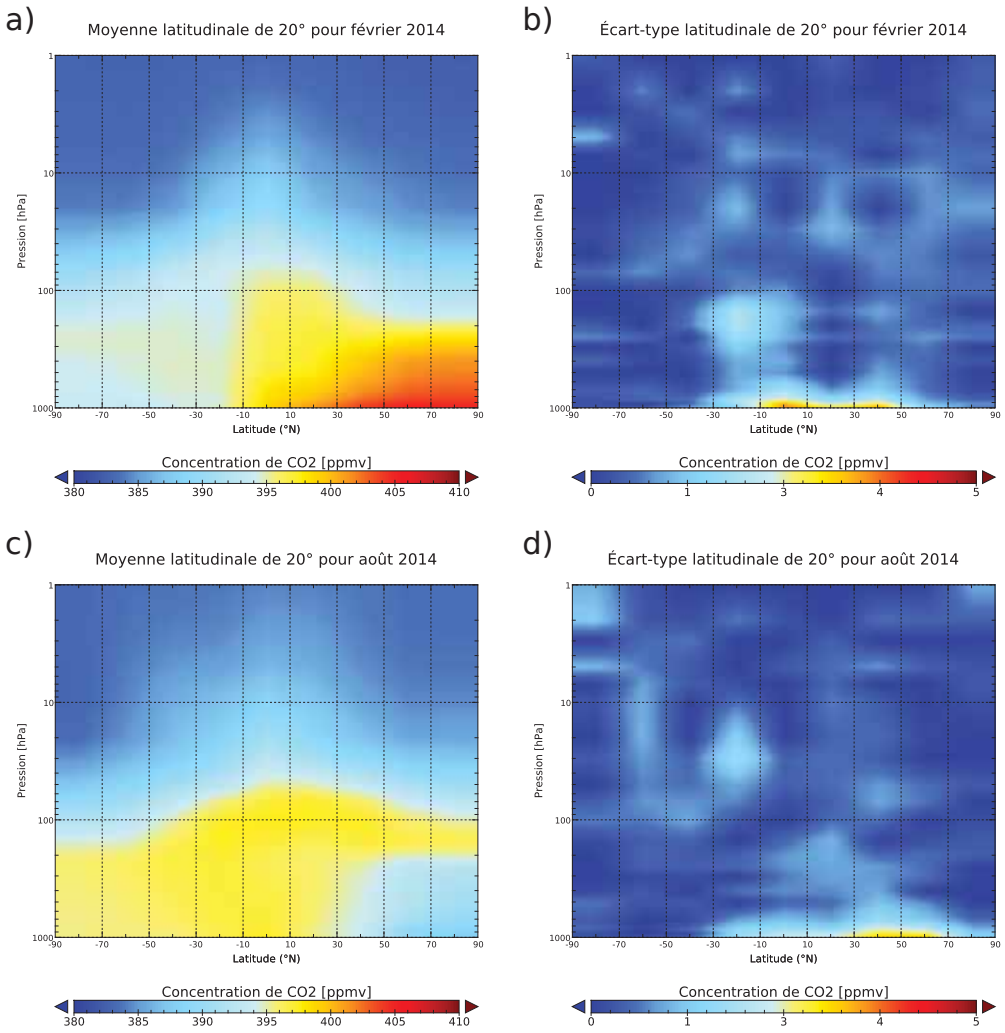


FIGURE 6.15: Coupe latitudinale des moyennes de CO_2 par bande de 20° pour les mois de février 2014 (a) et août 2014 (c) en fonction de la pression ; Coupe latitudinale des écarts-types de CO_2 par bande de 20° pour les mois de février 2014 (b) et août 2014 (d) en fonction de la pression.

Une fois les données synthétisées mensuellement et par bandes de latitude sur l'ensemble des années, nous devons en extraire la tendance annelle. En effet, l'objectif est de rendre cette climatologie évolutive et donc utilisable quelle que soit l'année considérée. Nous avons montré sur la Figure 6.13 une augmentation relativement régulière de la concentration de CO_2 passant en surface de 360 ppmv en 1994 à 400 ppmv en 2014. Cette tendance ne s'est pas arrêtée depuis 2014, comme nous avons pu le voir dans le Chapitre 1.

Il est donc important d'évaluer précisément la valeur de la contribution annuelle à prendre en compte pour l'élaboration de la climatologie. Nous avons ainsi calculé à l'aide de régressions linéaires, des coefficients directeurs et leurs ordonnées à l'origine pour chaque bande de 20° de latitude, soit 9 bandes en fonction des 21 niveaux de pression fixe. Les coefficients directeurs nous apportent une information sur l'augmentation annuelle de CO_2.

L'étude des coefficients directeurs calculés nous montre que le taux d'augmentation de dioxyde de carbone est plus important en surface. Dans la troposphère l'augmentation de CO_2 est en moyenne de 1,92 ppmv/an et de 1,75 ppmv/an dans la stratosphère. On observe que le zone de discontinuité de chaque coté de la tropopause varie en fonction de la latitude d'où une variabilité importante de l'augmentation de CO_2 au niveau de l'UTLS.

Ce travail a permis de mettre en évidence 9 zones de coefficients directeurs différents représentées sur la Figure 6.16.a et séparées en trois bandes de latitude (nord, tropique et sud) et trois niveaux atmosphériques (troposphère, UTLS et stratosphère). Afin d'évaluer la cohérence de la séparation des coefficients directeurs en 9 zones distinctes, nous avons testé cette configuration à l'aide d'un test d'égalité des moyennes des échantillons basé sur la loi de Student. Ce test statistique a été réalisé avec un seuil de confiance de 99,9 %. Les résultats de ce test statistique nous permettent de valider la cohérence des différents coefficients directeurs séparés par niveaux et par région. La contribution annuelle a été calculée telle que :

$$CA_{n,l} = a_{n,l}.x + b_{n,l} \tag{6.1}$$

où CA représente la contribution annuelle en fonction du niveau (n) et de la bande de latitude (l), a est le coefficient directeur, b est l'ordonnée à l'origine et x est l'année choisie.

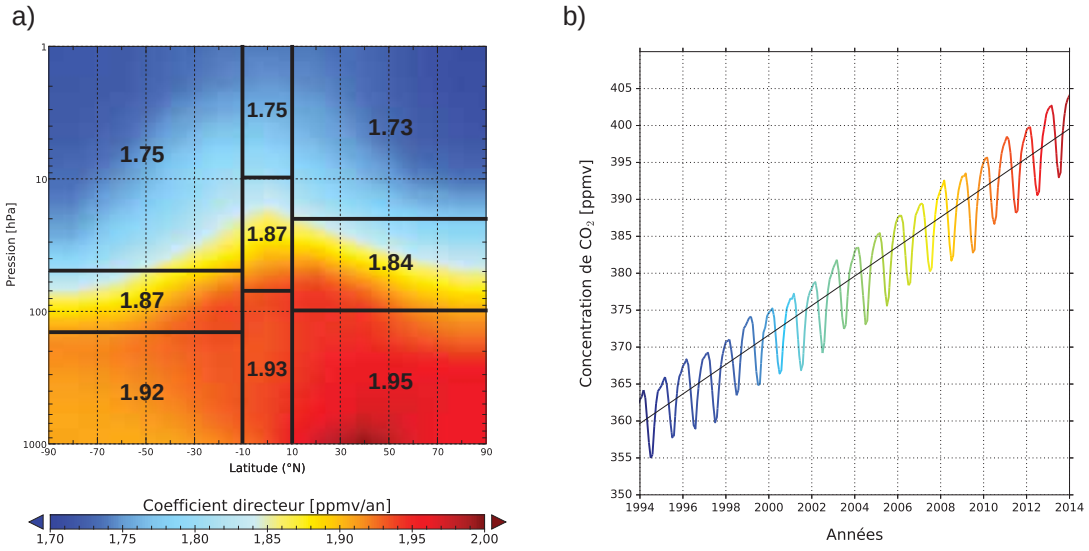


FIGURE 6.16: Coupe latitudinale des coefficients directeurs d'augmentation de la concentration de CO_2 annuelle en fonction de la pression (a) ; Courbe de la tendance annuelle de la concentration de CO_2 entre 1994 à 2014 dans une zone comprise entre 30°N et 50°N à 1000 hPa (b).

La Figure 6.16.b représente un exemple de la tendance annuelle pour la bande de latitude comprise entre 30°N et 50°N à 1000 hPa. On remarque la variabilité mensuelle de la concentration de CO_2 et l'augmentation constante en fonction des années. La droite en noir met en évidence une augmentation d'environ 40 ppmv entre 1994 et 2014.

La variabilité mensuelle doit également être prise en compte pour la construction d'une climatologie évolutive. Ainsi, nous avons calculé la moyenne des valeurs mensuelles sans la contribution annuelle telle que :

$$CM_{m,n,l} = \frac{1}{21} \sum_{1994}^{2014} [R_{m,n,l} - (a_{n,l}.x_i + b_{n,l})] \tag{6.2}$$

où CM représente la contribution mensuelle en fonction du mois (m), du niveau (n) et de la bande de latitude (l), R est l'information de CO_2 issue de $REACO_2$ post-traité et x_i est l'année correspondant à la donnée de $REACO_2$.

Après avoir calculé les contributions annelle et mensuelle, nous avons construit notre climatologie, variable dans le temps et l'espace telle que :

$$\mathrm{CLIMCO_2}_{\mathrm{m,n,l}} = \mathrm{CA}_{\mathrm{n,l}} + \mathrm{CM}_{\mathrm{m,n,l}} \tag{6.3}$$

Ainsi, pour n'importe quelles coordonnées, nous pouvons extraire un profil vertical climatologique de CO_2. Les deux profils ont été extraits de manière aléatoire. Nous avons évalué la qualité de cette climatologie par rapport aux données issues de $REACO_2$ et au profil $REFCO_2$. Pour ce faire, nous avons représenté sur la Figure 6.17 les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ en tireté noir, $REACO_2$ en rouge, $CLIMCO_2$ en bleu en fonction de la pression (a) et l'erreur relative entre les profils de CO_2 ($REACO_2/REFCO_2$) en tireté noir et ($REACO_2/CLIMCO_2$) en rouge en fonction de la pression (b) pour le 14 février 2014 au point de longitude 35.72°E et de latitude -42.48°N puis pour le 15 août 2014 au point de longitude 151.16°E et de latitude 39.46°N sur la Figure 6.18.

On remarque sur la Figure 6.17.a que les profils issus de $REACO_2$ et $CLIMCO_2$ sont très proches contrairement au profil de $REFCO_2$ qui a des valeurs plus faibles de 10 à 15 ppmv par rapport aux deux premiers profils. La similitude entre les profils $REACO_2$ et $CLIMCO_2$ est encourageante. En effet, ces résultats impliquent que la climatologie perd peu d'information par rapport aux réanalyses. Les courbes de la Figure 6.17.b confirment ce constat avec un profil d'erreur relative entre $REACO_2/CLIMCO_2$ à moins de 0,5 % tandis que le profil d'erreur relative entre $REACO_2/REFCO_2$ peut atteindre 4 %. On retrouve des résultats similaires sur la Figure 6.18.

Une partie importante de cette étude est la vérification du caractère évolutif de notre climatologie de CO_2 dans le temps. En effet, l'intérêt d'élaborer une climatologie évolutive est sa capacité à pouvoir être utilisée quelle que soit l'année. Ainsi, pour évaluer la qualité de notre climatologie à représenter des valeurs cohérentes dans le temps, nous avons extrait des profils climatologiques au-delà de la période des données de réanalyse que nous avons comparés à des profils *in situ* mesurés par l'instrument AirCore. Cet instrument permet de mesurer des profils verticaux de rapport de mélange de gaz trace. Les premières versions de AirCore ont été développées à la NOAA/ESRL [Tans, 2009] et [Karion et al., 2010]. Depuis, d'autres version de l'instrument ont été développées au LMD [Membrive et al., 2017].

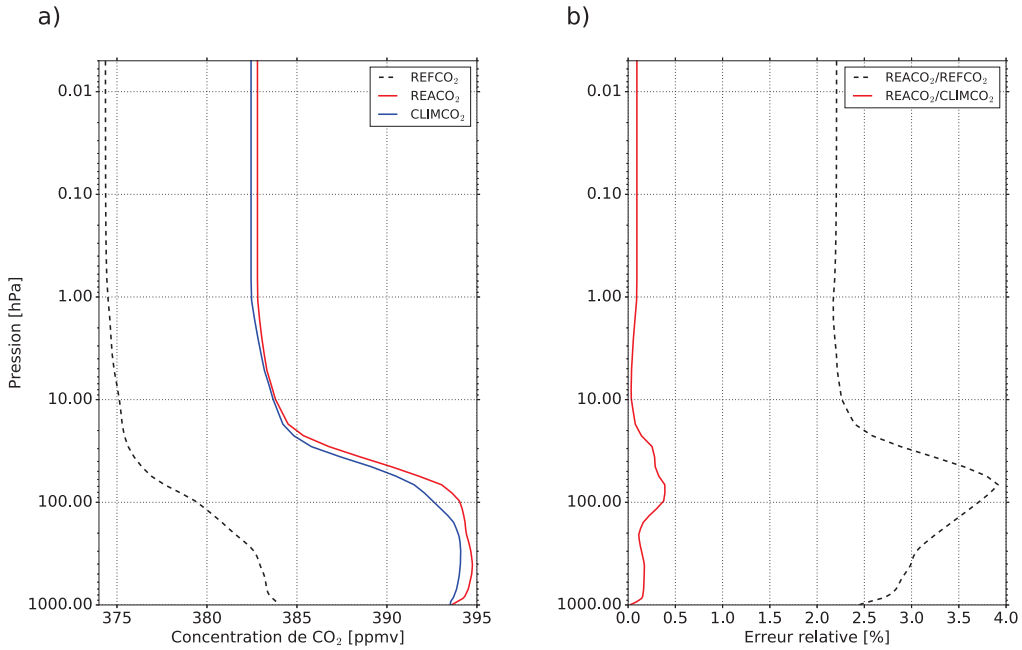


FIGURE 6.17: Profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ en tireté noir, $REACO_2$ en rouge, $CLIMCO_2$ en bleu en fonction de la pression (a) et erreur relative entre les profils de CO_2 ($REACO_2/REFCO_2$) en tireté noir et ($REACO_2/CLIMCO_2$) en rouge en fonction de la pression (b) pour le 14 février 2014 au point de longitude 35.72°E et de latitude -42.48°N.

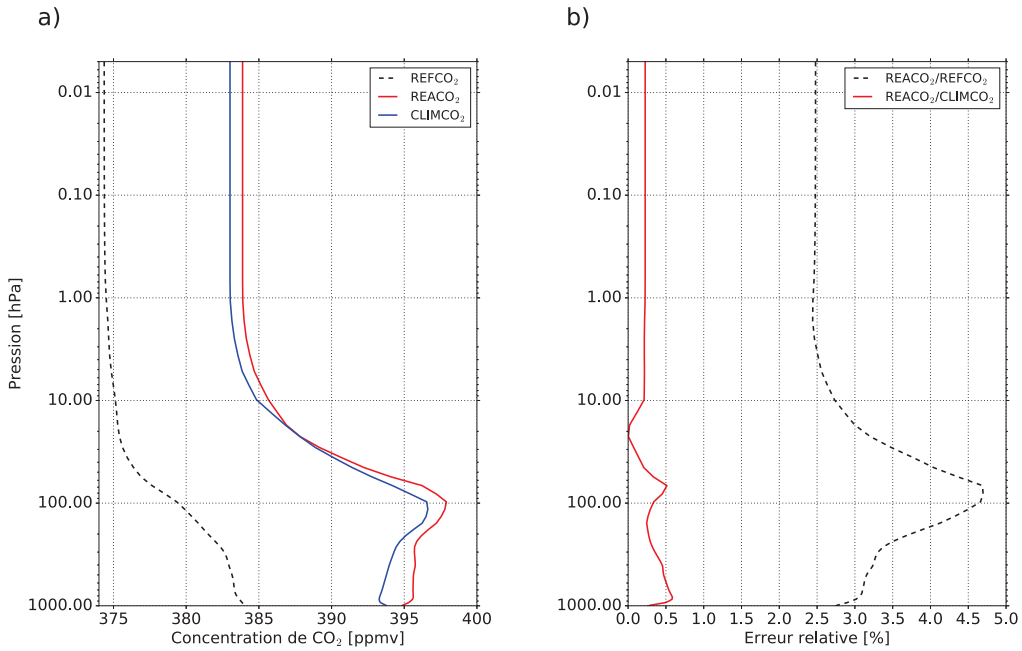


FIGURE 6.18: Profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ en tireté noir, $REACO_2$ en rouge, $CLIMCO_2$ en bleu en fonction de la pression (a) et erreur relative entre les profils de CO_2 ($REACO_2/REFCO_2$) en tireté noir et ($REACO_2/CLIMCO_2$) en rouge en fonction de la pression (b) pour le 15 août 2014 au point de longitude 151.16°E et de latitude 39.46°N.

De la même manière que pour l'instrument AMULSE, le AirCore est installé sous ballon météorologique pour effectuer des profils verticaux. Toutefois, la méthode de mesure est très différente entre les deux instruments. En effet, le AirCore est constitué d'une bobine de tube en acier extrêmement fin, fermée d'un côté et ouverte de l'autre. Lors de l'ascension du radiosondage, sous l'effet de la différence de pression, le tube se vide, et échantillonne l'air durant la phase descendante. La diffusion au sein du tube étant faible et l'échantillon étant rapidement récupéré grâce à un suivi GPS constant du décollage à l'atterrissage, la structure verticale de l'échantillon est conservée. Les teneurs en CO_2, CH_4 et CO sont ensuite déterminées par à un analyseur dans le domaine infrarouge au sol. Ces étapes de mesures par l'instrument AirCore sont schématisées sur la Figure 6.19.

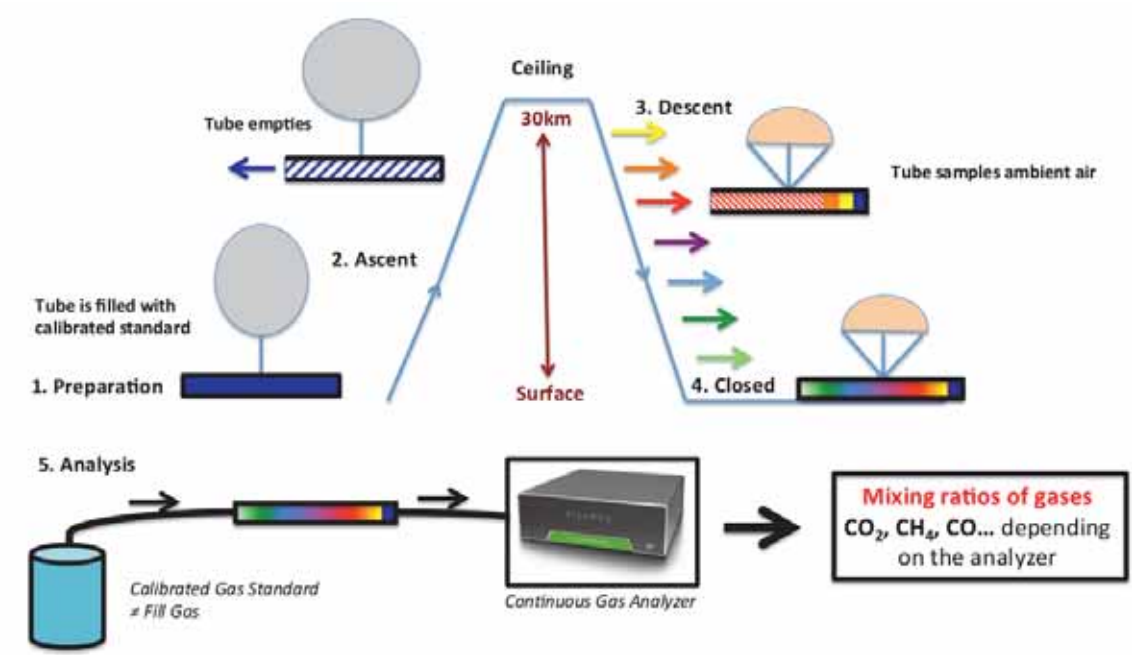


FIGURE 6.19: Schéma représentant les différentes étapes de mesures par l'instrument AirCore lors d'un radiosondage et l'analyse de l'échantillon par un analyseur. D'après [Membrive, 2016]

Nous avons représenté sur la Figure 6.20 le profil de CO_2 de référence issu de $REFCO_2$ en tireté noir, ainsi que les profils climatologiques issus de $CLIMCO_2$ en rouge, et les profils mesurés par des AirCores en bleu, le 20-06-2015 à Sodankyla en Finlande (a), le 12-02-2016 à Boulder au États-Unis (b), le 24-02-2017 en France (c) et le 06-06-2018 en France également (d). Les profils climatologiques ont été extraits aux mêmes coordonnées que les points de lâchers des radiosondages de AirCore. On remarque que globalement les profils climatologiques sont proches des profils *in situ* mesurés par les AirCore. Les oscillations verticales mesurées ne sont pas représentées par la climatologie mais l'allure sur l'ensemble du profil vertical est fidèle. Ces profils représentés sur 4 années différentes permettent également de mettre en évidence l'augmentation constante de la concentration en dioxyde de carbone atmosphérique.

La comparaison de ces profils climatologiques avec des données *in situ* de grande précision nous permet d'avoir une bonne confiance en la qualité de notre climatologie évolutive. En effet, malgré la forte variabilité locale qu'il peut exister dans la concentration en CO_2 atmosphérique, les différents profils verticaux extraits de la climatologie évolutive ont des valeurs dont les différences n'excèdent pas les 5 ppmv et ce, sur 4 années après les données de réanalyse utilisées pour réaliser cette climatologie.

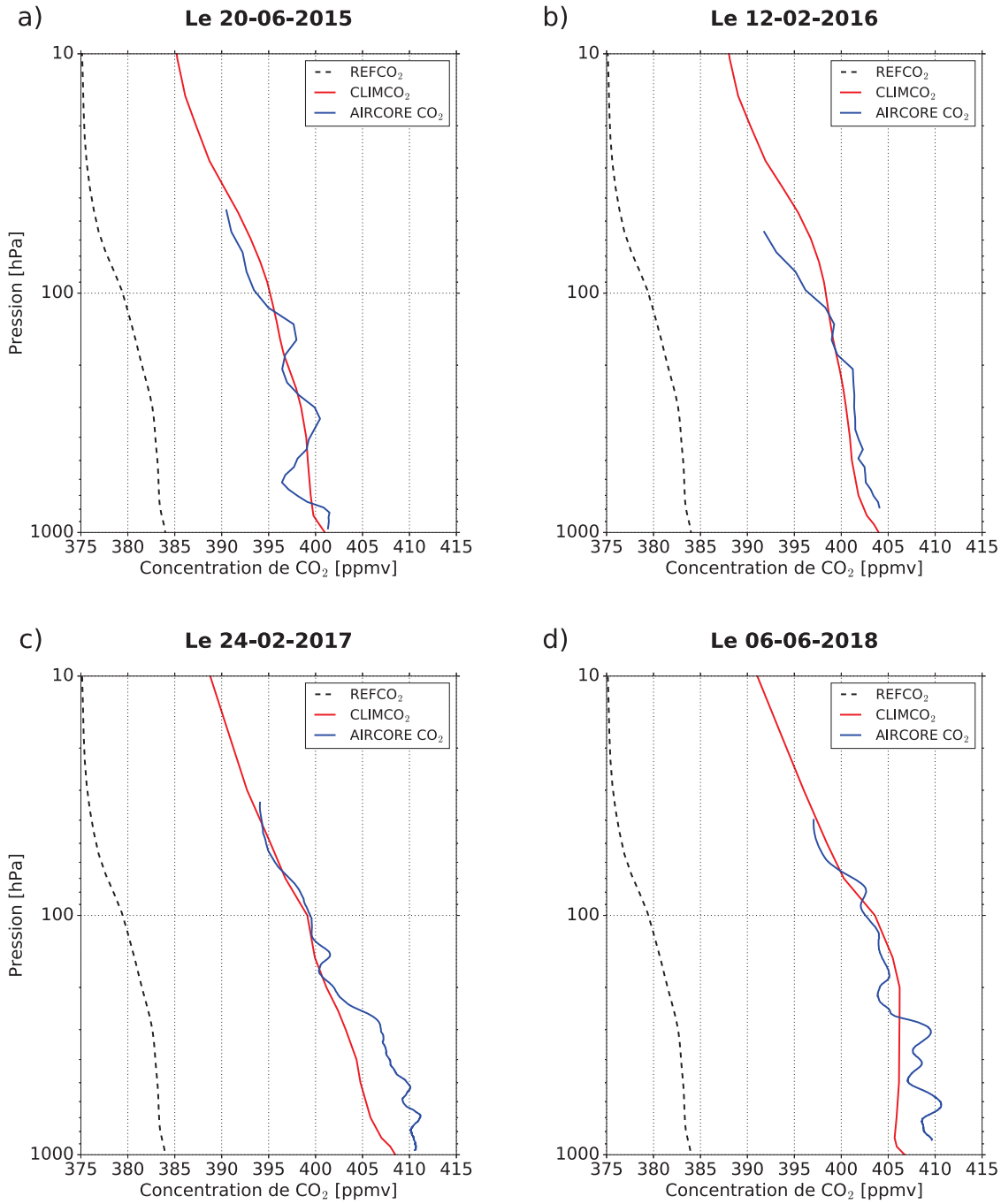


FIGURE 6.20: Comparaison du profil de CO_2 issu de $REFCO_2$ avec les profils de CO_2 issus de $CLIMCO_2$ et mesurés par des AirCores le 20-06-2015 (a), 12-02-2016 (b), 24-02-2017 (c) et 06-06-2018 (d).

6.4.3 Sensibilité des observations IASI aux ébauches en CO_2

Comme pour l'étude précédente utilisant les données mesurées dans le cadre de la campagne APOGEE, nous avons réalisé des expériences de simulations à partir du MTR RTTOV afin d'évaluer l'impact de l'utilisation de cette climatologie évolutive de CO_2 sur les simulations des observations infrarouges. Dans cette partie, nous avons réalisé les expériences pour les observations satellitaires infrarouges issues de l'instrument IASI. Ces expériences ont été réalisées sur deux cas d'étude :

- le 14 février 2014 avec 139 pixels IASI clair sur mer compris entre -70°N et 70°N (Figure 6.21.a),
- le 15 août 2014 avec 119 pixels IASI clair sur mer compris entre -70°N et 70°N (Figure 6.21.b).

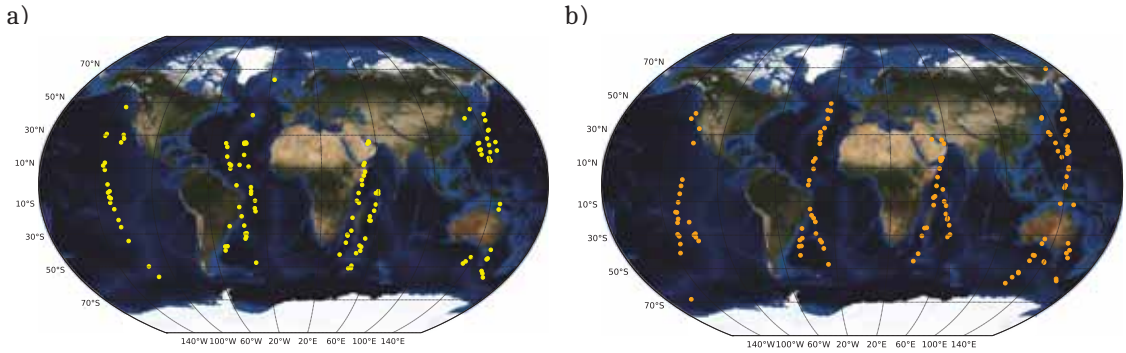


FIGURE 6.21: Carte des 139 pixels IASI du 14 février 2014 (a) et des 119 pixels IASI du 15 août 2014 (b) utilisés pour les expériences de simulation.

Le MTR RTTOV a été utilisé pour simuler les observations IASI. Les ébauches thermodynamiques (profils T, q, paramètres de surface P_{surf}, T_{surf}, q_{surf}, T_{skin}, u et v) ont été extraites du modèle global ARPEGE aux mêmes coordonnées et horaires que les pixels considérés. Les trois différentes sources de CO_2 ont été utilisées en entrée de RTTOV ($REFCO_2$, $REACO_2$ et $CLIMCO_2$). L'ensemble des profils thermodynamiques et chimiques ont été interpolés sur les 54 niveaux du MTR.

Les résultats des trois expériences pour les deux cas d'étude sont représentés sur la Figure 6.22 par les moyennes des différences de T_b entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 (a) et les 119 pixels du 15 août 2014 (c) et les écarts-types des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 (b) et les 119 pixels du 15 août 2014 (d).

Les canaux IASI sensibles au CO_2 sont compris sur une bande spectrale allant de 650 à 770 cm^1. Même si la répartition de leurs niveaux de sensibilité atmosphérique n'est pas forcément homogène, on peut toutefois distinguer trois zones de sensibilité atmosphérique distinctes : les canaux sensibles dans la stratosphère entre 650 et 688 cm^1, dans l'UTLS entre 688 et 720 cm^1 et dans la troposphère entre 720 et 758 cm^1. Les trois expériences de simulation se distinguent par la différence du profil de CO_2 utilisé en entrée de RTTOV soit : $REFCO_2$ en noir, $REACO_2$ en rouge et $CLIMCO_2$ en bleu.

Premièrement, on remarque que les différentes courbes semblent fournir des résultats à l'allure similaire entre les deux cas d'étude excepté pour les écarts-types du 15 août 2014 qui sont plus faibles comparés au 14 février 2014 pour les canaux de CO_2 sensibles dans la basse UTLS et la troposphère.

La tendance générale sur les courbes des moyennes et des écarts-types montre un intervalle de valeurs comprises entre -1 et +1 K pour les moyennes de ΔT_b et inférieur à 1 K pour les écarts-types de ΔT_b, excepté pour le canal 92 qui montre des pics très importants. Ce canal est sensible à la très haute stratosphère induisant un grand nombre d'erreurs pouvant expliquer la difficulté à bien le simuler. On remarque également que les courbes des moyennes et des écarts-types des expériences de simulations utilisant le CO_2 de $REACO_2$ et $CLIMCO_2$ sont relativement similaires. Une nouvelle fois, il s'agit d'un résultat positif puisque cela démontre que notre climatologie $CLIMCO_2$ suffit pour simuler les observations infrarouges de la même manière que si l'on utilisait les informations de CO_2 issues des réanalyses.

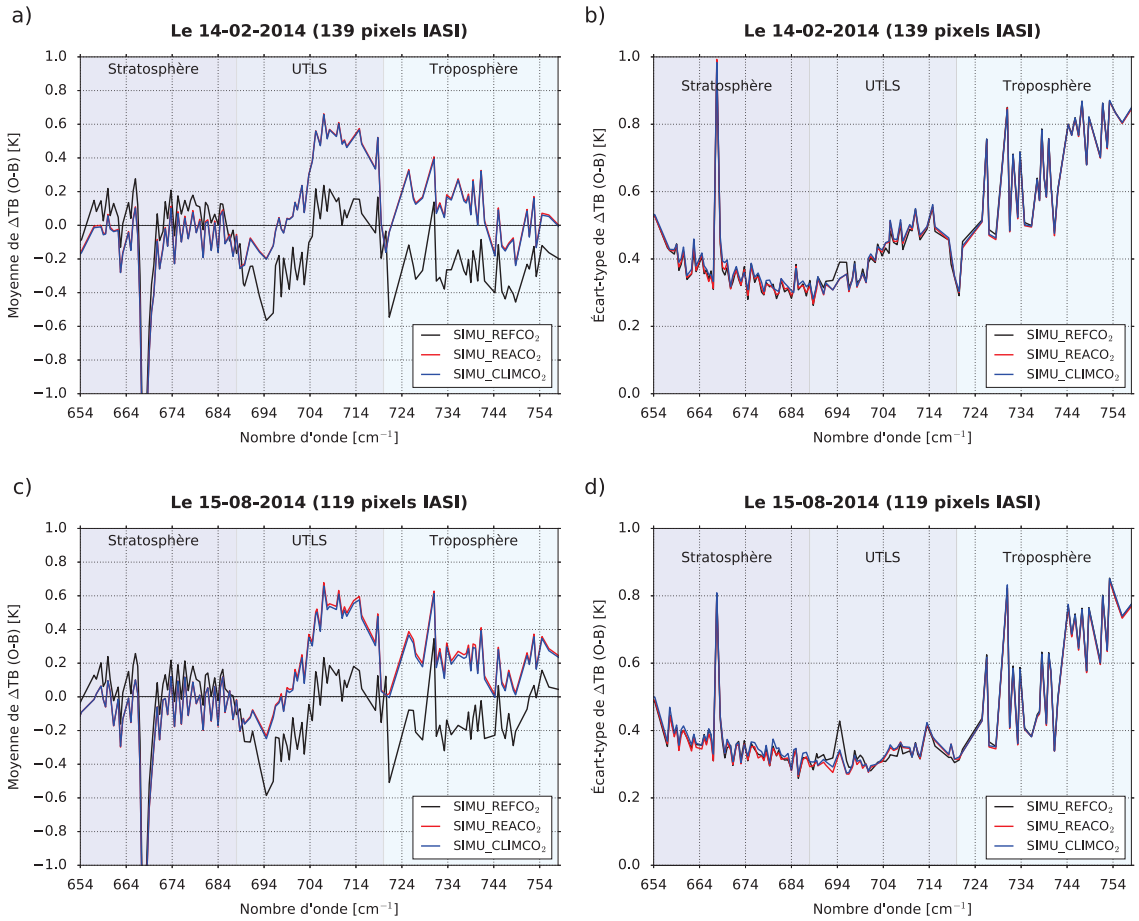


FIGURE 6.22: Moyennes des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 (a) et les 119 pixels du 15 août 2014 (c) ; Écarts-types des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 (b) et les 119 pixels du 15 août 2014 (d). Les expériences de simulation ont utilisé les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ en noir, $REACO_2$ en rouge et $CLIMCO_2$ en bleu.

Enfin, nous pouvons comparer les valeurs de ΔT_b entre les expériences de simulation $REFCO_2$ et $CLIMCO_2$. On remarque que globalement, l'utilisation des profils de CO_2 climatologiques permet de réduire les biais dans la stratosphère par rapport à l'utilisation du profil de référence. Ce résultat semble se confirmer dans la partie basse stratosphère mais pas dans la partie haute troposphère. Enfin, on relève des alternances de biais plus ou moins importantes en utilisant les profils climatologiques dans la troposphère. Ceci peut s'expliquer par la grande difficulté à représenter l'importante variabilité du CO_2 au niveau de l'UTLS et dans la troposphère. De plus, les profils thermodynamiques d'ARPEGE sont issus d'analyses ayant assimilé les sondeurs infrarouges avec $REFCO_2$. Comme tout le spectre est sensible à la température, les analyses ont des structures de températures cohérentes avec $REFCO_2$.

Il faudrait compléter ces résultats avec des cycles d'assimilation ARPEGE utilisant $CLIMCO_2$. On note peu de différences entre les valeurs des écarts-types quelle que soit la provenance des profils de CO_2 et globalement des écarts-types plus faibles sur l'ensemble des canaux sensibles au dioxyde de carbone pour les expériences du 15-08-2014. De manière générale, l'utilisation de la climatologie pour simuler les observations IASI, nous permet de réduire les biais par rapport aux observations réelles particulièrement dans la stratosphère.

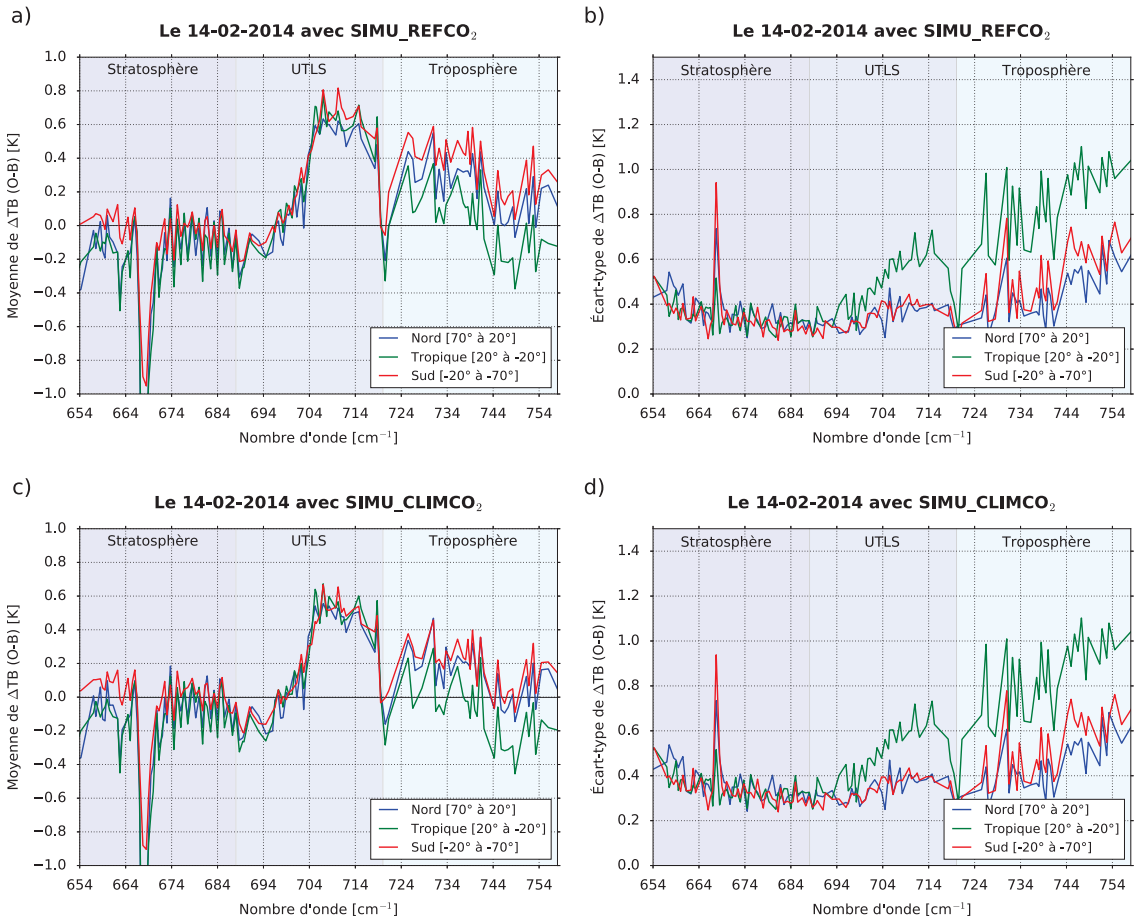


FIGURE 6.23: Moyennes des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 utilisant les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ (a) et $CLIMCO_2$ (c) ; écarts-types des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 le 14 février 2014 utilisant les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ (b) et $CLIMCO_2$ (d). Les expériences de simulation ont utilisé les 32 pixels situés dans l'hémisphère nord en bleu, les 55 pixels dans les Tropiques en vert et les 52 pixels dans l'hémisphère sud en rouge.

Finalement, pour évaluer la variabilité spatiale de notre climatologie, nous avons effectué les mêmes expériences sur 3 zones géographiques distinctes : Nord [70°N à 20°N], Tropique [20°N à -20°N] et Sud [-20°N à -70°N]. Sur la Figure 6.23 nous présentons les moyennes des différences de T_b entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 utilisant les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ (a) et $CLIMCO_2$ (c) et les écarts-types des différences T_b entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 le 14 février 2014 utilisant les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ (b) et $CLIMCO_2$ (d). Les expériences de simulation ont utilisé les 32 pixels situés dans l'hémisphère nord (en bleu), les 55 pixels dans les Tropiques (en vert) et les 52 pixels dans l'hémisphère sud (en rouge).

On remarque que les valeurs des biais avec $CLIMCO_2$ sont plus faibles qu'avec $REFCO_2$ pour les canaux sensibles dans la basse stratosphère sur l'ensemble des zones géographiques. Notons également, que les valeurs des biais sont plus faibles d'environ 0,2 K avec $CLIMCO_2$ dans l'UTLS et la troposphère excepté pour les valeurs de l'expérience dans les Tropiques. De la même façon que précédemment, on observe peu d'influence des différents profils de CO_2 sur les écarts-types. Globalement et quelle que soit la zone géographique, l'utilisation des profils climatologiques pour simuler les observations IASI nous permet de réduire les biais sur une grande partie des canaux sensibles au CO_2. Même si ces biais systématiques peuvent être gérés lors de l'assimilation par la correction de biais variationnelle Var-BC, il est primordial de corriger les biais en amont de la correction de biais variationnelle afin de se concentrer à l'essentiel dans le processus d'assimilation de données.

6.4.4 Conclusion et discussion

Nous avons montré que le système d'assimilation de données pour le modèle global de PNT ARPEGE utilise 76 % d'observations satellitaires infrarouges en opérationnel. Ces dernières sont potentiellement sensibles à la composition chimique de l'atmosphère et notamment au dioxyde de carbone. La sensibilité des différents canaux à ce composé est cruciale puisque ces dernier sont utilisés pour restituer des profils de température pour les modèles de PNT. De plus, pour extraire un maximum d'information de ces observations, il est important de les simuler à l'aide de MTR. Pour simuler précisément les observations infrarouges, le MTR utilise une connaissance *a priori* de l'état de l'atmosphère du point de vue thermodynamique et chimique. De la précision de ces informations dépend la qualité des simulations. Actuellement, les profils chimiques utilisés en opérationnel à Météo-France proviennent de profils de référence disponibles dans RTTOV et invariants dans le temps et l'espace. L'objectif de notre étude a donc été d'élaborer une climatologie évolutive de CO_2 à partir de réanalyses MACC-III afin de mieux simuler les observations satellitaires infrarouges issues de l'instruments IASI.

Dans un premier temps, nous avons synthétisé l'ensemble des informations disponibles dans ces réanalyses allant de 1994 à 2014. Ces dernières ont été moyennées mensuellement et spatialement par bande de 20° de latitude. La climatologie ainsi réalisée est utilisable pour tout point du globe et sur n'importe quelle période, même postérieure à la réanalyse. L'évaluation de la climatologie montre qu'elle est très proche de la réanalyse contrairement au profil de référence. Ceci indique une synthèse de l'information cohérente et plus réaliste. Pour évaluer le caractère évolutif de la climatologie, cette dernière a été comparée à des profils *in situ* issus de l'instrument AirCore sur différents points du globe et sur 4 années postérieures aux données de réanalyses. Les résultats montrent de très bons accords entre les profils extraits de la climatologie et les profils *in situ*. Ceci démontre la capacité de la climatologie à pouvoir être utilisée quelle que soit l'année considérée.

Enfin, nous avons simulé les observations IASI en utilisant les différentes ébauches de CO_2. On observe globalement une diminution du biais des canaux sensibles au dioxyde de carbone en utilisant les profils issus de la climatologie. Ces améliorations sont plus significatives dans la stratosphère et dans l'UTLS. Nous avons montré également, que la climatologie permet de mieux simuler les observations IASI dans différentes zones du globe excepté dans le basse troposphère de la zone tropicale. En conclusion, notre climatologie est très encourageante pour l'amélioration de l'assimilation d'observations satellitaires infrarouges. Par la suite, cette climatologie pourra être utilisée dans le système d'assimilation 4D-Var à Météo-France pour des simulations sur l'ensemble des surfaces (terre et mer) et pour différents instruments infrarouges. Toutefois, ce travail complexe demandera des développements techniques importants.

Ce stage m'a également permis d'effectuer ma première expérience d'encadrement. En effet, mon rôle a été de mettre en place ce sujet de recherche, de préparer les données scientifiques et l'arrivée administrative des stagiaires. Cette expérience a été l'occasion de mettre en pratique l'ensemble des connaissances acquises tant sur le plan théorique que technique mais surtout de les transmettre de manière pédagogique aux stagiaires. J'ai apprécié l'intérêt et la curiosité que les élèves ont manifestés tout au long de mon encadrement. Ils ont pleinement réalisé ce qui était attendu pour ce travail de recherche en laboratoire dans le court temps imparti (deux mois). Le sérieux du travail ainsi que la qualité du rapport écrit et de la soutenance orale ont valu à ce binôme la meilleure note de leur promotion 16,6/20. Ce stage s'est d'ailleurs poursuivi pendant deux mois pour l'un des élèves pendant l'été.

Chapitre 7

Préparation à l'assimilation des canaux IASI sensibles à l'ozone

« Innover, ce n'est pas avoir une nouvelle idée mais arrêter d'avoir une vieille idée. »

Edwin Herbert Land

Sommaire

7.1 Introduction et objectifs de ce chapitre 190
7.2 Résumé de l'article 191
7.2.1 Cadre expérimental 191
7.2.2 Méthodes 192
7.2.2.1 Élaboration de la matrice B 192
7.2.2.2 Élaboration de la matrice R 193
7.2.3 Résultats 194
7.2.3.1 Impact de l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste 194
7.2.3.2 Impact de l'ajout de 15 canaux IASI sensibles à l'ozone 195
7.2.4 Conclusion et discussion 197
7.3 L'article : Assimilation of IASI ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models 197
7.4 Application de la méthode à la campagne APOGEE 220
7.4.1 Objectif et méthodologie 220
7.4.2 Résultats 224
7.4.2.1 Synthèse des expériences EXP1 et EXP2 avec les observations CrIS 224
7.4.2.2 Synthèse des expériences EXP3 et EXP4 avec les observations IASI 224
7.4.3 Conclusion et discussion 225

7.1 Introduction et objectifs de ce chapitre

Le modèle global de PNT à Météo-France assimilait 123 canaux de IASI au début de cette étude en 2016, représentant environ 58 % de toutes les observations assimilées (Chapitre 4). Pourtant ces observations ne représentent que 1,5 % de l'ensemble des 8461 canaux disponibles sur le spectre complet de IASI (Chapitre 3). Pourquoi utiliser si peu d'information ? Comme nous l'avons expliqué précédemment, l'assimilation d'observations satellitaires peut être complexe par la grande quantité de données qu'elle génère mais également par les erreurs. L'assimilation de ces informations nécessite au préalable un important travail de traitement de ces observations tel que la compression d'information pour limiter le coût de calcul informatique et l'estimation des erreurs afin d'extraire précisément l'information à apporter au système. De plus, pour assimiler de manière optimale ces données, les observations doivent être confrontées à ce que le modèle météorologique connait déjà en simulant ces observations à l'aide d'un MTR comme expliqué dans le Chapitre 2.

Comme nous venons de le voir dans le Chapitre 6, la qualité de la simulation réside en partie dans la précision de l'ébauche thermodynamique et chimique qui serait fournis en entrée du MTR. Cependant, nous utilisons actuellement en opérationnel des profils chimiques invariants dans le temps et l'espace se traduisant par l'apparition de biais importants entre les observations et les simulations, particulièrement pour les canaux sensibles à l'ozone. Or ces canaux pourraient être intéressants à assimiler car ils possèdent eux aussi de l'information en température et humidité pouvant participer à l'amélioration de la qualité de nos analyses. De plus, le spectre IASI possède une large bande d'absorption à l'ozone et 15 de ces canaux IASI sensibles à l'ozone sont disponibles dans la sélection monitorée en opérationnel à Météo-France (Figure 7.1) ; d'où l'objectif de ce travail, se focalisant sur l'assimilation d'observations satellitaires infrarouges supplémentaires sensibles à l'ozone conjointement au couplage des modèles de PNT et de Chimie Transport. Dans un premier temps, nous avons réalisé une étude préparant le renforcement de ce couplage en assimilant ces 15 canaux IASI sensibles à l'ozone dans un cadre simplifié d'assimilation dit uni-dimensionnel (1D-Var[1]) et en utilisant des ébauches réalistes d'ozone issus du MCT MOCAGE. Ce travail a fait l'objet d'un article publié dans le *Journal of Geophysical Research : Atmospheres* en octobre 2018.

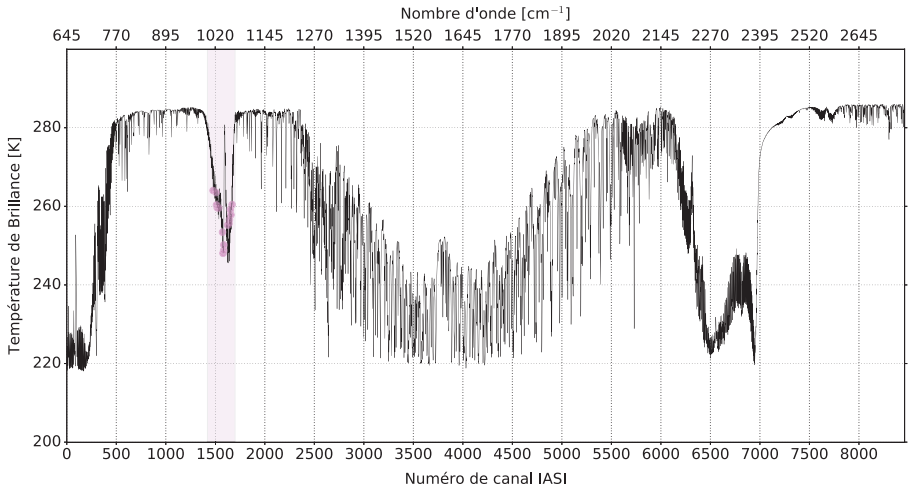


FIGURE 7.1: Représentation de la bande d'absorption de l'ozone sur un exemple du spectre IASI en Température de Brillance [K] en fonction du numéro de canal IASI et du nombre d'onde. Les 15 canaux sensibles à l'ozone sont représentés par les points violets (1479, 1509, 1513, 1521, 1536, 1574, 1579, 1585, 1587, 1626, 1639, 1643, 1652, 1658, 1671).

[1] Assimilation variationnelle uni-dimensionnelle

7.2 Résumé de l'article

7.2.1 Cadre expérimental

La principale difficulté lors d'études sur l'ozone réside dans la faible quantité de mesures *in situ* sur l'ensemble du globe en comparaison aux radiosondages de température et d'humidité. En effet, les stations de mesures chimiques au sol sont peu nombreuses et les radiosondages de profils verticaux d'ozone sont surtout réalisés dans l'hémisphère nord limitant ainsi leur utilisation comme données de vérification. Malgré cela, ces données sont nécessaires et un ensemble de profils verticaux d'ozone mesurés par radiosondage issus de plusieurs bases de données a été utilisé dans cette étude sur une période allant d'avril 2014 à mars 2015 [WOUDC (World Ozone and Ultraviolet Data Center) `http://www.woudc.org`, SHADOZ (Southern Hemisphere Additional Ozonesondes) `croc.gsfc.nasa.gov/shadoz/Archive.html` et NOAA (National Oceanic and Atmospheric) `ftp://ftp.cmdl.noaa.gov/ozwv/ozone/`]. Après un contrôle de qualité des données, 1688 radiosondages lâchers par 49 stations et mesurant la température, l'humidité et l'ozone ont été obtenus.

Afin de travailler avec des données en cohérence spatiale et temporelle, les pixels IASI ont été collocalisés avec ces radiosondages utilisant comme critère une distance de tolérance maximale de 150 km et une différence temporelle de 60 minutes. Seuls les pixels sur mer et dits clairs (Couverture nuageuse de l'AVHRR < 15 %) ont été retenus autour du radiosondage, limitant fortement le nombre de cas d'étude. Un dernier pré-traitement de qualité sur les innovations (Observations IASI - Simulations IASI) a permis de retenir un échantillon de 161 cas d'étude répartis de manière relativement homogène sur l'ensemble du globe. En plus de l'information issue des 123 canaux IASI utilisés en opérationnel, nous avons utilisé dans cette étude l'information contenue dans les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone dont on représente la moyenne des jacobiens en température, humidité et ozone calculés pour les 161 profils (Figure 7.2). On remarque en effet que ces canaux ont des sensibilités à la température dans la basse troposphère et la stratosphère et à l'humidité dans la basse troposphère.

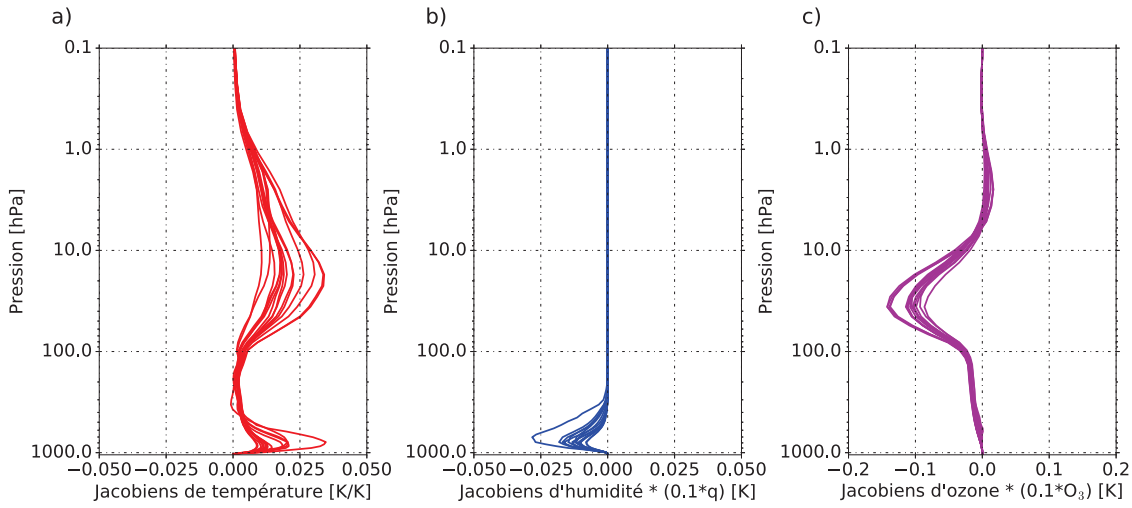


FIGURE 7.2: Moyenne des jacobiens de température (a) et des jacobiens normalisés d'humidité (b) et d'ozone (c) des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone pour les 161 profils.

Après avoir traité les données de vérification et d'observation, il a fallu extraire les échauches des principaux paramètres thermodynamiques. Ces dernières sont issues des prévisions toutes les 3 h du modèle global ARPEGE. Ces profils disponibles sur 70 niveaux verticaux ont été extraits aux mêmes coordonnées et heures que les radiosondages.

Enfin, afin d'évaluer l'impact de l'utilisation d'une ébauche réaliste d'ozone, nous avons utilisé deux sources d'ozone différentes ; la première est le profil d'ozone de référence issu du modèle de MTR RTTOV utilisé en opérationnel nommé **O3REF** et la deuxième provient du MCT MOCAGE sur 60 niveaux verticaux forcé par les analyses ARPEGE nommé **O3MOC**. De la même manière, les profils d'ozone de MOCAGE ont été extraits aux mêmes coordonnées et heures que les radiosondages. Finalement, pour utiliser les outils du MTR RTTOV et du logiciel d'assimilation 1D-Var, les profils thermodynamiques et chimiques ont été interpolés sur 54 niveaux.

7.2.2 Méthodes

Pour réaliser nos expériences d'assimilation nous avons besoin d'observations et d'ébauches comme décrit précédemment mais également de leurs erreurs associées. Ces erreurs sont décrites dans les matrices de covariance d'erreur d'ébauche **B** et d'observation **R**. Obtenir les erreurs d'ébauche en ozone et les erreurs d'observations des canaux IASI sensibles à l'ozone n'est pas chose aisée et a nécessité un travail très important de calcul avant de pouvoir réaliser nos expériences 1D-Var.

7.2.2.1 Élaboration de la matrice B

Pour se rapprocher de ce qui est fait en opérationnel, nous avons souhaité réaliser nos expériences d'assimilation en minimisant sur la température, l'humidité, la température de surface, l'humidité de surface et la température de peau. Dans ces expériences, l'un des enjeux est d'ajouter l'ozone à la variable de contrôle. Lors du processus d'assimilation, la minimisation sur ces paramètres nécessite la prise en compte de leurs erreurs représentées dans la matrice **B**. Le logiciel 1D-Var, fournit un exemple de matrice **B** contenant les erreurs de (T, q, T_{surf}, q_{surf} et T_{skin}) calculées au MetOffice.

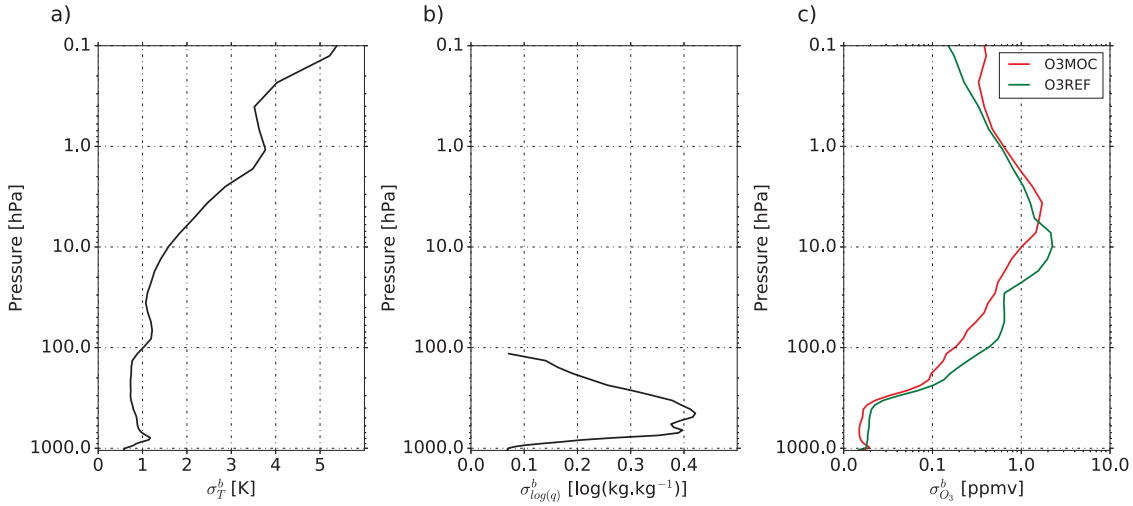


FIGURE 7.3: Représentations de écarts-types d'erreur d'ébauche en température σ_T^b (a), en humidité $\sigma_{log(q)}^b$ (b) et en ozone $\sigma_{O_3}^b$ (c) pour O3REF en vert et O3MOC en rouge.

Notre cas d'étude spécifique requiert l'élaboration d'une matrice **B** représentant les erreurs d'ébauche associées à notre échantillon de profils de manière cohérente. Pour la température et l'humidité, les erreurs d'ébauche ont été extraites du modèle global ARPEGE aux mêmes coordonnées et heures que les profils d'ébauche. Pour les paramètres de surface, nous avons utilisé les erreurs d'ébauche fournies dans la matrice du 1D-Var « $\sigma_{T_{surf}}^b$=1.65 K, $\sigma_{q_{surf}}^b$=1.30 log(kg.kg^{-1}) et $\sigma_{T_{skin}}^b$=4.10 K ». Les covariances d'erreurs d'ébauche des paramètres T et q sont très complexes à extraire d'ARPEGE, nous avons alors utilisé celles fournies par la matrice du 1D-Var.

Cependant les erreurs d'ébauche en ozone ont dû être calculées, dans notre cas en utilisant les mesures *in situ* issues des radiosondages. Ainsi sur l'ensemble de notre échantillon, nous avons calculé la moyenne et les écarts-types de différences entre l'ozone *in-situ* et l'ozone issu de O3MOC et O3REF.

Les statistiques de ces différences nous ont permis d'estimer la matrice de covariance d'erreur d'ébauche en ozone pour ces deux sources d'informations. Comme l'échantillon de données est faible, les covariances se trouvent être bruitées. Pour régulariser ces dernières, nous avons appliqué une fonction de structure agissant comme « un masque » pour nos covariances leur permettant d'être plus gaussiennes et surtout d'obtenir une matrice définie positive et pouvant être inversible pour le logiciel 1D-Var. Les écarts-types d'erreur d'ébauche en température, humidité et ozone sont représentés sur la Figure 7.3.

7.2.2.2 Élaboration de la matrice R

Une fois les erreurs d'ébauche décrites, il faut également estimer les erreurs d'observation des canaux IASI utilisés lors du processus d'assimilation. Une première étape a consisté à calculer les écarts-types des innovations (Observations - Simulations) des 123 canaux opérationnels et des 15 canaux sensibles à l'ozone en utilisant le MTR RTTOV avec en entrée les profils d'ébauche thermodynamique et les ébauches d'ozone issue de O3MOC ou O3REF. Ces écarts-types d'innovation représentent une première estimation des erreurs d'observation des canaux IASI et sont représentés par les courbes rouges sur la Figure 7.4 en utilisant l'ozone de O3MOC (a) et O3REF (b). On remarque qu'en utilisant l'ozone de référence O3REF, les écarts-types des innovations pour les canaux sensibles à l'ozone sont très importants, jusqu'à 4 K de plus qu'en utilisant l'ozone réaliste issu de O3MOC. Ceci nous démontre de nouveau l'importance d'utiliser une ébauche chimique la plus réaliste en entrée des MTR. Nous avons alors diagnostiqué nos erreurs d'observation des canaux IASI à l'aide de la méthode de Desroziers expliquée dans le Chapitre 4.

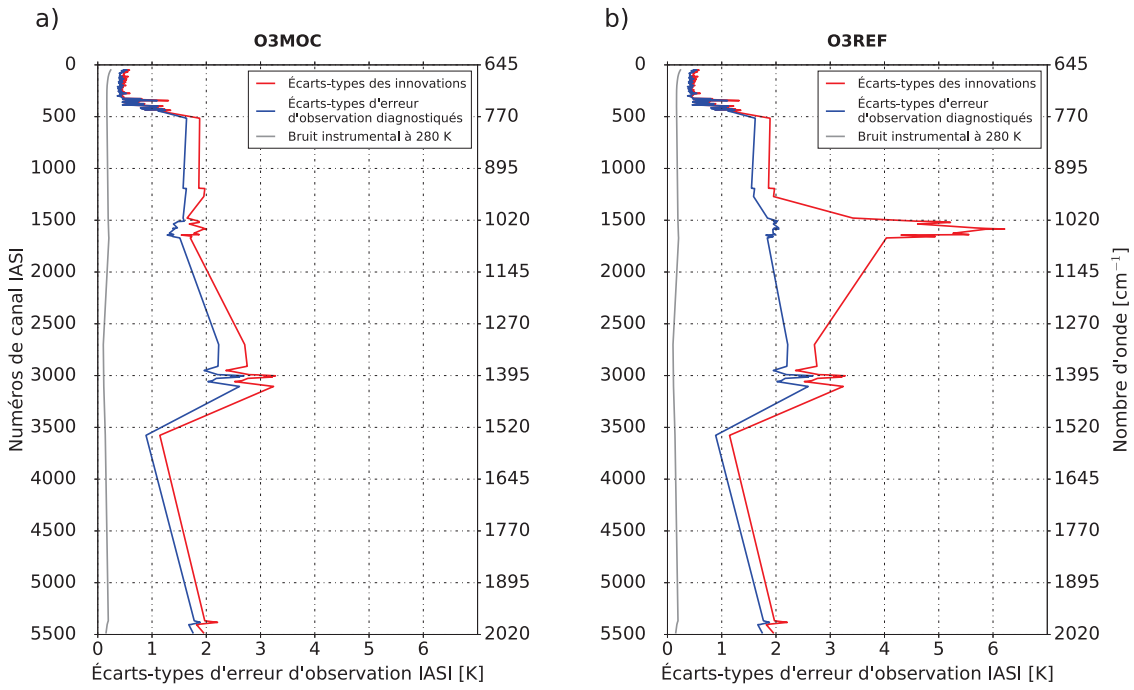


FIGURE 7.4: Représentation des écarts-types des innovations en rouge, des écarts-types d'erreur d'observation diagnostiqués en bleu et du bruit instrumental pour les 123 canaux opérationnels et les 15 canaux sensibles à l'ozone de IASI pour les expériences utilisant l'ébauche d'ozone issue de O3MOC (a) et O3REF (b).

Pour cela, nous avons utilisé une méthode itérative à l'aide du logiciel 1D-Var avec comme point de départ une matrice **R** diagonale utilisant les variances estimées à partir des écarts-types des innovations. Nous avons réalisé plusieurs expériences 1D-Var successives calculant pour chacune une nouvelle matrice **R** diagnostiquée et ce, jusqu'à la convergence des erreurs qui a été atteinte au bout de 10 itérations. Les erreurs d'observation diagnostiquées sont représentées par les courbes bleues sur la Figure 7.4 pour O3MOC (a) et O3REF (b). Les meilleurs résultats ont été obtenus avec les expériences ayant l'ozone dans la variable de contrôle. On remarque que les erreurs d'observations diagnostiquées sont plus faibles que les écarts-types des innovations et on note que les erreurs d'observations diagnostiquées pour les canaux sensibles à l'ozone ont des valeurs plus proches que précédemment.

Cette méthode nous a permis de diagnostiquer les erreurs d'observation et d'obtenir une matrice **R** complète prenant en compte les corrélations inter-canaux pour les 123 opérationnels et les 15 sensibles à l'ozone. Pour la suite de l'étude, l'objectif a été double puisque ces expériences nous ont permis d'évaluer l'impact d'utiliser une source d'ozone plus réaliste sur une configuration d'assimilation des canaux utilisés en opérationnel et également d'évaluer l'impact d'assimiler des canaux IASI supplémentaires sensibles à l'ozone sur les analyses en température, humidité et ozone du 1D-Var pour des expériences d'assimilation utilisant l'ébauche d'ozone issue de O3MOC ou O3REF.

7.2.3 Résultats

7.2.3.1 Impact de l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste

Dans un premier temps, nous avons évalué l'impact de l'utilisation des profils d'ébauche d'ozone plus réalistes issus de O3MOC à la place du profil de référence O3REF. Pour cela nous avons réalisé des expériences d'assimilation 1D-Var avec une configuration type opérationnelle assimilant 123 canaux IASI en changeant uniquement les profils d'ozone, nommées respectivement O3MOC+123 et O3REF+123. Afin de comparer nos résultats, nous avons calculé la réduction d'erreur d'analyse par rapport à l'ébauche en comparaison aux radiosondages, pour la température et l'humidité sur les 161 cas d'étude.

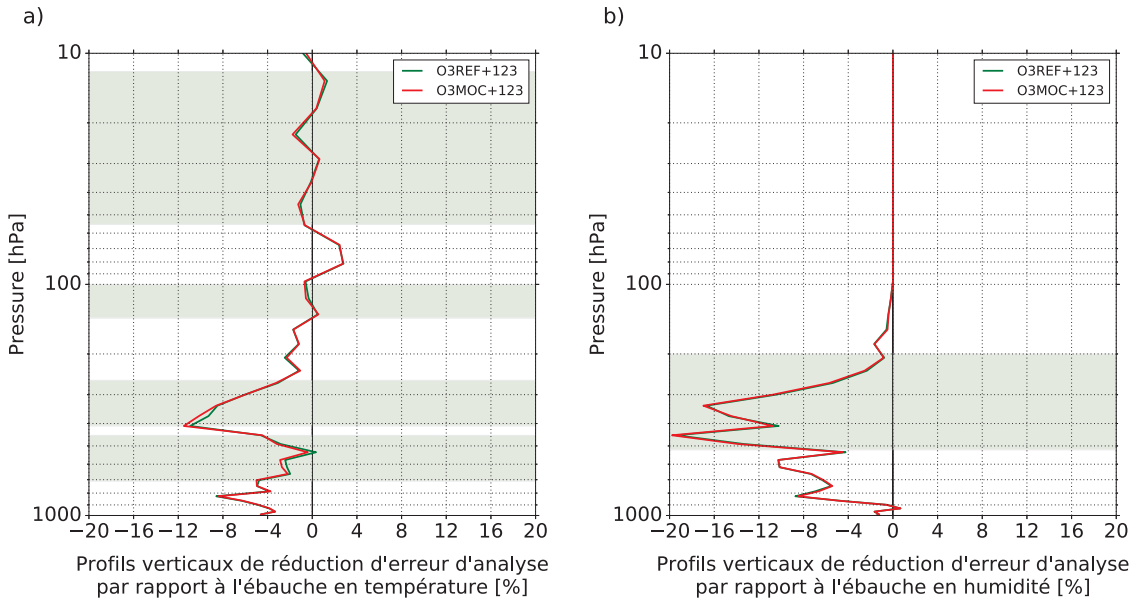


FIGURE 7.5: Profils verticaux de réduction d'erreur d'analyse par rapport à l'ébauche en comparaison aux radiosondages en pourcentage [%] en utilisant comme ébauche en ozone O3REF (courbe verte) et O3MOC (courbe rouge) pour la température (a) et l'humidité (b) dans un cadre d'assimilation opérationnelle (123 canaux IASI). O3MOC+123 meilleure que O3REF+123 (bandes vertes).

La Figure 7.5 représente ces profils verticaux de réduction d'erreur d'analyse en pourcentage en utilisant les ébauches d'ozone issues de O3MOC (courbe rouge) et O3REF (courbe verte) pour la température (a) et l'humidité (b). Une réduction d'erreur négative indique que l'analyse se rapproche d'avantage des données de vérification que l'ébauche. Dans un premier temps, on peut noter que l'assimilation des 123 canaux opérationnels de IASI nous permet d'améliorer significativement l'analyse en température et humidité sur l'ensemble de la verticale avec toutefois une légère dégradation de l'analyse en température entre 100 et 70 hPa. Ensuite, nous pouvons observer que l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste issue de O3MOC a un impact positif sur les analyses en température et en humidité.

Les améliorations des analyses dues à l'utilisation de l'ébauche d'ozone issue de O3MOC en comparaison à O3REF sont mis en évidence par les niveaux verdis sur la Figure 7.5. On constate des améliorations de l'analyse sur une grande partie de l'atmosphère en température et plutôt dans la haute troposphère pour l'humidité. La synthèse chiffrée de ces expériences résulte de la somme de réductions d'erreur relative sur l'ensemble des niveaux verticaux sur la température et l'humidité pour les deux expériences. Ces résultats sont disponibles dans le Tableau 7.1. On note une amélioration de l'analyse en température de 0,11 point de pourcentage et en humidité de 0.08 point de pourcentage pour l'expérience O3MOC+123 par rapport à O3REF+123. Ces premiers résultats nous confirment l'impact positif de l'utilisation d'une ébauche d'ozone plus réaliste dans un système d'assimilation de données dans un cadre opérationnel.

7.2.3.2 Impact de l'ajout de 15 canaux IASI sensibles à l'ozone

Après avoir évalué l'impact de l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste dans l'expérience d'assimilation opérationnelle O3MOC+123, nous avons réalisé une expérience similaire en ajoutant en plus des 123 canaux IASI opérationnels, 15 canaux sensibles à l'ozone issus de la sélection de [Collard, 2007]. Dans ces expériences, l'ozone a été ajouté à la variable de contrôle du 1D-Var. Ainsi deux expériences ont été réalisées en assimilant 123 canaux opérationnels puis 123 + 15 canaux sensibles à l'ozone, nommées respectivement O3MOC+123+XO3 et O3MOC+138+XO3. De la même manière que précédemment, nous avons calculé la réduction d'erreur d'analyse par rapport à l'ébauche en comparaison aux radiosondages pour la température et l'humidité sur les 161 cas d'étude. Nous présentons ici les résultats en assimilant la source d'ozone issue de O3MOC.

La Figure 7.6 illustre les profils verticaux de réduction d'erreur d'analyse par rapport à l'ébauche en température (a) et humidité (b) pour l'expérience O3MOC+123+XO3 (courbe rouge) et O3MOC+138+XO3 (courbe bleue). La seule différence entre les expériences O3MOC+123+XO3 et la précédente O3MOC+123 réside dans l'ajout de l'ozone à la variable de contrôle. Cet ajout se traduit dans notre expérience O3MOC+123+XO3 par une légère baisse de la somme de réduction d'erreur relative en température ; - 2,82 % au lieu de - 2,87 % précédemment. Inversement, l'ajout de l'ozone à la variable de contrôle permet d'améliorer un peu plus la somme de réduction d'erreur relative en humidité ; de - 6,22 % au lieu de - 6,19 % précédemment. Minimiser sur les profils d'ozone via l'ozone dans la variable de contrôle implique d'apporter de l'information supplémentaire, c'est pour cela que l'expérience O3MOC+138+XO3 a été réalisée. Les bandes vertes indiquent que la réduction d'erreur d'analyse est plus importante pour l'expérience O3MOC+138+XO3 par rapport à O3MOC+123+XO3, tandis que les bandes rouges indiquent que la réduction d'erreur d'analyse est moins importante pour l'expérience O3MOC+138+XO3 par rapport à O3MOC+123+XO3, enfin les zones blanches indiquent des impacts neutres. On remarque sur la Figure 7.6.a une alternance d'impacts positifs et négatifs pour la température et sur la Figure 7.6.b, des impacts positifs proches de la surface et en haute troposphère et négatifs entre 500 et 800 hPa pour l'humidité.

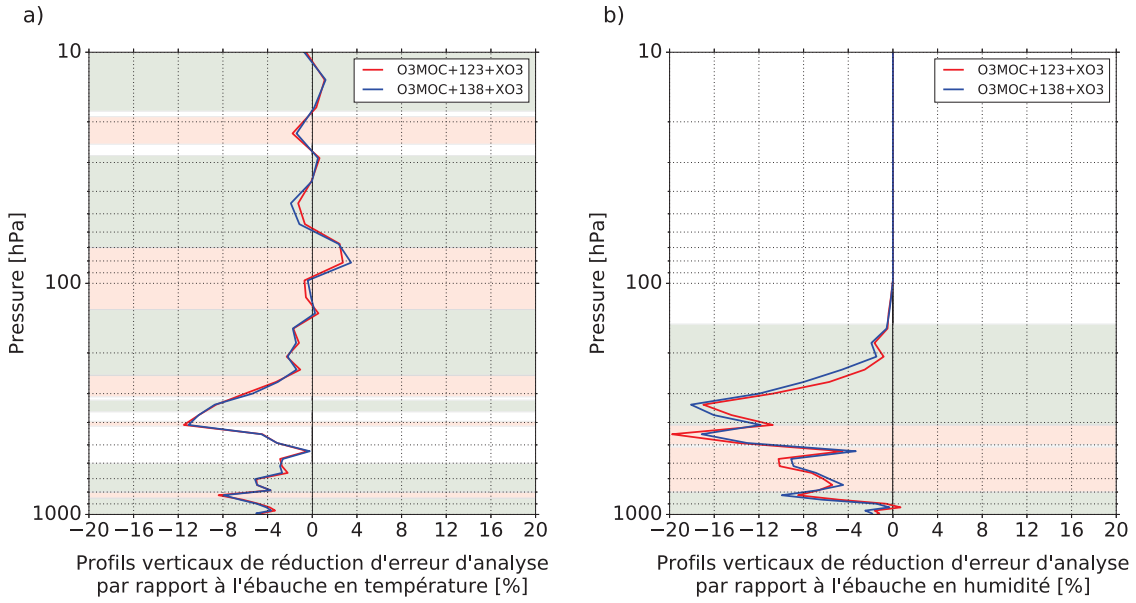


FIGURE 7.6: Profils verticaux de réduction d'erreur d'analyse par rapport à l'ébauche en comparaison aux radiosondages en pourcentage [%] en utilisant comme ébauche en ozone O3MOC en assimilant 123 canaux (courbe rouge) et 138=123+15 canaux IASI sensibles à l'ozone (courbe bleue) pour la température (a) et l'humidité (b). O3MOC+138+XO3 meilleure que O3MOC+123+XO3 (bandes vertes) et inversement (bandes rouges).

Globalement, nous avons calculé la somme des réductions d'erreur d'analyse en température et humidité pour les deux expériences. La synthèse de ces résultats est présentée dans le Tableau 7.1. On remarque que l'ajout de 15 canaux IASI sensibles à l'ozone dans l'expérience O3MOC+138+XO3 permet d'améliorer la réduction d'erreur totale en température de 0,05 point de pourcentage par rapport à l'expérience O3MOC+123+XO3. L'impact en température est donc relativement neutre entre les expériences O3MOC+138+XO3 et O3MOC+123. Cependant, les résultats de l'expérience O3MOC+123+XO3 montrent une amélioration de la réduction d'erreur totale en humidité très légère de 0,03 point de pourcentage par rapport à la précédente sans l'ozone dans la variable de contrôle et une amélioration plus importante, de l'ordre de 0,25 point de pourcentage en ajoutant les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone. L'analyse en ozone est fortement amélioré puisque la réduction d'erreur passe d'une dégradation de -0.34 % pour l'expérience O3MOC+123+XO3 à 2.79 % pour l'expérience O3MOC+138+XO3.

	Réduction d'erreur de l'analyse totale [%]				
Expériences	Température	Humidité	Expériences	Température	Humidité
O3REF+123	- 2,76	- 6,11	**O3MOC+123+XO3**	- 2,82	- 6,22
O3MOC+123	- 2,87	- 6,19	**O3MOC+138+XO3**	- 2,87	- 6,44

TABLE 7.1: Tableau synthétisant les résultats par la somme de réduction d'erreur relative sur tous les niveaux verticaux pour les expériences O3REF+123, O3MOC+123, O3MOC+123+XO3 et O3MOC+138+XO3.

Ces résultats nous démontrent la possibilité d'améliorer nos analyses de température et d'humidité en ajoutant de l'information supplémentaire, dans notre cas, à l'aide de canaux IASI sensibles à l'ozone. On remarque que l'ajout de ces canaux a un impact globalement neutre en température et positif en humidité.

7.2.4 Conclusion et discussion

L'objectif de cette étude est de préparer l'assimilation couplée entre les modèles de PNT et MCT à l'aide des observations satellitaires infrarouges. Les résultats présentés dans cet article sont encourageants quant à l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste issue de MOCAGE pour améliorer l'assimilation d'observations infarouges sensibles à l'ozone. Un travail important a été réalisé pour sélectionner et traiter les données de vérification (radiosondages), d'observations (IASI), d'ébauche (ARPEGE et MOCAGE), afin d'être facilement utilisables par le MTR RTTOV et le 1D-Var.

Une part importante des résultats dépend de l'élaboration des matrices de covariance d'erreur d'observation (**R**) et d'ébauche (**B**). Afin de converger vers des erreurs d'observation réalistes, nous avons choisi d'utiliser la méthode de [Desroziers et al., 2005] nous permettant de diagnostiquer la globalité des erreurs entre les canaux IASI utilisés. Pour calculer les erreurs d'ébauche en ozone, nous avons décidé de calculer les écarts-types entre les profils d'ébauche et de vérifications, nous rapprochant ainsi d'une estimation de **B** en ozone. Les erreurs d'ébauche en température et humidité ont été extraites du modèle ARPEGE.

Même si globalement l'impact de l'ajout de ces 15 canaux IASI sensibles à l'ozone est positif, des difficultés demeurent. En effet, le nombre réduit de cas d'étude peut altérer la qualité des matrices **R** et **B**. Ceci peut en partie expliquer les alternances d'impacts positifs et négatifs pour la température et l'humidité visibles sur la Figure 7.6. Évidemment, d'autres éléments peuvent expliquer la dégradation des résultats, comme la qualité des simulations des observations à l'aide de RTTOV, le débiaisage des observations IASI et les différentes configurations complexes du 1D-Var. Cependant, ces résultats nous ont permis de mettre en évidence une méthode efficace, nous donnant également la possibilité de restituer un profil d'ozone de bonne qualité.

Même si les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sont capables de fournir de l'information en température et en humidité, ils ont été sélectionnés au départ par Collard pour leur capacité à apporter de l'information en ozone. De plus, une matrice **R** diagonale a été utilisée dans cette sélection. La suite aura donc pour objectif de sélectionner plus précisément l'ensemble des canaux IASI sensibles à l'ozone sur le spectre complet (8461 canaux) qui serait capables d'apporter le plus d'information possible en température et humidité. On utilisera également une matrice **R** diagnostiquée complète et une nouvelle matrice **B** calculée à l'aide de la méthode NMC incluant les erreurs d'ozone. La nouvelle sélection de canaux d'ozone sera ensuite testée dans le système d'assimilation 4D-Var du modèle global de PNT ARPEGE en utilisant des champs d'ozone réalistes issus de MOCAGE.

7.3 L'article : Assimilation of IASI ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models

Journal of Geophysical Research: Atmospheres

RESEARCH ARTICLE
10.1029/2017JD027901

Assimilation of IASI Ozone-Sensitive Channels in Preparation for an Enhanced Coupling Between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models

O. Coopmann[1], **V. Guidard**[1], **N. Fourrié**[1], **and M. Plu**[1]

[1]CNRM, Université de Toulouse, Météo-France, CNRS, Toulouse, France

Key Points:
- IASI ozone-sensitive channels are also sensitive to temperature and humidity
- Using a realistic ozone information input of the RTTOV RTM allows to better simulate IASI ozone-sensitive channels radiances
- A simplified framework such as the 1D-Var data assimilation is used to prepare for an enhanced coupling between NWP and CTM

Correspondence to:
O. Coopmann,
olivier.coopmann@umr-cnrm.fr

Citation:
Coopmann, O., Guidard, V., Fourrié, N., & Plu, M. (2018). Assimilation of IASI ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 123*. https://doi.org/10.1029/2017JD027901

Received 17 OCT 2017
Accepted 4 OCT 2018
Accepted article online 25 OCT 2018

©2018. American Geophysical Union. All Rights Reserved.

Abstract In this study, IASI ozone-sensitive channels have been assimilated in 1D-Var data assimilation combined with realistic ozone background coming from a MOCAGE (Modèle de Chimie Atmosphérique à Grande Echelle) Chemistry Transport Model (CTM) as a first stage of coupling between Numerical Weather Prediction (NWP) and MOCAGE CTM at Météo-France for global model ARPEGE (Action de Recherche Petite Echelle Grande Echelle). To evaluate the impact of ozone-sensitive channels on analyses, databases of 161 temperatures, humidity, and ozone radiosondes across the globe during a 1-year period have been considered. Ozone forecast from MOCAGE CTM was evaluated with radiosondes and used as input for the Radiative Transfer Model (RTM) RTTOV. Statistics of IASI observations minus simulations show that the use of ozone from MOCAGE CTM allows to better simulate IASI ozone-sensitive channels. The Desroziers method is used to diagnose observation error covariance matrix and estimate realistic ozone observation standard errors taking into account cross-correlations between IASI channels. The background error covariance matrix for ozone is estimated using radiosondes. A control run assimilating 123 IASI operational channels is compared to an experiment which assimilates, in addition, 15 IASI ozone-sensitive channels. Results show potential benefits of IASI ozone-sensitive channels combined with realistic ozone from MOCAGE CTM to improve temperature, humidity and ozone analyses simultaneously. This work is an encouraging first step for the enhancing of the coupling between the global model ARPEGE and MOCAGE CTM.

1. Introduction

Since the launch in 1960 of the first weather satellite, techniques have significantly evolved with ever more sophisticated instruments. Data from space borne instruments that are assimilated in Numerical Weather Prediction (NWP) systems have a positive impact on forecasts (Lorenc & Marriott, 2014). IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) was jointly developed by CNES (Centre National d'Études Spatiales) and EUMETSAT (European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites; Cayla, 2001). It was first launched in 2006 onboard the Metop-A satellite. The second instrument was launched on board Metop-B in 2012 and its spectrum ranges from 645 to 2,760 cm^{-1} with a spectral sampling of 0.25 cm^{-1} and a spectral resolution of 0.5 cm^{-1} leading to a set of 8,461 radiance measurements. This sounder provides indirect information on temperature and humidity profiles to be obtained along with that of cloud cover, aerosols, atmospheric chemistry compounds such as O_3, CO_2, CO, CH_4, HNO_3, and N_2O (Clerbaux et al., 2009) and surface properties. The retrieval precision aimed for is 1 K/1 km in terms of temperature and 10%/1 km in terms of humidity (Hilton et al., 2012). This accuracy in temperature retrievals is achieved over oceans but is more challenging over land and near to the surface due for example to weaker instrument sensitivity combined with larger uncertainties especially on input surface parameters skin temperature (Guedj et al., 2011) and emissivity. (Guedj et al., 2011) was interested in land surface temperature retrievals in order to improve the assimilation of SEVIRI radiances.

The high volume of data resulting from IASI presents many challenges, particularly in the areas of data transmission, data storage and assimilation for example. The methods for reducing the data volume are channel selection, spatial sampling or principle components analysis. A channel selection was performed by (Collard, 2007) for NWP purposes. Channels were mainly selected in the CO_2 longwave (LW) band (for temperature retrievals), in the atmospheric window region and in the water vapor (WV) band. This selection of 300 channels includes 15 ozone-sensitive channels. CNES added 14 other channels for climate monitoring purposes.

Table 1
Number and Wave Number of the 15 Ozone-Sensitive IASI Channels Available in the Météo-France 314 Channel Subset

Channel number	Wave number (cm^{-1})	Channel number	Wave number (cm^{-1})	Channel number	Wave number (cm^{-1})
1479	1,014.50	1574	1,038.25	1639	1,054.50
1509	1,022.00	1579	1,039.50	1643	1,055.50
1513	1,023.00	1585	1,041.00	1652	1,057.75
1521	1,025.00	1587	1,041.50	1658	1,059.25
1536	1,028.75	1626	1,051.25	1671	1,062.50

This subset of 314 channels including Collard's selection is routinely monitored at Météo-France and up to 123 channels are assimilated in operations (99 temperature channels in the LW CO_2 band, 4 window channels and 20 WV channels). IASI-A and IASI-B alone account for 58% of the data used in the NWP global model ARPEGE (Action de Recherche Petite Echelle Grande Echelle) of Météo-France. The Global Telecommunication System also distributes a set of 500 channels (Martinet et al., 2014), which includes the 314-channels subset.

IASI ozone-sensitive channels are potentially beneficial because they are also sensitive to temperature and humidity and can therefore provide additional information for 4D-Var (four-dimensional variational data assimilation) data assimilation. Indeed, the work of Derber and Wu (1998) showed that realistic ozone information improves the use of ozone-sensitive channel satellite radiances in the High Infrared Resolution Sounder (HIRS) at the global forecast system at NCEP (National Centers for Environmental Prediction). Semane et al. (2009) showed potential benefits of 4D-Var ozone assimilation for the improvement of the wind field through dynamics-ozone coupling at the global model ARPEGE. Many more studies have shown the benefits of ozone assimilation for NWP. ECMWF's (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) Integrated Forecasting System (IFS) assimilates 16 IASI ozone-sensitive channels (in their own channel subset) in operational near-real-time providing ozone analysis (Dragani & McNally, 2013; Han & McNally, 2010). Lupu and McNally (2013) have shown through their study the positive impact on wind analysis assimilating ozone-sensitive channels from the Spinning Enhanced Visible and Infrared Imager (SEVIRI) instrument. These studies only assessed impact on wind and not on temperature and humidity forecast however. Additionally, IASI radiances may be used to provide Level 2 products such as temperature and humidity profiles, cloud information, surface emissivity and temperature, and atmospheric composition in near-real time. IASI operational Level 2 products from EUMETSAT version 5 algorithm are coretrieving temperature and ozone profiles (August et al., 2012). At present, Météo-France does not use these L2 products, only L1 products (radiances).

MOCAGE (Modèle de Chimie Atmosphérique à Grande Echelle) Chemistry Transport Model (CTM) is a three-dimensional CTM of the troposphere and stratosphere providing a realistic ozone background at Météo-France. This background is consistent with dynamical fields of the global model ARPEGE as MOCAGE is piloted by ARPEGE dynamics.

The present study is a preparatory study so as to demonstrate the potential benefits of extracting information from 15 IASI ozone-sensitive channels monitored at Météo-France. This is done by using realistic ozone background to simultaneously improve temperature, humidity and ozone analyses. A 1D-Var assimilation framework is used and this paper is outlined as follows: Section 2 describes the data sets used in this study, IASI ozone-sensitive channels, thermodynamics and ozone information and radiosondes, section 3 evaluates the impact of ozone background input on a Radiative Transfer Model (RTM) simulation of radiances, and section 4 presents the assimilation setup and observation and background errors used. The results of 1D-Var assimilation are shown in section 5. Finally, section 6 summarizes the results and opens discussion.

2. Description of the Data Sets

2.1. IASI Observations

IASI is a Michelson interferometer measuring infrared. It measures 8,461 spectral samples between 3.62 and 15.5 μm with a resolution of 0.5 cm^{-1} after apodization. IASI scans across-track in 30 successive elementary fields of view (EFOVs), each composed of four instantaneous fields of view (IFOV). The EFOV's span a ±48.33° range, symmetric with respect to the Nadir, in steps of 3.33°. The swath width on the ground is approximately 2200 km, which provides global Earth coverage twice a day. The IFOV is a disc of 12 km (pixel) diameter at

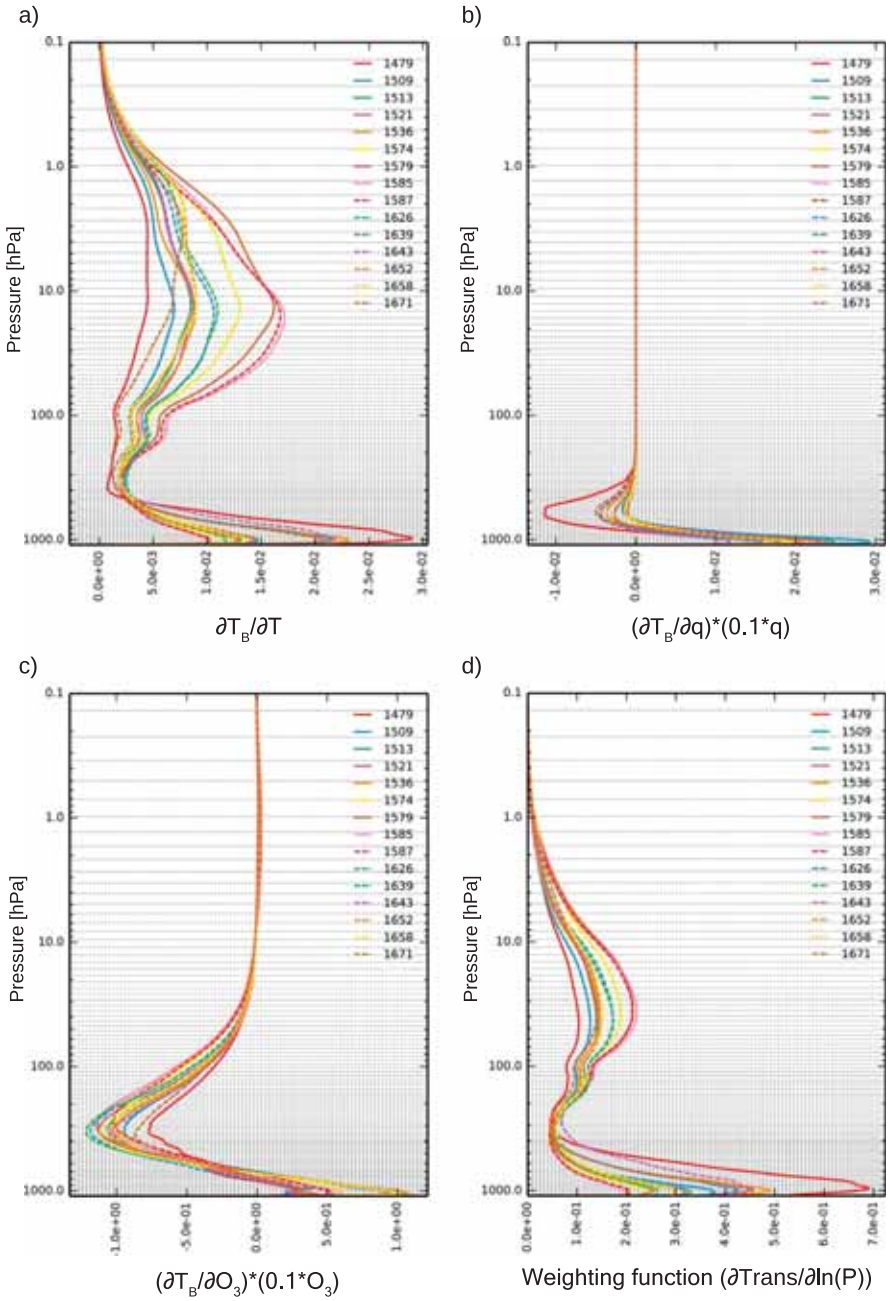


Figure 1. Jacobians of temperature (a), humidity (b), ozone (c), and weighting functions (d) for 15 IASI ozone-sensitive channels using O3REF profile.

subsatellite point (August et al., 2012). Operationally at Météo-France, 314 IASI channels are monitored and 123 are assimilated: 99 CO_2 sensitive channels in the LW to retrieve temperature profiles, 4 window channels, and 20 H_2O sensitive channels in the LW to retrieve humidity profiles. The 15 IASI ozone-sensitive channels that are monitored range from 1014.5 to 1062.5 cm^{-1} (Table 1).

We have evaluated the sensitivity of these channels to temperature, humidity and ozone by computing their Jacobians (Figures 1a–1c). The Jacobian represents the sensitivity of brightness temperature with respect to

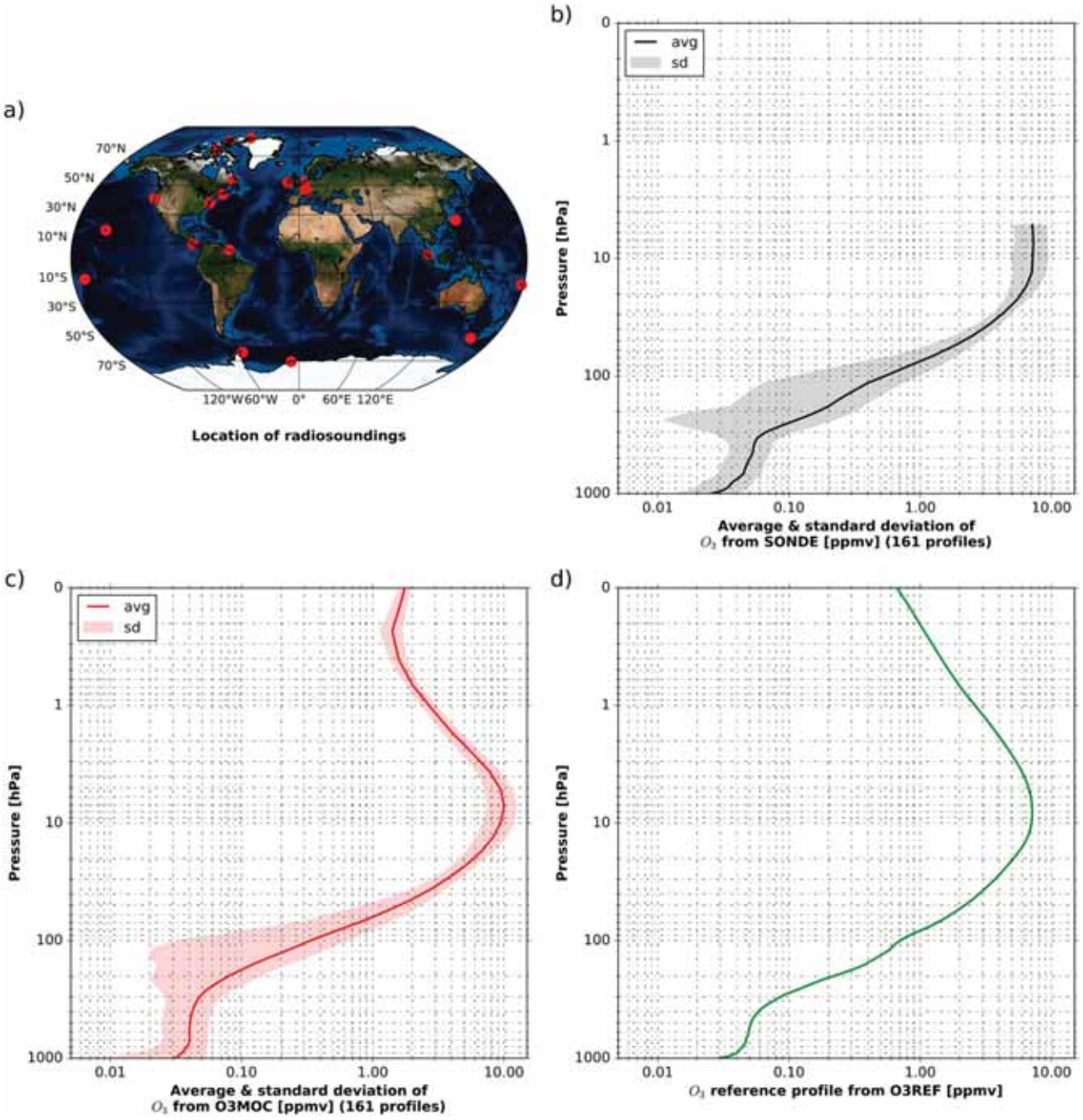


Figure 2. Location of radiosoundings from (WOUDC, SHADOZ, and NOAA) networks used in this study (a), average and standard deviation of the 161 ozone profiles from SONDE (b), O3MOC (c), and ozone reference profile from O3REF (d) with respect to pressure.

a change in thermodynamic or chemical parameters. Jacobians for temperature (T), humidity (q), and ozone (O_3) have been calculated with an average profile coming from RTTOV RTM data sets. Jacobians of humidity and ozone have been multiplied by 10% of their concentrations to overcome the large variability of these parameters. Temperature Jacobians (Figure 1a) for the 15 ozone-sensitive channels show broader values in the lower troposphere (1,000–500 hPa) with a peak around $0.03K.K^{-1}$ and in the large part of the stratosphere (100–1 hPa) with a peak around $0.015K.K^{-1}$. In Figure 1b, humidity Jacobians show the largest values in the lower troposphere between 1,000 and 900 hPa with a peak around $0.03K$ and in the middle troposphere (800–300 hPa) with a peak around $0.01K$. In Figure 1c, ozone Jacobians then show large values in the lower troposphere (1,000–800 hPa) and in the middle troposphere up to the lower stratosphere (700–30 hPa) with peaks around $\pm 1.0K$. In addition, Figure 1d present the weighting functions of these ozone-sensitive channels, that is, the derivative of the atmospheric transmission profile with respect to the vertical coordinate. Weighting functions show peaks of sensitivity at several altitudes (lower troposphere and stratosphere). These results show the interest in using IASI ozone-sensitive channels for NWP because these channels are also sensitive to temperature and humidity and could potentially provide further information in the data assimilation process.

2.2. Collocation Between Radiosondes and IASI Pixels

In this section, data sets used in the study are described. A 1-year period from April 2014 to March 2015 was selected to take into account the annual variability. Before the collocation between radiosondes and IASI pixels, we were starting from a set of 1,767 radiosounding profiles launched from 50 stations. Temperature, humidity, and ozone data were measured using radiosondes from the collection of

- the World Ozone and Ultraviolet Data Center (WOUDC, available online at http://www.woudc.org);
- the Southern Hemisphere Additional Ozonesondes (SHADOZ, available online at croc.gsfc.nasa.gov/shadoz/Archive.html); and
- the National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA)/Earth System Research Laboratory (ESRL), Global Monitoring Division (GMD) networks (available online at ftp://ftp.cmdl.noaa.gov/ozwv/ozone/).

After screening to remove erroneous profiles (missing or/and spurious data), we were left with data from 49 stations with a set of 1,688 radiosounding profiles. It is important to note that the radiosondes, named SONDE hereafter, provide a sufficient amount of data only up to 10 hPa. In addition, these radiosondes are not assimilated in the 4D-Var global model ARPEGE.

In order to collocate IASI pixels and radiosondes, several criteria were defined so as to select the closest pixel for each radiosonde. The smallest orthodromic distance and temporal difference between IASI pixel and radiosonde were retained. Only the IASI pixels nearest radiosonde were selected from those within an orthodromic distance below 150 km and a temporal difference below 60 min. The IASI instrument also includes an Integrated Imaging Subsystem (IIS) that allows to coregister interferometric measurements with AVHRR (Advanced Very High Resolution Radiometer), present on the same platform. AVHRR provides cloud and heterogeneity information in the IASI pixels (Saunders & Kriebel, 1988). To avoid the use of cloudy pixels, IASI pixels were discarded whenever the AVHRR cloud cover was above 15%. To avoid emissivity and surface temperature problem, only pixels over sea with less than 10% of land fraction were retained. Indeed, sea surface temperatures are known to be more accurate (around 0.5 K; Donlon et al., 2012 than land surface temperatures (few Kelvin), and the RTTOV RTM includes a surface emissivity model (ISEM; Sherlock & Saunders, 1999) over the sea while only an atlas is available over land (Borbas & Ruston, 2011). Finally, profiles with a difference between simulated IASI observation and real IASI observation (named innovation or first guess departure) larger than (in absolute value) 5 K were rejected. Indeed, large innovations could result from the presence of a cloud or a wrong surface description hence the 161 remaining pixels collocated with radiosounding profiles, among the 1,688 starting data, were used in the following study. In situ temperature, humidity, and ozone profiles from these radiosoundings have been used as verification data. Average and standard deviation of 161 ozone profiles (23 stations shown in Figure 2a) from SONDE are given in Figure 2b with respect to pressure.

2.3. Model Atmospheric Data

The first source of information for ozone emanates from O3REF (Matricardi, 2008), which is constant in time and space with 101 levels up to 0.005 hPa and used operationally at Météo-France (Figure 2d). This profile results from averaging a set of 83 diverse profiles from ECMWF analyses on 91 levels, interpolated in to 101 levels (Chevallier et al., 2006).

The second source of information for ozone available at Météo-France (every 3 hr) is an ozone realistic field from the model MOCAGE (O3MOC) which has 60 vertical hybrid sigma-pressure levels from the surface up to

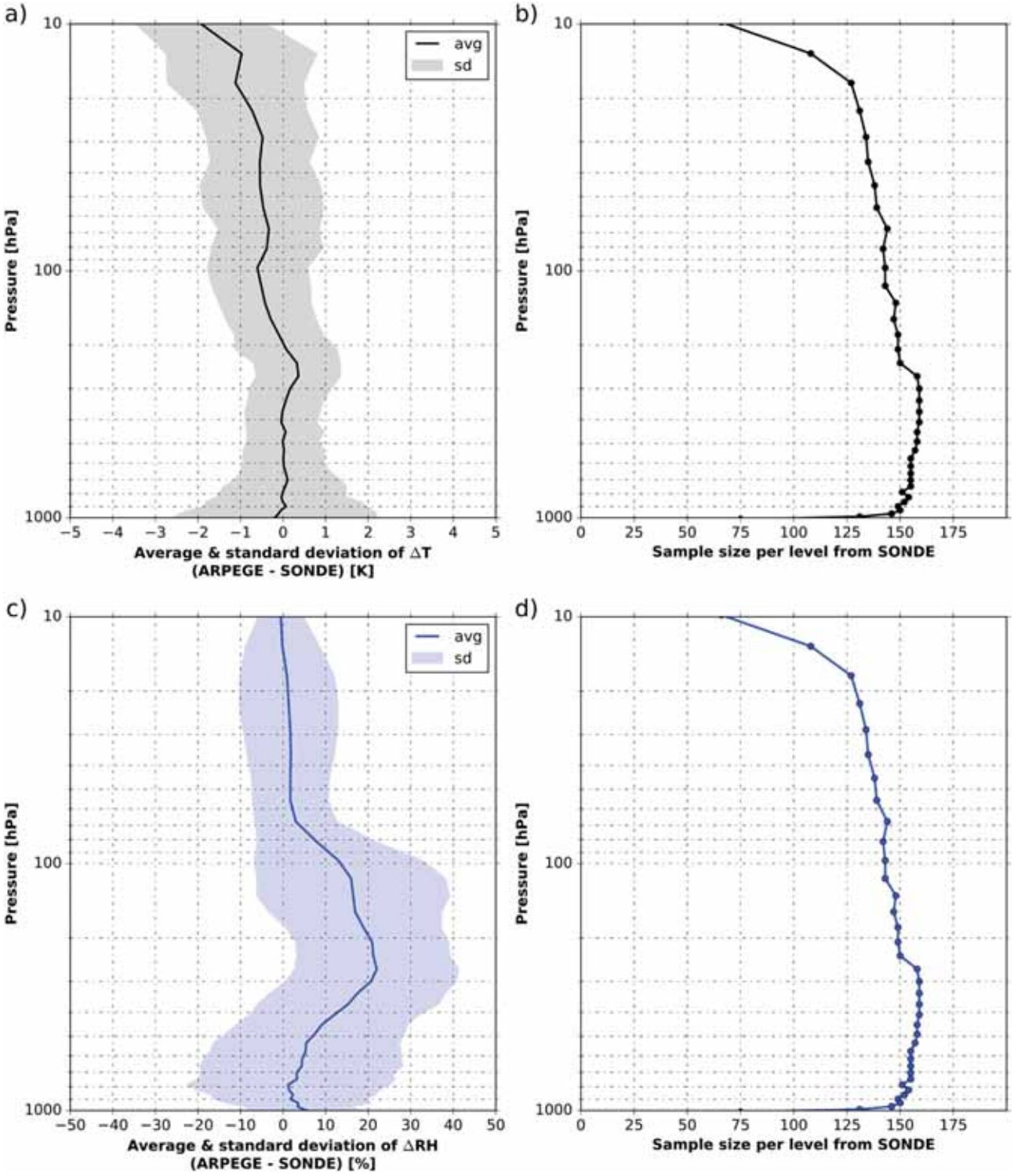


Figure 3. Average and standard deviation of differences between ARPEGE minus SONDE for temperature (a) and relative humidity (c) with respect to pressure and sample size per level for temperature (b) and relative humidity (d).

about 0.01 hPa and which takes into account the atmospheric chemical reactions describing the sources and sinks in time and space on a 2° global grid. The dynamics within the CTM are forced by ARPEGE meteorological analysis fields (pressure, winds, temperature, specific humidity; Sic et al., 2015.

The atmospheric profiles of temperature, specific humidity and surface parameters (skin temperature, surface temperature, surface humidity, surface pressure, zonal wind, and meridian wind) come from the global model ARPEGE forecasts (every 3 hr), which have been extracted for the same period and location as for the radiosondes as well as ozone profiles stemming from MOCAGE. Pressure levels of thermodynamics profiles (70 levels in ARPEGE at the time of the study case), ozone profiles from O3MOC (60 levels) and ozone reference profile from O3REF, were interpolated onto the 54 levels of the 1D-Var from the NWP-SAF (Numerical Weather Prediction Satellite Application Facility) of Eumetsat (http://nwpsaf.eu/site/software/1d-var). In Figure 2c, we show average and standard deviation of 161 ozone profiles from O3MOC with respect to pressure.

2.3.1. Statistics on Thermodynamic Profiles

To evaluate the 161 thermodynamic profiles, statistics between temperature and humidity from the forecasts of ARPEGE minus radiosondes (SONDE), were calculated between 1,013 and 5 hPa, across 40 pressure bins, relatively evenly spaced on a logarithmic scale. In Figure 3a, temperature bias between ARPEGE and SONDE of −0.25 K is observed at the surface with a standard deviation of around 2.5 K. This may be due to the surface temperature over sea ice, which is not simulated by the ARPEGE model (i.e., prescribed climatological values) over high latitudes. Additionally, the radiosoundings launched close to the coastal areas have very variable surface temperatures while the profiles extracted from the model only take into account the sea surface temperature. We note a temperature bias less than ±0.75 K between 950 and 30 hPa with standard deviation around 1.0 K. Then higher biases above 30 hPa are also noted for temperatures with increasing standard deviation, probably due to the decrease of the number of SONDE data, especially above 20 hPa. Figure 3b shows relative humidity biases between ARPEGE and SONDE. A positive bias of 0.5% is observed at the surface with a standard deviation of around 10%. Between the surface and 800 hPa, the bias decreases to 2% while the standard deviation increases by up to 25%. Then we note a positive bias of up to 20% between 800 and 70 hPa with standard deviation ranging from 10% and 20%. Finally, relative humidity biases are close to 0% above 70 hPa with a standard deviation of around 10%.

The expected accuracy of IASI retrievals for temperature (1 K/1 km) is already achieved in the model forecast to be used as prior information in the retrieval process in large parts of the atmosphere, but not near the surface, as previously explained, due probably to the surface temperature over sea ice. The standard deviation of humidity is however larger than 10%/1 km in the whole troposphere, showing that the vertical variations of humidity are difficult to model but also due to differences between model and the sonde, which are not exactly collocated and have different horizontal scales. The choice of prior information for humidity is very important as it is very difficult to correct errors in the vertical structure of the humidity profile using data assimilation methods (Hilton et al., 2009; Pougatchev et al., 2009).

2.3.2. Statistics on Ozone Profiles

Similar features in terms of biases and standard deviations are noticed with 161 profiles from O3MOC (see Figure 4a). We note that O3MOC overestimates ozone between 300 and 20 hPa around 0.1 up to 0.6 ppmv with standard deviation increasing (0.5 ppmv) up to 10 hPa, and underestimating it above 20 hPa. The biases of ozone from O3REF with respect to SONDE behave differently compared with O3MOC. Indeed, in Figure 4b, O3REF underestimates ozone between 300 and 40 hPa and overestimates it above 40 hPa with a large standard deviation (2 ppmv). These results were expected and confirm that ozone from O3MOC better describes the variability of ozone than the constant ozone profile from O3REF.

3. Sensitivity of Simulations to Ozone Information

To extract further information stemming from IASI observations, we need to confront the observations with what the model already knows. For this purpose, simulations of IASI observations are obtained with a RTM known as RTTOV at Météo-France. RTTOV (Radiative Transfer for TOVS; TOVS: TIROS Operational Vertical Sounder and TIROS: Television Infrared Observation Satellite; RTTOV v11 Users Guide, NWPSAF-MO-US-028; Saunders et al., 1999) is a RTM developed in the framework of the NWP-SAF of EUMETSAT (http://nwpsaf.eu/site/software/rttov) to meet the demands of operational data assimilation systems from national weather services. RTTOV simulates the top of the atmosphere clear-sky radiances in the visible, infrared and microwave for each available channel. RTTOV also has the capability to simulate the cloud and aerosol scattering. Simulated

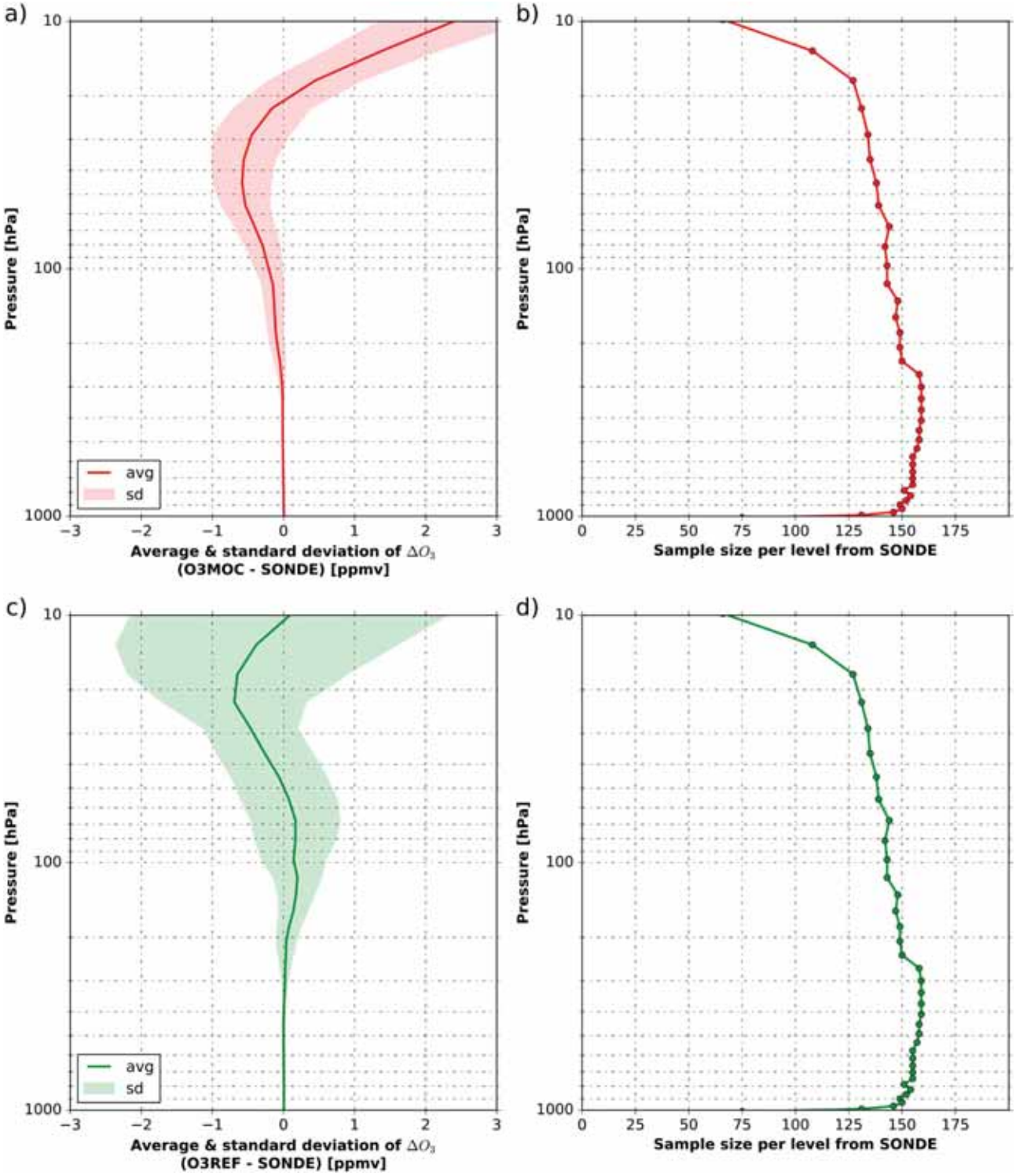


Figure 4. Average and standard deviation of ozone differences between O3MOC minus SONDE (a) and O3REF minus SONDE (c) with respect to pressure and sample size per level for O3MOC (b) and O3REF (d).

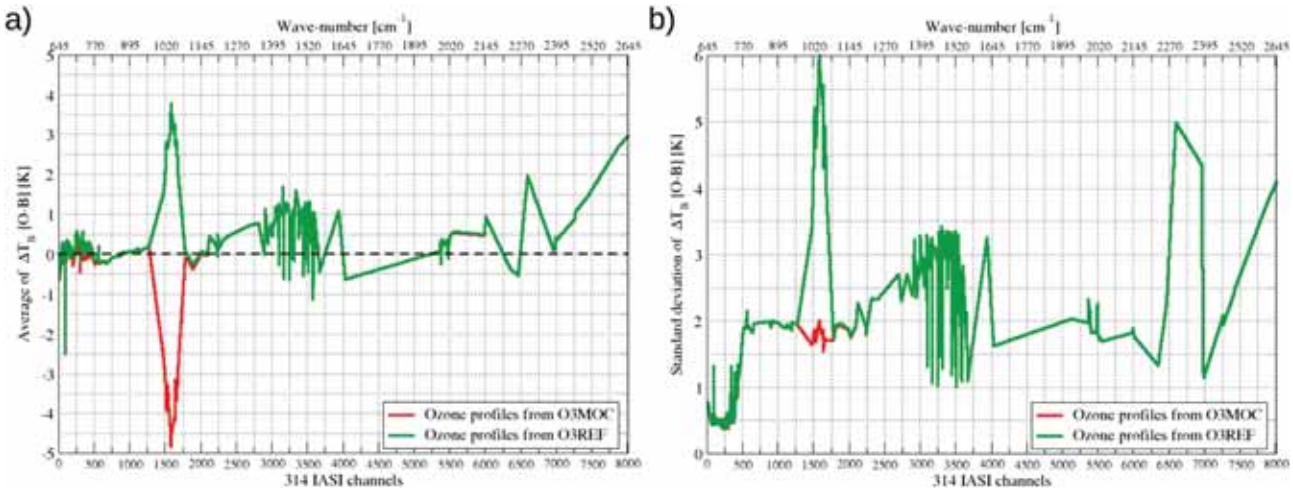


Figure 5. Average (a) and standard deviation (b) of brightness temperature (T_B) differences between real observations and simulations [O-B] with O3REF (green line) and O3MOC (red line) ozone fields for 314 IASI channels with respect to wave numbers.

IASI observations are then compared to real IASI observations. The sensitivity of brightness temperature simulations to both O3REF and O3MOC ozone profiles is assessed in this part. In order to initialize the RTM, we use the 161 temperatures, humidity profiles and surface parameters from ARPEGE. The only difference between experiments is in the ozone profiles. RTM provides 161 simulations of IASI observations for 314 channels which are then compared to 161 real IASI observations. Average and standard deviations of brightness temperature differences between IASI observations and simulations [O-B], where [O-B] represents the innovation, are displayed in Figure 5.

Differences are mainly located in the ozone band between 1014.5 and 1062.5 cm^{-1} as expected. A bias for O3MOC with values around −5 K is observed in Figure 5a. On the other hand, the O3REF ozone bias remains lower than O3MOC, around 3.5 K. A similar bias has been observed for O3MOC whatever the region, while bias for O3REF is more variable by region ranging from −1 K in the Polar region to 11 K in the Tropics (not shown). These results are consistent with large biases of O3MOC above 15 hPa compared with O3REF seen in Figure 4. These values were used to carry out bias correction of IASI observations for assimilation experiments. Some CO_2 channels appear to be sensitive to ozone between 650 and 800cm^{-1}. We observed in Figure 5b a large standard deviation of [O-B] brightness temperature differences for the IASI ozone sensitive-channels using ozone information from O3REF with values up to 6 K. The use of realistic ozone information from O3MOC leads however to the reduction of standard deviation of around 1.75 K for ozone-sensitive channels. Inaccurate skin temperature and the sea-ice over high latitudes may lead to higher standard deviations in window regions. Standard deviation of [O-B] brightness temperature differences using ozone information from O3MOC are an indication that the variable ozone profiles of O3MOC allow to better simulate IASI radiances than do O3REF. These results are expected and are consistent with the statistics on ozone profiles in section 2.3.2 with a larger bias of O3MOC than O3REF, but standard deviation is twice larger using O3REF than O3MOC in the stratosphere.

4. Experimental Method

4.1. Formalism of Data Assimilation

Data assimilation allows the best estimate $\mathbf{x}^a$ of the real state of the atmosphere to be found from observations $\mathbf{y}$ and a prior knowledge of the atmosphere (the background) $\mathbf{x}^b$, which is usually a short-term forecast. The errors of these two sources of information should be unbiased (zero mean). In a one-dimensional framework, atmospheric thermodynamic profiles at a given location are represented by a vector $\mathbf{x}$ and satellite radiances or brightness temperatures by a vector $\mathbf{y}$. Differences between observations and simulated observations formulated as $\mathbf{d}_b^o = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^b)$ are known as innovations. The transition from background model space to observation space is realized by the observation operator $\mathcal{H}$, which simulates brightness temperatures from $\mathbf{x}^b$ through the RTM. It can include horizontal and vertical interpolation.

Additionally, the following errors must be taken into account: the background error $\varepsilon^b = \mathbf{x}^b - \mathbf{x}^t$ and the observation error $\varepsilon^o = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^t) = (\mathbf{y} - \mathbf{y}^t) + (\mathbf{y}^t - \mathcal{H}(\mathbf{x}^t)) = \varepsilon^i + \varepsilon^f$, where $\mathbf{x}^t$ is the truth in the model space, $\mathbf{y}^t$ is the truth in the observation space, ε^i is the error due to instrument noise, and ε^f is the error in the observation operator and the representativeness error, which is induced by the difference of scale between the observation and the model.

In addition, the background-error covariance matrix is defined as $\mathbf{B} = E(\varepsilon^b \varepsilon^{bT})$ and the observation-error covariance matrix: $\mathbf{R} = E(\varepsilon^o \varepsilon^{oT})$, where E stands for the mathematical expectation. The background and observation error covariance matrices determine how much weight should be given to each source of information. The background-error covariance matrix contributes to filtering and propagating the innovation (Bouttier & Kelly, 2001).

A One-Dimensional Variational data assimilation (1D-Var) software developed within the frame of the EUMETSAT NWP SAF is used in this study. The purpose is to estimate the most likely atmospheric state $\mathbf{x}^a$ using observations $\mathbf{y}$ and short range forecasts $\mathbf{x}^b$, in accordance with their respective errors. The analysis state $\mathbf{x}^a$ minimizes the cost function J:

$$J(\mathbf{x}) = \underbrace{\frac{1}{2}\left(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}\right)^T \mathbf{B}^{-1}\left(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}\right)}_{J_b(x)} + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}))^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}))}_{J_o(x)}$$

where J_b is the background term and J_o is the observation term.

The analysis state $\mathbf{x}^a$ can be written:

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}\left(\mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^b)\right)$$

where the linear operator (Kalman gain matrix) $\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1} = \mathbf{A}\mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1}$ and $\mathbf{A}$ is the analysis-error covariance matrix $\mathbf{A} = (\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H})^{-1} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}$, where $\mathbf{I}$ is the identity matrix. The analysis $\mathbf{x}^a$ is obtained as $\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \delta\mathbf{x}^a$ where $\delta\mathbf{x}^a$ is the analysis increment.

4.2. Background Errors

The background-error covariance matrix $\tilde{\mathbf{B}}$ was computed for 1D-Var experiments for 161 profiles. Generally, temperature, humidity, skin temperature, surface temperature and surface humidity are in the 1D-Var control variable. Here, we have also carried out a 1D-Var experiment including ozone in the control variable. Background error covariance matrix $\mathbf{B}$ coming from the 1D-Var package provides variance and covariance of temperature on 54 levels (54 number being surface level), humidity in $log(kg.kg^{-1})$ on 29 levels and surface parameters (skin temperature, surface temperature and surface humidity). However this $\mathbf{B}$ matrix is not consistent with our background used in this study. Moreover, we have carried out a 1D-Var experiment including ozone in the control variable. We should therefore include ozone background standard errors $\sigma^b_{O_3}$ in addition to temperature σ^b_T, humidity $\sigma^b_{log(q)}$ and surface parameter $\left(\sigma^b_{T_{skin}}, \sigma^b_{T_{surf}}, \sigma^b_{log(q_{surf})}\right)$ errors.

To compute an appropriate background error covariance matrix $\tilde{\mathbf{B}}$, background standard errors of temperature σ^b_T and humidity $\sigma^b_{log(q)}$ are derived from the daily errors operationally used in global model ARPEGE (Berre et al., 2015), which are extracted for the same period and location as the background profiles. Cross covariances between temperature and humidity are not available in ARPEGE. However, vertical error correlations for temperature and humidity in ARPEGE are similar to those in the original $\mathbf{B}$ matrix. We can therefore compute temperature and humidity covariances and their cross covariances using multivariate temperature-humidity vertical error correlations ($\mathbf{Corr}_T$ and $\mathbf{Corr}_{log(q)}$) derived by original $\mathbf{B}$ matrix such as

$$\widetilde{\mathbf{B}}_T(i,j) = \mathbf{Corr}_T(i,j).\sqrt{\left(\sigma^b_T\right)_i^2.\left(\sigma^b_T\right)_j^2}$$

$$\widetilde{\mathbf{B}}_{log(q)}(i,j) = \mathbf{Corr}_{log(q)}(i,j).\sqrt{\left(\sigma^b_{log(q)}\right)_i^2.\left(\sigma^b_{log(q)}\right)_j^2}$$

We then computed background error covariances of ozone using $\varepsilon^b_{O_3} = \mathbf{x}^b_{O_3} - \mathbf{x}^t_{O_3}$ equation, where $\mathbf{x}^b_{O_3}$ is ozone background coming from O3MOC or O3REF and assuming that $\mathbf{x}^t_{O_3} \approx \mathbf{x}^v_{O_3}$, with $\mathbf{x}^t_{O_3}$ the unknown true state of ozone and $\mathbf{x}^v_{O_3}$ the verification data of ozone from radiosondes. We have however a limited number

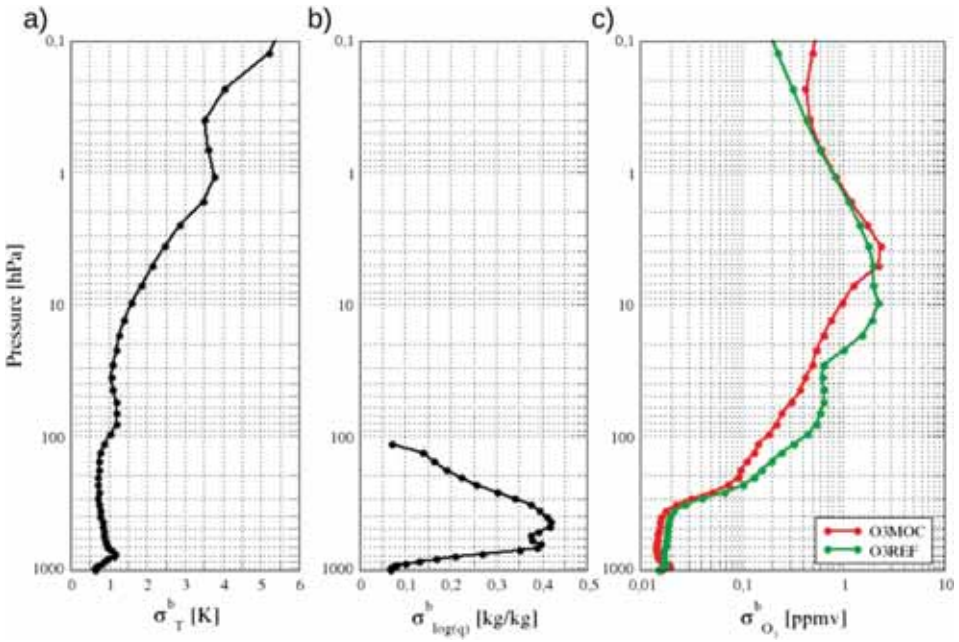


Figure 6. Temperature background standard errors σ_T^b (a), humidity background standard errors $\sigma_{log(q)}^b$ (b) and ozone background standard errors $\sigma_{O_3}^b$ for O3MOC (red line) and O3REF (green line) (c) with respect to pressure levels.

of cases and radiosondes contain errors, which can affect the range of ozone vertical covariance structures, leading to non positive matrix. We apply a compact support by multiplying vertical covariance structures by mask function:

$$mask_i(j) = \frac{1}{2}.\left[1 + cos(\pi.\frac{d_{i,j}}{D})\right] \text{ if } d_{i,j} < D; 0 \text{ otherwise}$$

where $d_{i,j}$ is the distance between pressure levels such as $d_{i,j} = |\ log(p_i) - log(p_j)\ |$ and D the maximal distance of correlation. This mask function allows the calculation of new ozone background error correlations $\widetilde{\mathbf{Corr}}_{O_3}$ and

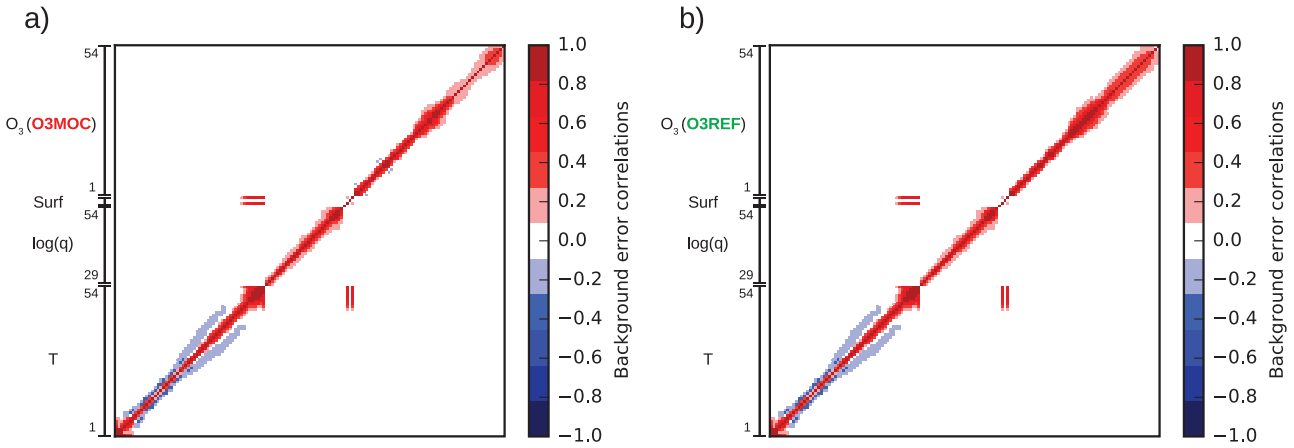


Figure 7. Background error correlations for temperature (T) on 54 vertical levels, humidity (log(q)) on 29 vertical levels, surface parameters "T_{surf}, q_{surf}, and T_{skin}" (Surf) and ozone (O_3) on 54 vertical levels from O3MOC (a) and from O3REF (b).

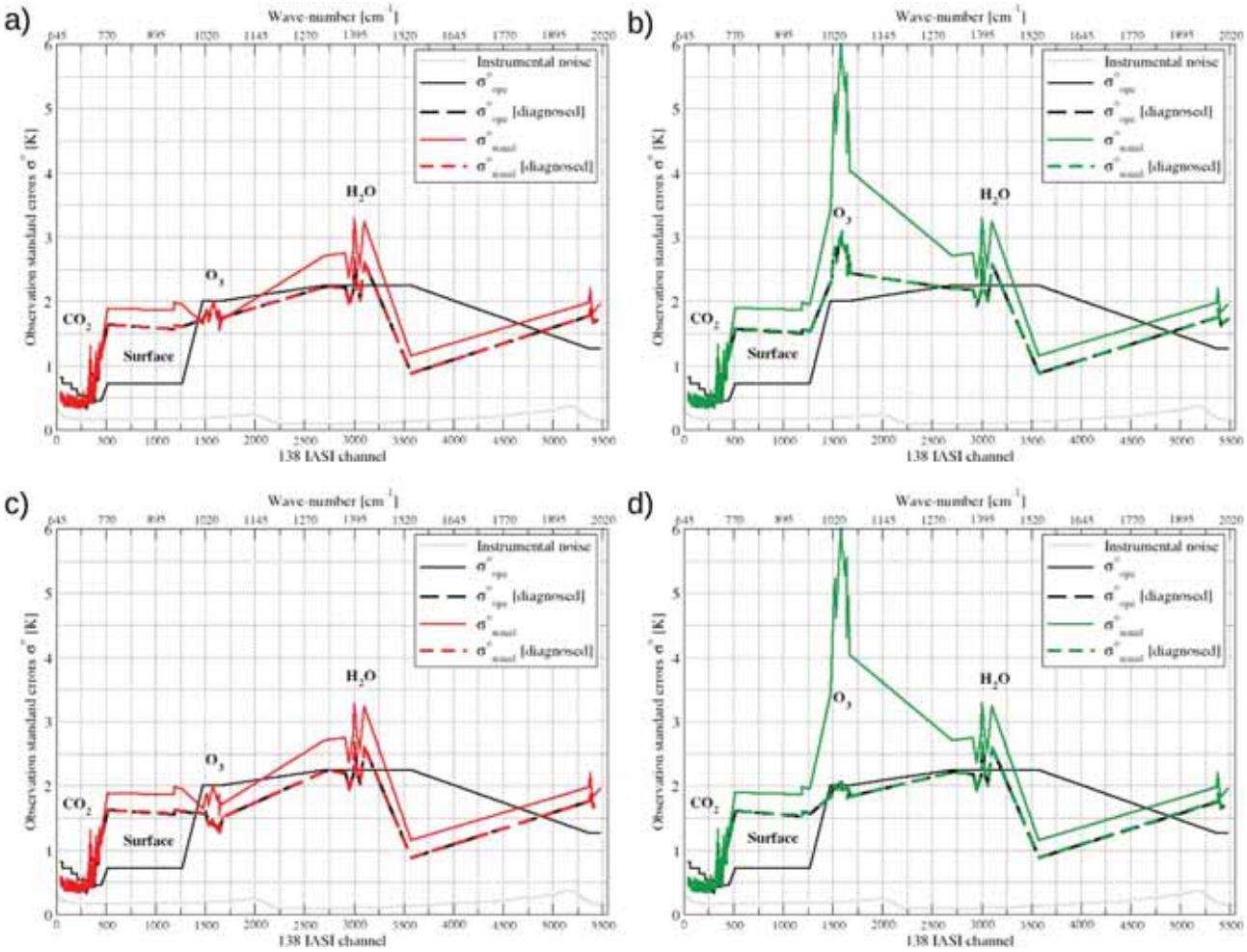


Figure 8. Operational observation errors (black line), diagnosed operational observation standard errors (black dashed), simulated observation standard errors using O3MOC (red line) (a) or O3REF (green line) (b) and diagnosed simulated observation standard errors using O3MOC (red dashed) (a) or O3REF (green line) (b) with respect to 138 IASI channels and experiments without ozone in the control variable. Operational observation standard errors (black line), diagnosed operational observation standard errors (black dashed), simulated observation standard errors using O3MOC (red line) (c) or O3REF (green line) (d) and diagnosed simulated observation standard errors using O3MOC (red dashed) (c) or O3REF (green line) (d) with respect to 138 IASI channels and experiments with ozone in the control variable.

thus ozone background error covariance matrix $\tilde{\mathbf{B}}_{O_3}$, where $\mathbf{Cov}_{O_3}$ are ozone background error covariances such as

$$\tilde{\mathbf{Corr}}_{O_3}(i,j) = \left[\frac{\mathbf{Cov}_{O_3}(i,j)}{\sqrt{\left(\sigma^b_{O_3}\right)^2_i \cdot \left(\sigma^b_{O_3}\right)^2_j}}\right].mask_i(j)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}_{O_3}(i,j) = \widetilde{\mathbf{Corr}}_{O_3}(i,j).\sqrt{\left(\sigma^b_{O_3}\right)^2_i \cdot \left(\sigma^b_{O_3}\right)^2_j}$$

We obtain a full background error covariance matrix $\tilde{\mathbf{B}}$ containing variances and covariances of temperature, humidity and ozone. In this study, we have decided not to take into account cross-correlation between ozone temperature and ozone humidity. This assumption allows the feedback effects of ozone on temperature and humidity to be overcome. (Dethof & Holm, 2004).

We observe values of σ_T^b around 0.5 and 1.5 K between 1,000 and 10 hPa, then values increase up to 5.5 K at 0.1 hPa (Figure 6a). Figure 6b shows $\sigma_{log(q)}^b$ values between 0.05 and 0.45 from the surface to 100 hPa. Finally, Figure 6c shows $\sigma_{O_3}^b$ values for ozone from O3MOC on the line and ozone from O3REF on the green line. We note larger values of $\sigma_{O_3}^b$ for O3REF than O3MOC especially between 200 and 5 hPa with respect to the increase in ozone concentration. Inversely, above 5 hPa, $\sigma_{O_3}^b$ values are slightly larger for O3MOC than O3REF and more above 0.4 hPa.

Concerning temperature, the highest background error correlations are observed at the surface and in the lower troposphere (Figure 7). High background error correlations across all atmospheric columns for humidity are noted especially near the surface. A slightly higher ozone correlation for O3REF than for O3MOC is observed in the troposphere and the lower stratosphere with respect to large values of $\sigma_{O_3}^b$ for O3REF than O3MOC seen in Figure 7. In this study, the univariate ozone background covariance error matrices were chosen because calculating the cross-covariance between ozone-humidity and ozone-temperature would prove too complex in this preparatory framework.

4.3. Observation Errors

Diagonal observation-error covariance matrices only give a narrow description of the observation errors. Observation error covariances between channels however may exist, in particular due to the observation operator $\mathcal{H}$. Nevertheless, they are used in 4D-Var data assimilation for the global model ARPEGE. In our study, we have initialized the observation standard errors using values that stem from ARPEGE for the 123 operational and 15 ozone-sensitive channels $\left(\sigma_{ope}^o\right)$ (black line in Figure 8).

These observation standard errors are not adapted to our study in a 1D-Var framework however. A first step toward the estimation of realistic observation standard errors is to use standard deviation derived from the differences between IASI simulation and observation using both pieces of ozone information computed in section 3. This produces simulated observation standard errors $\left(\sigma_{simul}^o\right)$ using O3MOC (red line) or O3REF (green line) shown respectively in Figures 8a and 8c and 8b and 8d. We can see larger values of σ_{simul}^o for IASI surface sensitive channels than σ_{ope}^o. The large values of observation standard errors for surface sensitive and WV channels may be caused by cloudy cases and/or a wrong skin temperature unidentified during data filtering. The larger values of σ_{simul}^o for IASI ozone-sensitive channels simulated using O3REF are also present, compared with those simulated using O3MOC. This is a useful first approach, but these observation standard errors do not take into account the cross-correlation between channels.

In order to estimate the observation standard errors and more generally the structure of the observation error covariance matrix $\widetilde{\mathbf{R}}$, a diagnostic method introduced by (Desroziers et al., 2005) was used. Background and observation error covariance matrices can be estimated from observation departures to background and analysis. These diagnosed matrices allow the investigation of the "a priori" prescribed matrices, before analysis, are correctly specified. Taking the expected value of the cross product of $\mathbf{d}_a^o$ and $\mathbf{d}_b^o$, and using the assumption of uncorrelated errors, Desroziers et al. (2005) found a statistical approximation for the observation error covariance matrix $\tilde{\mathbf{R}}$ as mean diagnosed matrix after iterations which reads:

$$\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{E}\left[\mathbf{d}_a^o \left(\mathbf{d}_b^o\right)^T\right]$$

where the vector of analysis residuals $\mathbf{d}_a^o$ is the difference between observations $\mathbf{y}$ and the analysis state projected onto the observation space $\mathcal{H}(\mathbf{x}^a)$ such as $\mathbf{d}_a^o = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^a)$ and the innovation $\mathbf{d}_b^o$. These revised matrices can be used for a new series of 1D-Var. This iterative method provides an updated version of the observation error covariance matrix $\widetilde{\mathbf{R}}$ with diagnosed observation standard errors. A set of 10 diagnostic iterations has been carried out. The updated $\widetilde{\mathbf{R}}$ matrix allows the calculation of a new analysis $\widetilde{\mathbf{x}^a}$. Desroziers diagnostic is commonly used by the assimilation community, at the MetOffice (Weston et al., 2014), and at the ECMWF (Bormann et al., 2011).

In Figure 8, we observe a decrease of diagnosed observation standard errors for surface-sensitive, ozone-sensitive and WV channels compared to simulated observation standard errors. We note a difference between diagnosed observation standard errors for ozone-sensitive channels with or without ozone in the control variable. Indeed, in Figure 8c, diagnosed observation standard errors for ozone-sensitive channels with ozone in the control variable are lower around 0.5 K than those without ozone in the control variable in Figure 8a. Also, in Figure 8d, diagnosed observation standard errors for ozone-sensitive channels with ozone in the control variable are lower around 1 K than those without ozone in the control variable in Figure 8b.

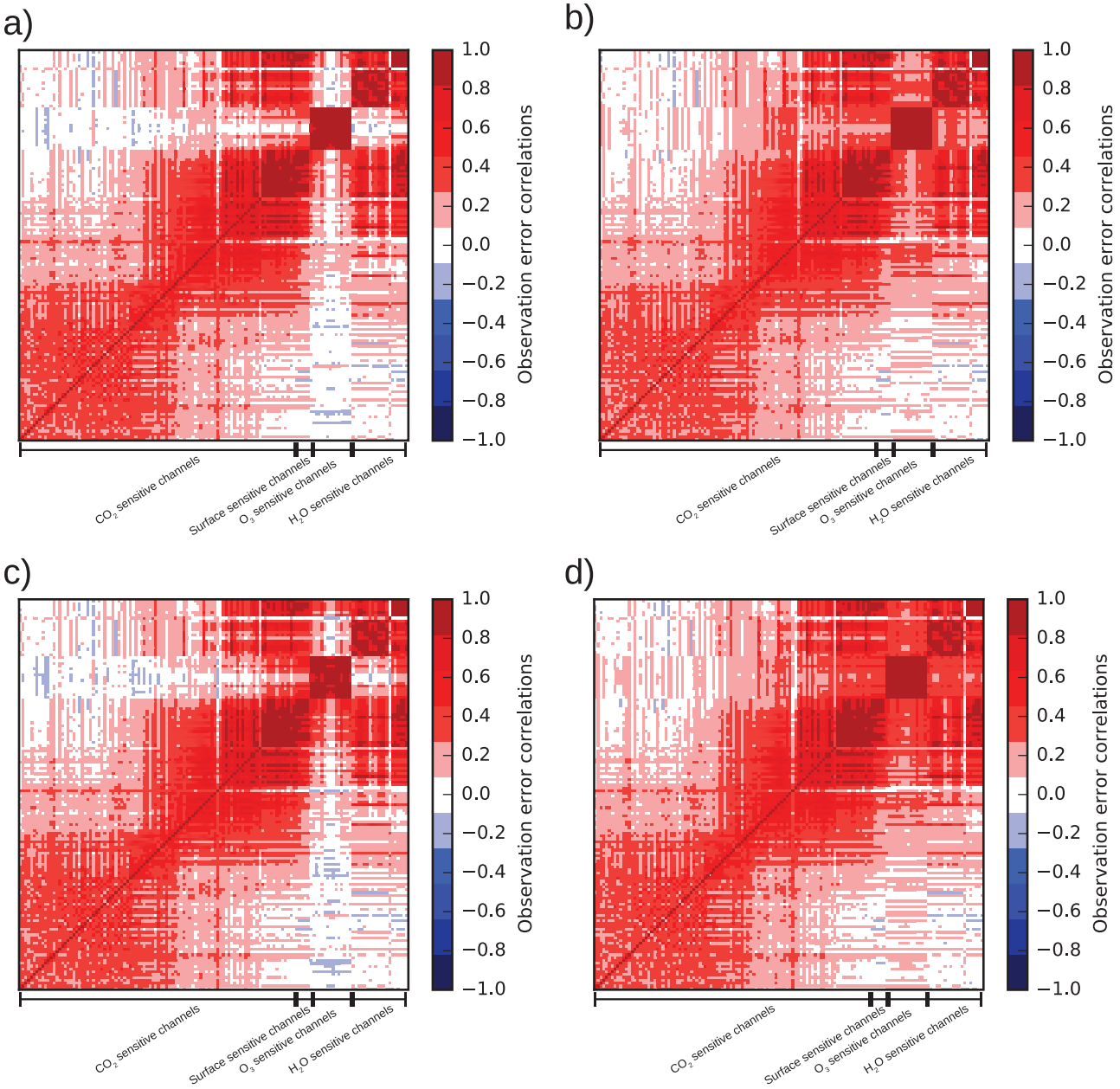


Figure 9. Observation error correlation for diagnosed observation standard error derived from σ^o_{simul} respectively using ozone information from O3MOC (a) and O3REF (b) without ozone in the control variable and observation error correlation for diagnosed observation standard error derived from σ^o_{simul} respectively using ozone information from O3MOC (c) and O3REF (d) with ozone in the control variable with respect to 138 IASI channels.

As ozone profiles are modified during 1D-Var with ozone in the control variable, this may help to better characterize the observation errors in the Desroziers method. Despite differences between σ^o_{ope} and σ^o_{simul} to diagnosed observation standard error, it is comforting to converge toward the same values. To this end, we have used diagnosed observation error covariance matrix for 1D-Var experiments. Finally, Figure 9 describes the cross-correlation between 138 IASI channels. We observe larger cross-correlations between ozone sensitive channels and other channels using O3REF than O3MOC. Figure 9c and d shows diagnosed observation

Table 2
Summary of 1D-Var Assimilation Experiments

Experiments	$\mathbf{x}^b_{O_3}$	Observation error	Background error	IASI channels assimilated
123-MOC	O3MOC	$\widetilde{\mathbf{R}}$ initialized by σ^o_{simul} for O3MOC	$\widetilde{\mathbf{B}}$ with $\sigma^b_{O_3}$ for O3MOC	123
123-REF	O3REF	$\widetilde{\mathbf{R}}$ initialized by σ^o_{simul} for O3REF	$\widetilde{\mathbf{B}}$ with $\sigma^b_{O_3}$ for O3REF	123
138-MOC	O3MOC	$\widetilde{\mathbf{R}}$ initialized by σ^o_{simul} for O3MOC	$\widetilde{\mathbf{B}}$ with $\sigma^b_{O_3}$ for O3MOC	123 +15 O_3
138-REF	O3REF	$\widetilde{\mathbf{R}}$ initialized by σ^o_{simul} for O3REF	$\widetilde{\mathbf{B}}$ with $\sigma^b_{O_3}$ for O3REF	123 + 15 O_3

standard error derived by σ^o_{simul} respectively using ozone information from O3MOC and O3REF with ozone in the control variable. Observation error correlation is sightly larger with ozone in the control variable than without.

4.4. Scores for Retrieval Evaluation

To evaluate the impact of IASI ozone sensitive channels on retrievals, 1D-Var experiments have been run for 123 IASI operational channels and 123 +15 IASI ozone-sensitive channels with ozone information derived from O3MOC or O3REF, after which two pairs of experiments remain. Investigations were conducted within a simplified framework such as the one-dimensional variational data assimilation. Indeed, 1D-Var is a common method used in research because of its low computing cost. Here, data assimilation experiments include ozone in the control variable, in addition to temperature, humidity and surface parameters. Diagnosed observation error covariance matrix $\widetilde{\mathbf{R}}$ and background error covariance matrix $\widetilde{\mathbf{B}}$ previously established were used. The experimental setting is summarized in Table 2.

To evaluate improvement of analysis (temperature, humidity and ozone retrievals), we calculated the sum of relative error reductions (REDs) of retrievals compared to background with respect to radiosonde for temperature (RED_T), humidity (RED_q), and ozone (RED_{O_3}) for 161 profiles. Evaluation criteria are crucial for the assessing of the quality impact on retrieved thermodynamic and chemical profiles. These criteria are calculated according to the formula:

$$RED_T = \sum_{i=1}^{n_T} \left[\frac{sd\left(\mathbf{x}^b_{T_i} - \mathbf{x}^v_{T_i}\right) - sd\left(\widetilde{\mathbf{x}}^a_{T_i} - \mathbf{x}^v_{T_i}\right)}{sd\left(\mathbf{x}^b_{T_i} - \mathbf{x}^v_{T_i}\right)} \right]$$

$$RED_q = \sum_{i=1}^{n_q} \left[\frac{sd\left(\mathbf{x}^b_{q_i} - \mathbf{x}^v_{q_i}\right) - sd\left(\widetilde{\mathbf{x}}^a_{q_i} - \mathbf{x}^v_{q_i}\right)}{sd\left(\mathbf{x}^b_{q_i} - \mathbf{x}^v_{q_i}\right)} \right]$$

$$RED_{O_3} = \sum_{i=1}^{n_{O_3}} \left[\frac{sd\left(\mathbf{x}^b_{O_3 i} - \mathbf{x}^v_{O_3 i}\right) - sd\left(\widetilde{\mathbf{x}}^a_{O_3 i} - \mathbf{x}^v_{O_3 i}\right)}{sd\left(\mathbf{x}^b_{O_3 i} - \mathbf{x}^v_{O_3 i}\right)} \right]$$

Using the standard deviation (sd), at each vertical level i, n_T and n_{O_3} being the number of 54 vertical temperature and ozone levels and n_q being the number of 29 vertical levels for humidity, $\widetilde{\mathbf{x}}^a_i$ the retrieval using diagnosed $\tilde{\mathbf{R}}$ matrix and $\mathbf{x}^b_i$ the background minus $\mathbf{x}^v_i$ the verification data from radiosondes.

In addition, in order to quantify the information of 15 IASI ozone-sensitive channels to retrievals, we calculated the DFS (Degree of Freedom for Signal) for temperature, humidity and ozone with respect to pressure levels. Indeed, DFS provides a measure of the gain in information gathered by the observations (Rodgers, 2000) (Fisher, 2003). Here, DFS is calculated with the background error covariance matrix $\widetilde{\mathbf{B}}$ and the analysis error covariance matrix $\mathbf{A}$. $DFS = Tr(\mathbf{I} - \mathbf{A}\widetilde{\mathbf{B}}^{-1})$, where Tr is the trace of matrix.

5. Results of 1D-Var Assimilation

5.1. Evaluation in the Observation Space

The impact of adding 15 IASI ozone-sensitive channels including the ozone in the control variable of the 1D-Var is evaluated. First, we can calculate the difference between IASI observations and simulations from the retrieved profiles, $\mathbf{d}^o_a$ or (O-A) here after. We observe for 123-MOC and 123-REF experiments where whichever

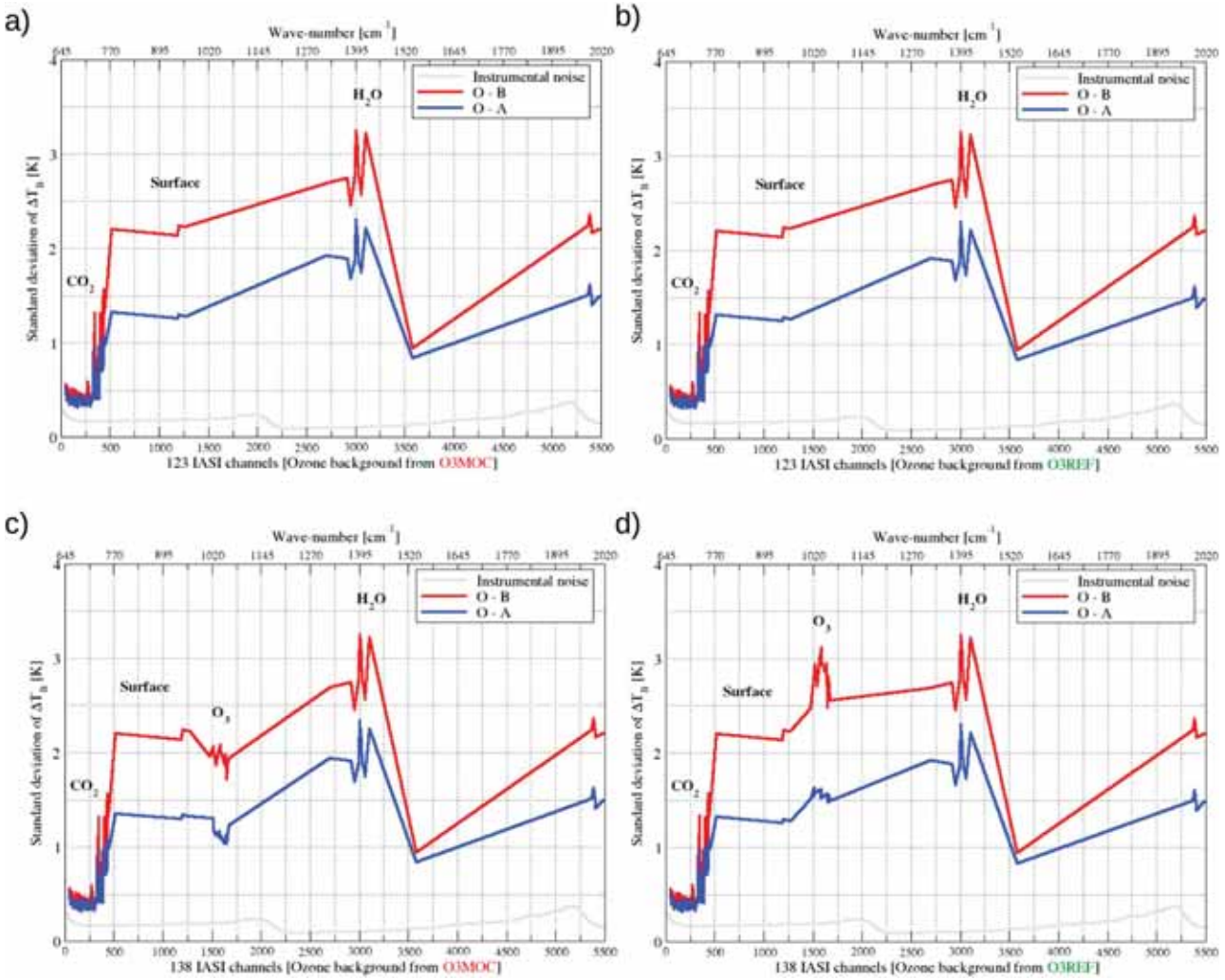


Figure 10. Standard deviation of the innovations (O-B) in red line and analysis residuals (O-A) in blue line for 123-MOC (a) and 123-REF (b) experiments with respect 123 IASI operational channels and for 138-MOC (c) and 138-REF (d) experiments with respect 123 + 15 IASI ozone-sensitive channels.

ozone background used, we obtain similar values between Figures 10a and 10b. Standard deviation of (O-A) are much lower when compared to standard deviation of [O-B] especially for surface-sensitive and WV sensitive IASI channels. These results were expected and indicated that the assimilation process works. We then added 15 IASI ozone-sensitive channels in 138-MOC and 138-REF experiments. Between Figure 10c and 10d, we can note a difference between standard deviation of [O-B] for 138-MOC and 138-REF experiments around 1 K. However, the difference between standard deviation of (O-A) for 138-MOC and 138-REF is around 0.5 K. Differences between statistics of 138-MOC and 138-REF are lower after the 1D-Var than before, which seems to indicate that ozone retrievals are closer to each other than to ozone background. These results shows that an inaccurate representation of the state vector in the ozone background, affects the posterior state.

5.2. Evaluation of the Analysis Standard Errors

Figure 11a and b, show the reduction of temperature, humidity and ozone analysis standard errors (σ^a) for (123-MOC/REF) and (138-MOC/REF) experiments compared to background standard errors. The former are lower than the latter, as 1D-Var attempts to minimize the error variance. Very few differences are observed for σ^a of temperature and humidity between (123-MOC/REF) and (138-MOC/REF) experiments. We note that σ^a of temperature and humidity from 138-MOC experiments are 1% smaller than 138-REF in the troposphere

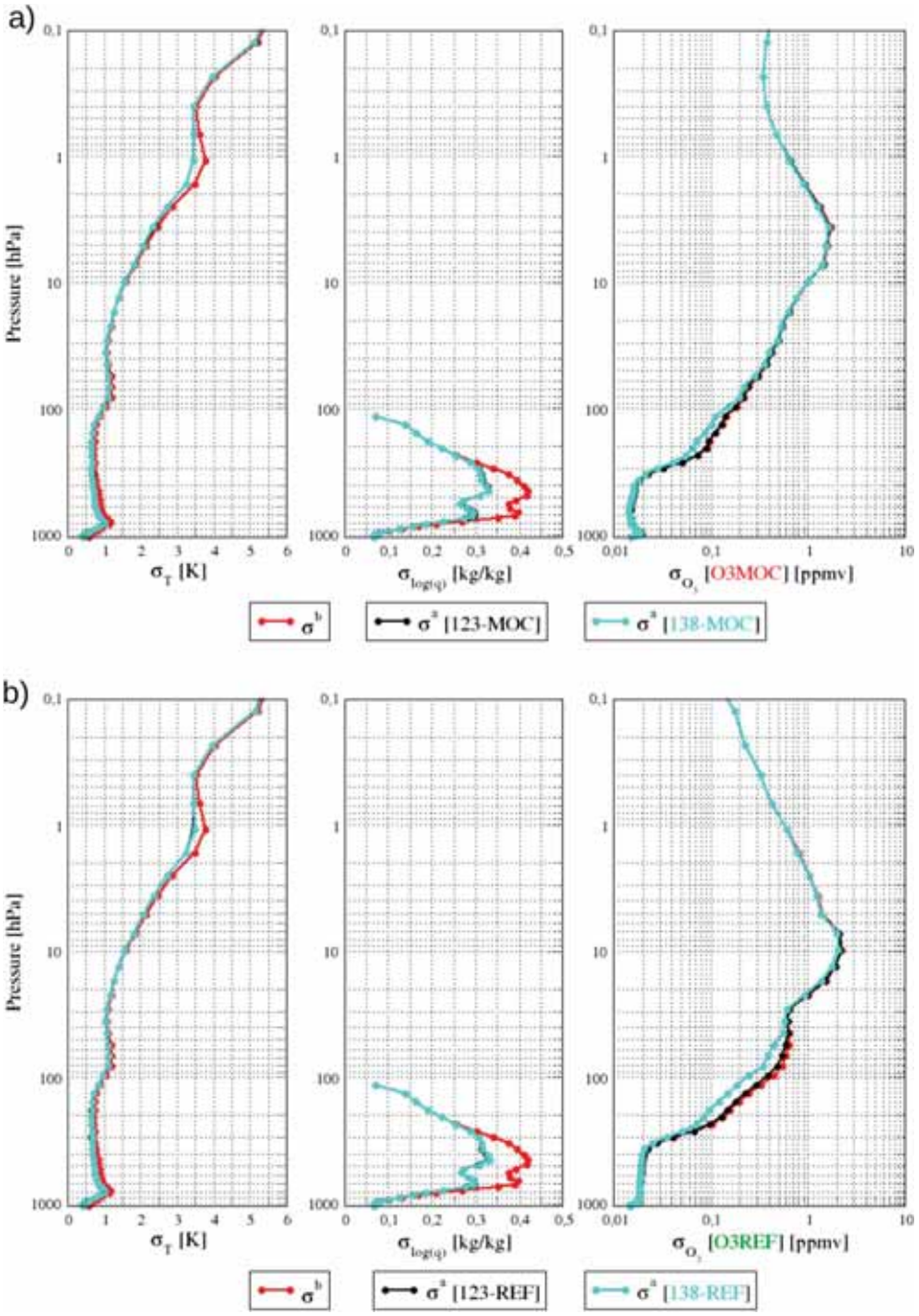


Figure 11. Background σ^b (in red line) and analysis σ^a standard errors of temperature σ_T, humidity $\sigma_{log(q)}$ and ozone σ_{O_3} for (123-MOC on the black line and 138-MOC in turquoise line) (a) and (123-REF on the black line and 138-REF on the turquoise line) (b) experiments with respect to pressure levels.

Table 3
Summary of the Results for Sum of Relative Error Reduction and DFS Averaged Over Vertical Levels for 123-MOC/REF and 138-MOC/REF Experiments

	Error reduction			Degree of Freedom for Signal		
Experiments	RED_T (%)	RED_q (%)	RED_{O_3} (%)	DFS_T	DFS_q	DFS_{O_3}
123-MOC	2.82	6.22	−0.34	4.07	2.45	0.14
138-MOC	2.87	6.44	2.79	4.12	2.49	1.54
123-REF	2.73	6.22	0	4.06	2.45	0.43
138-REF	3.03	6.70	3.34	3.96	2.41	1.96

between 700 and 300 hPa. We note a better reduction for σ^a of humidity from the 138-MOC experiment than from 138-REF. Obviously, a larger reduction of analysis standard errors are obtained for ozone. We observe a slight difference between σ^b and σ^a of ozone for 123-MOC/REF experiments. Reduction of σ^a for ozone from 138-MOC/REF experiments compared to 123-MOC/REF is more important for 138-REF, between 300 and 30 hPa because σ^b of ozone from O3REF are larger than O3MOC and thus, ozone analysis of O3REF can differ more from the background. This location is consistent with ozone Jacobians as we have seen in Figure 1c. However, σ^a of ozone from the 138-MOC experiment are 20% smaller than 138-REF in the troposphere between 700 and 300 hPa and 40% in the stratosphere between 100 and 10 hPa. As some IASI CO_2 sensitive channels are also sensitive to ozone, they can also modify the ozone profile during the 1D-Var.

5.3. Evaluation of the Retrievals

Hereafter, positive values of error reduction (RED) mean that retrievals from 123-MOC/REF or 138-MOC/REF are better than background. Conversely, negative values mean that retrievals are worse than background. The results of RED and DFS are averaged over vertical levels for experiments and summarized in Table 3. Assessments of temperature, humidity and ozone retrieval biases compared to background biases using SONDE as verification for our experiments shows no significant differences (not shown).

• Impact on temperature

In Figure 12a very few differences are observed for RED_T vertical profiles between 123-MOC and 138-MOC, with a 0.05% increase for RED_T in 138-MOC compared to 123-MOC. Improvement comes through using ozone background from O3REF in Figure 12b with a 0.30% increase for RED_T in 138-REF compared to 123-REF. The values of DFS_T for 123-MOC and 123-REF experiments are similar. DFS_T is slightly higher for the 138-MOC experiment (4.12) than the 138-REF (3.96) indicating a better use of IASI ozone-sensitive channels with ozone background from O3MOC to improve temperature retrievals.

• Impact on humidity

RED_q vertical profiles show no differences for experiments between 123-MOC in Figure 12c and 123-REF in Figure 12d. Improvement for humidity is greater than for temperatures with a 0.22% increase for RED_q in 138-MOC compared to 123-MOC and 0.48% for 138-REF compared to 123-REF. These improvements of RED_q vertical profiles provided by 15 IASI ozone-sensitive channels in 138-MOC/REF experiments are located between 1,000–800 hPa and 400–100 hPa. Results are consistent with humidity Jacobians of these channels (see Figure 1b). Similar, values of DFS_q for 123-MOC and 123-REF experiments are observed. DFS_q is slightly greater for the 138-MOC experiment (2.49) than the 138-REF (2.41) indicating a better use of IASI ozone-sensitive channels with ozone background from O3MOC in order to improve humidity retrievals.

• Impact on ozone

Without ozone-sensitive channels, RED_{O_3} vertical profiles for the 123-MOC experiment shows a degradation in Figure 12e and for 123-REF in Figure 12f. As expected, major improvements for ozone retrievals are obtained when adding 15 IASI ozone-sensitive channels in 138-MOC/REF experiments. Better improvement of RED_{O_3} is achieved this time using ozone background from O3REF with a 3.34% increase in the 138-REF experiment compared to 138-MOC and with 2.45%. Vertical level pressure of these improvements differ between 138-MOC and 138-REF with a relative improvement across all atmospheric profiles for 138-MOC. For 138-REF improvement is between 600 and 30 hPa beyond which RED_{O_3} vertical profile is degraded. DFS_{O_3} vertical profiles also differ between 138-MOC (1.54) and 138-REF (1.96). Two explanations can be suggested for the

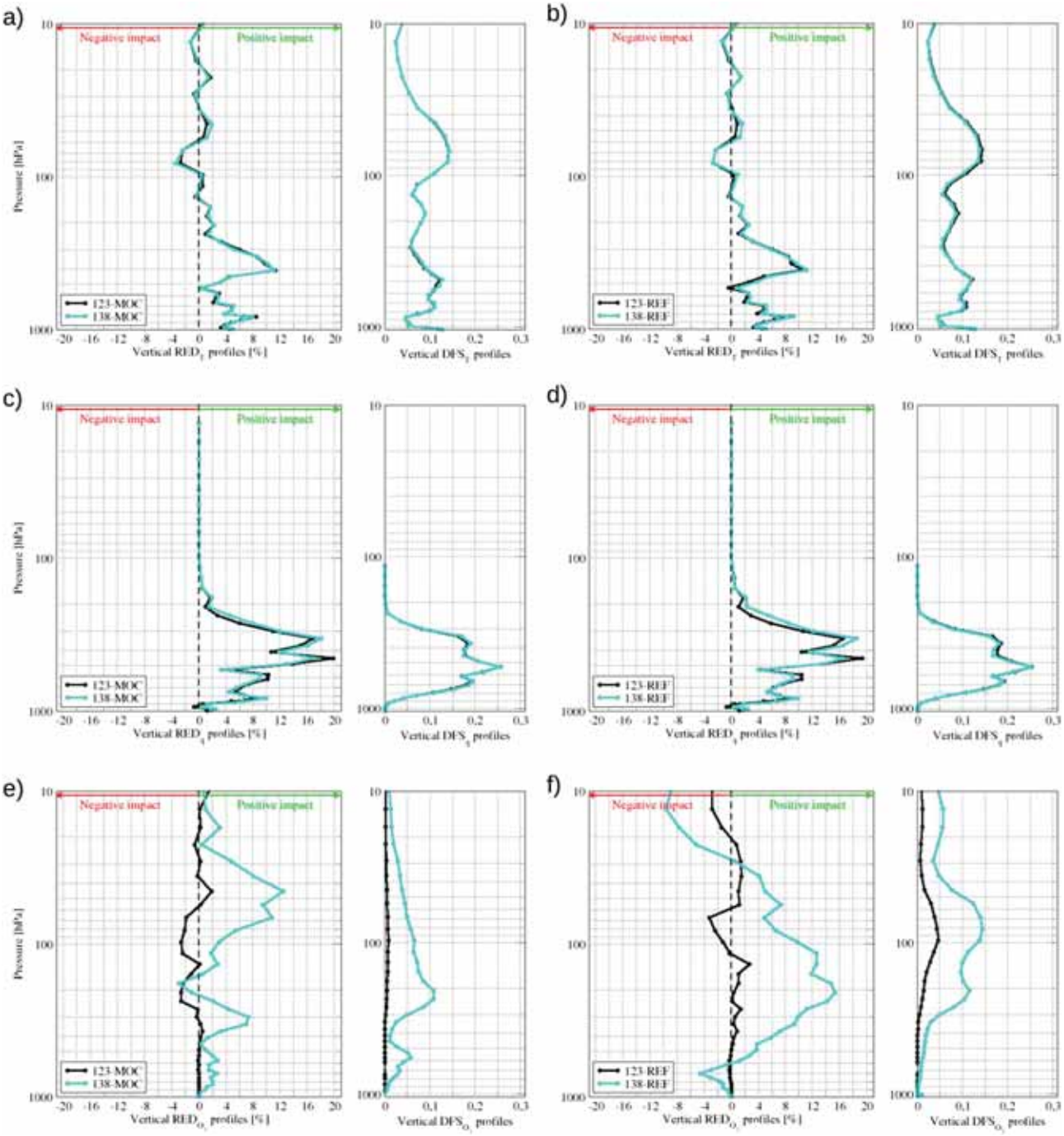


Figure 12. Vertical Degree of Freedom for Signal (DFS) and vertical RED of retrievals (123-MOC/REF on the black line and 138-MOC/REF on the turquoise line) compared to background with respect to radiosonde for temperature using ozone background from O3MOC (a) and O3REF (b), for humidity using ozone background from O3MOC (c) and O3REF (d) and for ozone using ozone background from O3MOC (e) and O3REF (f) with respect to pressure.

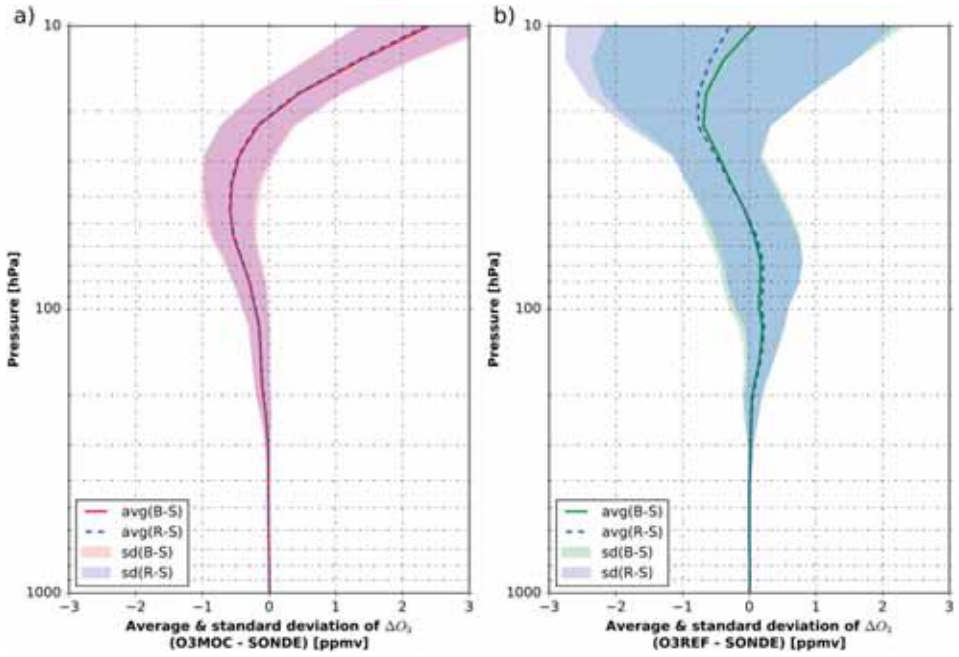


Figure 13. Average and standard deviation of differences between ozone background minus SONDE (B − S) and retrieval minus SONDE (R − S) for 138-MOC (a) and 138-REF (b) with respect to pressure.

differences. Firstly, ozone background errors of O3MOC and O3REF differ; $\widetilde{\mathbf{B}}_{O_3}$ of O3REF has larger ozone background errors than O3MOC, allowing a higher degree of freedom to adjust the O3REF ozone background. Secondly, differences between both DFS_{O_3} were also influenced by Jacobians, which vary depending on ozone background.

Finally, we can evaluate ozone retrievals that come from 138-MOC/REF directly against SONDE. Figure 13 shows average and standard deviation of differences between ozone retrievals and SONDE using ozone background that comes from O3MOC (a) or O3REF (b) in addition to similar statistics between ozone background and SONDE shown in Figure 4 (section 2.3.2). (B − S) means background minus SONDE for ozone from O3MOC (red line) and O3REF (green line). (R − S) means retrieval minus SONDE ozone background (O3MOC (a) or O3REF (b)) and SONDE (blue pulled). In Figure 13a, biases of (R − S) are close to biases of (B − S), and better between 20 and 10 hPa. In addition, standard deviations of (R − S) are generally smaller compared to standard deviations of (B − S) over the entire atmospheric column. While on Figure 13b for O3REF, biases of (R − S) are not as accurate good as biases of (B − S) from the surface to 10 hPa. Standard deviations of (R − S) are smaller than standard deviations of (B − S) from surface to 30 hPa and larger between 30 and 10 hPa. Thus, standard deviation of (R − S) using O3MOC is 40% smaller than standard deviation of (R − S) using O3REF from surface to 200 hPa, 60% between 200 and 30 hPa and 65% between 30 and 10 hPa. These results confirm that ozone which originates from O3MOC is the best ozone background to use to improve respectively temperature, humidity, and ozone retrievals.

6. Conclusions and Discussions

This work is part of the ambition to move toward coupled data assimilation between Numerical Weather Prediction and CTM by means of infrared satellite observations. At Météo-France, the 4D-Var assimilation system in the global NWP model ARPEGE uses only 123 IASI channels out of 314 monitored. Information on atmospheric composition for the assimilation of radiances from the IASI infrared sounder uses concentrations of some gases that vary neither in time nor in space. In this study, a simplified framework is used: 15 IASI ozone-sensitive channels have been assimilated in a 1D-Var in addition to IASI operational channels using realistic ozone profiles, which originate from MOCAGE CTM.

A data impact study with 1D-Var analysis was conducted from April 2014 to March 2015, on 161 background profiles collocated with clear-sky IASI pixels and radiosondes. Preliminarily, both pieces of ozone information originating from MOCAGE CTM (O3MOC) and RTTOV reference profile (O3REF) were evaluated through the comparison of simulations of the IASI observations. This study has shown that the use of realistic ozone information from O3MOC input of the RTTOV RTM allows better stimulation of IASI ozone-sensitive channel radiances than the use of ozone reference from O3REF. These results were expected and take into account the spatial and temporal variability of ozone in MOCAGE CTM. Indeed, statistics of differences between both ozone information and radiosondes show a standard deviation twice the size for O3REF than O3MOC.

These are useful results for the estimation of realistic observation standard errors used as diagonal observation covariance error matrix **R** for 1D-Var assimilation processes. They are then compared to operational standard errors used in 4D-Var ARPEGE thus not adapted for our case. Filtering of 161 clear-sky cases have definitely overlooked a few cloudy cases identified by the high standard deviation of [O-B] differences of IASI surface sensitive channels however. Hence, we have calculated a new $\widetilde{\mathbf{R}}$ from Desroziers' diagnostic, which allows the estimation of realistic observation standard errors taking into account the full cross-correlation from the iterative method. To extract the maximum amount of information that comes from IASI ozone sensitive channels, we should consider ozone background standard errors. To achieve this, we have added ozone to the 1D-Var control variable and estimated a new background covariance error matrix $\widetilde{\mathbf{B}}$ including ozone errors for O3MOC or O3REF.

The impact of 15 IASI ozone sensitive channels on the analysis was evaluated with RED of temperature, humidity, and ozone analyses compared to background with respect to radiosondes and DFS. Results of 1D-Var retrievals show that besides the significant improvement of ozone analysis, IASI ozone-sensitive channels provide additional information in order to improve temperature and humidity analyses, especially as the error reduction is increasing by 2.0% between 400 and 200 hPa. What is more, ozone DFS showed that IASI ozone-sensitive channels covering the large part of the vertical atmospheric range are able to provide additional information at levels where carbon dioxide and WV sensitive channels are less sensitive. Different results using either O3MOC or O3REF are explained by ozone standard errors in $\widetilde{\mathbf{B}}$ matrix. In addition, the low number of cases (161), does not enable us to take into account realistic error variability. Assimilation of these ozone-sensitive channels allows however the substantial improvement of ozone retrievals and the increase of the error reduction by up to 11.0% for O3MOC background at 45 hPa. The main conclusion is that it is possible to improve temperature and humidity analyses of ARPEGE by adding IASI ozone-sensitive channels to in the assimilation system. This also allows us to improve ozone profiles especially at the level of atmospheric layers difficult to model by CTM.

The next step will be to use the same approach in 4D-Var ARPEGE. First of all, other IASI ozone-sensitive channels will be selected from the full IASI spectrum. Experiments show that 503 IASI channels are sensitive to ozone, composed of 18 between 714.5 and 754cm^{-1}, 314 between 989.25 and 1,081.5 cm^{-1}, and 171 between 2,071.25 and 2,131.25 cm^{-1}. Only channels in an ozone-sensitive band will be considered. Ozone will then be added to the 4D-Var ARPEGE control variable and a new ozone background covariance errors matrix will be calculated considering ozone errors using the NMC method (Jeuken et al., 1999) or an ensemble method (Massart et al., 2012) so as to calculate an ozone background covariance error matrix in near real time. Furthermore, the impact of additional ozone-sensitive channels using ozone information from MOCAGE CTM to thermodynamic forecast will be assessed.

Acknowledgments
This research has been conducted within the framework of O. Coopmann's PhD thesis, which is funded by CNES and the Région Occitanie. The authors would like to acknowledge Jean-François MAHFOUF and Jean-Antoine MAZIEJEWSKI for their help in revising and increasing the quality of the manuscript. The anonymous reviewers are thanked for previous guidance. Data of radiosondes are available through these websites: (WOUDC, available online at http://www.woudc.org; SHADOZ, available online at croc.gsfc.nasa.gov/shadoz/Archive.html, and NOAA/Earth System Research Laboratory (ESRL), and Global Monitoring Division (GMD) networks available online at ftp://ftp.cmdl.noaa.gov/ozwv/ozone/). IASI data are available from EUMETSAT or AERIS (https://www.aeris-data.fr/). Model data are available online at https://mycore.core-cloud.net/index.php/s/ZXupzclFXbCHCTb.

References

August, T., Klaes, D., Schlüssel, P., Hultberg, T., Crapeau, M., Arriaga, A., et al. (2012). IASI on Metop-A: Operational level 2 retrievals after five years in orbit. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, *113*(11), 1340–1371.

Berre, L., Varella, H., & Desroziers, G. (2015). Modelling of flow-dependent ensemble-based background-error correlations using a wavelet formulation in 4D-Var at météo-france. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *141*(692), 2803–2812.

Borbas, E. E., & Ruston, B. C. (2011). *The RTTOV UWiremis IR Land Surface Emissivity Module*. Darmstadt.: EUMETSAT.

Bormann, N., Geer, A. J., & Bauer, P. (2011). Estimates of observation-error characteristics in clear and cloudy regions for microwave imager radiances from Numerical Weather Prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *137*(661), 2014–2023.

Bouttier, F., & Kelly, G. (2001). Observing-system experiments in the ECMWF 4D-Var data assimilation system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *127*(574), 1469–1488.

Cayla, F.-R. (2001). L'interféromètre iasi-un nouveau sondeur satellitaire haute résolution.

Chevallier, F., Di Michele, S., & McNally, A. P. (2006). *Diverse Profile Datasets from the ECMWF 91-Level Short-range Forecasts*. Shinfield Park, Reading: European Centre for Medium-Range Weather Forecasts.

Clerbaux, C., Boynard, A., Clarisse, L., George, M., Hadji-Lazaro, J., Herbin, H., et al. (2009). Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI/Metop sounder. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *9*(16), 6041–6054.

Collard, A. (2007). Selection of IASI channels for use in Numerical Weather Prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *133*(629), 1977–1991.
Derber, J. C., & Wu, W.-S. (1998). The use of Tovs cloud-cleared radiances in the NCEP SSI analysis system. *Monthly Weather Review*, *126*(8), 2287–2299.
Desroziers, G., Berre, L., Chapnik, B., & Poli, P. (2005). Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *131*(613), 3385–3396.
Dethof, A., & Holm, E. (2004). Ozone assimilation in the era-40 reanalysis project. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *130*(603), 2851–2872.
Donlon, C. J., Martin, M., Stark, J., Roberts-Jones, J., Fiedler, E., & Wimmer, W. (2012). The operational sea surface temperature and sea ice analysis (ostia) system. *Remote Sensing of Environment*, *116*, 140–158.
Dragani, R., & McNally, A. (2013). Operational assimilation of ozone-sensitive infrared radiances at ECMWF. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *139*, 2068–2080.
Fisher, M. (2003). *Estimation of Entropy Reduction and Degrees of Freedom for Signal for Large Variational Analysis Systems*. Shinfield Park, Reading: European Centre for Medium-Range Weather Forecasts.
Guedj, S., Karbou, F., & Rabier, F. (2011). Land surface temperature estimation to improve the assimilation of Seviri radiances over land. *Journal of Geophysical Research*, *116*, D14107. https://doi.org/10.1029/2011JD015776
Han, W., & McNally, A. (2010). The 4D-Var assimilation of ozone-sensitive infrared radiances measured by iasi. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *136*, 2025–2037.
Hilton, F., Antonelli, P., Calbet, X., Hultberg, T., Lavanant, L., Liu, X., et al. (2009). An investigation into the performance of retrievals of temperature and humidity from iasi.
Hilton, F., Armante, R., August, T., Barnet, C., Bouchard, A., Camy-Peyret, C., et al. (2012). Hyperspectral Earth observation from IASI: Five years of accomplishments. *bulletin of the american meteorological Society*, *93*(3), 347–370.
Jeuken, A., Eskes, H., Velthoven, P. v., Kelder, H., & Hólm, E. (1999). Assimilation of total ozone satellite measurements in a three-dimensional tracer transport model. *Journal of Geophysical Research*, *104*(D5), 5551–5563.
Lorenc, A. C., & Marriott, R. T. (2014). Forecast sensitivity to observations in the met office global Numerical Weather Prediction system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *140*(678), 209–224.
Lupu, C., & McNally, A. P. (2013). *Wind tracing with ozone-sensitive radiances from SEVIRI*. Shinfield Park, Reading: European Centre for Medium-Range Weather Forecasts.
Martinet, P., Lavanant, L., Fourrié, N., Rabier, F., & Gambacorta, A. (2014). Evaluation of a revised IASI channel selection for cloudy retrievals with a focus on the Mediterranean basin. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *140*(682), 1563–1577.
Massart, S., Piacentini, A., & Pannekoucke, O. (2012). Importance of using ensemble estimated background error covariances for the quality of atmospheric ozone analyses. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *138*(665), 889–905.
Matricardi, M. (2008). *The Generation of RTTOV Regression Coefficients for IASI and AIRS Using a New Profile Training Set and a New Line-by-line Database*. Shinfield Park, Reading: European Centre for Medium-Range Weather Forecasts.
Pougatchev, N., August, T., Calbet, X., Hultberg, T., Oduleye, O., Schlüssel, P., et al. (2009). IASI temperature and water vapor retrievals — Error assessment and validation. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *9*(17), 6453–6458.
Rodgers, C. D. (2000). *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice* (Vol. 2). Singapore: World Scientific.
Saunders, R. W., & Kriebel, K. T. (1988). An improved method for detecting clear sky and cloudy radiances from avhrr data. *International Journal of Remote Sensing*, *9*(1), 123–150.
Saunders, R., Matricardi, M., & Brunel, P. (1999). An improved fast Radiative Transfer Model for assimilation of satellite radiance observations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *125*(556), 1407–1425.
Semane, N., Peuch, V.-H., Pradier, S., Desroziers, G., Amraoui, L. E., Brousseau, P., et al. (2009). On the extraction of wind information from the assimilation of ozone profiles in météo–france 4-D-Var operational NWP suite. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *9*(14), 4855–4867.
Sherlock, V., & Saunders, R. (1999). ISEM-6: Infrared surface emissivity model for rttov-6 (*NWP-SAF report*), Bracknell.
Sic, B., El Amraoui, L., Marécal, V., Josse, B., Arteta, J., Guth, J., et al. (2015). Modelling of primary aerosols in the chemical transport model MOCAGE: Development and evaluation of aerosol physical parameterizations. *Geoscientific Model Development*, *8*(2), 381–408.
Weston, P., Bell, W., & Eyre, J. (2014). Accounting for correlated error in the assimilation of high-resolution sounder data. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *140*(685), 2420–2429.

7.4 Application de la méthode à la campagne APOGEE

7.4.1 Objectif et méthodologie

La campagne de mesure APOGEE nous a permis de réaliser des radiosondages mesurant des profils *in situ* de température, d'humidité et d'ozone. Ces profils peuvent être utilisés comme données de vérification et ont été l'occasion de tester la méthode mise en place précédemment à l'aide du 1D-Var. L'objectif de cette partie est de réaliser des expériences d'assimilation uni-dimensionnelle afin de restituer les profils de température, d'humidité et d'ozone. Pour évaluer la flexibilité de la méthode nous avons réalisé ces expériences avec deux types d'observations provenant de IASI et de CrIS, ainsi que deux sources d'ozone différentes issues de MOCAGE et de CAMS[2]. CAMS est un service du programme européen Copernicus utilisant le modèle C-IFS pour produire des prévisions des champs chimiques atmosphériques. La configuration de C-IFS au moment de l'extraction des profils d'ozone assimilait plusieurs instruments satellitaires tels que MLS, OMI, SBUV-2, GOME-2, IASI, MOPITT and TANSO-FTS. Elle fournissait des analyses et des prévisions à 5 jours de la composition chimique en temps réel à l'échelle globale et régionale.

Les expériences 1D-Var ont été réalisées en incluant l'ozone à la variable de contrôle et en utilisant la matrice **B** calculée dans l'étude précédente. Les profils d'ébauche thermodynamique (T, q, P_{surf}, T_{surf}, q_{surf}, T_{skin}, u, v) proviennent du modèle global ARPEGE et ont été extraits aux mêmes horaires et coordonnées que les radiosondages. Les différentes caractéristiques des expériences sont résumées dans le Tableau 7.2 :

	Configurations		
	Observations	Ébauche chimique (O_3)	Matrice R
EXP1	CrIS 68 canaux opérationnels 14 canaux sensibles à l'O_3	MOCAGE	Diagonale
EXP2	CrIS 68 canaux opérationnels 14 canaux sensibles à l'O_3	CAMS	Diagonale
EXP3	IASI 123 canaux opérationnels 15 canaux sensibles à l'O_3	MOCAGE	Diagnostiquée
EXP4	IASI 123 canaux opérationnels 15 canaux sensibles à l'O_3	CAMS	Diagnostiquée

TABLE 7.2: Tableau synthétisant les différentes configurations des expériences de restitution.

Les expériences EXP1 (ébauche d'ozone de MOCAGE) et EXP2 (ébauche d'ozone de CAMS) assimilent les observations issues de CrIS parmi les 68 canaux utilisés en opérationnel ainsi que 14 canaux monitorés, sensibles à l'ozone. Les assimilations 1D-Var sont réalisées pour les cas d'étude du 04 juillet 2017 à 02 UTC et 12 UTC. Les expériences EXP3 (ébauche d'ozone de MOCAGE) et EXP4 (ébauche d'ozone de CAMS) assimilent les observations issues de IASI parmi les 123 canaux utilisés en opérationnel ainsi que 15 canaux monitorés, sensibles à l'ozone. Les assimilations 1D-Var sont réalisées pour les cas d'étude du 01 juin 2017 à 10 UTC et 04 juillet 2017 à 09 UTC. Les expériences assimilant les observations issues de IASI utilisent la matrice **R** diagnostiquée estimée dans l'étude précédente, tandis que les expériences assimilant les observations issues de CrIS utilisent les erreurs prescrites en opérationnel et une matrice **R** diagonale. Ainsi les expériences d'assimilation nous fournissent la restitution des profils de température, humidité, ozone et peuvent être comparées aux ébauches et aux données de vérification.

[2]Copernicus Atmospheric Monitoring Services

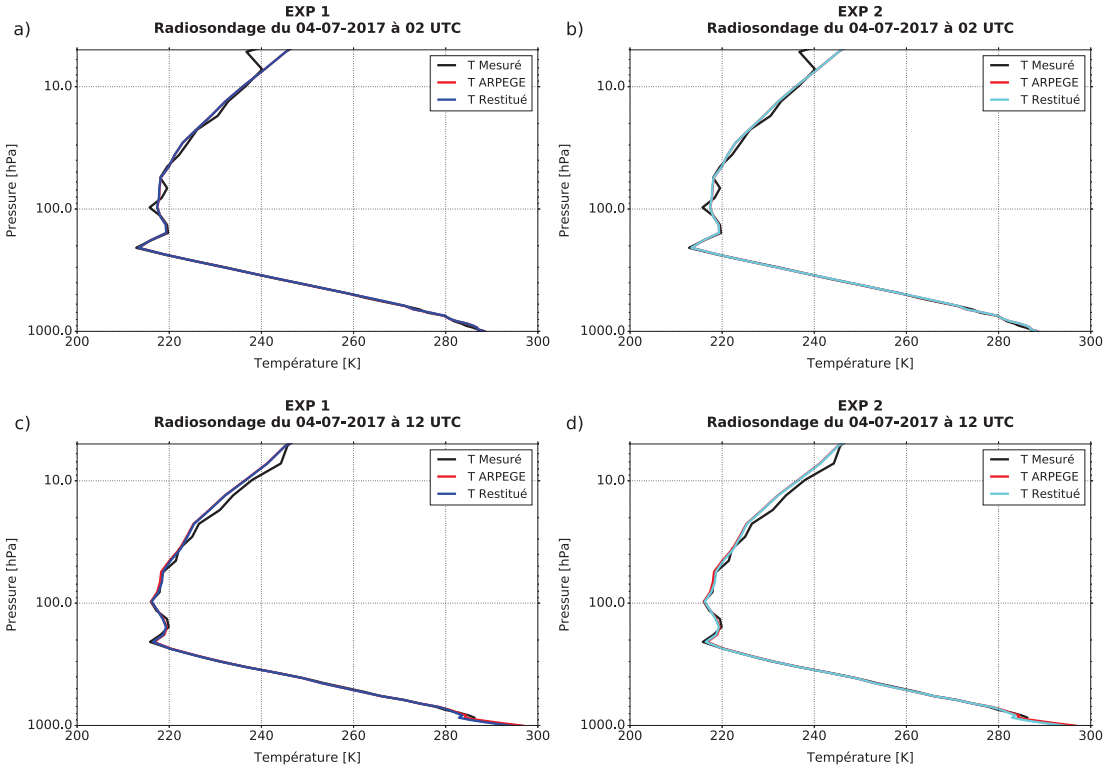


FIGURE 7.7: Profils *in situ* de température (en noir) mesurés le 04 juillet 2017 à 02 UTC (a et b) et à 12 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 1 et EXP 2 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan).

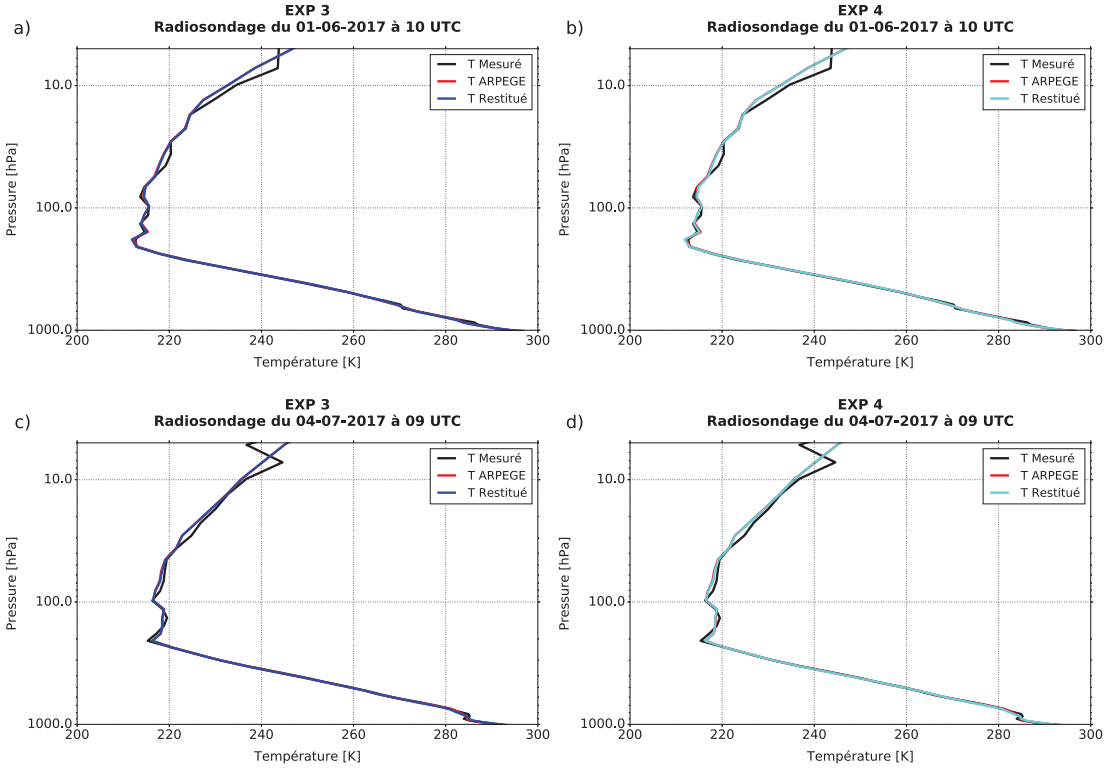


FIGURE 7.8: Profils *in situ* de température (en noir) mesurés le 06 juin 2017 à 10 UTC (a et b) et 04 juillet 2017 à 09 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 3 et EXP 4 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan).

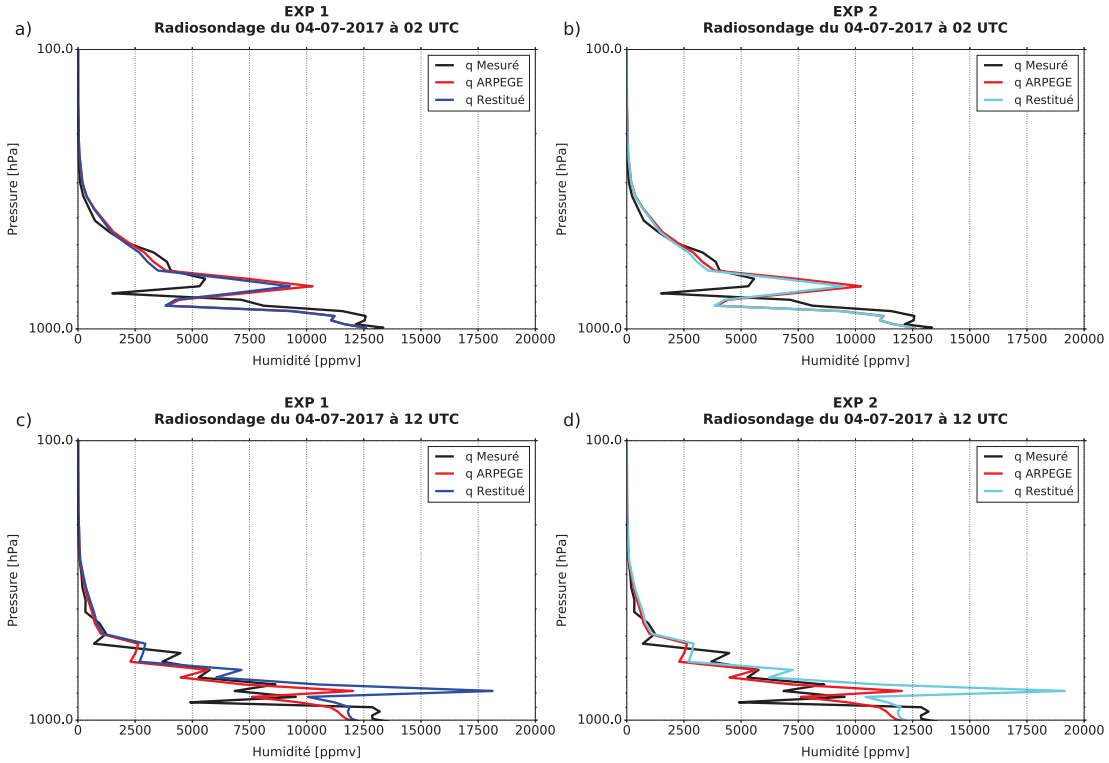


FIGURE 7.9: Profils *in situ* d'humidité (en noir) mesurés le 04 juillet 2017 à 02 UTC (a et b) et à 12 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 1 et EXP 2 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan).

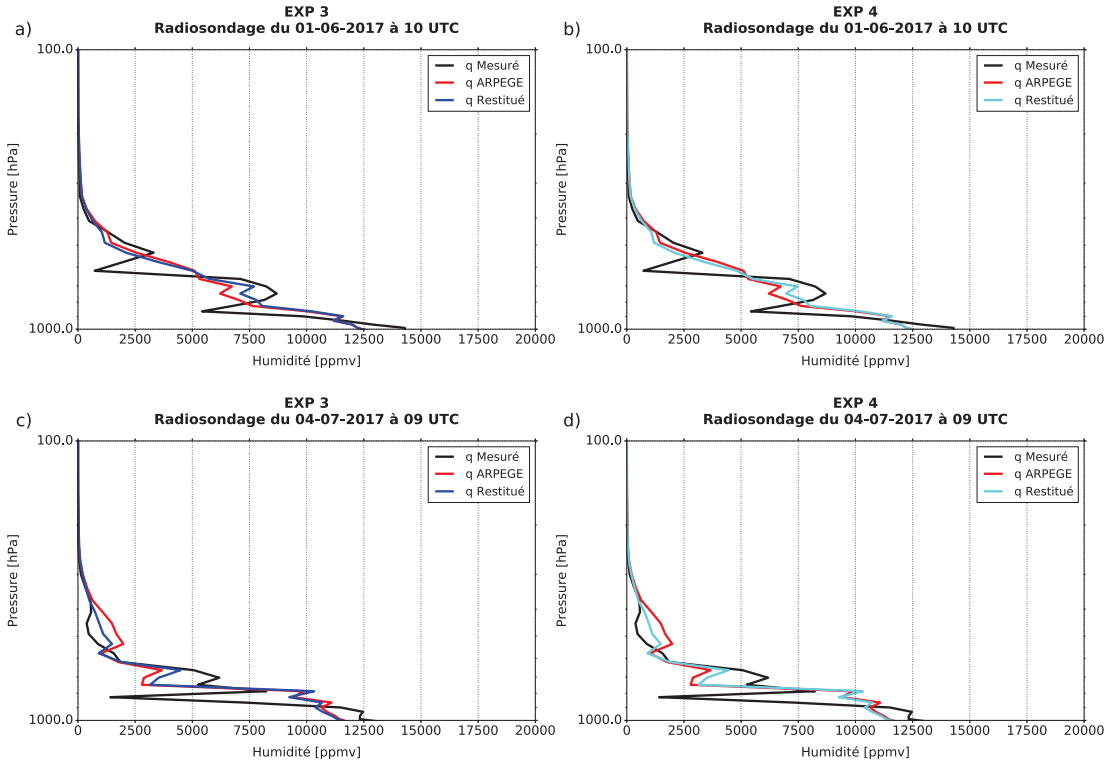


FIGURE 7.10: Profils *in situ* d'humidité (en noir) mesurés le 06 juin 2017 à 10 UTC (a et b) et 04 juillet 2017 à 09 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 3 et EXP 4 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan).

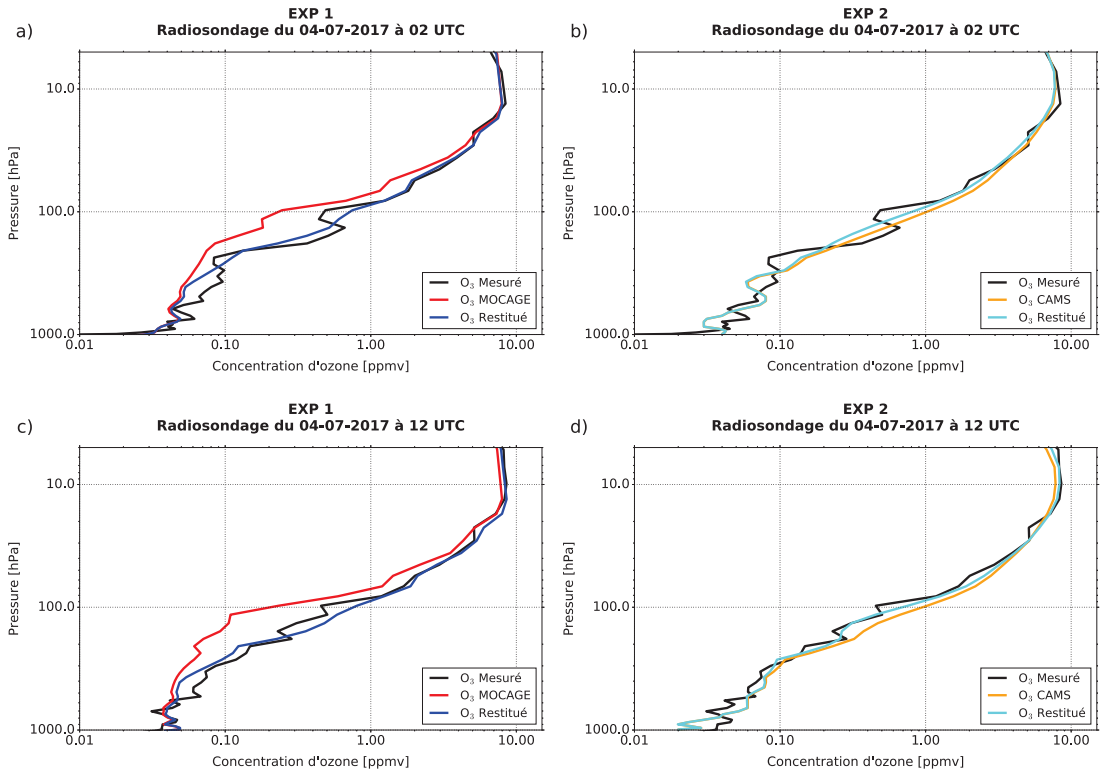


FIGURE 7.11: Profils *in situ* d'ozone (en noir) mesurés le 04 juillet 2017 à 02 UTC (a et b) et à 12 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche de MOCAGE (en rouge) et CAMS (en orange) et aux profils restitués pour les expériences EXP 1 et EXP 2 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan).

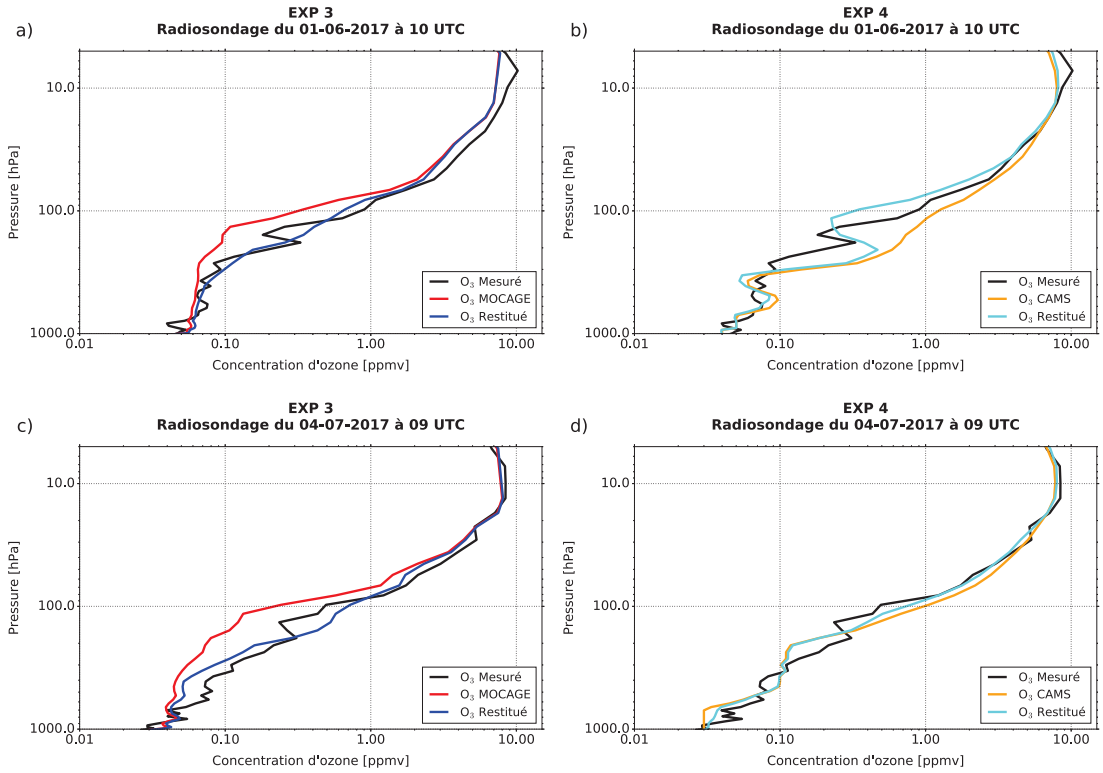


FIGURE 7.12: Profils *in situ* d'ozone (en noir) mesurés le 06 juin 2017 à 10 UTC (a et b) et 04 juillet 2017 à 09 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche de MOCAGE (en rouge) et CAMS (en orange) et aux profils restitués pour les expériences EXP 3 et EXP 4 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan).

7.4.2 Résultats

7.4.2.1 Synthèse des expériences EXP1 et EXP2 avec les observations CrIS

Pour les cas du 04 juillet à 02 UTC (Figure 7.7.a et b), on remarque un bon accord entre le profil d'ébauche de température et le profil mesuré, excepté au-dessus de 7 hPa (limite de la sonde au-dessus de 10 hPa). Ces résultats sont les mêmes quel que soit le profil d'ébauche d'ozone utilisé (MOCAGE ou CAMS). Les expériences pour le cas à 12 UTC (Figure 7.7.c et d), nous montrent également que quel que soit l'ébauche d'ozone utilisé, les résultats sont globalement les mêmes. On observe que le profil d'ébauche de température est proche du profil mesuré, excepté au-dessus de 30 hPa.

Pour la restitution des profils d'humidité, on remarque pour les cas du 04 juillet à 02 UTC (Figure 7.9.a et b) un accord plus ou moins correct entre le profil d'humidité mesuré et l'ébauche, avec une grande différence entre [825 - 650 hPa] quel que soit le profil d'ébauche d'ozone utilisé. Dans ces expériences, les profils restitués sont plus proches du profil mesuré que l'ébauche entre [975 - 625 hPa] et [500 - 300 hPa]. Les expériences pour le cas à 12 UTC (Figure 7.9.c et d), nous montrent un accord plus ou moins correct entre le profil d'humidité mesuré et l'ébauche avec une plus grande différence située entre [800 - 750 hPa]. On note cette fois-ci que les profils restitués sont globalement moins proches du profil mesuré que l'ébauche, excepté entre [1000 - 900 hPa].

Dans le cadre des restitutions des profils d'ozone, les profils d'ébauche d'ozone diffèrent entre les expériences EXP1 (MOCAGE) et EXP2 (CAMS). On observe sur les Figures 7.11.a et c que les profils d'ébauche issus de MOCAGE sous-estiment la concentration d'ozone par rapport aux profils mesurés, excepté en basse troposphère et au-dessus de 25 hPa. Ces expériences permettent de restituer des profils d'ozone très proches des profils mesurés. Inversement, on note sur la Figure 7.11.b que le profil d'ébauche issu de CAMS est globalement plus proche du profil mesuré que l'ébauche issue de MOCAGE, avec toutefois quelques sur-estimations de la concentration d'ozone de CAMS entre [300 - 200 hPa] et entre [150 - 50 hPa]. On remarque qu'avec cette ébauche, le profil restitué se retrouve être moins corrigé mais reste proche du profil mesuré. Enfin sur la Figure 7.11.d, on remarque que le profil d'ébauche issu de CAMS sous-estime la concentration d'ozone en basse troposphère comparé au profil mesuré et la sur-estime entre [500 - 20 hPa]. On observe que cette expérience restitue un profil d'ozone très proche du profil mesuré excepté en basse troposphère.

7.4.2.2 Synthèse des expériences EXP3 et EXP4 avec les observations IASI

Pour les expériences EXP 3 et EXP 4 du 01 juin 2017 à 10 UTC (Figure 7.8.a et b) et du 04 juillet 2017 à 09 UTC (Figure 7.8.c et d), on remarque de manière générale un bon accord entre les profils d'ébauche de température et les profils mesurés excepté au-dessus de 10 hPa quel que soit le profil d'ébauche d'ozone utilisé. On note très peu de différences dans ces expériences entre les profils d'ébauche et les profils restitués.

On observe pour l'humidité un accord plus ou moins correct entre le profil d'humidité mesuré et l'ébauche avec des différences importantes entre [800 - 675 hPa] et [600 - 550 hPa] (Figure 7.9.a et b). Ces expériences (EXP 3 et EXP 4) permettent de restituer des profils qui se rapprochent du profil mesuré surtout là où était la plus grande différence avec le profil d'ébauche. On constate les mêmes tendances pour le cas du 04 juillet 2017 à 09 UTC (Figure 7.10.c et d) avec un accord plus ou moins correct entre le profil d'humidité mesuré et l'ébauche avec de plus importantes différences situées entre [900 - 825 hPa], [850 - 650 hPa] et [550 - 400 hPa] et des profils restitués qui se rapprochent du profil mesuré sur les trois niveaux de grandes différences avec l'ébauche.

Enfin pour l'ozone, dans le cas du 01 juin 2017 à 10 UTC (Figure 7.12.a et b), on observe que l'ébauche issue de MOCAGE sous-estime la concentration d'ozone par rapport au profil mesuré excepté en basse troposphère et que l'ébauche issue de CAMS est globalement proche du profil mesuré excepté au niveau de l'UTLS où l'on note une sur-estimation de la concentration d'ozone. Pour l'expérience EXP 3, le profil restitué est très proche du profil mesuré excepté au-dessus de 50 hPa où ce dernier reste proche de l'ébauche. Pour l'expérience EXP 4 le profil restitué se rapproche du profil mesuré et on remarque également que le profil restitué fait apparaître la même structure que le profil mesuré. Dans le cas du 04 juillet 2017 à 09 UTC (Figure 7.12.c et d), on constate que l'ébauche issue de MOCAGE sous-estime la concentration d'ozone par rapport au profil mesuré excepté en basse troposphère et au-dessus de 25 hPa et que le profil d'ébauche issue de CAMS sous-estime la concentration d'ozone en basse troposphère comparé au profil mesuré et la sur-estime entre [150 - 40 hPa]. L'expérience EXP 3 permet de restituer un profil d'ozone qui se rapproche du profil mesuré et l'expérience EXP 4 restitue un profil d'ozone très proche du profil mesuré excepté entre [300 - 150 hPa].

7.4.3 Conclusion et discussion

La campagne de mesure APOGEE a été l'occasion de mesurer des profils *in situ* de température, d'humidité et d'ozone pouvant servir de données de vérification. Dans notre cas, nous avons pu évaluer concrètement la méthode mise en place dans l'étude précédente permettant d'améliorer les restitutions thermodynamiques et chimiques à l'aide d'observations satellitaires infrarouges. Pour démontrer le caractère flexible de cette approche nous avons réalisé des expériences d'assimilation uni-dimensionnelle (1D-Var) utilisant des observations issues de l'instrument IASI et CrIS. De plus, nous avons également utilisé deux sources d'ébauche d'ozone provenant de MOCAGE et CAMS. Ces expériences nous ont permis de restituer des profils de température, d'humidité et d'ozone qui ont pu être comparés aux ébauches et aux profils mesurés par les radiosondages.

Les résultats sont très encourageants et en accord avec les résultats de l'étude précédente. En effet, l'assimilation de canaux supplémentaires sensibles à l'ozone en utilisant une ébauche d'ozone réaliste, nous permet de restituer des profils plus proches des profils mesurés que l'ébauche en température, humidité et ozone. Comme dans l'étude précédente, on remarque que l'assimilation de ces canaux supplémentaires a un impact neutre à positif sur les restitutions de température. Cependant, ces canaux sensibles à l'ozone nous permettent de restituer des profils d'humidité plus proches des profils mesurés là où l'ébauche en était éloignée. On note également un éloignement important de la restitution du profil d'humidité par rapport à l'ébauche et au profil mesuré sur les Figures 7.9.c et d, assimilant les canaux issus de CrIS. Cette différence peut avoir plusieurs causes. En effet, cette expérience d'assimilation utilise une matrice $\mathbf{R}$ diagonale, il n'y a donc pas de prise en compte des corrélations inter-canaux.

Évidemment, l'impact positif le plus notable est visible pour l'ozone. On remarque que l'assimilation des canaux sensibles à l'ozone a la capacité de restituer des profils d'ozone très proches des profils mesurés, particulièrement dans l'UTLS qui demeure une zone difficile à modéliser par les MCT. On peut également observer des profils restitués ayant des structures qui se rapprochent des structures complexes que peuvent avoir certains profils mesurés au niveau de l'UTLS. C'est le cas par exemple sur la Figure 7.12.b. On rappelle que ces structures « feuilletées » de la concentration de l'ozone au niveau de l'UTLS peuvent être générées par les transport isentropiques explicités dans le Chapitre 1.

Bien qu'il ne s'agisse que de quelques cas d'études, ces expériences nous montrent, une nouvelle fois, que l'assimilation d'observations infrarouges supplémentaires a le double potentiel d'améliorer les restitutions thermodynamiques et chimiques. En plus de l'impact positif sur les analyses en température et humidité, nous avons restitué des profils d'ozone proches à la fois en concentration et en structure des profils mesurés. Ainsi, l'assimilation des canaux sensibles à l'ozone pourrait bénéficier aux modèles de PNT pour l'amélioration des champs thermodynamiques et aux MCT pour l'amélioration de la modélisation de l'ozone au niveau de l'UTLS.

Chapitre 8

Une nouvelle sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone pour la PNT

« La science ne renverse pas à mesure ses édifices ; mais elle y ajoute sans cesse de nouveaux étages et, à mesure qu'elle s'élève davantage, elle aperçoit des horizons plus élargis. »

Berthelot

Sommaire

8.1 Introduction et objectifs de ce chapitre 228
8.2 Résumé de l'article 229
8.2.1 Cadre expérimental 229
8.2.1.1 Cas d'étude 229
8.2.1.2 Données d'ébauche et d'observation 230
8.2.2 Méthodes 230
8.2.3 Résultats 237
8.2.4 Conclusion et discussion 240
8.3 L'article : Ozone-sensitive channel selection over IASI full spectrum with correlated observation errors for NWP 241

8.1 Introduction et objectifs de ce chapitre

Nous avons montré au cours des différentes études que les observations satellitaires infrarouges issues du sondeur IASI représentent le principal contributeur des observations utilisées dans le modèle global de PNT ARPEGE. L'année 2019 a été marquée par l'arrivée d'observations supplémentaires issues de l'instrument IASI à bord de Metop-C, lancé à la fin de l'année 2018. Ces données représentent une source d'information importante qu'il est nécessaire de traiter. En effet, le volume immense de données représente un challenge pour les grands centres de prévision qui sont encore limités informatiquement dans la transmission, le stockage et l'assimilation de données. L'une des méthodes permettant de réduire significativement la quantité d'information réside dans la sélection de canaux. Pour IASI, cette dernière a été réalisée par [Collard, 2007] qui a sélectionné 300 canaux dont 66 dans la bande sensible au CO_2 sélectionnés pour leur unique sensibilité à la température, puis 186 canaux sensibles à la température et/ou à la vapeur d'eau, 15 sensibles à l'ozone, 20 dans les fenêtres atmosphériques pour leur sensibilité aux surfaces et 13 dans la bande solaire. Ces derniers ne sont pas utilisés car ils ont un bruit instrumental trop élevé.

De nombreux centres disposent d'une capacité de calcul accrue pour assimiler davantage d'observations satellitaires. Une approche intéressante est l'assimilation supplémentaire d'observations satellitaires infrarouges sensibles à la composition atmosphérique permettant une assimilation couplée pour le système terrestre. Cette stratégie a été adoptée pour l'ozone, par le CEPMMT dans le modèle IFS. L'ozone est une molécule intéressante puisque les observations satellitaires sensibles à cette dernière peuvent également être sensibles à la température et à l'humidité et ces canaux peuvent donc fournir des informations supplémentaires pour l'assimilation de données. En effet, les travaux de [Derber and Wu, 1998] ont montré que l'utilisation de champs d'ozone réalistes améliore l'assimilation des observations satellitaires sensibles à l'ozone du sondeur infrarouge à haute résolution HIRS dans le système de prévision global du NCEP (National Centers for Environmental Prediction). Puis, l'étude de [Semane et al., 2009] a montré que l'utilisation dans le systême d'assimilation 4D-Var de champs d'ozone réalistes issus de MOCAGE par le couplage dynamique de l'ozone avec le modèle global ARPEGE à Météo-France améliore les prévisions des champs de vent. De nombreuses études ont montré les avantages de l'assimilation de l'ozone pour la PNT. Dans le modèle IFS, l'ozone est donc présent dans la variable de contrôle du 4D-Var qui assimile 16 canaux IASI sensibles à l'ozone issus de leur propre sous-ensemble de canaux permettant ainsi d'améliorer les analyses d'ozone [Han and McNally, 2010], [Dragani and McNally, 2013]. L'étude de [Lupu and McNally, 2013] montre également l'impact positif sur l'analyse du vent en assimilant des canaux sensibles à l'ozone issus de l'instrument SEVIRI. Enfin, la précédente étude de ce travail de thèse, explicitée dans le Chapitre 7 a montré que l'assimilation de 15 canaux IASI sensibles à l'ozone issus de la sélection effectuée par [Collard, 2007] fournit des informations supplémentaires permettant d'améliorer simultanément les analyses de température, d'humidité et d'ozone [Coopmann et al., 2018].

La sélection des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone effectuée par Collard n'a été réalisée que pour extraire spécifiquement de l'information bénéfique à l'analyse en ozone. De plus, cette sélection a été menée à l'aide d'une matrice de covariance d'erreur d'observation $\mathbf{R}$ diagonale, c'est à dire en prenant en compte uniquement les variances d'erreur d'observation de chacun des canaux. En effet, depuis le début de l'utilisation des observations infrarouges pour le PNT, les sélections de canaux ont été faites le plus souvent à l'aide de matrices $\mathbf{R}$ diagonales telles que celles réalisées par [Fourrié and Thépaut, 2003] pour AIRS et [Gambacorta and Barnet, 2013] pour CrIS.

Les instruments satellitaires mesurant plusieurs luminances spectrales ont souvent des canaux ayant des erreurs corrélées entre elles. Alors, l'utilisation d'une matrice **R** diagonale pour réaliser une sélection de canaux devient une approximation importante. Cette imprécision peut avoir un impact significatif sur la qualité de la sélection dès lors que les canaux sélectionnés sont sensibles à plusieurs paramètres, comme l'ozone par exemple. Ainsi, l'objectif de cette étude est d'effectuer une nouvelle sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone à partir du spectre complet en utilisant une matrice de covariance d'erreur d'observation complète prenant en compte les covariances d'erreur d'observation afin de sélectionner précisément les canaux les plus informatifs en température, humidité et ozone et ce, pour améliorer les analyses de ces trois variables. Pour y parvenir, une pré-sélection de l'ensemble des canaux IASI sensibles à l'ozone a été effectuée à l'aide d'une méthode de sensibilité. Puis le classement des canaux sensibles à l'ozone les plus informatifs a été réalisé en utilisant comme mesure d'informativité le DFS. Enfin, une sélection a été réalisée et évaluée par l'impact sur les analyses de l'assimilation de différentes sélections dans le cadre simplifié d'assimilation uni-dimensionnelle (1D-Var). Cette étude a fait l'objet d'un article soumis au journal scientifique international Atmospheric Measurement Techniques (AMT).

8.2 Résumé de l'article

8.2.1 Cadre expérimental

8.2.1.1 Cas d'étude

Afin d'évaluer l'apport de notre sélection de canaux sur les analyses, ces dernières doivent être comparées à des données de vérification. Ainsi pour cette étude, les pixels IASI (Metop-A et Metop-B) ont été sélectionnés et collocalisés autour d'un sous-ensemble de 40 sites de lancement de radiosondages répartis dans le monde entier (Voir Figure 8.1). Les données *in situ* de température, d'humidité et d'ozone ont été mesurées à différentes latitudes, prenant en compte plusieurs scénarios atmosphériques. Ces profils proviennent de la base de données WOUDC (World Ozone and Ultraviolet Data Center) et ont été sélectionnés entre mars 2016 et mars 2017 pour tenir compte de la variabilité annuelle. Ces profils verticaux seront utilisés comme données de vérification.

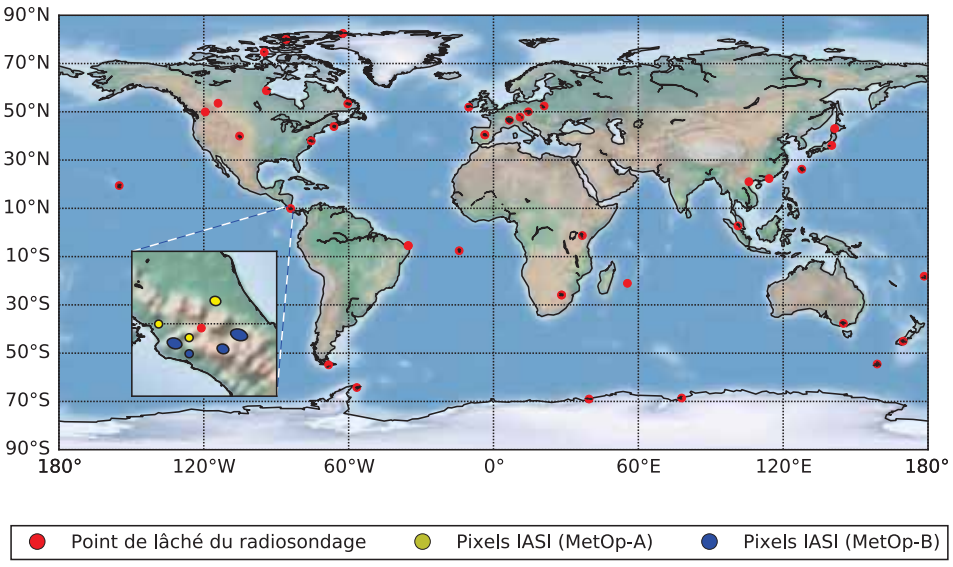


FIGURE 8.1: Carte des sites de lancer des radiosondages (points rouges) et exemple des pixels IASI issus de Metop-A (en jaune) et de Metop-B (en bleu), collocalisés avec les différents radiosondages sur la fenêtre de zoom.

La collocalisation entre les radiosondages et les pixels IASI a été réalisée en utilisant plusieurs critères tels que la sélection du pixel le plus proche pour chaque radiosondage. La plus petite distance orthodromique avec un seuil maximal de 100 km et une différence temporelle avec un seuil maximal de 60 min entre le pixel IASI et le radiosondage ont été retenues. L'instrument IASI comprend également un sous-système d'imagerie intégré (IIS) qui permet de co-enregistrer les mesures interférométriques avec l'instrument AVHRR, présent sur la même plate-forme. AVHRR fournit des informations sur les nuages et l'hétérogénéité dans le pixel IASI [Saunders and Kriebel, 1988]. Pour éviter l'utilisation de pixels nuageux, les pixels IASI ont été éliminés lorsque la couverture nuageuse de l'AVHRR était supérieure à 0 %. Par conséquent, 345 pixels IASI collocalisés avec 345 radiosondages indépendant ont été sélectionnés, dont 222 pixels sur la surface terrestre, 106 à la mer et 17 à la glace de mer.

8.2.1.2 Données d'ébauche et d'observation

Les profils d'ébauche de température, d'humidité, de température de surface, d'humidité de surface, de pression de surface, de vent de surface zonal et méridien proviennent des prévisions du modèle global ARPEGE (toutes les 3 h) et ont été extraits aux mêmes coordonnées et horaires que les pixels IASI ainsi que les profils d'ozone issus du MCT MOCAGE. Les modèles ARPEGE et MOCAGE ont des coordonnées verticales σ-hybrides (105 niveaux dans ARPEGE et 60 niveaux dans MOCAGE mode recherche avec un toit du modèle à 0,1 hPa pour les deux), qui ont été interpolées sur les 54 niveaux de pression fixe du MTR RTTOV. Pour s'affranchir des incertitudes de simulation liées aux imprécisions de la température de surface (T_{skin}) essentiellement sur la surface terrestre, nous avons restitué la température de surface à partir de l'inversion de l'équation de transfert radiatif en utilisant le canal fenêtre IASI 1194 (943,25 cm^{-1}) [Boukachaba, 2017] et [Vincensini, 2013] pour chaque pixel IASI. Cette température de surface pour chaque cas d'étude a été calculée en utilisant les valeurs d'émissivité sur les surfaces terrestres issues de l'atlas d'émissivité CAMEL (The Combined ASTER MODIS Emissivity over Land) [Borbas et al., 2018] et du modèle ISEM (surface emissivity model) [Sherlock and Saunders, 1999] sur mer et glace de mer. De ce fait, dans la suite de cette étude, nous n'assimilerons pas le canal 1194. Pour cette étude, nous avons travaillé à partir des spectres complets de IASI, soit 8461 canaux. Pour se rapprocher du cadre opérationnel, la sélection de canaux sensibles à l'ozone a été réalisée pour que ces derniers apportent de l'information supplémentaire à ceux déjà utilisés en opérationnel à Météo-France. Il s'agit des 123 canaux faisant partie de la sélection monitorée ; 99 canaux de température dans la bande LW CO_2 [650 à 770 cm^{-1}], 4 canaux fenêtre [790 à 980 cm^{-1}] et 20 canaux H_2O [1 210 à 1 650 cm−1].

8.2.2 Méthodes

Une première étape de cette étude a été de calculer les statistiques des innovations (en température de brillance) sur le spectre complet de IASI en utilisant les 345 profils d'ébauche décrit précédemment avec l'ozone de MOCAGE. Les résultats ont été illustrés sur les 5500 premiers canaux de IASI (bande 1 et 2). La moyenne des innovations montre globalement des biais inférieurs à 0,75 K sur l'ensemble des canaux excepté pour les canaux sensibles à l'ozone entre 1.000 et 1.070 cm^{-1} avec des valeurs pouvant atteindre 7 K. Les écarts-types des innovations ont des valeurs comprises entre 0,50 et 2,50 K. Même si les profils d'ozone issus de MOCAGE sont réalistes, ils ne représentent pas pour autant la réalité, d'où ces biais importants pour les canaux sensibles à l'ozone. Cependant, nous pouvons constater que les écarts-types de ces canaux ont des valeurs 3 fois plus faibles que les écarts-types des innovations issues des simulations utilisant le profil d'ozone de référence (Chapitre 7, Figure 7.4.b). La moyenne des innovations a été utilisée pour réaliser une correction de biais statique des observations IASI pour la suite de l'étude.

Nous avons ensuite identifié l'ensemble des canaux IASI sensibles à l'ozone sur le spectre complet. Pour cela, nous avons utilisé une méthode dite « physique » traitée dans l'étude de [Gambacorta and Barnet, 2013] pour le sondeur CrIS. Cette méthode consiste à évaluer la sensibilité de la différence de température de brillance (ΔT_b), entre des simulations dont les profils d'entrée sont non-perturbés et perturbés. Dans notre cas, seuls les profils d'ozone ont été modifiés par une perturbation constante de 10 % sur la verticale pour la simulation perturbée. Les statistiques des ΔT_b ont été réalisées sur les 345 profils et nous indique la sensibilité de chaque canal à l'ozone dans n'importe quel état atmosphérique. Les résultats montrent des sensibilités des canaux à l'ozone entre 645 et 770 cm^{-1} et entre 970 et 1095 cm^{-1}. Les canaux sensibles sur la première bande sont des canaux sensibles principalement au CO_2 et sont utilisés en opérationnel à Météo-France pour extraire de l'information en température. De ce fait, ces canaux sont rejetés de notre sélection supplémentaire. Seul les canaux compris dans la deuxième bande et ayant des valeurs supérieures au bruit instrumental ont été pré-sélectionnés pour la suite de l'étude. Ainsi 306 canaux IASI sensibles à l'ozone ont été retenus.

Une partie importante du travail a été d'estimer les erreurs d'ébauche en température, humidité et particulièrement en ozone. Nous avons ainsi utilisé la méthode NMC (National Meteorological Centers) [Parrish and Derber, 1992]. Cette technique permet de determiner les erreurs d'échauche à partir de statistique des différences d'échéance de prévision valides au même temps. Dans notre cas, nous avons considéré une difference de prévision entre les échéances 36 h et 12 h. Pour determiner les erreurs d'ébauche en ozone, nous avons appliqué la méthode NMC sur les prévisions du MCT MOCAGE pour les champs de température, d'humidité (ARPEGE) et d'ozone. Afin de prendre en compte la variabilité saisonnière de l'ozone, nous avons effectué les deux simulations sur une longue période couvrant l'année d'étude, débutant en septembre 2016 jusqu'à avril 2018. Les prévisions sont fournies sur 60 niveaux de pression hybride avec un toit du modèle à 0,1 hPa sur une grille horizontale de 1 ° de résolution. Les champs de température, d'humidité et d'ozone ont été interpolés sur les 54 niveaux proposés dans RTTOV. Finalement, la matrice de covariance d'erreur d'ébauche (**B**) en température (K), logarithme d'humidité spécifique (log(kg/kg)) et d'ozone (ppmv) a été calculée statistiquement par la différence de prévisions (MOC+36H - MOC+12H) sur un an de mars 2016 à mars 2017.

La Figure 8.2 représente la matrice de corrélation d'erreur d'ébauche calculée avec la méthode NMC en température de l'indice 1 à l'indice 54, en logarithme d'humidité spécifique de l'indice 55 à l'indice 108 et en ozone de l'indice 109 à l'indice 162. Pour chacun des paramètres les 54 indices correspondent aux 54 niveaux MTR allant de 0,005 à 1050 hPa. La diagonale de la matrice contient les variances d'erreur, les blocs diagonaux contiennent les cavariances d'erreur des variables considérées et les blocs non-diagonaux contiennent les covariances d'erreur inter-variables. On appelle cette matrice, une matrice **B** multivariée. Des corrélations d'erreur positives significatives (0,9) sont observées pour la température dans la troposphère et la haute stratosphère. On note également des corrélations d'erreur négatives dans l'UTLS. Puis, les mêmes tendances sont observées pour les corrélations d'erreur d'humidité dans la troposphère. Des corrélations d'erreur d'ozone sont observées pour tous les niveaux atmosphériques. Les fortes corrélations d'erreur positives entre la température, l'humidité et l'ozone au sommet de la stratosphère sont causées par l'interpolation sur les derniers niveaux au sommet de la stratosphère. En effet, les niveaux de pression MTR atteignent 0,005 hPa alors que les niveaux de pression MOCAGE et ARPEGE n'atteignent que 0,1 hPa. On remarque également des corrélations d'erreur complexes pour les blocs inter-variables. De fortes valeurs sont observées dans la troposphère pour les corrélations température-humidité. Tandis que les corrélations les plus importantes entre la température-ozone sont observées dans la stratosphère. Finalement, on note de faibles corrélations négatives entre humidité-ozone dans la troposphère.

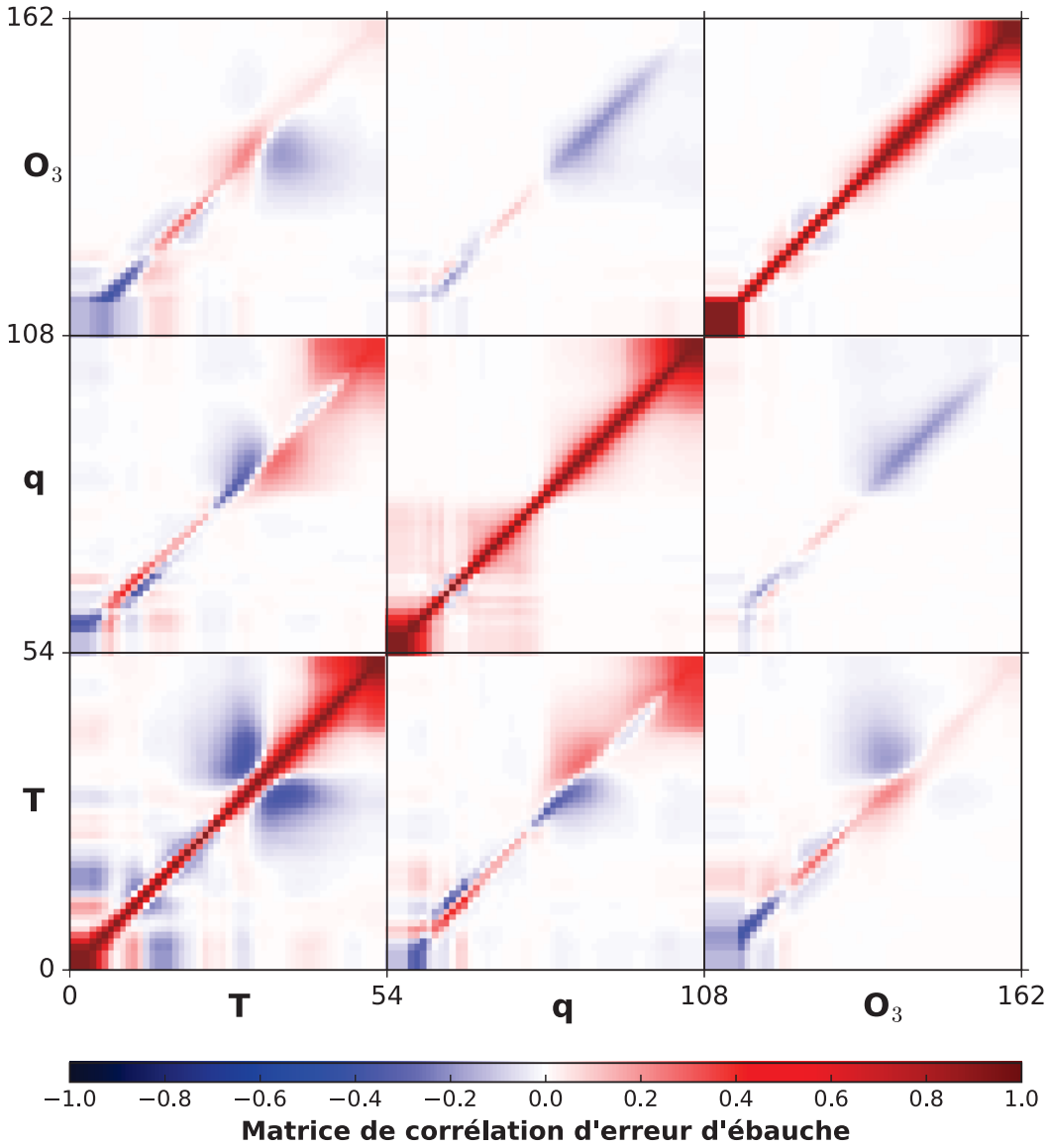


FIGURE 8.2: Matrice multi-variée des corrélations d'erreur d'ébauche en température (de 1 à 54) en humidité (de 55 à 108) et en ozone (de 109 à 162) estimée à l'aide de la méthode NMC.

Bien que les corrélations d'erreur inter-variables soient très intéressantes, leur utilisation dans les systèmes d'assimilation demeure très complexe. Par exemple, les corrélations d'erreur d'ébauche entre température et humidité ne sont pas décrites dans le 4D-Var ARPEGE. Ainsi nous avons décidé d'utiliser uniquement les blocs diagonaux pour cette étude et de construire une matrice **B** univariée. Cette hypothèse permet de supprimer les effets potentiellement négatifs des rétroactions entre les trois variables [Dethof and Holm, 2004]. Enfin, les niveaux utilisés dans la matrice **B** pour la sélection de canaux et son utilisation dans les expériences 1D-Var sont : 49 niveaux pour la température et pour l'ozone entre 1.013 et 0,06 hPa, 27 niveaux d'humidité entre 1013 et 115 hPa. Ces résultats sont cohérents avec ceux obtenus pour les erreurs d'ébauche en température, humidité et ozone dans le cadre des travaux de [Hólm and Kral, 2012].

Une fois la matrice **B** estimée, nous avons estimé les erreurs d'observations des canaux IASI en utilisant une nouvelle fois la méthode introduite par [Desroziers et al., 2005]. Cette technique nous a permis de construire une matrice de covariance d'erreur d'observation diagnostiquée **R** sur les 5500 premiers canaux IASI.

Ce diagnostic a été réalisé en utilisant comme point de départ une matrice **R** diagonale avec des variances estimées à partir des écarts-types des innovations précédemment calculés pour les 5500 canaux IASI, représentées par la ligne rouge sur la Figure 8.3. La matrice **B** calculée selon la méthode NMC a également été utilisée. Enfin, les 1D-Var ont été réalisés pour les 345 profils. Le diagnostic de Desroziers est couramment utilisé par la communauté, (par exemple au MetOffice [Weston et al., 2014], ou au CEPMMT [Bormann et al., 2011]).

Les écarts-types d'erreur d'observation diagnostiqués sont représentés par la ligne bleue en fonction des numéros de canaux IASI et du nombre d'onde (Figure 8.3). La ligne grise représente les valeurs du bruit instrumental à 280 K. Nous notons que les valeurs des écarts-types d'erreur d'observation diagnostiqué pour les canaux sensibles au CO_2 et O_3 sont proches des écarts-types d'erreur d'observation simulés alors que les valeurs des écarts-types d'erreur d'observation diagnostiqués pour les canaux sensibles à la surface et les canaux sensibles à H_2O sont inférieures à celles des écarts types d'erreur d'observation simulés.

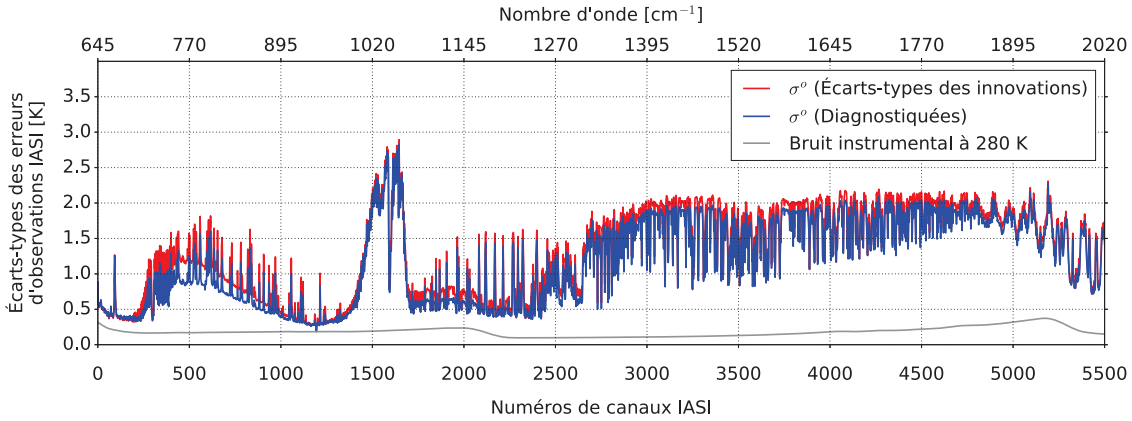


FIGURE 8.3: Écarts-types des erreurs d'observations IASI [K] en fonction des 5500 (Bande 1 & 2) numéros de canaux et du nombre d'onde [cm^{-1}] (a) pour les erreurs d'observation issues des innovations (en rouge), diagnostiquées (en bleu) et le bruit instrumental à 280 K (en gris).

La figure 8.4 représente la matrice de corrélation des erreurs d'observation IASI diagnostiquées à partir de la matrice **R** des 5500 premiers canaux IASI. Les corrélations d'erreurs situées entre les canaux 1 à 1100 représentent les canaux sensibles au CO_2 du haut de la stratosphère à la surface. On remarque de fortes valeurs sur grande partie de l'atmosphère. Les canaux entre 1100 à 1400 représentent les canaux sensibles à la surface. On retrouve entre les canaux 1400 et 1700, les canaux sensibles à l'ozone avec des valeurs de corrélations très importantes. Puis les canaux de 1700 à 2200 de nouveau sensibles à la surface sont très corrélés entre eux. Enfin le reste des canaux sont principalement sensibles à la vapeur d'eau avec d'importantes disparités dans les valeurs des corrélations d'erreur. Cette variabilité pour les canaux sensibles à la vapeur d'eau peut être mise en relation avec les altitudes auxquelles les différents canaux ont une sensibilité.

Pour la suite de l'étude, une matrice de covariance d'erreur d'observation diagnostiquée a été construite pour les 122 canaux IASI opérationnels utilisés à Météo-France (123 moins le canal fenêtre utilisé pour restituer la T_{skin}) accompagnés des 306 canaux pré-sélectionnés sensibles à l'ozone.

La matrice de corrélation des erreurs d'observation diagnostiquées dans cette étude présente des résultats similaires à celle estimée en 1D-Var et/ou 4D-Var pour un sous-ensemble de canaux IASI dans les travaux de [Migliorini, 2015], [Stewart et al., 2014] et [Weston et al., 2014]. Toutefois, on note également un facteur 2 entre nos valeurs de variance et les leurs. Cette inflations est potentiellement due au travail de conditionnement réalisé sur la matrice $\mathbf{R}$ diagnostiquée afin de la rendre symétrique et inversible. Le faible nombre d'observations utilisé dans ce cadre 1D-Var (345) peut être une explication aux valeurs deux fois plus élevées obtenues pour nos variances d'erreur d'observation.

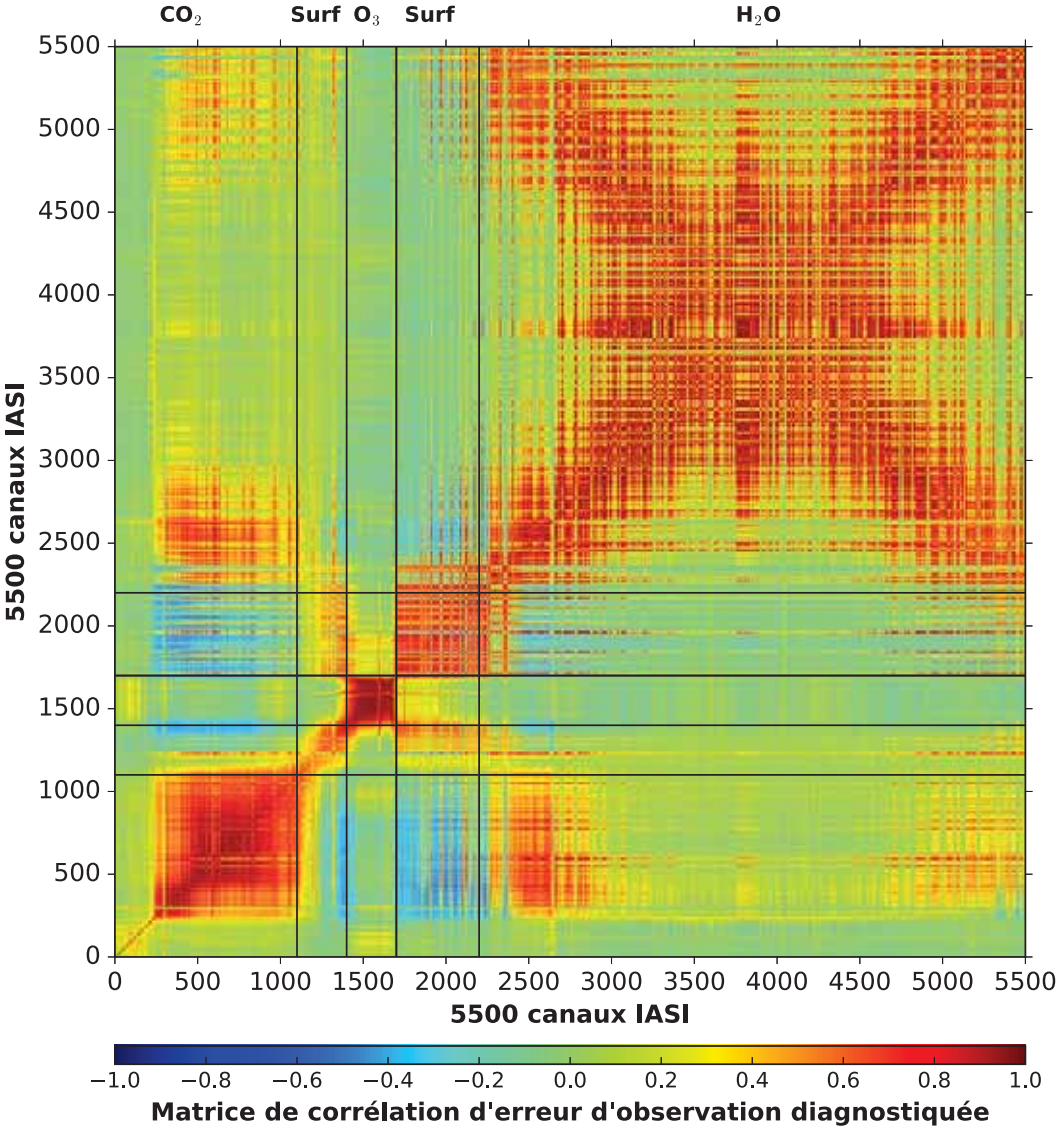


FIGURE 8.4: Matrice des corrélations d'erreur d'observation diagnostiquées pour les 5500 canaux IASI des bandes 1 et 2.

Une autre partie importante du travail a été de traiter les données de vérification pour être en cohérence avec les analyses. En effet, dans le cadre des expériences 1D-Var, les profils sont restitués sur les 54 niveaux MTR dont la résolution est spécifiée pour les observations satellitaires de IASI pour notre étude. Or, les profils des sondes ont une résolution verticale bien plus élevée (environ 100 m). Les profils des sondes ont donc été interpolés sur les 54 niveaux MTR mais cette interpolation peut entraîner des erreurs. Afin de lisser les données des sondes vers la résolution des observations satellitaires, nous avons utilisé la matrice de fonction de lissage (Averaging Kernel en anglais). Simplement, le principe est de voir ces profils de la même manière que IASI les verraient (avec les canaux utilisés).

Cette matrice de fonction de lissage provient de la théorie des méthodes d'inversion reposant sur la connaissance du transfert radiatif. La méthode la plus couramment utilisée est celle de l'estimation optimale basée sur le théorème de Bayes permettant d'inverser des profils thermodynamiques et chimiques à partir de la mesure d'observations satellitaires en visée au nadir [Rodgers, 2000]. La matrice de fonction de lissage, noté **AK**, peut être définie comme la variation du profil inversé ($\mathbf{x}^{\mathrm{a}}$) sur la variation du profil réel de l'atmosphère ($\mathbf{x}^{\mathrm{t}}$) tel que :

$$\mathbf{AK} = \frac{\partial \mathbf{x}^{a}}{\partial \mathbf{x}^{t}} \tag{8.1}$$

Si le système d'observation était parfait, la matrice **AK** serait donc la matrice identité ($\mathbf{x}^{\mathrm{a}} = \mathbf{x}^{\mathrm{t}}$) et toute l'information du profil inversé proviendrait alors de la mesure. Dans les faits, les observations satellitaires seules ne permettent pas d'obtenir une inversion acceptable, de plus les MTR utilisés pour simuler la mesure sont non-linéaires. Ainsi, nous faisons intervenir un profil d'ébauche ($\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$) issu d'une climatologie ou d'une prévision de l'état de l'atmosphère.

Cette méthode permet une meilleure caractérisation de l'inversion ayant une connaissance à la fois de la mesure et de l'*a priori* de l'atmosphère. De plus, cette méthode permet de quantifier la sensibilité de la mesure et son contenu en information, de séparer les composantes des paramètres qui sont contenues dans la mesure et celles qui proviennent du profil d'ébauche mais également de calculer les erreurs issues du bruit de la mesure et du lissage du profil réel par le système d'observation [Herbin and Dubuisson, 2016]. Ainsi on obtient l'équation de caractérisation de Rodgers qui décrit la relation entre le profil réel ($\mathbf{x}^{\mathrm{t}}$), le profil d'ébauche ($\mathbf{x}^{\mathrm{b}}$) et le profil inversé ($\mathbf{x}^{\mathrm{a}}$) tel que :

$$\mathbf{x}^{\mathrm{a}} = \mathbf{x}^{\mathrm{b}} + \mathbf{AK}(\mathbf{x}^{\mathrm{t}} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}}) + \varepsilon \tag{8.2}$$

où ε contient les erreurs d'inversion et de mesure. Chaque ligne de la matrice **AK** montre comment à un niveau donné de l'atmosphère, le système lisse ou amplifie les différences entre l'état réel de l'atmosphère et le profil d'ébauche. Ainsi à un niveau donné la valeur inversée contient une contribution de chaque niveau du profil réel pondérée par la ligne correspondante de la matrice **AK** que l'on nomme fonction de lissage.

Les colonnes peuvent être considérées comme la réponse du système à une perturbation unitaire de l'état réel de l'atmosphère que l'on nomme réponse impulsionnelle (ou Dirac). Il est important de noter que l'information contenue dans **AK** provient aussi bien du MTR que du modèle d'inversion. L'avantage est qu'à partir de cette matrice, on peut mathématiquement calculer d'autres paramètres de diagnostic tels que le DFS, les valeurs et vecteurs propres, la sensibilité de la mesure, etc. Ces paramètres permettent une analyse complète du contenu d'information des profils inversés [[Rodgers, 2000] et [Rodgers and Connor, 2003]].

Dans notre cas, nous ne voulons pas inverser des profils puisque nous utilisons le 1D-Var pour le faire. Mais nous avons utilisé l'équation 8.2 en négligeant ε pour lisser nos profils vers la résolution des observations de IASI à la fois pour les profils des sondes mais également pour les profils restitués afin d'être cohérent tels que :

$$\mathbf{x}^{\text{sonde AK}} = \mathbf{x}^{\mathrm{b}} + \mathbf{AK}(\mathbf{x}^{\text{sonde brut}} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}})$$

$$\mathbf{x}^{\text{restitution AK}} = \mathbf{x}^{\mathrm{b}} + \mathbf{AK}(\mathbf{x}^{\text{restitution brut}} - \mathbf{x}^{\mathrm{b}})$$

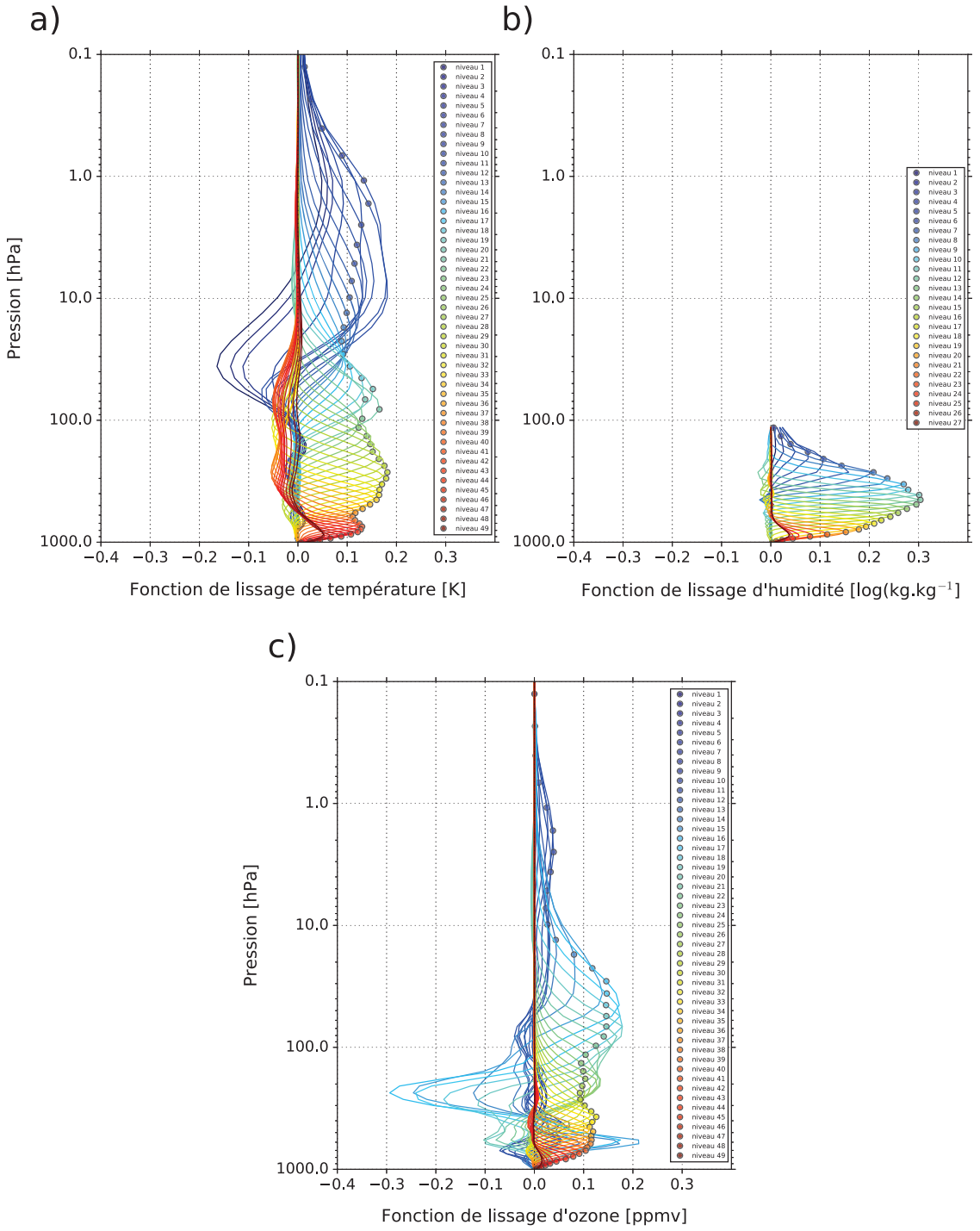


FIGURE 8.5: Fonctions de lissage (Averaging Kernel) de température (a), d'humidité (b) et d'ozone (c) issues des lignes de la matrice de fonction de lissage (AK) moyennée sur les 345 profils, tracées pour chaque niveaux MTR considérés en fonction de la pression atmosphérique.

Les matrices **AK** sont calculées pour chacun des 345 profils par le 1D-Var pour l'expérience qui assimile l'ensemble des 122 + 306 canaux IASI telle que : $\mathbf{AK} = (\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H}$. La matrice **AK** finale utilisée résulte de la moyenne sur les 345 profils. La Figure 8.5 représente les lignes de la matrice **AK** avec les fonctions de lissage de température (a), d'humidité (b) et d'ozone (c), tracées pour chaque niveaux MTR considérés en fonction de la pression atmosphérique. On remarque des distributions des fonctions de lissage de température localisées proches de leurs niveaux entre 600 et 20 hPa et un peu un moins en basse troposphère et surtout dans la stratosphère entre 20 et 0,1 hPa. Les distributions des fonctions de lissage d'humidité sont localisées proches de leurs niveaux sur l'ensemble de la troposphère. Enfin on observe des distributions des fonctions de lissage d'ozone localisées proches de leurs niveaux de la surface jusqu'à 100 hPa puis avec une contribution de nombreux niveaux, même éloignés dans la stratosphère. Ces perturbations observées dans les fonctions de lissage peuvent s'expliquer par la convolution entre la matrice de covariance d'erreur d'ébauche et les Jacobiens dans le calcul de la matrice **AK**.

8.2.3 Résultats

Avant de réaliser la sélection de canaux, nous avons classé les canaux IASI sensibles à l'ozone par ordre d'informativité additionnelle aux canaux opérationnels déjà assimilés à Météo-France. Pour cela, nous avons utilisé la méthode des DFS issue de la théorie de l'information qui fournit une mesure du gain en information recueilli par les observations. Pour le calcul du DFS, nous avons fait intervenir les Jacobiens, la matrice **B** issue de la méthode NMC et la matrice $\widetilde{\mathbf{R}}$ diagnostiquée. Le $\mathrm{DFS_{TOT}}$ a été choisi comme facteur de qualité, où $\mathrm{DFS_{TOT}}$ est la somme des DFS de température ($\mathrm{DFS_T}$), d'humidité ($\mathrm{DFS_q}$), d'ozone ($\mathrm{DFS_{O_3}}$) et de température de peau ($\mathrm{DFS_{T_{skin}}}$). En effet, la prise en compte de chaque variable dans la sélection est importante car nous souhaitons améliorer les analyses de chacune d'entre elles. Notre point de départ est la moyenne de la valeur $\mathrm{DFS_{TOT}}$ sur les 345 profils des 122 canaux opérationnels à Météo-France. Ensuite, nous calculons les 306 combinaisons de 122 canaux + 1 canal O_3 supplémentaire. Nous sélectionnons le canal fournissant la valeur moyenne de $\mathrm{DFS_{TOT}}$ la plus importante. Le processus itératif se poursuit avec 305 combinaisons de 123 + 1 canaux et ce, jusqu'à ce que tous les canaux soient sélectionnés.

La moyenne globale des valeurs de DFS augmente rapidement avec seulement l'ajout de 120 canaux, puis les valeurs convergent vers un seuil lorsque de nouveaux canaux sensibles à l'ozone sont ajoutés. Le potentiel d'information contenu dans ces canaux est donc rapidement atteint. Le gain supplémentaire (122 + 306) en $\mathrm{DFS_{TOT}}$ est :

$$\mathbf{6,09}(\mathrm{DFS_{TOT}}) = \mathbf{3,80}(\mathrm{DFS_{O_3}}) + \mathbf{1,63}(\mathrm{DFS_T}) + \mathbf{0,64}(\mathrm{DFS_q}) + \mathbf{0,015}(\mathrm{DFS_{T_{skin}}}) \quad (8.3)$$

La contribution la plus élevée provient de $\mathrm{DFS_{O_3}}$. Cependant, nous notons un potentiel d'information des canaux sensibles à l'ozone sur la température et l'humidité.

La méthode des DFS permet de classer les canaux sensibles à l'ozone les plus informatifs en termes d'ozone, de température, d'humidité et de température de surface. Afin d'identifier les canaux ayant le plus grand impact sur les analyses thermodynamiques, nous avons réalisé des expériences 1D-Var. Pour identifier les différents échantillons de sélection de canaux, nous avons calculé le pourcentage du $\mathrm{DFS_{TOT}}$ additionnel disponible normalisé, 0 % représentant le DFS total pour les 122 canaux opérationnels et 100 % pour les 428 canaux (122 + 306). Nous avons sélectionné les canaux pour chaque gain de 10 % d'information (Tableau 8.1). Les résultats des expériences 1D-Var assimilant les différentes sélections de canaux sont comparés aux résultats de l'expérience assimilant les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés par Collard.

Pourcentage du DFS_{Total} additionnel disponible normalisé	10 %	20 %	30 %	34 %	40 %	50 %	60 %	70 %	80 %	90 %	100 %
Nombre de canaux IASI O_3 sélectionné	2	5	11	15	22	39	62	94	135	195	306

TABLE 8.1: Classement des nombres de canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés en fonction du pourcentage du DFS_{TOT} additionnel disponible normalisé.

Pour évaluer les analyses issues des différentes expériences 1D-Var, nous avons utilisé le même critère que celui utilisé dans [Coopmann et al., 2018] : la réduction d'erreur relative de l'analyse par rapport à l'ébauche en fonction des sondes (RED). Une différence avec les sondes utilisées dans l'étude du Chapitre 7, vient de l'utilisation des fonctions de lissage pour placer les sondes dans la résolution de IASI. On remarque que l'expérience assimilant les 15 canaux sensibles à l'ozone sélectionnés par Collard ne réduit pas autant le RED en température et en humidité que la sélection de 15 canaux sensibles à l'ozone effectuée dans cette étude. Cependant, comme prévu, la sélection de Collard permet de réduire un peu plus le RED d'ozone que notre sélection puisqu'elle a été faite exclusivement pour améliorer les analyses d'ozone. Inversement, l'objectif de notre étude est de sélectionner des canaux sensibles à l'ozone avec de l'information utile pour améliorer les analyses de température et d'humidité (voir la Figure 11 dans l'article).

Dans ce contexte, la sélection de canaux qui semble être le meilleur compromis pour réduire les RED de température et d'humidité est celle des 15 premiers canaux sélectionnés (représentant environ un tiers du gain total du DFS) (Table 8.3). Notons que pour cette sélection, 4 canaux sont en communs avec la sélection de Collard (1479, 1587, 1626 et 1643) comme l'illustre la Figure 8.6. On remarque que les canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés dans le cadre de cette étude couvrent une bande spectrale plus large que ceux sélectionnés par Collard.

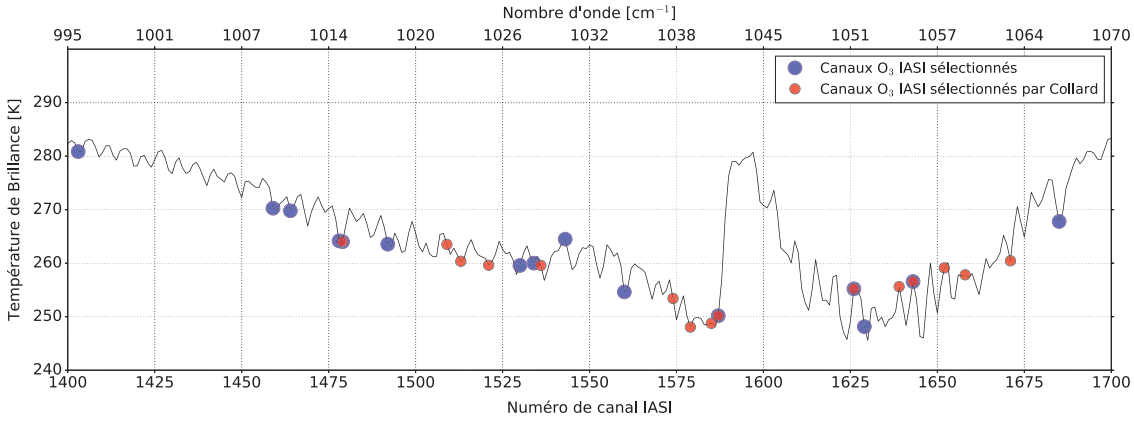


FIGURE 8.6: Spectre infrarouge de IASI en température de brillance simulé avec un profil standard de moyenne latitude incluant les 15 canaux sensibles à l'ozone sélectionnés (cercles en bleu) et les 15 canaux sensibles à l'ozone sélectionnés par Collard (cercles en rouge).

Les canaux sélectionnés dans le cadre de cette étude sont illustrés par leurs Jacobiens sur la Figure 8.7. La moyenne des jacobiens a été calculée à partir des 345 profils utilisés dans cette étude. Les jacobiens des canaux sélectionnés sont représentés en bleu, ceux sélectionnés par Collard en rouge et les 4 canaux communs en vert. On remarque que les jacobiens des canaux sélectionnés dans le cadre de cette étude ont des répartitions de leurs valeurs plus importantes en température, humidité et ozone que ceux sélectionnés par Collard. On note également, que plusieurs canaux sélectionnés, différents de la sélection de Collard, ont des valeurs de jacobien en température et humidité deux fois plus importantes dans la troposphère.

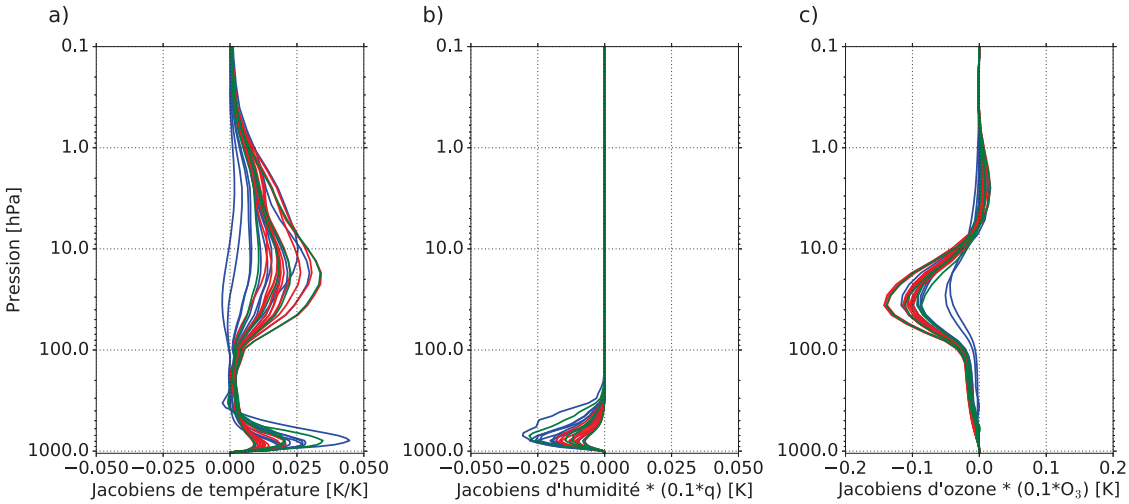


FIGURE 8.7: Moyenne de jacobiens de température (a), d'humidité (b) et d'ozone (c) en fonction de la pression pour les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés (en bleu) et sélectionnés par Collard (en rouge). En vert sont représenté les jacobiens des 4 canaux communs.

L'évaluation des analyses à l'issue de l'expérience assimilant cette nouvelle sélection est très encourageante puisque que l'examen des RED nous indiquent que les analyses en température et en humidité sont améliorées respectivement de 13,8 % et 20,9 % par rapport aux analyses n'assimilant que 122 canaux. Les canaux sélectionnés dans cette étude apportent un gain supplémentaire par rapport aux canaux sélectionnés par Collard. En effet, ces derniers améliorent plus faiblement les analyses en température et humidité avec respectivement des valeurs de RED de 9,5 % et 3,4 % par rapport aux analyses n'assimilant que les 122 canaux opérationnels. Évidemment, l'analyse en ozone est également largement améliorée.

Canal	Nombre d'onde	Canal	Nombre d'onde	Canal	Nombre d'onde
1403	995,50	1492	1017,75	1587	1041,50
1459	1009,50	1530	1027,25	1626	1051,25
1464	1010,75	1534	1028,25	1629	1052,00
1478	1014,25	1543	1030,50	1643	1055,50
1479	1014,50	1560	1034,75	1685	1066,00

TABLE 8.2: Liste des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés et leur nombre d'onde associés.

Canaux IASI	122 opérationnels	122 + 15 O_3 Collard	122 + 15 O_3 sélectionnés
	DFS (moyenne ± écart-type)		
Température	3,57 ± 0,20	3,77 ± 0,20	3,79 ± 0,20
Humidité	2,54 ± 0,70	2,60 ± 0,70	2,61 ± 0,70
Ozone	0,05 ± 0,02	1,78 ± 0,80	1,88 ± 0,80
	RED / 122 canaux opérationnels		
Température		- 9,50 %	- 13,80 %
Humidité		- 3,40 %	- 20,90 %

TABLE 8.3: Tableau récapitulatif des DFS en température, humidité et ozone des canaux opérationnels et des 15 canaux de Collard et sélectionnés supplémentaires. Résultats des expériences d'assimilation par les RED en température et humidité de l'ajout des 15 canaux de Collard et sélectionnés par rapport à l'assimilation seule des 122 canaux opérationnels.

8.2.4 Conclusion et discussion

Les résultats moyens de DFS sur 345 profils indiquent que les 306 canaux sensibles à l'ozone de l'IASI fournissent des informations supplémentaires par rapport aux 122 canaux opérationnels. Pour la température, le DFS passe de 3,57 (122 canaux) à 5,20 (122 + 306 canaux), pour l'humidité il passe de 2,54 à 3,18, pour l'ozone de 0,05 à 3,86 et pour la température de peau de 0,979 à 0,994. Si on ajoute ces 306 canaux aux 122 canaux opérationnels, l'information est principalement redondante dans cette partie du spectre puisque 39 canaux suffisent à fournir 50 % de l'information disponible sur les 306 canaux sensibles à l'ozone. Afin de sélectionner les canaux d'ozone qui amélioreraient le plus les analyses de température et d'humidité, plusieurs expériences 1D-Var ont été réalisées dans un cadre unidimensionnel (1D-Var). Pour quantifier la contribution des canaux d'ozone aux analyses, nous avons estimé la réduction d'erreur relative des analyses de température, d'humidité et d'ozone par rapport aux ébauches en fonction des données des sondes *in situ* indépendantes comme données de vérification. Les résultats montrent que l'ajout de canaux d'ozone supplémentaires n'est pas forcement bénéfique à l'analyse. La non-linéarité des résultats de la réduction d'erreur relative (RED) lorsque des canaux sensibles à l'ozone sont ajoutés peut s'expliquer par les incertitudes globales liées à l'utilisation du 1D-Var. De plus, les profils d'ébauche sont déjà de bonne qualité, ce qui signifie que le seuil d'amélioration est limité. Enfin, les profils des sondes ne représentent pas la réalité et peuvent également comporter des erreurs, ce qui peut expliquer pourquoi les analyses sont moins proches des données de vérification chaque fois que de nouveaux canaux sont ajoutés. Nous avons également réalisé une expérience 1D-Var avec les 15 canaux sélectionnés par Collard dont les résultats ont été comparés aux expériences avec les différentes sélections. Le but de cette sélection est de fournir des informations qui peuvent améliorer l'analyse de la température et de l'humidité et le meilleur compromis pour cela est atteint avec une expérience assimilant également 15 canaux IASI sensibles à l'ozone. Cette nouvelle sélection de canaux réduit en moyenne l'erreur d'analyse par rapport à l'utilisation de seulement 122 canaux. Le RED en température diminue de 0,58 point de pourcentage, en humidité de 0,62 point de pourcentage et en ozone de 4,46 points de pourcentage, ce qui signifie une amélioration, respectivement, de 13,8 % de analyse en température, de 20,9 % en humidité et très largement en ozone comparé à l'analyse de l'expérience avec seulement 122 canaux.

Les profils verticaux de réduction d'erreur relative pour l'assimilation des 15 canaux supplémentaires sélectionnés montrent une meilleure analyse de la température troposphérique. Les profils verticaux des DFS de ces canaux montrent un maximum dans la troposphère et dans la stratosphère moyenne mais les sondes n'ont pas de données à ces niveaux pour le vérifier. Enfin, comme on pouvait s'y attendre, cette sélection de canaux améliore considérablement l'analyse de l'ozone jusqu'à 14 % dans la basse stratosphère. La dégradation du RED en ozone dans la basse troposphère peut s'expliquer par le manque de sensibilité des canaux sensibles à l'ozone dans cette partie de l'atmosphère. L'amélioration de la qualité des analyses est obtenue à des niveaux où les Jacobiens en température, humidité et ozone des 15 canaux sélectionnés sont au maximum.

Ces résultats sont très encourageants et nous permettent de proposer une nouvelle sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone pour le modèle global ARPEGE. L'objectif pour la suite est d'étendre l'ensemble des études réalisées jusqu'ici au système global de PNT ARPEGE en ajoutant cette nouvelle sélection au 4D-Var et en couplant les champs d'ozone de MOCAGE au modèle ARPEGE.

Une importante révision de cet article a été réalisée à la demande des reviewers. Cette mise à jour du papier a concerné l'ensemble des travaux effectués puisque la sélection de canaux s'est portée cette fois-ci sur l'ensemble du spectre IASI et plus particulièrement sur les bandes spectrales 1 et 2. Une grande partie des méthodes et des expériences ont été modifiées dans le nouveau papier. Le nouveau titre de l'article est « Update of IASI channel selection with correlated observation-errors for NWP ». Ce dernier est actuellement en révision ([Coopmann et al., 2020], DOI :10.5194/amt-2019-242).

8.3 L'article : Ozone-sensitive channel selection over IASI full spectrum with correlated observation errors for NWP

Ozone-sensitive channel selection over IASI full spectrum with correlated observation errors for NWP

Olivier Coopmann[1], **Vincent Guidard**[1], **Béatrice Josse**[1], **Virginie Marécal**[1], **and Nadia Fourrié**[1]

[1]CNRM, Université de Toulouse, Météo-France, CNRS, Toulouse, France

Correspondence: O. Coopmann, Météo-France, CNRM/GMAP/OBS, 42 Avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex, France (olivier.coopmann@umr-cnrm.fr);V. Guidard (vincent.guidard@meteo.fr)

Abstract.

The Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI) onboard the Metop satellites provides 8461 channels in the infrared spectrum, covering the spectral interval 645 - 2.760 cm^{-1} at a resolution of 0.5 cm^{-1}. The high volume of data observation resulting from IASI presents many challenges. In current Numerical Weather Prediction (NWP) models, assimilating all channels is not feasible, due to data transmission, data storage and significant computational costs. One of the methods for reducing the data volume is the channel selection. Many NWP centres use a subset of 314 IASI channels including 15 ozone-sensitive channels. However, this channel selection has been carried out assuming uncorrelated observation errors. In addition, these ozone-sensitive channels have been selected only for ozone information.

The objective of this study is to carry out a new selection of IASI ozone-sensitive channels from the full spectrum over a spectral range of 1,000 - 1,070 cm^{-1}. This selection is done with a full observation error covariance matrix to take into account cross-channel error correlations. A sensitivity method based on the channel spectral sensitivity to variables and a statistical approach based on the Degrees of Freedom for Signal (DFS) have been chosen. To be representative of atmospheric variability, 345 profiles from around the world over a one-year period were selected. The new selection, is evaluated in a One-Dimensional Variational (1D-Var) analyses framework.

This selection highlights a new set of 15 IASI ozone-sensitive channels. The results are very encouraging since by adding these 15 channels to 122 operational channels, temperature and humidity analyses are improved by 13.8 % and 20.9 % respectively. Obviously, these 15 channels significantly improve ozone analyses. In addition to considering inter-channel observation error correlations, the channel selection method uses a robust background error covariance matrix that takes into account temperature, humidity and ozone errors using a lagged forecast method over a one-year period. The new selection of IASI ozone-sensitive channels will be soon used in the global 4D-Var ARPEGE (Action de Recherche Petite Echelle Grande Echelle) data assimilation system.

Copyright statement. TEXT

1 Introduction

The use of satellite observations in data assimilation systems has greatly advanced Numerical Weather Prediction (NWP) models. In particular, observations from infrared sounders have significantly improved the quality of weather forecasts (Hilton et al., 2012). At Météo-France, ARPEGE (Action de Recherche Petite Echelle Grande Echelle) is the global NWP model used in operations (Courtier et al., 1991) and provides forecasts up to 102 h. The Four Dimensional Variational (4D-Var) data assimilation system that provides the initial conditions to ARPEGE uses 75 % of observations from infrared sounders. The major contributor is the Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI), which alone accounts for 60 % of the data assimilated in the NWP global model ARPEGE. The IASI instrument was jointly developed by CNES (Centre National d'Études Spatiales) and EUMETSAT (European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites). It was first launched in 2006 on board the MetOp-A polar orbiting satellite. The second instrument was launched on board MetOp-B in 2012, the last

one, was launched on board MetOp-C in 2018. Its spectrum ranges from 645 to 2,760 cm^{-1} with a spectral sampling of 0.25 cm^{-1} and a spectral resolution of 0.5 cm^{-1} leading to a set of 8,461 radiance measurements. The high volume of data resulting from IASI presents many challenges, particularly in the areas of data transmission, data storage and information content for example. The methods for reducing the data volume are channel selection, spatial sampling or principle components analysis. A selection of 300 channels was performed by (Collard, 2007) for NWP purposes. Channels were mainly selected in the CO_2 long wave (LW) band (for temperature retrievals), in the atmospheric window regions (for surface properties and clouds), in the water vapour (H_2O) band (for humidity retrievals) and in O_3 long wave band (for ozone retrievals). CNES added 14 other channels for climate monitoring purposes. Thus, this reduces the use of IASI data to 1.5 % of the full spectrum.

NWP models have evolved rapidly, resulting in significant improvements in the quality and accuracy of weather forecasts. However, many centres have increased their computing capability to assimilate more satellite observations. An interesting approach is the additional assimilation of observation sensitive to atmospheric composition compatible with a coupled assimilation of the Earth system. This strategy is followed by the ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) leading to the use of the NWP model IFS (Integrated Forecasting System) for weather forecasting and the modelling of the atmospheric composition (greenhouse gases, aerosols, and chemical species). Ozone is potentially beneficial because these sensitive channels are also sensitive to temperature and humidity and they can therefore provide additional information in 4D-Var data assimilation. Indeed, the work of (Derber and Wu, 1998) showed that a realistic ozone information improves the use of ozone-sensitive channel satellite radiances in the High Infra-red Resolution Sounder (HIRS) in the global forecast system at NCEP (National Centers for Environmental Prediction). (Semane et al., 2009) showed potential benefits of 4D-Var ozone assimilation for the improvement of the wind field through dynamics-ozone coupling with the global model ARPEGE. Many more studies have shown the benefits of ozone assimilation for NWP. Since ozone is part of the control variable of the 4D-Var IFS, the assimilation of 16 IASI ozone-sensitive channels (from their own channel subset) in operation improves ozone analyses (Han and McNally, 2010), (Dragani and McNally, 2013). (Lupu and McNally, 2013) have shown the positive impact on wind analysis of assimilating ozone-sensitive channels from the Spinning Enhanced Visible and Infrared Imager (SEVIRI) instrument on board the MSG (Meteosat Second Generation) geostationary satellite. Finally, (Coopmann et al., 2018) showed that the assimilation of 15 IASI ozone-sensitive channels from Collard's channel selection, provides additional information to improve temperature, humidity and ozone analyses. However, the 15 IASI ozone-sensitive channel selection from Collard has been carried out only for extracting ozone information with a diagonal observation-error covariance matrix (**R**). Indeed, since the beginning of the use of infrared observations for NWP, channel selections have been mostly performed often using diagonal **R** matrices such as those made by (Fourrié and Thépaut, 2003) for AIRS (Atmospheric Infrared Sounder) and (Gambacorta and Barnet, 2013) for CrIS (Cross-track Infrared Sounder).

This study is a preparatory work towards the use of additional IASI channels in the global 4D-Var operational system at Météo-France. The objective is to carry out a ozone-sensitive channel ranking to obtain an additional gain on thermodynamic information (temperature, humidity) and to make a new channel selection using a full **R** matrix. To achieve this, a pre-selection using physical method based on non-linear sensitivity study and ranking selection with Degrees of Freedom for Signal (DFS) method has been undertaken. Important prerequisites for a beneficial interaction between additional IASI information and the 4D-Var system, are the use of accurate IASI observations, ozone background and their respective errors. Hence, the following inputs and operator have been used:

- Ozone background profiles come from the three dimensional MOCAGE (Modèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle) Chemistry Transport Model (CTM) (Guth et al., 2016) of Météo-France. This ozone field is consistent with dynamical fields of the global model ARPEGE as MOCAGE is forced by ARPEGE dynamics.

- The Radiative Transfer Model (RTM) RTTOV (Radiative Transfer for TOVS; TOVS: TIROS Operational Vertical Sounder and TIROS: Television Infrared Observation Satellite) simulated IASI radiances from thermodynamic information of the global model ARPEGE.

- Realistic observation error covariance matrix from a diagnostic method including IASI interchannel correlations (Desroziers et al., 2005).

- A background error covariance matrix including ozone, temperature and humidity errors with inter-variable correlations, computed with lagged forecast method.

The article is structured as follows, Section 2 presents an overview of the MOCAGE CTM, the IASI instrument, its use in the NWP ARPEGE system, and a description of the case study. We then introduce in Section 3, results of simulated IASI observations over the full spectrum and the preselection of all ozone-sensitive channels using a physical method based on non-linear sensitivity. The diagnosed observation error covariance matrix taking into account the IASI

inter-channel error correlations is computed and the background error covariance matrix including ozone is also investigated with a lagged forecast method. Section 4 describes the channel selection method to extract information content of IASI ozone-sensitive data. Then, channel selection are evaluated with 1D-Var experiments on top of the operational IASI channel dataset and the final selected ozone-sensitive channel selection for NWP are presented. Finally, Section 5 summarizes the results and opens discussion.

2 Model and data

2.1 Description of the case study

To perform a channel selection in an optimal way, IASI pixels from MetOp-A and MetOp-B have been selected and collocated around a subset of 40 radiosounding launching sites spread all over the globe (Figure 1). Temperature, humidity and ozone in-situ data were measured at different latitudes, considering several atmospheric scenarios. These profiles available from the collection of the World Ozone and Ultraviolet Data Center (WOUDC) have been selected between March 2016 and March 2017 to take into account the annual variability and have been used as verification data in Section 5.

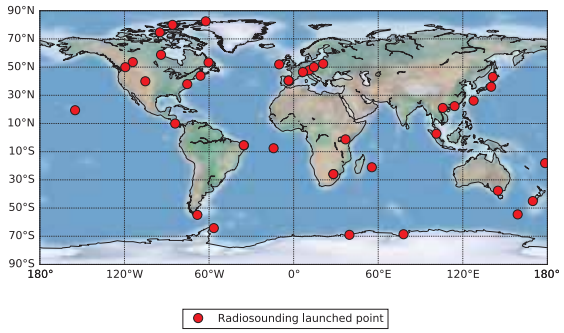


Figure 1. Map of radiosounding launched point (40 sites in red) and 345 sonde profiles from WOUDC networks.

Collocations between radiosondes and IASI pixels have been carried out using several criteria defined such as to select the closest pixel for each radiosonde. The smallest orthodromic distance with a maximal threshold of 100 km and a maximal temporal difference of 60 min between IASI pixel and radiosonde were retained. The IASI instrument also includes an Integrated Imaging Subsystem (IIS) that allows to coregister interferometric measurements with high resolution imager AVHRR (Advanced Very High Resolution Radiometer) (Saunders and Kriebel, 1988). AVHRR provides cloud and heterogeneity information in each IASI pixel. To avoid the use of cloudy pixels, IASI observations are discarded whenever the AVHRR cloud cover is above 0%. Hence, a subset of 345 radiosondes each collocated with one IASI pixel has been selected including 222 pixels over land, 106 over sea and 17 over sea ice.

Then, the *a priori* atmospheric profiles of temperature, specific humidity, surface temperature, surface humidity, surface pressure, zonal and meridian surface winds come from the global model ARPEGE forecasts (every 3 hr), which were extracted for the same period and location as for the IASI pixels as well as ozone profiles from MOCAGE. NWP and CTM models have σ-hybrid vertical coordinates (105 levels in ARPEGE and 60 levels in MOCAGE with model top at 0.1 hPa), which were interpolated onto the 54 fixed-pressure levels of the RTM RTTOV model. In order to use a realistic surface temperature, the skin temperature is retrieved from the radiative transfer equation inversion using IASI window channel 1194 (943,25 cm^{-1}) ((Boukachaba, 2017) and (Vincensini, 2013)) for each pixel. This retrieval relies on the specification of emissivity values over land from The Combined ASTER MODIS Emissivity over Land (CAMEL) (Borbas et al., 2018) and from a surface emissivity model (ISEM) (Sherlock and Saunders, 1999) over the open sea and sea ice. Thus, in the following, we will not assimilate this particular IASI window channel.

2.2 MOCAGE model

MOCAGE is an off-line global three-dimensional chemistry transport model (Josse et al., 2004), (Guth et al., 2016). It provides the time evolution of the chemical air composition from the surface to the stratosphere. This model is used for operational daily forecasts e.g. (Marécal et al., 2015) and also for research studies e.g. (Bousserez et al., 2007), (Anderson et al., 2017), (Morgenstern et al., 2017), (Guth et al., 2018).

The meteorological fields (temperature, wind, specific humidity, pressure, cloud and precipitation) used here in MOCAGE come from outputs of a separate meteorological model, ARPEGE. The advection of chemical species in MOCAGE follows the semi-lagrangian approach of (Williamson and Rasch, 1989). Sub-grid scale convection and diffusion are represented using (Bechtold et al., 2001) and (Louis, 1979), respectively. Dry deposition comes from (Wesely, 2007) parametrisation. Scavenging of trace gases by stratiform and convective precipitation follows (Giorgi and Chameides, 1986) and (Mari et al., 2000), respectively. Gas chemistry is based on RACM (Regional Atmospheric Chemistry Mechanism) chemical scheme (Stockwell et al., 1997) for the troposphere, and REPROBUS (Reactive Processes Ruling the Ozone Budget in the Stratosphere) (Lefevre et al., 1994), (Lefèvre et al., 1998) for the stratosphere. This leads to a total of 115 gas species and 372

reactions.

Ozone from MOCAGE simulations was already used by (Coopmann et al., 2018) in their 1D-Var data assimilation of IASI ozone-sensitive channels. Since then, MOCAGE chemistry was improved. All thermal reaction rates were updated following the latest version of JPL (Jet Propulsion Laboratory) recommendations (Burkholder et al., 2015). Photolysis rates are calculated in MOCAGE via a look-up table computed off-line. This table was updated using TUV (The Tropospheric Ultraviolet and Visible) software version 4.6 (Madronich, 1987). Also the photolysis of PAN (Peroxyacetic Nitric Anhydride) was added. All these changes provide improvements to ozone in MOCAGE, particularly in the Upper Troposphere and Lower Stratosphere (UTLS) where ozone plays an important role on the radiation. Ozone profiles from MOCAGE are used in this study for two purposes: firstly, as input to the RTM for the simulation of IASI radiances, and secondly, to calculate the background error covariance matrix with a lagged forecast approach.

2.3 Radiative Transfer Model

To extract information from IASI radiances, we need to confront them with what the model already knows. For this purpose, IASI observations are simulated with a RTM known as RTTOV. RTTOV simulates the top of the atmosphere clear-sky radiances in the visible, infrared and microwave spectrum. In the data assimilation formalism, differences between observations and simulated counterparts formulated as $\mathbf{d}_b^o = \mathbf{y}^o - \mathcal{H}(\mathbf{x}^b)$ are known as First Guess (FG) departure or innovation, where $\mathbf{y}^o$ is the observation, $\mathbf{x}^b$ is the background and $\mathcal{H}$ is the observation operator, which simulates radiances from $\mathbf{x}^b$ through the RTM. To accurately simulate satellite observations, RTTOV requires knowledge of thermodynamic and chemical profiles that represent the most probable atmospheric state at the time of the measurement by the satellite instrument.

2.4 IASI satellite data

IASI is a Michelson interferometer measuring 8.461 spectral samples between 3.62 and 15.5 μm with a resolution of 0.5 cm^{-1} after apodisation. IASI scans cross-track in 30 successive elementary fields of view (EFOV), each composed of 4 instantaneous fields of view (IFOV). The EFOV's span a $\pm$48.33° range, symmetric with respect to the Nadir, in steps of 3.33°. The swath width on the ground is approximately 2,200 km, which provides global Earth coverage twice a day. The IFOV is a disc or pixel of 12 km diameter at sub-satellite point (August et al., 2012). The shape of the IFOV at the edge of the scan line is an ellipse: across track, it measures 39 km and along track, 20 km. This sounder provides indirect information on temperature and humidity profiles to be obtained along with that of cloud cover, aerosols, atmospheric chemistry compounds such as O_3, CO_2, CO, CH_4, HNO_3 and N_2O (Clerbaux et al., 2009) and surface properties. The retrieval precision aimed for is 1 K/1 km in terms of temperature and 10%/1 km in terms of relative humidity (Hilton et al., 2012).

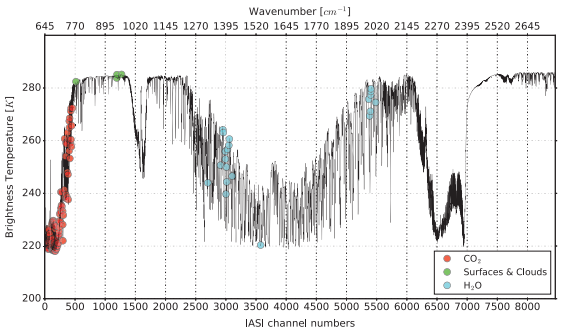


Figure 2. The IASI infrared spectrum in Brightness Temperature simulated for a standard mid-latitude clear sky profile (black) and 123 IASI channels operationally assimilated at Météo-France; 99 CO_2 sensitive channels (red), 4 window channels (green) and 20 H_2O sensitive channels (cyan).

A subset of 314 channels corresponding to Collard's selection is routinely monitored at Météo-France and up to 123 channels are assimilated in operations; 99 temperature channels in the LW CO_2 band [650 to 770 cm^{-1}], 4 window channels [790 to 980 cm^{-1}] and 20 H_2O channels [1.210 to 1.650 cm^{-1}] (Figure 2). The sensitivity of this subset to temperature, humidity, ozone and skin temperature is evaluated by computing their mean Jacobians for 345 *a priori* profiles (Figure 3). The Jacobian represents the sensitivity of the Brightness Temperature (BT) with respect to a change in thermodynamic or chemical parameters. Jacobians for temperature (T), humidity (q), ozone (O_3) and skin temperature (T_{skin}) were calculated with RTM RTTOV. Jacobians of humidity and ozone were multiplied by 10 % of their concentrations to overcome the large variability of these parameters.

Temperature Jacobians (Figure 3.a) for the 99 CO_2 sensitive channels **[index 0 to 99]** show sensitivity from the lower troposphere up to the top of the stratosphere with a higher value in the stratosphere with a maximum around $0.10\ K.K^{-1}$. The 4 window channels **[index 100 to 103]** show very low sensitivity to atmospheric temperature. The 20 H_2O sensitive channels **[index 104 to 123]** show high sensitivity in the troposphere with a maximum value around $0.15\ K.K^{-1}$. All the channels have temperature-sensitive Jacobians because by definition the radiative transfer equation involves this parameter. Humidity Jacobians (Figure 3.b) for the CO_2 sensitive channels show no sensitivity except for 72 to 99 channel indices with values around $0.05\ K$. Window channels show some sensitivity in lower troposphere.

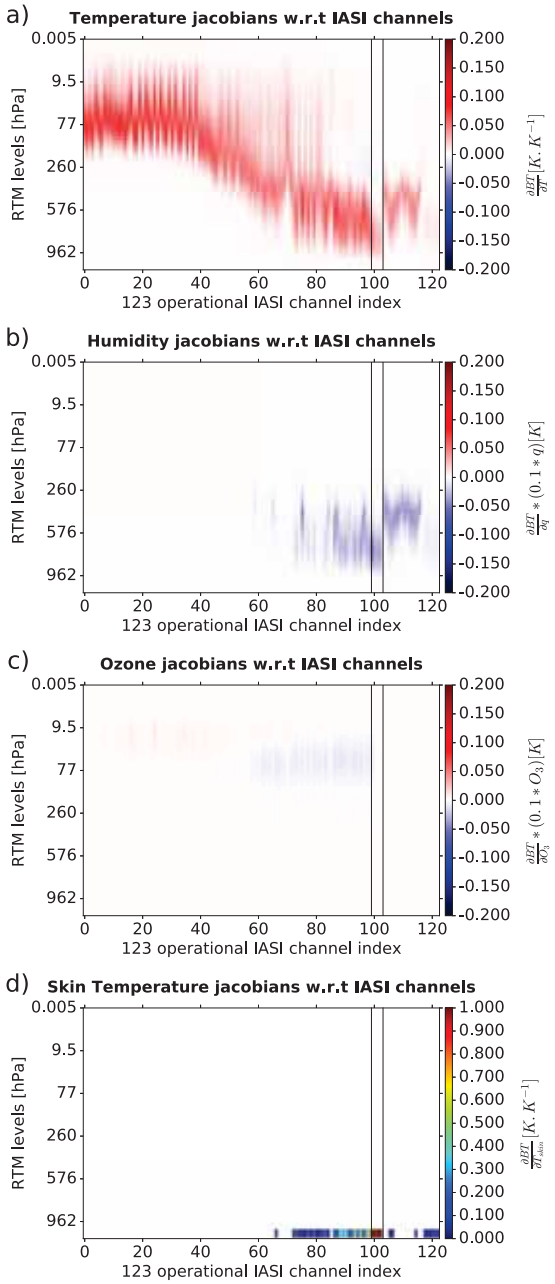


Figure 3. Mean Jacobians of temperature (a), humidity (b), ozone (c) and skin temperature (d) for 123 IASI operational channels at Météo-France w.r.t. 54 RTM pressure levels [hPa].

The H_2O sensitive channels exhibit higher values in the mid-troposphere for the 103 to 115 channel index with a maximum around 0.12 K and lower values for the 116 to 123 channel index. Ozone Jacobians (Figure 3.c) show almost no sensitivity. Finally, skin temperature Jacobians (Figure 3.d) show low sensitivity for the channels on each side of the atmospheric window with values between 0.10 to 0.40 $K.K^{-1}$. Window channels show higher values around 0.90 $K.K^{-1}$. Overall, we notice that the 123 channels are almost insensitive to ozone. They provide temperature sensitivity over a large part of the atmosphere. Water vapour sensitive channels have Jacobians of humidity whose values are high on mid tropospheric where there is on average the most humidity.

3 Experimental framework

3.1 Simulated IASI observations

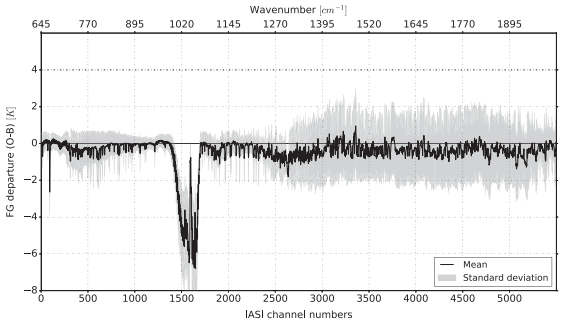


Figure 4. Mean and standard deviation of FG departures with respect to 5500 IASI channels number and wavenumber (IASI bands 1 & 2) using a set of 345 profiles.

In this experiment, we simulated the IASI radiances for the 345 pixels collocated with the 345 radiosondes using in RTTOV the 345 profiles *a priori* from the ARPEGE model. The simulations for the 345 case studies were compared with real IASI observations and statistics calculated (in Brightness Temperature) on the channels contained in spectral bands 1 and 2 (5500 channels). Mean and standard deviation of FG departures show different values according to spectral range (Figure 4). Generally, mean FG departures display values less than 0.75 K with standard deviation between 0.25 to 2.00 K, except for O_3 sensitive channels. Indeed, we note a large mean of FG departures between 1000 to 1070 cm^{-1} with values up to 7.00 K and standard deviation between 0.50 to 2.50 K. The ozone profiles from MOCAGE are realistic but do not represent reality, hence the important bias of ozone-sensitive channels. However, the study conducted by (Coopmann et al., 2018) showed that the standard deviation of FG departures are 3 times lower for IASI ozone-sensitive channels using realistic ozone profiles from MOCAGE than the reference ozone profile available in RTTOV. The mean of FG departures calculated in this experiment is used to perform a static bias correction of IASI observations for the next step.

3.2 Pre-selection of O_3 channels based on a physical method

First step of channel selection is the identification of IASI ozone-sensitive channels over the full spectrum. For this purpose, we have used the methodology developed by (Gambacorta and Barnet, 2013) for the Cross-track Infrared Sounder (CrIS) instrument. This method involves assessing sensitivity of the brightness temperature response ΔBT, represented by the difference between RTTOV simulations with unperturbed and perturbed profiles. Only the vertical ozone profile was modified with a constant perturbation, typically 10 % for the perturbed simulations. Same background datasets from previous simulation experiments were used. The ΔBT indicates the sensitivity of each channel to ozone in all atmospheric cases (345).

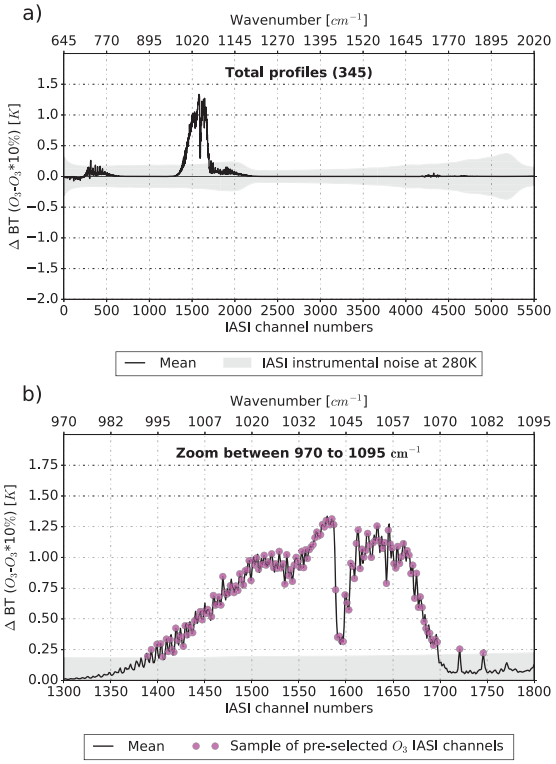


Figure 5. Mean of differences between simulations with the unperturbed and perturbed ozone profiles (ΔBT) w.r.t. IASI channels and wavenumbers [cm^{-1}] using a set of 345 profiles (a). Sample of pre-selected ozone-sensitive channels between 970 and 1095 cm^{-1} for ΔBT using total datasets (b). The shaded area represents IASI instrumental noise at 280 K.

The largest ΔBT sensitivity of IASI channels is located between 645 - 770 cm^{-1} and 970 - 1095 cm^{-1}, with values around 0.20 and 1.25 K (Figure 5.a). Sensitivity identified between 645 - 770 cm^{-1} is for CO_2 sensitive channels already used operationally to extract temperature content. Only IASI channels between 970 - 1095 cm^{-1} and above the instrumental noise have been pre-selected. Thus, a sample of 306 IASI ozone-sensitive channels has been retained. These

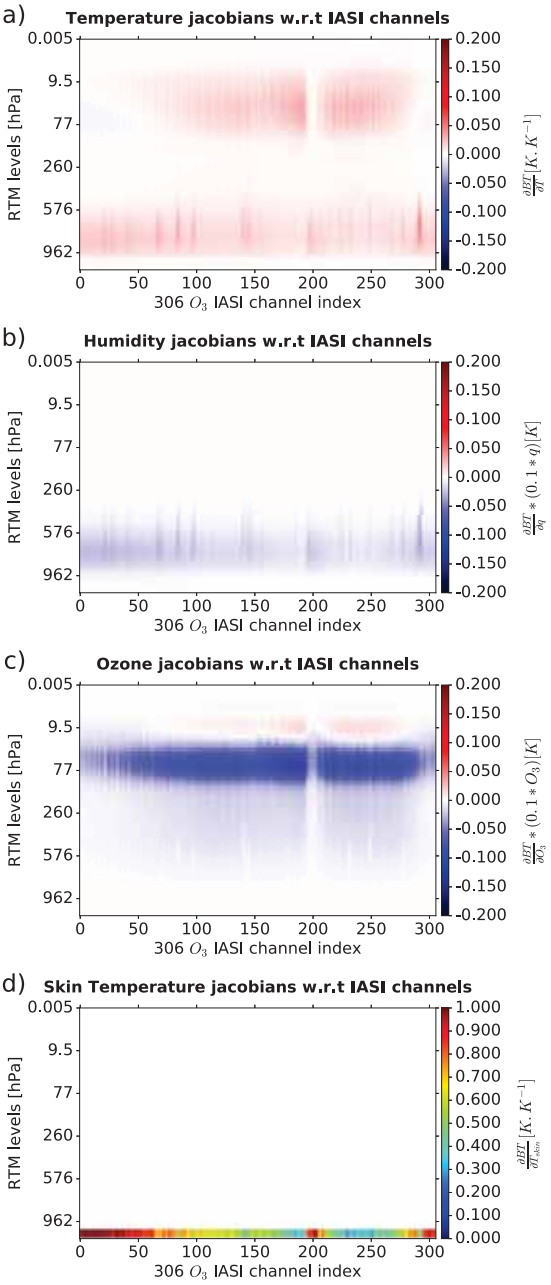


Figure 6. Jacobians in temperature (a), humidity (b), ozone (c) and skin temperature (d) for 306 O_3 IASI channels pre-selected w.r.t. 54 RTM pressure levels [hPa].

channels are shown in Figure 5.b.

We examine the Jacobians of 306 pre-selected ozone-sensitive channels w.r.t temperature, humidity, ozone and skin temperature in Figure 6 as it has been done for operational IASI channels (Figure 3). Temperature Jacobians (Figure 6.a) **[index 0 to 306]** show sensitivity in the lower troposphere up to the mid-troposphere with a maximum value of around $0.05\ K.K^{-1}$ due to the high concentration of tropospheric ozone. The rather sensitive channels in the stratosphere have high Jacobian temperature values towards the mid-stratosphere where stratospheric ozone concentrations are highest. Figure 6.b reveals a humidity sensitivity in the lower troposphere with a maximum value of around $0.05\ K$. Ozone Jacobians (Figure 6.c) have high sensitivity in the middle of the stratosphere with maximum values around 0.15 K corresponding to the region of the atmosphere having the largest stratospheric ozone concentrations. Finally, skin temperature Jacobians (Figure 6.d) show a large sensitivity between [0 to 75], [190 to 210] and [295 to 306] channel index with values between 0.70 to $1.0\ K.K^{-1}$. Indeed, the channels with high values of skin temperature Jacobians are channels close to atmospheric windows. These Jacobians of the 306 pre-selected O_3 channels indicate a potential of additional information on temperature, humidity and skin temperature compared to operational IASI channels especially for temperature and humidity in lower troposphere.

3.3 Background errors

The National Meteorological Centers (NMC) method by (Parrish and Derber, 1992) is a technique that defines background errors from the difference between NWP forecasts of various range valid at the same time. This method is here apllied to ozone forecasts. We consider differences from between 36 h and 12 h forecast ranges. The background error covariance matrix (**B**) is then constructed using long-term modelling results. MOCAGE was run to provide temperature, specific humidity (from ARPEGE) and ozone 3D distributions. Two twin simulations were performed. For each one, the configuration uses 60 hybrid levels, from the ground up to 0.1 hPa, and a global domain with a 1 ° horizontal resolution. The model was run from September 2015 to April 2017, the first 6 months being considered as spin-up. Meteorological inputs from ARPEGE to MOCAGE given every 3 h. Simulation method is illustrated in Figure 7:

- In the first simulation (MOC+12H), every day an ozone forecast up to 24 h range is produced using ARPEGE forecasts starting from an analysis at 00 UTC. The chemical fields for the day D at 24 h are used as the initial chemical fields of the day D+1 at 00 h. 1.5 yr simulation has been produced with this cycling mode;
- In the second simulation (MOC+36H), an ozone forecast up to 36 h range is produced using MOC+12H ozone initial field and using 36 h range meteorological fields from the ARPEGE forecast starting at D, 00 UTC.

Finally, **B** matrix is computed statistically from MOC+12H/MOC+36H forecast differences, valid at the same time, over a one year period (March 2017 to March 2018). The MOCAGE fields were interpolated on the 54 RTM pressure levels before computing statistics.

Figure 8 shows the background error standard deviation (σ) of temperature (a), logarithm of specific humidity (b) and ozone (c) with respect to pressure. We observe values of σ_T^b around 0.5 and 1.5 K between 1000 and 10 hPa, then values increase up to 3.0 K at 0.1 hPa. We note a peak of $\sigma_{log(q)}^b$ values around 0.6 log(kg/kg) beween 600 and 400 hPa. Then, $\sigma_{O_3}^b$ values show two peaks around 0.65 ppmv at 25 and 2 hPa. Finally, Figure 8 shows the background error correlation matrix of temperature (d), humidity (e) and ozone (f) with respect to model levels. Significant positives correlation are observed for temperature in the troposphere and upper stratosphere. We also note negative correlations in the UTLS. Then, the same trends are noticed for the humidity correlation in troposphere. Correlations of ozone are noticed for all atmospheric levels. The high positive correlations in temperature, humidity and ozone at the top of the stratosphere are caused by field interpolation to be set on RTM pressure levels. Indeed, RTM pressure levels rise to 0.005 hPa while MOCAGE pressure levels rise only to 0.1 hPa. These results are consistent with the work carried out by (Berre, 2000) and (Hólm and Kral, 2012).

This **B** matrix will be used for the channel selection. In this study, a univariate **B** matrix is chosen, which means that cross-correlation between temperature, humidity and ozone variables are not taken into account. This assumption prevents feedback effects of ozone on temperature and humidity (Dethof and Holm, 2004). In addition, levels used for the background-error covariance in channel selection and 1D-Var experiments are: 49 levels for temperature between 1013 and 0.06 hPa, 27 levels for humidity between 1013 and 115 hPa (no level in the stratosphere) and 49 levels for ozone between 1013 and 0.06 hPa.

3.4 Correlated observation errors

Diagonal observation-error covariance matrices are convenient to specify but it has been shown that for hyperspectral infra-red sounders such hypothesis is not valid (Bormann et al., 2011). Nevertheless, few channel selection studies have used a complete observational error covariance matrix taking into account cross-channel correlations. It is worth mentioning that (Ventress and Dudhia, 2014) performed a selection of IASI channels with a full **R** matrix, but like in Collard's study, the ozone-sensitive IASI channels were selected for the sole purpose of improving ozone analyses. A

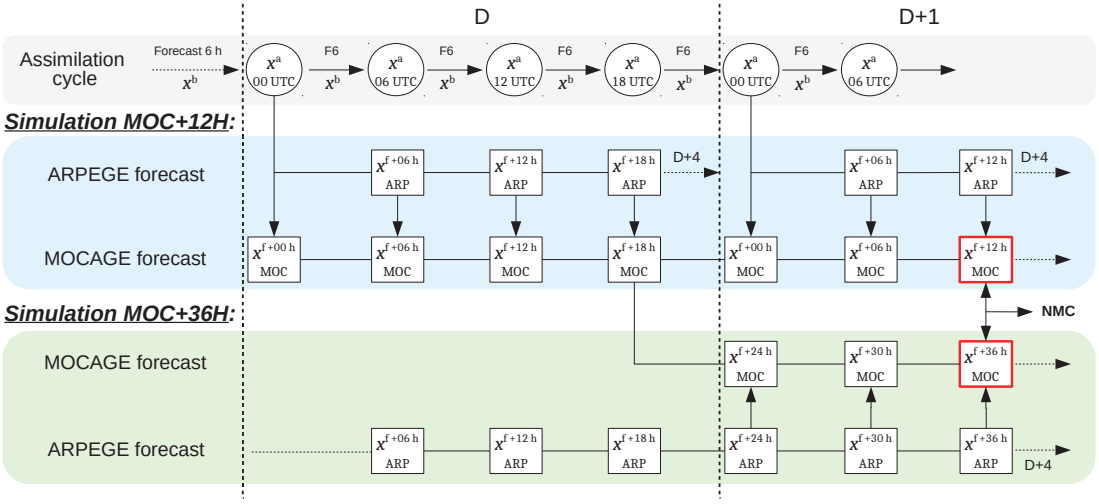


Figure 7. Schematic illustration of the NMC method using ARPEGE and MOCAGE models, where x_{MOC}^{f+12h}. is the forecast from simulation MOC+12H that valid at time D ; Similarly, x_{MOC}^{f+36h} is the forecast from simulation MOC+36H that valid at time D+1.

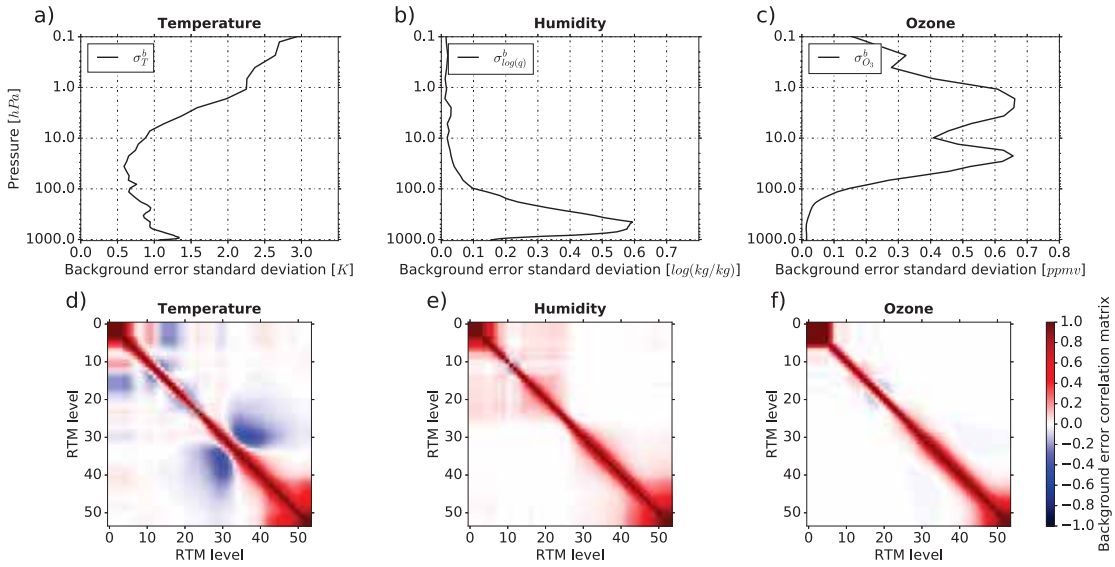


Figure 8. Standard deviation of temperature [K] (a), humidity [log(kg/kg)] (b) and ozone [ppmv] (c) background error with respect to pressure [hPa]. Background error correlation matrix of temperature (d), humidity (e) and ozone (f) with respect to RTM level. Note that level 0 is the top RTM level at $0.005\ hPa$ and level 54 is lowest RTM level at $1050\ hPa$.

first step towards the estimation of realistic observation-error standard deviation is to use standard deviation derived from FG departures previously computed. This provides simulated observation-error standard deviation represented by the red line in Figure 9.a with respect to IASI channel numbers (122 operational + 306 O_3 channels). This is a useful first approach but these observation-error standard deviations do not take into account the cross-correlation between channels.

In order to estimate the observation-error standard deviation and more generally the structure of the observation error covariance matrix $\mathbf{R}$, a diagnostic method introduced by (Desroziers et al., 2005) was used. Background and observation error covariance matrices can be estimated from observation departures to background and analysis. These

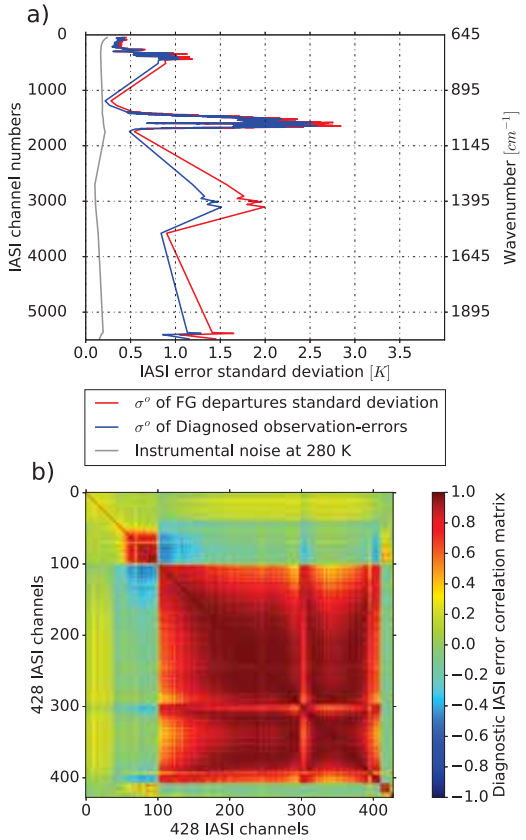


Figure 9. Simulated observation-error standard deviation with respect to IASI channel (122 operational + 306 O_3 channels) in red line, diagnosed observation-error standard deviation with respect to IASI channel in blue line and instrumental noise at 280 K in grey line (a). Diagnostic IASI error correlation matrix with respect to 428 IASI channels (b)

.

diagnosed matrices allow to investigated if of the "a priori" prescribed matrices, before analysis, are correctly specified. Taking the expected value of the cross-product of $\mathbf{d}_a^o$, where the vector of analysis residuals $\mathbf{d}_a^o$ is the difference between observations $\mathbf{y}$ and the analysis state projected onto the observation space $\mathcal{H}(\mathbf{x}^a)$ such as $\mathbf{d}_a^o = \mathbf{y} - \mathcal{H}(\mathbf{x}^a)$, and using the assumption of uncorrelated errors, (Desroziers et al., 2005) found a statistical approximation for the observation error covariance matrix $\widetilde{\mathbf{R}}$ as mean diagnosed matrix after iterations which reads: $\widetilde{\mathbf{R}} = \mathbf{E}\left[\mathbf{d}_a^o (\mathbf{d}_b^o)^{\mathrm{T}}\right]$, where E is the mathematical expectation. A set of 1D-Var experiments was carried out to diagnosed $\mathbf{R}$ matrix up to the convergence. This diagnostic was conducted using as a starting point a diagonal $\mathbf{R}$ matrix with variances from the standard deviations of FG departures previously calculated for the operational channels and the 306 ozone-sensitive channels. The **B** matrix calculated using the NMC method was also used. Finally, the 1D-Var were made for the 345 profiles. Desroziers diagnostic is commonly used by the assimilation community, (eg at the MetOffice (Weston et al., 2014), or at ECMWF (Bormann et al., 2011)). The diagnosed observation-error standard deviations are represented by blue line with respect to IASI channel numbers in Figure 9.a. The grey line represents values of instrumental noise at 280 K. We note that the values of diagnosed observation-error standard deviation for CO_2 and O_3 sensitive channels are close to simulated observation-error standard deviation while the values of diagnosed observation-error standard deviation for surface and H_2O sensitive channels are smaller than values of simulated observation-error standard deviation.

Figure 9.b displays the diagnosed IASI error correlation matrix from diagnosed $\widetilde{\mathbf{R}}$ matrix with respect to 428 channels. Correlation between 0 and 99 IASI channels index indicates sensitivity of CO_2 from the top of the stratosphere to the lower of the troposphere. Correlations of window channel observation errors are represented between 100 and 102 IASI channel indexes. Then, the higher correlated block between 103 and 408 IASI channel numbers represents ozone-sensitive channels. Finally, IASI channel indexes between 409 and 428 represent water vapour correlations. We note large positive correlations between O_3 and stratospheric CO_2 sensitive channels while we observe negative correlation between O_3 and tropospheric CO_2 sensitive channels. Large positive correlations between tropospheric CO_2 and water vapour sensitive channels are noticed.

4 Channel selection

4.1 Ranking selection of O_3 channels based on DFS method

In the following section, the Degree of Freedom for Signal (DFS) method is used to select a set of optimal channels having the largest information content for each atmospheric profile as described by (Rodgers, 2000). The DFS is based on information theory and provides a measure of the gain in information gathered by the observations according to the formula: $\mathrm{DFS} = \mathrm{Tr}(\mathbf{I} - \mathbf{A}\mathbf{B}^{-1})$, where Tr denotes the trace, $\mathbf{I}$ the identity matrix and $\mathbf{A}$ is the analysis-error covariance matrix with $\mathbf{A} = (\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^T \widetilde{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{H})^{-1}$, where $\mathbf{H}$ represent Jacobians matrix of the RTM for all channels. The background-error covariance matrix is derived from the one previously computed with the NMC method. The diagnosed $\widetilde{\mathbf{R}}$ matrix estimated for the 123 operational and 306 ozone-sensitive channels has been used.

The $\mathrm{DFS_{TOT}}$ has been chosen as a figure of merit, where $\mathrm{DFS_{TOT}}$ is the sum of temperature $\mathrm{DFS_T}$, humidity $\mathrm{DFS_q}$, ozone $\mathrm{DFS_{O_3}}$ and skin temperature $\mathrm{DFS_{T_{skin}}}$. Indeed, the consideration of each variable in the selection is important

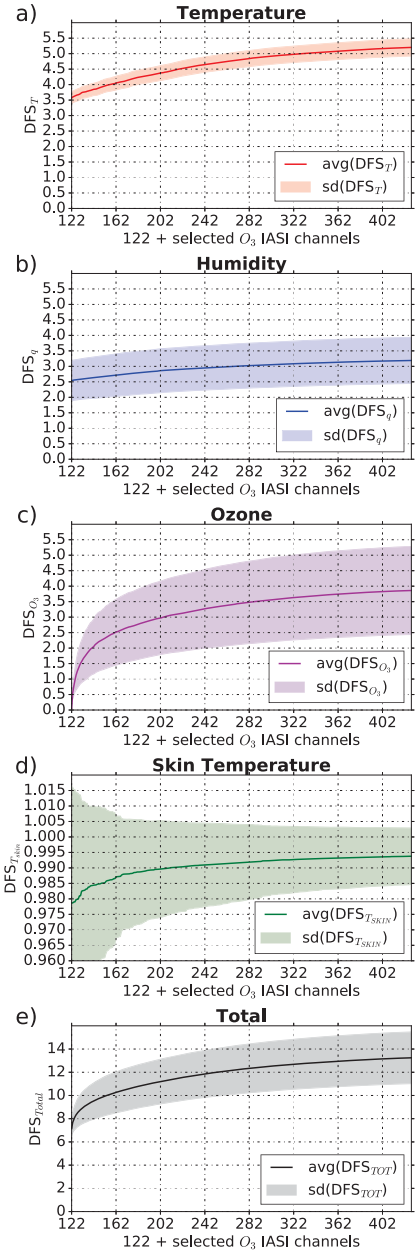


Figure 10. Evolution of the DFS statistics during the IASI O_3 channel ranking starting from the total DFS of 122 operational channels at Météo-France. The average over 345 profiles (solid line) and +/- standard deviation (coloured area) of DFS_T is represented in red (a), DFS_q is represented in blue (b), DFS_{O_3} is represented in purple (c), $DFS_{T_{skin}}$ is represented in green (d) and DFS_{TOT} is represented in black (e).

because we use a full **R** matrix where the sensitivity of each channel is correlated with the sensitivity of the other channels. Our starting point is the mean of DFS_{TOT} value over all 345 profiles for the 122 operational channels. Then we compute all 306 combinations of 122 channels + 1 additional O_3 channel. We select the channel providing the maximum increase in the mean of DFS_{TOT} value. The iterative process continues with 305 combinations of 123 + 1 channels and soon until all channels are selected. This means that we iteratively selected ozone-sensitive channels having the largest mean of DFS_{TOT} value on top of the DFS from the operational channels over all atmospheric profiles.

Figure 10 represents the evolution of DFS statistics (average and standard deviation over 345 profiles) during the IASI O_3 channel ranking starting from the DFS of the 122 operational channels. The evolution of the averaged DFS_T during the selection process (Figure 10.a), ranges from 3.5 for the 122 operational channels to 5.20 when using 306 additional channels. Figure 10.b shows the evolution of the averaged DFS_q which values vary from 2.54 to 3.18. Figure 10.c shows the evolution of the averaged DFS_{O_3}: as expected the value is very small for the 122 operational channels (0.05) and reaches 3.86 with 428 channels. The evolution of the averaged $DFS_{T_{skin}}$ exhibits only very small variations, from 0.979 to 0.994 (Figure 10.d). Finally, the evolution of the averaged DFS_{TOT} during the selection process increase from 7.15 to 13.24 (Figure 10.e). It can be seen that overall mean of DFS values increase rapidly with the addition of 120 channels and then the lines converge towards a threshold as new ozone-sensitive channels are added. The information potential contained in these channels is therefore quickly achieved. The additional gain in DFS_{TOT} is: 6.09 DFS_{TOT} = 3.80 DFS_{O_3} + 1.63 DFS_T + 0.64 DFS_q + 0.015 $DFS_{T_{skin}}$. The highest contribution comes from DFS_{O_3}. However, we note potential information from ozone-sensitive channels on temperature and humidity.

4.2 Choice of selection

The DFS method has allows to rank the most informative ozone-sensitive channels in terms of ozone, temperature, humidity and skin temperature. In order to identify the channels having the largest impact on thermodynamic analyses, we carried out retrieval experiments in a one-dimensional framework (1D-Var). To identify different channel selection samples, we calculated the normalized percentage of additional total DFS, 0 % representing the total DFS for the 122 operational channels and 100 % for the 428 channels. We selected the channels for every 10 % change, summarized in Table 1. Results from 1D-Var experiments assimilating the different channel selections are compared to the results from 1D-Var experiments using the 15 ozone-sensitive channels selected by Collard.

In our assimilation experiments, the selected ozone-sensitive channels are added to the operational selection to

Normalized percentage of additional available DFS_{TOT}	Number of IASI O_3 channels selected
10%	2
20%	5
30%	11
34%	15
40%	22
50%	39
60%	62
70%	94
80%	135
90%	195
100%	306

Table 1. Table of number of IASI ozone-sensitive channels selected w.r.t normalized percentage of additional available DFS_{TOT}.

assess the potential for providing additional information. To evaluate improvement on temperature, humidity and ozone analyses between experiments, the sum of relative error reduction (RED) of analysis profiles ($\mathbf{x}^{a}$) is compared to background profiles ($\mathbf{x}^{b}$) with respect to sondes profiles ($\mathbf{x}^{s}$) for all 345 profiles according to the formula:

$$\mathrm{RED} = \sum_{i}^{n} \left[\frac{\mathrm{sd}(\mathbf{x}_i^{a} - \mathbf{x}_i^{s}) - \mathrm{sd}(\mathbf{x}_i^{b} - \mathbf{x}_i^{s})}{\mathrm{sd}(\mathbf{x}_i^{b} - \mathbf{x}_i^{s})} \right] \quad (1)$$

where (sd) defined standard deviation at each vertical level (i); n being the number of levels on which we minimize and for which there are sonde data (n=40 for temperature, n=27 for humidity and n=40 for ozone). Thus, a negative RED indicates that the analysis is closer to the sonde than the background profiles. As the sonde profiles have very high vertical resolution, we take into account the IASI Averaging Kernel matrix **AK** in our RED evaluation to smooth the temperature, humidity and ozone sonde ($\mathbf{x}^{sk}$) and analysis ($\mathbf{x}^{ak}$) profiles towards the resolution of the satellite data such as: $\mathbf{x}^{ak\ or\ sk} = \mathbf{x}^{b} + \mathbf{AK}(\mathbf{x}^{a\ or\ s} - \mathbf{x}^{b})$. In our case, the Averaging Kernels are a representation of the sensitivity of the IASI observations to changes in the atmosphere [Rodgers (2000) and Rodgers and Connor (2003)]. The Averaging Kernel matrix is calculated as follow: $\mathbf{AK} = (\mathbf{B}^{-1}+\mathbf{H}^{T}\widetilde{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^{T}\widetilde{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{H}$. This method is used in many studies such as Delcloo et al. (2011) and Boylan et al. (2015).

To evaluate the impact of different O_3 channel selections on temperature, humidity and ozone analyses, the evolution of the relative error reduction for temperature (red line), humidity (blue line) and ozone (purple line) is shown in Figure 11. It appears that the RED does not evolve linearly with the addition of ozone-sensitive channels. The RED in ozone decreases very quickly with the 2 first additional channels, from -0.41 to -3.0 %. Then the RED in ozone continues to decrease until 22 additional channels are added with a value of -5.8 %. Finally, the use of additional channel above 22 the quality of RED in ozone up to -4.3 % when all channels are considered. For temperature, there is also

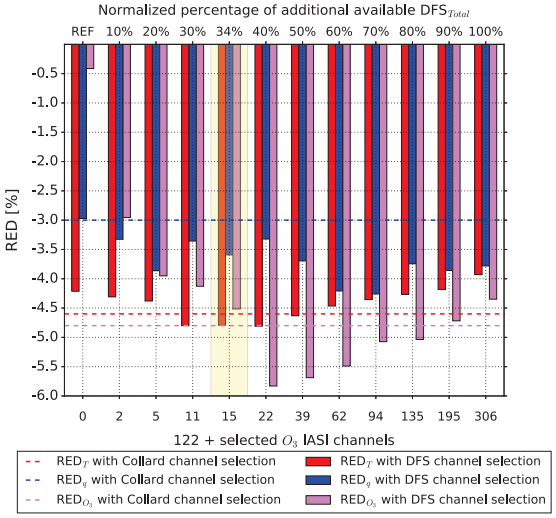


Figure 11. Evolution of the relative error reduction (RED) for temperature (red line), humidity (blue line) and ozone (purple line) using different ozone-sensitive channels selection (b). Dashed line for the same variables indicates the RED using Collard's channel selection.

an improvement in RED up to 22 channels. Then selections with more channels reduce the quality of RED until all ozone channels are added. For humidity, there are oscillations in RED on the first channel selection and then an improvement is obtained until 94 channels are added. Finally, the RED decreases slightly until all ozone-sensitive channels are added.

The non-monotonous evolution of each error reduction appears surprising at a first glance. Several factors could explain such a behaviour. Firstly, while adding more and more channels in the 1D-VAR, more minimization steps are needed. This has been accounted for by increasing the number of possible iterations. Nevertheless, it still can be difficult to disentangle the information contained in the innovations to obtain the optimal increments to the temperature, humidity and ozone profiles. Indeed, even if the error covariance matrices are evaluated thanks to advanced techniques, some inconsistencies between **B** and $\widetilde{\mathbf{R}}$ still are possible. Secondly, the bias correction has been calculated over the 345 cases of the study and may not be fully optimal. This can eventually lead to some inconsistencies between the information contained in the innovations of various channels. Finally, background profiles already are of good quality (around 0.6 K between 7 and 700 hPa) and sondes are not the true state of the atmosphere.

It should be noted that the experiment assimilating the 15 ozone-sensitive channels selected by Collard does not

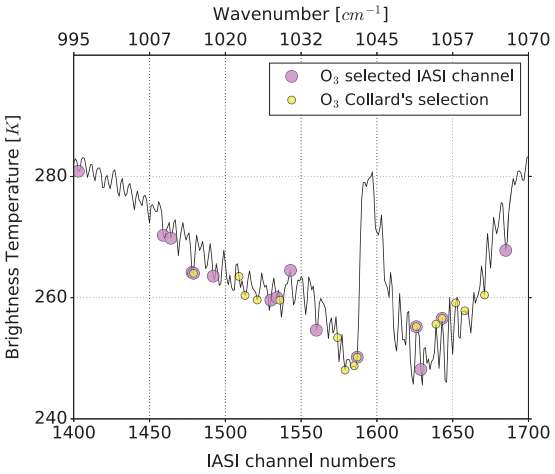


Figure 12. The IASI infrared spectrum in Brightness Temperature computed from a standard mid-latitude profile with 15 IASI ozone-sensitive channels selected (purple circles) and 15 IASI ozone-sensitive from Collard's selection (yellow circles).

reduce the RED in temperature and humidity as much as the selection of 15 ozone-sensitive channels performed in this study (dashed lines versus bars for 137 channels). However, as expected, Collard's selection allows to reduce the RED in ozone even further than our selection since it was made exclusively to improve ozone analyses. Conversely, the objective of our study is to select ozone-sensitive channels with information to also improve temperature and humidity analyses. In this context, the channel selection that seems to be the best compromise to reduce temperature and humidity errors is the 15 first selected channels (representing around one third of the total DFS gain). These channels, along with those of Collard are represented in Figure 12 with a IASI infrared spectrum in BT computed from a standard mid-latitude profile. It can be seen that the channels of this selection are rather well distributed over the ozone sensitive part of the spectrum. Note that for this selection, 4 channels are common with Collard's selection (1479, 1587, 1626 and 1643).

4.3 Further assessment of a 15 O_3 channel selection

In order to assess the contribution of 15 new ozone-sensitive IASI channels, we compared the vertical profiles of analysis errors and DFS from 1D-Var experiments using the 122 operational channels and 122 + 15 selected channels. We observe in Figure 13, that the 122 operational channels assimilation reduce the analysis error of temperature (σ^a_{122}) compared to background error especially in the troposphere between 1000 and 100 hPa and in the upper stratosphere between 10 and 0.1 hPa. Adding the 15 selected channels slightly reduces the analysis error (σ^a_{137}) compared to σ^a_{122} at the same atmospheric levels. Similarly, the 122 channels reduce analysis error of humidity especially between 900 and 150 hPa. The addition of the 15 selected channels further reduce even through very slightly the analysis error of humidity on the same part of the atmosphere. As expected, the 122 operational channels do not reduce the analysis error of ozone compared to the background error. The addition of the 15 selected channels reduces the ozone analysis error, especially between 1000 to 200 hPa and 100 to 15 hPa. It can be seen that the error reduction levels correspond to the levels of maximum DFS values.

Figure 14 identifies the atmospheric levels for which 1D-Var experiments (122 or 137) improve the analysis compared to the background using the sonde as verification data. In Figure 14.a the vertical RED profiles for temperature for RED_{122} (black line) or RED_{137} (blue line) were plotted. Note that the more negative the relative error reduction value is, the closer the analysis is to the sonde. Overall, the RED_{137} experiment reduces the analysis error of temperature compared to the RED_{122} experiment over the entire atmospheric profile, especially in the troposphere. Figure 14.b shows that the addition of the 15 selected channels improves moisture analysis, especially in the lower troposphere, between 750 and 600 hPa and between 450 to 150 hPa compared to the RED_{122} experiment. On the contrary, there was a slight deterioration in the humidity analyses of the RED_{137} experiment compared to RED_{122} around 850 to 550 hPa. Finally, as expected, Figure 14.c shows that the RED_{137} experiment significantly improves ozone analysis compared to the RED_{122} experiment over a very large part of the atmosphere except in the lower troposphere. This near-surface degradation can be explained by the lack of sensitivity of the ozone-sensitive channels in the lower troposphere. Thus, for all the case studies representing different surfaces, latitudes and seasons, the addition of this 15 ozone sensitive IASI channel selection improves temperature and humidity analyses and offers the possibility of improving ozone analyses in the case of data assimilation systems where the O_3 mixing ration is part of the control variable.

5 Summary and conclusions

This study has highlighted the potential of the information content provided by the IASI instrument on the atmosphere and particularly in the ozone-sensitive spectral band around 9.3 μm. Indeed, channels available in this spectral band are not only sensitive to ozone but also to temperature and water vapour. However, these channels are not used in the global NWP model ARPEGE at Météo-France. The increase in computing power allows us to use more radiances from IASI. A selection of 15 ozone sensitive IASI channels was performed by (Collard, 2007), but only to improve the

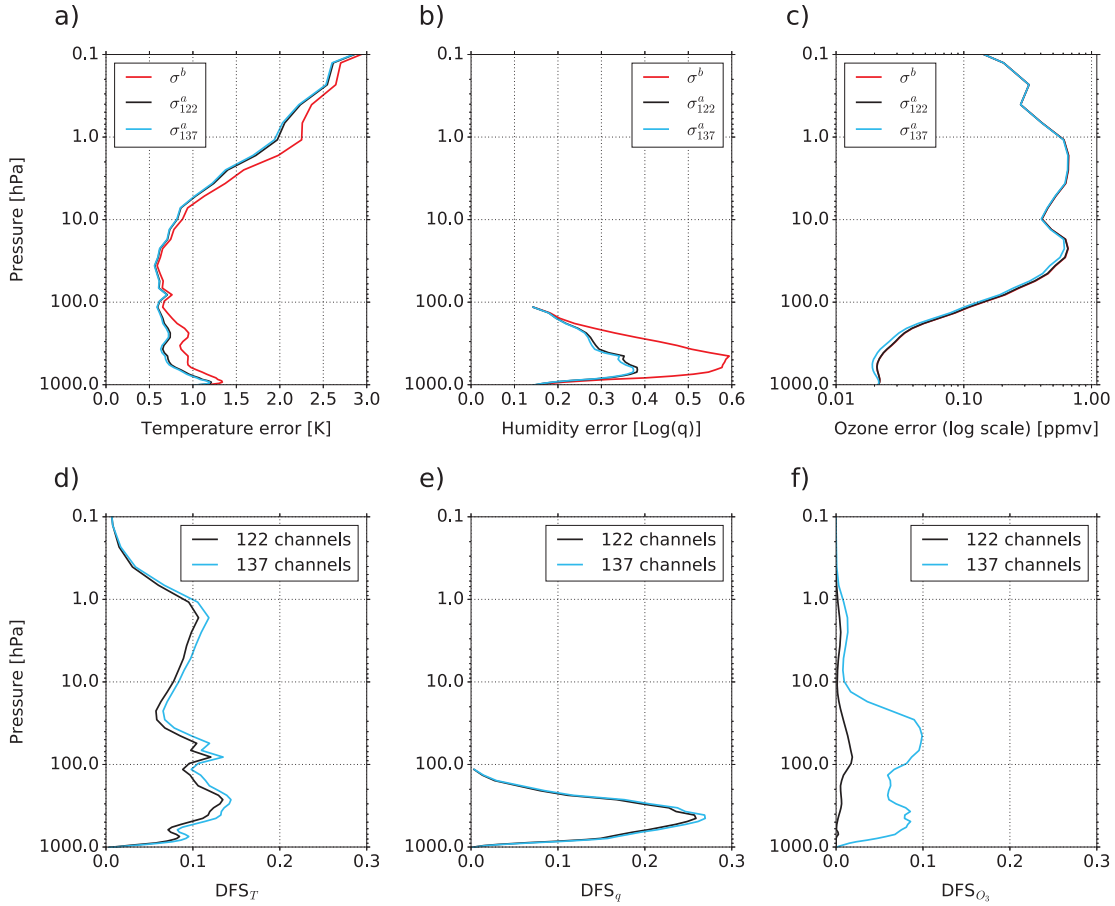


Figure 13. Vertical profiles of standard deviation of background errors (red line), analysis errors from 1D-Var experiments using 122 channels (black line) and using 137 channels (blue line) for temperature (a), humidity (b) and ozone (c). Vertical profiles of mean DFS over 345 profiles from 1D-Var experiments using 122 channels (black line) and using 137 channels (blue line) for temperature (d), humidity (e) and ozone (f).

ozone variable; a diagonal observation error covariance matrix **R** was used in his study. Nowadays, NWP centres are increasingly using full, diagnosed **R** matrices to take into account the cross correlation errors between channels. Thus, the objective of this study was to perform a new selection of ozone-sensitive IASI channels from the full spectrum using a non diagonal **R** matrix on a set of 345 profiles representative of contrasted surface types, latitudes and seasons to also improve temperature and humidity analyses profiles.

In order to identify all ozone-sensitive channels over the entire spectrum, a physical method based on the non linear sensitivity was done and 306 channels were pre-selected. Jacobians of these channels show that they are sensitive to ozone, to temperature in the troposphere and stratospheric environment, to humidity in the troposphere and to skin temperature. To determine the most informative ozone channels in terms of temperature, humidity, ozone and skin temperature, the DFS method has been chosen. This approach requires the specification of a covariance matrix of observational errors **R**, background error covariance matrix **B** and Jacobians of these channels. The matrix $\widetilde{\mathbf{R}}$ was diagnosed using the Desroziers method to take into account the cross correlations between 306 ozone channels and 122 operational channels at Météo-France. The matrix **B** was calculated using the NMC method over a one-year period from CTM MOCAGE and the NWP model ARPEGE forecasts. Finally, the Jacobians were calculated using the RTTOV Radiative Transfer Model.

The average DFS results over 345 profiles indicate that the 306 ozone sensitive IASI channels provide additional information compared to to the 122 operational channels. For temperature, the DFS increases from 3.57 to 5.20, for humidity it increases from 2.54 to 3.18, for ozone from 0.05 to 3.86 and for skin temperature from 0.979 to 0.994. When

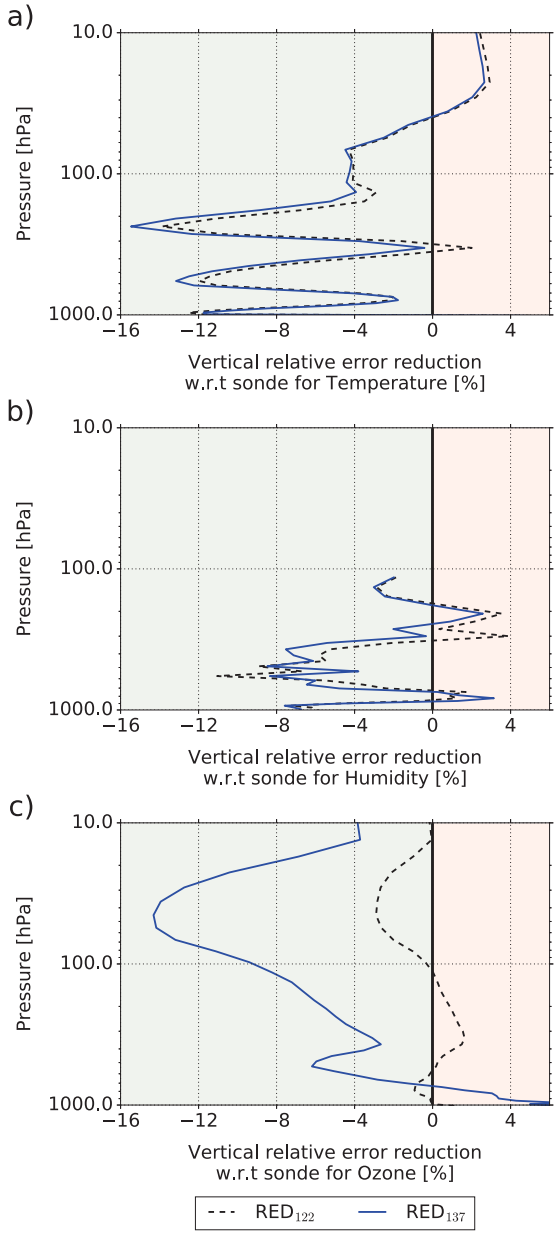


Figure 14. Vertical relative error reduction w.r.t sonde for 1D-Var experiment using 122 operational channels at Météo-France (black line) and using 137 selected channels (122 operational + 15 O_3 channels) (blue line) for temperature (a), humidity (b) and ozone (c).

these 306 channels are added to the 122 operational ones, the information is mainly redundant in this part of the spectrum since only 39 channels provide 50 % of the available DFS with all 306 ozone channels. In order to select ozone channels that would most improve temperature and humidity analyses, several 1D-Var experiments have been carried out in a one-dimensional framework (1D-Var). To quantify the contribution of ozone channels on analyses, we estimated the error reduction of the temperature, humidity and ozone analyses compared to their background using independent *in situ* sonde data as verification data. The results show that adding more ozone channels is not beneficial to the analysis. The non-linearity of the relative error reduction (RED) results as ozone-sensitive channels are added may be explained by the overall uncertainties in the use of 1D-Var. Moreover, the *a priori* profiles are already of good quality, which means that the threshold for improvement is limited. Finally, the sondes profiles do not represent reality and can also have errors, which may explain why the analyses are less close to the verification data each time new channels are added. We also performed an 1D-Var experiment with the 15 channels selected by Collard whose results have been compared to the experiments with the different selections. The purpose of this selection is to provide information that can improve both temperature and humidity analysis and the best compromise for this is achieved with an experiment assimilating also 15 IASI channels sensitive to additional ozone. This revised channel selection reduces the analysis error on average compared to only 122 channels. The RED in temperature decreases by 0.58 percentage points, in humidity by 0.62 percentage points and in ozone by 4.46 percentage points, which means an improvement, respectively, in temperature analysis of 13.8 %, in humidity of 20.9 % and in ozone of 1000 % compared to the analysis of the experiment with only 122 channels.

The vertical profiles of relative error reduction show that the assimilation of 15 additional selected channels improves tropospheric temperature analysis. The vertical DFS profiles of these channels show a maximum in the troposphere and also in the middle stratosphere but the sondes do not have data at these levels to verify. Finally, as expected, this channel selection significantly improves ozone analysis by up to 14 % in the lower stratosphere. The degradation of RED to ozone in the lower troposphere can be explained by the lack of sensitivity of ozone-sensitive channels in this part of the atmosphere. The improvement in the quality analyses are obtained at levels where Jacobians in temperature, humidity and ozone of the 15 selected channels are maximum.

These results are very encouraging and allow us to propose a new selection of IASI ozone-sensitive channels for the global model ARPEGE. This selection provides the possibility to improve thermodynamic variable in the 4D-Var data assimilation and this study will be the subject of a future article.

Code availability. Codes of the Radiative Transfer Model RTTOV and the uni-dimensional data assimilation system 1D-Var used is

this study are all available on https://www.nwpsaf.eu/site/software/rttov/download/.

Data availability. Data of radiosondes are available through this website: http://www.woudc.org. IASI data are available from EUMETSAT or AERIS: https://www.aeris-data.fr/. Model data are available upon request.

Competing interests. The authors declare that they have no conflict of interest.

Acknowledgements. This research has been conducted within the framework of O. Coopmann's PhD thesis, which funded by CNES (Centre National d'Études Spatiales) and the Région Occitanie. The authors would like to acknowledge Jean-François MAHFOUF for his help in revising and increasing the quality of the manuscript.

References

Anderson, D. C., Nicely, J. M., Wolfe, G. M., Hanisco, T. F., Salawitch, R. J., Canty, T. P., Dickerson, R. R., Apel, E. C., Baidar, S., Bannan, T. J., et al.: Formaldehyde in the Tropical Western Pacific: Chemical Sources and Sinks, Convective Transport, and Representation in CAM-Chem and the CCMI Models, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 122, 2017.

August, T., Klaes, D., Schlüssel, P., Hultberg, T., Crapeau, M., Arriaga, A., O'Carroll, A., Coppens, D., Munro, R., and Calbet, X.: IASI on Metop-A: Operational Level 2 retrievals after five years in orbit, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 113, 1340–1371, 2012.

Bechtold, P., Bazile, E., Guichard, F., Mascart, P., and Richard, E.: A mass-flux convection scheme for regional and global models, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 127, 869–886, 2001.

Berre, L.: Estimation of synoptic and mesoscale forecast error covariances in a limited-area model, Monthly weather review, 128, 644–667, 2000.

Borbas, E. E., Hulley, G., Feltz, M., Knuteson, R., and Hook, S.: The Combined ASTER MODIS Emissivity over Land (CAMEL) Part 1: Methodology and High Spectral Resolution Application, Remote Sensing, 10, 643, 2018.

Bormann, N., Geer, A. J., and Bauer, P.: Estimates of observation-error characteristics in clear and cloudy regions for microwave imager radiances from numerical weather prediction, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 137, 2014–2023, 2011.

Boukachaba, N.: Apport des observations satellitaires hyperspectrales infrarouges IASI au-dessus des continents dans le modèle météorologique à échelle convective AROME, Ph.D. thesis, INP Toulouse, http://www.theses.fr/2017INPT0065, 2017.

Bousserez, N., Attié, J., Peuch, V., Michou, M., Pfister, G., Edwards, D., Emmons, L., Mari, C., Barret, B., Arnold, S., et al.: Evaluation of the MOCAGE chemistry transport model during the ICARTT/ITOP experiment, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 112, 2007.

Boylan, P., Wang, J., Cohn, S. A., Fetzer, E., Maddy, E. S., and Wong, S.: Validation of AIRS version 6 temperature profiles and surface-based inversions over Antarctica using Concordiasi dropsonde data, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 120, 992–1007, 2015.

Burkholder, J. B., Sander, S. P., Abbatt, J. P. D., Barker, J. R., Huie, R. E., Kolb, C. E., Kurylo, M. J., Orkin, V. L., Wilmouth, D. M., and Wine, P. H.: Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies. Evaluation No. 18, JPL Publication 15-10, 2015.

Clerbaux, C., Boynard, A., Clarisse, L., George, M., Hadji-Lazaro, J., Herbin, H., Hurtmans, D., Pommier, M., Razavi, A., Turquety, S., et al.: Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI/MetOp sounder, Atmospheric Chemistry and Physics, 9, 6041–6054, 2009.

Collard, A.: Selection of IASI channels for use in numerical weather prediction, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 133, 1977–1991, 2007.

Coopmann, O., Guidard, V., Fourrié, N., and Plu, M.: Assimilation of IASI ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2018.

Courtier, P., Freydier, C., Geleyn, J.-F., Rabier, F., and Rochas, M.: The Arpege project at Meteo France, in: ECMWF Seminar on Numerical Methods in Atmospheric Models, 9-13 September 1991, vol. II, pp. 193–232, ECMWF, Shinfield Park, Reading, https://www.ecmwf.int/node/8798, 1991.

Delcloo, A., Hurtmans, D., Coheur, P.-F., and Clerbaux, C.: Validation of IASI ozone profiles, using balloon sounding data, in: 2011 EUMETSAT meteorological satellite conference, https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00736646/document, 2011.

Derber, J. C. and Wu, W.-S.: The use of TOVS cloud-cleared radiances in the NCEP SSI analysis system, Monthly Weather Review, 126, 2287–2299, 1998.

Desroziers, G., Berre, L., Chapnik, B., and Poli, P.: Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 131, 3385–3396, 2005.

Dethof, A. and Holm, E.: Ozone assimilation in the ERA-40 reanalysis project, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 130, 2851–2872, 2004.

Dragani, R. and McNally, A.: Operational assimilation of ozone-sensitive infrared radiances at ECMWF, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 139, 2068–2080, 2013.

Fourrié, N. and Thépaut, J.-n.: Evaluation of the AIRS near-real-time channel selection for application to numerical weather prediction, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 129, 2425–2439, 2003.

Gambacorta, A. and Barnet, C. D.: Methodology and information content of the NOAA NESDIS operational channel selection for the Cross-Track Infrared Sounder (CrIS), IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 51, 3207–3216, 2013.

Giorgi, F. and Chameides, W. L.: Rainout lifetimes of highly soluble aerosols and gases as inferred from simulations with a general circulation model, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 91, 14 367–14 376, 1986.

Guth, J., Josse, B., Marécal, V., Joly, M., and Hamer, P.: First implementation of secondary inorganic aerosols in the MOCAGE

version R2.15.0 chemistry transport model, Geoscientific Model Development, 9, 137–160, https://doi.org/10.5194/gmd-9-137-2016, https://www.geosci-model-dev.net/9/137/2016/, 2016.

Guth, J., Marécal, V., Josse, B., Arteta, J., and Hamer, P.: Primary aerosol and secondary inorganic aerosol budget over the Mediterranean Basin during 2012 and 2013, Atmospheric Chemistry and Physics, 18, 4911–4934, https://doi.org/10.5194/acp-18-4911-2018, https://www.atmos-chem-phys.net/18/4911/2018/, 2018.

Han, W. and McNally, A.: The 4D-Var assimilation of ozone-sensitive infrared radiances measured by IASI, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. Meteor. Soc., 136, 2025–2037, 2010.

Hilton, F., Armante, R., August, T., Barnet, C., Bouchard, A., Camy-Peyret, C., Capelle, V., Clarisse, L., Clerbaux, C., Coheur, P.-F., et al.: Hyperspectral Earth observation from IASI: Five years of accomplishments, Bulletin of the American Meteorological Society, 93, 347–370, 2012.

Hólm, E. V. and Kral, T.: Flow-dependent, geographically varying background error covariances for 1D-VAR applications in MTG-IRS L2 Processing, ECMWF Technical Memoranda, p. 15, https://doi.org/10.21957/3yx4fe6cv, https://www.ecmwf.int/node/9997, 2012.

Josse, B., Simon, P., and Peuch, V.-H.: Radon global simulations with the multiscale chemistry and transport model MOCAGE, Tellus B: Chemical and Physical Meteorology, 56, 339–356, 2004.

Lefevre, F., Brasseur, G., Folkins, I., Smith, A., and Simon, P.: Chemistry of the 1991–1992 stratospheric winter: Three-dimensional model simulations, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 99, 8183–8195, 1994.

Lefèvre, F., Figarol, F., Carslaw, K. S., and Peter, T.: The 1997 Arctic ozone depletion quantified from three-dimensional model simulations, Geophysical research letters, 25, 2425–2428, 1998.

Louis, J.-F.: A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere, Boundary-Layer Meteorology, 17, 187–202, 1979.

Lupu, C. and McNally, A.: Wind tracing with ozone-sensitive radiances from SEVIRI, p. 22, https://www.ecmwf.int/node/10862, 2013.

Madronich, S.: Photodissociation in the atmosphere: 1. Actinic flux and the effects of ground reflections and clouds, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 92, 9740–9752, 1987.

Marécal, V., Peuch, V.-H., Andersson, C., Andersson, S., Arteta, J., Beekmann, M., Benedictow, A., Bergström, R., Bessagnet, B., Cansado, A., et al.: A regional air quality forecasting system over Europe: the MACC-II daily ensemble production, 2015.

Mari, C., Jacob, D. J., and Bechtold, P.: Transport and scavenging of soluble gases in a deep convective cloud, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 105, 22 255–22 267, 2000.

Morgenstern, O., Hegglin, M., Rozanov, E., O'Connor, F. M., Abraham, N. L., Akiyoshi, H., Archibald, A., Bekki, S., Butchart, N., Chipperfield, M. P., et al.: Review of the global models used within phase 1 of the Chemistry-Climate Model Initiative (CCMI), Geoscientific Model Development, 10, 639–671, 2017.

Parrish, D. F. and Derber, J. C.: The National Meteorological Center's spectral statistical-interpolation analysis system, Monthly Weather Review, 120, 1747–1763, 1992.

Rodgers, C. D.: Inverse methods for atmospheric sounding: theory and practice, vol. 2, World scientific, 2000.

Rodgers, C. D. and Connor, B. J.: Intercomparison of remote sounding instruments, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 108, 2003.

Saunders, R. W. and Kriebel, K. T.: An improved method for detecting clear sky and cloudy radiances from AVHRR data, International Journal of Remote Sensing, 9, 123–150, 1988.

Semane, N., Peuch, V.-H., Pradier, S., Desroziers, G., Amraoui, L. E., Brousseau, P., Massart, S., Chapnik, B., and Peuch, A.: On the extraction of wind information from the assimilation of ozone profiles in Météo–France 4-D-Var operational NWP suite, Atmospheric Chemistry and Physics, 9, 4855–4867, 2009.

Sherlock, V. and Saunders, R.: ISEM-6: Infrared surface emissivity model for RTTOV-6, NWP-SAF report, https://www.nwpsaf.eu/site/download/documentation/rtm/papers/isem6.pdf, 1999.

Stockwell, W. R., Kirchner, F., Kuhn, M., and Seefeld, S.: A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 102, 25 847–25 879, 1997.

Ventress, L. and Dudhia, A.: Improving the selection of IASI channels for use in numerical weather prediction, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 140, 2111–2118, 2014.

Vincensini, A.: Contribution de IASI à l'estimation des paramètres des surfaces continentales pour la prévision numérique du temps, Ph.D. thesis, École Doctorale Sciences de l'univers, de l'environnement et de l'espace, 2013.

Wesely, M.: Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models, Atmospheric Environment, 41, 52–63, 2007.

Weston, P., Bell, W., and Eyre, J.: Accounting for correlated error in the assimilation of high-resolution sounder data, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 140, 2420–2429, 2014.

Williamson, D. L. and Rasch, P. J.: Two-dimensional semi-Lagrangian transport with shape-preserving interpolation, Monthly Weather Review, 117, 102–129, 1989.

Chapitre 9

Vers une meilleure assimilation 4D-Var par le couplage des modèles ARPEGE et MOCAGE pour l'ozone

« Les grandes découvertes et les améliorations impliquent constamment la coopération de nombreux esprits. »

Alexander Graham Bell

Sommaire

9.1 Introduction et objectifs de ce chapitre 260
9.2 Cadre expérimental 262
9.3 Étape 1 : Utilisation d'un champ d'ozone réaliste dans $\mathcal{H}$ . . . 263
9.3.1 Impacts sur les innovations 263
9.3.2 Impacts sur les analyses en température, humidité et vent 271
9.3.3 Impacts sur l'assimilation des autres observations 275
9.3.4 Impacts sur la qualité des prévisions 284
9.4 Étape 2 : Ajout de la sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone 287
9.4.1 Impacts sur les analyses en température, humidité et vent 288
9.4.2 Impacts sur la qualité des prévisions 288
9.5 Étape 3 : Ajout de l'ozone à la variable de contrôle ARPEGE 290
9.5.1 Initialisation des erreurs d'ébauche en ozone dans ARPEGE . . . 291
9.5.2 Analyse de l'ozone dans ARPEGE 292
9.5.3 Impacts sur les analyses en température, humidité et vent 292
9.5.4 Impacts sur la qualité des prévisions 295
9.6 Conclusion et discussion 296

9.1 Introduction et objectifs de ce chapitre

Jusqu'à présent, l'ensemble des études réalisées dans le cadre de cette thèse ont aidé à préparer l'utilisation des observations IASI sensibles à l'ozone dans le système d'assimilation 4D-Var par le couplage des modèles ARPEGE et MOCAGE à Météo-France. En effet, les Chapitres 6 et 7, nous ont montré le bénéfice d'utiliser une ébauche d'ozone plus réaliste issue du MCT MOCAGE pour l'utilisation des observations infrarouges sensibles à l'ozone. Puis les Chapitres 7 et 8 présentent le potentiel de l'assimilation de ces observations pour améliorer simultanément les analyses de température, d'humidité et d'ozone. L'ozone est un gaz qui a un impact radiatif très important dans l'atmosphère et peut influencer les champs de température du modèle du fait de la paramétrisation du rayonnement, nommé le plus souvent intéraction ozone-rayonnement [Cariolle and Morcrette, 2006]. Ainsi, ajouter l'ozone à la variable de contrôle du 4D-Var en utilisant des champs d'ozone variables issus de MOCAGE aura un impact certain sur l'assimilation des observations satellitaires infrarouges mais également sur la dynamique et la thermodynamique du modèle global ARPEGE. Dans cette étude, l'ozone de MOCAGE ne sera pas utilisé dans le schéma de rayonnement.

Nous avons montré que l'utilisation d'une ébauche d'ozone réaliste permet d'améliorer l'assimilation des observations IASI. D'autres études montrent des résultats similaires à partir d'autres instruments : [Derber and Wu, 1998] pour le sondeur à haute résolution HIRS ou encore [John and Buehler, 2004] pour le sondeur AMSU-B. Depuis 2011, le CEPMMT assimile en opérationnel dans le système de PNT IFS, des canaux sensibles à l'ozone issus des instruments AIRS, IASI et HIRS. De manière générale, l'assimilation de ces canaux permet d'améliorer les analyses en ozone par comparaison à des données indépendantes d'ozone issues de MLS[1] et de radiosondages, particulièrement dans l'UTLS et dans les régions polaires [Dragani and McNally, 2013].

Le travail effectué par [Han and McNally, 2010] montre que l'assimilation de canaux IASI sensibles à l'ozone dans le 4D-Var du système global IFS du CEPMMT améliore considérablement les analyses en ozone par comparaison aux données d'ozone indépendantes, issues de l'instrument MLS à bord du satellite Aura. Ces améliorations sont principalement notées au niveau des régions polaires. [Peubey and McNally, 2009] ont démontré que l'extraction de l'information sur l'ozone à partir de canaux infrarouges peut contraindre l'analyse des vents stratosphériques par le traçage de l'advection. Dans le cadre d'expériences d'OSSE (Observing-System Simulation Experiments), [Peuch et al., 2000] montrent un impact positif, tant sur l'analyse du flux que sur l'analyse de la température. Ils remarquent également que les informations sur les champs de vent fournies par les données d'ozone peuvent s'ajouter aux informations déjà fournies par les observations assimilées dans les modèles de PNT. Cependant, certaines conditions, telles que la minimisation sur l'ozone en plus des variables habituelles est nécessaire pour que les informations fournies par les colonnes d'ozone soient efficaces.

D'autres études ont montré que des améliorations sur les prévisions et les analyses de la déplétion d'ozone aux hautes latitudes peuvent être obtenues en assimilant des profils d'ozone restituées à partir d'instruments infrarouges ou micro-ondes en visé aux limbes. Les recherches menées par ([Dethof, 2003] et [Wargan et al., 2005]) montrent que l'assimilation de profils d'ozone restitués à partir de l'instrument MIPAS[2] à bord du satellite ENVISAT[3] peut améliorer de manière considérable les analyses d'ozone en hiver et la caractérisation du trou de la couche d'ozone.

[1] Microwave Limb Sounder
[2] Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding
[3] ENVIronment SATellite

Ces profils d'ozone issus de MIPAS ont également été assimilés dans le système de PNT du MetOffice et ont permis de reproduire avec une grande précision le phénomène de dislocation du trou de la couche d'ozones, sans aucun paramétrage particulier de la composition chimique hétérogène [Geer et al., 2006]. Des résultats similaires ont été démontrés en assimilant des profils d'ozone restitués à partir de l'instrument MLS au sein des systèmes de PNT du MetOffice et du CEPMMT avec des améliorations dans la distribution verticale de l'ozone ([Jackson, 2007], [Feng et al., 2008] et [Dragani and Dee, 2008]). Puis, le travail de [Semane et al., 2009] a montré que l'assimilation de profils d'ozone restitués par MLS dans le système global de PNT ARPEGE permet de réduire les biais de vent dans la basse stratosphère. Enfin, l'étude menée par [Stajner et al., 2008] permet grâce à l'assimilation de profils d'ozone restitués simultanément à partir des instruments MLS et OMI d'améliorer les analyses de colonne d'ozone troposphérique. Finalement, ces études montrent le potentiel d'assimiler des profils d'ozone restitués à partir d'instrument satellitaires infrarouges ou micro-ondes. Il ressort de ces études que l'assimilation basée uniquement sur des données issues de capteurs qui mesurent le rayonnement ultra-violet rétrodiffusé ne suffit pas pour obtenir une analyse d'ozone précise.

Jusqu'à aujourd'hui les études menées dans le cadre des STI ou STC Météo - Chimie pour l'ozone ont majoritairement eu pour objectif d'améliorer les analyses d'ozone. Les impacts de l'ozone sur les analyses et prévisions météorologiques des variables critiques (température, humidité, vent...) sont encore peu évalués et font l'objet de recherches récentes en ce qui concerne les interactions et les erreurs croisées entre les variables thermodynamiques et chimiques.

Ce Chapitre a pour objectif d'initier un STC Météo - Chimie pour l'ozone dans le but de mieux assimiler les observations notamment satellitaires infrarouges et ainsi d'améliorer les analyses et prévisions météorologiques. Nous allons présenter les différentes étapes qui ont conduit à l'évaluation d'un STC Météo - Chimie par le couplage des modèles ARPEGE et MOCAGE en utilisant les ébauches d'ozone issues de MOCAGE :

- L'étape 1 consiste en l'utilisation des ébauches réalistes d'ozone issues de MOCAGE dans l'opérateur d'observation ($\mathcal{H}$) pour l'ensemble des simulations sous l'expérience nommée **EXP** comparée à **REF** l'expérience de référence utilisant le profil constant d'ozone (expériences en période estivale entre le 12 juillet et le 10 septembre 2016 et hivernale entre le 12 novembre et le 31 décembre 2016) ;

- L'étape 2 consiste à assimiler de manière additionnelle, la nouvelle sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone, en plus de l'utilisation des ébauches d'ozone réaliste issues de MOCAGE dans $\mathcal{H}$ sous l'expérience nommée **EXP15** comparée à **EXP** l'expérience de référence n'assimilant pas cette sélection de canaux O_3 (expériences en période estivale entre le 12 juillet et le 31 août 2016) ;

- L'étape 3 consiste à ajouter l'ozone dans la variable de contrôle d'ARPEGE afin de minimiser sur le champ d'ozone en parallèle des autres variables en complément de ce qui a été réalisé dans l'étape 1 et 2 sous l'expérience nommée nommée **EXP15O3** comparée à **EXP15** l'expérience de référence n'ayant pas l'ozone dans la variable de contrôle (expériences en période estivale entre le 12 et le 30 juillet 2016).

Dans une première partie nous allons décrire les différentes étapes techniques de l'élaboration d'une configuration innovante du modèle global ARPEGE capable de gérer les champs d'ozone issus du MCT MOCAGE menant à réaliser un STC Météo - Chimie pour l'ozone. Dans une deuxième partie, nous analyserons les impacts d'une expérience assimilant les observations de la configuration opérationnelle (sans les canaux IASI sensibles à l'ozone) mais en utilisant les champs d'ozone issus du MCT MOCAGE dans l'opérateur d'observation, en période estivale et hivernale sur deux mois chacune.

Une troisième partie évaluera les impacts d'une expérience assimilant cette fois-ci, en plus des canaux IASI opérationnels, les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés dans le Chapitre 8. Enfin, nous détaillerons la prise en compte des nouvelles erreurs d'ébauche d'ozone dans le 4D-Var afin d'analyser les champs d'ozone dans ARPEGE par l'ajout de l'ozone dans la variable de contrôle. Nous évaluerons l'ensemble de ces expériences en termes d'impact sur les analyses et les prévisions météorologiques. Finalement, nous terminerons ce Chapitre par une conclusion et une discussion des résultats.

9.2 Cadre expérimental

L'ajout des champs d'ozone de MOCAGE dans le système de PNT ARPEGE requiert de nombreuses configurations techniques au sein même du code informatique et a demandé un travail important. L'une des premières difficultés réside dans la différence de géométrie des grilles MOCAGE et ARPEGE. En effet, ARPEGE possède une grille variable horizontalement sur 105 niveaux verticaux, tandis que les champs d'ozone utilisés ici sont issus d'un MOCAGE sur une grille régulière horizontalement de 1 ° de résolution et 60 niveaux verticaux (avec un toit à 0,1 hPa pour les deux modèles). Pour être utilisables dans ARPEGE, les champs d'ozone ont donc été interpolés horizontalement sur la grille variable d'ARPEGE et sur les 105 niveaux modèle. La Figure 9.1 illustre ceci en présentant une coupe latitudinale d'un champ d'ozone sur la grille de MOCAGE le 12 juillet 2016 à 03 UTC (a) et ce même champs sur la grille d'ARPEGE (b). On remarque que le champ d'ozone dans ARPEGE semble comprimé, ce qui s'explique par le fait qu'il y a presque deux fois plus de niveaux que dans MOCAGE (artefact visuel).

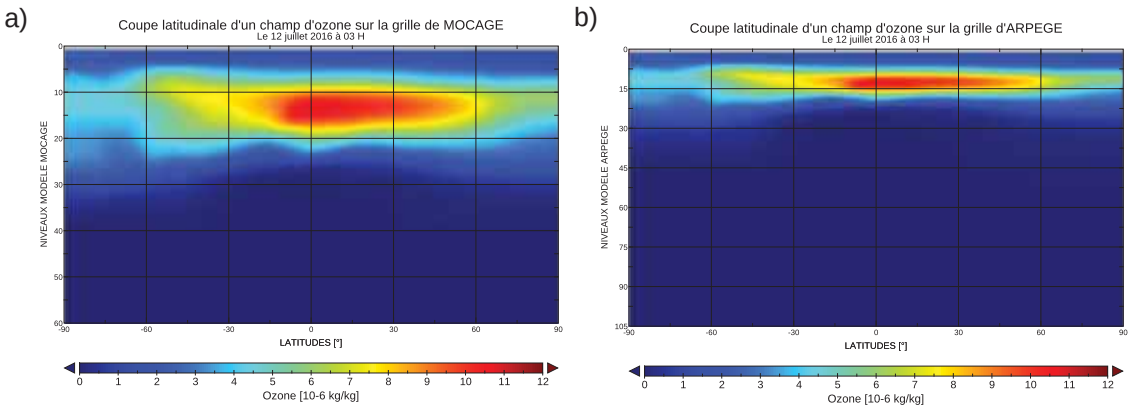


FIGURE 9.1: Coupe latitudinale d'un champ d'ozone sur la grille de MOCAGE en fonction des 60 niveaux modèle le 12 juillet 2016 à 03 H (a) et coupe latitudinale de ce même champ d'ozone extrapolé sur la grille d'ARPEGE en fonction des 105 niveaux modèle (b).

L'ensemble des nouvelles contributions apportées à ARPEGE dans cette étude n'ont pas déséquilibré le modèle. En effet, il peut arriver que d'importantes modifications dans le modèle soient répercutées en bruit à très courte échéance dans l'intégration du modèle sous forme par exemple d'ondes de gravité, de précipitations excessivement intenses, de variations brutales et intempestives. Ces variations sont généralement appelées « spin-up ou spin-down » et nécessite un temps de remise à l'équilibre du modèle. Ce qui n'est pas notre cas ici. Cependant, l'ajout de la nouvelle sélection de canaux IASI sensible à l'ozone a nécessité une adaptation de la correction de biais (Var-BC) de ces nouvelles observations. Les expériences ont commencé les 1er de chaque mois considéré avec une correction de biais efficace au bout d'environ 8 jours. Enfin, les expériences de l'étape 1 ont utilisé les erreurs d'observations prescrites en opérationnel par une matrice de covariance d'erreur d'observation diagonale, tandis que les expériences des étapes 2 et 3 ont utilisé des erreurs d'observation diagnostiquées par la méthode de [Desroziers et al., 2005] par une matrice de covariance d'erreur d'observation complète.

9.3 Étape 1 : Utilisation d'un champ d'ozone réaliste dans $\mathcal{H}$

9.3.1 Impacts sur les innovations

Dans cette première partie, nous avons réalisé deux expériences. La première expérience dite de contrôle nommée « REF » utilise les caractéristiques opérationnelles actuelles et le profil constant comme ébauche d'ozone dans le système de PNT ARPEGE. C'est particulièrement ce dernier point qui est modifié dans la deuxième expérience nommée « EXP » où cette fois-ci le profil d'ozone constant est remplacé par les champs 3D d'ozone issus de MOCAGE variant dans le temps et l'espace. En plus des 314 canaux IASI opérationnels, nous avons ajouté la liste des 291 (306 moins les 15 déjà monitorés) canaux sensibles à l'ozone et pré-sélectionnés dans l'étude précédente du Chapitre 8. Une période d'environ 8 jours avant les expériences d'assimilation a été consacrée à l'adaptation du Var-BC pour la correction des biais de ces nouveaux canaux. Afin d'évaluer l'impact de l'utilisation des champs d'ozone de MOCAGE sur les simulations des observations IASI, nous avons calculé les moyennes et les écarts-types des innovations (avant correction de biais) pour plusieurs configurations : toutes surfaces et tous cieux (313.879 pixels), toutes surfaces et ciel clair (47.802 pixels) et surfaces océaniques et ciel clair (29.546 pixels). Ces statistiques ont été réalisées pour les deux expériences REF et EXP pour le 12 juillet (Figure 9.2) et le 12 novembre (Figure 9.3) 2016 de jour. Globalement, on retrouve les valeurs des biais et des écarts-types typiques liées aux différents types de surface et aux paramètres nuageux pour les canaux de la bande de CO_2, de la surface ou encore de la vapeur d'eau, quasiment identiques dans REF et EXP.

Les différences entre les expériences REF et EXP interviennent pour les canaux sensibles à l'ozone (bande comprise entre 1.000 et 1.070 cm^{-1}). Pour les statistiques des innovations pour les deux dates de jour, dans le cas des canaux pris sur toutes les surfaces et tous cieux, on remarque des valeurs de biais plus faibles pour l'expérience REF que pour celles de l'expérience EXP. Ceci s'explique simplement par le fait que le biais positif des canaux sensibles à l'ozone dans REF est contrebalancé par le fort biais négatif induit par les nuages. Cependant, on observe des écarts-types plus faibles pour EXP par rapport à REF, avec respectivement des valeurs autour de 5 K et 8 K. Pour les canaux pris sur toutes les surfaces mais en ciel clair (utilisation de l'AVHRR pour identifier les pixels nuageux), on retrouve les allures attendues des biais des canaux d'ozone, avec des valeurs positives pour REF et négatives pour EXP. Au niveau des écarts-types des canaux sensibles à la surface on retrouve des valeurs importantes liées à la température de surface sur terre et glace de mer. En effet, contrairement aux expériences 1D-Var effectuées dans les études précédentes, les expériences 4D-Var ne restituent pas la T_{skin} sur ces surfaces. Enfin, les canaux pris sur les surfaces océaniques (utilisation du Land Sea Mask pour déterminer le type de surface) et en ciel clair, montrent des valeurs similaires à celles obtenues dans l'étude du Chapitre 7 dans un cadre uni-dimensionnel. On retrouve des biais inversés selon REF et EXP, respectivement avec des valeurs pour les canaux d'ozone d'environ 7 K et 6,5 K. La différence la plus notable entre les deux expériences se situe au niveau des écarts-types avec des valeurs bien plus élevées pour REF (environ 6 K) que pour EXP (2,5 K).

Ces résultats sont en accord et confirment ceux obtenus dans le cadre des simulations réalisées avec seulement 161 observations dans le Chapitre 7. Ainsi, la prise en compte de la variabilité de la concentration d'ozone dans l'atmosphère permet de réduire significativement les écarts-types des canaux IASI sensibles à l'ozone. Les statistiques des innovations pour le 12 novembre 2016 de jour montrent sensiblement les mêmes résultats. On note toutefois des biais plus importants pour REF. Ces statistiques ont été réalisées pour ces mêmes dates de nuit et présentent des résultats similaires.

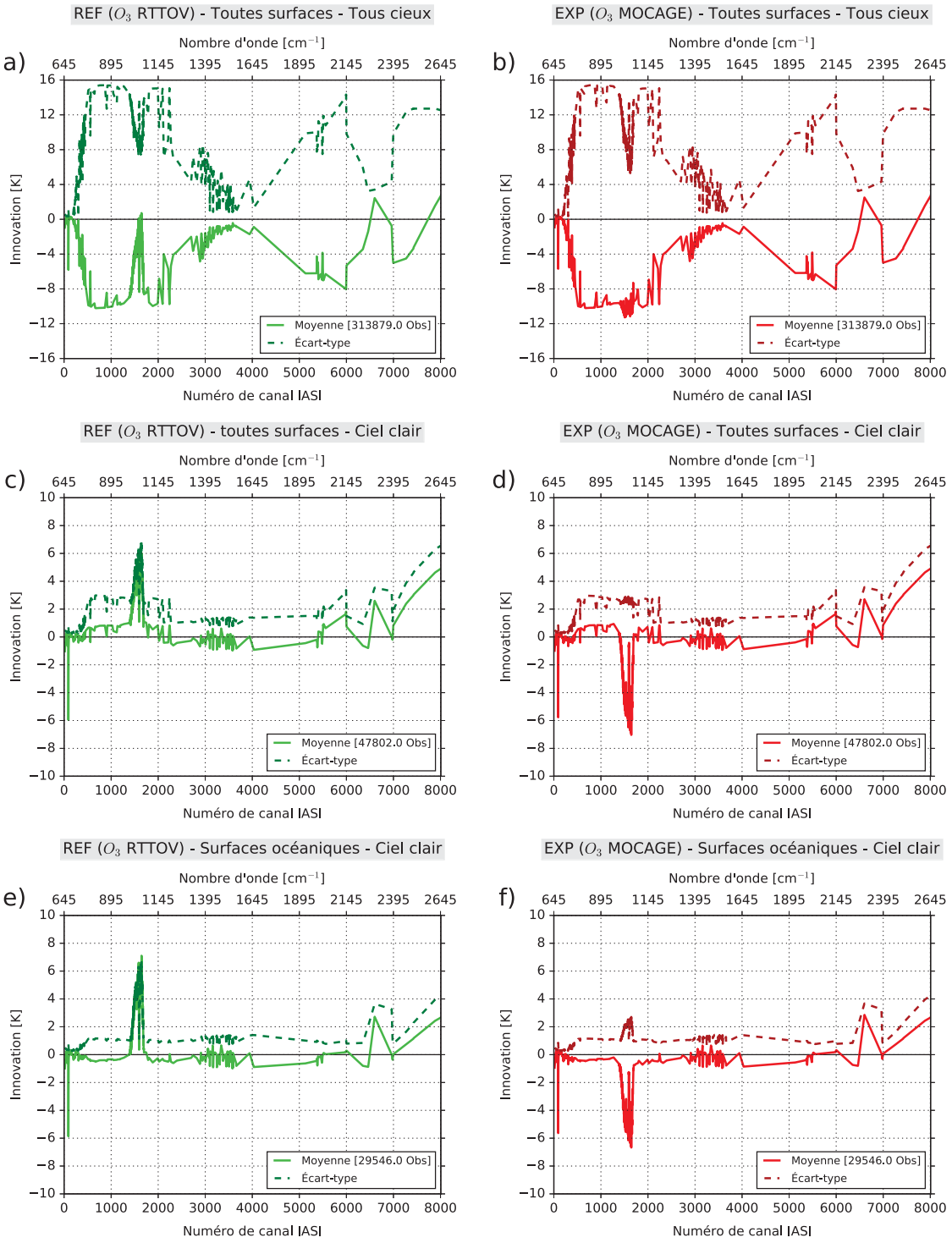


FIGURE 9.2: Moyenne et écart-type des innovations le 12 juillet 2016 de jour sur toutes les surfaces et tous cieux pour les expériences REF en vert (a) et EXP en rouge (b), puis sur toutes les surfaces en ciel clair pour les expériences REF (c) et EXP (d) et sur les surfaces océaniques en ciel clair pour les expériences REF (e) et EXP (f) en fonction les 314 canaux IASI monitorés et de 291 canaux sensibles à l'ozone.

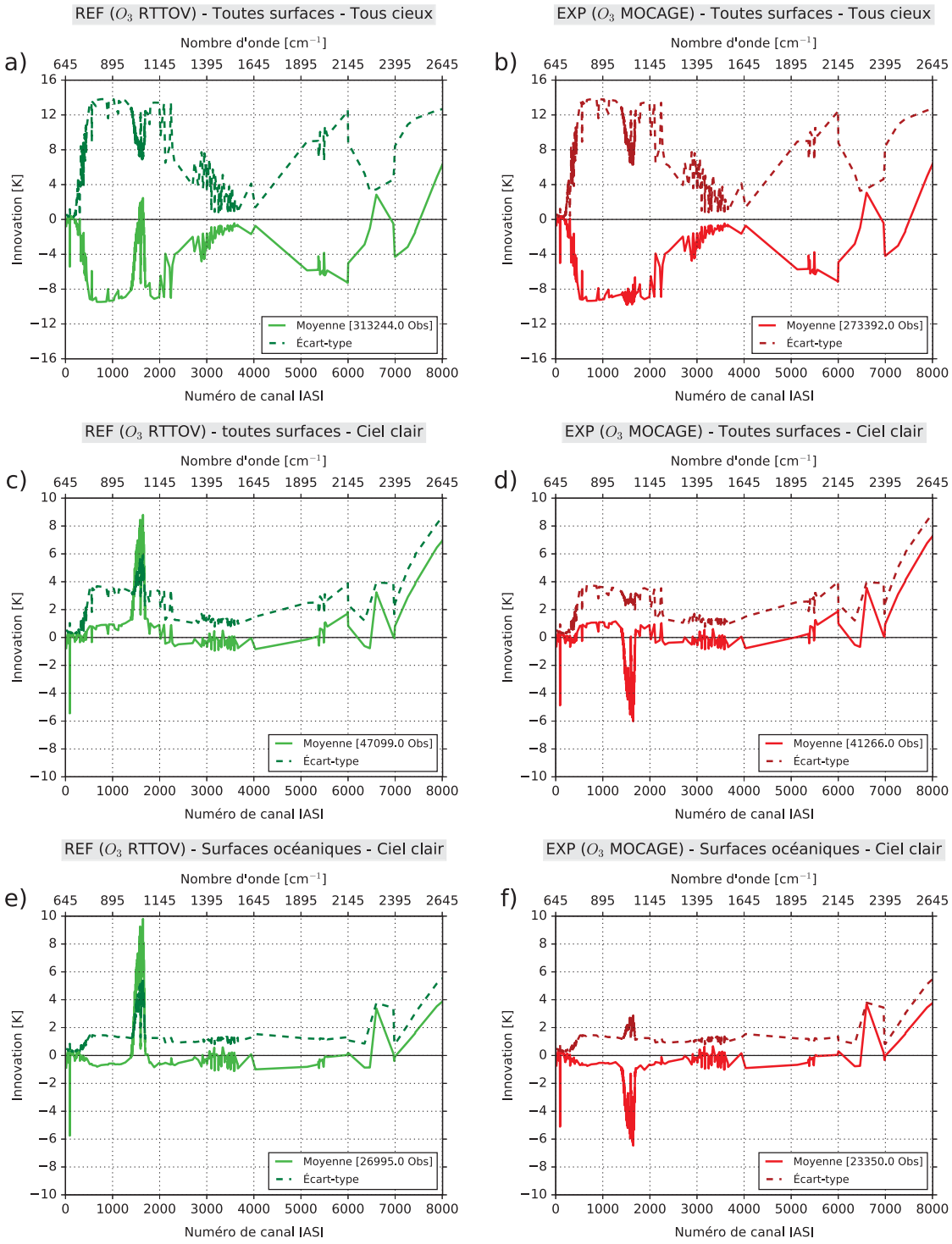


FIGURE 9.3: Moyenne et écart-type des innovations le 12 novembre 2016 de jour sur toutes les surfaces et tous cieux pour les expériences REF en vert (a) et EXP en rouge (b), puis sur toutes les surfaces en ciel clair pour les expériences REF (c) et EXP (d) et sur les surfaces océaniques en ciel clair pour les expériences REF (e) et EXP (f) en fonction les 314 canaux IASI monitorés et de 291 canaux sensibles à l'ozone.

Nous allons regarder plus en détail les canaux 1530 et 1585 dont les jacobiens sont présentés sur la Figure 9.4. Ces canaux font partie de la sélection réalisée dans le Chapitre 8 et sont sensibles à différentes couches de l'atmosphère. Le canal 1530 a un jacobien de température qui montre une sensibilité stratosphérique entre 100 et 1 hPa tandis que le canal 1685 a un jacobien de température qui présente une sensibilité dans la basse troposphère entre 1.000 et 400 hPa. Le jacobien d'humidité du canal 1530 montre une sensibilité dans la basse troposphère entre 1.000 et 500 hPa alors que le canal 1685 a une sensibilité sur une plus grande partie de la troposphère entre 1.000 et 300 hPa. Ces deux canaux ont des jacobiens d'ozone sensibles entre 100 et 10 hPa.

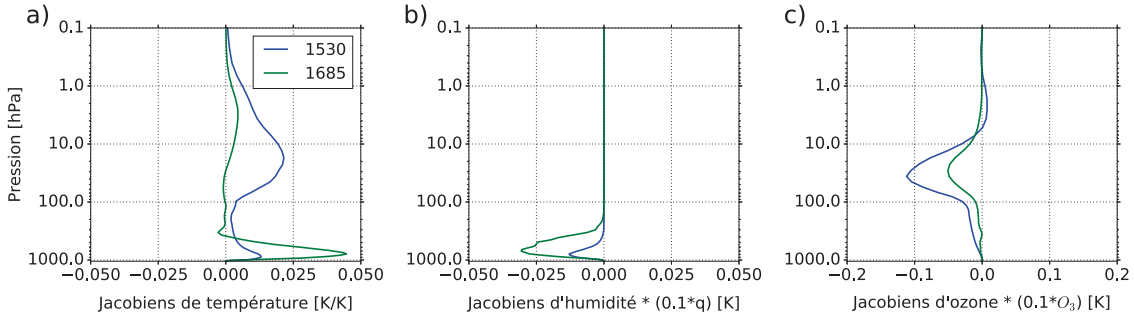


FIGURE 9.4: Jacobien de température, d'humidité et d'ozone des canaux 1530 et 1685 en fonction de la pression.

On retrouve le même signal que les statistiques calculées précédemment en visualisant des cartes d'innovations pour chaque pixel IASI considéré le 12 juillet 2016 de jour (Figure 9.5 et 9.7) et le 12 novembre 2016 de jour (Figure 9.6 et 9.8) en prenant en compte les mêmes configurations que les expériences REF et EXP. L'utilisation de l'ozone de MOCAGE dans le processus d'assimilation permet de réduire les innovations par rapport à REF. Ces cartes nous permettent également de mettre en évidence une différence de signe des valeurs des innovations en utilisant l'ozone de référence. Nous avons montré précédemment qu'en moyenne les innovations des canaux sensibles à l'ozone pour REF ont des valeurs positives et négatives pour EXP. Or, on observe sur les cartes d'innovations une différence dans le signe des valeurs d'innovations pour REF, avec des valeurs positives aux Tropiques et aux moyennes latitudes et négatives aux hautes latitudes. Pour EXP, on observe globalement le même signe dans les valeurs d'innovations. Globalement, on remarque pour le canal 1685 des valeurs d'innovations plus faibles en utilisant l'ozone de MOCAGE. On note des réductions significatives des innovations sur des surfaces continentales au sud de l'Afrique, en Amérique du sud, sur l'ouest des États-Unis, sur les plaines de Sibérie occidentales et en Australie. Cette diminution des valeurs des innovations est constatée à la fois sur la période estivale (Figure 9.5) et hivernale (Figure 9.6). L'utilisation de l'ozone réaliste améliore la simulation et nous permet de voir la contribution aux innovations de la sensibilité à la température en basses couches.

Le canal 1530 a un jacobien en température sensible bien plus haut dans l'atmosphère que le canal 1685. On retrouve la même tendance d'alternance des signes des valeurs d'innovations pour REF. On remarque globalement des valeurs bien plus élevées à la fois pour REF et EXP qui peuvent s'expliquer par le niveau de sensibilité atmosphérique du jacobien de température de ce canal. On observe tout de même les améliorations sur les surfaces continentales explicitées précédemment avec le canal 1685. Effectivement, on note que le jacobien de température du canal 1530 a également une légère sensibilité en basse troposphère entre 1.000 et 700 hPa. Pour ce canal, on remarque qu'une zone en particulier voit ses innovations réduites. Il s'agit des Tropiques et plus spécialement de la zone de convergence intertropicale.

Les améliorations dans cette zone sont importantes puisqu'il s'agit d'un domaine complexe à modéliser de part la grande variabilité au niveau de la vapeur d'eau, de la formation des nuages en convection profonde ayant un fort impact radiatif. De plus, nous avons vu que cette zone est le point de départ de la formation de l'ozone stratosphérique. Ainsi, l'utilisation de canaux IASI sensibles à l'ozone, combinée à un champ d'ozone réaliste nous permet de réduire les innovations et potentiellement d'extraire de l'information supplémentaire pour les modèles dans cette zone du globe. Les innovations pour ces canaux ont également été évaluées de nuit et ont montré sensiblement les mêmes résultats.

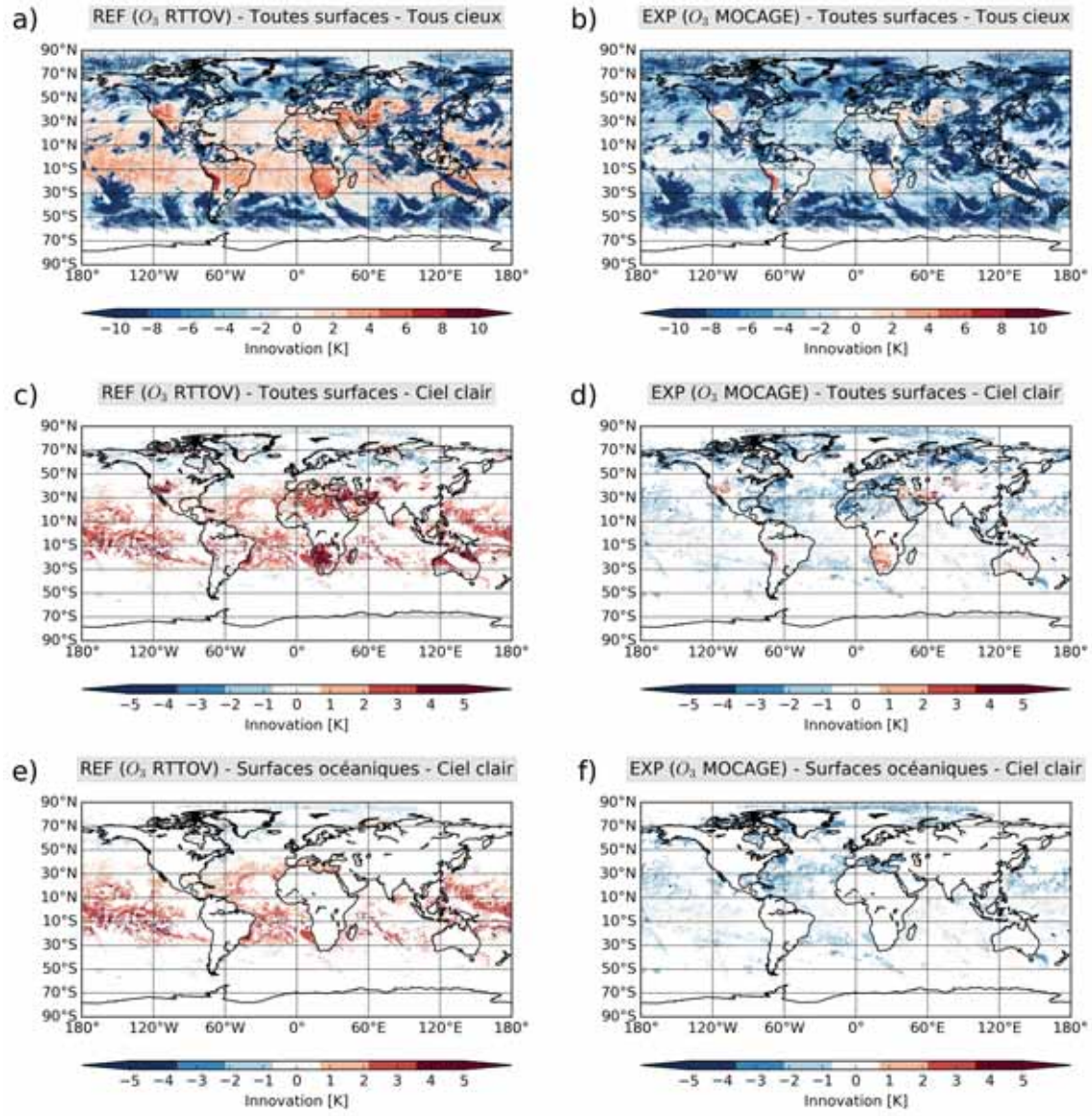


FIGURE 9.5: Innovations pour le canal IASI 1685 (1.066 cm^{-1}) le 12 juillet 2016 de jour sur toutes les surfaces et tous cieux pour les expériences REF en vert (a) et EXP en rouge (b), puis sur toutes les surfaces en ciel clair pour les expériences REF (c) et EXP (d) et sur les surfaces océaniques en ciel clair pour les expériences REF (e) et EXP (f).

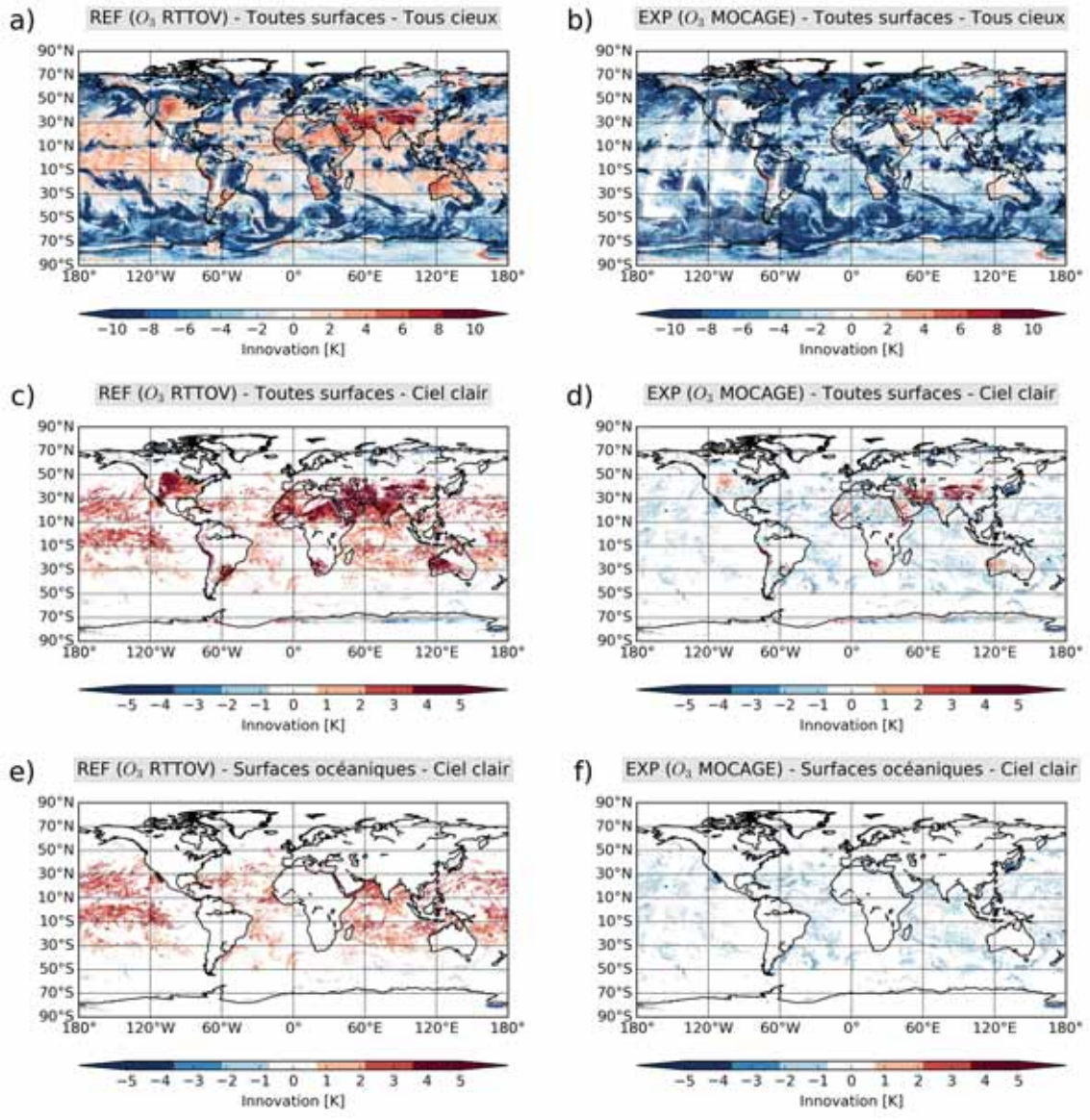


FIGURE 9.6: Idem que pour la Figure 9.5 mais pour le 12 novembre 2016 de jour.

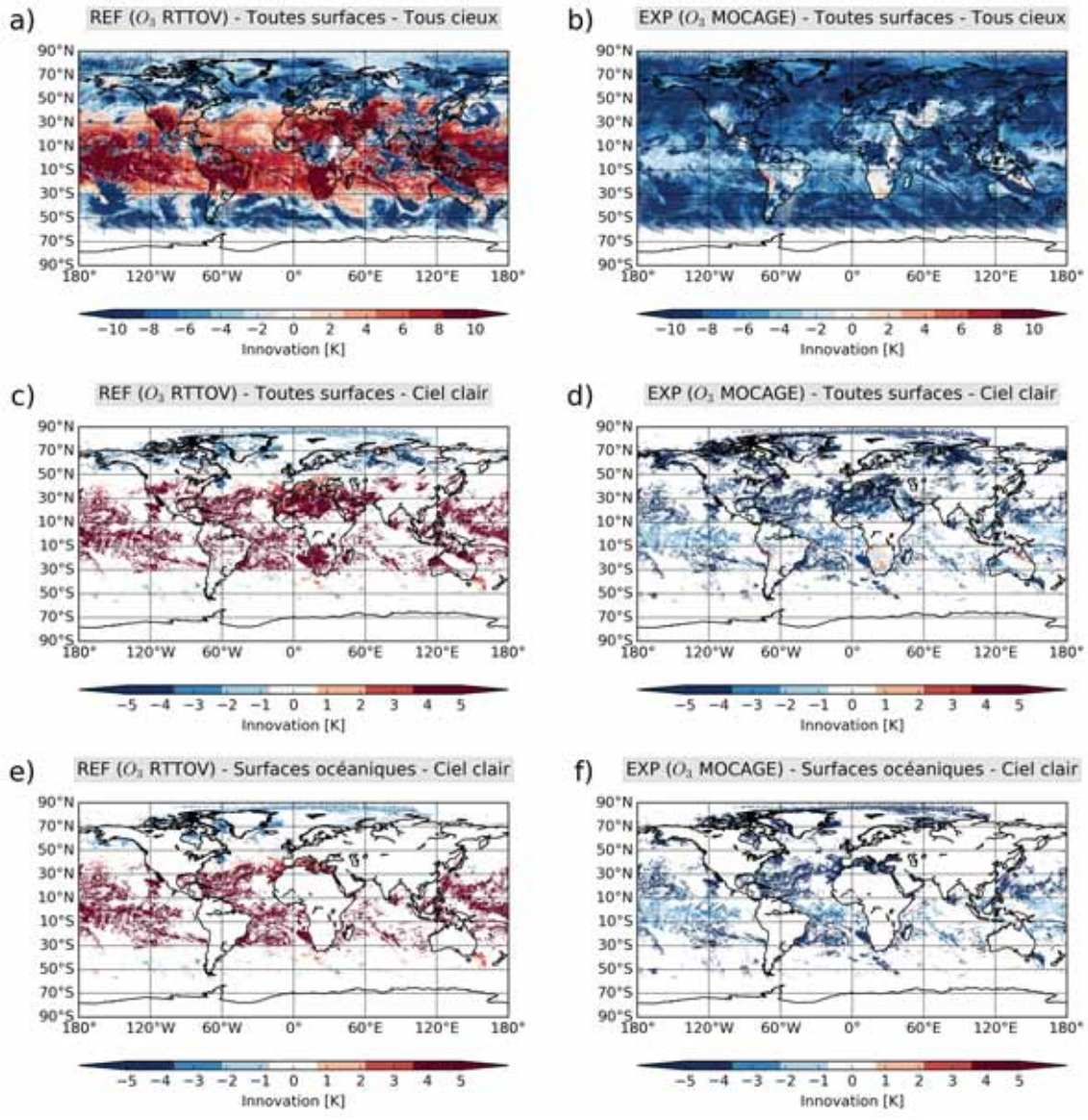


FIGURE 9.7: Idem que pour la Figure 9.5 mais pour le canal IASI 1530 (1.027,25 cm^{-1}).

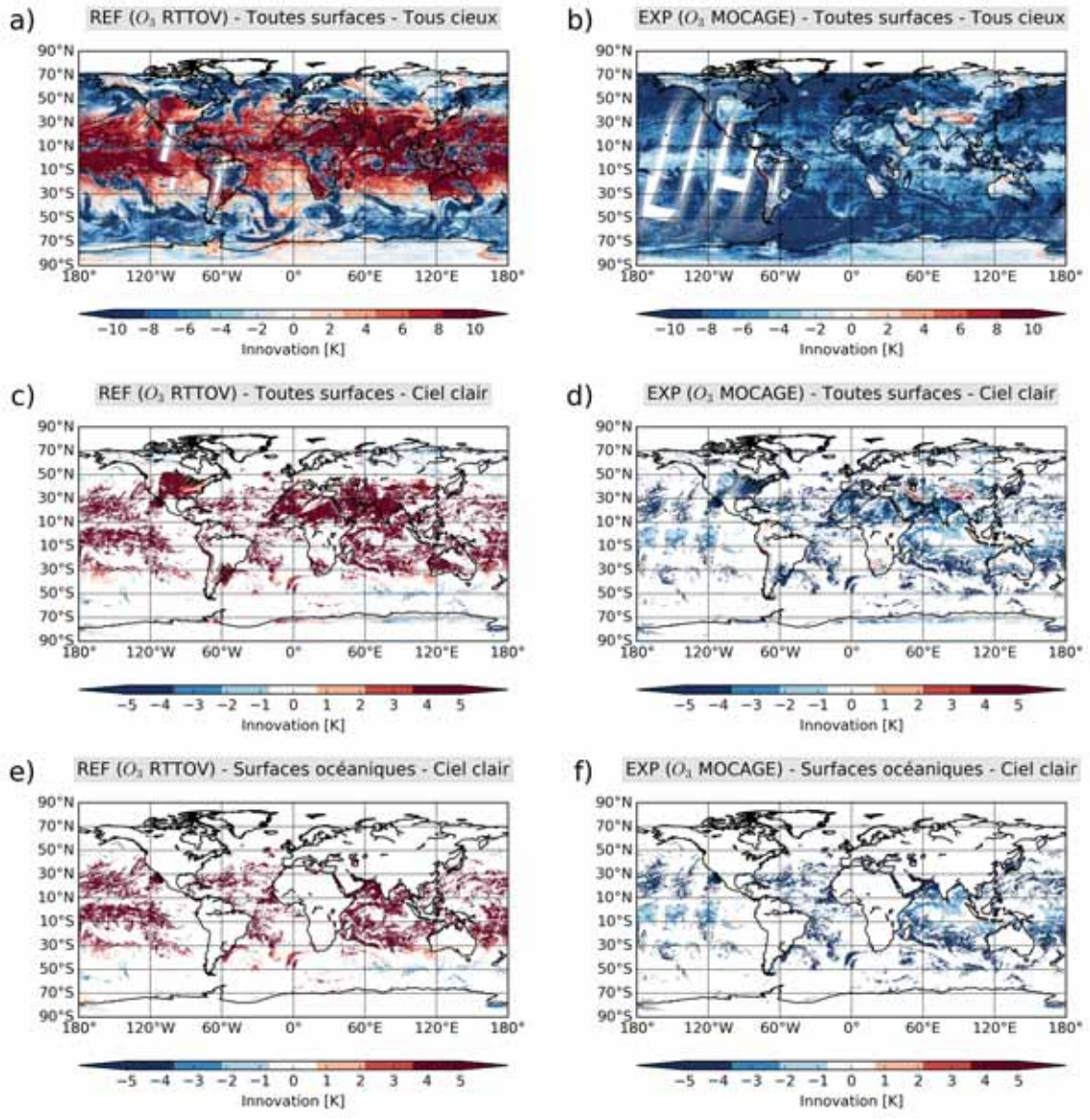


FIGURE 9.8: Idem que pour la Figure 9.7 mais pour le 12 novembre 2016 de jour.

9.3.2 Impacts sur les analyses en température, humidité et vent

Nous avons ensuite évalué l'utilisation seule des champs d'ozone dans le système d'assimilation 4D-Var sur les analyses en température, humidité et vent. Pour cela, des moyennes des différences d'analyse entre les expériences REF et EXP (EXP - REF) sur les périodes considérées ont été calculées pour la température, l'humidité relative et la composante zonale du vent. Sur les Figures 9.9, 9.10 et 9.11 nous identifions les impacts de l'utilisation de l'ozone de MOCAGE sur les analyses par des coupes latitudinales (moyennes longitudinales) en fonction de la pression.

Les impacts du champ d'ozone de MOCAGE sur les champs analysés de température sont relativement faibles sur une grande partie de l'atmosphère excepté pour certaines zones. Sur la période juillet-août, on remarque des différences de température légèrement plus élevées au-dessus de l'Arctique entre 600 et 200 hPa, tandis que des différences un peu plus fortes sont observées sur la période de novembre-décembre entre les mêmes niveaux de pression mais cette fois-ci au-dessus de l'Antarctique. La zone de l'atmosphère pour laquelle on observe les plus grandes différences de température se situe entre 10 et 1 hPa avec des valeurs à plus de 1 K. Les valeurs minimales et maximales peuvent atteindre -2,0 et 2,2 K pour la période estivale et -1,8 et 1,8 K pour la période hivernale. Ces niveaux de pression coïncident avec ceux où l'on mesure les valeurs maximales des moyennes zonales du rapport de mélange d'ozone, évoquées dans le Chapitre 1. Pendant la période estivale, ces maxima tendent vers les hautes latitudes dans l'hémisphère nord, tandis que sur la période hivernale, ils tendent vers les hautes latitudes dans l'hémisphère sud. Les différences de températures observées à ces niveaux de pression suivent ces tendances. Ainsi, l'utilisation de l'ozone de MOCAGE dans ARPEGE a tendance à refroidir les analyses en température dans la haute stratosphère aux Tropiques et à réchauffer ces mêmes analyses également dans la haute stratosphère mais aux hautes latitudes.

Les impacts de l'utilisation des champs d'ozone de MOCAGE sur les analyses en humidité relative sont observés dans la troposphère, principalement aux Tropiques entre 30 ° S et 30 ° N, avec des différences pouvant atteindre plus de 2 %. Les valeurs minimums et maximums peuvent atteindre -2,1 et 2,25 % pour la période estivale et -3,4 et 2,6 % pour la période hivernale. On remarque que l'utilisation de l'ozone de MOCAGE dans ARPEGE a tendance à humidifier les analyses dans la troposphère aux Tropiques avec des valeurs plus élevées dans la basse troposphère sur les deux périodes, estivales et hivernales. Pour la période de juillet-août, on observe une humidification au-dessus de l'Antarctique et un assèchement pour la même zone sur la période novembre-décembre.

L'utilisation des champs d'ozone réalistes issus de MOCAGE dans l'opérateur d'observation impact également les analyses de la composante zonale du vent dans la stratosphère et particulièrement en haute stratosphère aux Tropiques et moyennes latitudes avec des différences pouvant atteindre plus de 1 $m.s^{-1}$. Les valeurs minimales et maximales peuvent atteindre -1,6 et 0,3 $m.s^{-1}$ pour la période estivale et -1,7 et 0,5 $m.s^{-1}$ pour la période hivernale. Ces résultats indique une tendance à l'affaiblissement de la composante zonale du vent aux moyennes latitudes et un renforcement aux Tropiques sur les deux périodes, estivales et hivernales.

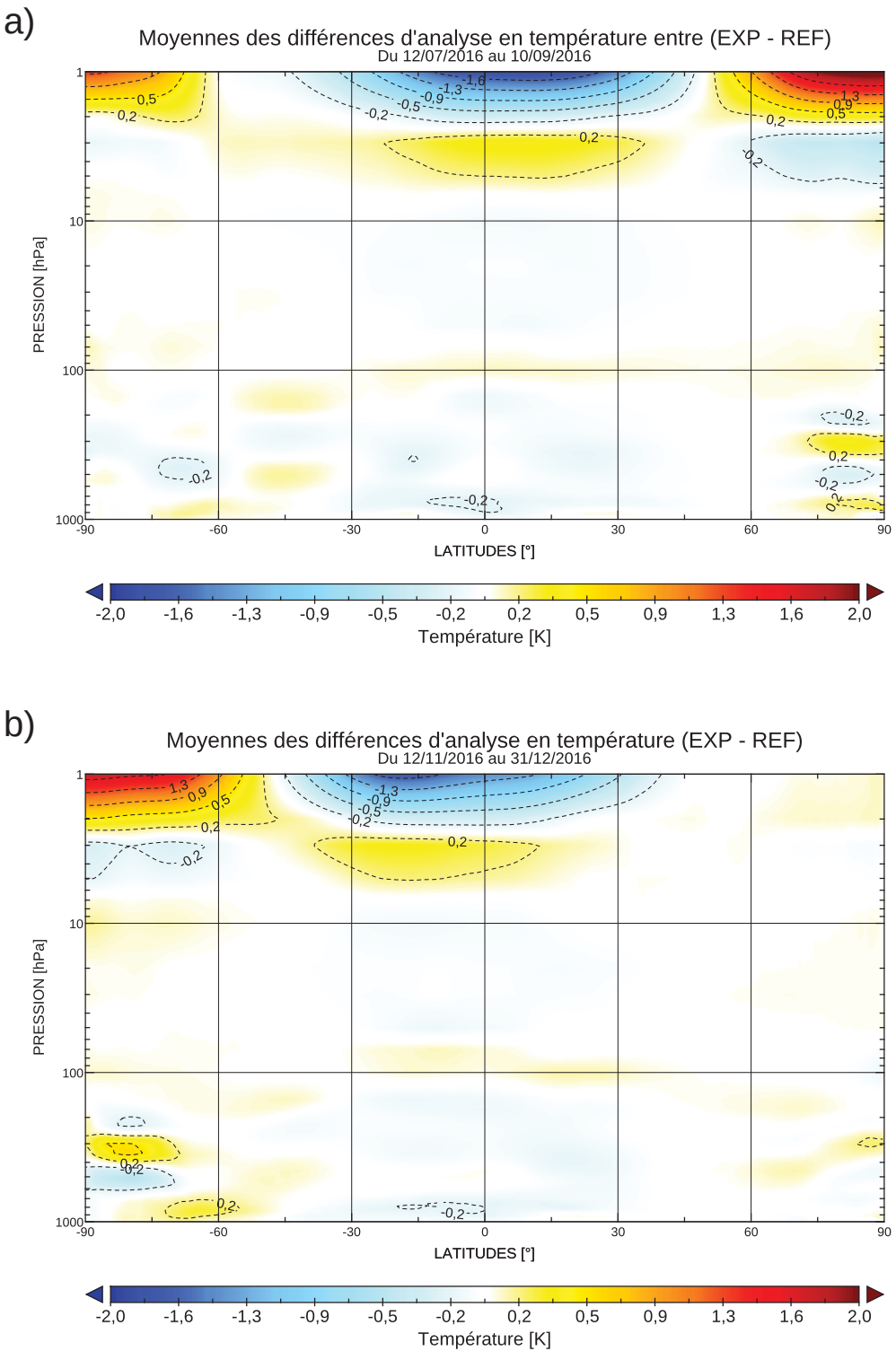


FIGURE 9.9: Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en température entre les expériences REF et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 10 septembre 2016 (a) et la période allant du 12 novembre au 31 décembre 2016 (b).

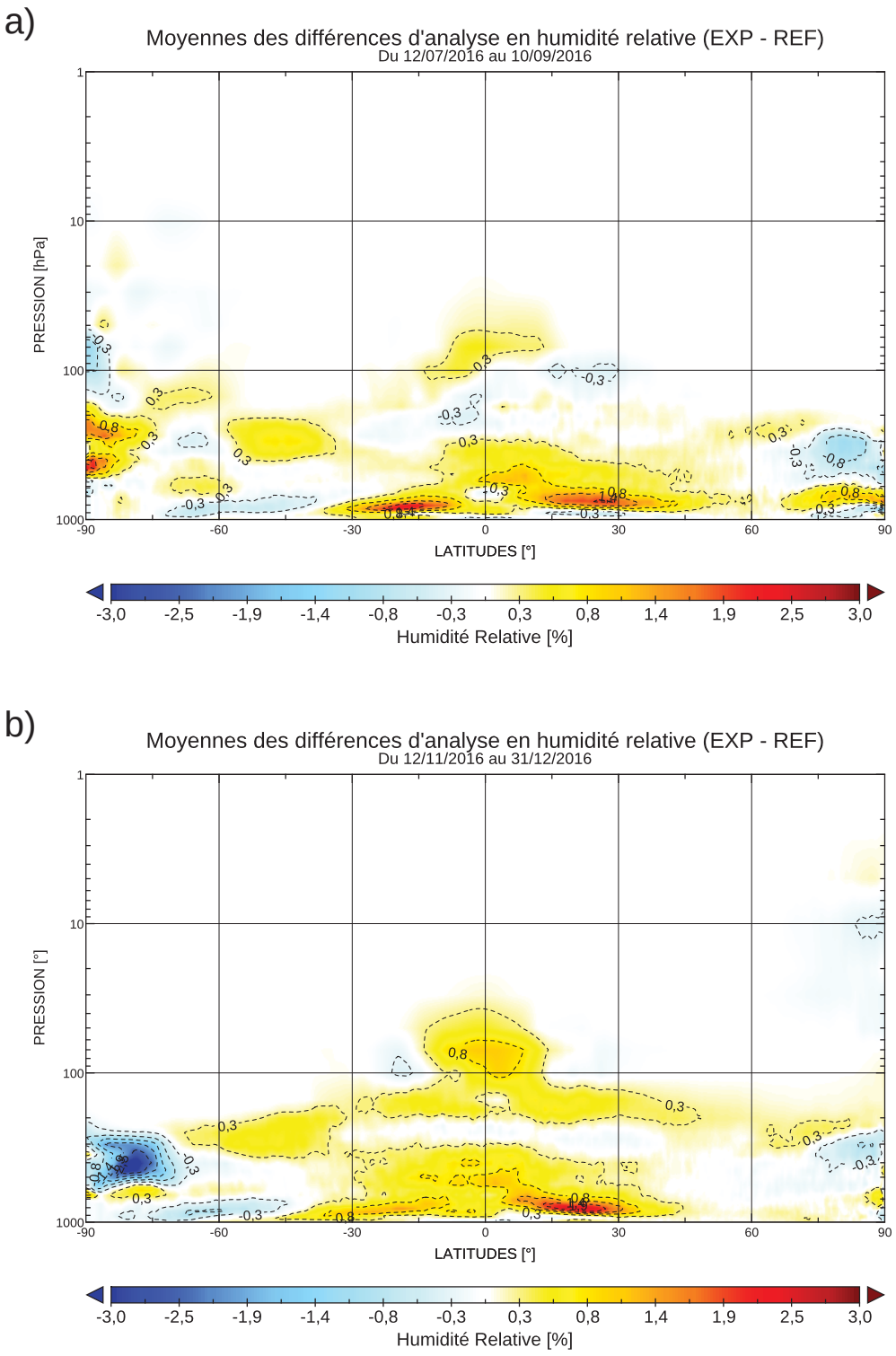


FIGURE 9.10: Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en humidité relative entre les expériences REF et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 10 septembre 2016 (a) et la période allant du 12 novembre au 31 décembre 2016 (b).

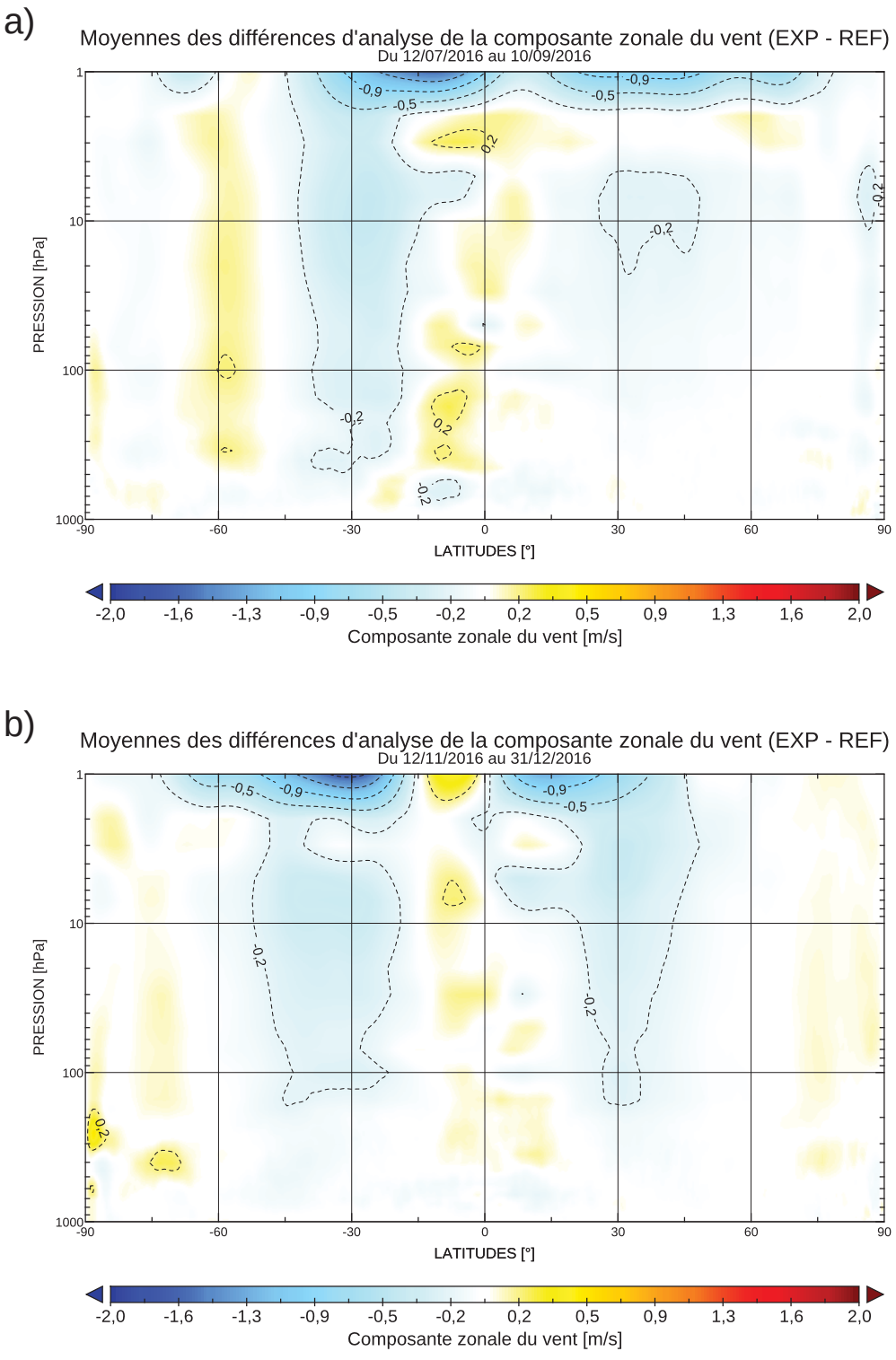


FIGURE 9.11: Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse de la composante zonale du vent entre les expériences REF et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 10 septembre 2016 (a) et la période allant du 12 novembre au 31 décembre 2016 (b).

Comment l'utilisation des champs d'ozone de MOCAGE dans ARPEGE sans minimisation sur l'ozone et sans assimilation d'observations supplémentaires sensibles à l'ozone peut-elle avoir de tels impacts sur les analyses en température, humidité et vent ? Nous avons montré que l'utilisation de cette ozone réaliste dans le processus d'assimilation permet de mieux simuler les canaux IASI sensibles à l'ozone et d'en réduire les valeurs des innovations. En effet, comme nous l'avons vu tout au long de ces études, l'utilisation d'une ébauche chimique plus réaliste a un impact positif sur la résolution du transfert radiatif par RTTOV et donc sur une meilleure simulation des observations sensibles à l'ozone. Or, dans ces expériences EXP et REF, on n'assimile pas encore la sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone. L'utilisation de l'ozone de MOCAGE doit donc avoir un impact sur la simulation d'autres observations. C'est ce que nous allons évoquer dans la prochaine section.

9.3.3 Impacts sur l'assimilation des autres observations

Dans cette section nous avons évalué l'impact de l'utilisation de l'ozone de MOCAGE dans ARPEGE sur le processus d'assimilation d'autres observations que celles de IASI. En effet, les champs d'ozone ont été fournis à tous les opérateurs d'observations, ce qui a eu un impact sur les observations sensibles à l'ozone des instruments CrIS, AIRS, SEVIRI... mais pas uniquement sur les canaux sensibles à l'ozone. En effet, nous avons vu dans le Chapitre 6 que les résultats illustrées par la Figure 6.11 démontrent que l'utilisation d'une source d'ozone plus réaliste permet de réduire significativement les biais et les écarts-types des innovations des canaux IASI sensibles à l'ozone mais également de certains canaux sensibles au dioxyde de carbone.

Si l'on réalise un zoom sur les canaux sensibles au CO_2 entre 645 et 720 cm^{-1} (Figure 9.12) on constate une réduction des biais et des écarts-types des innovations particulièrement pour une bande spectrale comprise entre 705 et 720 cm^{-1}. On observe également qu'à cette bande spectrale appartient 14 canaux assimilés actuellement en opérationnel. Cela démontre que l'utilisation d'un champ d'ozone réaliste utilisé dans l'opérateur d'observation permet de mieux simuler les observations satellitaires infrarouges sensibles à l'ozone des instruments hyperspectraux mais également les observations satellitaires infrarouges sensibles au CO_2.

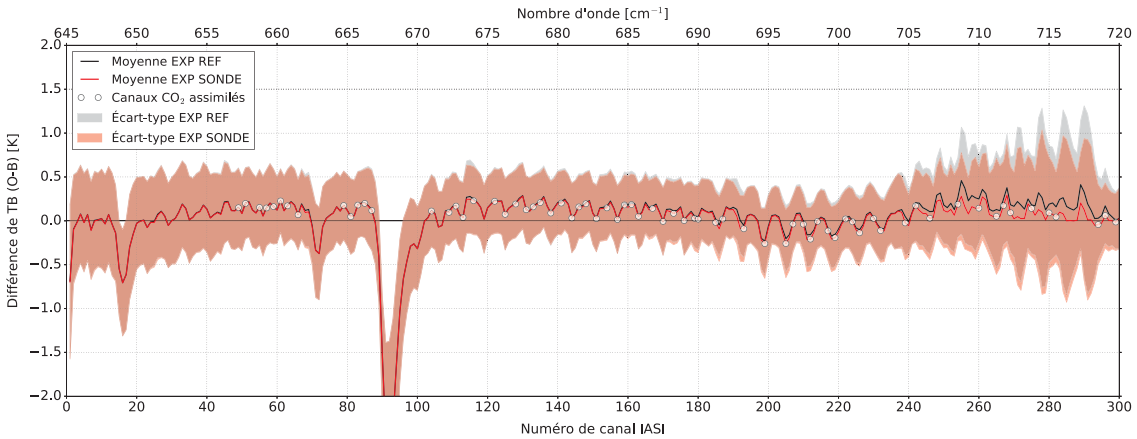


FIGURE 9.12: Moyennes plus ou moins les écarts-types des différences de Température de Brillance entre les observations réelles et simulées utilisant le profil d'ozone de référence (en noir) et les profils d'ozone mesurés *in situ* (en rouge) (Figure 6.11) pour les 300 premiers canaux de IASI sensibles au dioxyde de carbone (645 à 720 cm^{-1}) premiers canaux IASI. Les points blancs représentent les canaux assimilés actuellement en opérationnel à Météo-France.

Nous avons également constaté des impacts sur des observations qui à première vue ne sont pas sensibles à l'ozone, typiquement les radiosondages de température, d'humidité, de vent zonal et méridien ainsi que sur les observations satellitaires des sondeurs micro-ondes AMSU-A et AMSU-B. Nous avons calculé pour chacune de ces observations, les moyennes et les écarts-types des innovations (obs - ébauche) et des résidus (obs - analyse) pour les deux périodes d'étude, pour REF et EXP. Les moyennes sont présentées sous forme de profils superposés ; pour les écarts-types, nous présentons les différences relatives entre EXP et REF, accompagnées de barres d'erreurs. Nous allons décrire plus spécifiquement les résultats des innovations puisque c'est ces dernières nous indiquent si l'information apportée par les observations par rapport à l'ébauche est positive et sert à construire une meilleure analyse.

Sur la Figure 9.13 pour la période estivale, on remarque que EXP permet de réduire la moyenne des innovations des radiosondages de température par rapport à REF de la surface à 70 hPa. Les différences relatives des écarts-types des innovations montrent que ces réductions sont significatives pour les niveaux de pression 400 hPa et 850 hPa. On note également une réduction des moyennes des innovations des radiosondages d'humidité entre 850 et 400 hPa pour l'expérience EXP par rapport à REF.

Pour la période hivernale (Figure 9.14), on observe une réduction des moyennes des innovations des radiosondages de température entre 1.000 et 70 hPa pour l'expérience EXP par rapport à REF. Les différences relatives des écarts-types des innovations indiquent que ces réductions sont significatives autour des niveaux de pression 50 et 100 hPa. On remarque la même réduction qu'en période estivale des moyennes d'innovations pour les radiosondages d'humidité entre 1.000 et 400 hPa pour l'expérience EXP par rapport à REF. Les différences relatives des écarts-types des innovations montrent que cette réduction est significative autour du niveau de pression 850 hPa. La réduction des moyennes des innovations des radiosondages d'humidité pour EXP peut être mise en relation avec les modifications apportées par l'ozone de MOCAGE sur les champs d'humidité analysés à ces mêmes niveaux de pression.

Sur la Figure 9.15, on remarque une réduction des moyennes de EXP et des différences relatives des écarts-types des innovations pour les radiosondages vent zonal entre 150 et 10 hPa. Les barres d'erreur nous montrent que ces réductions sont significatives pour les niveaux de pression 150, 100, 70, 30 et 20 hPa. On note également une augmentation des moyennes des innovations de EXP pour les radiosondages du vent zonal entre 700 et 250 hPa mais non significative. On observe pour les radiosondages de vent méridien, une réduction sur l'ensemble de la verticale des moyennes des innovations de EXP et une réduction des différences relatives des écarts-types significative entre 150 et 50 hPa.

Pour les radiosondages des vents zonaux et méridiens sur la période hivernale (Figure 9.16), on observe les mêmes comportements sur les réductions des moyennes des innovations de EXP et des différences relatives des écarts-types des innovations. Les réductions pour le vent zonal sont significatives pour les niveaux de pression 100, 70, 50, 30, 20 et 10 hPa et pour le vent méridien pour les niveaux de pression 500, 150, 100, 70 et 30 hPa.

Ces niveaux de pression coïncident avec les maxima de concentration en ozone dans l'atmosphère. Ces améliorations peuvent s'expliquer par la prise en compte au fil des simulations EXP d'une meilleure variabilité de l'ozone à cette altitude et à une amélioration des analyses permettant une réduction des innovations pour ces observations. De plus, les incréments de température apportés par les canaux faiblement sensibles à l'ozone et présents dans la sélection opérationnelle génèrent probablement des incréments de vent plus réalistes. En effet, des corrélations existent dans la matrice $\mathbf{B}$ entre les erreurs de température et les erreurs de vent.

Nous avons également remarqué des impacts positifs sur l'assimilation d'autres observations satellitaires que les infrarouges. En effet, nous avons observé des impacts de l'utilisation du champ d'ozone de MOCAGE sur l'assimilation des sondeurs micro-ondes AMSU-A et AMSU-B. Les canaux de l'instrument AMSU-A sont sensibles à la température de la surface au sommet de l'atmosphère, respectivement du canal 5 au canal 13, tandis que les canaux de l'instrument AMSU-B sont sensibles à l'humidité. Sur la Figure 9.17 on remarque une réduction des moyennes des innovations dans EXP pour l'instrument AMSU-A pour les canaux allant de 7 à 13 et une réduction significative des différences relatives des écarts-types des innovations pour ces mêmes canaux. On observe également une réduction des moyennes des innovations dans EXP pour l'instrument AMSU-B pour les canaux allant de 3 à 5 et une réduction associée, significative des différences relatives des écarts-types des innovations pour ces mêmes canaux. Les jacobiens de température pour les canaux AMSU-A sont sensibles entre 100 et 10 hPa. Ces canaux n'étant pas sensibles à l'ozone, cette amélioration est obtenue grâce à un champ de température mieux décrit dans EXP.

Pour la période hivernale présentée sur la Figure 9.18, on observe les mêmes résultats en termes de moyennes des innovations de EXP pour les instruments AMSU-A et AMSU-B. On note une réduction supplémentaire des différences relatives des écarts-types des innovations des canaux 5 et 6. Cependant, les différences relatives des écarts-types des innovations pour AMSU-B ne sont pas significatives pour cette période.

Globalement, l'utilisation des champs d'ozone réalistes dans les expériences EXP permet de mieux assimiler les observations satellitaires infrarouges mais également d'autres observations, conventionnelles ou sensibles dans différentes gammes spectrales. Nous venons de montrer que l'utilisation de l'ozone de MOCAGE dans $\mathcal{H}$ pour le processus d'assimilation du 4D-Var ARPEGE améliore significativement l'assimilation des radiosondages en température, humidité et vents sur des expériences de deux mois pour deux périodes distinctes. En effet, même si les améliorations apportées par le champ d'ozone réaliste au début de l'expérience sont faibles, elles se propagent et s'ajoutent au fil des simulations améliorant les analyses thermodynamiques et permettent ainsi de réduire les innovations pour ces radiosondages et de mieux les assimiler pour l'analyse suivante. De la même manière, les améliorations apportées dans les analyses thermodynamiques et l'utilisation d'un champ réaliste d'ozone permettent de mieux simuler n'importe quel type d'observations, en l'occurrence dans cet exemple, les sondeurs micro-ondes AMSU-A et AMSU-B. Ces résultats démontrent la nécessité d'augmenter le réalisme de la chimie dans le modèle ARPEGE puisque l'utilisation de l'ozone réaliste permet à elle seule à la fois de mieux assimiler les observations et d'améliorer les analyses thermodynamiques.

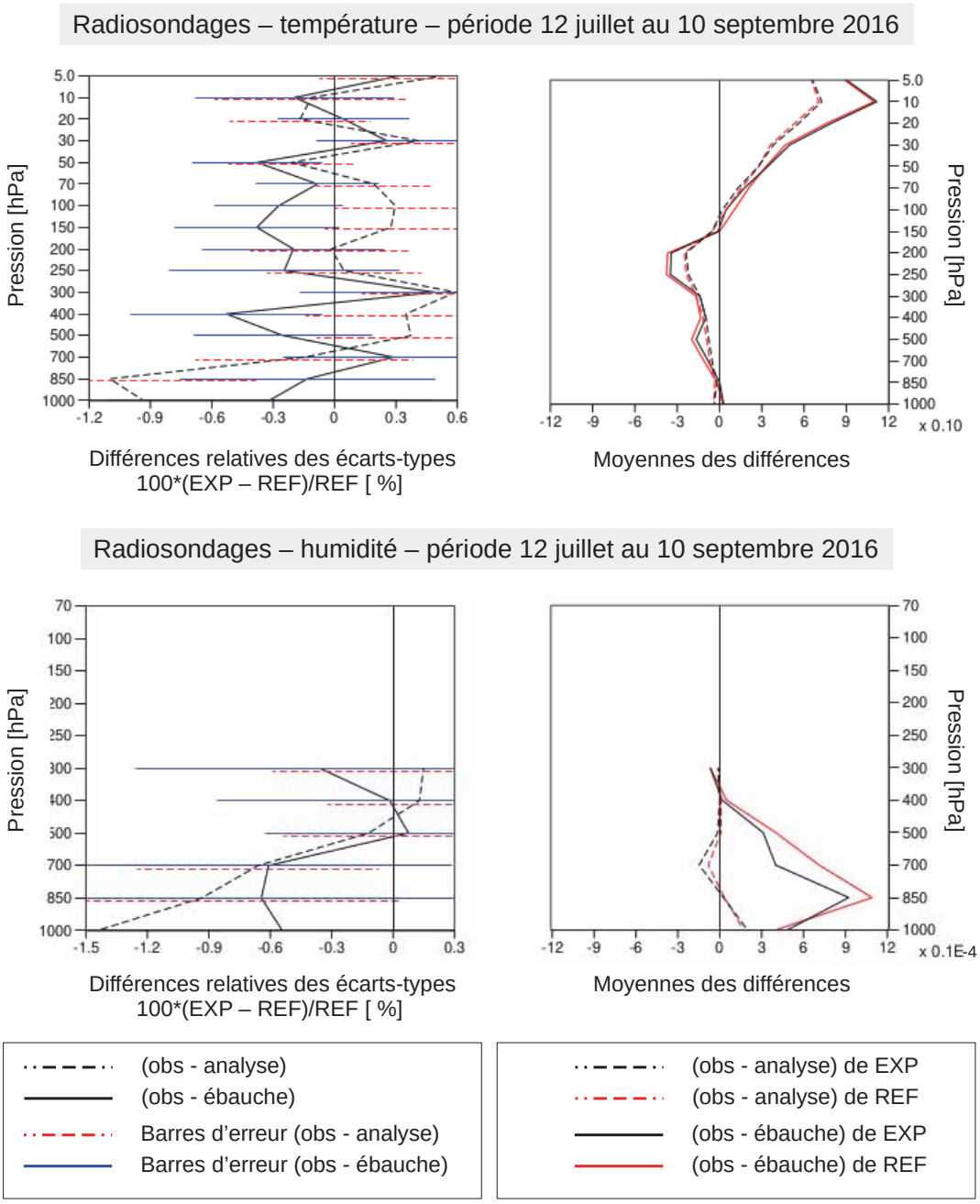


FIGURE 9.13: (Colonne de droite) Profils verticaux des moyennes des différences (obs - analyse) en ligne en tireté pour REF en rouge et EXP en noir et des moyennes des différences (obs - ébauche) en ligne continue pour REF en rouge et EXP en noir ; (Colonne de gauche) profils verticaux des différences relatives des écarts-types entre EXP et REF pour (obs - analyse) en ligne en tireté et (obs - échauche) en ligne continue avec les barres d'erreur associées à (obs - analyse) en ligne en tireté rouge et (obs - ébauche) en ligne continue bleue pour les radiosondages de température (en haut) et d'humidité (en bas) assimilés entre le 12 juillet et le 10 septembre 2016.

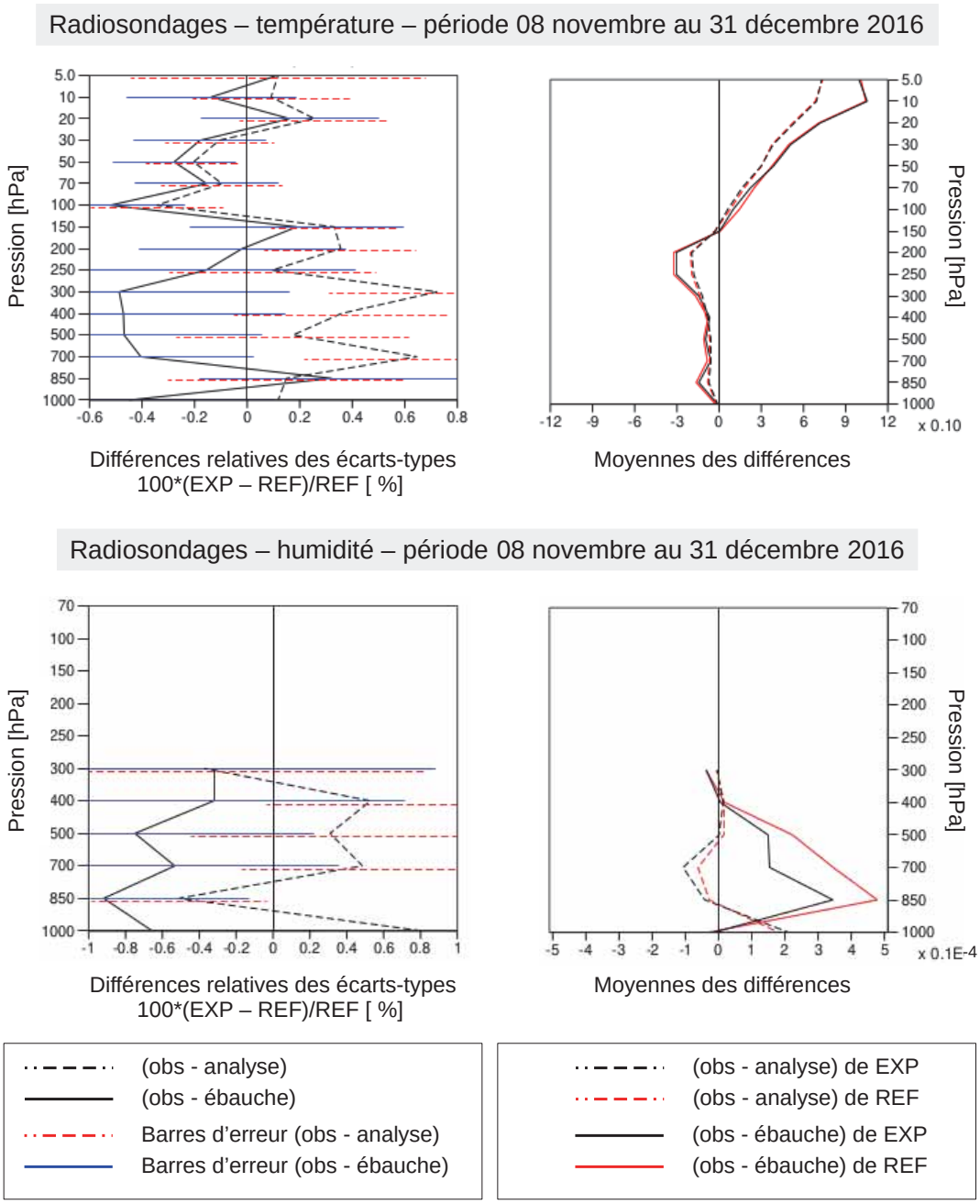


FIGURE 9.14: Idem que la Figure 9.13 mais pour la période entre le 08 novembre et le 31 décembre 2016.

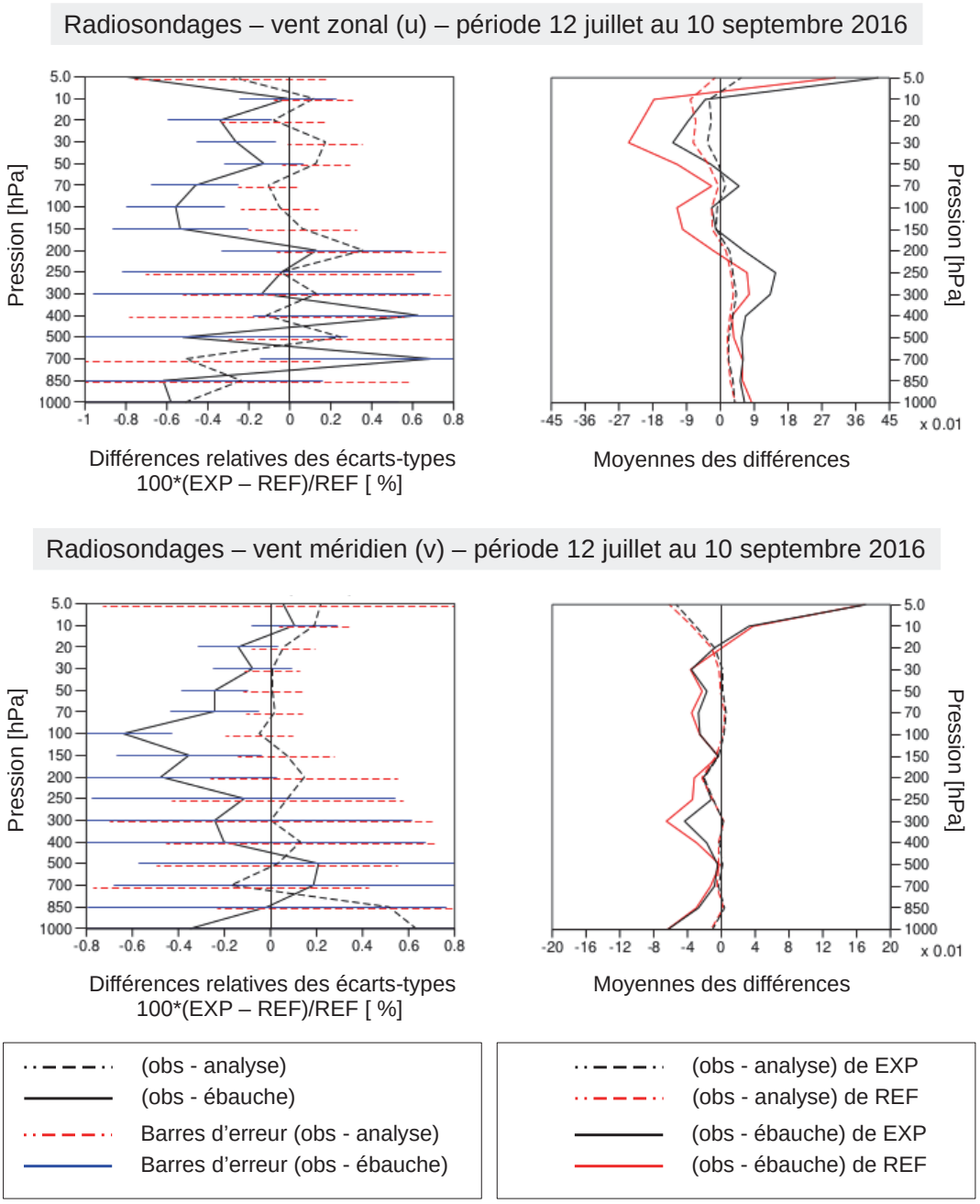


FIGURE 9.15: (Colonne de droite) Profils verticaux des moyennes des différences (obs - analyse) en ligne en tireté pour REF en rouge et EXP en noir et des moyennes des différences (obs - ébauche) en ligne continue pour REF en rouge et EXP en noir ; (Colonne de gauche) profils verticaux des différences relatives des écarts-types entre EXP et REF pour (obs - analyse) en ligne en tireté et (obs - échauche) en ligne continue avec les barres d'erreur associées à (obs - analyse) en ligne en tireté rouge et (obs - ébauche) en ligne continue bleue pour les radiosondages de vent zonal (en haut) et méridien (en bas) assimilés entre le 12 juillet et le 10 septembre 2016.

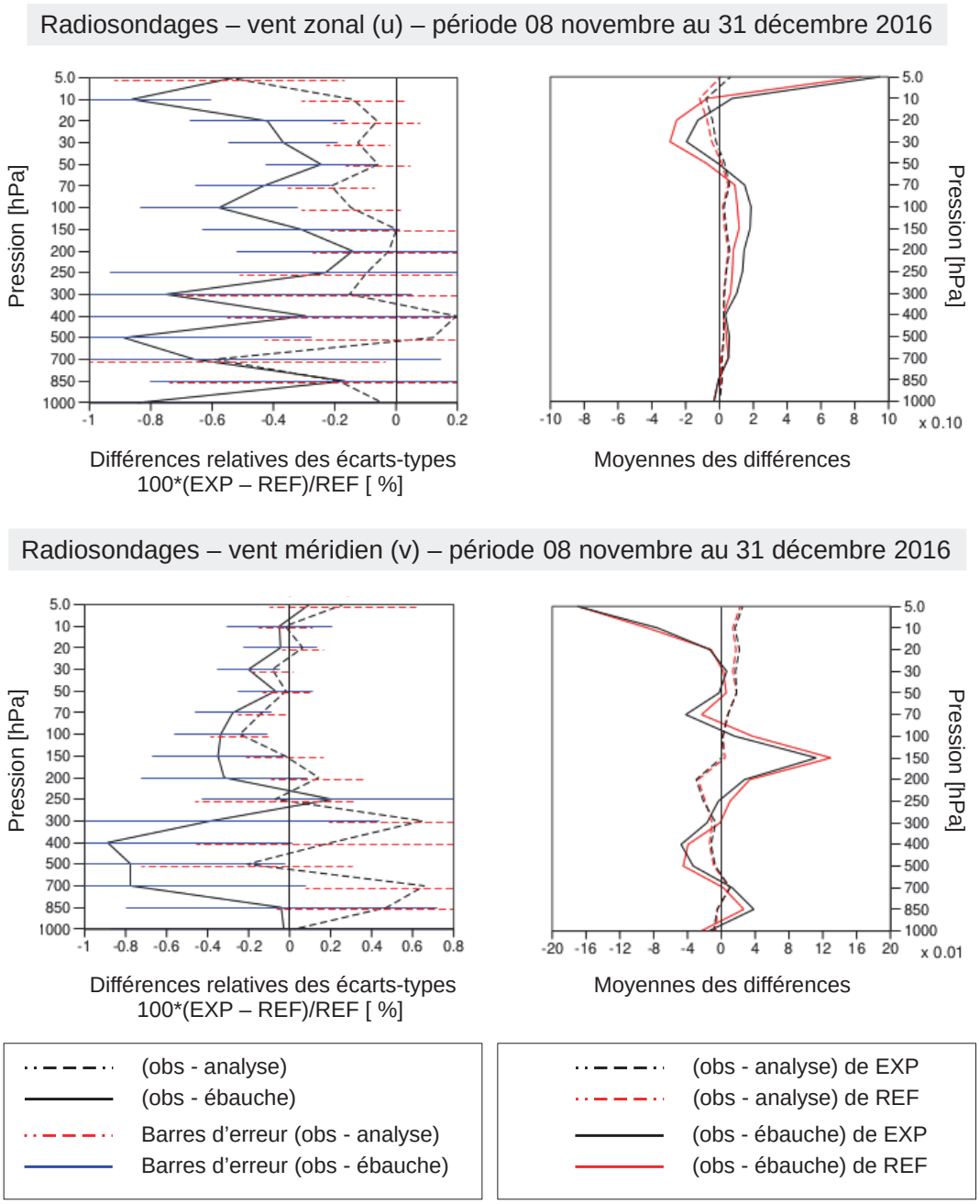


FIGURE 9.16: Idem que la Figure 9.15 mais pour la période entre le 08 novembre et le 31 décembre 2016.

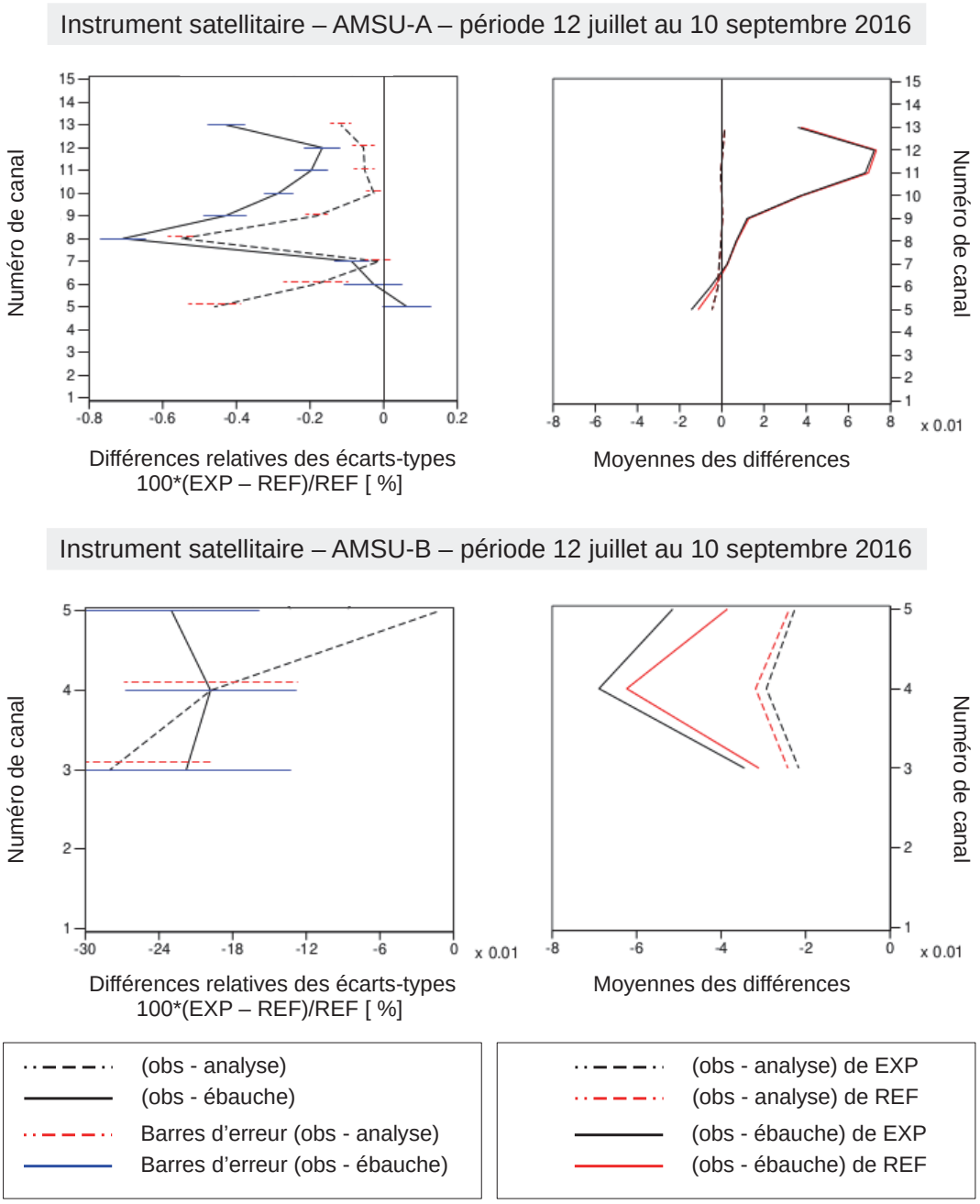


FIGURE 9.17: (Colonne de droite) Moyennes des différences (obs - analyse) en ligne en tireté pour REF en rouge et EXP en noir et moyennes des différences (obs - ébauche) en ligne continue pour REF en rouge et EXP en noir ; (Colonne de gauche) différences relatives des écarts-types entre EXP et REF pour (obs - analyse) en ligne en tireté et (obs - échauche) en ligne continue avec les barres d'erreur associées à (obs - analyse) en ligne en tireté rouge et (obs - ébauche) en ligne continue bleue pour les canaux des instruments satellitaires AMSU-A (en haut) et AMSU-B (en bas) assimilés entre le 12 juillet et le 10 septembre 2016.

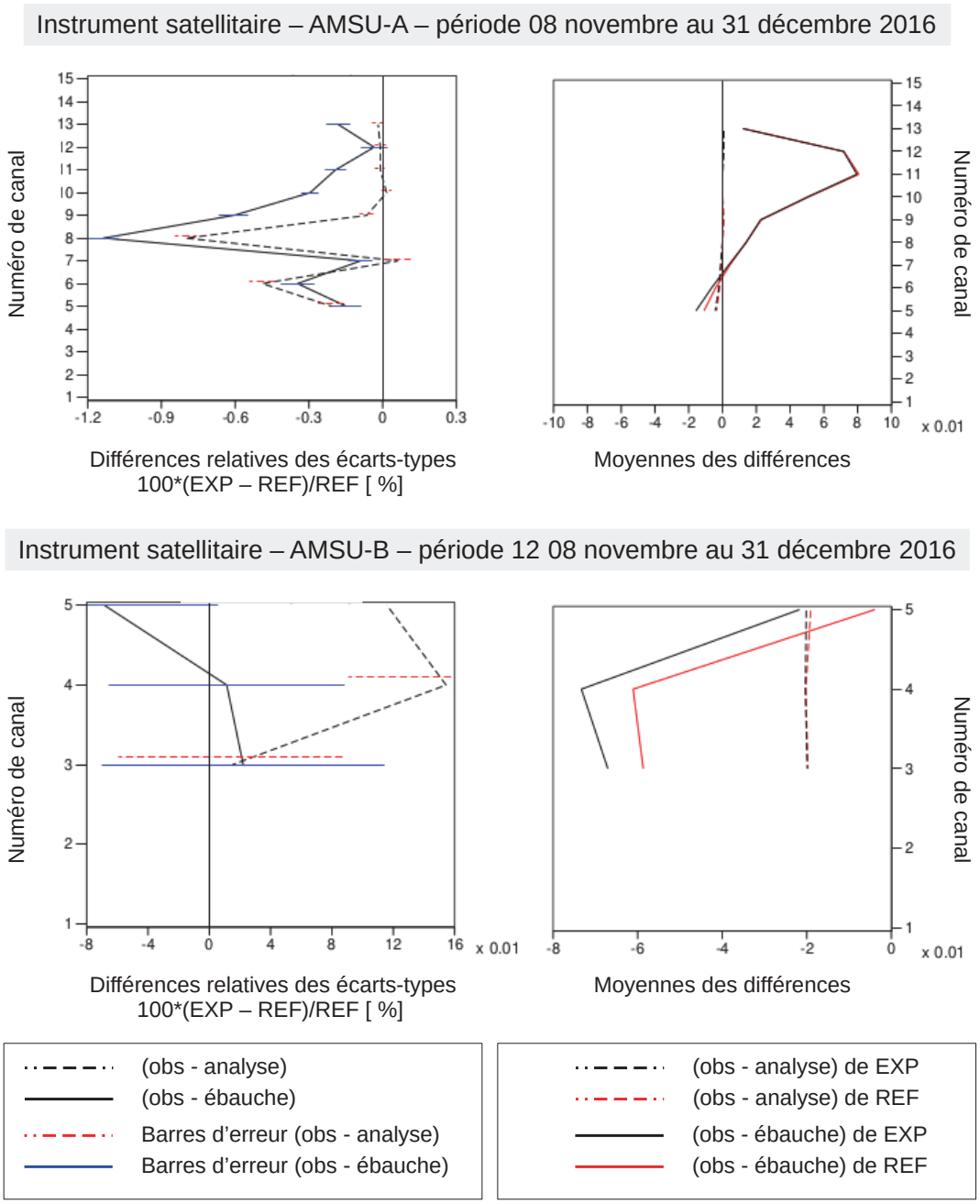


FIGURE 9.18: Idem que la Figure 9.17 mais pour la période entre le 08 novembre et le 31 décembre 2016.

9.3.4 Impacts sur la qualité des prévisions

L'ajout des champs d'ozone de MOCAGE dans $\mathcal{H}$ pour le processus d'assimilation 4D-Var ARPEGE, a montré des améliorations sur l'assimilation des observations conventionnelles et satellitaires et sur les analyses thermodynamiques. Il est important de vérifier si ces impacts positifs se propagent sur les prévisions météorologiques. À l'issue des expériences de prévisions, il est produit une quantité très importante de données à vérifier. Pour simplifier notre propos, nous avons choisi de présenter un exemple d'impact de l'utilisation des champs d'ozone réalistes dans l'assimilation ARPEGE sur les prévisions à échéance 72 H sur les Tropiques. Ces prévisions sont évaluées par rapport à leurs propres analyses, pour les expériences EXP et REF, pendant les deux périodes d'étude, pour la température, l'humidité relative et le vent.

La Figure 9.19 présente les moyennes et les écarts-types des différences entre prévisions et analyses. On remarque que l'expérience EXP (bleu) permet de réduire les moyennes des prévisions en température sur les deux périodes, particulièrement dans la basse troposphère entre 900 et 600 hPa. C'est à ces mêmes niveaux de pression que EXP réduit également le plus les écarts-types de prévisions. On observe que les écarts-types de EXP sont réduits sur l'ensemble du profil vertical particulièrement pour la période estivale.

Pour les prévisions d'humidité relative à cette échéance, l'expérience EXP permet de réduire les moyennes et les écarts-types dans la basse troposphère sur la période estivale et hivernale. On note également une augmentation des moyennes d'humidité relative pour cette même expérience entre 600 et 300 hPa avec un impact neutre sur l'écarts-types à ces mêmes niveaux de pression. Les valeurs de ces moyennes d'humidité pour l'expérience EXP peuvent être mises en relation avec la tendance d'humidification troposphérique dans les Tropiques remarquée sur les différences d'analyse en humidité relative sur la Figure 9.10. Enfin pour le vent, on remarque de légères diminutions des moyennes et des écarts-types pour l'expérience EXP sur les deux périodes principalement dans la basse troposphère et la basse stratosphère. Ces résultats semblent positifs et aller dans le sens d'une amélioration des prévisions.

Nous avons calculé et tracé les différences relatives des erreurs quadratiques moyennes (qui regroupent le biais et les écarts-types) des prévisions de température, d'humidité relative et de vent par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision (de 00 à 102 h toutes les 06 h) dans les trois grands domaines (Nord, Tropiques et Sud) sur les deux périodes estivale et hivernale pour tirer des conclusions (Figure 9.20). Les isolignes bleues indiquent que les prévisions issues de EXP sont améliorées par rapport à REF et les isolignes en tireté rouge indiquent l'inverse. Pour s'assurer du caractère statistiquement significatif de nos résultats, nous avons réalisé des tests de significativité à 95 % (Bootstrap). Les améliorations et dégradations des prévisions surlignées en jaune sont donc significatives à 95 %.

Les résultats sont très intéressants puisque l'ajout de l'ozone réaliste dans $\mathcal{H}$ permet d'améliorer les prévisions de température, d'humidité relative et du vent sur les deux périodes de l'étude, sur les trois grands domaines sur l'ensemble des échéances de prévision. On note quelques légères dégradations en température et humidité qui sont soit très faibles, soit non significatives. Globalement les prévisions de température peuvent être améliorées jusqu'à 4 %, et 3 % pour l'humidité et le vent. L'impact positif de l'ozone de MOCAGE utilisé par l'opérateur d'observation, sur les prévisions météorologiques est 8 à 6 fois plus important que les améliorations généralement apportées au modèle de PNT ARPEGE de nos jours. L'étape 1 offre ainsi une avancée significative à l'évolution du modèle ARPEGE.

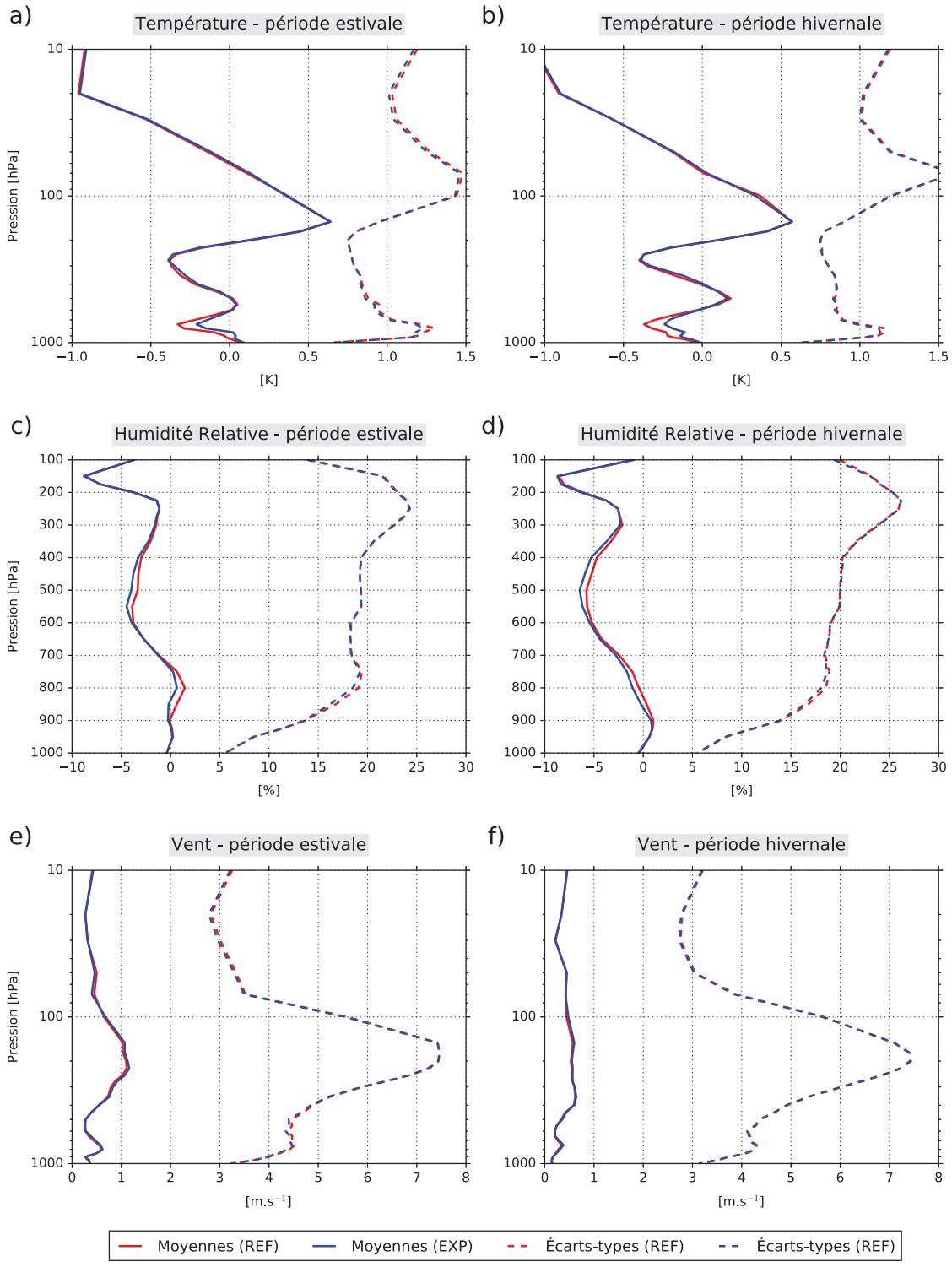


FIGURE 9.19: Moyennes (en ligne pleine) et écarts-types (en ligne tireté) des prévisions en température, humidité relative et vent par rapport à leurs propres analyses à échéance 72 H sur les Tropiques pour les expériences REF (en rouge) et EXP (en bleu) sur la période estivale du 12 juillet au 10 septembre 2016 (à gauche) et hivernale du 08 novembre au 31 décembre 2016 (à droite).

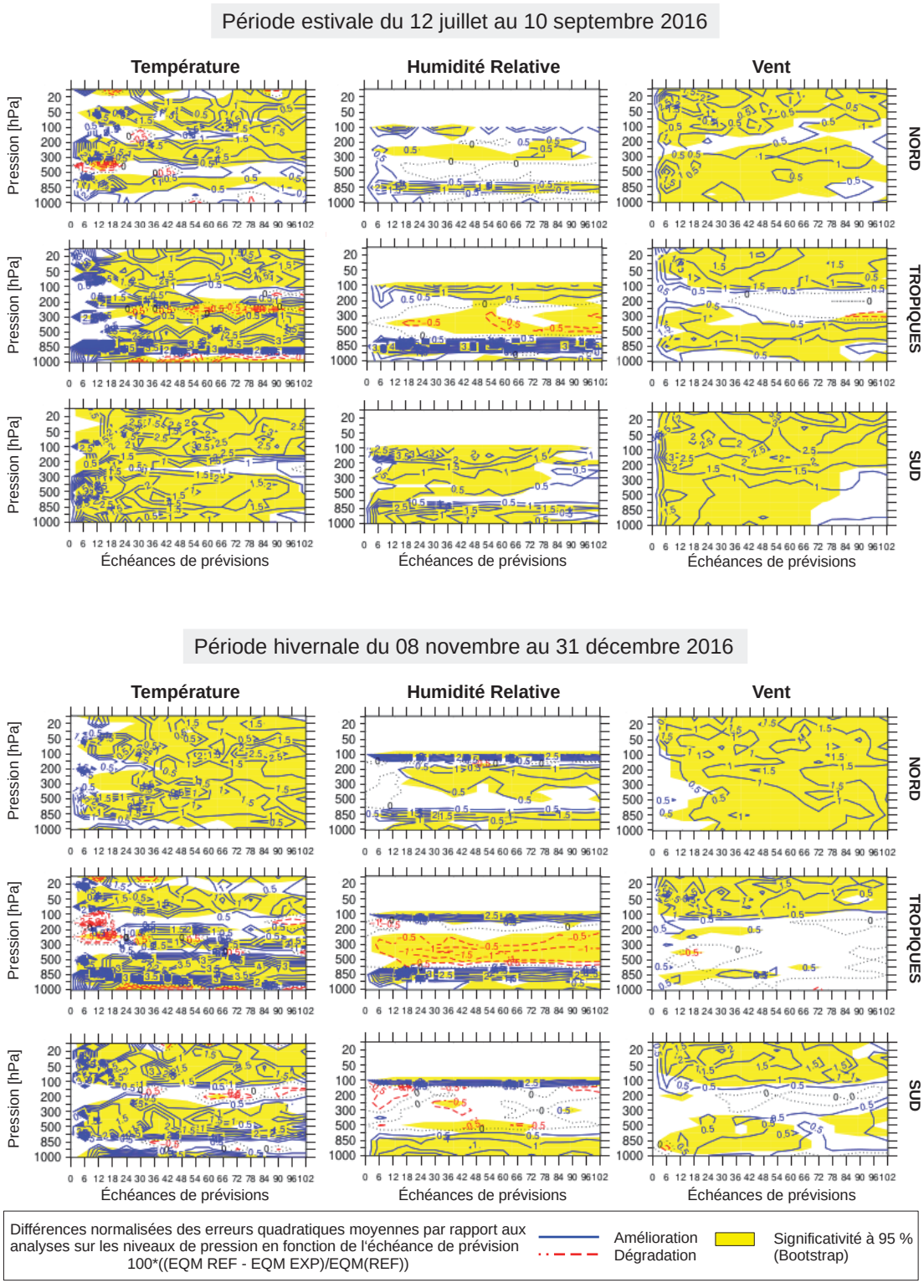


FIGURE 9.20: Différences normalisées des erreurs quadratiques moyennes des prévisions de température (à gauche), d'humidité relative (au centre) et de vent (à droite) par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision dans les trois grands domaines : Nord, Tropiques et Sud pour les périodes estivales du 12 juillet au 10 septembre 2016 (en haut) et hivernale du 08 novembre au 31 décembre 2016 (en bas).

9.4 Étape 2 : Ajout de la sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone

Une deuxième partie de l'étude a consisté à assimiler notre sélection des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone conjointement à l'utilisation des champs 3D d'ozone dans l'opérateur d'observation. Nous avons réalisé deux expériences utilisant l'ozone de MOCAGE avec ou sans les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone, respectivement EXP15 et EXP. Ces expériences ont été réalisées pendant la période estivale du 12 juillet au 31 août 2016 et l'ozone n'a pas été ajouté à la variable de contrôle du 4D-Var. De plus, pour bénéficier de manière optimale des informations fournies par ces 15 canaux, ces expériences utilisent une matrice de covariance d'erreur d'observation diagnostiquée par la méthode de [Desroziers et al., 2005] dont l'on illustre les écarts-types d'erreur d'observation et la matrice de corrélation des 138 canaux IASI considérés, dans la Figure 9.21.a et b.

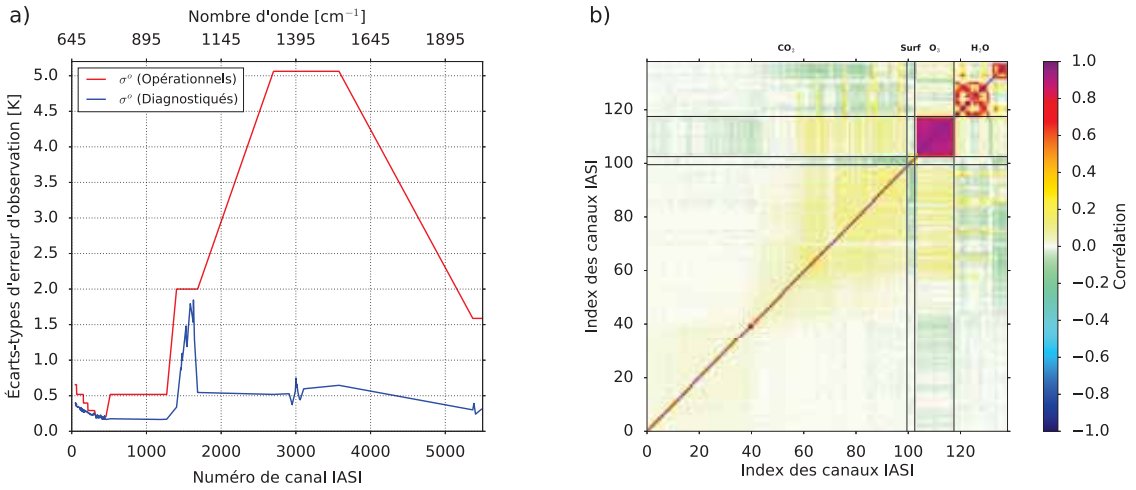


FIGURE 9.21: Écarts-types d'erreur d'observation diagnostiquées (a) et matrice de corrélation d'erreur d'observation diagnostiquées (b) en fonction des 138 canaux IASI (123 opérationnels + 15 O_3).

La Figure 9.21.a représente les écarts-types d'erreur d'observation (en rouge) des 123 canaux IASI assimilés en opérationnel dans le 4D-Var, ainsi que les écarts-types d'erreur d'observation prescrits pour les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés dans cette étude. La ligne bleue correspond aux valeurs des écarts-types d'erreur d'observation diagnostiquées par la méthode de Desroziers dans le 4D-Var pour ces 138 canaux. On observe que les 99 canaux IASI sensibles au CO_2 ont des valeurs comprises entre 0,20 et 0,40 K, les 4 canaux sensibles à la surface aux alentours de 0,17 K, les 15 canaux sensibles à O_3 entre 0,15 et 1,85 K et les 20 canaux sensibles à la vapeur d'eau entre 0,35 et 0,75 K. La Figure 9.21.b présente la matrice de corrélation des erreurs d'observation diagnostiquées des 138 canaux IASI. On remarque que les canaux sensibles au CO_2 sont corrélés entre eux avec des valeurs plus ou moins importante selon leur niveaux atmosphériques de sensibilité. Ainsi les canaux sensibles dans la troposphère ont des valeurs plus élevées aux alentours de 0.2. Les 4 canaux sensibles à la surface sont également corrélés entre eux avec des valeurs de l'ordre de 0,3. On note également une anti-corrélation d'environ - 0,2 entre les canaux sensibles à la surface et les canaux troposphériques sensibles au CO_2. Puis, on retrouve les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone avec des valeurs de corrélation élevées, comprises entre 0,9 et 1,0. Enfin, on remarque que les canaux sensibles à la vapeur d'eau possèdent une alternance de valeur positives et négatives de corrélation.

9.4.1 Impacts sur les analyses en température, humidité et vent

Dans cette deuxième étape, nous avons évalué l'impact de l'assimilation de la sélection des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone en complément des observations assimilées de manière opérationnelle. Dans ces expériences, nous utilisons les ébauches d'ozone issues de MOCAGE dans le même cadre que l'étape 1. De la même manière que précédemment, nous avons évalué l'impact de ces 15 canaux dans le système d'assimilation de données 4D-Var sur les analyses en température, humidité et vent. Nous avons calculé les moyennes des différences d'analyses entre les expériences EXP et EXP15 sur une période allant du 12 juillet au 31 août 2016. Ces résultats sont illustrés sur la Figure 9.22 pour la température (a), l'humidité relative (b) et la composante zonale du vent (c).

On remarque très peu de différences d'analyse en température (Figure 9.22.a), ainsi qu'une très légère différence d'analyse de la composante zonale du vent d'environ 0,3 $m.s^{-1}$ dans la haute stratosphère au niveau des Tropiques (Figure 9.22.c). Les différences d'analyse les plus significatives sont observées pour l'humidité (Figure 9.22.b), avec des différences situées au niveau des Tropiques entre - 30 ° et 30 ° N dans la basse troposphère et dans l'UTLS avec des valeurs oscillants entre - 1,4 % et 0,9 %. Ainsi, l'assimilation de ces 15 canaux supplémentaires sensibles à l'ozone a un impact sur les analyses, principalement sur les analyses d'humidité relative. Ces résultats sont cohérents avec les précédentes études réalisées dans le cadre de cette thèse et montrant des impacts plus importants sur les analyses en humidité.

9.4.2 Impacts sur la qualité des prévisions

Nous avons directement évalué l'impact de l'ajout de ces canaux en calculant et traçant les différences des erreurs quadratiques moyennes normalisées des prévisions de température, d'humidité relative et de vent par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision dans les trois grands domaines : Nord, Tropiques et Sud pour la période estivale du 12 juillet au 31 août 2016 (Figure 9.23). Comme pour l'étape 1, les isolignes bleues indiquent une amélioration des prévisions et les zones jaunes renseignent sur le caractère significatif de ces améliorations. On remarque globalement des améliorations des prévisions de température, humidité et vent sur plusieurs domaines, niveaux atmosphériques et échéances de prévision. On observe que les améliorations les plus importantes sont obtenues pour l'humidité au niveau des Tropiques en basse troposphère et au niveau de l'UTLS avec des valeurs comprises entre 0,5 et 1,0 %, ce qui est cohérent avec les zones des différences d'analyses évaluées précédemment. On note également des améliorations des prévisions de température à ces mêmes niveaux atmosphériques également aux Tropiques ainsi que pour les prévisions du vent avec des valeurs similaires à l'humidité. On observe une amélioration des prévisions en température, humidité et vent au niveau de l'UTLS dans l'hémisphère sud d'environ 0,5 %. Enfin, on note de légères améliorations d'environ 0,5 % des prévisions de température, humidité et vent dans l'hémisphère nord.

Ces résultats nous démontrent que l'assimilation de 15 canaux supplémentaires sensibles à l'ozone en complément de l'utilisation de champs d'ozone réalistes permet d'améliorer d'avantage par rapport à l'étape 1, les prévisions météorologiques en température, humidité relative et vent sur l'ensemble des grands domaines, à des niveaux atmosphériques d'intérêt sur plusieurs échéances de prévision. Ainsi, nous avons montré que l'étape 1 a un impact positif sur l'assimilation d'observations déjà utilisées et le potentiel que d'autres peuvent apporter au système permettant d'améliorer de manière significative les prévisions météorologiques. En complément de cette dernière, l'étape 2 permet d'extraire de l'information supplémentaire en température, humidité et vent pour les analyses qui se traduit par des améliorations supplémentaires des prévisions météorologiques.

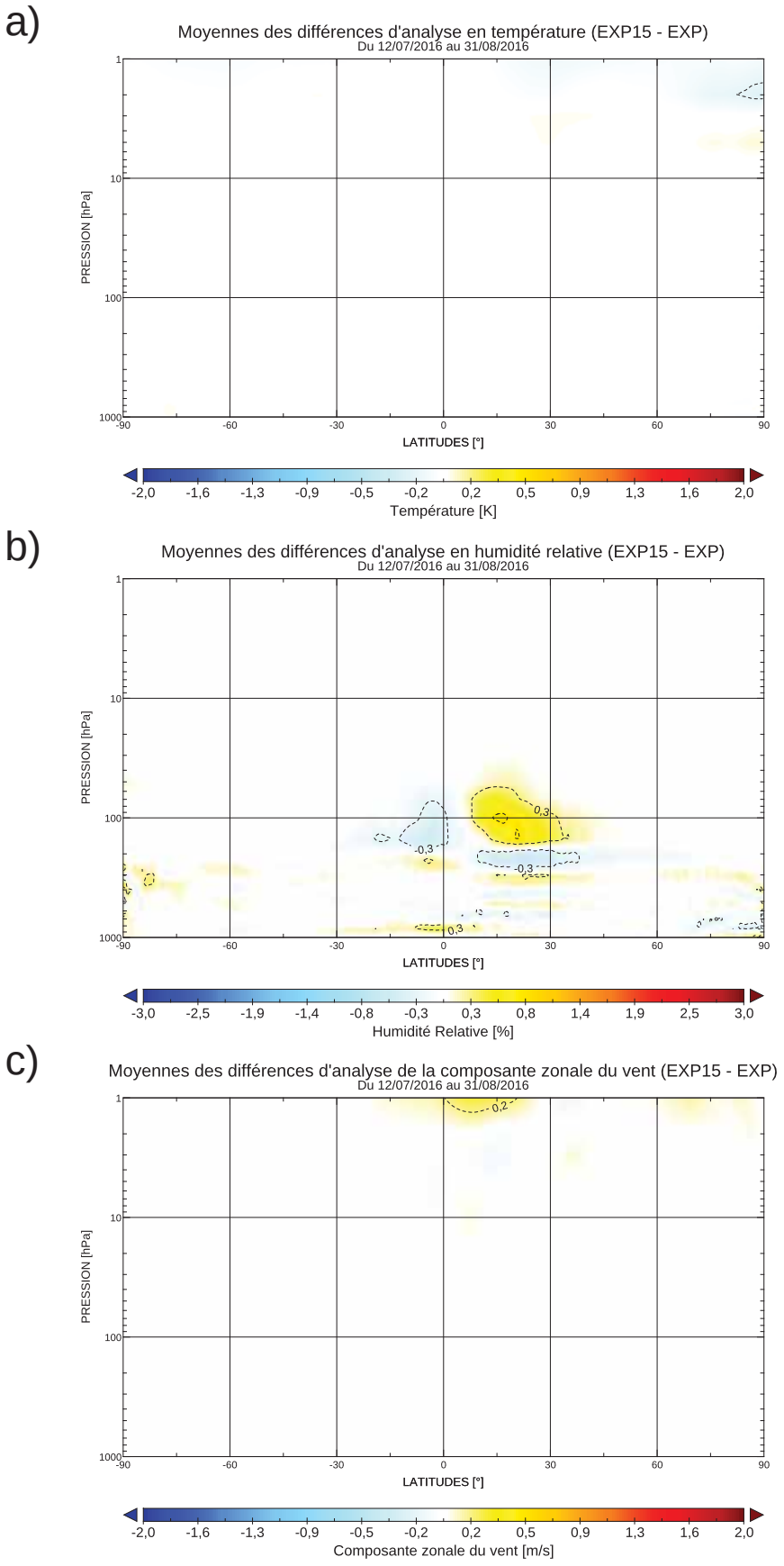


FIGURE 9.22: Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15 et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 31 août 2016.

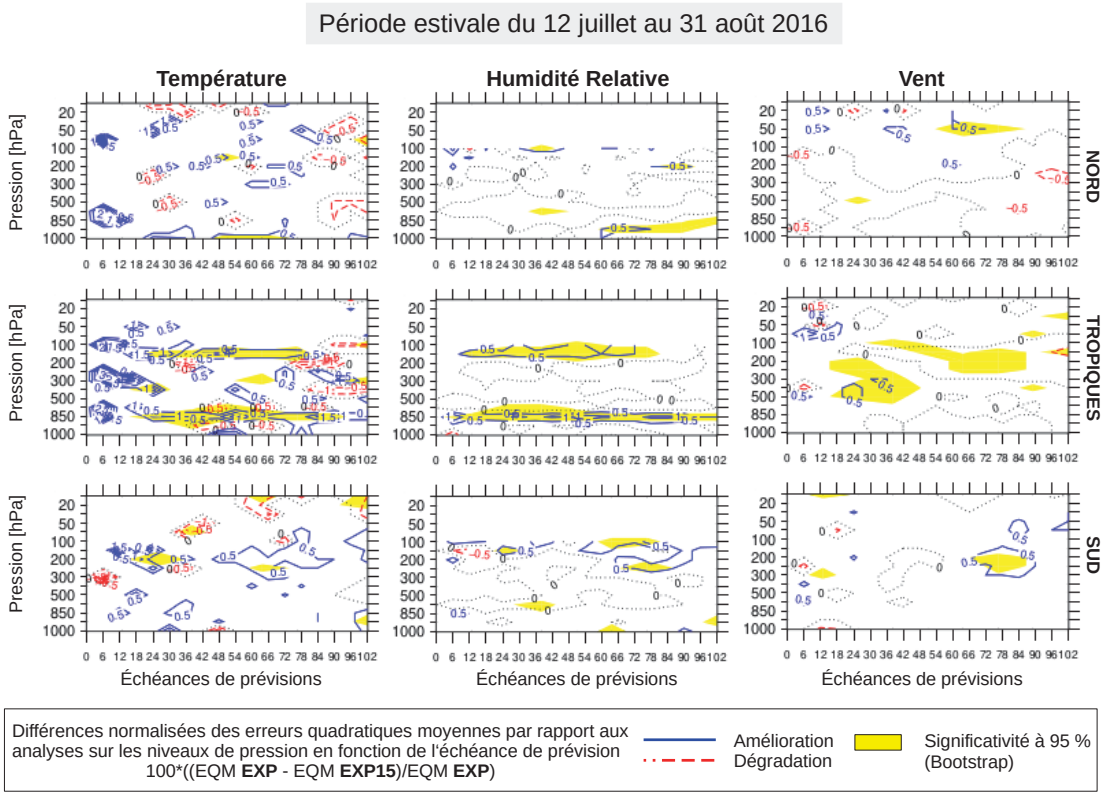


FIGURE 9.23: Différences des erreurs quadratiques moyennes normalisées des prévisions de température (à gauche), d'humidité relative (au centre) et de vent (à droite) par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision dans les trois grands domaines : Nord, Tropiques et Sud pour la période estivale du 12 juillet au 31 août 2016.

9.5 Étape 3 : Ajout de l'ozone à la variable de contrôle ARPEGE

Même si les champs d'ozone issus de MOCAGE sont bien plus réalistes que le profil constant utilisé actuellement en opérationnel, il est encore possible de les améliorer. L'ajout de l'ozone à la variable de contrôle du 4D-Var permettrait de minimiser sur ce paramètre lors du processus d'assimilation pouvant ainsi produire un champ d'ozone de meilleure qualité que l'ébauche. Cependant, nous sommes conscients que les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone assimilés dans le cadre de cette étude ne suffisent par pour améliorer significativement l'analyse d'ozone. En effet, ces canaux sont sensibles à des niveaux atmosphériques bien particuliers, or pour modifier de manière optimale les champs d'ozone analysés, d'autres observations devraient être assimilés en complément. L'assimilation d'autres observations d'ozone demande des études complexes que nous n'avons pas le temps de réaliser dans le cadre de ce travail de thèse. Ainsi, l'analyse de l'ozone dans ces dernières expériences vise davantage à mieux répartir l'information et à donner un degré de liberté supplémentaire aux autres variables. En effet, analyser l'ozone permet de prendre en compte les erreurs éventuelles de celui-ci sans qu'elles se répercutent sur d'autres variables comme la température ou l'humidité par exemple.

Ces dernières expériences ont demandé un travail préparatoire très important et les configurations permettant de les faire tourner sont moins optimisées que pour les expériences précédentes. C'est pour cela que les résultats présentés ici sont sur une période d'une vingtaine de jours. L'expérience de référence est représentée par celle de l'étape 2 (EXP15), tandis que l'expérience réalisée dans cette dernière étape (EXP15O3), analyse en plus des autres variables, l'ozone lors du processus 4D-Var. Dans cette étude on utilise également une matrice de covariance d'erreur d'observation diagnostiquée. Enfin, une part importante du travail a été d'ajouter les erreurs d'ébauche en ozone indispensables au processus d'assimilation pour minimiser sur l'ozone. Cette étape est décrite ci-après.

9.5.1 Initialisation des erreurs d'ébauche en ozone dans ARPEGE

Comme l'ozone est ajoutée dans la variable de contrôle du 4D-Var ARPEGE, cela implique d'ajouter également les erreurs d'ébauche en ozone associées à ces champs dans le système. Le travail effectué dans le Chapitre 8, nous a permis d'estimer précisément les erreurs d'ébauche en ozone à partir de la méthode statistique de la différence de prévisions décalées de 12 h et 36 h (méthode NMC) sur l'ensemble du globe et sur une période d'un an qui couvre les mois pour lesquels les expériences sont réalisées dans ce Chapitre.

Sur la Figure 9.24.a nous avons tracé la coupe latitudinale de la moyenne des écarts-types d'erreur d'ébauche d'ozone. Les erreurs d'ébauche en ozone sont localisées de part et d'autre de la zone du maximum de production d'ozone identifié aux Tropiques en moyenne stratosphère vers 10 hPa. On remarque un premier maximum d'erreur d'environ 0,20 ppmv situé entre - 30° et 30° N entre 100 et 10 hPa et un deuxième de chaque côté de l'équateur s'étendant jusqu'aux moyennes latitudes entre 10 et 0.5 hPa dont les valeurs oscillent entre 0,10 et 0,18 ppmv. Afin d'évaluer nos erreurs d'ébauche en ozone ainsi estimées, nous avons calculé le profil vertical moyen des écarts-types d'erreur d'ébauche d'ozone en fonction de la pression (Figure 9.24.b). Nous avons ainsi remarqué que l'allure du profil et les valeurs des écarts-types d'erreur d'ozone (avec deux valeurs maximales à 0,11 ppmv) sont cohérentes avec celles issues d'autres études. Par exemple, les travaux de [Dragani, 2016] et [Dragani and McNally, 2013] utilisent des écarts-types d'erreur d'ébauche en ozone dont les valeurs maximales sont comprises entre 0,08 et 0,10 ppmv. Puis, l'étude de [Inness et al., 2015] pour l'assimilation de produits satellitaires d'ozone de niveau 2 dans le modèle C-IFS du CEPMMT utilise des écarts-types d'erreur d'ébauche en ozone dont les valeurs maximales sont comprises entre 1,4 et 1,6 kg.kg^1 soit respectivement environ 0.084 et 0,097 ppmv. Enfin, nous avons utilisé dans cette étude une matrice de covariance d'erreur d'ébauche univariée comme dans les travaux précédents.

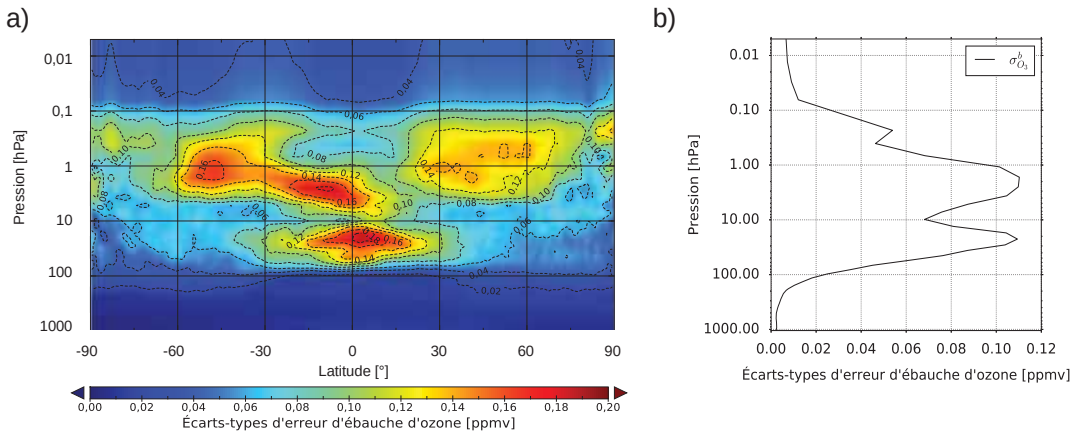


FIGURE 9.24: Coupe latitudinale de la moyenne des écarts-types d'erreur d'ébauche d'ozone (a) et profil vertical moyen des écarts-types d'erreur d'ébauche d'ozone (b) calculées à partir de la méthode NMC et extrapolées sur les 105 niveaux d'ARPEGE.

9.5.2 Analyse de l'ozone dans ARPEGE

Dans un premier temps nous avons évalué la cohérence des analyses d'ozone produites. En effet, l'ajout de l'ozone à la variable de contrôle (Section 4.1.1.1) nous permet de calculer l'analyse selon le cycle représenté par la Figure 4.5. Cependant, à la différence de ce qui est fait pour les autres variables, nous ne réalisons pas de prévision d'ozone dans cette étude. Ainsi, l'ébauche d'ozone provient du modèle MOCAGE. La prévision d'un nouveau paramètre dans le modèle ARPEGE demande un travail important en terme de paramétrisation physico-chimique, de l'ajout d'un schéma linéaire pour l'ozone et de réglages particulièrement complexes qui représentent des recherches à long terme. C'est pour cela que dans un premier temps nous avons choisi de seulement analyser l'ozone.

Sur la Figure 9.25 nous avons représenté les coupes latitudinales des moyennes des ébauches en ozone issues de MOCAGE (a), des moyennes des analyses en ozone issues du processus d'assimilation du 4D-Var dans ARPEGE (b) et des moyennes des incréments d'analyses en ozone (c) sur une période allant du 12 au 30 juillet 2016. À première vue on remarque pas de différences entre les moyennes des ébauches et des analyses en ozone. En effet, lorsqu'on l'on calcule les moyennes des incréments d'analyse en ozone, on observe de très légères différences entre l'ébauche et l'analyse de l'ordre de 10^{-3} ppmv. On note également que les incréments se situent de part et d'autre du maximum de concentration en ozone vers 10 hPa. De plus, les incréments en forme de dipôle situés aux Tropiques et aux hautes latitudes peuvent indiquer un déplacement de la concentration en ozone dans ces zones et à ces niveaux atmosphériques dues au processus d'assimilation de données et dans notre cas, principalement aux observations issues des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone. Comme nous l'avons évoqué précédemment, ces faibles différences entre l'ébauche et l'analyse s'expliquent également par le nombre limité d'observations d'ozone assimilées dans notre expérience.

9.5.3 Impacts sur les analyses en température, humidité et vent

Analyser l'ozone en même temps que les autres variables thermodynamiques lors du processus d'assimilation de données a pour objectif de mieux répartir l'information et de donner un degré de liberté supplémentaire aux autres variables. L'analyse de l'ozone et la prise en compte de ses erreurs respectives permettent d'extraire l'information contenue dans les observations de manière plus précise. Comme précédemment, nous avons évalué l'impact d'analyser l'ozone sur les autres analyses.

Nous avons calculé les moyennes des différences d'analyses entre les expériences EXP15 et EXP15O3 sur une période allant du 12 au 28 juillet 2016. Ces résultats sont illustrés sur la Figure 9.26 pour la température (a), l'humidité relative (b) et la composante zonale du vent (c). On observe qu'analyser l'ozone lors du processus d'assimilation de données modifie les analyses en température dans la stratosphère au-dessus de 10 hPa avec des valeurs oscillant entre -1,1 et 0,2 K. On note un impact important sur les analyses en humidité relative situé dans la haute troposphère aux Tropiques et aux moyennes latitudes avec des valeurs pouvant atteindre -2,8 et 4,1 % de différences. On remarque également une différence d'analyse en humidité relative située au niveau de l'Antarctique dans la basse stratosphère entre 100 et 10 hPa. Des impacts importants sur les analyses de la composante zonale du vent sont observés au niveau des Tropiques en haute stratosphère au-dessus de 10 hPa avec des valeurs comprises entre -1,7 et 1,4 $m.s^{-1}$. Ces modifications observées dans les analyses en température et vent sont en accord avec les travaux de [Allen et al., 2018] qui ont extrait de l'information en température et vent par l'assimilation de l'ozone dans un cadre 4D-Var hybride. Les zones de différences d'analyse obtenues dans leur étude sont similaires à celles observées dans notre cas, au-dessus de 10 hPa et principalement localisées aux Tropiques pour le vent.

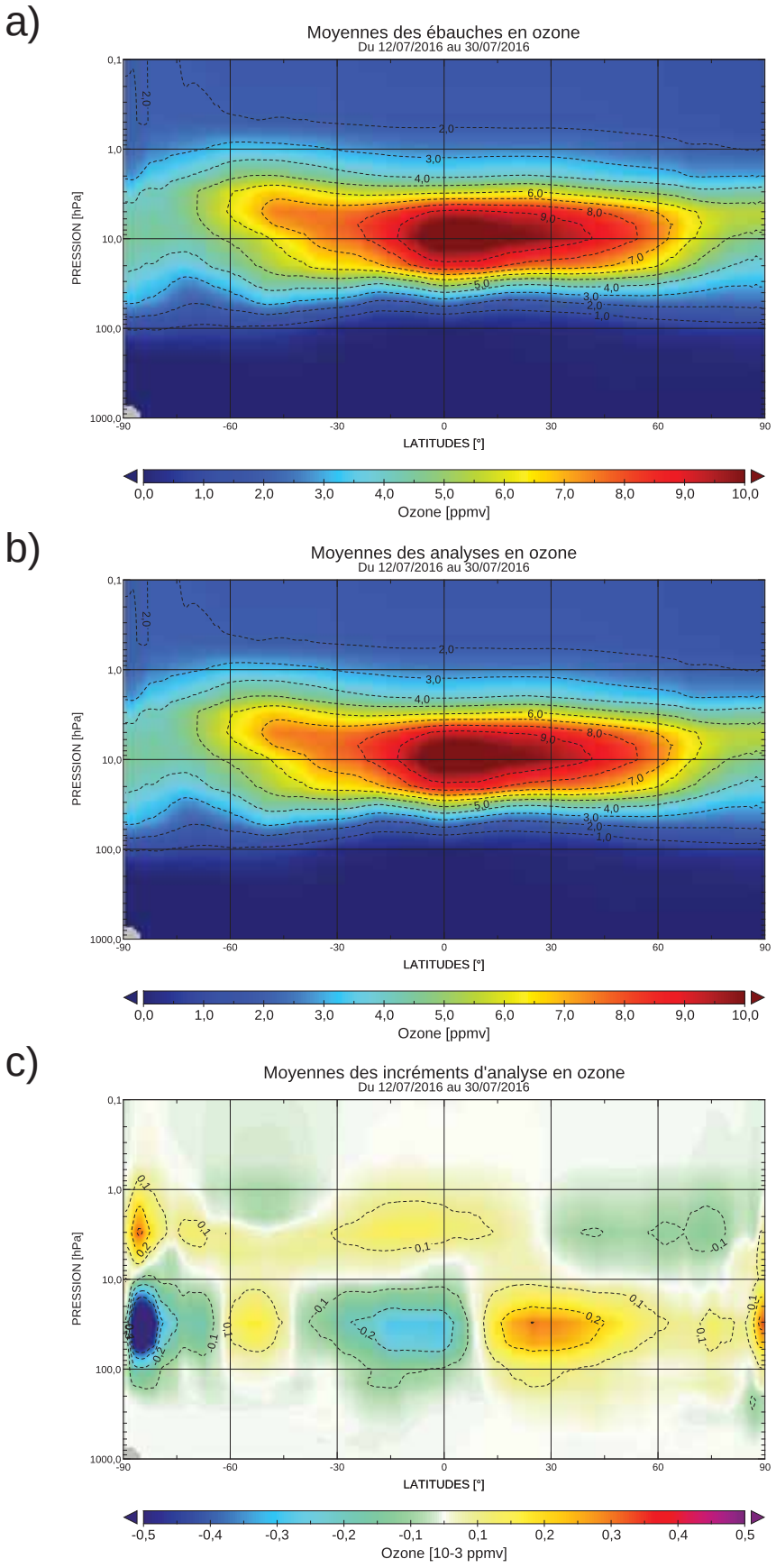


FIGURE 9.25: Moyennes des ébauches (a), analyses (b) et incréments d'analyse (c) en ozone de l'expérience EXP15O3 de l'étape 3 du 12 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression.

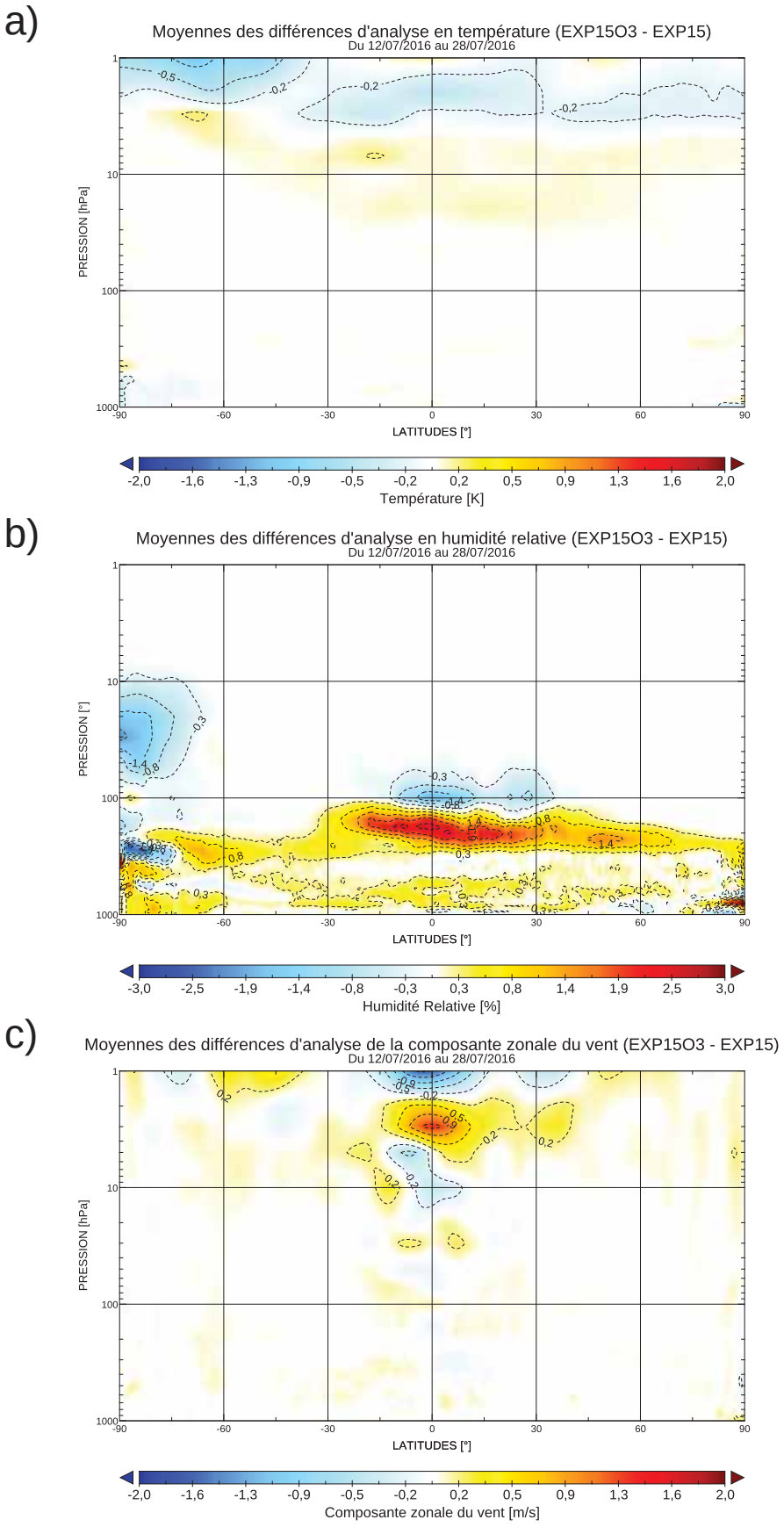


FIGURE 9.26: Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15O3 et EXP15 en fonction de la pression pour la période allant du 12 au 31 juillet 2016.

9.5.4 Impacts sur la qualité des prévisions

Finalement, nous avons évalué l'impact de ces modifications dans les analyses sur les prévisions météorologiques. N'ayant pas l'intégralité de la période (2 mois d'expérience), nous avons calculé les biais des différences de prévision entre les expériences EXP15 et EXP15O3 en température, humidité relative et vent par rapport à leur propre analyse sur les niveaux de pression, en fonction des échéances de prévision de 0 à 96 h sur les trois grands domaines sur une période allant du 12 juillet au 3 août 2016. On remarque sur la Figure 9.27 une réduction des biais des prévisions en température principalement dans la stratosphère avec des valeurs comprises entre 0.025 et 0.1 K, en humidité relative dans la haute troposphère et en vent dans la stratosphère aux Tropiques entre 48 et 96 h d'échéance avec des valeurs au alentour de 0.1 m.s^{-1}. Les dégradations au niveau des biais des prévisions peuvent être dues au nombre insuffisant d'observation d'ozone utilisées pour contraindre le champ d'ozone pendant le processus d'assimilation de données. En effet, à chaque cycle, une nouvelle ébauche issue de MOCAGE est utilisée, de ce fait le possible bénéfice apporté pour l'amélioration de l'analyse d'ozone n'est pas propagé dans le temps.

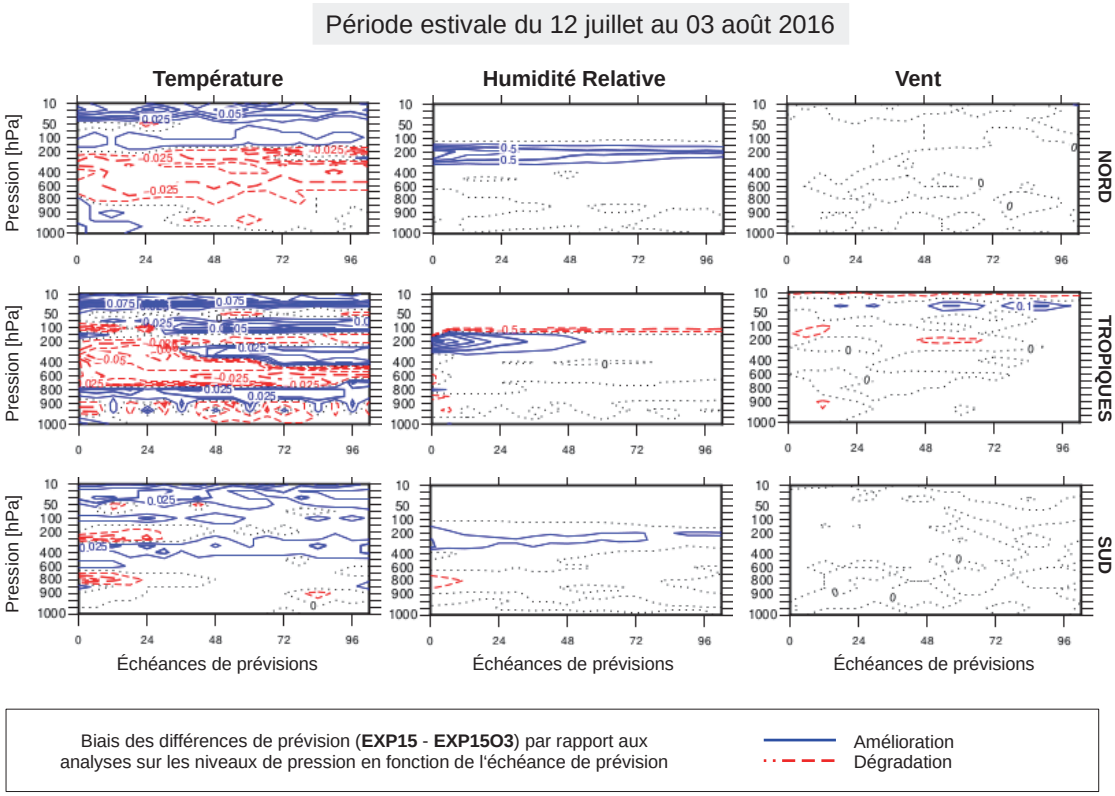


FIGURE 9.27: Biais des différences de prévision de température (à gauche), d'humidité relative (au centre) et de vent (à droite) par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision dans les trois grands domaines : Nord, Tropiques et Sud pour la période estivale du 12 juillet au 03 août 2016.

Globalement, ces expériences permettent de démontrer le potentiel important que représente l'ajout de l'ozone à la variable de contrôle du 4D-Var ARPEGE dans l'amélioration des prévisions météorologiques en complément des étapes 1 et 2. Nous avons montré qu'une assimilation plus précise de l'ozone permet d'extraire de l'information supplémentaires des observations modifiant ainsi les analyses de température, d'humidité et de vent avec des impacts positifs sur les biais des prévisions.

9.6 Conclusion et discussion

Dans cette étude, un couplage innovant a été réalisé entre les champs 3D d'ozone issus du MCT MOCAGE et le modèle de PNT ARPEGE par le processus d'assimilation 4D-Var. Une première étape a consisté à évaluer l'utilisation seule du champ d'ozone dans $\mathcal{H}$. Nous avons ainsi comparé deux expériences sur deux périodes estivale et hivernale de deux mois chacune, l'une avec et l'autre sans les champs d'ozone réalistes. L'évaluation des innovations des canaux IASI confirme les résultats obtenus dans les études précédentes. En effet, on retrouve la même allure des biais inversés entre les expériences REF et EXP avec respectivement pour les canaux d'ozone des valeurs aux alentours de 7 K et 6,5 K. La différence la plus notable entre les deux expériences se situe au niveau des écarts-types avec des valeurs bien plus élevées pour REF (environ 6 K) que pour EXP (2,5 K). Ces résultats sont similaires qu'on soit de jour ou de nuit. Ainsi, la prise en compte de la variabilité du champ d'ozone nous permet de réduire les innovations des canaux IASI sensibles à l'ozone pour une meilleure utilisation par la suite.

L'utilisation du champ d'ozone n'a pas qu'un impact sur les innovations des canaux IASI sensibles à l'ozone, puisque l'on observe des différences d'analyse en température entre 600 et 200 hPa au-dessus de l'Arctique en juillet-août et de l'Antarctique en novembre-décembre et des différences de température plus importantes qui se situe entre 10 et 1 hPa avec des valeurs à plus de 1 K. Des différences d'analyse en humidité sont également constatées principalement aux Tropiques entre 30 ° S et 30 ° N, avec des différences pouvant atteindre plus de 2 %. Enfin on note également des différences d'analyse de la composante zonale du vent dans la haute stratosphère avec des valeurs pouvant atteindre -1,7 $m.s^{-1}$. Ces différences ne proviennent pas des canaux IASI sensibles à l'ozone puisqu'ils ne sont pas assimilés dans ces expériences.

Effectivement, l'utilisation des champs d'ozone réalistes issus de MOCAGE dans l'expérience EXP permet un cercle vertueux d'amélioration. Dans un premier temps, la prise en compte de la variabilité de l'ozone permet de mieux simuler les observations satellitaires infrarouges sensibles à l'ozone mais également sensibles au CO_2 avec un impact positif sur les analyses thermodynamiques. Nous avons ensuite montré que ces modifications dans les analyses permettent de mieux simuler les observations des radiosondages qui modifient positivement à leur tour les analyses thermodynamiques. Nous avons remarqué également une amélioration des simulations des sondeurs micro-ondes AMSU-A et AMSU-B. Ainsi, l'utilisation des champs réalistes d'ozone permet d'améliorer les simulations à la fois d'observations satellitaires et conventionnelles influençant positivement les analyses en température, humidité et vent. Ces résultats démontrent la nécessité d'augmenter le réalisme de la chimie dans le modèle ARPEGE puisque seule l'utilisation de l'ozone réaliste permet à la fois de mieux assimiler les observations et d'améliorer les analyses thermodynamiques.

Puis, nous avons évalué l'impact de l'utilisation des champs 3D d'ozone issus de MOCAGE dans $\mathcal{H}$ en termes de scores de prévisions représentés par les différences relatives des erreurs quadratiques moyennes des prévisions de température, d'humidité relative et de vent par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision (de 00 à 102 h toutes les 06 h) dans les trois grands domaines (Nord, Tropiques et Sud) sur les deux périodes estivale et hivernale. Les résultats montrent que l'utilisation d'un ozone réaliste permet d'améliorer les prévisions de température d'environ 4 % et de 3 % en humidité relative et vent sur l'ensemble de l'atmosphère et des échéances de prévision. Ces résultats sont encourageants et inattendus, d'autant plus que l'on attend de nos jours des améliorations sur les prévisions de l'ordre de 0,5 % comme nous l'avons expliqué au tout début de ce travail dans l'introduction.

Dans l'étape 2, l'ajout de notre sélection des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone conjointement à l'utilisation des champs 3D d'ozone issus de MOCAGE dans l'expérience suivante (EXP15) modifie légèrement les analyses avec un impact plus important sur les analyse en humidité relative particulièrement au niveau des Tropiques dans la basse troposphère et à l'UTLS. L'assimilation de ces 15 canaux nous permet d'améliorer davantage les prévisions météorologiques sur la période estivale du 12 juillet au 31 août 2016 par rapport à l'expérience EXP. Ces gains sur les prévisions sont principalement obtenus au niveau des Tropiques en basse troposphère et à l'UTLS pour la température et l'humidité relative. Ces améliorations sont plus modestes que pour l'étape 1, de l'ordre de 0,5 à 1,0 % mais sont également significatives.

Finalement, une dernière modélisation est en cours de calcul pour l'étape 3 dont l'expérience EXP15O3 a consisté à ajouter l'ozone à la variable de contrôle du 4D-Var ARPEGE en utilisant les erreurs d'ébauche en ozone estimées à l'aide de la méthode NMC explicitée dans le Chapitre précédent. Nous avons évalué l'impact de EXP15O3 sur une vingtaine de jours. Nous avons remarqué que les moyennes des incréments d'analyse en ozone ont des valeurs relativement faibles de l'ordre de 10^{-3} ppmv. Cependant, on observe des impacts sur les analyses avec des modifications des analyses en température dans la haute stratosphère et principalement en humidité relative au niveau de l'UTLS aux Tropiques avec des valeurs comprises entre -2,8 % et 4,1 % et de la composante zonale du vent dans la moyenne et haute stratosphère aux Tropiques avec des valeurs comprises entre -1,7 % et 1,4 %. Ces expériences montrent que l'assimilation de l'ozone peut potentiellement modifier les analyses de température, humidité et vent. Ceci démontre qu'il existe des informations dynamiques dans la distribution de l'ozone qui peuvent potentiellement être utilisées pour améliorer les analyses thermodynamiques dans l'atmosphère et particulièrement aux Tropiques qui demeure une zone difficile à modéliser encore actuellement. L'impact de l'ajout de l'ozone à la variable de contrôle a finalement été évalué en termes de scores de prévision en calculant les biais des différences entre les expériences EXP15 et EXP15O3. Globalement, on remarque une amélioration des biais des prévisions de température dans la stratosphère et d'humidité au niveau de l'UTLS et un impact neutre sur le vent. Les dégradations des biais des prévisions en température observées ici sont probablement dues à la non propagations des améliorations apportées au champs d'ozone analysé et au nombre limité d'observations d'ozone assimilées dans cette expérience. L'expérience de l'étape 3 présente des résultats encourageants pour l'avenir de l'assimilation couplée Météo-Chimie et les améliorations des prévisions météorologiques qui doit être poursuivie.

Nous espérons pouvoir étendre les expériences sur les périodes d'étude dans un avenir proche. Nous pourrons ainsi évaluer l'impact de l'ozone dans la variable de contrôle du 4D-Var ARPEGE sur les analyses, sur l'assimilation des observations (conventionnelles et satellitaires) et sur les prévisions météorologiques. Ces expériences nous permettront également d'obtenir pour les deux périodes des champs d'ozone 3D analysés que nous pourrons comparer aux prévisions opérationnelles MOCAGE mais également à des produits de niveau 2 qui proposent des champs 3D d'ozone, restitués à partir de l'instrument MLS par exemple. Les résultats obtenus dans l'étape 1 ont fait l'objet d'un article soumis au journal international « Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society » sous le titre « Use of variable ozone in radiative transfer model for the global Météo-France 4D-Var system ». Ce dernier est actuellement en révision (Coopmann et al., 2020).

Conclusions, discussions, perspectives et apports personnels

Conclusions et discussions

« *Tout ce qui a un début a une fin, mais chaque fin est le début d'un nouveau départ.* »

Serge Zeller

• Rappel du contexte et des objectifs

Les données issues des instruments satellitaires représentent une quantité immense d'information en particulier celles issues des sondeurs infrarouges hyperspectraux comme IASI. L'assimilation de ces observations dans les modèles de Prévision Numérique du Temps (PNT) représente un enjeu majeur dans l'amélioration croissante des prévisions météorologiques. Cependant, la transformation des luminances spectrales issues de ces observations en données géophysiques utilisables dans les modèles météorologiques requiert l'utilisation de modèles de transfert radiatif (MTR). Ces MTR utilisent l'équation de transfert radiatif et un opérateur d'observation complexe qui permet de passer de l'espace du modèle à celui des observations. Néanmoins, l'inversion de l'équation du transfert radiatif nécessite la connaissance *a priori* de l'état de l'atmosphère le plus probable en matière de thermodynamique mais également de la composition chimique. Or, à Météo-France, nous utilisons comme ébauche chimique des profils invariants dans le temps et l'espace dans le MTR RTTOV et dans le modèle global ARPEGE. Cette approximation a un impact sur les simulations des observations et leurs assimilations, et donc sur la qualité des analyses et des prévisions. Une connaissance plus réaliste de la composition chimique de l'atmosphère peut être réalisée par des modèles de chimie-transport (MCT) comme MOCAGE à Météo-France.

Dans ce contexte, l'objectif de ce travail de thèse consiste à mieux assimiler les observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles météorologique et chimique. Dans un premier temps nous avons évalué la sensibilité des observations infrarouges à l'ébauche chimique sur les simulations en utilisant des données d'ozone, de CH_4 et de CO_2 issues de la campagne de mesure APOGEE et d'une climatologie de CO_2 élaborée dans le cadre d'un stage de Master 1 que j'ai co-encadré. Ces études ont montré l'intérêt d'approfondir les recherches en particulier sur l'ozone. Ainsi nous avons préparé l'assimilation d'observations infrarouges sensibles à l'ozone pour la PNT en particulier pour les 15 canaux d'ozone IASI monitorés en opérationnel à Météo-France. Actuellement, les progrès et les recherches dans le domaine de la PNT sont rapides, en particulier pour l'utilisation des matrices de covariance d'erreur d'observation $\mathbf{R}$ diagnostiquées et prenant en compte les corrélations inter-canaux essentiellement pour les canaux infrarouges des hyperspectraux tel que IASI. Ainsi, dans un deuxième temps nous avons réalisé une nouvelle sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone à partir du spectre complet de IASI en utilisant une matrice $\mathbf{R}$ complète. L'ensemble des premières études ont été menées dans un cadre simplifié d'assimilation uni-dimensionnelle (1D-Var). Finalement, l'objectif final est de transférer l'ensemble des méthodes mises en évidence lors de ces derniers travaux au système global du 4D-Var ARPEGE utilisé à Météo-France. Nous avons ainsi, utilisé les champs 3D d'ozone issus du MCT MOCAGE directement dans ARPEGE, assimilé notre sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone et ajouté l'ozone à la variable de contrôle du 4D-Var ARPEGE.

• La campagne de mesure APOGEE

Dans cette thèse, la campagne de mesure APOGEE a permis d'utiliser les profils de dioxyde de carbone, de méthane et d'ozone mesurés *in situ* pour évaluer la sensibilité des observations satellitaires infrarouges à la chimie atmosphérique. Les profils *in situ* ont été mesurés pour l'ozone à l'aide d'une cellule électrochimique et les profils de CO_2 et de CH_4 en utilisant l'instrument AMULSE. Ces instruments ont été placés sous des ballons météorologiques pour réaliser des profils verticaux jusqu'à 30 km d'altitude. Dans cette étude nous avons travaillé sur la sensibilité des simulations des observations infrarouges issues de IASI et CrIS.

Les expériences de simulations nous ont montré que les observations infrarouges sont extrêmement sensibles aux changements des concentrations chimiques. Les simulations des observations IASI et CrIS ont mis en évidence de grandes différences selon que l'on utilise en entrée de RTTOV les profils mesurés *in situ* ou les profils de référence sur les canaux sensibles aux gaz considérés dans cette étude. Cependant, malgré ces différences, nous avons montré peu d'impact sur les différences pour les deux instruments entre les observations réelles et les observations simulées sauf celles sensibles à l'ozone. En effet, ce dernier réagit différemment dans l'atmosphère et est bien plus variable que le CO_2 et CH_4. Les données mesurées par l'instrument AMULSE et les mesures *in situ* de profils verticaux chimiques en général sont précieuses pour valider la qualité de nos simulations.

Une autre partie de l'étude a consisté à utiliser ces profils mesurés *in situ* comme données de comparaison avec les profils chimiques issus des MCT. Dans ce travail nous nous sommes concentrés sur des profils d'ozone et de méthane issus des MCT MOCAGE et CAMS. Cette comparaison avec les profils mesurés nous a montré que les MCT représentent assez bien l'ozone atmosphérique, surtout dans la stratosphère et à l'UTLS pour la version recherche de MOCAGE et dans la troposphère pour CAMS.

Nous avons également montré que le méthane est très bien simulé par CAMS dans la troposphère mais sous-estimé de 0,5 ppmv par MOCAGE. La différence est principalement due au fait que CAMS assimile des produits de niveau 2 comparativement au modèle MOCAGE utilisé dans cette étude qui n'assimile aucune observation. Nous démontrons une nouvelle fois l'importance que représentent ces profils chimiques mesurés *in situ* pour la comparaison et la vérification des prévisions chimiques des MCT.

L'ensemble de ces résultats a fait l'objet d'un article scientifique écrit en collaboration avec le GSMA et soumis au journal international Atmospheric Measurement Techniques « The evolution of AMULSE (Atmospheric Measurements by Ultra-Light Spectrometer) and its interest in atmospheric applications.Results of the Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs (APOGEE) weather balloon release campaign for satellite retrieval validation ».

• La climatologie évolutive de CO_2

À Météo-France, plus de 75 % des données utilisées en opérationnel dans le modèle global de PNT ARPEGE proviennent des observations satellitaires infrarouges. Nous avons montré que la sensibilité de ces observations à la composition chimique de l'atmosphère les rend particulièrement intéressantes pour les modèles de PNT. En effet, à Météo-France, 99 canaux IASI sensibles au dioxyde de carbone sont utilisés pour apporter de l'information selon la verticale sur la température atmosphérique. Or, pour extraire un maximum d'information de ces observations, il est important de les simuler à l'aide de MTR. Nous avons démontré précédemment que pour simuler précisément les observations infrarouges, le MTR utilise une connaissance *a priori* de l'état de l'atmosphère du point de vue thermodynamique et chimique. De la précision de ces informations dépend la qualité des simulations. Actuellement, les profils chimiques utilisés en opérationnel à Météo-France proviennent de profils de référence disponibles dans RTTOV et invariants dans le temps et l'espace.

L'objectif du travail a donc été d'élaborer une climatologie évolutive de CO_2 à partir de réanalyses MACC-III afin de mieux simuler les observations satellitaires infrarouges issues de l'instrument IASI pour améliorer leur utilisation dans la PNT.

La climatologie ainsi réalisée est utilisable pour tout point du globe et sur n'importe quelle période, même postérieure à la réanalyse en faisant l'hypothèse que les taux annuels d'évolution ne changent pas. En effet, l'évaluation de la climatologie montre qu'elle est très proche de la réanalyse. Ceci indique une synthèse de l'information cohérente et réaliste. Pour évaluer le caractère évolutif de la climatologie, cette dernière a été comparée à des profils *in situ* issus de l'instrument AirCore sur différents points du globe et sur 4 années postérieures aux données de réanalyses. Les résultats sont très encourageants et montrent de très bons accords entre les profils extraits de la climatologie et les profils de CO_2 mesurés *in situ*. Ceci illustre la capacité de la climatologie à pouvoir être utilisée quelle que soit l'année considérée.

Finalement, les observations IASI ont été simulées en utilisant les différentes ébauches de CO_2. Globalement une diminution du biais des canaux sensibles au dioxyde de carbone a été observée en utilisant les profils issus de la climatologie. Ces améliorations sont plus significatives dans la stratosphère et dans l'UTLS. De plus, la climatologie permet de mieux simuler les observations IASI dans différentes zones du globe excepté dans la basse troposphère dans les Tropiques. En conclusion, notre climatologie est très encourageante pour l'amélioration de l'assimilation d'observations satellitaires infrarouges. L'utilisation de profils chimiques de dioxyde de carbone mesurés *in situ* par AirCore pour valider notre climatologie confirme une nouvelle fois l'enjeu que représentent ces profils pour mener à bien différentes études scientifiques.

Il serait intéressant dans une prochaine étude d'évaluer cette climatologie dans ARPEGE. La complexité technique d'implémenter la climatologie dans le code d'ARPEGE et le temps limité du stage de Master 1 ne nous a pas permis d'effectuer ce travail.

- **Préparation à l'assimilation des canaux O_3 IASI**

Dans cette étude, l'objectif a été de se préparer à l'assimilation d'observations satellitaires infrarouges supplémentaires par le couplage des modèles de PNT et MCT. L'ozone a été choisi pour initier ce couplage entre ARPEGE et MOCAGE, pour plusieurs raisons. La première est qu'il est très bien simulé dans MOCAGE. La deuxième est que le spectre de IASI possède une large bande sensible à l'ozone capable au même titre que les canaux sensibles au CO_2 de fournir de l'information sur une grande partie de l'atmosphère en température et humidité.

Cette étude a permis d'initier l'élaboration des matrices de covariance d'erreur d'observation (**R**) et d'ébauche (**B**). La méthode de Desroziers a été utilisée pour diagnostiquer des erreurs d'observation réalistes entre les canaux IASI. Pour estimer les erreurs d'ébauche en ozone, nous avons décidé de calculer les écarts-types entre les profils d'ébauche et de vérification, nous rapprochant ainsi d'une estimation de **B** en ozone. Cependant, la faible quantité de radiosondages et la difficulté à calculer des fonctions de structure verticale cohérentes marque une limite dans la qualité des erreurs d'ozone utilisées dans cette étude. Même si globalement l'impact de l'ajout de ces 15 canaux IASI sensibles à l'ozone est positif, des difficultés demeurent. En effet, le nombre réduit de cas d'étude peut certainement altérer la qualité des matrices **R** et **B**. Ceci peut en partie expliquer dans les résultats les alternances d'impacts positifs et négatifs pour la température et l'humidité. Évidemment, d'autres éléments peuvent expliquer la dégradation des résultats, comme la qualité des simulations des observations à l'aide de RTTOV, le débiaisage des observations IASI et les différentes configurations complexes du 1D-Var.

De plus, lors de cette étude, les données de vérification étaient composées de sondes dites « brutes » et n'ont pas été replacées dans l'espace des observations satellitaires par des fonctions de lissage. Cependant, ces résultats nous démontrent qu'il est possible d'extraire de l'information supplémentaire des canaux IASI et d'apporter cette information à l'assimilation de données qui est capable ainsi d'améliorer les analyses simultanément en température, humidité et ozone. De plus, cette méthode donne la possibilité de restituer des profils d'ozone de bonne qualité. Ces résultats ont fait l'objet d'un article publié en octobre 2018 dans le journal international Journal of Geophysical Research Atmospheres « Assimilation of IASI ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling between Numerical Weather Prediction and Chemistry Transport Models » .

Pour évaluer la qualité de ces restitutions, en plus des données de vérification de notre étude, nous avons appliqué notre méthode aux données de la campagne de mesure APOGEE. Nous avons pu ainsi montrer que notre méthode est flexible et applicable à d'autres types d'observations en utilisant d'autres ébauches d'ozone. Les expériences ont donc été menées avec deux types d'observations provenant de IASI et de CrIS, ainsi que deux sources d'ozone différentes issues de MOCAGE et de CAMS. Les résultats sont également très encourageants et montrent la capacité de cette méthode à restituer des profils plus proches des profils mesurés que l'ébauche en température, humidité et ozone. L'assimilation de ces canaux supplémentaires a un impact neutre à positif sur les restitutions de température. Puis, ces canaux sensibles à l'ozone nous permettent de restituer des profils d'humidité plus proches des profils mesurés là où l'ébauche en était éloignée. Cependant, on peut noter un éloignement important de la restitution du profil d'humidité par rapport à l'ébauche et au profil mesuré pour les expériences assimilant les canaux issus de CrIS. Cette différence peut être liée au fait que cette expérience d'assimilation utilise une matrice **R** diagonale contrairement aux expériences avec IASI, il n'y a donc pas de prise en compte des corrélations inter-canaux.

Évidemment, l'impact positif le plus notable est visible pour l'ozone. On remarque que l'assimilation des canaux sensibles à l'ozone a la capacité de restituer des profils d'ozone très proches des profils mesurés, particulièrement dans l'UTLS.

• Nouvelle sélection de canaux O_3 IASI pour la PNT

Les centres de PNT prennent de plus en plus en compte les erreurs inter-canaux des observations satellitaires infrarouges et particulièrement celles de IASI. C'est pour cela que notre nouvelle sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone a été réalisée en utilisant une matrice de covariance d'erreur d'observation diagnostiquée. La nouvelle matrice a été réalisée pour les 5500 premiers canaux de IASI et représente une base solide pour cette étude mais également pour d'autres à venir. Cette sélection a également utilisé la matrice **B** estimée à l'aide de la méthode NMC qui calcule des différences entre des prévisions valides au même instant mais de durées différentes (36 h - 12 h). Une pré-sélection des canaux IASI sensibles à l'ozone sur le spectre complet a conduit à retenir 306 canaux. La méthode des DFS a permis de trier les canaux en fonction de leur apport cumulé en information. Les résultats moyens de DFS sur 345 profils indiquent que les 306 canaux sensibles à l'ozone de IASI fournissent des informations supplémentaires par rapport aux 122 canaux opérationnels. Pour la température, le DFS passe de 3,57 à 5,20, pour l'humidité il passe de 2,54 à 3,18, pour l'ozone de 0,05 à 3,86 et pour la température de peau de 0,979 à 0,994. Si l'on ajoute ces 306 canaux aux 122 canaux opérationnels, l'information est principalement redondante dans cette partie du spectre puisque seulement 39 canaux fournissent 50 % de l'information disponible sur les 306 canaux sensibles à l'ozone.

Ainsi, pour ne sélectionner que les canaux d'ozone qui amélioreraient le plus les analyses de température et d'humidité, plusieurs expériences 1D-Var ont été réalisées à l'aide du 1D-Var. Les résultats montrent que l'ajout de canaux d'ozone supplémentaires n'est pas forcement bénéfique à l'analyse. La non-linéarité des résultats de la réduction d'erreur relative (RED) lorsque des canaux sensibles à l'ozone sont ajoutés peut s'expliquer par les incertitudes globales liées à l'utilisation du 1D-Var. De plus, les profils d'ébauche sont déjà de bonne qualité, ce qui signifie que la marge d'amélioration est limitée. Enfin, les profils des sondes ne représentent pas la réalité et peuvent également comporter des erreurs, ce qui peut expliquer pourquoi les analyses sont moins proches des données de vérification chaque fois que de nouveaux canaux sont ajoutés. Nous avons également réalisé une expérience 1D-Var avec les 15 canaux sélectionnés par Collard, dont les résultats ont été comparés aux expériences avec les différentes sélections. Le but de notre sélection est de fournir des informations qui peuvent améliorer l'analyse de la température et de l'humidité et le meilleur compromis pour cela est atteint avec une expérience assimilant également 15 canaux IASI sensibles à l'ozone, par ordre de sélection :

- **1459, 1643, 1543, 1479, 1626, 1587, 1685, 1629, 1403, 1492, 1534, 1478, 1464, 1560, 1530**

Cette nouvelle sélection de canaux réduit en moyenne l'erreur d'analyse par rapport à l'utilisation de seulement 122 canaux. La RED en température diminue de 0,58 point de pourcentage, en humidité de 0,62 et en ozone de 4,46, ce qui signifie une amélioration, respectivement, de 13,8 % de analyse en température, de 20,9 % en humidité et très largement en ozone comparé à l'analyse de l'expérience avec seulement 122 canaux. Cette étude a fait l'objet d'un article soumis au journal scientifique international Atmospheric Measurement Techniques « Ozone-sensitive channel selection over IASI full spectrum with correlated observation errors for NWP ». La revision de cet article a conduit à largement modifier le papier avec un nouveau titre « Update of IASI channel selection with correlated observation-errors for NWP ».

• Apport du couplage ARPEGE - MOCAGE par l'ozone

Toutes les études précédentes représentent une base solide pour appréhender l'assimilation de nouvelles observations IASI sensibles à l'ozone dans le système 4D-Var par le couplage des modèles ARPEGE et MOCAGE. L'étape 1 a consisté à remplacer l'utilisation du profil d'ozone constant dans l'opérateur d'observation par les champs réalistes d'ozone issus des ébauches MOCAGE. Le premier impact est observé sur les simulations des observations IASI sensibles à l'ozone monitoré et non assimilés dans cette expérience. On remarque qu'avant la correction de biais variationnelle, l'utilisation des ébauches d'ozone de MOCAGE dans l'opérateur d'observation permet de mieux simuler les canaux IASI sensibles à l'ozone et de réduire significativement les écarts-types des innovations de ces canaux, passant de 6 K avec l'ozone constant à 2,5 K avec l'ozone de MOCAGE. Ces résultats confirment les précédentes études et ouvrent la voie à une meilleure utilisation des canaux IASI sensibles à l'ozone.

Nous avons également remarqué que l'utilisation de l'ozone de MOCAGE dans l'opérateur d'observation modifie les analyses thermodynamiques sans assimilation d'observations d'ozone. Ces modifications s'expliquent par la sensibilité de certains canaux sensibles au CO_2, également sensibles à l'ozone. Ainsi, l'utilisation d'ébauches d'ozone plus réalistes permet de mieux simuler ces canaux. De plus, des études ont démontré que certains canaux micro-ondes des sondeurs de type AMSU-B sont également sensibles à l'ozone. Ces améliorations apportées aux simulations de ces observations ont donc des impacts positifs sur les analyses qui à leur tour ont des impacts positifs sur les simulations des radiosondages par exemple. Ainsi, l'ozone de MOCAGE utilisé dans l'opérateur d'observation permet un cercle vertueux d'améliorations des simulations et des analyses thermodynamiques.

Enfin, l'impact de cette expérience sur les prévisions météorologiques a été évalué et a démontré un potentiel important d'amélioration. L'expérience utilisant l'ozone de MOCAGE dans l'opérateur d'observation permet d'améliorer significativement les prévisions de température d'environ 4 %, d'humidité et de vent d'environ 3 % sur l'ensemble de la colonne atmosphérique, des échéances de prévisions et sur l'ensemble du globe. Ces résultats montrent l'impact que peut avoir la chimie atmosphérique sur les paramètres thermodynamiques du modèle météorologique, au travers d'une meilleure assimilation des observations satellitaires. Les expériences de l'étape 1 ont fait l'objet d'un article qui est en révision pour journal international Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society.

Dans l'étape 2, une autre expérience, utilisant de nouveau les champs 3D d'ozone issus de MOCAGE dans ARPEGE et en ajoutant notre sélection des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone, montre également des modifications des analyses particulièrement en humidité relative et des améliorations significatives des prévisions météorologiques à différentes échéances situées principalement au niveau des Tropiques en basse troposphère et au niveau de l'UTLS. Ainsi, l'assimilation supplémentaire d'observations sensibles à l'ozone permet d'améliorer davantage les prévisions.

Finalement, dans l'étape 3, nous avons perfectionné le couplage Météo - Chimie en ajoutant l'ozone à la variable de contrôle du 4D-Var ARPEGE permettant d'analyser l'ozone en plus des autres variables. Pour minimiser sur l'ozone pendant le processus d'assimilation, nous avons ajouté les erreurs d'ébauche en ozone calculées à l'aide de la méthode NMC. L'évaluation des champs d'ozone analysés issus de l'expérience EXP15O3 montre de faibles incréments d'analyse d'ozone de l'ordre de 10^{-3} ppmv. Cependant, analyser l'ozone permet de mieux repartir l'information des différentes observations et donne un degré de liberté supplémentaire aux autres variables. Des modifications importantes des analyses ont été observées particulièrement en humidité relative et vent. Une première évaluation sur les biais des prévisions sur une période d'une vingtaine de jours montre des impacts positifs avec une amélioration des biais des prévisions principalement pour la température dans la stratosphère et pour l'humidité au niveau de l'UTLS. Les dégradations observées pour les biais des prévisions en température sont probablement dues au nombre limité d'observations d'ozone utilisées dans le processus d'assimilation de données pour contraindre les analyses d'ozone.

Perspectives

« La recherche est un processus sans fin dont on ne peut jamais dire comment il évoluera. L'imprévisible est dans la nature même de la science. »

Francois Jacob

Les recherches menées au cours de cette thèse ouvrent la voie à de nombreuses pistes, à plus ou moins long terme. Plusieurs de ces voies de poursuite sont présentées ici.

• Optimisation du couplage ARPEGE - MOCAGE

Il sera intéressant de poursuivre sur une longue période les expériences avec l'ozone dans la variable de contrôle du 4D-Var. Il sera important de suivre l'évolution des biais, des moyennes des incréments, des impacts sur les analyses et les prévisions. On pourra éventuellement tester des sélections avec un nombre plus important de canaux IASI sensibles à l'ozone que nous avions éliminés dans le Chapitre 8. En effet, le cadre d'étude 4D-Var pourrait permettre de les évaluer plus en détail.

Dans cette étude l'ajout de l'ozone dans la variable de contrôle du 4D-Var nous permet par le processus de minimisation d'analyser un champ d'ozone. Cependant nous avons négligé l'ensemble des processus physico-chimiques qui interagissent avec l'ozone atmosphérique. C'est d'ailleurs pour cette raison que nous n'avons pas réalisé de prévisions des champs d'ozone à partir du modèle ARPEGE. Nous pourrons ainsi nous inspirer des travaux de [Cariolle and Morcrette, 2006, Dethof and Holm, 2004, Hólm et al., 2000, Hólm et al., 1999], afin de renforcer le couplage entre ARPEGE et MOCAGE, en utilisant de manière dynamique les prévisions des champs d'ozone de MOCAGE directement dans le processus d'assimilation 4D-Var et dans le schéma de rayonnement utilisé au cours de la prévision ARPEGE. ARPEGE utilise actuellement une climatologie d'ozone issue des travaux de [Fortuin and Langematz, 1995] dans son schéma de rayonnement. Il serait intéressant d'évaluer l'impact d'utiliser directement les champs d'ozone issus de MOCAGE sur le rayonnement dans le modèle ARPEGE. On pourra évaluer la possibilité d'utiliser en retour, l'ozone analysé par ARPEGE directement dans MOCAGE afin de boucler le couplage. La deuxième piste consiste à améliorer la qualité des analyses et à réaliser des prévisions d'ozone directement dans le modèle ARPEGE. En effet, il est possible d'ajouter des paramétrisations pour l'ozone stratosphérique disponible dans les paramétrisations de Cariolle utilisées dans le modèle IFS au CEPMMT. Il est également possible d'ajouter le schéma de Cariolle qui contrôle l'ensemble des mécanismes chimiques de l'ozone atmosphérique. L'ensemble de ces modifications conduira à l'indépendance du modèle ARPEGE pour réaliser des prévisions d'ozone. Il pourra ainsi utiliser ses propres analyses et ébauches dans son processus d'assimilation et ne dépendra plus des prévisions MOCAGE, ce qui placerait l'ozone comme premier composé chimique « in line » dans ARPEGE.

• Assimilation de canaux IASI sensibles à d'autres espèces chimiques

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes particulièrement intéressé à l'assimilation des canaux IASI sensibles à l'ozone. Les observations IASI sont sensibles à plus de 27 autres espèces chimiques : CO_2, CH_4, CO, NH_3, N_2O, SO_2, HNO_3, CFC-11, CFC-12, HCFC-11, OCS, H_2O, HDO, $H_2^{18}O$, CH_3COOH, HCOOH, C_2H_4 etc. Pour certaines de ces espèces, IASI est juste capable de les détecter et ne mesure pas leurs quantités. Elles ne sont donc pas utilisables. L'assimilation de toutes ces espèces dans le système global de PNT ARPEGE semble complexe mais il est possible de transposer les méthodes de cette étude à certaines espèces chimiques ciblées. En effet, nous pourrions commencer par assimiler des espèces chimiquement liées à l'ozone et ainsi améliorer à la fois les analyses en ozone et pouvoir fournir les prévisions d'une nouvelle espèce. C'est le cas par exemple du monoxyde de carbone. Nous avons vu dans le Chapitre 1 que le CO participe aux mécanismes de formation de l'ozone troposphérique et se transforme en dioxyde de carbone CO_2 dans l'atmosphère. De plus, le schéma chimique linéaire du CO existe et a été validé par [Claeyman et al., 2010].

Cependant, les sondeurs infrarouges sont sensibles au CO dans la basse troposphère et l'utilisation des canaux sensibles à cette espèce est conditionnée aux forts contrastes thermiques sur les surfaces. Une autre espèce qu'il serait intéressant d'assimiler à partir des observations IASI est le méthane. Ce dernier représente un enjeu au niveau du changement climatique et des incertitudes demeurent sur les sources liées à son augmentation dans l'atmosphère.

- **Utilisation de l'ensemble de ces méthodes pour d'autres instruments**

Avant d'évoquer les instruments satellitaires encore au sol, nous pouvons émettre des perspectives sur une meilleure utilisation des instruments actuellement en vol. Les sondeurs CrIS possèdent également une bande spectrale sensible à l'ozone. L'instrument Chinois HIRAS possède une résolution spectrale équivalente à celle de CrIS. Enfin les instruments à bord des satellites géostationnaires possèdent également un canal à large bande spectrale sensible à l'ozone. Il serait intéressant d'utiliser l'ensemble des méthodes de ce travail de thèse pour améliorer l'assimilation des observations de ces instruments.

De nouveaux instruments satellitaires infrarouges sont évidemment prévus dans les années à venir, à commencer par l'instrument IASI-NG (New Generation). Il sera à bord des 3 futurs satellites météorologiques européens de la série Metop-SG-A (Seconde Génération) dont les lancements sont prévus en 2021, 2028 et 2035. Il possédera le double de canaux par rapport à IASI. Ainsi, la compression de l'information sera capitale. La réduction d'information pourra passer également par la compression d'information à l'aide des analyses en composante principale (ACP) qui est une méthode statistique classique pour « compresser » efficacement des données volumineuses. Ainsi, les agences spatiales prévoient de fournir ces données sous forme de « PC scores ». Une technique consiste à assimiler des luminances spectrales reconstruites à partir des PC scores [Collard et al., 2010]. Des études ont aussi été menées pour assimiler directement les PC scores. Cependant, l'utilisation des ACP requiert des ébauches réalistes, également pour les profils chimiques. Pour réduire l'information, une nouvelle sélection de canaux devra également être réalisée. Cette dernière a commencé avec les travaux de Francesca Vittoriosio qui a sélectionné environ 600 à 800 canaux dans la bande de sensibilité au CO_2, à la surface et la vapeur d'eau. Une collaboration est envisagée pour réaliser une sélection des canaux IASI-NG supplémentaires sensibles à l'ozone. De nombreuses autres espèces chimiques pourraient être identifiées à l'avenir.

Il existe un instrument de sondage infrarouge à bord des satellites géostationnaires chinois FY-4 : GIIRS (Geostationary Interferometric InfraRed Sounder). Un exemplaire est déjà en orbite mais l'accès aux données est restreint. Un second instrument est également très attendu, il s'agit de IRS (InfraRed Sounder) qui sera à bord de prochains satellites géostationnaires européens MTG-S dont le lancement est prévu en 2023. Ce dernier fournira des données à haute résolution spatio-temporelle sur la vapeur d'eau et les structures de température de l'atmosphère. La résolution spectrale de IRS est moins bonne que celle de IASI et sa couverture spectrale est plus faible mais on pourrait exploiter les bandes sensibles à l'ozone et au monoxyde de carbone avec une haute résolution temporelle. Ces observations représentent donc un potentiel intéressant, particulièrement dans le cadre des prévisions de qualité de l'air. Les perspectives qui entourent cet instrument sont nombreuses.

Apport personnel de la thèse

« *La connaissance s'acquiert par l'expérience, tout le reste n'est que de l'information.* »

Albert Einstein

L'une des difficultés de cette thèse est qu'elle a abordé une grande quantité de sujets différents : les observations satellitaires, les sondeurs infrarouges, l'assimilation de données, le modèle de transfert radiatif, la prévision numérique du temps, la météorologie, la chimie atmosphérique, les modèles de chimie transport, etc. Ainsi, le travail de bibliographie au début de la thèse a été très important mais a été constant tout au long de la thèse. Afin de parfaire mes compétences en assimilation de données, j'ai réalisé deux formations au CEPMMT, sur la partie théorie de l'assimilation de données et une partie plus technique sur l'assimilation de données satellitaire. Un autre aspect important dans ce travail de thèse a été de maitriser une série de divers codes de programmation informatique afin de traiter de très grandes quantités de données (radiosondages, observations satellitaires, champs météorologiques et chimiques, etc.). Cela m'a permis d'apprendre à utiliser plusieurs langages de programmation (Fortran, Python, Shell, etc.). La simulation des observations satellitaires a nécessité l'utilisation d'un modèle de transfert radiatif nommé RTTOV et disponible sur le site de SAF-NWP (https://www.nwpsaf.eu/site/software/rttov/rttov-v12/). Ce code informatique requiert un apprentissage rigoureux afin de maitriser le plus largement possible les différentes configurations. Une grande partie des études de cette thèse a été réalisée dans un cadre simplifié d'assimilation uni-dimensionnel à partir du programme 1D-Var disponible également sur le site du SAF-NWP (https://www.nwpsaf.eu/site/software/1d-var/). Même si ce programme d'assimilation de données est plus simple que le 4D-Var, il n'en demeure pas moins qu'il s'agit un système non linéaire qui utilise tous les outils de l'assimilation de données opérationnelle. Ainsi, un travail très important a été réalisé en amont de chaque expérience pour comprendre le fonctionnement du 1D-Var dans ses différentes configurations.

Les observations satellitaires infrarouges issues de IASI représentent la majorité des observations utilisées en opérationnel à Météo-France. Il a fallu apprendre à maitriser cette quantité impressionnante de données. En effet, l'étude sur la sélection de canaux par exemple, a utilisé l'ensemble des canaux IASI, soit 8461 canaux multipliés par l'ensemble des pixels mesurés par IASI sur toute la période d'étude. Le pré-traitement de ces données a demandé plusieurs mois et l'utilisation d'un poste de travail à lui seul.

Les travaux autour de l'élaboration des matrices de covariances d'erreur d'observation $\mathbf{R}$ et d'ébauche $\mathbf{B}$ ont demandé beaucoup de temps. En effet, l'utilisation de la méthode de Desroziers pour diagnostiquer la matrice $\mathbf{R}$ s'articule autour de techniques statistiques qui requièrent une grande quantité d'observations. Or une grande partie des études réalisées dans cette thèse étaient dans un cadre simplifié et restreintes à une quantité limitée d'observations. Il a donc fallu apprendre à maitriser des techniques mathématiques capables de conditionner nos matrices $\mathbf{R}$ pour les rendre utilisables dans le 1D-Var. De la même manière, l'estimation des erreurs d'ébauche en ozone a été capitale pour ce travail de thèse. Une première technique a consisté en l'utilisation d'une méthode statistique utilisant les profils *in situ* d'ozone issus des radiosondages et les profils d'ozone issus de MOCAGE. Cette méthode est intéressante mais la faible quantité de radiosondages et la difficulté à réaliser des fonctions de structure verticale cohérentes nous a conduit à utiliser une autre méthode bien plus robuste. Nous avons ainsi élaboré une matrice $\mathbf{B}$ multi-variée en température, humidité et ozone à partir de la méthode NMC élaborée au National Meteorological Center. Cette technique permet de calculer une matrice $\mathbf{B}$ statique en calculant des différences entre des prévisions valides au même instant mais de durées différentes (36 h - 12 h). Ainsi, il est possible à partir de ces différences, d'obtenir des statistiques qui conduisent au calcul de la matrice $\mathbf{B}$.

Ce travail de thèse a été l'occasion d'apprendre à maitriser divers outils essentiellement informatiques et de développer plusieurs stratégies dans le traitement de base de données de grandes tailles. La possibilité de réaliser une étude de terrain a été rendue possible par la campagne de mesure APOGEE. J'ai été rencontrer directement Lilian Joly, le coordinateur de cette campagne au GSMA de l'Université de Reims et lui ai demandé la possibilité de réaliser une collaboration pour mon travail de thèse, ce à quoi il a répondu très positivement. Cette campagne m'a permis d'acquérir un large éventail de compétences. Il a fallu que j'apprenne à préparer une sonde de mesure d'ozone. Ainsi, j'ai demandé à un spécialiste du Laboratoire d'Aérologie de me former à la préparation spécifique de ces sondes qui consiste en une élaboration de solutions chimiques en laboratoire, puis une série d'étalonnages avant la mise en place de la sonde sur une chaine de vol et du radiosondage. La technicité d'un radiosondage m'a été instruite par l'équipe d'instrumentation à Météo-France avec qui nous avons également collaboré tout au long de la campagne APOGEE. Cette campagne de mesure a également été l'occasion de lier des partenariats avec d'autres équipes de recherche au CNRM et particulièrement l'équipe qui s'occupe du MCT MOCAGE.

Dans le cadre de cette étude, j'ai proposé un stage de Master 1, réalisé par deux étudiants que j'ai co-encadré avec mes encadrants de thèse. Ce stage a été l'occasion de préparer administrativement l'arrivée de stagiaires dans un laboratoire et surtout de préparer scientifiquement le sujet de recherche. Ce dernier portait sur l'élaboration d'une climatologie évolutive de CO_2 pour une meilleure utilisation des sondeurs satellitaires infrarouges. Le travail en amont a été d'extraire une grande quantité de données issues des réanalyses MACC-III (champs 3D de dioxyde de carbone toutes les 3 heures de 1994 à 2014) réalisées au CEPMMT. La durée du stage étant limitée à deux mois, j'ai pré-traité les données afin de fournir une base de données rapidement exploitable par les étudiants. Un autre aspect important dans cet encadrement a été de transmettre des connaissances complexes sur divers sujets : observations satellitaires, assimilation de données, réanalyses, modélisation, chimie atmosphérique etc. Les étudiants se sont rapidement intégrés à l'équipe et leur curiosité et leur sérieux leur a permis de réaliser un excellent travail de recherche dans le court temps qui leur était imparti. La qualité des résultats scientifiques obtenus de leur rapport et de leur présentation orale les a conduits à obtenir la meilleure note de stage de leur promotion. J'ai encadré un des étudiants deux mois de plus sur un prolongement du stage pendant l'été.

Enfin, ce travail de thèse m'a permis de me familiariser avec l'environnement de travail des chaînes opérationnelles du système d'assimilation de données 4D-Var dans le modèle ARPEGE. J'ai suivi une formation pour apprendre à réaliser des expériences sur le super-calculateur de Météo-France en utilisant un outil interactif nommé OLIVE. J'ai ainsi appris la complexité qui entoure la mise en place, le maintien et la surveillance des chaînes opérationnelles de prévisions et les problématiques liées au transfert des nouvelles avancées des travaux de recherche dans ces chaines.

Mes encadrants m'ont encouragé à partager mes recherches lors de plusieurs conférences scientifiques internationales qui m'ont permis de rencontrer les principaux acteurs scientifiques travaillant dans les domaines en lien avec mon sujet de recherche. Ces rencontres ont été l'occasion de confronter mes recherches à celles d'autres chercheurs. La critique scientifique est capitale pour un chercheur et m'a souvent donné des idées pour la suite de mes recherches. Globalement, ce travail de thèse m'a permis d'acquérir un éventail très diversifié de compétences théoriques et techniques qui m'ont conforté dans mon intérêt pour la recherche. Cet apprentissage a été une parfaite préparation pour la suite et me sera bénéfique dans ma carrière de chercheur.

Annexes

Les canaux IASI

Liste des canaux monitorées

Canaux	Nombre d'onde (cm^{-1})	Principales sensibilités	Assimilés sur mer	Assimilés sur terre
16	648.75	CO_2, température stratosphérique		
38	654.25	CO_2, température stratosphérique		
49	657.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
51	657.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
55	658.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
57	659.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
59	659.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
61	660.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
63	660.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
66	661.25	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
70	662.25	CO_2, température stratosphérique		
72	662.75	CO_2, température stratosphérique		
74	663.25	CO_2, température stratosphérique		
79	664.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
81	665.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
83	665.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
85	666.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
87	666.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
89	667.00	CO_2, température stratosphérique		
92	667.75	CO_2, température stratosphérique		
95	668.50	CO_2, température stratosphérique		
97	669.00	CO_2, température stratosphérique		
99	669.50	CO_2, température stratosphérique		
101	670.00	CO_2, température stratosphérique		
104	670.75	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
106	671.25	CO_2, température stratosphérique		
109	672.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
111	672.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
113	673.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
116	673.75	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
119	674.50	CO_2, température stratosphérique		
122	675.25	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
125	676.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
128	676.75	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
131	677.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
133	678.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
135	678.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
138	679.25	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
141	680.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
144	680.75	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
146	681.25	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
148	681.75	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
151	682.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
154	683.25	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
157	684.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
159	684.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
161	685.00	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
163	685.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
167	686.50	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
170	687.25	CO_2, température stratosphérique	✓	✓
173	688.00	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
176	688.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
179	689.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
180	689.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
185	691.00	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
187	691.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
193	693.00	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
199	694.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
205	696.00	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
207	696.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
210	697.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
212	697.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
214	698.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
217	699.00	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
219	699.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
222	700.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
224	700.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
226	701.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
230	702.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓

Canaux	Nombre d'onde (cm^{-1})	Principales sensibilités	Assimilés sur mer	Assimilés sur terre
232	702.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
236	703.75	CO_2, température haute troposphère		
239	704.50	CO_2, température haute troposphère		
242	705.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
243	705.50	CO_2, température haute troposphère		
246	706.25	CO_2, température haute troposphère		
249	707.00	CO_2, température haute troposphère		
252	707.75	CO_2, température haute troposphère		
254	708.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
260	709.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
262	710.25	CO_2, température haute troposphère		
265	711.00	CO_2, température moyenne troposphère	✓	✓
267	711.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
269	712.00	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
275	713.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
280	714.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
282	715.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
294	718.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
296	718.75	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
299	719.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
303	720.50	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
306	721.25	CO_2, température haute troposphère	✓	✓
323	725.50	CO_2, température haute troposphère	✓	
327	726.50	CO_2, température basse troposphère	✓	
329	727.00	CO_2, température haute troposphère	✓	
335	728.50	CO_2, température haute troposphère		
345	731.00	CO_2, température moyenne troposphère	✓	
347	731.50	CO_2, température moyenne troposphère	✓	
350	732.25	CO_2, température moyenne troposphère	✓	
354	733.25	CO_2, température haute troposphère	✓	
356	733.75	CO_2, température moyenne troposphère	✓	
360	734.75	CO_2, température haute troposphère	✓	
366	736.25	CO_2, température haute troposphère	✓	
371	737.50	CO_2, température moyenne troposphère		
373	738.00	CO_2, température moyenne troposphère	✓	
375	738.50	CO_2, température moyenne troposphère	✓	
377	739.00	CO_2, température moyenne troposphère		
379	739.50	CO_2, température moyenne troposphère		
381	740.00	CO_2, température moyenne troposphère		
383	740.50	CO_2, température moyenne troposphère	✓	
386	741.25	CO_2, température haute troposphère	✓	
389	742.00	CO_2, température moyenne troposphère		
398	744.25	CO_2, température basse troposphère	✓	
401	745.00	CO_2, température basse troposphère	✓	
404	745.75	CO_2, température basse troposphère	✓	
407	746.50	CO_2, température basse troposphère	✓	
410	747.25	CO_2, température basse troposphère	✓	
414	748.25	CO_2, température basse troposphère	✓	
416	748.75	CO_2, température basse troposphère		
426	751.25	CO_2, température basse troposphère	✓	
428	751.75	CO_2, température basse troposphère	✓	
432	752.75	CO_2, température basse troposphère	✓	
434	753.25	CO_2, température basse troposphère	✓	
439	754.50	CO_2, température basse troposphère	✓	
445	756.00	CO_2, température basse troposphère	✓	
457	759.00	CO_2, température basse troposphère	✓	
515	773.50	Surfaces et nuages	✓	
546	781.25	Surfaces et nuages		
552	782.75	Surfaces et nuages		
559	784.50	Surfaces et nuages		
566	786.25	Surfaces et nuages		
571	787.50	Surfaces et nuages		
573	788.00	Surfaces et nuages		
646	806.25	Surfaces et nuages		
662	810.25	Surfaces et nuages		
668	811.75	Surfaces et nuages		
756	833.75	Surfaces et nuages		
867	861.50	Surfaces et nuages		
906	871.25	Surfaces et nuages		

Canaux	Nombre d'onde (cm^{-1})	Principales sensibilités	Assimilés sur mer	Assimilés sur terre
921	875.00	Surfaces et nuages		
1027	901.50	Surfaces et nuages		
1046	906.25	Surfaces et nuages		
1121	925.00	Surfaces et nuages		
1133	928.00	Surfaces et nuages		
1191	942.50	Surfaces et nuages	✓	
1194	943.25	Surfaces et nuages	✓	
1271	962.50	Surfaces et nuages	✓	
1479	1014.50	O_3, température, humidité		
1509	1022.00	O_3, température, humidité		
1513	1023.00	O_3, température, humidité		
1521	1025.00	O_3, température, humidité		
1536	1028.75	O_3, température, humidité		
1574	1038.25	O_3, température, humidité		
1579	1039.50	O_3, température, humidité		
1585	1041.00	O_3, température, humidité		
1587	1041.50	O_3, température, humidité		
1626	1051.25	O_3, température, humidité		
1639	1054.50	O_3, température, humidité		
1643	1055.50	O_3, température, humidité		
1652	1057.75	O_3, température, humidité		
1658	1059.25	O_3, température, humidité		
1671	1062.50	O_3, température, humidité		
1786	1091.25	O_3, température, humidité		
1805	1096.00	Surfaces et nuages		
1884	1115.75	Surfaces et nuages		
1991	1142.50	Surfaces et nuages		
2019	1149.50	Surfaces et nuages		
2094	1168.25	Humidité haute troposphère		
2119	1174.50	Humidité haute troposphère		
2213	1198.00	Humidité haute troposphère		
2239	1204.50	Humidité haute troposphère		
2245	1206.00	Humidité haute troposphère		
2271	1212.50	Humidité haute troposphère		
2321	1225.00	Humidité haute troposphère		
2398	1244.25	Humidité haute troposphère		
2701	1320.00	Humidité haute troposphère	✓	✓
2741	1330.00	Humidité haute troposphère		
2819	1349.50	Humidité haute troposphère		
2889	1367.00	Humidité haute troposphère		
2907	1371.50	Humidité haute troposphère		
2910	1372.25	Humidité haute troposphère	✓	✓
2919	1374.50	Humidité haute troposphère		
2939	1379.50	Humidité haute troposphère		
2944	1380.75	Humidité haute troposphère		
2948	1381.75	Humidité haute troposphère		
2951	1382.50	Humidité haute troposphère	✓	
2958	1384.25	Humidité haute troposphère	✓	
2977	1389.00	Humidité haute troposphère		
2985	1391.00	Humidité haute troposphère		
2988	1391.75	Humidité haute troposphère		
2991	1392.50	Humidité haute troposphère	✓	✓
2993	1393.00	Humidité haute troposphère	✓	✓
3002	1395.25	Humidité haute troposphère	✓	✓
3008	1396.75	Humidité moyenne troposphère	✓	✓
3014	1398.25	Humidité moyenne troposphère	✓	✓
3027	1401.50	Humidité moyenne troposphère	✓	✓
3029	1402.00	Humidité moyenne troposphère		
3036	1403.75	Humidité moyenne troposphère		
3047	1406.50	Humidité moyenne troposphère		
3049	1407.00	Humidité moyenne troposphère	✓	
3053	1408.00	Humidité moyenne troposphère		
3058	1409.25	Humidité moyenne troposphère	✓	
3064	1410.75	Humidité moyenne troposphère		
3069	1412.00	Humidité moyenne troposphère		
3087	1416.50	Humidité moyenne troposphère		
3093	1418.00	Humidité moyenne troposphère		
3098	1419.25	Humidité moyenne troposphère		
3105	1421.00	Humidité moyenne troposphère	✓	

Canaux	Nombre d'onde (cm^{-1})	Principales sensibilités	Assimilés sur mer	Assimilés sur terre
3107	1421.50	Humidité moyenne troposphère		
3110	1422.25	Humidité moyenne troposphère		
3127	1426.50	Humidité moyenne troposphère		
3136	1428.75	Humidité moyenne troposphère		
3151	1432.50	Humidité moyenne troposphère		
3160	1434.75	Humidité moyenne troposphère		
3165	1436.00	Humidité moyenne troposphère		
3168	1436.75	Humidité moyenne troposphère		
3175	1438.50	Humidité moyenne troposphère		
3178	1439.25	Humidité moyenne troposphère		
3207	1446.50	Humidité moyenne troposphère		
3228	1451.75	Humidité moyenne troposphère		
3244	1455.75	Humidité moyenne troposphère		
3248	1456.75	Humidité moyenne troposphère		
3252	1457.75	Humidité moyenne troposphère		
3256	1458.75	Humidité moyenne troposphère		
3263	1460.50	Humidité moyenne troposphère		
3281	1465.00	Humidité moyenne troposphère		
3303	1470.50	Humidité moyenne troposphère		
3309	1472.00	Humidité moyenne troposphère		
3312	1472.75	Humidité moyenne troposphère		
3322	1475.25	Humidité moyenne troposphère		
3339	1479.50	Humidité moyenne troposphère		
3375	1488.50	Humidité moyenne troposphère		
3378	1489.25	Humidité moyenne troposphère		
3411	1497.50	Humidité moyenne troposphère		
3438	1504.25	Humidité moyenne troposphère		
3440	1504.75	Humidité moyenne troposphère		
3442	1505.25	Humidité moyenne troposphère		
3444	1505.75	Humidité moyenne troposphère		
3446	1506.25	Humidité moyenne troposphère		
3448	1506.75	Humidité moyenne troposphère		
3450	1507.25	Humidité moyenne troposphère		
3452	1507.75	Humidité moyenne troposphère		
3454	1508.25	Humidité moyenne troposphère		
3458	1509.25	Humidité moyenne troposphère		
3467	1511.50	Humidité moyenne troposphère		
3476	1513.75	Humidité moyenne troposphère		
3484	1515.75	Humidité moyenne troposphère		
3491	1517.50	Humidité moyenne troposphère		
3497	1519.00	Humidité moyenne troposphère		
3499	1519.50	Humidité moyenne troposphère		
3504	1520.75	Humidité moyenne troposphère		
3506	1521.25	Humidité moyenne troposphère		
3509	1522.00	Humidité moyenne troposphère		
3518	1524.25	Humidité moyenne troposphère		
3522	1525.25	Humidité moyenne troposphère		
3527	1526.50	Humidité moyenne troposphère		
3540	1529.75	Humidité moyenne troposphère		
3555	1533.50	Humidité moyenne troposphère		
3575	1538.50	Humidité moyenne troposphère		
3577	1539.00	Humidité moyenne troposphère	✓	
3580	1539.75	Humidité basse troposphère		
3582	1540.25	Humidité basse troposphère		
3586	1541.25	Humidité basse troposphère		
3589	1542.00	Humidité basse troposphère		
3599	1544.50	Humidité basse troposphère		
3653	1558.00	Humidité basse troposphère		
3658	1559.25	Humidité basse troposphère		
3661	1560.00	Humidité basse troposphère		
3943	1630.50	Humidité basse troposphère		
4032	1652.75	Humidité basse troposphère		
5130	1927.25	Humidité basse troposphère		
5368	1986.75	Humidité basse troposphère	✓	
5371	1987.50	Humidité basse troposphère		
5379	1989.50	Humidité basse troposphère		
5381	1990.00	Humidité basse troposphère		
5383	1990.50	Humidité basse troposphère	✓	
5397	1994.00	Humidité basse troposphère	✓	

Canaux	Nombre d'onde (cm^{-1})	Principales sensibilités	Assimilés sur mer	Assimilés sur terre
5399	1994.50	Humidité basse troposphère		
5401	1995.00	Humidité basse troposphère	✓	
5403	1995.50	Humidité basse troposphère	✓	
5405	1996.00	Humidité basse troposphère	✓	
5455	2008.50	Humidité basse troposphère		
5480	2014.75	Humidité basse troposphère		
5483	2015.50	Humidité basse troposphère	✓	
5485	2016.00	Humidité basse troposphère		
5492	2017.75	Humidité basse troposphère		
5502	2020.25	Humidité basse troposphère		
5507	2021.50	Humidité basse troposphère		
5509	2022.00	Humidité basse troposphère		
5517	2024.00	Humidité basse troposphère		
5558	2034.25	Humidité basse troposphère		
5988	2141.75	CO		
5992	2142.75	CO		
5994	2143.25	CO		
6003	2145.50	CO		
6350	2232.25	CO_2, N_2O, température		
6463	2260.50	CO_2, N_2O, température		
6601	2295.00	CO_2, N_2O, température		
6962	2385.25	CO_2, température		
6980	2389.75	CO_2, température		
6982	2390.25	Solaire		
6985	2391.00	Solaire		
6987	2391.50	Solaire		
6989	2392.00	Solaire		
6991	2392.50	Solaire		
6993	2393.00	Solaire		
6995	2393.50	Solaire		
6997	2394.00	Solaire		
7267	2461.50	Solaire		
7269	2462.00	Solaire		
7424	2500.75	Solaire		
7426	2501.25	Solaire		
7428	2501.75	Solaire		
7885	2616.00	Solaire		
8007	2646.50	Solaire		

TABLE 9.1: Liste des 314 canaux IASI monitorés à Météo-France et des 123 canaux assimilés en opérationnel au début de l'étude sur mer et/ou sur terre en fonction de leur nombre d'onde et principales sensibilités.

Résultats complémentaires

Écarts-types des différences d'analyse des expériences de l'étape 1 - période estivale

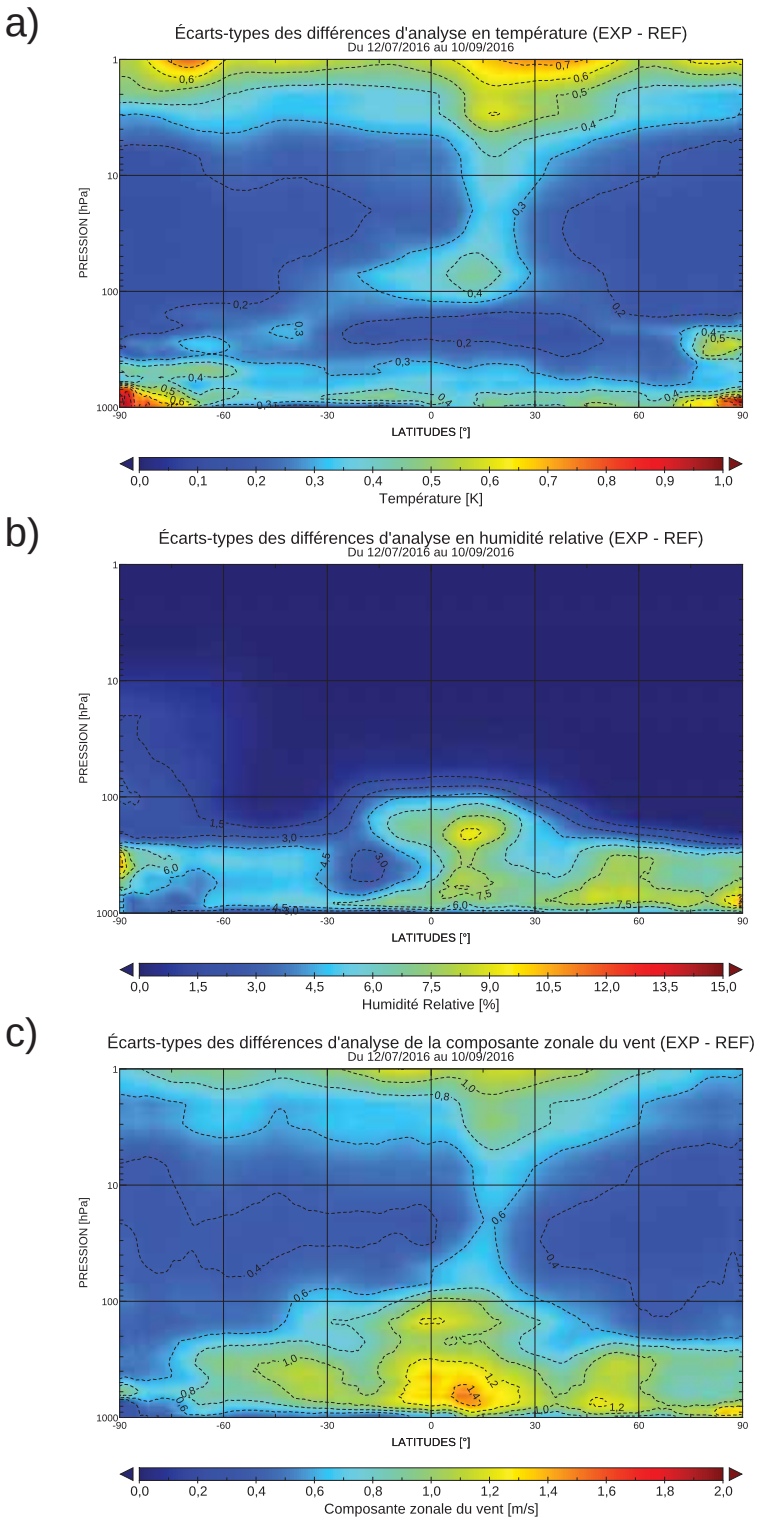


FIGURE 9.28: Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP et REF du 12 juillet 2016 au 10 septembre 2016 en fonction de la pression.

Écarts-types des différences d'analyse des expériences de l'étape 1 - période hivernale

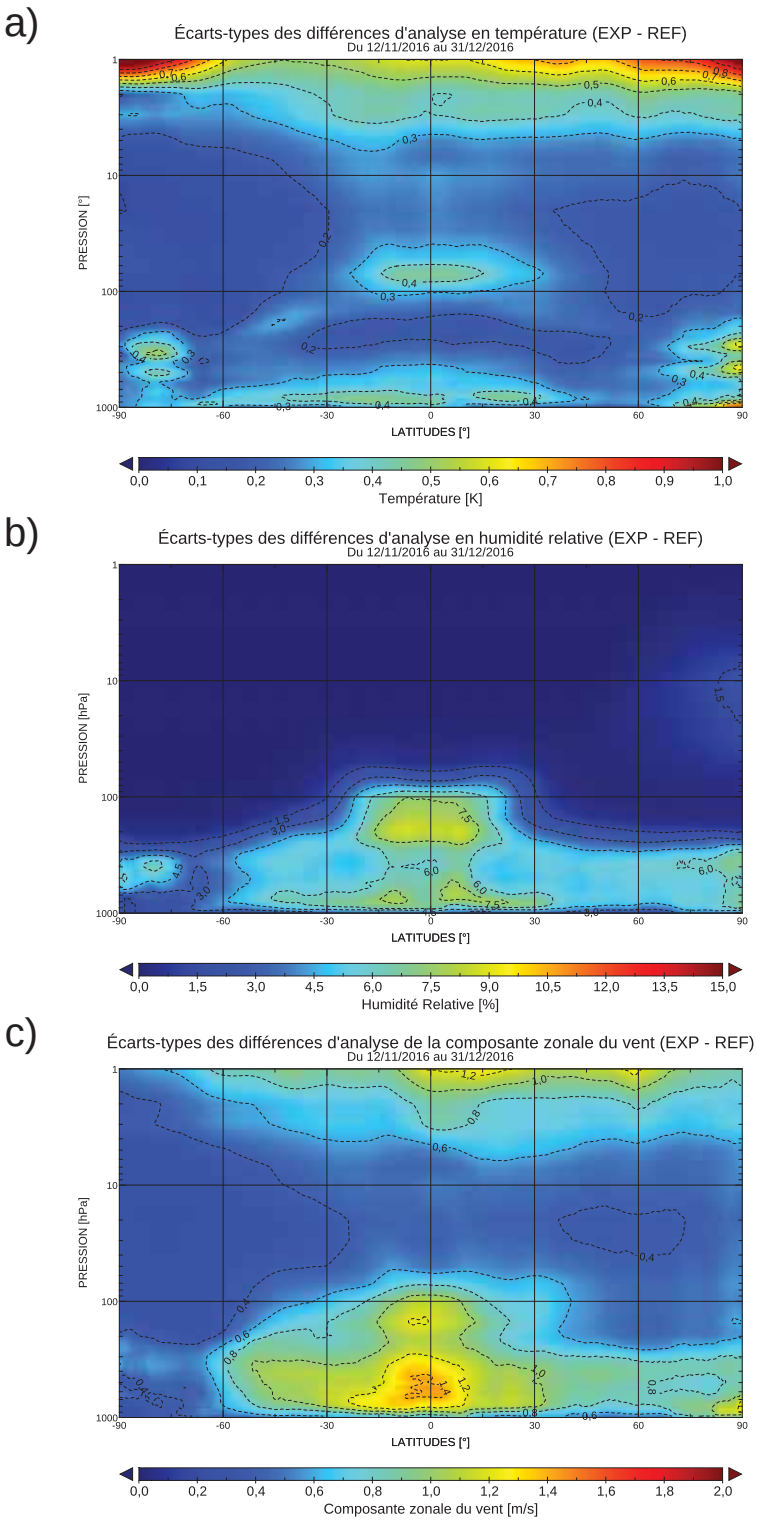


FIGURE 9.29: Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP et REF du 12 novembre 2016 au 31 décembre 2016 en fonction de la pression.

Écarts-types des différences d'analyse des expériences de l'étape 2

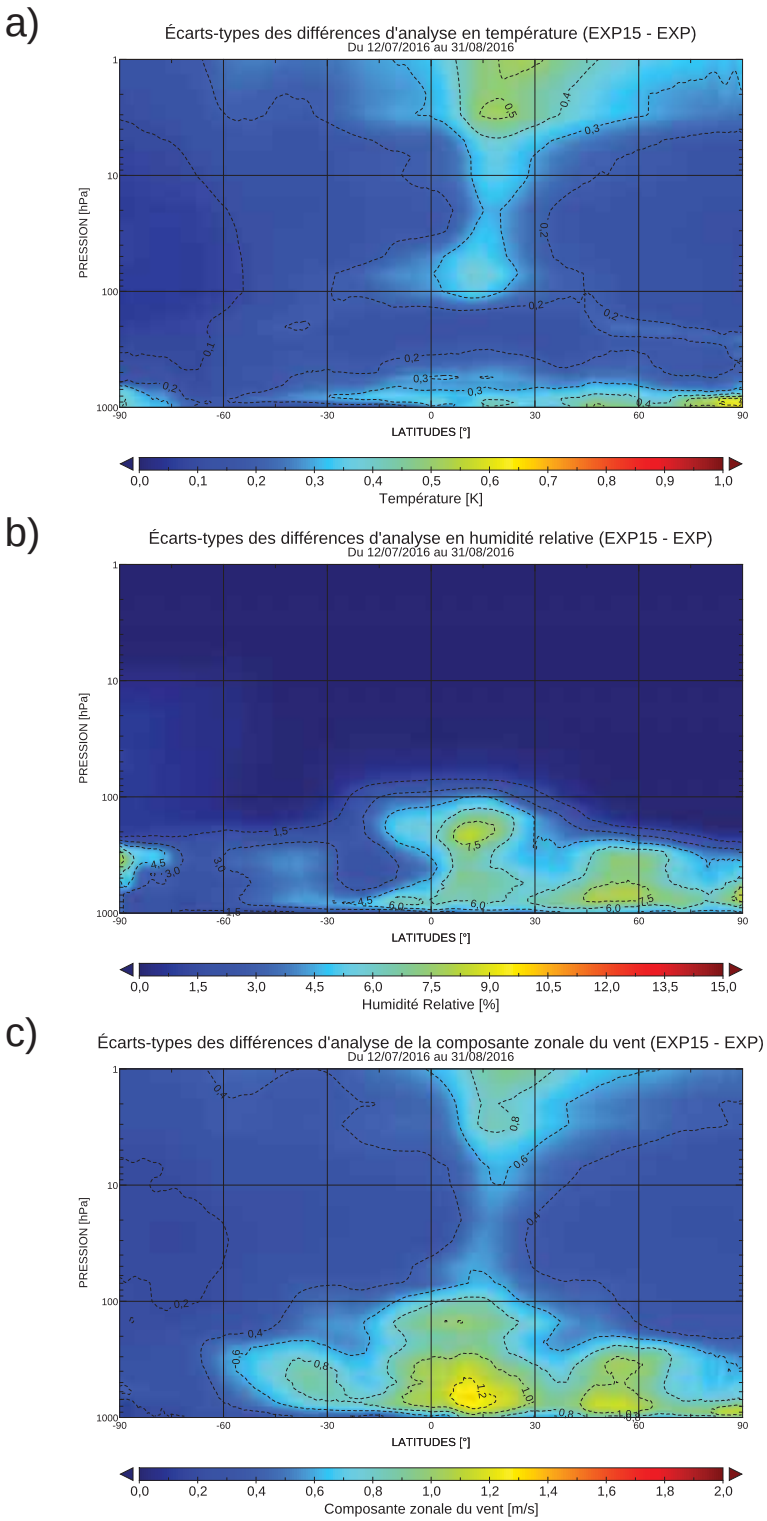


FIGURE 9.30: Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15 et EXP du 12 juillet 2016 au 31 août 2016 en fonction de la pression.

Écarts-types des différences d'analyse des expériences de l'étape 3

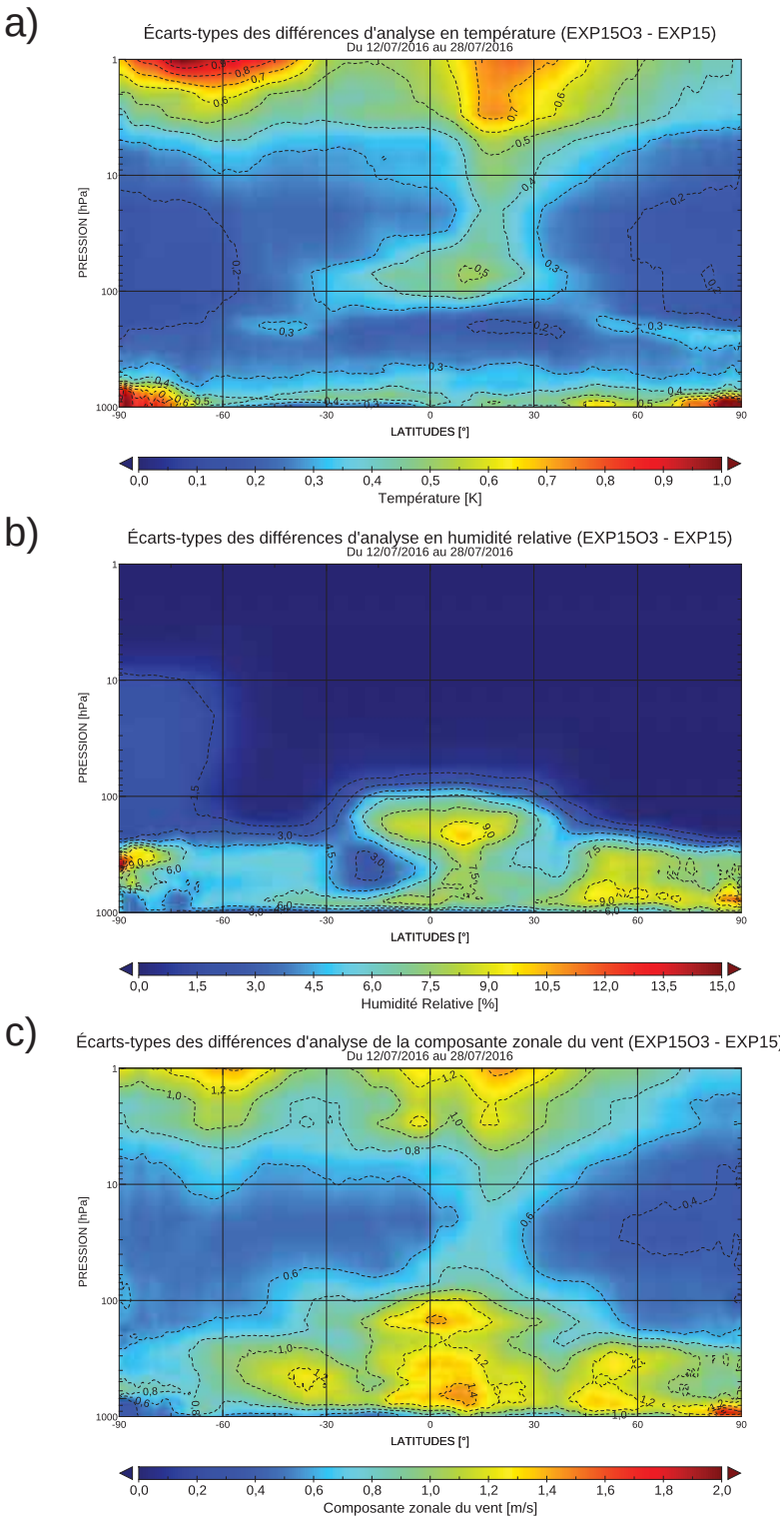


FIGURE 9.31: Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15O3 et EXP15 du 12 juillet 2016 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression.

Moyennes des ébauches, analyses et incréments de température de l'étape 3

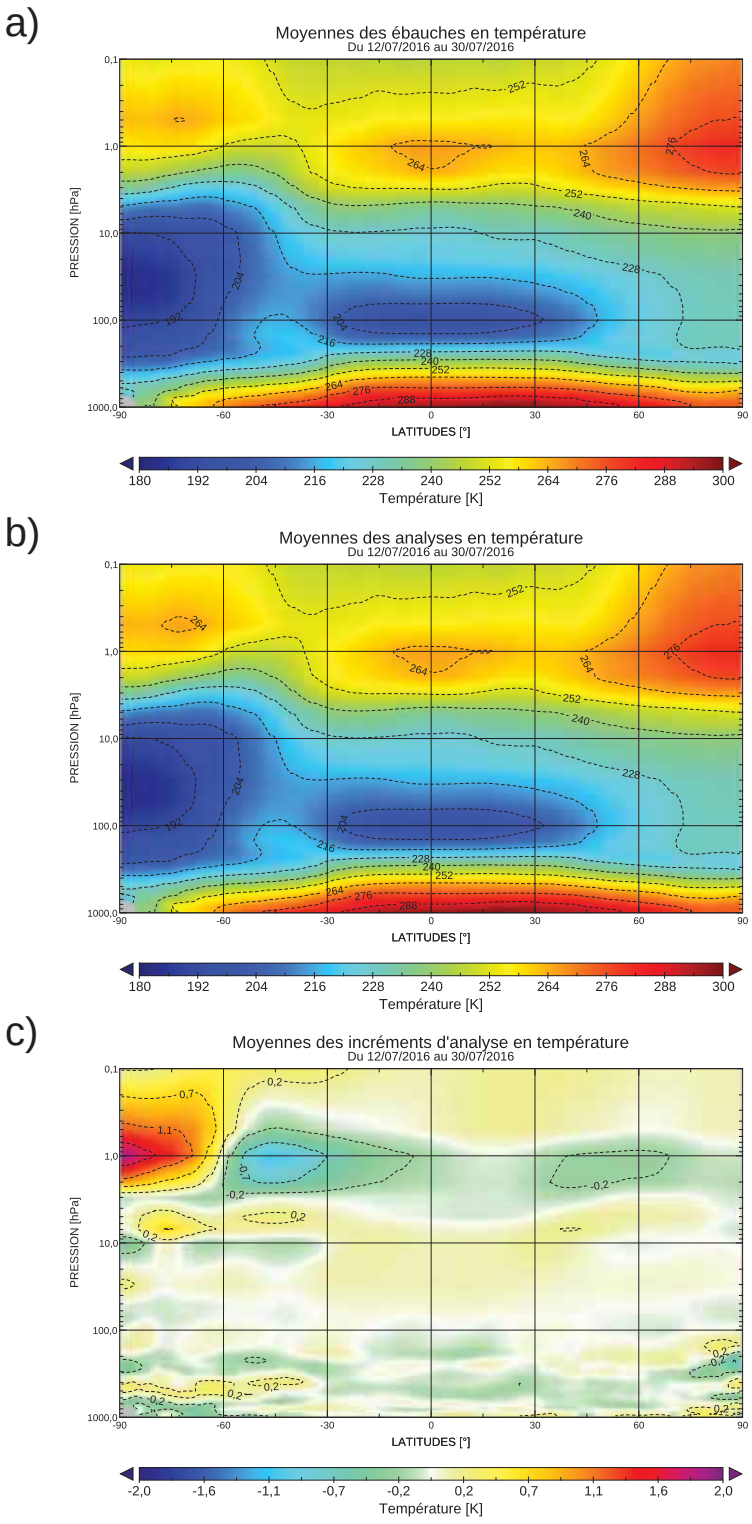


FIGURE 9.32: Moyennes des ébauches (a), analyses (b) et incréments d'analyse (c) en température de l'expérience EXP15O3 de l'étape 3 du 12 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression.

Moyennes des ébauches, analyses et incréments d'humidité de l'étape 3

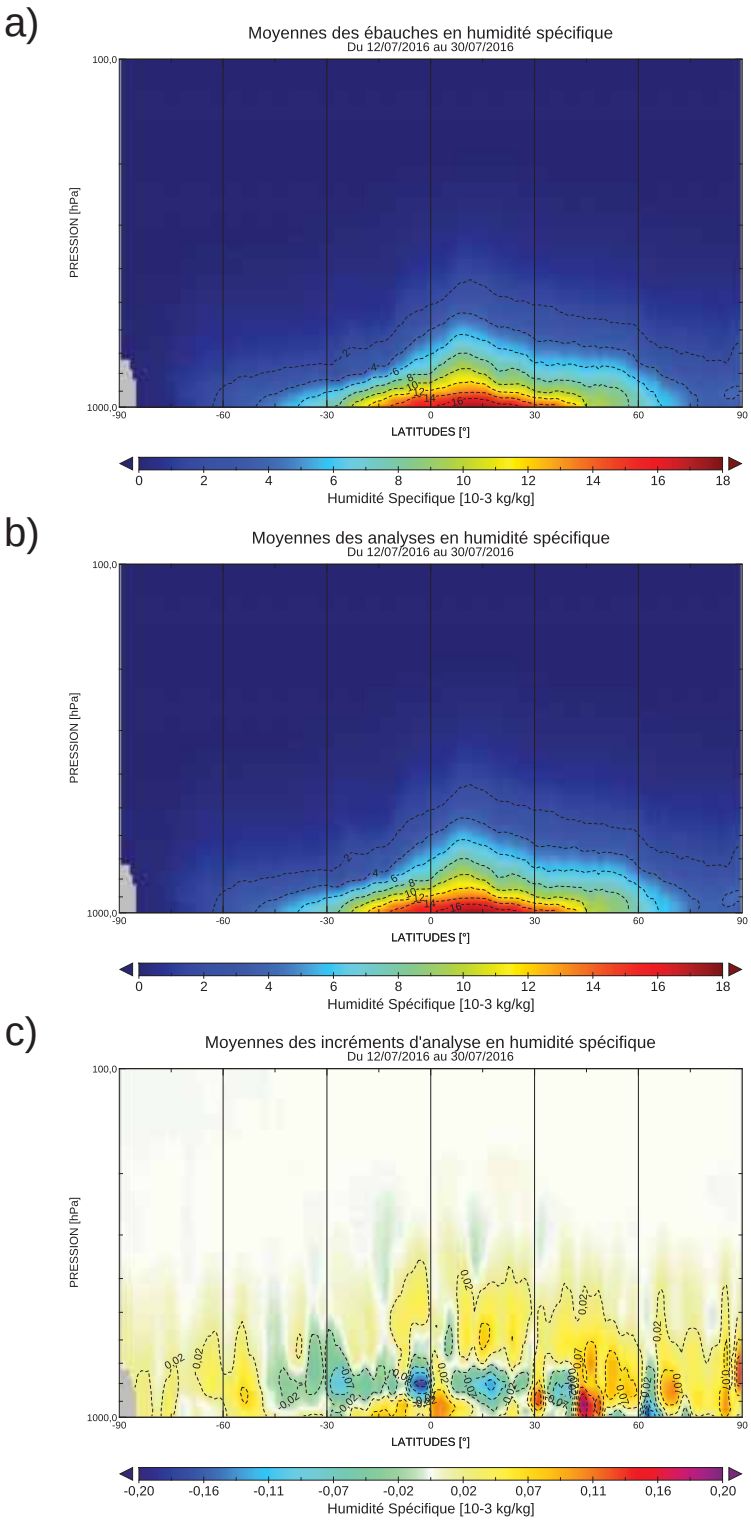


FIGURE 9.33: Moyennes des ébauches (a), analyses (b) et incréments d'analyse (c) en humidité spécifique de l'expérience EXP15O3 de l'étape 3 du 12 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression.

Bibliographie

[Moh, 2008] (2008). *Chemical Processes in the Stratosphere and Troposphere*, pages 209–252. Springer Netherlands, Dordrecht. *(Cité page 33)*

[Allen et al., 2018] Allen, D. R., Hoppel, K. W., and Kuhl, D. D. (2018). Extraction of wind and temperature information from hybrid 4d-var assimilation of stratospheric ozone using navgem. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18(4) :2999–3026. *(Cité page 292)*

[Andersson et al., 1998] Andersson, E., Haseler, J., Undén, P., Courtier, P., Kelly, G., Vasiljevic, D., Brankovic, C., Gaffard, C., Hollingsworth, A., Jakob, C., et al. (1998). The ecmwf implementation of three-dimensional variational assimilation (3d-var). iii : Experimental results. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 124(550) :1831–1860. *(Cité page 86)*

[August et al., 2012] August, T., Klaes, D., Schlüssel, P., Hultberg, T., Crapeau, M., Arriaga, A., O'Carroll, A., Coppens, D., Munro, R., and Calbet, X. (2012). Iasi on metop-a : Operational level 2 retrievals after five years in orbit. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 113(11) :1340–1371. *(Cité page 82)*

[Auligné et al., 2007] Auligné, T., McNally, A., and Dee, D. (2007). Adaptive bias correction for satellite data in a numerical weather prediction system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 133(624) :631–642. *(Cité page 112)*

[Auligné et al., 2003] Auligné, T., Rabier, F., Lavanant, L., and Dahoui, M. (2003). First results of the assimilation of airs data in météo-france numerical weather prediction model. In *Proceedings of the Thirteenth International TOVS Study Conference*, pages 74–79. *(Cité page 8)*

[Baklanov et al., 2015] Baklanov, A., Baldasano, J. M., Bouchet, V., Brunner, D., Ekman, A., Galmarini, S., Carmichael, G., Grell, G., Flemming, J., Forkel, R., Freitas, S., Gauss, M., Hegglin, M., Hov, Ø., Joffre, S., Makar, P., Mathur, R., Miranda, A., Moussiopoulos, N., Peuch, V.-H., Rao, S., Rixen, M., Savage, N., Heinke Schlünzen, K., Seigneur, C., Suppan, P., Vogel, B., Zhang, Y., et al. (23-25 February 2015). Coupled chemistry-meteorology/climate modelling (ccmm) : status and relevance for numerical weather prediction, atmospheric pollution and climate research. *World Meteorological Organization*, GAW Report No. 226, WWRP 2016-1, WCRP Report No. 9/2016. *(Cité page 10)*

[Baklanov et al., 2017] Baklanov, A., Brunner, D., Carmichael, G., Flemming, J., Freitas, S., Gauss, M., Hov, Ø., Mathur, R., Schlünzen, K. H., Seigneur, C., et al. (2017). Key issues for seamless integrated chemistry–meteorology modeling. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 98(11) :2285–2292. *(Cité page 10)*

[Bayes et al., 1763] Bayes, T., Price, R., and Canton, J. (1763). An essay towards solving a problem in the doctrine of chances. *(Cité page 91)*

[Benedetti et al., 2009] Benedetti, A., Morcrette, J.-J., Boucher, O., Dethof, A., Engelen, R., Fisher, M., Flentje, H., Huneeus, N., Jones, L., Kaiser, J., et al. (2009). Aerosol analysis and forecast in the european centre for medium-range weather forecasts integrated forecast system : 2. data assimilation. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 114(D13). *(Cité page 11)*

[Berk et al., 2005] Berk, A., Anderson, G. P., Acharya, P. K., Bernstein, L. S., Muratov, L., Lee, J., Fox, M., Adler-Golden, S. M., Chetwynd, J. H., Hoke, M. L., et al. (2005). Modtran 5 : a reformulated atmospheric band model with auxiliary species and practical multiple scattering options : update. In *Algorithms and technologies for multispectral, hyperspectral, and ultraspectral imagery XI*, volume 5806, pages 662–668. International Society for Optics and Photonics. *(Cité page 66)*

[Berk et al., 1999] Berk, A., Anderson, G. P., Bernstein, L. S., Acharya, P. K., Dothe, H., Matthew, M. W., Adler-Golden, S. M., Chetwynd, J. H., Richtsmeier, S. C., Pukall, B., et al. (1999). Modtran4 radiative transfer modeling for atmospheric correction. In *Optical spectroscopic techniques and instrumentation for atmospheric and space research III*, volume 3756, pages 348–354. International Society for Optics and Photonics. *(Cité page 66)*

[Bjerknes, 1904] Bjerknes, V. (1904). The problem of weather prediction, as seen from the standpoints of mechanics and physics. *Meteorologische Zeitschrift*. *(Cité page 86)*

[Bocquet et al., 2015] Bocquet, M., Elbern, H., Eskes, H., Hirtl, M., Žabkar, R., Carmichael, G., Flemming, J., Inness, A., Pagowski, M., Pérez Camaño, J., et al. (2015). Data assimilation in atmospheric chemistry models : current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models. *Atmospheric chemistry and physics*, 15(10) :5325–5358. *2 citations pages 11 et 12*

[Borbas et al., 2018] Borbas, E. E., Hulley, G., Feltz, M., Knuteson, R., and Hook, S. (2018). The combined aster modis emissivity over land (camel) part 1 : Methodology and high spectral resolution application. *Remote Sensing*, 10(4) :643. *3 citations pages 69, 145, et 230*

[Bormann et al., 2011] Bormann, N., Geer, A. J., and Bauer, P. (2011). Estimates of observation-error characteristics in clear and cloudy regions for microwave imager radiances from numerical weather prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137(661) :2014–2023. *(Cité page 233)*

[Boukachaba, 2017] Boukachaba, N. (2017). *Apport des observations satellitaires hyperspectrales infrarouges IASI au-dessus des continents dans le modèle météorologique à échelle convective AROME*. PhD thesis, INP Toulouse. *2 citations pages 145 et 230*

[Bousserez et al., 2007] Bousserez, N., Attié, J., Peuch, V., Michou, M., Pfister, G., Edwards, D., Emmons, L., Mari, C., Barret, B., Arnold, S., et al. (2007). Evaluation of the mocage chemistry transport model during the icartt/itop experiment. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 112(D10). *(Cité page 122)*

[Bouttier and Courtier, 1999] Bouttier, F. and Courtier, P. (1999). Data assimilation concepts and methods. training course notes of the european centre for medium-range weather forecasts, 1999. *Reading, UK*, 9 :85. *(Cité page 87)*

[Cariolle and Morcrette, 2006] Cariolle, D. and Morcrette, J.-J. (2006). A linearized approach to the radiative budget of the stratosphere : influence of the ozone distribution. *Geophysical research letters*, 33(5). *2 citations pages 260 et 310*

[Cayla, 2001] Cayla, F.-R. (2001). L'interféromètre iasi-un nouveau sondeur satellitaire haute résolution. *4 citations pages 62, 80, 82, et 357*

[Chevallier et al., 2001] Chevallier, F., Bauer, P., Kelly, G., Jakob, C., and McNally, T. (2001). Model clouds over oceans as seen from space : Comparison with hirs/2 and msu radiances. *Journal of climate*, 14(21) :4216–4229. *(Cité page 70)*

[Chevallier et al., 2002] Chevallier, F., Bauer, P., Mahfouf, J.-F., and Morcrette, J.-J. (2002). Variational retrieval of cloud profile from atovs observations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 128(585) :2511–2525. *(Cité page 70)*

[Chevallier et al., 2010] Chevallier, F., Ciais, P., Conway, T., Aalto, T., Anderson, B., Bousquet, P., Brunke, E., Ciattaglia, L., Esaki, Y., Fröhlich, M., et al. (2010). Co2 surface fluxes at grid point scale estimated from a global 21 year reanalysis of atmospheric measurements. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 115(D21). *(Cité page 175)*

[Chevallier et al., 2006] Chevallier, F., Di Michele, S., and McNally, A. P. (2006). *Diverse profile datasets from the ECMWF 91-level short-range forecasts*. European Centre for Medium-Range Weather Forecasts. *3 citations pages 67, 68, et 357*

[Christensen et al., 2004] Christensen, T. R., Johansson, T., Åkerman, H. J., Mastepanov, M., Malmer, N., Friborg, T., Crill, P., and Svensson, B. H. (2004). Thawing sub-arctic permafrost : Effects on vegetation and methane emissions. *Geophysical research letters*, 31(4). *(Cité page 43)*

[Claeyman et al., 2010] Claeyman, M., Attié, J.-L., El Amraoui, L., Cariolle, D., Peuch, V.-H., Teyssèdre, H., Josse, B., Ricaud, P., Massart, S., Piacentini, A., et al. (2010). A linear co chemistry parameterization in a chemistry-transport model : evaluation and application to data assimilation. *Atmospheric Chemistry & Physics*, 10(13). *(Cité page 310)*

[Clerbaux et al., 2009] Clerbaux, C., Boynard, A., Clarisse, L., George, M., Hadji-Lazaro, J., Herbin, H., Hurtmans, D., Pommier, M., Razavi, A., Turquety, S., et al. (2009). Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared iasi/metop sounder. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(16) :6041–6054. *2 citations pages 80 et 81*

[Clerbaux et al., 2007] Clerbaux, C., Cunnold, D., Anderson, J., Engel, A., Fraser, P., Mahieu, E., Manning, A., Miller, J., Montzka, S., Nassar, R., et al. (2007). Scientific assessment of ozone depletion : 2006. *Global Ozone Research and Monitoring Project-Report No. 50*. *(Cité page 39)*

[Clough et al., 1992] Clough, S. A., Iacono, M. J., and Moncet, J.-L. (1992). Line-by-line calculations of atmospheric fluxes and cooling rates : Application to water vapor. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 97(D14) :15761–15785. *(Cité page 66)*

[Collard, 2007] Collard, A. (2007). Selection of iasi channels for use in numerical weather prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 133(629) :1977–1991. *3 citations pages 117, 195, et 228*

[Collard et al., 2010] Collard, A., McNally, A., Hilton, F., Healy, S., and Atkinson, N. (2010). The use of principal component analysis for the assimilation of high-resolution infrared sounder observations for numerical weather prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 136(653) :2038–2050. *(Cité page 311)*

[Coopmann et al., 2020] Coopmann, O., Guidard, V., Fourrié, N., Josse, B., and Marécal, V. (2020). Update of iasi channel selection with correlated observation-errors for nwp. *Atmospheric Measurement Techniques Discussions*, 2020 :1–19. *(Cité page 241)*

[Coopmann et al., 2018] Coopmann, O., Guidard, V., Fourrié, N., and Plu, M. (2018). Assimilation of iasi ozone-sensitive channels in preparation for an enhanced coupling

between numerical weather prediction and chemistry transport models. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres.* *4 citations pages v, vii, 228, et 238*

[Courtier et al., 1998] Courtier, P., Andersson, E., Heckley, W., Vasiljevic, D., Hamrud, M., Hollingsworth, A., Rabier, F., Fisher, M., and Pailleux, J. (1998). The ecmwf implementation of three-dimensional variational assimilation (3d-var). i : Formulation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 124(550) :1783–1807. *(Cité page 86)*

[Courtier et al., 1994] Courtier, P., Thépaut, J.-N., and Hollingsworth, A. (1994). A strategy for operational implementation of 4d-var, using an incremental approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120(519) :1367–1387. *(Cité page 91)*

[Craig et al., 2017] Craig, A., Valcke, S., and Coquart, L. (2017). Development and performance of a new version of the oasis coupler, oasis3-mct_3. 0. *Geoscientific Model Development*, 10(9) :3297–3308. *(Cité page 9)*

[Cressman, 1959] Cressman, G. P. (1959). An operational objective analysis system. *Mon. Wea. Rev*, 87(10) :367–374. *(Cité page 86)*

[Daley, 1994] Daley, R. (1994). 1991 : Atmospheric data analysis. *(Cité page 89)*

[De Laplace, 1774] De Laplace, P. (1774). Mémoire sur la probabilité des causes par les événements. *Mém. de math. et phys. présentés à l'Acad. roy. des sci*, 6 :621–656. *(Cité page 91)*

[Delmas et al., 2005] Delmas, R., Mégie, G., and Peuch, V.-H. (2005). *Physique et chimie de l'atmosphère*. Belin. *17 citations pages 27, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 37, 46, 54, 55, 58, 60, 355, 356, 357, et 367*

[Derber and Wu, 1998] Derber, J. C. and Wu, W.-S. (1998). The use of tovs cloud-cleared radiances in the ncep ssi analysis system. *Monthly Weather Review*, 126(8) :2287–2299. *2 citations pages 228 et 260*

[DeSouza-Machado et al., 1997] DeSouza-Machado, S., Strow, L. L., and Hannon, S. E. (1997). kcompressed atmospheric radiative transfer algorithm (kcarta). In *Satellite Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere II*, volume 3220, pages 156–163. International Society for Optics and Photonics. *(Cité page 67)*

[Desroziers et al., 2005] Desroziers, G., Berre, L., Chapnik, B., and Poli, P. (2005). Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 131(613) :3385–3396. *5 citations pages 110, 197, 232, 262, et 287*

[Desroziers G, 2009] Desroziers G, Berre L, C. B. (2009). Objective validation of a data assimilation system : Diagnosing sub-optimality. In *Proceedings of Workshop on Diagnostics of Data Assimilation System Performance*, pages 15–25. ECMWF, European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, Reading, UK. *(Cité page 110)*

[Dethof, 2003] Dethof, A. (2003). *Assimilation of ozone retrievals from the MIPAS instrument on board ENVISAT*. Citeseer. *(Cité page 260)*

[Dethof and Holm, 2004] Dethof, A. and Holm, E. (2004). Ozone assimilation in the era-40 reanalysis project. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 130(603) :2851–2872. *2 citations pages 232 et 310*

[Dragani, 2016] Dragani, R. (2016). A comparative analysis of uv nadir-backscatter and infrared limb-emission ozone data assimilation. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16(13) :8539–8557. *(Cité page 291)*

[Dragani and Dee, 2008] Dragani, R. and Dee, D. (2008). Progress in ozone monitoring and assimilation. *ECMWF Newsletter*, 116 :35–42. *(Cité page 261)*

[Dragani and McNally, 2013] Dragani, R. and McNally, A. (2013). Operational assimilation of ozone-sensitive infrared radiances at ecmwf, qj roy. meteor. soc., 139, 2068–2080. *3 citations pages 228, 260, et 291*

[Dufresne et al., 2013] Dufresne, J.-L., Foujols, M.-A., Denvil, S., Caubel, A., Marti, O., Aumont, O., Balkanski, Y., Bekki, S., Bellenger, H., Benshila, R., et al. (2013). Climate change projections using the ipsl-cm5 earth system model : from cmip3 to cmip5. *Climate Dynamics*, 40(9-10) :2123–2165. *(Cité page 9)*

[Edwards, 1992] Edwards, D. (1992). Genln2 : A general line-by-line atmospheric transmittance and radiance model. version 3.0 : Description and users guide. *Unknown*. *(Cité page 66)*

[El Khair et al., 2017] El Khair, Z. M., Joly, L., Cousin, J., Decarpenterie, T., Dumelié, N., Maamary, R., Chauvin, N., and Durry, G. (2017). In situ measurements of methane in the troposphere and the stratosphere by the ultra light spectrometer amulse. *Applied Physics B*, 123(12) :281. *(Cité page 138)*

[Emmons et al., 2010] Emmons, L. K., Walters, S., Hess, P. G., Lamarque, J.-F., Pfister, G. G., Fillmore, D., Granier, C., Guenther, A., Kinnison, D., Laepple, T., et al. (2010). Description and evaluation of the model for ozone and related chemical tracers, version 4 (mozart-4). *(Cité page 122)*

[Engelen and Bauer, 2014] Engelen, R. and Bauer, P. (2014). The use of variable co2 in the data assimilation of airs and iasi radiances. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(680) :958–965. *2 citations pages 11 et 136*

[Engelen et al., 2009] Engelen, R. J., Serrar, S., and Chevallier, F. (2009). Four-dimensional data assimilation of atmospheric co2 using airs observations. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 114(D3). *(Cité page 11)*

[English et al., 1999] English, S., Eyre, J., and Smith, J. (1999). A cloud-detection scheme for use with satellite sounding radiances in the context of data assimilation for numerical weather prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 125(559) :2359–2378. *(Cité page 118)*

[English and Hewison, 1998] English, S. J. and Hewison, T. J. (1998). Fast generic millimeter-wave emissivity model. In *Microwave Remote Sensing of the Atmosphere and Environment*, volume 3503, pages 288–301. International Society for Optics and Photonics. *(Cité page 69)*

[Eyre, 1991] Eyre, J. (1991). A fast radiative transfer model for satellite sounding systems. *ECMWF Tech. Memo 176*. *(Cité page 67)*

[Eyre, 1992] Eyre, J. (1992). A bias correction scheme for simulated tovs brightness temperatures. *ECMWF Tech. Memo.* *(Cité page 111)*

[Eyre, 1989] Eyre, J. R. (1989). Inversion of cloudy satellite sounding radiances by nonlinear optimal estimation. i : Theory and simulation for tovs. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 115(489) :1001–1026. *(Cité page 90)*

[F. Richardson, 1922] F. Richardson, L. (1922). *Weather Prediction by Numerical Process*, volume 20. *(Cité page 86)*

[Farman et al., 1985] Farman, J. C., Gardiner, B. G., and Shanklin, J. D. (1985). Large losses of total ozone in antarctica reveal seasonal clox/nox interaction. *Nature*, 315(6016) :207. *(Cité page 38)*

[Feng et al., 2008] Feng, L., Brugge, R., Hólm, E., Harwood, R., O'Neill, A., Filipiak, M., Froidevaux, L., and Livesey, N. (2008). Four-dimensional variational assimilation of ozone profiles from the microwave limb sounder on the aura satellite. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 113(D15). *(Cité page 261)*

[Flato, 2011] Flato, G. M. (2011). Earth system models : an overview. *Wiley Interdisciplinary Reviews : Climate Change*, 2(6) :783–800. *(Cité page 9)*

[Flemming et al., 2015] Flemming, J., Huijnen, V., Arteta, J., Bechtold, P., Beljaars, A., Blechschmidt, A.-M., Diamantakis, M., Engelen, R., Gaudel, A., Inness, A., et al. (2015). Tropospheric chemistry in the integrated forecasting system of ecmwf. *Geoscientific model development*, 8(9). *(Cité page 124)*

[Flemming and Inness, 2013] Flemming, J. and Inness, A. (2013). Volcanic sulfur dioxide plume forecasts based on uv satellite retrievals for the 2011 grímsvötn and the 2010 eyjafjallajökull eruption. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 118(17) :10–172. *(Cité page 11)*

[Flemming et al., 2009] Flemming, J., Inness, A., Flentje, H., Huijnen, V., Moinat, P., Schultz, M., and Stein, O. (2009). Coupling global chemistry transport models to ecmwf's integrated forecast system. *Geoscientific Model Development*, 2 :253–265. *(Cité page 11)*

[Flemming et al., 2011] Flemming, J., Inness, A., Jones, L., Eskes, H., Huijnen, V., Schultz, M., Stein, O., Cariolle, D., Kinnison, D., and Brasseur, G. (2011). Forecasts and assimilation experiments of the antarctic ozone hole 2008. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 11(5) :1961–1977. *(Cité page 11)*

[Fortuin and Langematz, 1995] Fortuin, J. P. and Langematz, U. (1995). Update on the global ozone climatology and on concurrent ozone and temperature trends. In *Atmospheric Sensing and Modelling*, volume 2311, pages 207–217. International Society for Optics and Photonics. *(Cité page 310)*

[Fountoukis and Nenes, 2007] Fountoukis, C. and Nenes, A. (2007). Isorropia ii : a computationally efficient thermodynamic equilibrium model for k+–ca 2+–mg 2+–nh 4+–na+–so 4 2—no 3—cl—h 2 o aerosols. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7(17) :4639–4659. *(Cité page 127)*

[Fourrié and Rabier, 2004] Fourrié, N. and Rabier, F. (2004). Cloud characteristics and channel selection for iasi radiances in meteorologically sensitive areas. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 130(600) :1839–1856. *(Cité page 118)*

[Fourrié and Thépaut, 2003] Fourrié, N. and Thépaut, J.-n. (2003). Evaluation of the airs near-real-time channel selection for application to numerical weather prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 129(592) :2425–2439. *(Cité page 228)*

[Gambacorta and Barnet, 2012] Gambacorta, A. and Barnet, C. D. (2012). Methodology and information content of the noaa nesdis operational channel selection for the cross-track infrared sounder (cris). *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 51(6) :3207–3216. *(Cité page 148)*

[Gambacorta and Barnet, 2013] Gambacorta, A. and Barnet, C. D. (2013). Methodology and information content of the noaa nesdis operational channel selection for the cross-track infrared sounder (cris). *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 51(6) :3207–3216. *2 citations pages 228 et 231*

[Gaudel et al., 2018] Gaudel, A., Cooper, O., Ancellet, G., Barret, B., Boynard, A., Burrows, J., Clerbaux, C., Coheur, P.-F., Cuesta, J., Cuevas, E., et al. (2018). Tropospheric ozone assessment report : Present-day distribution and trends of tropospheric ozone relevant to climate and global atmospheric chemistry model evaluation. *Elementa : Science of the Anthropocene*, 6(1) :39. *2 citations pages 47 et 356*

[Geer et al., 2006] Geer, A., Peubey, C., Bannister, R., Brugge, R., Jackson, D., Lahoz, W., Migliorini, S., O'Neill, A., and Swinbank, R. (2006). Assimilation of stratospheric ozone from mipas into a global general-circulation model : The september 2002 vortex split. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society : A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, 132(614) :231–257. *(Cité page 261)*

[Geiß et al., 2017] Geiß, A., Wiegner, M., Bonn, B., Schäfer, K., Forkel, R., von Schneidemesser, E., Münkel, C., Chan, K. L., and Nothard, R. (2017). Mixing layer height as an indicator for urban air quality ? *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(8) :2969–2988. *(Cité page 152)*

[Ghil, 1989] Ghil, M. (1989). Meteorological data assimilation for oceanographers. part i : Description and theoretical framework. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, 13(3-4) :171–218. *(Cité page 89)*

[Gilbert and Lemaréchal, 1989] Gilbert, J. C. and Lemaréchal, C. (1989). Some numerical experiments with variable-storage quasi-newton algorithms. *Mathematical programming*, 45(1-3) :407–435. *(Cité page 92)*

[Grell and Baklanov, 2011] Grell, G. and Baklanov, A. (2011). Integrated modeling for forecasting weather and air quality : A call for fully coupled approaches. *Atmospheric Environment*, 45(38) :6845–6851. *(Cité page 10)*

[Grell et al., 2005] Grell, G. A., Peckham, S. E., Schmitz, R., McKeen, S. A., Frost, G., Skamarock, W. C., and Eder, B. (2005). Fully coupled "online" chemistry within the wrf model. *Atmospheric Environment*, 39(37) :6957–6975. *(Cité page 124)*

[Guidard et al., 2011] Guidard, V., Fourrié, N., Brousseau, P., and Rabier, F. (2011). Impact of iasi assimilation at global and convective scales and challenges for the assimilation of cloudy scenes. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137(661) :1975–1987. *2 citations pages 8 et 118*

[Guth et al., 2016] Guth, J., Josse, B., Marécal, V., Joly, M., and Hamer, P. D. (2016). First implementation of secondary inorganic aerosols in the mocage version r2. 15.0 chemistry transport model. *(Cité page 122)*

[Han and McNally, 2010] Han, W. and McNally, A. (2010). The 4d-var assimilation of ozone-sensitive infrared radiances measured by iasi, qj roy. meteor. soc., 136, 2025–2037. *2 citations pages 228 et 260*

[Han, 2006] Han, Y. (2006). Jcsda community radiative transfer model (crtm) : Version 1. *(Cité page 66)*

[Harris and Kelly, 2001] Harris, B. and Kelly, G. (2001). A satellite radiance-bias correction scheme for data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 127(574) :1453–1468. *(Cité page 111)*

[Herbin and Dubuisson, 2016] Herbin, H. and Dubuisson, P. (2016). *Observation infrarouge de l'atmosphère terrestre*. ISTE editions. *(Cité page 235)*

[Hilton et al., 2012] Hilton, F., Armante, R., August, T., Barnet, C., Bouchard, A., Camy-Peyret, C., Capelle, V., Clarisse, L., Clerbaux, C., Coheur, P.-F., et al. (2012). Hyperspectral earth observation from IASI : five years of accomplishments. *bulletin of the american meteorological Society*, 93(3) :347–370. *(Cité page 80)*

[Hollingsworth and Lönnberg, 1986] Hollingsworth, A. and Lönnberg, P. (1986). The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radiosonde data. part i : The wind field. *Tellus A*, 38(2) :111–136. *(Cité page 107)*

[Hollingsworth et al., 1986] Hollingsworth, A., Shaw, D., Lönnberg, P., Illari, L., Arpe, K., and Simmons, A. (1986). Monitoring of observation and analysis quality by a data assimilation system. *Monthly Weather Review*, 114(5) :861–879. *(Cité page 107)*

[Hólm et al., 1999] Hólm, E., Untch, A., Simmons, A., Saunders, R., Bouttier, F., and Andersson, E. (1999). Multivariate ozone assimilation in four-dimensional data assimilation. In *Pp. 89–94 in Proceedings of the SODA Workshop on Chemical Data Assimilation, 9–10 December 1998, KNMI, De Bilt, The Netherlands.* *(Cité page 310)*

[Hólm et al., 2000] Hólm, E., Untch, A., Simmons, A., Saunders, R., Bouttier, F., and Andersson, E. (2000). Multivariate ozone assimilation. In *Pp. 305–308 in Proceedings of the Third International Symposium on Assimilation of Observations in Meteorology and Oceanography, 7–11 June 1999, Quebec City, Canada, TD 986, WMO, Geneva, Switzerland.* *(Cité page 310)*

[Hólm and Kral, 2012] Hólm, E. V. and Kral, T. (2012). *Flow-dependent, geographically varying background error covariances for 1D-VAR applications in MTG-IRS L2 Processing.* European Centre for Medium-Range Weather Forecasts. *(Cité page 232)*

[Horowitz et al., 2003] Horowitz, L. W., Walters, S., Mauzerall, D. L., Emmons, L. K., Rasch, P. J., Granier, C., Tie, X., Lamarque, J.-F., Schultz, M. G., Tyndall, G. S., et al. (2003). A global simulation of tropospheric ozone and related tracers : Description and evaluation of mozart, version 2. *Journal of geophysical research : Atmospheres*, 108(D24). *(Cité page 11)*

[Hourdin et al., 2006] Hourdin, F., Musat, I., Bony, S., Braconnot, P., Codron, F., Dufresne, J.-L., Fairhead, L., Filiberti, M.-A., Friedlingstein, P., Grandpeix, J.-Y., et al. (2006). The lmdz4 general circulation model : climate performance and sensitivity to parametrized physics with emphasis on tropical convection. *Climate Dynamics*, 27(7-8) :787–813. *(Cité page 175)*

[Huijnen et al., 2010] Huijnen, V., Eskes, H., Poupkou, A., Elbern, H., Boersma, K., Foret, G., Sofiev, M., Valdebenito, A., Flemming, J., Stein, O., et al. (2010). Comparison of omi no 2 tropospheric columns with an ensemble of global and european regional air quality models. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(7) :3273–3296. *(Cité page 122)*

[Ide et al., 1997] Ide, K., Courtier, P., Ghil, M., and Lorenc, A. C. (1997). Unified notation for data assimilation : Operational, sequential and variational (gtspecial issueltdata assimilation in meteology and oceanography : Theory and practice). *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II*, 75(1B) :181–189. *(Cité page 87)*

[Inness et al., 2013] Inness, A., Baier, F., Benedetti, A., Bouarar, I., Chabrillat, S., Clark, H., Clerbaux, C., Coheur, P., Engelen, R., Errera, Q., et al. (2013). The macc reanalysis : an 8 yr data set of atmospheric composition. *Atmospheric chemistry and physics*, 13(8) :4073–4109. *(Cité page 11)*

[Inness et al., 2015] Inness, A., Blechschmidt, A.-M., Bouarar, I., Chabrillat, S., Crepulja, M., Engelen, R., Eskes, H., Flemming, J., Gaudel, A., Hendrick, F., et al. (2015). Data assimilation of satellite-retrieved ozone, carbon monoxide and nitrogen dioxide

with ecmwf's composition-ifs. *Atmospheric chemistry and physics*, 15(9) :5275–5303. *(Cité page 291)*

[Inness et al., 2009] Inness, A., Flemming, J., Suttie, M., and Jones, L. (2009). Gems data assimilation system for chemically reactive gases. *European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF), Technical Memoradum*, (587). *(Cité page 11)*

[Jackson, 2007] Jackson, D. (2007). Assimilation of eos mls ozone observations in the met office data-assimilation system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society : A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, 133(628) :1771–1788. *(Cité page 261)*

[Jacquinet-Husson et al., 2011] Jacquinet-Husson, N., Crepeau, L., Armante, R., Boutammine, C., Chédin, A., Scott, N., Crevoisier, C., Capelle, V., Boone, C., Poulet-Crovisier, N., et al. (2011). The 2009 edition of the geisa spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(15) :2395–2445. *(Cité page 66)*

[Jazwinski, 1970] Jazwinski, A. (1970). Stochastic process and filtering theory, academic press. *A subsidiary of Harcourt Brace Jovanovich Publishers*. *(Cité page 90)*

[John and Buehler, 2004] John, V. and Buehler, S. (2004). The impact of ozone lines on amsu-b radiances. *Geophysical research letters*, 31(21). *(Cité page 260)*

[Joly et al., 2016] Joly, L., Maamary, R., Decarpenterie, T., Cousin, J., Dumelié, N., Chauvin, N., Legain, D., Tzanos, D., and Durry, G. (2016). Atmospheric measurements by ultra-light spectrometer (amulse) dedicated to vertical profile in situ measurements of carbon dioxide (co2) under weather balloons : Instrumental development and field application. *Sensors*, 16(10) :1609. *(Cité page 138)*

[Kai et al., 2011] Kai, F. M., Tyler, S. C., Randerson, J. T., and Blake, D. R. (2011). Reduced methane growth rate explained by decreased northern hemisphere microbial sources. *Nature*, 476(7359) :194. *(Cité page 42)*

[Karbou et al., 2006] Karbou, F., Gérard, É., and Rabier, F. (2006). Microwave land emissivity and skin temperature for amsu-a and-b assimilation over land. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society : A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, 132(620) :2333–2355. *(Cité page 8)*

[Karion et al., 2010] Karion, A., Sweeney, C., Tans, P., and Newberger, T. (2010). Aircore : An innovative atmospheric sampling system. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 27(11) :1839–1853. *(Cité page 180)*

[Khalil and Rasmussen, 1994] Khalil, M. and Rasmussen, R. (1994). Global decrease in atmospheric carbon monoxide concentration. *Nature*, 370(6491) :639. *(Cité page 44)*

[Kiehl and Trenberth, 1997] Kiehl, J. T. and Trenberth, K. E. (1997). Earth's annual global mean energy budget. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 78(2) :197–208. *(Cité page 41)*

[Kinnison et al., 2007] Kinnison, D., Brasseur, G., Walters, S., Garcia, R., Marsh, D., Sassi, F., Harvey, V., Randall, C., Emmons, L., Lamarque, J.-F., et al. (2007). Sensitivity of chemical tracers to meteorological parameters in the mozart-3 chemical transport model. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 112(D20). *(Cité page 11)*

[Klinker et al., 2000] Klinker, E., Rabier, F., Kelly, G., and Mahfouf, J.-F. (2000). The ecmwf operational implementation of four-dimensional variational assimilation. iii : Experimental results and diagnostics with operational configuration. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 126(564) :1191–1215. *(Cité page 86)*

[Kneizys et al., 1988] Kneizys, F. X., Shettle, E., Abreu, L., Chetwynd, J. H., and Anderson, G. P. (1988). Users guide to lowtran 7. Technical report, AIR FORCE GEOPHYSICS LAB HANSCOM AFB MA. *(Cité page 66)*

[Krinner et al., 2005] Krinner, G., Viovy, N., de Noblet-Ducoudré, N., Ogée, J., Polcher, J., Friedlingstein, P., Ciais, P., Sitch, S., and Prentice, I. C. (2005). A dynamic global vegetation model for studies of the coupled atmosphere-biosphere system. *Global Biogeochemical Cycles*, 19(1). *(Cité page 175)*

[Krol et al., 2005] Krol, M., Houweling, S., Bregman, B., Broek, M. v., Segers, A., Velthoven, P. v., Peters, W., Dentener, F., and Bergamaschi, P. (2005). The two-way nested global chemistry-transport zoom model tm5 : algorithm and applications. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5(2) :417–432. *(Cité page 11)*

[Lahoz et al., 2007] Lahoz, W., Geer, A., Bekki, S., Bormann, N., Ceccherini, S., Elbern, H., Errera, Q., Eskes, H., Fonteyn, D., Jackson, D., et al. (2007). The assimilation of envisat data (asset) project. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7(7) :1773–1796. *(Cité page 127)*

[Lakshmivarahan and Lewis, 2013] Lakshmivarahan, S. and Lewis, J. M. (2013). Nudging methods : a critical overview. In *Data Assimilation for Atmospheric, Oceanic and Hydrologic Applications (Vol. II)*, pages 27–57. Springer. *(Cité page 86)*

[Le Moigne et al., 2018] Le Moigne, P., Albergel, C., Boone, A., Belamari, S., Decharme, B., Dumont, M., Masson, V., et al. (2018). Surfex scientific documentation. *Note de centre (CNRM/GMME), Météo-France, Toulouse, France*. *(Cité page 9)*

[Lefevre et al., 1994] Lefevre, F., Brasseur, G., Folkins, I., Smith, A., and Simon, P. (1994). Chemistry of the 1991–1992 stratospheric winter : Three-dimensional model simulations. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 99(D4) :8183–8195. *(Cité page 126)*

[Liang et al., 2017] Liang, A., Gong, W., Han, G., and Xiang, C. (2017). Comparison of satellite-observed xco2 from gosat, oco-2, and ground-based tccon. *Remote Sensing*, 9(10) :1033. *(Cité page 174)*

[Liebe, 1989] Liebe, H. J. (1989). Mpm—an atmospheric millimeter-wave propagation model. *International Journal of Infrared and millimeter waves*, 10(6) :631–650. *(Cité page 67)*

[Liu and Rabier, 2002] Liu, Z.-Q. and Rabier, F. (2002). The interaction between model resolution, observation resolution and observation density in data assimilation : A one-dimensional study. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society : A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, 128(582) :1367–1386. *(Cité page 117)*

[Lönnberg and Hollingsworth, 1986] Lönnberg, P. and Hollingsworth, A. (1986). The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radiosonde data part ii : The covariance of height and wind errors. *Tellus A*, 38(2) :137–161. *(Cité page 107)*

[Lorenc, 1986] Lorenc, A. C. (1986). Analysis methods for numerical weather prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 112(474) :1177–1194. *2 citations pages 89 et 91*

[Lu et al., 1997] Lu, R., Turco, R. P., and Jacobson, M. Z. (1997). An integrated air pollution modeling system for urban and regional scales : 2. simulations for scaqs 1987. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 102(D5) :6081–6098. *(Cité page 123)*

[Lupu and McNally, 2013] Lupu, C. and McNally, A. P. (2013). *Wind tracing with ozone-sensitive radiances from SEVIRI*. European Centre for Medium-Range Weather Forecasts. *(Cité page 228)*

[Madec et al., 2015] Madec, G. et al. (2015). Nemo ocean engine. *(Cité page 9)*

[Mahfouf and Rabier, 2000] Mahfouf, J.-F. and Rabier, F. (2000). The ecmwf operational implementation of four-dimensional variational assimilation. ii : Experimental results with improved physics. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 126(564) :1171–1190. *(Cité page 86)*

[Malardel, 2005] Malardel, S. (2005). Fondamentaux de météorologie. *Cépadues éditions*. *3 citations pages 54, 61, et 357*

[Matricardi, 2003] Matricardi, M. (2003). *RTIASI-4, a new version of the ECMWF fast radiative transfer model for the infrared atmospheric sounding interferometer*. European Centre for Medium-Range Weather Forecasts. *(Cité page 67)*

[Matricardi, 2005] Matricardi, M. (2005). *The inclusion of aerosols and clouds in RTIASI, the ECMWF fast radiative transfer model for the infrared atmospheric sounding interferometer*. European Centre for Medium-Range Weather Forecasts. *(Cité page 67)*

[Matricardi, 2008] Matricardi, M. (2008). *The generation of RTTOV regression coefficients for IASI and AIRS using a new profile training set and a new line-by-line database*. European Centre for Medium-Range Weather Forecasts. *3 citations pages 67, 68, et 357*

[Matricardi et al., 2004] Matricardi, M., Chevallier, F., Kelly, G., and Thépaut, J.-N. (2004). An improved general fast radiative transfer model for the assimilation of radiance observations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 130(596) :153–173. *(Cité page 67)*

[McElroy et al., 1986] McElroy, M. B., Salawitch, R. J., Wofsy, S. C., and Logan, J. A. (1986). Reductions of antarctic ozone due to synergistic interactions of chlorine and bromine. *Nature*, 321(6072) :759. *(Cité page 38)*

[McNally, 2002] McNally, A. (2002). A note on the occurrence of cloud in meteorologically sensitive areas and the implications for advanced infrared sounders. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 128(585) :2551–2556. *(Cité page 118)*

[McNally and Watts, 2003] McNally, A. and Watts, P. (2003). A cloud detection algorithm for high-spectral-resolution infrared sounders. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 129(595) :3411–3423. *(Cité page 118)*

[Megie et al., 1994] Megie, G., Bonte, J., Carlier, P., Feugier, A., et al. (1994). Ozone et propriétés oxydantes de la troposphère. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 49(1) :83–104. *(Cité page 49)*

[Membrive, 2016] Membrive, O. (2016). *Caractérisation de la distribution verticale des gaz à effet de serre CO2 et CH4 par mesures sous ballons. Application à la validation d'observations satellites*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI. *2 citations pages 182 et 360*

[Membrive et al., 2017] Membrive, O., Crevoisier, C., Sweeney, C., Danis, F., Hertzog, A., Engel, A., Bönisch, H., and Picon, L. (2017). Aircore-hr : a high-resolution column sampling to enhance the vertical description of ch4 and co2. *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(6) :2163–2181. *(Cité page 180)*

[Menut et al., 2014] Menut, L., Bessagnet, B., Khvorostyanov, D., Beekmann, M., Blond, N., Colette, A., Coll, I., Curci, G., Foret, G., Hodzic, A., et al. (2014). Chimere 2013 : a model for regional atmospheric composition modelling. *Geoscientific model development*, 6(4) :981–1028. *(Cité page 122)*

[Migliorini, 2015] Migliorini, S. (2015). Optimal ensemble-based selection of channels from advanced sounders in the presence of cloud. *Monthly Weather Review*, 143(9) :3754–3773. *(Cité page 234)*

[Moncet et al., 2008] Moncet, J.-L., Uymin, G., Lipton, A. E., and Snell, H. E. (2008). Infrared radiance modeling by optimal spectral sampling. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 65(12) :3917–3934. *(Cité page 66)*

[Morcrette et al., 2009] Morcrette, J.-J., Boucher, O., Jones, L., Salmond, D., Bechtold, P., Beljaars, A., Benedetti, A., Bonet, A., Kaiser, J., Razinger, M., et al. (2009). Aerosol analysis and forecast in the european centre for medium-range weather forecasts integrated forecast system : Forward modeling. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 114(D6). *(Cité page 11)*

[Morgan et al., 2004] Morgan, J. A., Mosier, A. R., Milchunas, D. G., LeCain, D. R., Nelson, J. A., and Parton, W. J. (2004). Co2 enhances productivity, alters species composition, and reduces digestibility of shortgrass steppe vegetation. *Ecological applications*, 14(1) :208–219. *(Cité page 41)*

[Météo-France, 2019] Météo-France (2019). Le système climatique (fonctionnement, composantes) - Météo-France. *(Cité page 22)*

[Oki and Sud, 1998] Oki, T. and Sud, Y. (1998). Design of total runoff integrating pathways (trip)—a global river channel network. *Earth interactions*, 2(1) :1–37. *(Cité page 9)*

[Olivier Talagrand, 2018] Olivier Talagrand, K. L. e. J. P. (2018). Que sont les modèles numériques de circulation de l'atmosphère et de l'océan ? comment sont-ils construits et utilisés ? *(Cité page 9)*

[Pailleux, 1996] Pailleux, J. (1996). Impact des mesures satellitales sur la prévision numérique. *(Cité page 102)*

[Papaud and Poisson, 1985] Papaud, A. and Poisson, A. (1985). Le cycle du carbone et sa perturbation par les activités humaines : un aperçu du problème. *Oceanologica acta*, 8(2) :133–145. *(Cité page 40)*

[Parrish et al., 2002] Parrish, D., Trainer, M., Hereid, D., Williams, E., Olszyna, K., Harley, R., Meagher, J., and Fehsenfeld, F. (2002). Decadal change in carbon monoxide to nitrogen oxide ratio in us vehicular emissions. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 107(D12) :ACH–5. *(Cité page 44)*

[Parrish and Derber, 1992] Parrish, D. F. and Derber, J. C. (1992). The national meteorological center's spectral statistical-interpolation analysis system. *Monthly Weather Review*, 120(8) :1747–1763. *2 citations pages 107 et 231*

[Pereira and Berre, 2006] Pereira, M. B. and Berre, L. (2006). The use of an ensemble approach to study the background error covariances in a global nwp model. *Monthly weather review*, 134(9) :2466–2489. *(Cité page 108)*

[Peters et al., 1995] Peters, L. K., Berkowitz, C. M., Carmichael, G. R., Easter, R. C., Fairweather, G., Ghan, S. J., Hales, J. M., Leung, L. R., Pennell, W. R., Potra, F. A., et al. (1995). The current state and future direction of eulerian models in simulating

the tropospheric chemistry and transport of trace species : a review. *Atmospheric Environment*, 29(2) :189–222. *(Cité page 122)*

[Peubey and McNally, 2009] Peubey, C. and McNally, A. (2009). Characterization of the impact of geostationary clear-sky radiances on wind analyses in a 4d-var context. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 135(644) :1863–1876. *(Cité page 260)*

[Peuch et al., 2000] Peuch, A., Thépaut, J.-N., and Pailleux, J. (2000). Dynamical impact of total-ozone observations in a four-dimensional variational assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 126(566) :1641–1659. *(Cité page 260)*

[Phillips, 1982] Phillips, N. A. (1982). On the completeness of multi-variate optimum interpolation for large-scale meteorological analysis. *Monthly Weather Review*, 110(10) :1329–1334. *(Cité page 86)*

[Rabier et al., 2000] Rabier, F., Järvinen, H., Klinker, E., Mahfouf, J.-F., and Simmons, A. (2000). The ecmwf operational implementation of four-dimensional variational assimilation. i : Experimental results with simplified physics. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 126(564) :1143–1170. *(Cité page 86)*

[Rabier et al., 1998] Rabier, F., McNally, A., Andersson, E., Courtier, P., Unden, P., Eyre, J., Hollingsworth, A., and Bouttier, F. (1998). The ecmwf implementation of three-dimensional variational assimilation (3d-var). ii : Structure functions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 124(550) :1809–1829. *(Cité page 86)*

[Ramanathan et al., 1987] Ramanathan, V., Callis, L., Cess, R., Hansen, J., Isaksen, I., Kuhn, W., Lacis, A., Luther, F., Mahlman, J., Reck, R., et al. (1987). Climate-chemical interactions and effects of changing atmospheric trace gases. *Reviews of Geophysics*, 25(7) :1441–1482. *(Cité page 124)*

[Randerson et al., 2007] Randerson, J., Van der Werf, G., Giglio, L., Collatz, G., and Kasibhatla, P. (2007). Global fire emissions database, version 2 (gfedv2. 1). *Data set. Available on-line [http ://daac. ornl. gov/] from Oak Ridge National Laboratory Distributed Active Archive Center, Oak Ridge, Tennessee, USA doi*, 10. *(Cité page 175)*

[Raynaud, 2013] Raynaud, L. (2013). Estimation des variances d'erreur de prévision pour l'assimilation de données. *Météorologie*, (80) :48–58. *(Cité page 107)*

[Richardson, 1922] Richardson, L. F. (1922). Weather prediction by numerical methods. *Cambridge : Cambridge University Press*. *(Cité page 86)*

[Rodgers, 2000] Rodgers, C. D. (2000). *Inverse methods for atmospheric sounding : theory and practice*, volume 2. World scientific. *(Cité page 235)*

[Rodgers and Connor, 2003] Rodgers, C. D. and Connor, B. J. (2003). Intercomparison of remote sounding instruments. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 108(D3). *(Cité page 235)*

[Rothman et al., 1987] Rothman, L., Gamache, R., Goldman, A., Brown, L., Toth, R., Pickett, H., Poynter, R., Flaud, J.-M., Camy-Peyret, C., Barbe, A., et al. (1987). The hitran database : 1986 edition. *Applied Optics*, 26(19) :4058–4097. *(Cité page 66)*

[Rouil et al., 2009] Rouil, L., Honore, C., Vautard, R., Beekmann, M., Bessagnet, B., Malherbe, L., Meleux, F., Dufour, A., Elichegaray, C., Flaud, J.-M., et al. (2009). Prev'air : an operational forecasting and mapping system for air quality in europe. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 90(1) :73–84. *(Cité page 127)*

[Salas y Melia, 2002] Salas y Melia (2002). A global coupled sea ice–ocean model. *Ocean Modelling*, 4(2) :137–172. *(Cité page 9)*

[Saunders et al., 2018] Saunders, R., Hocking, J., Turner, E., Rayer, P., Rundle, D., Brunel, P., Vidot, J., Roquet, P., Matricardi, M., Geer, A., et al. (2018). An update on the rttov fast radiative transfer model (currently at version 12). *Geoscientific Model Development*, 11(7) :2717–2737. *2 citations pages 66 et 68*

[Saunders et al., 1999] Saunders, R., Matricardi, M., and Brunel, P. (1999). An improved fast radiative transfer model for assimilation of satellite radiance observations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 125(556) :1407–1425. *(Cité page 67)*

[Saunders and Kriebel, 1988] Saunders, R. W. and Kriebel, K. T. (1988). An improved method for detecting clear sky and cloudy radiances from avhrr data. *International Journal of Remote Sensing*, 9(1) :123–150. *(Cité page 230)*

[Schultz et al., 2017] Schultz, M. G., Schröder, S., Lyapina, O., Cooper, O. R., Galbally, I., Petropavlovskikh, I., Von Schneidemesser, E., Tanimoto, H., Elshorbany, Y., Naja, M., et al. (2017). Tropospheric ozone assessment report : Database and metrics data of global surface ozone observations. *Elementa : Science of the Anthropocene*, 5. *(Cité page 47)*

[Scott, 1974] Scott, N. (1974). A direct method of computation of the transmission function of an inhomogeneous gaseous medium—i : Description of the method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 14(8) :691–704. *(Cité page 66)*

[Scott and Chedin, 1981] Scott, N. and Chedin, A. (1981). A fast line-by-line method for atmospheric absorption computations : The automatized atmospheric absorption atlas. *Journal of Applied Meteorology*, 20(7) :802–812. *(Cité page 66)*

[Semane et al., 2009] Semane, N., Peuch, V.-H., Pradier, S., Desroziers, G., Amraoui, L. E., Brousseau, P., Massart, S., Chapnik, B., and Peuch, A. (2009). On the extraction of wind information from the assimilation of ozone profiles in météo–france 4-d-var operational nwp suite. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(14) :4855–4867. *4 citations pages 10, 12, 228, et 261*

[Sherlock and Saunders, 1999] Sherlock, V. and Saunders, R. (1999). Isem-6 : Infrared surface emissivity model for rttov-6. *NWP-SAF report.* *2 citations pages 69 et 230*

[Solomon et al., 1986] Solomon, S., Garcia, R. R., Rowland, F. S., and Wuebbles, D. J. (1986). On the depletion of antarctic ozone. *Nature*, 321(6072) :755. *(Cité page 38)*

[Solomon et al., 2016] Solomon, S., Ivy, D. J., Kinnison, D., Mills, M. J., Neely, R. R., and Schmidt, A. (2016). Emergence of healing in the antarctic ozone layer. *Science*, 353(6296) :269–274. *(Cité page 39)*

[Stajner et al., 2008] Stajner, I., Wargan, K., Pawson, S., Hayashi, H., Chang, L.-P., Hudman, R. C., Froidevaux, L., Livesey, N., Levelt, P. F., Thompson, A. M., et al. (2008). Assimilated ozone from eos-aura : Evaluation of the tropopause region and tropospheric columns. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 113(D16). *(Cité page 261)*

[Stein et al., 2015] Stein, J., Pailleux, J., Stoop, F., Amodei, M., Dupont, O., Mayoka, M., Pouponneau, F., and Sanchez, I. (2015). La vérification des prévisions météorologiques à météo-france. *La Météorologie.* *(Cité page 7)*

[Stewart et al., 2014] Stewart, L., Dance, S. L., Nichols, N. K., Eyre, J., and Cameron, J. (2014). Estimating interchannel observation-error correlations for iasi radiance data in the met office system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(681) :1236–1244. *(Cité page 234)*

[Stocker et al., 2013] Stocker, T. F., Qin, D., Plattner, G.-K., Tignor, M., Allen, S. K., Boschung, J., Nauels, A., Xia, Y., Bex, V., Midgley, P. M., et al. (2013). Climate change 2013 : The physical science basis. *(Cité page 42)*

[Stockwell et al., 1997] Stockwell, W. R., Kirchner, F., Kuhn, M., and Seefeld, S. (1997). A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 102(D22) :25847–25879. *(Cité page 126)*

[Stolarski et al., 1991] Stolarski, R. S., Bloomfield, P., McPeters, R. D., and Herman, J. R. (1991). Total ozone trends deduced from nimbus 7 toms data. *Geophysical Research Letters*, 18(6) :1015–1018. *(Cité page 38)*

[Strow et al., 2003] Strow, L. L., Hannon, S. E., De Souza-Machado, S., Motteler, H. E., and Tobin, D. (2003). An overview of the airs radiative transfer model. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 41(2) :303–313. *(Cité page 66)*

[Takahashi et al., 2009] Takahashi, T., Sutherland, S. C., Wanninkhof, R., Sweeney, C., Feely, R. A., Chipman, D. W., Hales, B., Friederich, G., Chavez, F., Sabine, C., et al. (2009). Climatological mean and decadal change in surface ocean pco2, and net sea–air co2 flux over the global oceans. *Deep Sea Research Part II : Topical Studies in Oceanography*, 56(8-10) :554–577. *(Cité page 175)*

[Talmage and Gobler, 2010] Talmage, S. C. and Gobler, C. J. (2010). Effects of past, present, and future ocean carbon dioxide concentrations on the growth and survival of larval shellfish. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(40) :17246–17251. *(Cité page 41)*

[Tans, 2009] Tans, P. P. (2009). System and method for providing vertical profile measurements of atmospheric gases. US Patent 7,597,014. *(Cité page 180)*

[Thompson et al., 2019] Thompson, A. M., Smit, H. G., Witte, J. C., Stauffer, R. M., Johnson, B. J., Morris, G., von der Gathen, P., Van Malderen, R., Davies, J., Piters, A., et al. (2019). Ozonesonde quality assurance : The josie–shadoz (2017) experience. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 100(1). *(Cité page 140)*

[Tournier et al., 1995] Tournier, B., Armante, R., and Scott, N. (1995). Stransac-93 et 4a-93 : Developpement et validation des nouvelles versions des codes de transfert radiatif pour application au projet iasi. *Internal Rep. LMD*, (201). *(Cité page 66)*

[Tulet et al., 2000] Tulet, P., Crassier, V., and Rosset, R. (2000). Air pollution modelling at a regional scale. *Environmental Modelling & Software*, 15(6-7) :693–701. *(Cité page 123)*

[Turner et al., 2017] Turner, A. J., Frankenberg, C., Wennberg, P. O., and Jacob, D. J. (2017). Ambiguity in the causes for decadal trends in atmospheric methane and hydroxyl. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 114(21) :5367–5372. *(Cité page 42)*

[Turner, 1995] Turner, D. (1995). Absorption coefficient estimation using a two-dimensional interpolation procedure. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 53(6) :633–637. *(Cité page 66)*

[Van Peet et al., 2018] Van Peet, J. C., Kelder, H. M., Levelt, P. F., et al. (2018). Simultaneous assimilation of ozone profiles from multiple uv-vis satellite instruments. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18(3) :1685–1704. *(Cité page 48)*

[Vautard et al., 2001] Vautard, R., Beekmann, M., Roux, J., and Gombert, D. (2001). Validation of a hybrid forecasting system for the ozone concentrations over the paris area. *Atmospheric Environment*, 35(14) :2449–2461. *(Cité page 123)*

[Vincensini, 2013] Vincensini, A. (2013). *Contribution de iasi à l'estimation des paramètres des surfaces continentales pour la prévision numérique du temps*. PhD

thesis, École Doctorale Sciences de l'univers, de l'environnement et de l'espace .... *2 citations pages 145 et 230*

[Voldoire et al., 2013] Voldoire, A., Sanchez-Gomez, E., y Mélia, D. S., Decharme, B., Cassou, C., Sénési, S., Valcke, S., Beau, I., Alias, A., Chevallier, M., et al. (2013). The cnrm-cm5. 1 global climate model : description and basic evaluation. *Climate Dynamics*, 40(9-10) :2091–2121. *(Cité page 9)*

[Wargan et al., 2005] Wargan, K., Stajner, I., Pawson, S., Rood, R. B., and Tan, W.-w. (2005). Assimilation of ozone data from the michelson interferometer for passive atmospheric sounding. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society : A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, 131(611) :2713–2734. *(Cité page 260)*

[Weston et al., 2014] Weston, P., Bell, W., and Eyre, J. (2014). Accounting for correlated error in the assimilation of high-resolution sounder data. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(685) :2420–2429. *2 citations pages 233 et 234*

Liste des acronymes et abréviations

Symbols

1D-Var Assimilation variationnelle uni-dimensionnelle. 190

3D-Var Assimilation variationnelle tri-dimensionnelle. 86

4A Atlas Automatisé des Absorptions Atmosphériques. 65

4D-En-Var Assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle 4D-Var, dans laquelle on utilise un ensemble de prévisions pour le calcul du gradient, à la place du modèle adjoint. 86

4D-Var Assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle. 86

A

AASQA Associations Agréées Surveillance Qualité de l'Air. 152

ADEME Agence De l'Environnement et de la Maîtrise de l'Énergie. 152

AIRS Atmospheric InfraRed Sounder. 8, 104

AMSU-A Advanced Microwave Sounding Unit-A. 8, 78, 102

AMSU-B Advanced Microwave Sounding Unit-B. 8, 102

AMULSE Atmospheric Measurement Ultralight SpEctrometer. 138

APOGEE Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs. 139

AROME Applications de la Recherche à l'Opérationnel à Méso-Echelle. 92

ARPEGE Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle. 93

ASCAT Advanced Scatterometer. 78

ATOVS Advanced TOVS. 66, 104

AVHRR Advanced Very High Resolution Radiometer. 77

B

BLUE Best Linear Unbiased Estimator. 90

C

C-IFS Composition Integrated Forecasting System. 124

CAMEL Combined ASTER MODIS Emissivity over Land. 68

CAMS Copernicus Atmospheric Monitoring Services. 11, 220

CEPMMT Centre Européen de Prévision Météorologique à Moyen Terme. iv, 11, 66, 67, 93

CERFACS Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique. 9

CMTR Community Radiative Transfer Model. 66

CNES Centre National d'Études spatiales. iv

CNRM Centre National de Recherche Météorologique. iii

COMPAS Contrôle Monitoring Prévisibilité et Adaptations Statistiques. 95

CrIS Cross-Track Infrared Sounder. 104

D

DirOp Direction des Opérations pour la Prévision. 95

DMSP Defense Meteorological Satellite Program. 76, 103

E

ECCC Environnement et Changement Climatique Canada. 12

ECUME Exchange Coefficients from Unified Multi-campaigns Estimates. 96

ENVISAT ENVIronment SATellite. 260

ESA European Space Agency. 98

ESRL Earth System Research Laboratory. 124, 175

EUMETSAT EUropean organisation for the exploitation of METeorological SATellites. iv, 66, 98

F

FASTEM FAST Emissivity Model. 68

FY Feng-Yun. 74

G

GEISA Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques. 65

GELATO Global Experimental Leads and ice for ATmosphere and Ocean. 9

GENLEN2 General Line-by-Lyne Atmospheric Transmittance and Radiance Model. 65

GEORAD GEOstationary RADiances. 103

GEOS Geostationary Operational Environmental Satellite. 74

GFEDv2 Global Fire of Emission Database version 2. 175

GFS Global Forecasting System. 9

GIEC Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat. 41

GMAP Groupe de Modélisation et d'Assimilation pour la Prévision. iii

GMS Geostationary Meteorological Satellite. 74

GNSS Global Navigation Satellite System. 102

GOES Geostationary Operational Environmental Satellite. 102

GOME-2 Global Ozone Monitoring Experiment-2. 11, 78

GOMS Geostationary Operational Meteorological Satellite. 74

GOSAT Greenhouse Gases Observing Satellite. 174

GPS Global Positioning System. 103

GRAS Global Navigation System Satellite Receiver for Atmospheric Sounding. 77

GSMA Groupe de Spectrométrie Moléculaire Atmosphérique. iv, 138

H

HIRS High Resolution Infrared Radiation Sounder. 77, 102

HITRAN HIgh Resolution TRANsmission molecular absorption database. 66

I

IASI Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge. 77, 87

IFOV IASI Field Of View. 82

IFS Integrated Forecasting System. 9, 93

IIS Integrated Imaging System. 78

IJPS Initial Joint Polar-Orbiting Operational Satellite System. 77

INCA INteraction avec la Chimie et les Aérosols. 125

INSAT Indian National Satellite System. 74

IPSL Institut Pierre et Simon Laplace. 9, 125

ISEM Infrared Surface Emissivity Model. 68

K

KCARTA KCompressed Atmospheric Radiative Transfer Algorithm. 66

KNMI Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut. 122

L

LATMOS Laboratoire Atmosphères, Milieux, Observations Spatiales. iv

LBLMTR Line-By-Line Radiative Transfer Model. 65

LMD Laboratoire de Météorologie Dynamique. 125

LMDZ Laboratoire de Météorologie Dynamique Zoom. 175

LOWTRAN LOW resolution TRANsmittance code. 65

LSCE Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement. 125

M

MACC-III Monitoring Atmospheric Composition Climate-III. 174

MESO-NH-C MESOscale Non-Hydrostatic numerical model and Chemistry. 123

. 76

MHS Microwave Humidity Sounder. 78

MIPAS Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding. 260

MLS Microwave Limb Sounder. 10, 260

MOCAGE Modèle de Chimie Atmosphérique à Grande Échelle. 122

MODTRAN MODerate resolution TRANsimittance code. 65

MOZART Model for OZone And Related chemical Tracers. 11, 122

MPM Millimeter-wave Propagation Model. 66

MSG Meteosat Second Generation. 74

MSU Microwave Sounding Unit. 102

MTSAT Multifunctional Transport Satellite. 74

N

NCAR National Center for Atmospheric Research. 122

NEMO Nucleus for European Modelling of the Ocean. 9

NESDIS National Environmental Satellite, Data, and Information Service. 102

NMC National Meteorological Center. 107

NOAA National Oceanic and Atmospheric Administration. 76, 102

O

OASIS Ocean Atmosphere Sea Ice Soil. 9

OCO-2 Orbiting Carbon Observatory 2. 174

OMI Ozone Monitoring Instrument. 11, 47

OMM Organisation Météorologique Mondiale. 7

OMPS-NP Ozone Mapping and Profiling Suite - Nadir Profiler. 12

ORCHIDEE Organazing Carbon and Hydrology in Dynamic Ecosystems. 175

OSS Optimal Spectral Sampling. 66

OSTIA Operational Sea Surface Temperature and Ice Analysis. 96

P

PDF Probability Density Function. 88

Petaflops Puissance de un million de milliards d'opérations par seconde. 6

PNT Prévision Numérique du Temps. 86

R

RTTOV Radiative Transfer for Tiros Operational Vertical sounder (TIROS : Television InfraRed Observation Satellite). 66

S

SAF Satellite Application Facility. 66

SARTA Stand Alone AIRS Radiative Transfer Algorithm. 66

SBUV-2 Solar Backscatter UltraViolet-2. 11

SCIAMACHY SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CartograpHY. 11

SEVIRI Spinning Enhanced Visible and InfraRed Imager. 114

SHADOZ Southern Hemisphere Additional OZonesondes. 150

SMOG the Surface Meteorology and Ozone Generation. 123

SSMI Special Sensor Microwave Imager. 103

Suomi-NPP Suomi National Polar-orbiting Partnership. 76

SURFEX SURFace EXternalisée. 9, 96

T

TCCON Total Carbon Column Observing Network. 174

Teraflops Puissance de mille milliards d'opérations par seconde. 6

TGM Third Generation Models. 122

TIROS Television Infra-Red Observation Satellites. 74

TM5 Tracer Model version 5. 11, 122

TOAR The Tropospheric Ozone Assessment Report. 47

TOVS TIROS (Television Infra-Red Observation Satellites) Operational Vertical Sounder. 66, 102

TRIP Total Runoff Integrating Pathways. 9

U

UKMO UK Met Office. 9

UTLS Upper Troposphere Lower Stratosphere. 99

V

VTPR Vertical Temperature Profile Radiometer. 102

W

WDCGG World Data Centre for Greenhouse Gases. 175

WOUDC World Ozone and Ultraviolet Data Center. 150

WRF-CHEM Weather Research and Forecasting/Chemistry. 124

Table des figures

1 Spectre de IASI en température de brillance en fonction des numéros de canal et des nombres d'onde, simulé avec un profil standard de moyenne latitude. Les points rouges représentent les canaux sensibles au CO_2, en vert les canaux sensibles aux surfaces et en bleu les canaux sensibles à la vapeur d'eau, utilisés en opérationnel à Météo-France au début de cette étude. 5

2 Évolutions temporelles des erreurs quadratiques moyennes annuelles (EQM) (moyennes glissantes) de la prévision à 24 h d'échéance du réseau de 00 UTC du géopotentiel à 500 hPa (m) par rapport aux mesures des radiosondages sur l'hémisphère nord de 1998 à 2019 pour différents modèles globaux : Français (en kaki), CEPMMT (en rouge), Anglais (en bleu), Américain (en vert), Canadien (en rose), Allemand (en marron) et Japonais (en violet). [D'après ECMWF (https://apps.ecmwf.int/wmolcdnv/scores/time_series/msl)]. 7

3 Schéma de synthèse résumant le contexte actuel de l'étude (a) et l'objectif de la thèse (b). 13

1.1 Schéma du système climatique présentant les différentes composantes du système : atmosphère, hydrosphère, biosphère, lithosphère, cryosphère et anthroposphère, ainsi que leurs interactions en termes d'échanges d'énergie, d'eau et de carbone. Les perturbateurs du système y sont aussi représentés. 21

1.2 Schéma de la structure verticale de l'atmosphère et du profil de température idéalisés en fonction de la pression atmosphérique et de l'altitude correspondant au profil global moyenné annuellement. 23

1.3 Coupe méridienne de l'atmosphère terrestre représentant la circulation et le transport dans les grandes cellules troposphériques et stratosphériques. . 25

1.4 Schéma représentant les principaux processus de la chimie atmosphérique. Source : [Delmas et al., 2005]. 27

1.5 Représentation schématique des temps caractéristiques moyens des transports (a) horizontaux et (b) verticaux des constituants chimiques dans l'atmosphère. Source : [Delmas et al., 2005]. 30

1.6 Représentation schématique de la distribution verticale des principaux constituants gazeux atmosphériques en concentration en molécules (a) et en rapport de mélange (b). Source : [Delmas et al., 2005]. 31

1.7 Schéma comparant des temps de vie et des échelles spatiales pour quelques constituants atmosphériques. Source : [Delmas et al., 2005]. 32

1.8 Moyennes zonales du rapport de mélange d'ozone (en ppv) en janvier (a) et juillet (b) 2017 modélisées par le modèle de chimie transport MOCAGE de Météo-France. 34

1.9 Colonne totale d'ozone (en unités Dobson, ou DU) en fonction de la latitude et du mois. Ces valeurs sont issues des mesures de l'instrument satellitaire TOMS (Total Ozone Mapping Spectrometer), moyennées sur les années 1997 à 2001. Source : [Delmas et al., 2005] 34

1.10 Schéma de l'équilibre naturel de production et destruction de l'ozone stratosphérique ne considérant que les espèces oxygénées. 36
1.11 Courbes de l'évolution de la moyenne mensuelle de la colonne totale d'ozone mesurée par satellite aux régions polaires (données moyennées sur les latitudes supérieur à 63°), pour le mois de mars dans l'hémisphère nord, et le mois d'octobre dans l'hémisphère sud (a). Évolution du profil vertical d'ozone mesuré par radiosondage sous ballon en octobre au-dessus du pôle Sud, et en mars à la station arctique de Sodankylä (67°N) (b). Source : [Delmas et al., 2005]. 37
1.12 Moyenne mensuelle (courbe noire) et tendance (courbe rouge) de la concentration de CO_2 mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï de 1958 à 2019. Données disponibles : Dr. Pieter Tans, NOAA/ESRL (www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends/) and Dr. Ralph Keeling, Scripps Institution of Oceanography (scrippsco2.ucsd.edu/). 41
1.13 Moyenne mensuelle (courbe noire) et tendance (courbe rouge) de la concentration de CH_4 mesurée à partir du réseau mondial de sites d'échantillonnage de l'air depuis 1983. Données disponibles : Ed Dlugokencky, NOAA/ESRL (www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends_ch4/). 42
1.14 Moyenne mensuelle (courbe noire) et moyenne mobile (courbe rouge) de la concentration de CO mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï à partir de 1989. Données disponibles : (www.esrl.noaa.gov/gmd). 43
1.15 Moyenne mensuelle (courbe noire) et moyenne mobile (courbe rouge) de la concentration de N_2O mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï à partir de 1989. Données disponibles : (www.esrl.noaa.gov/gmd). 44
1.16 Diagramme d'isoplèthe d'ozone [ppb] en fonction du taux moyen d'émission de NO_x et de COV en $[10^{12}.cm^{-2}.s^{-1}]$. D'après [Delmas et al., 2005]. 46
1.17 Moyenne journalière de colonne totale d'ozone en unité Dobson [DU] mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï à partir de 1963. Données disponibles : (www.esrl.noaa.gov/gmd). 47
1.18 Valeurs médianes mensuelles de l'ozone troposphérique nocture mesurée à l'Observatoire de Mauna Loa, Hawaï d'octobre 1973 à décembre 2017. Les valeurs médianes mensuelles sont calculées avec toutes les données disponibles pour les mois pour lesquels au moins 50 % des données sont disponibles. Les tendances de cette figure sont basées sur une régression linéaire par les moindres carrés ajustée aux valeurs médianes mensuelles, et rapportées avec des intervalles de confiance et des valeurs p de 95 %. Figure extraite des travaux de [Gaudel et al., 2018]. 47
1.19 Moyenne mensuelle de colonne d'ozone troposphérique en unité Dobson [DU] entre 0 et 6 km d'altitude pour les mois de janvier (a), avril (b), juillet (c) et octobre (d) 2010. Données disponibles : http://www.temis.nl/protocols/tropo.html. 48
1.20 Schéma représentant la haute troposphère et la basse stratosphère (UTLS) et les principaux échanges chimique entre ces deux réservoirs. 50

2.1 Schéma illustrant le spectre électromagnétique en longueur d'onde (en m) et en fréquence (en Hz). 54
2.2 Schéma d'un angle solide élémentaire. Source : [Delmas et al., 2005]. 55
2.3 Schéma de la luminance provenant d'un angle solide élémentaire $d\omega$ et traversant une surface élémentaire dS. Source : [Delmas et al., 2005]. 55
2.4 Schéma des interactions entre un rayonnement électromagnétique incident et une particule de matière. 56

2.5 Représentation des fonctions de Planck pour quelques températures du corps noir. (a) Émission dans le domaine solaire pour une température de 5750 K. (b) Émission dans le domaine thermique pour des températures de 280, 300 et 320 K. Source : [Delmas et al., 2005]. 58
2.6 Bilan énergétique annuel terrestre moyen dans l'atmosphère terrestre en W.m^{-2} [Delmas et al., 2005]. 60
2.7 Transmittance atmosphérique (%) en fonction des longueurs d'onde comprises entre 0 et 15 μm et les bandes d'absorption associées aux principaux gaz atmosphériques. D'après [Malardel, 2005]. 61
2.8 Schéma de plusieurs transmissions atmosphériques (τ) (à gauche) et des fonctions de poids (K(z)) associées (à droite) en fonction de l'altitude (z). [D'après les cours d'assimilation de données satellitaires dispensés par le CEPMMT] 62
2.9 Bilan radiatif à travers un élément de volume. 64
2.10 Schéma simplifié de la luminance spectrale quittant l'atmosphère vers un capteur satellitaire. 64
2.11 Histogrammes de fréquence des bases de données échantillonnées pour les profils de température (a), d'humidité spécifique (b), d'ozone (c) en fonction des niveaux modèle. Les Figures montrent également les profils composites du minimum (ligne pointillée de gauche), du maximum (ligne pointillée de droite), de la moyenne (ligne noire épaisse) et du mode (ligne discontinue) [D'après [Chevallier et al., 2006]]. 68
2.12 Représentation des 83 profils d'entraînement de la base de données pour le dioxyde de carbone (a), le monoxyde de carbone (b), le méthane (c) et le protoxyde d'azote (d) en fonction de la pression atmosphérique [D'après [Matricardi, 2008]]]. 68

3.1 Image en couleur naturelle issue de Meteosat à 0°. Source : www.eumetsat.org. 74
3.2 Schéma du réseau mondial d'observation opérationnelle des principaux satellites météorologiques. Source : www.nesdisia.noaa.gov/globaleocoordination.html. 75
3.3 Schéma des orbites de satellites défilants passant par les pôles et de l'orbite des satellites géostationnaires. Source : Météo-France. 76
3.4 Schéma de la position des instruments sur le satellite Metop [source : www.eumetsat.int/website/home/Satellites/CurrentSatellites/Metop/MetopDesign/index.html]. 77
3.5 Schémas de l'interféromètre IASI vu de dessous et du dessus [source : http://www.meteo-spatiale.fr/src/profils_atmospheriques_iasi.php]. . . 78
3.6 Schéma optique d'un interféromètre de Michelson. 79
3.7 Exemple d'un spectre IASI en Température de Brillance [K] en fonction du numéro de canal IASI et du nombre d'onde. 80
3.8 Schéma de la géométrie de balayage de IASI [Cayla, 2001] et orientation des pixels IASI et IIS. 82

4.1 Illustration schématique d'observations projetées dans la représentation du modèle à l'aide de l'opérateur d'observation. À gauche un spectre IASI en Température de Brillance [K] dans la bande sensible au CO_2 et à droite les jacobiens de température pour 4 canaux IASI (en couleur) et le profil de température [K] associé (en noir). 88
4.2 Représentation schématique de la minimisation variationnelle de la fonction de coût dans un espace à deux variables. 92

4.3 Représentation schématique de l'assimilation 4D-Var. On cherche à obtenir la trajectoire analysée du modèle (courbe en tireté bleu) qui soit à la fois proche des observations (cercles verts) et de l'ébauche fournie par une prévision antérieure (courbe en tiretés rouges). 93
4.4 Représentation schématique de la résolution horizontale de la maille variable sur le globe et de la résolution verticale sur 105 niveaux du modèle global ARPEGE. 96
4.5 Représentation schématique de la chaîne opérationnelle pour ARPEGE. . . 97
4.6 Représentation de l'évolution du nombre d'observations conventionnelles utilisées dans le modèle global ARPEGE depuis 2002. 98
4.7 Cartes du pointage d'observations conventionnelles assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des stations au sol et à bord de navires (a) et des bouées (b). 100
4.8 Cartes du pointage d'observations conventionnelles assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des données d'avions (a) et des profileurs de vent (b).101
4.9 Représentation de l'évolution du nombre d'observations satellitaires utilisées de le modèle global ARPEGE depuis 2002. 103
4.10 Cartes du pointage d'observations satellitaires assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des instruments IASI (a) et des diffusiomètres (b). . 105
4.11 Cartes du pointage d'observations satellitaires assimilées par ARPEGE pour le réseau 00 UTC des géostationnaires (a) et des imageurs micro-ondes (b). 106
4.12 Représentation schématique de la structure de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche **B** pour l'exemple du système à quatre variables dont les erreurs sont notées ε_1, ε_2, ε_3 et ε_4. 108
4.13 Écarts-types d'erreur d'observation σ^o prescrits pour les canaux sensibles au CO_2 des données des sondeurs infrarouges AIRS, IASI et CrIS. 109
4.14 Cartes du pointage d'observations satellitaires pour le réseau 00 UTC de l'instrument IASI avant screening (a) et après screening (b). 114
4.15 Monitoring des statistiques d'innovation du canal 49 (657 cm^{-1}) de l'instrument IASI à bord de Metop-A (a) et de l'intégration verticale des données de radio-occultation GPS à bord de Metop-A (b) sur deux mois de données (novembre et décembre 2018). 115
4.16 Monitoring des statistiques d'innovation du canal 2 (6,25 μm) de l'instrument SEVIRI à bord de Meteosat 8 (a) et du canal 5 (55,5 GHz) de l'instrument SSMI/S à bord de DMSP (d) sur deux mois de données (novembre et décembre 2018). 116
4.17 Fonctions de poids des canaux IASI assimilés en opérationnel dans le modèle de PNT global ARPEGE sur mer (a) et sur terre (b). En noir les canaux sensibles au CO_2, en bleu ceux de la bande sensible à la vapeur d'eau et en rouge les canaux fenêtres. 118
4.18 Schéma du sondage infrarouge reçu par l'instrument IASI en ciel clair et nuageux. 119
4.19 Schéma de la répartition du nombre d'observations (conventionnelles et satellitaires) utilisées en novembre 2018 dans le système global de PNT ARPEGE. 119

5.1 Illustration des principaux processus physico-chimiques impliqués dans l'évolution spatiale et temporelle des distributions d'espèces chimiques dans l'atmosphère. 124
5.2 Schéma représentant un exemple d'architecture 3D qu'utilise le modèle MOCAGE pour réaliser des simulations numériques de la composition de l'atmosphère et sa structure verticale utilisant une coordonnée verticale hybride (σ,P). 125

6.1 Évolution de la concentration en CO_2 (a) et de CH_4 mesurée par AMULSE sous ballon captif dans la couche limite atmosphérique (21 profils) en fonction du temps. Campagne réalisée sur le site de Total à Lacq (France) pendant l'été 2017. Source : GSMA. 138
6.2 Image d'un radiosondage d'ozone (image de gauche) et d'une sonde OZONE (a). Image d'un radiosondage avec l'instrument AMULSE (image de droite) et de l'instrument AMULSE (b) sur le Campus de l'Université de Reims. . 139
6.3 Profil d'ozone (a), de dioxyde de carbone (b) et de méthane (c) mesurés pendant la campagne APOGEE le 17 avril 2018 à 10 UTC, à Reims, France 140
6.4 Représentation des profils de références en pointillés noirs de O_3 (a), CO_2 (b) et CH_4 utilisés par défauts dans le MTR RTTOV et des profils mesurés par radiosondage de O_3 en violet (a), CO_2 en rouge (b) et CH_4 en vert (c). Les zones grisées représentent les niveaux RTTOV pour lesquels les données mesurées sont manquantes. L'unité de concentration des espèces chimiques est donnée en [ppmv] le 17 avril 2018 à 10 UTC. 141
6.5 Tracé des pixels de IASI le 17 avril 2018 à 10 UTC dans le nord de la France (Point de lâcher : étoile rouge) en fonction de la couverture nuageuse AVHRR (Blanc : ciel clair, gris : ciel partiellement clair, noir : ciel nuageux) (a) et tracé des pixels de CrIS le 17 avril 2018 à 12 UTC sur la même zone que précédemment (b). 142
6.6 Tracés des pixels de SEVIRI le 17 avril 2018 à 10 UTC (a) et 12 UTC (b) autour de la zone de lâcher en fonction du type de nuage. La croix noire indique le point de lâcher du radiosondage. 144
6.7 Différence de température de brillance (T_b) [K] due à la perturbation des profils d'ozone (courbes en violet), de dioxyde de carbone (courbes en rouge) et de méthane (courbes en orange) pour l'ensemble des canaux contenus dans les spectres de IASI (a) et CrIS (b). Dans cette expérience les profils chimiques ont subi une perturbation de 10 %. 146
6.8 Différence de température de brillance (T_b) [K] due à l'utilisation des profils *in situ* d'ozone (courbes en violet), de dioxyde de carbone (courbes en rouge) et de méthane (courbes en orange) pour l'ensemble des canaux contenus dans les spectres de IASI (a) et CrIS (b). 147
6.9 Différences de Température de Brillance entre les observations réelles et simulées utilisant les profils chimiques de référence (en noir) et les profils chimiques *in situ* (en rouge) pour les 314 canaux IASI et les 330 canaux CrIS monitorés en opérationnel à Météo-France pour le cas d'étude du 17 avril 2018 à 10 UTC. 149
6.10 Carte des 40 stations (points rouges) des 345 lâchers des radiosondages d'ozone. 150
6.11 Moyennes plus ou moins les écarts-types des différences de Température de Brillance entre les observations réelles et simulées utilisant le profil d'ozone de référence (en noir) et les profils d'ozone mesurés *in situ* (en rouge) pour les 5500 (645 à 2020 cm^{-1}) premiers canaux IASI. 151
6.12 Profils d'ozone (a) et de méthane (b) issus des mesures *in situ* (ligne noire) comparé aux profils d'ébauche de O_3 et CH_4 issus de CAMS (ligne rouge) et de MOCAGE (ligne bleue) pour le cas d'étude du 17 avril 2018 à 10 UTC. Les profils de O_3 et CH_4 de référence sont représentés en tireté noir. 152
6.13 Profils verticaux des moyennes globales annuelles de la concentration de CO_2 issus de $REACO_2$ et le profil vertical issu de $REFCO_2$ en fonction de la pression. 176
6.14 Cartes des moyennes mensuelles de CO_2 pour les mois de février (a) et août (b) sur une période allant de 1994 à 2014 issue de $REACO_2$ à 1000 hPa. . . 177

6.15 Coupe latitudinale des moyennes de CO_2 par bande de 20° pour les mois de février 2014 (a) et août 2014 (c) en fonction de la pression ; Coupe latitudinale des écarts-types de CO_2 par bande de 20° pour les mois de février 2014 (b) et août 2014 (d) en fonction de la pression. 178
6.16 Coupe latitudinale des coefficients directeurs d'augmentation de la concentration de CO_2 annuelle en fonction de la pression (a) ; Courbe de la tendance annuelle de la concentration de CO_2 entre 1994 à 2014 dans une zone comprise entre 30°N et 50°N à 1000 hPa (b). 179
6.17 Profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ en tireté noir, $REACO_2$ en rouge, $CLIMCO_2$ en bleu en fonction de la pression (a) et erreur relative entre les profils de CO_2 ($REACO_2$/$REFCO_2$) en tireté noir et ($REACO_2$/$CLIMCO_2$) en rouge en fonction de la pression (b) pour le 14 février 2014 au point de longitude 35.72°E et de latitude -42.48°N. 181
6.18 Profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ en tireté noir, $REACO_2$ en rouge, $CLIMCO_2$ en bleu en fonction de la pression (a) et erreur relative entre les profils de CO_2 ($REACO_2$/$REFCO_2$) en tireté noir et ($REACO_2$/$CLIMCO_2$) en rouge en fonction de la pression (b) pour le 15 août 2014 au point de longitude 151.16°E et de latitude 39.46°N. 181
6.19 Schéma représentant les différentes étapes de mesures par l'instrument AirCore lors d'un radiosondage et l'analyse de l'échantillon par un analyseur. D'après [Membrive, 2016] 182
6.20 Comparaison du profil de CO_2 issu de $REFCO_2$ avec les profils de CO_2 issus de $CLIMCO_2$ et mesurés par des AirCores le 20-06-2015 (a), 12-02-2016 (b), 24-02-2017 (c) et 06-06-2018 (d). 183
6.21 Carte des 139 pixels IASI du 14 février 2014 (a) et des 119 pixels IASI du 15 août 2014 (b) utilisés pour les expériences de simulation. 184
6.22 Moyennes des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 (a) et les 119 pixels du 15 août 2014 (c) ; Écarts-types des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 (b) et les 119 pixels du 15 août 2014 (d). Les expériences de simulation ont utilisé les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ en noir, $REACO_2$ en rouge et $CLIMCO_2$ en bleu. 185
6.23 Moyennes des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 sur les 139 pixels du 14 février 2014 utilisant les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ (a) et $CLIMCO_2$ (c) ; écarts-types des différences de Température de Brillance (T_b) entre les observations réelles et simulées des canaux IASI sensibles au CO_2 le 14 février 2014 utilisant les profils de CO_2 issus de $REFCO_2$ (b) et $CLIMCO_2$ (d). Les expériences de simulation ont utilisé les 32 pixels situés dans l'hémisphère nord en bleu, les 55 pixels dans les Tropiques en vert et les 52 pixels dans l'hémisphère sud en rouge. 186

7.1 Représentation de la bande d'absorption de l'ozone sur un exemple du spectre IASI en Température de Brillance [K] en fonction du numéro de canal IASI et du nombre d'onde. Les 15 canaux sensibles à l'ozone sont représentés par les points violets (1479, 1509, 1513, 1521, 1536, 1574, 1579, 1585, 1587, 1626, 1639, 1643, 1652, 1658, 1671). 190
7.2 Moyenne des jacobiens de température (a) et des jacobiens normalisés d'humidité (b) et d'ozone (c) des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone pour les 161 profils. 191

7.3 Représentations de écarts-types d'erreur d'ébauche en température σ_T^b (a), en humidité $\sigma_{log(q)}^b$ (b) et en ozone $\sigma_{O_3}^b$ (c) pour O3REF en vert et O3MOC en rouge. 192
7.4 Représentation des écarts-types des innovations en rouge, des écarts-types d'erreur d'observation diagnostiqués en bleu et du bruit instrumental pour les 123 canaux opérationnels et les 15 canaux sensibles à l'ozone de IASI pour les expériences utilisant l'ébauche d'ozone issue de O3MOC (a) et O3REF (b). 193
7.5 Profils verticaux de réduction d'erreur d'analyse par rapport à l'ébauche en comparaison aux radiosondages en pourcentage [%] en utilisant comme ébauche en ozone O3REF (courbe verte) et O3MOC (courbe rouge) pour la température (a) et l'humidité (b) dans un cadre d'assimilation opérationnelle (123 canaux IASI). O3MOC+123 meilleure que O3REF+123 (bandes vertes). 194
7.6 Profils verticaux de réduction d'erreur d'analyse par rapport à l'ébauche en comparaison aux radiosondages en pourcentage [%] en utilisant comme ébauche en ozone O3MOC en assimilant 123 canaux (courbe rouge) et 138=123+15 canaux IASI sensibles à l'ozone (courbe bleue) pour la température (a) et l'humidité (b). O3MOC+138+XO3 meilleure que O3MOC+123+XO3 (bandes vertes) et inversement (bandes rouges). 196
7.7 Profils *in situ* de température (en noir) mesurés le 04 juillet 2017 à 02 UTC (a et b) et à 12 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 1 et EXP 2 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan). 221
7.8 Profils *in situ* de température (en noir) mesurés le 06 juin 2017 à 10 UTC (a et b) et 04 juillet 2017 à 09 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 3 et EXP 4 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan). 221
7.9 Profils *in situ* d'humidité (en noir) mesurés le 04 juillet 2017 à 02 UTC (a et b) et à 12 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 1 et EXP 2 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan). . . 222
7.10 Profils *in situ* d'humidité (en noir) mesurés le 06 juin 2017 à 10 UTC (a et b) et 04 juillet 2017 à 09 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche (en rouge) et aux profils restitués pour les expériences EXP 3 et EXP 4 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan). 222
7.11 Profils *in situ* d'ozone (en noir) mesurés le 04 juillet 2017 à 02 UTC (a et b) et à 12 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche de MOCAGE (en rouge) et CAMS (en orange) et aux profils restitués pour les expériences EXP 1 et EXP 2 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan). 223
7.12 Profils *in situ* d'ozone (en noir) mesurés le 06 juin 2017 à 10 UTC (a et b) et 04 juillet 2017 à 09 UTC (c et d) comparés aux profils d'ébauche de MOCAGE (en rouge) et CAMS (en orange) et aux profils restitués pour les expériences EXP 3 et EXP 4 utilisant respectivement l'ozone de MOCAGE (en bleu) et l'ozone de CAMS (en cyan). 223

8.1 Carte des sites de lancer des radiosondages (points rouges) et exemple des pixels IASI issus de Metop-A (en jaune) et de Metop-B (en bleu), collocalisés avec les différents radiosondages sur la fenêtre de zoom. 229
8.2 Matrice multi-variée des corrélations d'erreur d'ébauche en température (de 1 à 54) en humidité (de 55 à 108) et en ozone (de 109 à 162) estimée à l'aide de la méthode NMC. 232

8.3 Écarts-types des erreurs d'observations IASI [K] en fonction des 5500 (Bande 1 & 2) numéros de canaux et du nombre d'onde [cm^{-1}] (a) pour les erreurs d'observation issues des innovations (en rouge), diagnostiquées (en bleu) et le bruit instrumental à 280 K (en gris). 233
8.4 Matrice des corrélations d'erreur d'observation diagnostiquées pour les 5500 canaux IASI des bandes 1 et 2. 234
8.5 Fonctions de lissage (Averaging Kernel) de température (a), d'humidité (b) et d'ozone (c) issues des lignes de la matrice de fonction de lissage (AK) moyennée sur les 345 profils, tracées pour chaque niveaux MTR considérés en fonction de la pression atmosphérique. 236
8.6 Spectre infrarouge de IASI en température de brillance simulé avec un profil standard de moyenne latitude incluant les 15 canaux sensibles à l'ozone sélectionnés (cercles en bleu) et les 15 canaux sensibles à l'ozone sélectionnés par Collard (cercles en rouge). 238
8.7 Moyenne de jacobiens de température (a), d'humidité (b) et d'ozone (c) en fonction de la pression pour les 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés (en bleu) et sélectionnés par Collard (en rouge). En vert sont représenté les jacobiens des 4 canaux communs. 239

9.1 Coupe latitudinale d'un champ d'ozone sur la grille de MOCAGE en fonction des 60 niveaux modèle le 12 juillet 2016 à 03 H (a) et coupe latitudinale de ce même champ d'ozone extrapolé sur la grille d'ARPEGE en fonction des 105 niveaux modèle (b). 262
9.2 Moyenne et écart-type des innovations le 12 juillet 2016 de jour sur toutes les surfaces et tous cieux pour les expériences REF en vert (a) et EXP en rouge (b), puis sur toutes les surfaces en ciel clair pour les expériences REF (c) et EXP (d) et sur les surfaces océaniques en ciel clair pour les expériences REF (e) et EXP (f) en fonction les 314 canaux IASI monitorés et de 291 canaux sensibles à l'ozone. 264
9.3 Moyenne et écart-type des innovations le 12 novembre 2016 de jour sur toutes les surfaces et tous cieux pour les expériences REF en vert (a) et EXP en rouge (b), puis sur toutes les surfaces en ciel clair pour les expériences REF (c) et EXP (d) et sur les surfaces océaniques en ciel clair pour les expériences REF (e) et EXP (f) en fonction les 314 canaux IASI monitorés et de 291 canaux sensibles à l'ozone. 265
9.4 Jacobien de température, d'humidité et d'ozone des canaux 1530 et 1685 en fonction de la pression. 266
9.5 Innovations pour le canal IASI 1685 (1.066 cm^{-1}) le 12 juillet 2016 de jour sur toutes les surfaces et tous cieux pour les expériences REF en vert (a) et EXP en rouge (b), puis sur toutes les surfaces en ciel clair pour les expériences REF (c) et EXP (d) et sur les surfaces océaniques en ciel clair pour les expériences REF (e) et EXP (f). 267
9.6 Idem que pour la Figure 9.5 mais pour le 12 novembre 2016 de jour. 268
9.7 Idem que pour la Figure 9.5 mais pour le canal IASI 1530 (1.027,25 cm^{-1}). 269
9.8 Idem que pour la Figure 9.7 mais pour le 12 novembre 2016 de jour. 270
9.9 Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en température entre les expériences REF et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 10 septembre 2016 (a) et la période allant du 12 novembre au 31 décembre 2016 (b). 272
9.10 Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en humidité relative entre les expériences REF et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 10 septembre 2016 (a) et la période allant du 12 novembre au 31 décembre 2016 (b). 273

9.11 Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse de la composante zonale du vent entre les expériences REF et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 10 septembre 2016 (a) et la période allant du 12 novembre au 31 décembre 2016 (b). 274

9.12 Moyennes plus ou moins les écarts-types des différences de Température de Brillance entre les observations réelles et simulées utilisant le profil d'ozone de référence (en noir) et les profils d'ozone mesurés *in situ* (en rouge) (Figure 6.11) pour les 300 premiers canaux de IASI sensibles au dioxyde de carbone (645 à 720 cm^{-1}) premiers canaux IASI. Les points blancs représentent les canaux assimilés actuellement en opérationnel à Météo-France. 275

9.13 (Colonne de droite) Profils verticaux des moyennes des différences (obs - analyse) en ligne en tireté pour REF en rouge et EXP en noir et des moyennes des différences (obs - ébauche) en ligne continue pour REF en rouge et EXP en noir ; (Colonne de gauche) profils verticaux des différences relatives des écarts-types entre EXP et REF pour (obs - analyse) en ligne en tireté et (obs - échauche) en ligne continue avec les barres d'erreur associées à (obs - analyse) en ligne en tireté rouge et (obs - ébauche) en ligne continue bleue pour les radiosondages de température (en haut) et d'humidité (en bas) assimilés entre le 12 juillet et le 10 septembre 2016. 278

9.14 Idem que la Figure 9.13 mais pour la période entre le 08 novembre et le 31 décembre 2016. 279

9.15 (Colonne de droite) Profils verticaux des moyennes des différences (obs - analyse) en ligne en tireté pour REF en rouge et EXP en noir et des moyennes des différences (obs - ébauche) en ligne continue pour REF en rouge et EXP en noir ; (Colonne de gauche) profils verticaux des différences relatives des écarts-types entre EXP et REF pour (obs - analyse) en ligne en tireté et (obs - échauche) en ligne continue avec les barres d'erreur associées à (obs - analyse) en ligne en tireté rouge et (obs - ébauche) en ligne continue bleue pour les radiosondages de vent zonal (en haut) et méridien (en bas) assimilés entre le 12 juillet et le 10 septembre 2016. 280

9.16 Idem que la Figure 9.15 mais pour la période entre le 08 novembre et le 31 décembre 2016. 281

9.17 (Colonne de droite) Moyennes des différences (obs - analyse) en ligne en tireté pour REF en rouge et EXP en noir et moyennes des différences (obs - ébauche) en ligne continue pour REF en rouge et EXP en noir ; (Colonne de gauche) différences relatives des écarts-types entre EXP et REF pour (obs - analyse) en ligne en tireté et (obs - échauche) en ligne continue avec les barres d'erreur associées à (obs - analyse) en ligne en tireté rouge et (obs - ébauche) en ligne continue bleue pour les canaux des instruments satellitaires AMSU-A (en haut) et AMSU-B (en bas) assimilés entre le 12 juillet et le 10 septembre 2016. 282

9.18 Idem que la Figure 9.17 mais pour la période entre le 08 novembre et le 31 décembre 2016. 283

9.19 Moyennes (en ligne pleine) et écarts-types (en ligne tireté) des prévisions en température, humidité relative et vent par rapport à leurs propres analyses à échéance 72 H sur les Tropiques pour les expériences REF (en rouge) et EXP (en bleu) sur la période estivale du 12 juillet au 10 septembre 2016 (à gauche) et hivernale du 08 novembre au 31 décembre 2016 (à droite). . . . 285

9.20 Différences normalisées des erreurs quadratiques moyennes des prévisions de température (à gauche), d'humidité relative (au centre) et de vent (à droite) par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision dans les trois grands domaines : Nord, Tropiques et Sud pour les périodes estivales du 12 juillet au 10 septembre 2016 (en haut) et hivernale du 08 novembre au 31 décembre 2016 (en bas). 286
9.21 Écarts-types d'erreur d'observation diagnostiquées (a) et matrice de corrélation d'erreur d'observation diagnostiquées (b) en fonction des 138 canaux IASI (123 opérationnels + 15 O_3). 287
9.22 Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15 et EXP en fonction de la pression pour la période allant du 12 juillet au 31 août 2016. 289
9.23 Différences des erreurs quadratiques moyennes normalisées des prévisions de température (à gauche), d'humidité relative (au centre) et de vent (à droite) par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision dans les trois grands domaines : Nord, Tropiques et Sud pour la période estivale du 12 juillet au 31 août 2016. . . 290
9.24 Coupe latitudinale de la moyenne des écarts-types d'erreur d'ébauche d'ozone (a) et profil vertical moyen des écarts-types d'erreur d'ébauche d'ozone (b) calculées à partir de la méthode NMC et extrapolées sur les 105 niveaux d'ARPEGE. 291
9.25 Moyennes des ébauches (a), analyses (b) et incréments d'analyse (c) en ozone de l'expérience EXP15O3 de l'étape 3 du 12 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression. 293
9.26 Coupe latitudinale de la moyenne des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15O3 et EXP15 en fonction de la pression pour la période allant du 12 au 31 juillet 2016. 294
9.27 Biais des différences de prévision de température (à gauche), d'humidité relative (au centre) et de vent (à droite) par rapport à leurs propres analyses sur les niveaux de pression en fonction de l'échéance de prévision dans les trois grands domaines : Nord, Tropiques et Sud pour la période estivale du 12 juillet au 03 août 2016. 295
9.28 Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP et REF du 12 juillet 2016 au 10 septembre 2016 en fonction de la pression. 326
9.29 Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP et REF du 12 novembre 2016 au 31 décembre 2016 en fonction de la pression. 327
9.30 Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15 et EXP du 12 juillet 2016 au 31 août 2016 en fonction de la pression. 328
9.31 Coupe latitudinale des écarts-types des différences d'analyse en température (a), humidité relative (b) et de la composante zonale du vent (c) entre les expériences EXP15O3 et EXP15 du 12 juillet 2016 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression. 329
9.32 Moyennes des ébauches (a), analyses (b) et incréments d'analyse (c) en température de l'expérience EXP15O3 de l'étape 3 du 12 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression. 330

9.33 Moyennes des ébauches (a), analyses (b) et incréments d'analyse (c) en humidité spécifique de l'expérience EXP15O3 de l'étape 3 du 12 au 30 juillet 2016 en fonction de la pression. 331

Liste des tableaux

1.1 Tableau des caractéristiques des principaux constituants chimiques gazeux de l'atmosphère terrestre. D'après [Delmas et al., 2005]. 29

3.1 Principales régions spectrales, sensibilités radiométriques et principales applications de l'instrument IASI. 81

6.1 Caractéristiques techniques des instruments AMULSE et RS41 + OZONE. 139

7.1 Tableau synthétisant les résultats par la somme de réduction d'erreur relative sur tous les niveaux verticaux pour les expériences O3REF+123, O3MOC+123, O3MOC+123+XO3 et O3MOC+138+XO3. 196
7.2 Tableau synthétisant les différentes configurations des expériences de restitution. 220

8.1 Classement des nombres de canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés en fonction du pourcentage du DFS_{TOT} additionnel disponible normalisé. . . . 238
8.2 Liste des 15 canaux IASI sensibles à l'ozone sélectionnés et leur nombre d'onde associés. 239
8.3 Tableau récapitulatif des DFS en température, humidité et ozone des canaux opérationnels et des 15 canaux de Collard et sélectionnés supplémentaires. Résultats des expériences d'assimilation par les RED en température et humidité de l'ajout des 15 canaux de Collard et sélectionnés par rapport à l'assimilation seule des 122 canaux opérationnels. 239

9.1 Liste des 314 canaux IASI monitorés à Météo-France et des 123 canaux assimilés en opérationnel au début de l'étude sur mer et/ou sur terre en fonction de leur nombre d'onde et principales sensibilités. 324

Towards a better assimilation of infrared satellite observations by coupling meteorological and chemical models

Abstract:

The Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI) is the instrument that provides the most satellite observations to the ARPEGE (Action de Recherche Petite Échelle Grande Scale) Numerical Weather Prediction (NWP) model at Météo-France. This sensor was developed jointly by CNES (Centre National d'Études Spatiales) and EUMETSAT (European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites) and is carried on board the Metop-A, B and C polar orbiting satellites. The assimilation of these observations requires the use of a Radiative Transfer Model (RTM) called RTTOV at Météo-France. The latter uses an a priori knowledge of the most likely thermodynamic and chemical state of the atmosphere to simulate IASI observations. At Meteo-France, the background thermodynamic fields come from a short-term forecast provided by ARPEGE but the information on the chemical composition of the atmosphere comes from a single vertical reference profile for each chemical species, provided by RTTOV. However, this approximation has a significant impact on the quality of simulations and the use of infrared satellite observations for NWP. Chemistry Transport Models (CTM) are able to provide forecasts of the chemical composition of the atmosphere. At Météo-France, this CTM is called MOCAGE. This thesis therefore proposes a method toward a better assimilation of infrared satellite observations by coupling meteorological and chemical models. The first part of the work was to evaluate the sensitivity of infrared observations to some atmospheric compounds. To do so, we participated in the APOGEE (Atmospheric Profiles Of GreenhousE gases) measurement campaign, which enabled us to measure in situ profiles of CO_2, CH_4 and O_3. These data were used both to validate the quality of our simulations and as verification data to assess atmospheric chemical composition derived from CTM. We then supervised two Master 1 trainees to carry out an evolving climatology of CO_2 in order to improve the use of infrared satellite observations. From these studies, it appears that the quality of the simulations depends on the accuracy of the chemical information used and the chemical component with the greatest impact on the simulations is ozone. Thus, the rest of the thesis work was therefore focused on ozone. A first step was to prepare the assimilation of ozone-sensitive IASI channels. This work has shown both that the use of realistic ozone information from a CTM can better simulate ozone-sensitive observations and provide additional information, simultaneously improving temperature, humidity and ozone analyses [Coopmann et al., 2018]. Then a new channel selection of IASI ozone-sensitive highlighted 15 channels that also improve thermodynamic and chemical analyses. Finally, this channel selection was used in the four-dimensional data assimilation system (4D-Var) and a coupling was performed between the ARPEGE and MOCAGE models for ozone fields. The results show that the use of ozone from MOCAGE allows a better use of infrared satellite observations and has a positive impact on the quality of thermodynamic and ozone analyses but also on weather forecasts.

Keywords: Numerical Weather Prediction, Radiatif Transfer, Data assimilation, Chemistry Transport Model, Infrared Sounders, IASI, ozone

M. Olivier COOPMANN

Vers une meilleure assimilation des observations satellitaires infrarouges par le couplage des modèles météorologique et chimique

M. Vincent GUIDARD	CNRM-UMR 3589	Directeur de thèse
Mme Nadia FOURRIÉ	CNRM-UMR 3589	Co-directrice de thèse

Date de soutenance : vendredi 13 septembre 2019 à 10H

Lieu de soutenance : Centre International de Conférence, 42 Avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse

Résumé :

Le sondeur infrarouge hyperspectral IASI (Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge) est l'instrument qui fournit le plus d'observations satellitaires au modèle de Prévision Numérique du Temps (PNT) ARPEGE (Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle) à Météo-France. Ce capteur a été développé conjointement entre le CNES (Centre National d'Études Spatiales) et EUMETSAT (European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites) et est embarqué à bord des satellites défilants Metop-A, B et C. L'assimilation de ces observations requiert l'utilisation d'un Modèle de Transfert Radiatif (MTR) qui s'appelle RTTOV à Météo-France. Ce dernier utilise une connaissance a priori de l'état thermodynamique et chimique de l'atmosphère le plus probable pour simuler les observations IASI. À Météo-France, les champs d'ébauche thermodynamiques proviennent d'une prévision à courte échéance fournie par ARPEGE. Les ébauches de la composition chimique de l'atmosphère sont issues d'un unique profil vertical de référence pour chaque espèce chimique fourni par RTTOV. Cette approximation a un impact important sur la qualité des simulations et l'utilisation des observations satellitaires infrarouges pour la PNT. Les Modèles de Chimie Transport (MCT) sont capables de fournir des prévisions de la composition chimique de l'atmosphère. À Météo-France, ce MCT s'appelle MOCAGE. Ce travail de thèse propose une méthode permettant une meilleure assimilation des observations satellitaires infrarouges par un couplage des modèles météorologique et chimique. La première partie du travail consiste à évaluer la sensibilité des observations infrarouges à la chimie atmosphérique. Pour cela nous avons participé à la campagne de mesure APOGEE (Atmospheric Profiles Of GreenhousE gasEs) qui nous a permis de mesurer des profils in situ de CO_2, CH_4 et O_3. Ces données ont été utilisées à la fois pour valider la qualité de nos simulations et comme données de vérification pour évaluer les prévisions de composition chimique atmosphérique issus de MCT. Nous avons par la suite encadré deux stagiaires de Master 1 pour réaliser une climatologie évolutive de CO_2 afin d'améliorer l'utilisation des observations satellitaires infrarouges. De ces études, il ressort que la qualité des simulations dépend de la précision de l'ébauche chimique utilisée et que le constituant chimique ayant l'impact le plus important sur les simulations est l'ozone. La suite du travail de thèse s'est donc articulée autour de l'ozone. Une première étape a consisté à préparer l'assimilation de canaux IASI sensibles à l'ozone. Ce travail a montré à la fois que l'utilisation d'une ébauche réaliste d'ozone issue d'un MCT permet de mieux simuler les observations sensibles à l'ozone et d'apporter de l'information supplémentaire, améliorant simultanément les analyses de température, d'humidité et d'ozone [Coopmann et al., 2018]. Puis une nouvelle sélection de canaux IASI sensibles à l'ozone a mis évidence 15 canaux permettant également d'améliorer les analyses thermodynamiques et chimiques. Enfin cette sélection de canaux a été utilisée dans le système d'assimilation de données quadri-dimensionnel variationnel (4D-Var) et un couplage a été réalisé entre les modèles ARPEGE et MOCAGE pour les champs d'ozone. Les résultats montrent que l'utilisation de l'ozone de MOCAGE permet une meilleure utilisation des observations satellitaires infrarouges et a un impact positif sur la qualité des analyses thermodynamiques et d'ozone mais également sur les prévisions météorologiques.

Mots-clés : Prévision Numérique du Temps, Transfert Radiatif, Assimilation de données, Modèle de Chimie Transport, Sondeurs infrarouges, IASI, ozone

École Doctorale : Sciences de l'Univers, de l'Environnement et de l'Espace (SDU2E)

Spécialité : Océan, Atmosphère et Surfaces Continentales

Laboratoire : CNRM, Université de Toulouse, Météo-France et CNRS