



HAL
open science

Suivi de la concentration atmosphérique de CO₂ par satellite : performances et sensibilités des prochains concepts d'observation dans le proche infrarouge

Matthieu Dogniaux

► **To cite this version:**

Matthieu Dogniaux. Suivi de la concentration atmosphérique de CO₂ par satellite : performances et sensibilités des prochains concepts d'observation dans le proche infrarouge. Ingénierie de l'environnement. Institut Polytechnique de Paris, 2021. Français. NNT : 2021IPPAX119 . tel-03662470

HAL Id: tel-03662470

<https://theses.hal.science/tel-03662470>

Submitted on 9 May 2022

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.



INSTITUT
POLYTECHNIQUE
DE PARIS

NNT : 2021IPPAX119

Thèse de doctorat



Suivi de la concentration atmosphérique de CO₂ par satellite : performances et sensibilités des prochains concepts d'observation dans le proche infrarouge

Thèse de doctorat de l'Institut Polytechnique de Paris
préparée à l'École polytechnique

École doctorale n°626 École doctorale de l'Institut Polytechnique de Paris (EDIPP)
Spécialité de doctorat : Sciences de l'environnement

Thèse présentée et soutenue à Palaiseau, le 13 décembre 2021, par

MATTHIEU DOGNIAUX

Composition du Jury :

Frédéric Chevallier Directeur de recherche, LSCE, CEA	Président, Rapporteur
Hervé Herbin Professeur, LOA, Université de Lille	Rapporteur
Thomas Lauvaux Chargé de recherche, LSCE, CNRS	Examineur
Clémence Pierangelo Ingénieure, CNES	Examinatrice
Cyril Crevoisier Directeur de recherche, LMD, CNRS	Directeur de thèse
Laure Brooker Ingénieure, Airbus Defence and Space	Invitée

Remerciements

Cette thèse a été préparée au sein du Laboratoire de Météorologie Dynamique, sur son site de l'École polytechnique. Je veux d'abord remercier Philippe Drobinski, son directeur, pour l'accueil au sein du laboratoire, ainsi que toute l'équipe administrative.

Je tiens particulièrement à remercier Cyril Crevoisier, mon directeur de thèse, pour m'avoir d'abord accueilli en stage dans l'équipe ABC(t), puis ensuite re-cueilli en tant qu'ingénieur puis doctorant, alors que, infidèle, j'étais parti éprouver dans un secteur assez nevrosé ma motivation pour la recherche scientifique. Sa direction tout au long de ce travail de thèse a été essentielle. Alors que mes inclinations naturelles me portent à souvent voir le verre à moitié vide, ses conseils et son enthousiasme, distillés au cours de longues discussions, malgré la fatigue pandémique du Zoom, m'ont permis de comprendre la vraie valeur de mes résultats, et d'explorer des pistes que j'aurais peut-être abandonnées sans lui. Il a également su trouver comment me redonner de la motivation pour dépasser mes – rares – passages de flemme... Pour ces presque quatre années qui m'ont permis de découvrir tous les aspects du travail de recherche, merci beaucoup Cyril !

Je remercie également tous les membres du jury : Frédéric Chevallier, qui l'a présidé, et Hervé Herbin ont accepté le rôle de rapporteur, et Thomas Lauvaux et Clémence Pierangelo, celui d'examinateur. Je tiens également à remercier Laure Brooker, d'Airbus Defence and Space, pour avoir d'abord financé cette thèse, puis ensuite suivi mes travaux dans le cadre du projet SCARBO jusqu'à la soutenance.

Naturellement, mes remerciements se portent également vers tous les membres de l'équipe ABC(t) qui ont suivi et m'ont aidé dans mon travail : Raymond Armante, Nicolas Meilhac, Vincent Cassé, Virginie Capelle, Thibault Delahaye, Thibaud Thonat et Laurent Crépeau, ainsi que vers tous ceux qui ont été présents au fil de ces années : Jérôme Pernin, Jean-Michel Hartmann, Ha Tran, Agnès Perrin, Noëlle Scott et Alain Chédin, ou qui sont arrivés plus récemment : Leslie David et Wissam Fakhardji. Ma participation au projet SCARBO m'a également permis de collaborer avec différents groupes au-delà du LMD. Je remercie notamment Silvère Gousset et Étienne Le Coarer de l'Université de Grenoble-Alpes, Laurence Croizé et Yann Ferrec de l'ONERA, Lianghai Wu, Otto Hasekamp et Friedemann Reum du SRON, Bojan Sic de l'entreprise NOVELTIS, et Saturnino Val Serra et Laure Brooker d'Airbus Defence and Space.

Il y a le travail, mais aussi la camaraderie. J'aimerais exprimer mes vifs remerciements à Yoann Tellier et Axel Guedj, avec qui j'ai partagé mon bureau pour la plus grosse partie de cette thèse. Nous avons eu l'occasion de refaire le monde, de sauver la planète du réchauf-

fement climatique et de vaincre la pandémie bien plus d'une fois lors de nos discussions et pauses extensives... ce qui a sans aucun doute décuplé notre productivité. Leur présence au quotidien – à polytechnique ou à distance, lors des confinements – a été très précieuse et a indéniablement participé à la réussite de ce travail.

N'étant pas d'un caractère très cuisinier, j'aimerais inclure dans ces remerciements certaines institutions qui ont contribué ces dernières années à mon alimentation et à mes doses de café : le Magnan qu'on adore détester pour le pire, mais qu'on loue pour le meilleur, la cafétéria du grand hall et – confinement et télétravail obligeant – l'entreprise de surgelés Picard et le bar-tabac Le Rallye.

Ce travail n'aurait certainement pas été possible sans le soutien et la présence de tous mes formidables amis rencontrés au fil des ans : les cocos du lycée, le club des cinq de la prépa et tous mes affreux camarades d'école d'ingénieur. Je vous dois beaucoup, merci à tous.

Finalement, j'aimerais remercier mes parents, et ma famille en général. Merci à tous pour votre soutien, votre présence et votre confiance au fil des ans, à vous, aussi, je dois beaucoup.

Table des matières

1	Introduction	7
1.1	Un changement climatique d'origine anthropique	7
1.1.1	Évolution de la température globale et causes anthropiques	7
1.1.2	Objectifs politiques de lutte contre le changement climatique	10
1.2	Cycle et budget carbone	12
1.2.1	Cycle naturel	12
1.2.2	Contributions anthropiques et budget carbone global	13
1.2.3	Détermination des flux de CO ₂ : approches montantes et descendantes	17
1.3	Observations actuelles du CO ₂ atmosphérique et ambitions pour l'observation spatiale des émissions anthropiques	19
1.3.1	Mesures in-situ	20
1.3.2	Téledétection de la concentration atmosphérique de CO ₂ à partir de mesures satellites	22
1.3.3	Vers l'observation des émissions anthropiques de CO ₂ par imagerie spatiale	25
1.3.4	Observations par téledétection depuis les airs et le sol	27
1.4	Missions satellites passées et actuelles pour l'observation du CO ₂ dans le proche infrarouge	29
1.4.1	Missions satellites passées et actuelles	31
1.4.2	Limites actuelles des observations de la colonne totale de CO ₂ dans le proche infrarouge	33
1.5	Concepts planifiés ou à l'étude pour l'observation du CO ₂ par satellite dans le proche infrarouge	35
1.6	Motivation du travail de thèse	39
1.7	Plan du manuscrit	40
2	Modélisation directe du transfert radiatif dans l'infrarouge pour l'atmosphère terrestre	42
2.1	Introduction	42
2.2	La transmission atmosphérique, à la base du transfert radiatif	43
2.3	La spectroscopie moléculaire au service du calcul de l'absorption atmosphérique	44
2.3.1	Les raies d'absorption	44
2.3.2	Modélisation des profils de raies	48

2.3.3	Autres effets collisionnels	50
2.3.4	Les « sections efficaces »	52
2.3.5	Bases de données spectroscopiques	52
2.4	Propriétés optiques pour la prise en compte de la diffusion	53
2.5	L'équation du transfert radiatif	56
2.5.1	Position de l'équation	57
2.5.2	Intégration dans le cas simplifié sans diffusion	60
2.6	Modèle numérique : 4A/OP	64
2.6.1	Description	64
2.6.2	Calcul des atlas d'absorptions atmosphériques	65
2.6.3	Prise en compte de la diffusion : (V)LIDORT	65
2.7	Conclusions	66
3	Inversion du transfert radiatif pour l'estimation de la colonne totale de CO₂ à partir de mesures satellites dans le proche infrarouge	67
3.1	Introduction	67
3.2	L'algorithme d'estimation optimale appliqué à l'inversion de la colonne totale de CO ₂	69
3.2.1	Principes généraux	69
3.2.2	Application en pratique pour l'inversion de la colonne totale de CO ₂ .	73
3.2.3	Un code d'estimation optimale adaptable basé sur 4A/OP : l'Adaptable 4A Inversion (5AI)	74
3.3	Sensibilités des mesures proche infrarouge aux variables géophysiques essentielles	74
3.3.1	Bande A de l'oxygène ($\sim 0.76 \mu\text{m}$)	75
3.3.2	Bande CO ₂ faible ($\sim 1.6 \mu\text{m}$)	76
3.3.3	Bande CO ₂ fort ($\sim 2.05 \mu\text{m}$)	77
3.4	Application aux mesures de la mission américaine OCO-2	78
3.4.1	Configuration de l'algorithme 5AI pour OCO-2	79
3.4.2	Données	81
3.4.3	Résultats	84
3.5	Sensibilités des résultats d'inversion	89
3.5.1	Sensibilités à la connaissance de la spectroscopie de l'O ₂ et du CO ₂ .	90
3.5.2	Sensibilités à la prise en compte de l'impact des particules diffusantes	95
3.5.3	Compensation des différences systématiques entre 5AI et ACOS	99
3.6	Conclusions	101
4	Performances du concept proposé dans le cadre du projet Space CARBon Observatory (SCARBO)	103
4.1	Introduction	103
4.2	Le Space Carbon Observatory	104
4.2.1	Présentation détaillée du projet et de ses objectifs	104
4.2.2	L'instrument compact NanoCarb	105
4.2.3	Le polarimètre multi-angles SPEXone	109

4.2.4	Dimensionnement de la constellation de petits satellites	110
4.3	Méthodologie de l'étude de performance	110
4.3.1	Approche générale	111
4.3.2	Modèles d'atmosphère et d'aérosols	113
4.3.3	Paramètres d'observation atmosphérique explorés pour l'étude de performance	113
4.3.4	Méthode d'inversion : le code 5AI	115
4.3.5	Prise en compte du champ de vue	117
4.3.6	Deux scénarios de conception : sans et avec SPEXone	119
4.4	Contenu en information de la mesure NanoCarb	122
4.4.1	Degrés de liberté et sensibilités verticales	122
4.4.2	Entremêlement de l'information géophysique dans la mesure NanoCarb	125
4.4.3	Effets dans le champ de vue et limites de conception	127
4.5	Erreurs systématiques et aléatoires pour l'estimation de X_{CO_2}	132
4.5.1	Résultats sans SPEXone	132
4.5.2	Résultats avec SPEXone	134
4.6	Paramétrisation de la performance du concept SCARBO	137
4.6.1	Paramétrisation par régression linéaire	137
4.6.2	Application de la paramétrisation : exemple du 1 ^{er} juillet 2015	140
4.7	Campagne aéroportée SCARBO : première tentative d'inversion des mesures acquises par le prototype de NanoCarb	144
4.7.1	Présentation de la campagne aéroportée SCARBO	144
4.7.2	Algorithme de traitement et exemple pour une scène complète : détermination de l'a priori	145
4.7.3	Étude de sensibilités sur une mesure	147
4.7.4	Algorithme de traitement et exemple pour une scène complète : résultats d'inversion	149
4.7.5	Difficultés, enseignements et perspectives	151
4.8	Conclusions	153
5	Performances et sensibilités de l'estimation de la colonne totale de CO₂ à partir de mesures proche infrarouge : exploration de l'impact de la résolution spectrale	155
5.1	Introduction	155
5.2	Méthodologie	156
5.2.1	Approche « performance » de l'estimation optimale	156
5.2.2	Situations d'observation atmosphérique	158
5.2.3	Instruments considérés	158
5.3	Performances et contenu en information	161
5.3.1	Impact du rapport signal à bruit	161
5.3.2	Impact des bandes spectrales comprises dans la mesure	165
5.3.3	Impact de la représentation de la concentration de CO ₂ dans le vecteur d'état	168

5.4	Sensibilités aux perturbations des variables géophysiques essentielles	170
5.4.1	Sensibilités à la perturbation des variables géophysiques auxiliaires . .	170
5.4.2	Sensibilités à des perturbations de l'épaisseur optique des aérosols . .	172
5.4.3	Sensibilités à une perturbation anthropique du profil de concentration de CO ₂	175
5.5	Sensibilités à la connaissance de la spectroscopie de l'O ₂ et du CO ₂	182
5.5.1	Précisions sur la méthode	182
5.5.2	Sensibilités à l'évolution de la spectroscopie du CO ₂	183
5.5.3	Sensibilités à la correction empirique du modèle de CIA dans la bande A de l'O ₂	186
5.5.4	Sensibilités à l'évolution combinée de la spectroscopie de l'O ₂ et du CO ₂	188
5.6	Synthèse et conclusions	190
6	Conclusions	193
6.1	Inversion du transfert radiatif avec l'Adaptable 4A Inversion (5AI)	194
6.1.1	Un code d'estimation optimale adaptable, testé sur OCO-2	195
6.1.2	Perspectives	195
6.2	Le concept du Space CARBon Observatory (SCARBO)	198
6.2.1	Performances et limites actuelles	198
6.2.2	Perspectives	199
6.3	Exploration de l'impact des caractéristiques instrumentales	200
6.3.1	Impact de la résolution spectrale	200
6.3.2	Perspectives	201
A	Correction empirique du modèle d'absorption induite par collisions (CIA) pour la bande A de l'O₂	203
B	Impacts sur les résidus spectraux d'une mise à jour de la spectroscopie du CO₂	207
C	Approximation de la dépendance des résultats L2 dans le champ de vue de NanoCarb	210
D	Performances du concept SCARBO pour l'estimation de X_{CH₄}	216
E	Performances et contenu en information pour les 12 situations d'observa- tion atmosphérique	222
F	Test de cohérence avec OCO-2 pour l'étude des sensibilités à la connais- sance de la spectroscopie	235
G	Sensibilités à la connaissance de la spectroscopie : figures pour la pression de surface	238

Chapitre 1

Introduction

1.1 Un changement climatique d'origine anthropique

1.1.1 Évolution de la température globale et causes anthropiques

En 2020, dans son rapport annuel sur l'état du climat, l'Organisation Météorologique Mondiale évaluait la moyenne globale des températures de l'air à $1.2 \pm 0.1^\circ\text{C}$ au dessus des niveaux de la période pré-industrielle de référence (WMO, 2021). Ce réchauffement s'est réalisé progressivement, d'abord entre 1900 et 1940, et finalement depuis 1970 comme le montre la figure 1.1. De récents travaux scientifiques, rassemblés dans le cadre du 5^{ème} rapport du Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC, *Intergovernmental Panel on Climate Change*, IPCC), attribuent plus de la moitié du réchauffement observé entre 1951 et 2010 aux conséquences des activités humaines qui perturbent le bilan radiatif terrestre (IPCC, 2013).

Bilan radiatif et effet de serre L'énergie reçue par la Terre provient pour son immense majorité du rayonnement émis par le Soleil, entre 0.1 et 4.5 μm de longueur d'onde (ultraviolet, visible et le proche infrarouge). Compte tenu de la distance Terre-Soleil, celui-ci délivre une puissance moyenne de $342 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ à notre planète. Si on néglige l'impact de l'atmosphère et que l'on considère qu'en moyenne 30% de l'énergie incidente est réfléchié, il est possible de déduire une température théorique d'environ -18°C pour la surface de la Terre. L'émission thermique associée à cette température est comprise entre environ 5 et 60 μm de longueur d'onde (infrarouge thermique et lointain) et permet d'équilibrer le bilan énergétique de la planète. Or, certains gaz présents dans l'atmosphère, notamment la vapeur d'eau (H_2O), le dioxyde de carbone (CO_2), le méthane (CH_4) ou le protoxyde d'azote (N_2O), dits gaz à « effet de serre », absorbent une partie de ce rayonnement thermique et piègent l'énergie dans l'atmosphère. Celle-ci se réchauffe et réémet alors du rayonnement vers l'extérieur ($239 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$) mais aussi vers la surface, qui se réchauffe également. Ce phénomène que l'on nomme « effet de serre » explique la température moyenne de 15°C observée à la surface de Terre, supérieure de 33°C à celle que l'on observerait sans atmosphère. L'émission

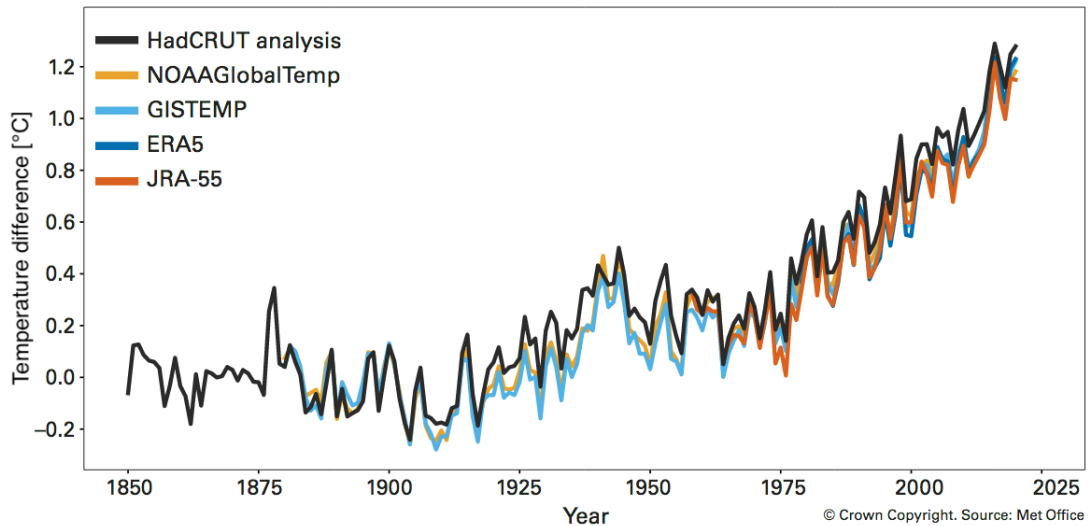


FIGURE 1.1 – Moyenne annuelle globale de la différence entre la température de l’air proche du sol et la température de référence, évaluée sur la période pré-industrielle 1850-1900, pour cinq jeux de données différents. Figure tirée de WMO (2021).

thermique associée à cette température de surface est d’environ 390 W.m^{-2} , et la différence d’environ 150 W.m^{-2} avec le rayonnement émis par l’atmosphère à son sommet donne une mesure de l’impact radiatif de l’effet de serre. La vapeur d’eau contribue aux $2/3$ pour cet effet, suivie par le CO_2 dont la contribution est proche du quart.

Ce phénomène est parfaitement naturel. Sans lui, la température de -18°C et la glace qui aurait recouvert la Terre n’auraient certainement pas permis l’apparition de la vie telle que nous la connaissons.

Perturbations anthropiques L’analyse des bulles d’air piégées dans la glace des pôles, extraite par carottage, a montré que les concentrations atmosphériques du CO_2 , CH_4 et N_2O ont oscillé au rythme des glaciations durant ces 800 000 dernières années. Elles ont atteint des minimums glaciaires d’environ 180 parties par million (ppm), 350 parties par billion (ppb) et 200 ppb, respectivement, et des maximums interglaciaires d’environ 300 ppm, 800 ppb et 300 ppb, respectivement (Masson-Delmotte et al., 2013). Leurs concentrations atteignent leurs niveaux pré-industriels dès le début de notre ère, et celles-ci restent quasiment constantes jusqu’aux alentours de 1750, comme le montre la figure 1.2. C’est en effet au cours du XVIII^{ème} siècle que la révolution industrielle va initier un changement radical dans l’empreinte de l’Homme sur son environnement. La combustion d’énergies fossiles (charbon, pétrole et gaz), la déforestation et le changement d’usage des sols (déforestation, exploitation du bois, rotation des cultures, reboisement, etc) émettent notamment du dioxyde de carbone, et l’agriculture, qui est de plus en plus intensive, relâche quant à elle méthane et protoxyde d’azote. Une fraction de ces émissions s’accumule dans l’atmosphère faisant alors augmenter les concentrations de ces gaz : environ 1.7 ppm/an pour le CO_2 (évalué entre 1980 et 2011),

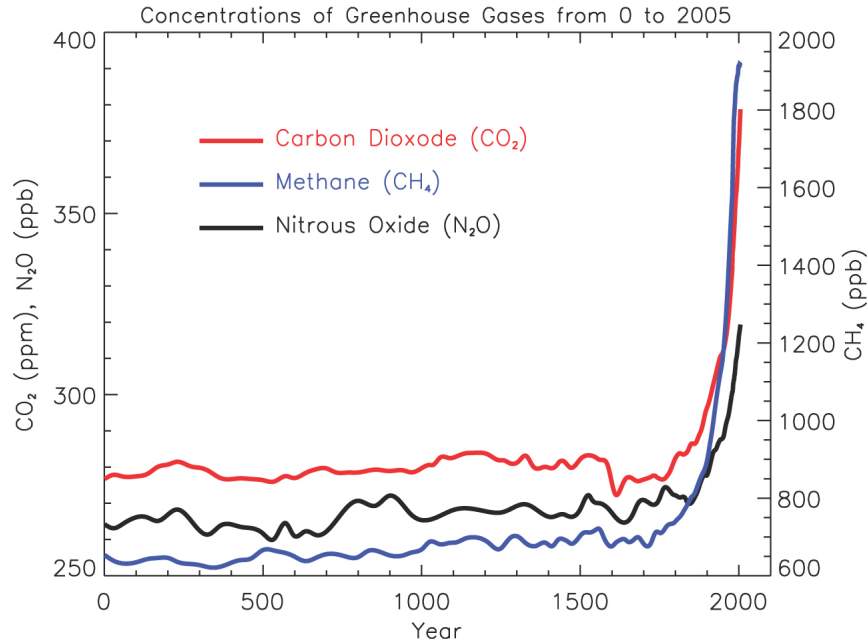


FIGURE 1.2 – Concentrations atmosphériques du CO_2 , N_2O (gauche) et du CH_4 (droite) entre l’an 0 et l’an 2000. Figure tirée de Forster et al. (2007).

un gain d’environ 250 ppb pour le CH_4 et une augmentation variant entre 0.25 et 1.0 ppb/an pour le N_2O , sur la même période (Hartmann et al., 2013). Au moment de la rédaction de ce paragraphe, la concentration atmosphérique de CO_2 culmine à 416.34 ppm (moyenne globale pour mars 2021), celle de CH_4 à 1888.9 ppb (moyenne globale pour février 2021) et celle de N_2O à 334.0 ppb (moyenne globale pour février 2021), telles que rapportées sur le site internet de la *National Oceanic and Atmospheric Administration* (NOAA, Dlugokencky and Tans, 2021). Ainsi, l’influence des activités humaines ont porté la concentration atmosphérique de ces trois gaz bien au-delà des niveaux qu’elles ont atteint au cours des 800 000 dernières années.

Cette modification anthropique de l’abondance des gaz à effet de serre dans l’atmosphère par rapport aux niveaux pré-industriels perturbe l’équilibre radiatif de notre planète. Le réhaussement des concentrations de CO_2 , CH_4 et N_2O est responsable de perturbations du bilan radiatif de la Terre, dit *forçages radiatifs*, évalués à $1.68 \pm 0.35 \text{ W.m}^{-2}$, $0.97 \pm 0.23 \text{ W.m}^{-2}$ et $0.17 \pm 0.04 \text{ W.m}^{-2}$ par rapport aux valeurs estimées pour les niveaux pré-industriels de 1750, respectivement. Les valeurs positives de ces forçages vont dans le sens d’une énergie gagnée par le système Terre, conduisant à une augmentation des températures. Les activités humaines émettent également des aérosols, des gaz à plus courte durée de vie et modifient aussi l’albédo via le changement d’utilisation des sols. Une fois les forçages radiatifs respectifs (positifs et/ou négatifs) de ces autres perturbations anthropiques pris en compte, le forçage radiatif global par rapport à 1750 est évalué en 2011 à $2.29 \pm 0.25 \text{ W.m}^{-2}$ (IPCC, 2013). Il correspond à environ 1% de l’effet de serre naturel, et constitue le moteur du changement climatique.

1.1.2 Objectifs politiques de lutte contre le changement climatique

Le changement du climat observé par rapport à la période pré-industrielle a, depuis quelques décennies, des effets déjà identifiables sur les systèmes hydrologiques, la biodiversité, les rendements agricoles, ainsi qu'un impact vraisemblable sur la fréquence d'occurrence des événements météorologiques extrêmes, comme les vagues de chaleur ou les inondations (IPCC, 2014). Des scénarios socio-économiques, allant du *business-as-usual* jusqu'à une réduction drastique des émissions de gaz à effet de serre d'ici la fin du XXI^{ème} siècle, ont servi de base pour simuler l'évolution du climat jusqu'en 2100 à l'échelle globale, permettant d'envisager les futurs impacts du changement climatique. Ces exercices sont conduits régulièrement pour préparer les rapports du GIEC, depuis le premier paru en 1990, et préviennent, avec toujours plus de détails, des risques encourus en cas d'absence de réduction des émissions anthropiques de gaz à effet de serre (IPCC, 2014). Écosystèmes terrestres et marins, zones côtières ou insulaires, villes et zones rurales, accès à l'eau, sécurité alimentaire, habitabilité des divers régions du globe ou économie, le changement climatique perturbe déjà ou touchera de nombreux aspects de la vie et des systèmes humains sur Terre, motivant une réponse politique pour tenter d'enrayer son aggravation.

La Convention Cadre des Nations Unies sur le Changement Climatique (*United Nations Framework Convention on Climate Change*, UNFCCC) est un traité international proposant un cadre de coopération pour lutter contre le réchauffement climatique et ses conséquences. L'UNFCCC a été initiée en 1992 lors du Sommet de la Terre, à Rio de Janeiro, et rassemble maintenant 197 pays signataires, dits « parties ». Son objectif, décrit dans l'article 2 du traité, est « de stabiliser les concentrations de gaz à effet de serre dans l'atmosphère à un niveau qui empêche toute perturbation anthropique dangereuse du système climatique ». Divers engagements y sont pris, notamment concernant la déclaration des émissions anthropiques de gaz à effet de serre à l'échelle nationale, ou l'importance des mesures d'atténuation du changement climatique mais aussi d'adaptation. Du fait de leur responsabilité historique pour les émissions de gaz à effet de serre passées (et actuelles), la Convention distingue dans leurs obligations les pays industrialisés (dits de « l'Annexe I ») de ceux en développement. Elle crée aussi une Conférence des Parties (*Conference of Parties*, COP) qui se rassemble chaque année afin de faire le point sur l'application de la Convention (UNFCCC, 1992).

Le protocole de Kyoto, adopté lors de la 3^{ème} COP en 1997, implémente de manière opérationnelle la Convention. Les pays de l'Annexe I ont notamment l'obligation contraignante de réduire, sur la période 2008 - 2012, leurs émissions de gaz à effet de serre d'une quantité correspondant à en moyenne 5% de leur émissions de 1990. À ces réductions s'ajoute l'obligation d'établir des inventaires nationaux d'émissions, mis à jour chaque année. Les pays hors de l'Annexe I doivent également fournir des rapports sur leurs émissions, mais à des échéances moins régulières. Le protocole de Kyoto a été amendé à Doha en 2012 pour définir une deuxième période d'engagement s'étalant entre 2013 et 2020, avec pour nouvel objectif de réduire de les émissions de gaz à effet de serre des pays de l'Annexe I d'une quantité correspondant en moyenne à 18% des niveaux de 1990.

L'Accord de Paris, adopté lors de la 21^{ème} COP en 2015, vient compléter l'ambition

Stylized net global CO₂ emission pathways
Billion tonnes CO₂ per year (GtCO₂/yr)

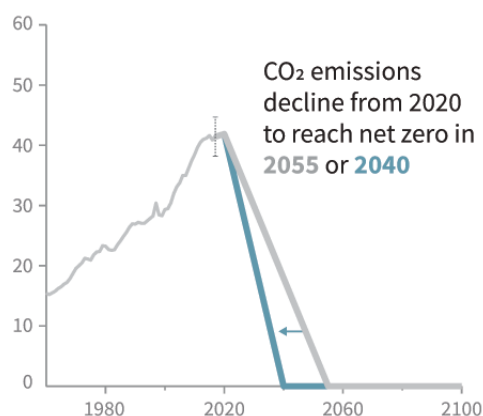


FIGURE 1.3 – Émissions nettes globales de CO₂ en milliards de tonnes par an (avant 2017), et trajectoires d’émissions nettes globales de CO₂ conduisant à une émission nette nulle en **2040 (bleu)** ou **2055 (gris)**. Figure tirée d’IPCC (2018).

politique de lutte contre le changement climatique. Son objectif est de contenir « l’élévation de la température moyenne de la planète nettement en dessous de 2°C par rapport aux niveaux pré-industriels » et de poursuivre « l’action menée pour limiter l’élévation de la température à 1.5°C par rapport aux niveaux pré-industriels, étant entendu que cela réduirait sensiblement les risques et les effets des changements climatiques » (UNFCCC, 2015). Ce nouvel Accord établit en particulier l’obligation contraignante pour les 195 pays signataires de déclarer tous les 5 ans des Contributions Déterminées au niveau National (*Nationally Determined Contributions*, NDCs) à l’effort commun de réduction des émissions de gaz à effet de serre au niveau mondial. Le progrès vers les objectifs de l’Accord sera évalué tous les 5 ans à partir de 2023 lors d’un inventaire mondial (*Global Stocktake*).

Par ailleurs, un rapport spécial sur les impacts d’un réchauffement climatique limité à 1.5°C au-dessus des niveaux pré-industriels et sur les trajectoires d’émissions compatibles avec un tel objectif a été demandé au GIEC dans le cadre de l’Accord de Paris. Ses conclusions montrent que pour atteindre un tel objectif, il faudrait des émissions nettes nulles de CO₂ avant 2055, ainsi qu’agir en parallèle sur le forçage radiatif venant d’autres perturbateurs comme le CH₄, le N₂O, les gaz à courte durée de vie ou les aérosols. Cela supposerait en particulier de réduire les émissions anthropique de CO₂ plus vite qu’elles n’ont jamais augmenté comme le montre la figure 1.3 (IPCC, 2018, figure SPM.1). Pour l’instant, les NDCs déclarées ne sont pas compatibles avec des trajectoires d’émissions menant vers un réchauffement global qui serait largement inférieur à 2°C par rapport aux niveaux pré-industriels (par exemple Roelfsema et al., 2020).

1.2 Cycle et budget carbone

Le dioxyde de carbone (CO_2) contribue le plus au forçage radiatif causé par les émissions anthropiques de gaz à effet de serre, avec 56% du total (IPCC, 2013). Ainsi, l'étude de son cycle et des phénomènes qui l'influencent est particulièrement cruciale pour la compréhension générale des moteurs du changement climatique. Cette section présente d'abord le cycle naturel du carbone, qui met en relation ses trois réservoirs que sont le continent, l'océan et l'atmosphère. Ensuite, nous décrirons son budget global qui étudie la réponse de ces réservoirs aux émissions anthropiques de CO_2 , puis nous présenterons finalement les deux familles d'approches, montantes et descendantes, utilisées pour estimer les flux de CO_2 à la surface de la Terre.

1.2.1 Cycle naturel

Le carbone circule entre ses trois réservoirs que sont les continents (principalement stocké à l'état solide), les océans (principalement dissous) et l'atmosphère (principalement gazeux). On compte usuellement la quantité de carbone stockée ou échangée en milliards de tonnes (GtC) ou en péta (10^{15}) grammes de carbone (PgC). Ces deux unités sont égales.

Aux temps pré-industriels, les quantités de carbone en stock dans chacun de ces trois réservoirs sont par exemple données par Ciais et al. (2013), et illustrées (en **noir**) sur la figure 1.4 :

- Le **continent** stocke principalement le carbone sous forme solide. Il est présent dans la biomasse vivante à la surface des continents (450-650 GtC) et dans les sols, sous forme de matière organique décomposée (1500-2400 GtC). Des zones humides (300-700 GtC) et le permafrost (~ 1700 GtC) complètent les stocks de surface. Dans la croûte terrestre, on trouve des combustibles fossiles (1000-1940 GtC), issus de la décomposition de poches de matière organique à l'échelle des temps géologiques dans des conditions spécifiques de température et de pression (Berner, 2003; Archer, 2010). Finalement, les fonds océaniques sont recouverts de sédiments contenant également du carbone (1750 GtC).
- L'**océan** contient l'immense majorité du carbone présent sur Terre. On y trouve du carbone inorganique dissout sous forme de CO_2 , d'ions carbonates et bicarbonates (38 000 GtC) ainsi que du carbone organique, issus de la décomposition de matière organique morte (700 GtC). Finalement, la biosphère marine (constituée de planctons, microorganismes, poissons, etc) est également présente (3 GtC).
- L'**atmosphère** comptait 589 GtC de carbone lors des temps pré-industriels, principalement sous forme de CO_2 gazeux, et de plus faibles quantités de méthane (CH_4), de monoxyde de carbone (CO) ou d'aérosols comme des suies de combustion.

La circulation du carbone entre ses trois réservoirs se déroule à différentes échelles temporelles. Schématiquement, on peut distinguer deux domaines : celui des temps géologiques,

très longs, et celui plus rapide, lié à la vie sur Terre. Les flux associés au cycle du carbone pré-industriel sont représentés par les flèches **noires** sur la figure 1.4.

Le domaine géologique lent Le premier domaine du cycle du carbone est celui qui évolue à l'échelle des temps géologiques ($> 10^6$ années). Le CO_2 atmosphérique érode chimiquement les roches des surfaces continentales, produisant alors du carbonate de calcium (CaCO_3) qui ruisselle par les rivières jusqu'aux océans. Les océans dégazent une moitié de ce carbone sous forme de CO_2 atmosphérique, et l'autre moitié sédimente sur les fonds océaniques. Finalement, la subduction de la croûte océanique aux frontières des plaques tectoniques emmène les sédiments à des conditions de température et de pression rendant possible le dégazage de CO_2 lors de l'activité volcanique (Archer, 2010)¹. Ces processus sont très lents, et les flux de carbone associés sont inférieurs à 0.3 GtC/an (Ciais et al., 2013).

Le domaine rapide De l'échelle de la journée jusqu'au millénaire, un cycle du carbone plus « rapide » est lié à la vie sur Terre. La photosynthèse qui permet la pousse de la végétation retire du carbone de l'atmosphère (108.9 GtC/an), et la respiration de tous les êtres vivants ainsi que les feux de forêt d'origine naturelle en réémettent (107.2 GtC/an), pour un flux net de carbone de l'atmosphère vers le continent évalué à 1.7 GtC/an (Ciais et al., 2013). Le carbone contenu dans les sols est transporté vers l'océan par les rivières, l'eau douce en dégazant une partie en chemin. L'océan échange lui aussi du carbone avec l'atmosphère. Cet échange provient d'une différence de pression partielle de CO_2 entre l'océan et l'atmosphère, et dépend en intensité de la turbulence et des bulles dans l'eau de mer, dépendant elles-mêmes de la vitesse du vent. Cet échange est également influencé par la solubilité du CO_2 dans l'eau de mer, qui dépend elle-même de sa température et de sa salinité : l'eau froide absorbe mieux le CO_2 que l'eau chaude (Archer, 2010). Pendant la période pré-industrielle, les estimations donnent un flux net de l'océan vers l'atmosphère de 0.7 GtC/an (Ciais et al., 2013).

1.2.2 Contributions anthropiques et budget carbone global

Depuis le début de la révolution industrielle, l'exploitation des énergies fossiles (charbon, gaz, pétrole) a extrait des stocks de carbone inscrits dans le domaine géologique très lent, et leur combustion, relâchant du CO_2 dans l'atmosphère, est venu perturber le domaine rapide du cycle naturel carbone (Ciais et al., 2013). Le *budget carbone global* désigne l'étude de la perturbation du cycle du carbone exercée par les activités humaines, ainsi que la réponse de ses trois réservoirs que sont le continent, l'océan et l'atmosphère. La figure 1.4 donne (en **rouge**) une estimation de la variation des stocks de carbone dans chacun des réservoirs depuis entre 1750 et 2011 : environ 365 GtC de combustibles fossiles ont été extraits de la croûte terrestre, 155 GtC ont été réabsorbés par l'océan et 240 GtC se sont accumulés

1. En cherchant plus d'informations que celles données par Ciais et al. (2013) sur ce domaine très lent du cycle du carbone, à l'échelle des temps géologiques, j'ai découvert la série de livres *Princeton Primers in Climate* qui propose de petits ouvrages très pédagogiques

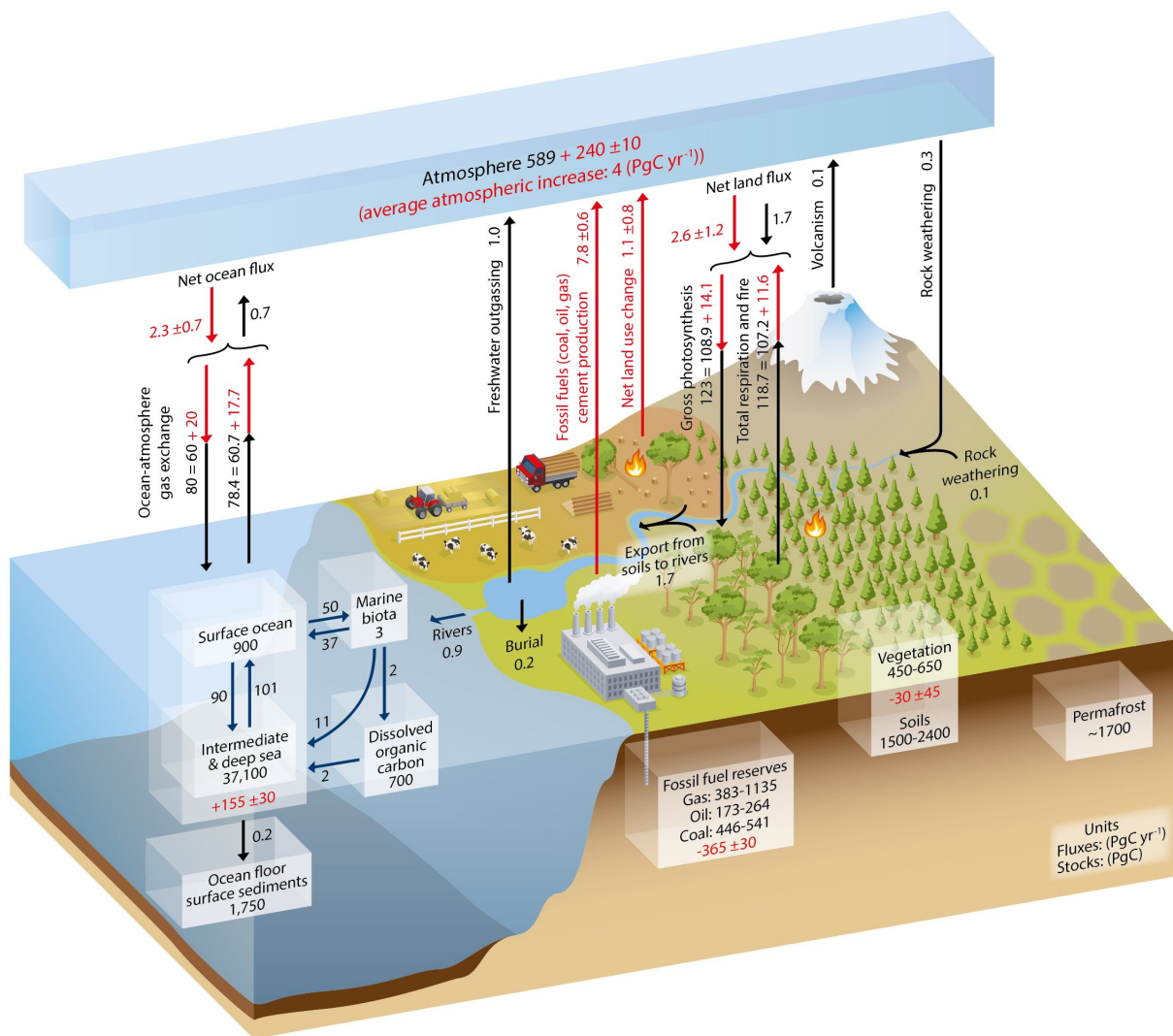


FIGURE 1.4 – Cycle naturel du carbone et **perturbation anthropique**. Les stocks et flux associés au cycle naturel, représentatifs de la période pré-industrielle, sont représentés en **noir** et estimés pour l'année 1750. Les variations de stocks estimées pour la période 1750-2011, dues à la **perturbation anthropique** des flux entre tous les réservoirs (estimés pour la période 2000-2009), sont données en **rouge**. La figure est tirée de Ciais et al. (2013), qui donne une légende plus complète. Pour rappel, l'unité PgC utilisée est égale à GtC.

dans l'atmosphère, provoquant alors l'augmentation de la concentration atmosphérique de CO₂ illustrée sur la figure 1.2. La biomasse vivante à la surface des continents a également connu une variation globale de stock estimée à -30 GtC, combinaison de l'absorption d'une part du carbone émis dans l'atmosphère et du changement d'usage des sols (déforestation, exploitation du bois, rotation des cultures, reboisement, etc). Les flux annuels associés à la perturbation anthropique et à la réponse des trois réservoirs sont donnés par les flèches

rouge pour la période 2000-2009 sur la figure 1.4.

Depuis 2007, la communauté scientifique qui étudie le cycle du carbone travaille au suivi annuel du budget carbone global de la planète dans le cadre du *Global Carbon Project*². Cette démarche poursuit deux objectifs (Friedlingstein et al., 2020) :

1. Répondre aux besoins de multiples parties-prenantes (politiques, entreprises, journalistes, ONG, etc) avec des données fiables et mises à jour.
2. Suivre et améliorer la compréhension du cycle du carbone, et ce alors que les activités humaines connaissent des évolutions rapides (politique de réduction des émissions de gaz à effet de serre ou pandémie de COVID-19) et que les écosystèmes impliqués dans l'absorption du CO₂ subissent les premières conséquences du changement climatique.

Le budget carbone global de l'année 2020 a été publié par Friedlingstein et al. (2020). Pour la période complète 1850-2019, il donne une estimation annuelle des émissions de carbone (notées E) dues à la combustion des énergies fossiles (E_{FOS}) et au changement d'usage des sols (*Land Use Change*, E_{LUC}). À ces émissions correspondent les estimations de la variation des stocks de carbone dans ses trois réservoirs : croissance de la quantité de carbone dans l'atmosphère (*Growth*, G_{ATM}), absorption du carbone dans ses puits continental (*Sink*, S_{LAND}) et océanique (S_{OCEAN}). La figure 1.5 représente ces différentes composantes pour la période 1850-2019.

C'est après la seconde guerre mondiale que les émissions de CO₂ dues à la combustion des énergies fossiles augmentent fortement, passant de 3.0 ± 0.2 GtC/an dans les années 1960s à 9.4 ± 0.5 GtC/an pour les 2010s. Les émissions liées au changement d'usage des sols restent quant à elles relativement constantes, autour de 1.4 ± 0.7 GtC/an depuis le milieu du siècle dernier. Du côté des puits d'absorption, la quantité de CO₂ absorbée par l'océan et les continents a suivi l'augmentation des émissions anthropiques : S_{OCEAN} est passé de 1.0 ± 0.3 GtC/an dans les années 1960s à 2.5 ± 0.6 GtC/an pour les 2010s, et S_{LAND} est passé de 1.3 ± 0.4 GtC/an dans les années 1960s à 3.4 ± 0.9 GtC/an pour les 2010s. L'atmosphère gagnait quant à elle en moyenne 1.8 ± 0.07 GtC/an dans les années 1960 pour atteindre 2.5 ± 0.6 GtC/an dans les 2010s. Ainsi, jusqu'à présent, les réservoirs océaniques et continentaux ont travaillé à atténuer la perturbation anthropique du cycle du carbone en absorbant environ toujours la même fraction des émissions croissantes de CO₂ : 24% pour l'océan et 32% pour le continent, avec environ 45% restant dans l'atmosphère (Friedlingstein et al., 2020). Un des enjeux actuels de l'étude du cycle du carbone est justement de déceler de potentielles rétroactions des changements climatiques en cours sur la capacité des puits continentaux et océaniques à atténuer la perturbation anthropique.

Au-delà des tendances globales, la figure 1.5 montre également la variabilité interannuelle des puits. Le puit océanique (S_{OCEAN}) montre une variabilité de quelques dixièmes de GtC, avec des valeurs généralement plus fortes corrélées avec le phénomène El Niño. La variabilité interannuelle du puit continental (S_{LAND}) est quant à elle beaucoup plus forte, pouvant aller jusqu'à ± 2 GtC/an, avec des réductions du puits généralement corrélées avec El Niño,

2. <https://www.globalcarbonproject.org/>

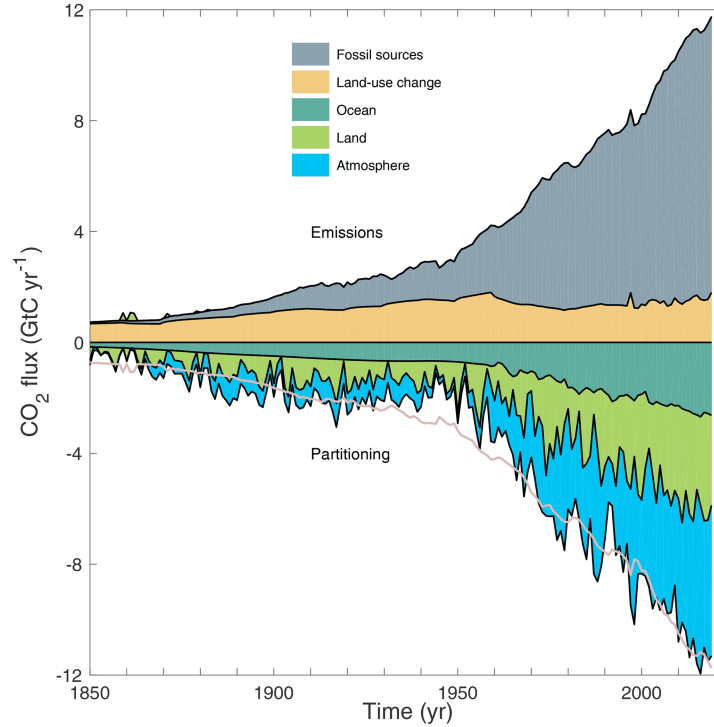


FIGURE 1.5 – Les différentes composantes du budget carbone global, évaluées pour chaque année entre 1850 et 2019, en milliards de tonnes de carbone par an (GtC/an). Les émissions liées à la **combustion des énergies fossiles** (E_{FOS}) apparaissent en **gris**, les émissions liées au **changement d’usage des sols** (E_{LUC}) apparaissent en **orange**, l’absorption du carbone par le **puits océanique** (S_{OCEAN}) apparaît en **turquoise**, l’absorption du carbone par le **puits continental** (S_{LAND}) apparaît en **vert** et finalement la quantité de carbone qui persiste dans le **réservoir atmosphérique** (G_{ATM}) est représentée en **bleu**. Le **reflet des émissions totales**, pour pouvoir les comparer à l’évolution des puits et de la quantité restant dans l’atmosphère, est donné par la ligne en **rose léger**. La figure est tirée de Friedlingstein et al. (2020).

auxquelles correspondent de plus fortes augmentations de la concentration atmosphérique de CO_2 (G_{ATM}). Ces interactions entre un phénomène climatique ponctuel comme El Niño et le cycle du carbone permettent d’envisager les réponses de ce dernier aux prochaines évolutions du climat (par exemple Friedlingstein, 2015).

Les estimations collectées pour faire le budget carbone global illustré par la figure 1.5 sont le fruit de la compréhension collective du cycle du carbone par la communauté scientifique qui l’étudie. Cependant, un déséquilibre persiste entre la somme de l’évolution des stocks de carbone dans les trois réservoirs ($G_{\text{ATM}} + S_{\text{LAND}} + S_{\text{OCEAN}}$) et la somme des émissions ($E_{\text{FOS}} + E_{\text{LUC}}$). Ce déséquilibre est illustré par l’écart visible entre la courbe en rose léger (qui reflète en négatif les émissions totales) et la somme des puits et de l’augmentation de

la concentration de CO_2 sur la figure 1.5. Le cumul de ce déséquilibre correspond à 3% des émissions totales entre 1850 et 2019, et proviendrait majoritairement d’une surestimation des émissions associées au changement d’usage des sols entre les années 1920s et 1960s. Entre 1959 et 2019, le déséquilibre total est de 0.03 GtC sans tendance particulière, dénotant une compréhension cohérente du cycle par la communauté scientifique sur cette période. Cependant, la forte variabilité de ± 1 GtC/an de ce déséquilibre, qui viendrait principalement d’erreurs dans S_{LAND} et S_{OCEAN} , illustre les progrès qu’il reste encore à réaliser dans la compréhension du cycle du carbone (Friedlingstein et al., 2020).

1.2.3 Détermination des flux de CO_2 : approches montantes et descendantes

Deux approches complémentaires permettent de déterminer les flux de CO_2 à la surface de la Terre. La première approche, dite « montante » (*bottom-up*), consiste à rassembler les données globales nécessaires pour l’utilisation de modèles décrivant explicitement les mécanismes d’émission et d’absorption de CO_2 par la surface. La seconde est dite « descendante » (*top-down*) car elle utilise l’information apportée par un ensemble de mesures atmosphériques du CO_2 pour donner une estimation de ses flux à la surface grâce à la modélisation du transport atmosphérique. La figure 1.6 donne un schéma qui résume ces deux approches complémentaires.

Approche montante (*bottom-up*) Cette approche est celle utilisée pour obtenir les résultats présentés dans la figure 1.5 extraite de Friedlingstein et al. (2020). Elle repose sur la collecte la plus exhaustive possible des données globales nécessaires à la modélisation explicite des mécanismes à l’origine de l’émission et de l’absorption du CO_2 par la surface.

Les émissions de CO_2 liées à la combustion des énergies fossiles sont calculées en appliquant des facteurs d’émission aux statistiques économiques sur la consommation de combustibles fossiles. Celles liées au changement d’usage des sols viennent d’inventaires qui comptabilisent la rotation des cultures et des sols, auxquels sont appliquées des courbes de réponse qui décrivent, avec différentes durées caractéristiques, la décomposition et le transfert du carbone entre différents stocks, pour les sols et la végétation (*bookkeeping models*). Ainsi, E_{FOS} et E_{LUC} calculées avec l’approche montante sont particulièrement sensibles à l’exhaustivité (ou non) des données collectées ainsi qu’à leur fréquence de mise à jour. Les incertitudes pour E_{FOS} sont de l’ordre de $\pm 5\%$ pour les pays développés, aux bonnes structures statistiques, mais elles montent à $\pm 10\%$ pour les pays en croissance rapide comme la Chine par exemple.

Le puit d’absorption continental S_{LAND} est calculé comme la moyenne des résultats de 17 modèles dynamiques de végétation globale (*Dynamic Global Vegetation Models*, DGVMs) qui décrivent les processus de pousse, mort et décomposition de la végétation. Les processus biogéochimiques inclus dans ces modèles sont étudiés à l’échelle d’écosystèmes ponctuels (réseau FLUXNET par exemple) et permettent la calibration et/ou validation et/ou paramétrisation des DGVMs qui les extrapolent ensuite à l’échelle globale (Friend et al., 2007). Finalement, le puit océanique S_{OCEAN} est calculé comme la moyenne d’un ensemble de si-

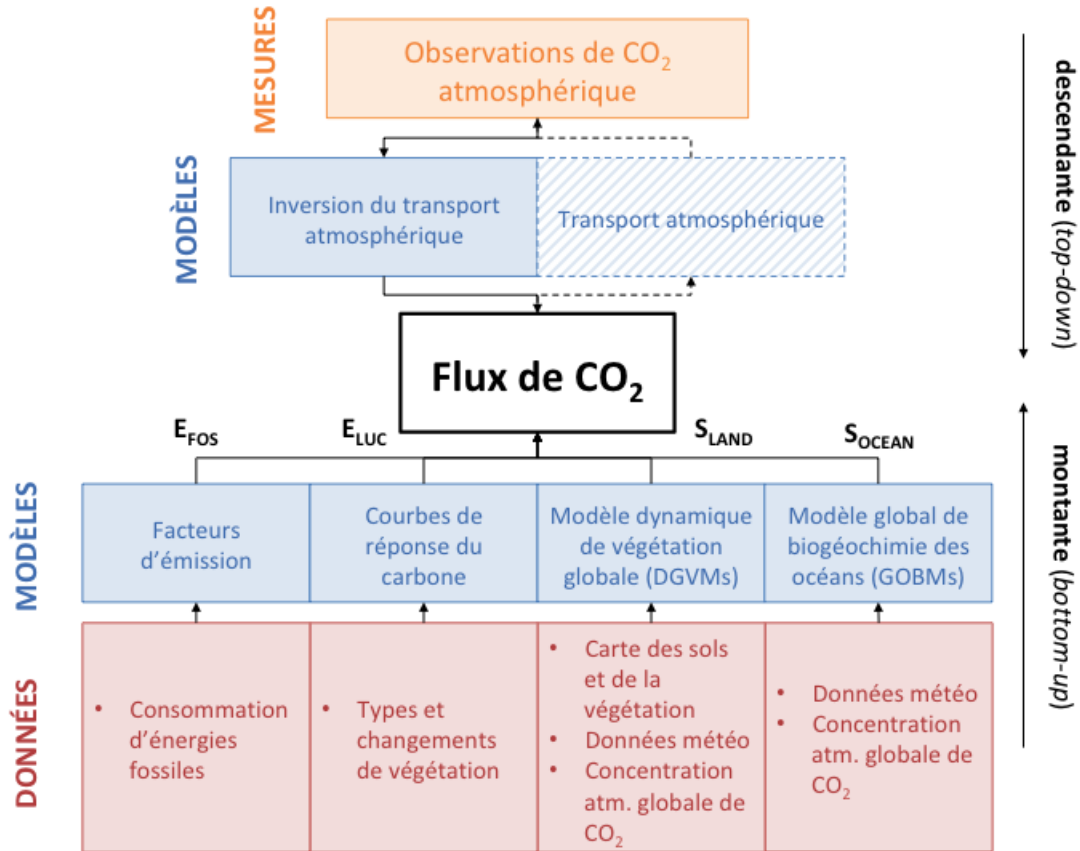


FIGURE 1.6 – Approches « montante » (*bottom-up*) et « descendante » (*top-down*) pour l'estimation des flux de CO₂.

mulations de modèles globaux de biogéochimie des océans (*Global Ocean Biogeochemistry Models*, GOBMs), qui représentent tous les processus physiques, chimiques et biologiques qui influent sur la concentration de CO₂ à la surface de l'océan, et donc sur le flux de CO₂ avec l'atmosphère. Les DGVMs comme les GOBMs sont forcés par les conditions climatiques et la concentration atmosphérique de CO₂.

Approche descendante (*top-down*) Dans un mouvement complémentaire, l'approche descendante ne s'intéresse pas à la description explicite des mécanismes régissant les flux de CO₂ à la surface de la Terre. Au contraire, elle utilise l'information apportée par un ensemble d'observations du CO₂ atmosphérique pour estimer la répartition spatio-temporelle de ses flux à la surface de la Terre. On parle ici de *modélisation inverse* du transport atmosphérique. Cette méthode consiste à déterminer un ensemble statistiquement optimal de flux de CO₂ permettant de simuler, par transport atmosphérique, des champs de concentration qui satisfont, vis-à-vis de leurs incertitudes respectives, un ensemble d'observations atmosphériques du CO₂ (Ciais et al., 2010).

Pour commencer, le transport atmosphérique inverse nécessite une connaissance « a

priori » des flux, que l'on aurait avant l'information apportée par les observations de CO₂ utilisées pour l'inversion. Ces flux a priori sont modélisés comme un vecteur gaussien, décrit par une moyenne et sa matrice de variance/covariance qui illustre leur incertitude. Un modèle de transport atmosphérique permet ensuite de simuler les champs de concentration de CO₂ associés aux flux a priori. Le schéma d'estimation utilise alors les différences entre ces concentrations simulées et l'ensemble des observations du CO₂ atmosphérique considérées pour l'estimation afin de déduire itérativement un ajustement des flux a priori. On converge alors vers un ensemble de flux a posteriori qui respectent à la fois leur a priori (vis-à-vis de son incertitude) mais aussi les observations du CO₂ atmosphérique utilisées (vis-à-vis de leurs incertitudes). L'incertitude de ces flux a posteriori est réduite par rapport à celles des flux a priori grâce à l'information apportée par les observations du CO₂ atmosphérique considérées dans l'inversion.

Complémentaires à l'approche montante, différents résultats d'inversions atmosphériques sont utilisés pour discuter des flux calculés pour le budget carbone global (Friedlingstein et al., 2020). Ces comparaisons montrent en particulier des désaccords sur les intensités respectives des puits d'absorption (ou sources d'émissions) des continents dans la zone tropicale et dans l'hémisphère Nord extratropical, sujet ouvert de recherche dans la communauté du cycle du carbone. Par ailleurs, ces mêmes désaccords existent également entre les différentes inversions atmosphériques elles-mêmes. Ceux-ci proviennent vraisemblablement des différences entre les modèles de transport atmosphérique utilisés, qui sont l'une des plus importantes sources de variabilité et d'incertitudes dans le domaine de l'inversion atmosphérique (par exemple Baker et al., 2006; Houweling et al., 2010; Basu et al., 2018; Schuh et al., 2019).

Historiquement, les inversions atmosphériques des flux de carbone reposent sur des mesures de la concentration atmosphérique de CO₂ réalisées in-situ par des stations au sol. Selon la répartition spatiale des mesures prises en compte, les inversions visent différentes échelles. Certaines visent l'échelle globale (par exemple Peylin et al., 2013), d'autres sont consacrées à l'échelle régionale (\sim continent, par exemple Schuh et al., 2010; Broquet et al., 2013; Monteil et al., 2020) ou plus locale encore (par exemple Bréon et al., 2015; Turnbull et al., 2019).

1.3 Observations actuelles du CO₂ atmosphérique et ambitions pour l'observation spatiale des émissions anthropiques

On dispose de différents types d'observations de la concentration atmosphérique de CO₂ pour suivre son évolution. Certaines alimentent les inversions du transport atmosphérique, d'autres permettent de valider ces inversions tandis qu'on peut également utiliser certaines observations pour en valider d'autres. Elles peuvent être séparées en deux catégories : (1) les observations *in situ* qui vont au contact direct de la concentration observée (2) les observations par télédétection qui ne sont pas en contact direct avec la concentration observée, et

qui reposent sur des mesures sensibles à cette concentration.

On présentera d'abord les observations in-situ, puis celles basées sur la télédétection par satellite. Ensuite, les ambitions pour l'observation des émissions anthropiques de CO_2 par imagerie satellite seront décrites. Finalement, les méthodes de télédétection depuis les airs ou le sol, idéales pour prototyper de nouvelles méthodes d'estimation des flux ou valider les observations satellites, seront présentées.

1.3.1 Mesures in-situ

En plus de son évolution temporelle marquée par un cycle saisonnier et une augmentation sur le long terme, la concentration atmosphérique de CO_2 connaît des variations selon la latitude, la longitude et l'altitude. Différentes approches de mesures in-situ apportent des éclairages complémentaires sur ces complexes variabilités dans les trois dimensions de l'espace.

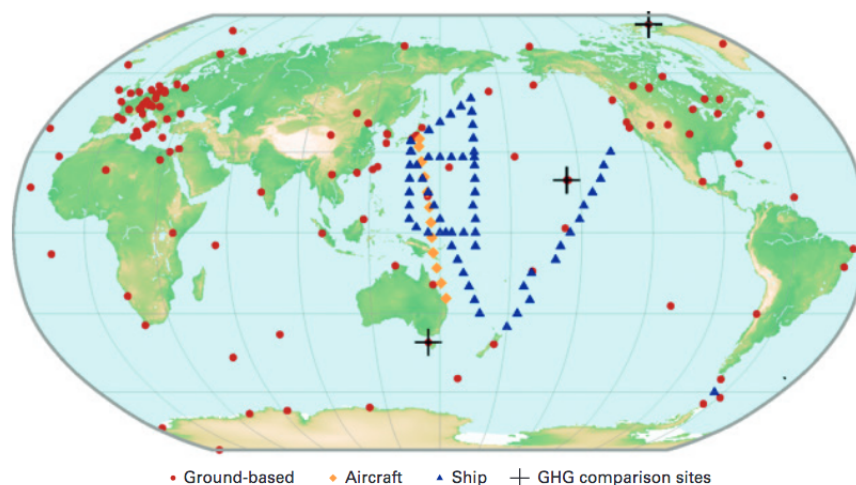


FIGURE 1.7 – Réseau de stations sol du *Global Atmosphere Watch* (GAW) pour la mesure de la concentration atmosphérique de CO_2 , pour cette dernière décennie. Image tirée de WMO (2020).

Les mesures de surface Des stations de mesures atmosphériques réparties sur tout le globe réalisent des mesures de la concentration atmosphérique de CO_2 . Deux méthodes se distinguent. Les plus équipées disposent d'un système d'analyse en continu de la concentration atmosphérique de CO_2 présente dans l'air, qui est extrait à quelques dizaines de mètres au-dessus du sol depuis une tour ou un bâtiment élevé. Les stations moins équipées (dont certaines difficiles d'accès) remplissent quant à elles des flacons d'air qui sont ensuite envoyés dans des laboratoires pour analyses.

Ces mesures de surface, réalisées par divers réseaux de stations, sont réparties sur plusieurs bases de données. Par exemple, l'inversion des flux de CO_2 menées pour le *Copernicus*

Atmosphere Monitoring Service (CAMS) intègrent les mesures de surface provenant de cinq bases de données différentes (Chevallier et al., 2005; Chevallier, 2020). Les stations de surface participant à la mesure de la concentration atmosphérique de CO₂ pour le *Global Atmosphere Watch* (GAW) de l'Organisation Météorologique Mondiale (OMM) sont par exemple représentées sur la figure 1.7. Au niveau européen, on peut noter le réseau de stations ICOS³ qui participent au GAW.

La figure 1.7 montre que l'Europe de l'Ouest, l'Amérique du Nord et le Japon sont les zones les plus denses en stations de mesure au sol. Les tropiques et l'hémisphère Sud sont particulièrement sous-échantillonnés. La densification des mesures en Afrique, Amérique du Sud, Asie du Sud et du Sud-Est, Europe de l'Est, Sibérie et océans de l'hémisphère Sud est critique pour la mise en place d'un suivi des flux de carbone visant à informer les décideurs politiques (Ciais et al., 2014).

Les mesures aéroportées Les mesures de surface n'apportent pas de connaissance sur les variations verticales de la concentration atmosphérique de CO₂. Pour y accéder, une première approche consiste à faire des mesures depuis des avions. Des campagnes scientifiques régulières sont ainsi organisées sur des sites dédiés, principalement en Amérique du Nord (Crevoisier et al., 2010), en Sibérie et au-dessus de l'Amazonie (Ciais et al., 2014). Les compagnies commerciales contribuent également, via des programmes comme le *Comprehensive Observation Network for trace gases by Airliner* (CONTRAIL, Machida et al., 2008) par exemple.

Ces mesures de la concentration atmosphérique de CO₂ à différentes altitudes sont particulièrement intéressantes pour valider les estimations réalisées depuis des satellites qui sont sensibles à la colonne intégrée ou partielle de CO₂ et pas seulement à la concentration de surface (par exemple Crevoisier et al., 2009; Frankenberg et al., 2016). Ces mesures aéroportées sont également couramment utilisées comme données indépendantes pour évaluer les inversions des flux de CO₂ (par exemple Houweling et al., 2015; Chevallier et al., 2019), dont celles utilisées pour discuter le budget carbone global (Friedlingstein et al., 2020). Elles sont cependant limitées par l'altitude maximale de croisière des avions (~ 14 km pour les vols scientifiques, ~ 11 km pour les vols commerciaux).

Les mesures sous ballons Les ballons permettent de réaliser des mesures de la concentration atmosphérique de CO₂ jusqu'à des altitudes bien supérieures à celles que peuvent atteindre les avions. L'instrument « AirCore », initialement développé à la NOAA sur une idée de Pieter Tans (Tans, 2009; Karion et al., 2010), est un système qui, monté sous un ballon météorologique, permet notamment de réaliser un échantillonnage de la colonne atmosphérique entre 0 et 30 km d'altitude. Le concept a été repris et développé au Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) dans le cadre de la thèse de Membrive (2016). Depuis, le LMD et ses partenaires ont réalisés plus de 100 vols dans le cadre du programme français de AirCore⁴.

3. *Intergrated Carbon Observation System* : <https://www.icos-cp.eu/>

4. <https://aircore.aeris-data.fr/>

Des vols sont également réalisés lors de campagnes de mesures intensives comme *Monitoring of Atmospheric composition and Greenhouse gases through multi-Instrument Campaigns* (MAGIC) ⁵.

D'autres approches de mesures sous ballon météorologiques existent. On trouve notamment celle de l'*Atmospheric Measurements by Ultra-Light Spectrometer* (AMULSE, Joly et al., 2016, 2020), un spectromètre à diode laser très compact qui mesure directement la quantité de vapeur d'eau, et les concentrations de CO₂ et de CH₄ par l'absorption du signal d'une diode laser à fréquence réglable.

1.3.2 Télédétection de la concentration atmosphérique de CO₂ à partir de mesures satellites

Les observations de CO₂ par télédétection ne sont pas en contact direct avec la concentration observée, et reposent sur des mesures du rayonnement atmosphérique sensibles à cette concentration. Elles peuvent être réalisées par des instruments volant à bord de satellites (cette partie et la suivante), embarqués dans des avions ou posés à la surface de la Terre (la partie 1.3.4).

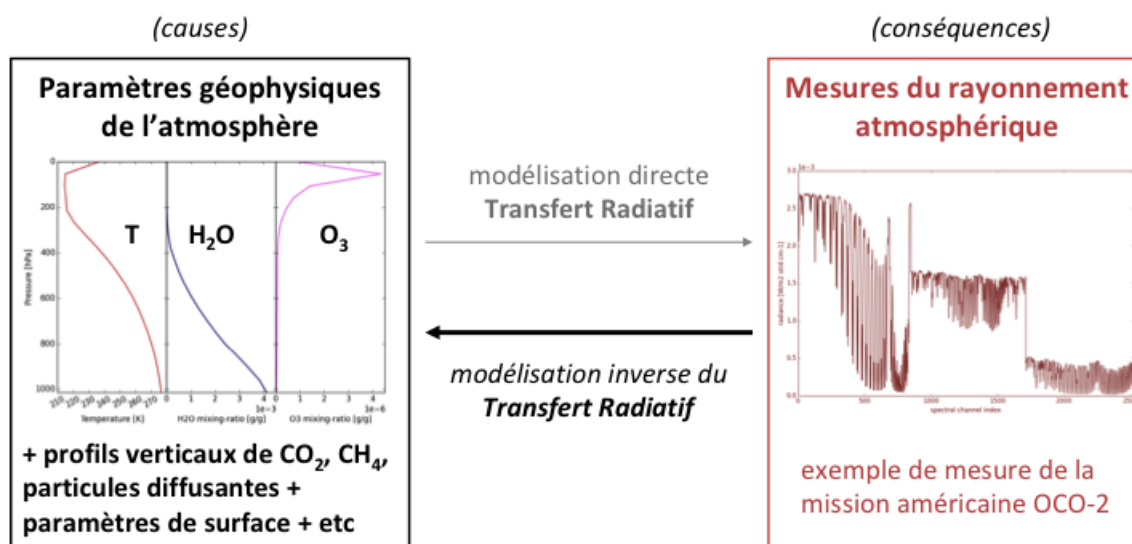


FIGURE 1.8 – Illustration des sens direct et inverse pour la télédétection de la concentration atmosphérique de CO₂ à partir de mesures du rayonnement atmosphérique.

La nature inverse du problème de télédétection Quelle que soit la configuration instrumentale, la télédétection consiste ici estimer la concentration atmosphérique de CO₂ en interprétant l'absorption du rayonnement atmosphérique observée dans les mesures. On parle ici de *modélisation inverse* du transfert radiatif. Le transfert radiatif est le domaine de

5. <https://magic.aeris-data.fr/>

la physique qui s'intéresse aux interactions entre le rayonnement et notre atmosphère, et le schéma sur la figure 1.8 illustre le sens du terme *inverse* pour le problème d'estimation de la concentration atmosphérique de CO₂. Les paramètres géophysiques inconnus de l'atmosphère (dont la concentration de CO₂) sont à l'origine (la cause) du rayonnement qui parvient jusqu'à l'instrument par transfert radiatif : c'est le sens *direct*. C'est donc parce que l'estimation de la concentration de CO₂ à partir d'une mesure de rayonnement atmosphérique consiste à remonter aux « causes » en partant des « conséquences » que l'on parle d'*inversion* car cette démarche est à rebours du sens *direct*.

Par la nature inverse du problème qu'elle cherche à résoudre, la télédétection repose ainsi fondamentalement sur la modélisation directe du transfert radiatif. Celle-ci suppose notamment une bonne connaissance des coefficients d'absorption du rayonnement par les gaz qui composent l'atmosphère. C'est la spectroscopie moléculaire, domaine de recherche actif à part entière, qui nous les donne.

Observation de « colonnes » de CO₂ Les mesures du rayonnement atmosphérique sont sensibles à la concentration du CO₂ sur toute ou partie de l'épaisseur de l'atmosphère. Cependant, les mesures infrarouges disponibles ne transportent usuellement pas assez d'information pour résoudre cette concentration sur la verticale, on obtient alors un contenu intégré sur toute l'épaisseur de l'atmosphère : on parle de « colonne intégrée » de CO₂. Si on note x , le profil vertical par couche de la concentration atmosphérique de CO₂, la colonne intégrée de CO₂, notée X_{CO_2} , s'exprime :

$$X_{\text{CO}_2} = h \cdot x \quad (1.1)$$

avec h , la fonction de pondération par la pression. Pour une couche atmosphérique i , h_i correspond au rapport entre nombre de molécules d'air présentes dans la couche i et le nombre de molécules d'air total sur la verticale. On trouve dans la littérature différentes méthodes pour calculer ce rapport avec plus ou moins d'approximations (par exemple Connor et al., 2008; O'Dell et al., 2012; Liuzzi et al., 2016). La plus simple consiste à considérer pour une couche i qu'il est égal au rapport entre l'épaisseur en pression Δp_i de la couche et la pression de surface (Liuzzi et al., 2016).

Domaines de l'infrarouge pour la télédétection du CO₂ On trouve des sensibilités à la concentration atmosphérique de CO₂ dans le proche infrarouge (rayonnement émis par le Soleil et situé après le visible, compris entre 0.7 μm et 2.5 μm) et dans l'infrarouge thermique (émission associée aux températures typiques de la Terre, comprise entre 2.5 – 15.5 μm). La physique du transfert radiatif n'étant pas identique entre ces deux domaines spectraux, les colonnes intégrées de CO₂ n'ont pas les mêmes *sensibilités verticales* selon qu'elles sont estimées à partir de mesures du proche infrarouge ou de l'infrarouge thermique. La sensibilité verticale donne les couches de l'atmosphère – et donc les altitudes – pour lesquelles l'estimation de la colonne est la plus fidèle. La figure 1.9 montre les sensibilités verticales typiques pour le proche infrarouge et l'infrarouge thermique. Les estimations réalisées à partir de mesures du proche infrarouge sont sensibles à la concentration du CO₂ sur toute l'épaisseur de l'atmosphère. Ainsi, on appelle (abusivement) les X_{CO_2} estimés à partir du rayonnement

proche infrarouge des « colonnes totales de CO₂ »⁶. Celles estimées à partir de l’infrarouge thermique sont principalement sensibles à la concentration du CO₂ dans la moyenne à haute troposphère (~ 12 km, ~ 200 hPa). Pour l’infrarouge thermique on ne parle donc pas de colonne totale, mais plus précisément de « colonne troposphérique partielle de CO₂ ».

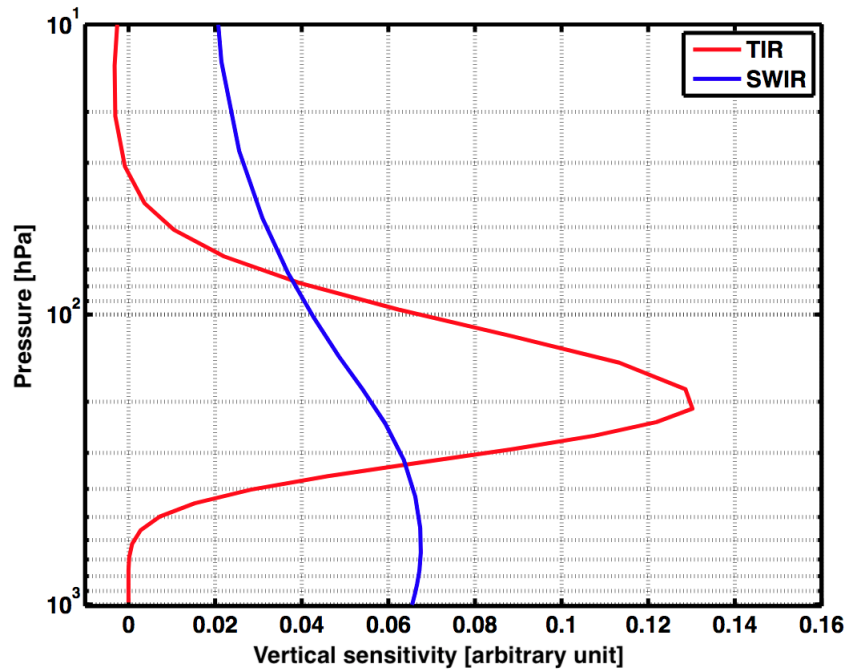


FIGURE 1.9 – Sensibilités verticales typiques (pondérées par le poids en pression des couches) des colonnes de CO₂ estimées à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge (**bleu**) et à partir de mesures de l’infrarouge thermique (**rouge**).

Les mesures des sondeurs infrarouges TOVS⁷ (par exemple Chédin et al., 2003), AIRS⁸ (par exemple Crevoisier et al., 2004; Chahine et al., 2005), IASI⁹ (par exemple Crevoisier et al., 2009; Liuzzi et al., 2016) ou TES¹⁰ (par exemple Kulawik et al., 2010) ont notamment été exploitées pour estimer la concentration atmosphérique de CO₂ à partir de mesures de l’infrarouge thermique. Concernant le proche infrarouge, domaine spectral étudié dans ce travail de thèse, on peut noter les missions *Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chemistry* (SCIAMACHY), *Greenhouse gases Observing SATellite* (GOSAT) et *Orbiting Carbon Observatory-2* (OCO-2) qui sont décrites plus en détails dans la section 1.4.

6. La suite du manuscrit pratiquera allègrement cet abus.

7. *Television and InfraRed Operational Satellite-Next generation* (TIROS-N) *Operational Vertical Sounder*, de la NOAA

8. *Atmospheric Infrared Sounder*, sur le satellite Aqua de la NASA

9. *Infrared Atmospheric Sounding Interferometer*, à bord des satellites européen MetOp-A,-B et -C

10. *Tropospheric Emission Spectrometer*, sur le satellite Aura de la NASA

Apports des observations satellites dans le proche infrarouge pour l'estimation des flux de CO₂ En plus des mesures de concentration de CO₂ réalisées par un ensemble de stations de surface, Rayner and O'Brien (2001) ont montré l'intérêt pour l'estimation des flux de CO₂ de disposer de colonnes intégrées de CO₂ obtenues à partir de mesures satellites. En effet, leur étude synthétique soulignait l'avantage majeur de la couverture globale des mesures satellites comparée à celle clairsemée des réseaux de stations sol (voir figure 1.7). Elle évaluait qu'une précision de 2.5 ppm obtenue pour des colonnes intégrées mensuelles, moyennées sur une grille de résolution $8^\circ \times 10^\circ$, permettrait d'égaliser la performance d'un réseau sol de taille moyenne à la couverture globale.

Depuis, les estimations de colonnes intégrées de CO₂ obtenues à partir des missions SCIAMACHY (Reuter et al., 2014)¹¹, GOSAT (par exemple Maksyutov et al., 2013; Basu et al., 2013; Chevallier et al., 2014; Houweling et al., 2015; Feng et al., 2016), et OCO-2 (par exemple Crowell et al., 2019; Chevallier et al., 2019) ont été utilisées, parfois seules, parfois accompagnées de mesures in-situ, pour des études d'inversion atmosphérique des flux de CO₂. Les différences observées entre les flux estimés à partir de données satellites et/ou in-situ sont principalement causées par (1) les erreurs de modélisation du transport atmosphérique et (2) les biais qui entâchent les mesures satellites. L'évaluation de leurs impacts respectifs est un sujet de recherche ouvert pour la communauté d'inversion atmosphérique. La section 1.4 reviendra par la suite sur les missions SCIAMACHY, GOSAT et OCO-2, mais aussi sur les limites identifiées dans les estimations de colonnes intégrées de CO₂ obtenues jusqu'à présent.

1.3.3 Vers l'observation des émissions anthropiques de CO₂ par imagerie spatiale

Les zones urbaines rassemblent 70% des émissions anthropiques liées à la combustion d'énergies fossiles sur de petites surface (Duren and Miller, 2012). Une surveillance fréquente des sources d'émission ponctuelles ou très localisées permettrait donc de couvrir une large fraction des émissions anthropiques de CO₂, rendant ainsi possible une vérification des progrès réalisés vers les objectifs de l'Accord de Paris, et ce de manière indépendante des déclarations d'émissions. Ces objectifs requièrent des concepts d'observation satellite différents de ceux mis en orbite jusqu'à présent (voir sections 1.4 et 1.5).

Des estimations de colonnes totales de CO₂, sensibles à la concentration atmosphérique du CO₂ dans la couche limite, réalisées à partir des mesures d'instruments imageurs (disposant d'une large fauchée avec de petits pixels adjacents pour réaliser des *images* de la concentration atmosphérique de CO₂) permettraient de détecter les fins panaches d'émissions anthropiques depuis des sources ponctuelles ou très localisées. La figure 1.10 montre ce à quoi pourrait ressembler une telle mesure au-dessus de la région de Berlin : on y voit le pa-

11. J'ai bien noté la vive discussion sur le sens du résultats annoncé par Reuter et ses co-auteurs, mais c'est la seule étude d'inversion atmosphérique des flux assimilant des résultats CO₂ issus de SCIAMACHY que j'ai trouvée. On trouve cependant différentes études d'inversion atmosphérique assimilant les résultats CH₄ issus de SCIAMACHY (par exemple Bergamaschi et al., 2009; Houweling et al., 2014).

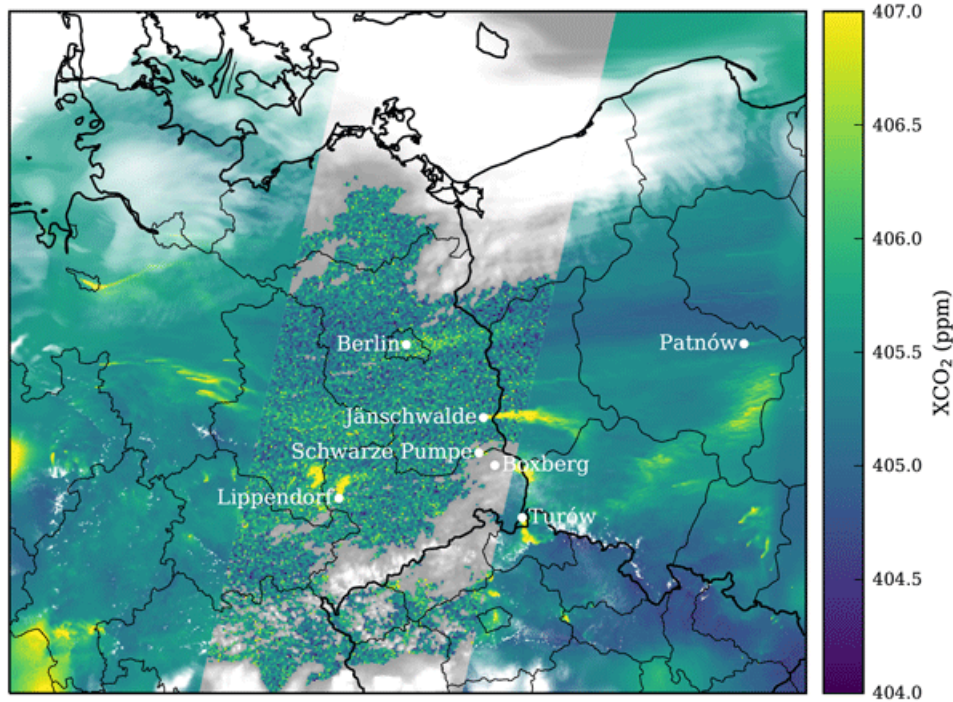


FIGURE 1.10 – Simulation de X_{CO_2} au-dessus de l’Allemagne, de la Pologne et de la République Tchèque pour le 23 avril 2015, et illustration des observations d’un instrument imageur avec une fauchée de 250 km. Image tirée de Kuhlmann et al. (2019).

nache d’émission de la ville ainsi que ceux de diverses centrales à charbon, qui se distinguent de la colonne de CO_2 de fond. Ces observations de la colonne totale de CO_2 peuvent ensuite être utilisées dans le cadre d’inversions du transport atmosphérique tel que décrit précédemment (Pillai et al., 2016; Broquet et al., 2018), ou bien exploitées grâce à des approches dites « de panache ». Ces approches, initiées par Bovensmann et al. (2010), reposent sur la mesure de la forme du panache et l’évaluation du réhaussement de la concentration atmosphérique de CO_2 observé dans le panache pour calculer, grâce à la connaissance de la vitesse du vent (souvent apportée par des modèles météorologiques), l’émission du point source associé au panache (Varon et al., 2018)¹². Elles ont déjà été mises en oeuvre pour des instruments aéroportés (par exemple Bovensmann et al., 2010; Fujinawa et al., 2021; Cusworth et al., 2021a), ainsi que pour des mesures OCO-2 bien que la géométrie d’observation ne soit pas idéale (par exemple Nassar et al., 2017; Reuter et al., 2019).

La surveillance opérationnelle des émissions anthropiques de CO_2 demande également de pouvoir réaliser des observations aussi fréquentes que possible. Des constellations de satellites doivent être alors envisagées pour augmenter la fréquence de revisite. Par exemple, d’après Kuhlmann et al. (2019), en considérant un satellite avec une fauchée large de 250 km, le nombre annuel de panaches détectés au-dessus de Berlin se situe entre 12 et 50, pour une constellation de 1 à 6 satellites, respectivement (avec prise en compte de la couverture nua-

12. Cette publication est dédié au CH_4 , mais le principe reste identique pour CO_2

geuse). Une constellation de 6 satellites offrirait une revisite quasi-quotidienne. Par ailleurs, si l'on s'intéresse au NO_2 , un polluant produit par la combustion d'énergies fossiles et dont les panaches sont bien plus détectables que ceux du CO_2 du fait de sa très faible concentration de fond, le nombre de panaches détectés par an au-dessus de Berlin serait compris entre seulement 22 et 108, pour une constellation de 1 à 6 satellites, respectivement (Kuhlmann et al., 2019). En effet, malgré la revisite quasi-quotidienne offerte par la constellation de 6 satellites, la couverture nuageuse empêcherait d'observer quelque panache que ce soit dans $\sim 70\%$ des survols. Ainsi, au-delà des perspectives intéressantes qu'elle ouvre, ce résultat rappelle que l'imagerie du CO_2 par satellite devra s'inscrire dans un plus grand ensemble d'observations du CO_2 atmosphérique, qui devra inclure également plus de mesures de surface (voir partie 1.3.1 et figure 1.7), qui sont, elles, disponibles quelle que soit la couverture nuageuse (Chevallier et al., 2020).

Ces nouvelles observations par imagerie du CO_2 atmosphérique participeraient à la mise en place d'un système complet de suivi du carbone sur Terre, dans tous ses réservoirs (Ciais et al., 2014). Du côté européen, les spécifications et premiers développements pour un support de vérification des émissions anthropiques de CO_2 ont notamment été initiés dans le cadre du projet *CO₂ Human Emissions* (CHE, Balsamo et al., 2021) de la Commission Européenne.

1.3.4 Observations par télédétection depuis les airs et le sol

En plus de la télédétection par satellites, des instrument observent également le CO_2 atmosphérique par télédétection depuis les airs, avec des instruments aéroportés, et depuis le sol.

Télédétection depuis les airs Les instruments aéroportés permettent de prototyper des concepts d'observation ou des approches d'estimation des flux dans des conditions proches de celles d'instruments embarqués sur des satellites, et ce à un moindre coût. Pour l'observation de la concentration atmosphérique des gaz à effet de serre depuis des avions, on note particulièrement les instruments MAMAP et AVIRIS-NG. Le *Methane Airborne Mapper* (MAMAP, Gerilowski et al., 2011) est le démonstrateur aéroporté de la mission proche infrarouge CarbonSat (non sélectionnée, ESA, 2015), et ses mesures permettent d'obtenir des observations de la concentration atmosphérique de CO_2 et de CH_4 au nadir, sous l'avion. L'*Airborne Visible/InfraRed Imaging Spectrometer Next Generation* (AVIRIS-NG Hamlin et al., 2011) de la NASA est un imageur aéroporté à très basse résolution spectrale mais très haute résolution spatiale. Ses mesures permettent entre autres de prototyper l'apport de l'imagerie pour déterminer les émissions de CO_2 issues de sources ponctuelles (par exemple Cusworth et al., 2021a).

Télédétection depuis le sol Les observations de la concentration atmosphérique de CO_2 par télédétection depuis le sol sont particulièrement intéressantes pour valider les observations réalisées à partir de mesures satellites. En effet, les mesures effectuées dans les deux

cas sont sensibles à toute ou partie de la colonne atmosphérique, contrairement aux mesures in-situ limitées en altitude.



FIGURE 1.11 – Carte des stations du *Total Carbon Column Observing Network* (TCCON). Téléchargée sur le Wiki TCCON.

Le *Total Carbon Column Observing Network* (TCCON, Wunch et al., 2011a)¹³ est un réseau de stations sol équipées de spectromètres à transformée de Fourier de très haute résolution spectrale, observant directement le Soleil à travers l’atmosphère. Leurs mesures du rayonnement proche infrarouge sont analysées par l’algorithme GGG2014 (Wunch et al., 2015) et fournissent les colonnes totales des gaz traces, dont celles de CO₂. Des travaux sont par ailleurs en cours pour tenter d’exploiter la grande quantité d’information contenue dans ces mesures très résolues spectralement, et estimer des profils verticaux de concentration de CO₂ plutôt que la seule colonne totale (Roche et al., 2021). Comme le montre la carte sur la figure 1.11, le réseau TCCON compte actuellement 28 stations opérationnelles sur le globe. Elles sont principalement situées dans l’hémisphère Nord et, comme pour les stations de mesure in-situ, les tropiques et l’hémisphère Sud sont cruellement sous-représentés. Les stations TCCON sont des cibles usuelles pour la validation des estimations de colonnes totale de CO₂ réalisées à partir de mesures satellites du rayonnement proche infrarouge (par exemple Reuter et al., 2011; Inoue et al., 2016; O’Dell et al., 2018).

En plus de ces stations fixes, il existe des interféromètres à transformée de Fourier très compacts, avec une résolution spectrale cependant plus faible, qui peuvent être déplacés et fournir des observations de la colonne totale de CO₂ à la manière de TCCON. C’est le cas de l’EM27/SUN de la société Bruker¹⁴ (Gisi et al., 2012; Hase et al., 2016) qui est utilisé dans différents groupes de recherche à travers le monde. Sa petite taille permet par exemple de l’emmener directement sur le terrain, dans la trace des satellites, lors de campagnes de

13. <https://tcon-wiki.caltech.edu/Main/WebHome>

14. <https://www.bruker.com/fr/products-and-solutions/infrared-and-raman/remote-sensing/em27-sun-solar-absorption-spectrometer.html>



FIGURE 1.12 – Un EM27/SUN déployé lors de la campagne de mesures mutli-instruments MAGIC 2020.

mesures mutli-instruments (voir figure 1.12). Par ailleurs, le nombre croissant d’EM27/SUN a conduit à l’intercalibration d’un ensemble d’instruments permettant la constitution d’un *COllaborative Carbon Column Observing Network* (COCCON, Frey et al., 2015, 2019). Un tel réseau permet par exemple de déployer autour d’une ville un ensemble d’EM27/SUN cohérents, afin d’observer les impacts des émissions anthropiques sur la colonne totale de CO_2 (Vogel et al., 2019). Au-delà de l’EM27/SUN, on peut également noter le *Compact High-Spectral-Resolution Infrared Spectrometer* (CHRIS, El Kattar et al., 2020), un interféromètre compact pouvant être déployé sur le terrain et qui propose des mesures dans l’infrarouge thermique en plus de celles dans le proche infrarouge.

1.4 Missions satellites passées et actuelles pour l’observation du CO_2 dans le proche infrarouge

Ce travail de thèse s’intéresse à l’estimation de la colonne totale de CO_2 à partir de mesures du rayonnement atmosphérique dans le proche infrarouge. Différentes missions satellites ont déjà été mises en orbite avec cet objectif, et cette section les présente dans un premier temps. L’expérience acquise grâce à elles a permis d’améliorer la qualité des estimations de X_{CO_2} réalisées à partir de leurs mesures mais aussi d’en comprendre les limites, que l’on décrira dans un second temps.

	SCIAMACHY	GOSAT	OCO-2
Période	2002 - 2012	2009 - ?	2014 - ?
Suite	-	GOSAT-2 (2018 - ?)	OCO-3 (2019 - ?)
Masse (instr./sat.)	198 kg / 8140 kg	250 kg / 1750 kg	140 kg / 449 kg
Orbite	799.8 km, héliosynchrone, passage à l'équateur 10:00	666 km, héliosynchrone, passage à l'équateur 12:49	705 km, héliosynchrone, passage à l'équateur 13:30 (A-Train)
Fréquence de revisite	6 jours	3 jours	16 jours
Résolution spatiale (pixel/fauchée)	60 × 30 km ² / 960 km	∅ = 10.5 km / 3 points pour ~ 520 km	1.3 × 2.3 km ² / 10 km
Géométrie (Paris et la France pour échelle)			
Nature de l'instrument	Spectromètre à réseau	Spectromètre à transformée de Fourier	Spectromètre à réseau
Bandes spectrales	0.600 - 0.800 μm (O ₂) 0.970 - 1.772 μm (CO ₂) 2.360 - 2.385 μm (CH ₄)	0.758 - 0.775 μm (O ₂) 1.56 - 1.72 μm (CO ₂ , CH ₄) 1.92 - 2.08 μm (CO ₂)	0.758 - 0.773 μm (O ₂) 1.591 - 1.622 μm (CO ₂) 2.043 - 2.083 μm (CO ₂)
Pouvoirs de résolution (λ/Δλ)	~ 1500 ~ 900 ~ 12000	~ 21750 ~ 22600 ~ 18300	~ 18000 ~ 19800 ~ 19800
Facteurs d'échantillonnage spectral	non trouvés	~ 2 ~ 0.75 - 1.1 ~ 0.7 - 0.9	2.6 - 3.5 2.3 - 3.2 2.2 - 3.2
Références	(Bovensmann et al., 1999; Buchwitz et al., 2005; ESA, 2021a)	(Yokota et al., 2009; Crisp et al., 2012; Kuze et al., 2012, 2016; Kataoka et al., 2017; ESA, 2021b)	(Crisp et al., 2017; ESA, 2021c)

TABLE 1.1 – Caractéristiques des missions SCIAMACHY, GOSAT et OCO-2. Les tracés de la géométrie d'observation sont inspirés d'O. Schneising (ESA, 2015).

1.4.1 Missions satellites passées et actuelles

Les principales missions satellites¹⁵ à avoir permis ou permettant l'estimation de la concentration atmosphérique de CO₂ à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge sont SCIAMACHY¹⁶, GOSAT¹⁷ et OCO-2¹⁸. Les caractéristiques de ces missions sont listées dans le tableau 1.1. Les satellites TanSat et PRISMA seront aussi décrits.

SCIAMACHY L'instrument SCIAMACHY (Bovensmann et al., 1999) fait partie de la charge utile scientifique de l'*Environmental Satellite* (EnviSat) de l'agence spatiale européenne (ESA), mis sur orbite en octobre 2002 (Buchwitz et al., 2005). Cet instrument a été conçu pour étudier la physique et la chimie de l'atmosphère et réalise des mesures qui ont permis – entre autres – d'estimer les colonnes totales des principaux gaz à effet de serre : CO₂, CH₄ et N₂O. La fin de la mission a été déclarée par l'ESA en 2012.

GOSAT Le satellite japonais GOSAT est la première mission satellite entièrement dédiée à l'observation des gaz à effet de serre depuis l'espace. Elle a été mise en orbite en janvier 2009 et observe le rayonnement atmosphérique dans le proche infrarouge (voir tableau 1.1) mais aussi dans l'infrarouge thermique. Les mesures de ce domaine spectral ont cependant été moins utilisées du fait de difficultés de calibration (par exemple Kataoka et al., 2014; Saitoh et al., 2016). Les mesures du rayonnement proche infrarouge réalisées par GOSAT permettent d'estimer les colonnes totales de CO₂ et de CH₄, avec pour ambition d'aider à réduire l'incertitude sur les flux de CO₂ à l'échelle sub-continentale (Hamazaki et al., 2004).

Le satellite GOSAT continue de fournir des données après plus de 12 ans sur orbite, et le carburant restant peut permettre de la maintenir pour encore une décennie (Kuze et al., 2021). Depuis son lancement, de nombreux groupes de recherche ont exploité ses mesures du rayonnement proche infrarouge pour estimer la colonne totale de CO₂ (par exemple Wunch et al., 2011b; Guerlet et al., 2013; Cogan et al., 2012; Inoue et al., 2016; Noël et al., 2021), et certains de ces produits X_{CO_2} ont à leur tour été utilisés pour l'estimation des flux de CO₂ (par exemple Maksyutov et al., 2013; Basu et al., 2013; Chevallier et al., 2014; Houweling et al., 2015; Feng et al., 2016).

Le satellite GOSAT a été suivi en 2018 par le satellite GOSAT-2, qui est basé sur un concept d'observation très similaire (par exemple Suto et al., 2021).

OCO-2 Le satellite américain OCO-2 a été mis en orbite en juillet 2014 (Crisp et al., 2017) et fait suite au satellite OCO qui avait été perdu lors de son lancement en 2009 (Palmer and Rayner, 2009). Ses objectifs sont similaires à ceux d'OCO qui ambitionnait d'estimer la colonne totale de CO₂ avec une précision d' ~ 1 ppm afin de pouvoir substantiellement réduire les incertitudes sur les flux de CO₂ à la surface de la planète, et ce à l'échelle régionale

15. Un site utile qui centralise les informations, parfois trop éparpillées dans les articles : <https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions>.

16. Pour rappel : *Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chemistry*

17. Pour rappel : *Greenhouse gases Observing SATellite*

18. Pour rappel : *Orbiting Carbon Observatory-2*

(Crisp et al., 2004). Il observe le rayonnement atmosphérique dans le proche infrarouge avec une haute résolution spectrale et une fine résolution spatiale (voir tableau 1.1 et figure 1.13), et l’exploitation de ses mesures permet d’estimer la colonne totale de CO_2 .

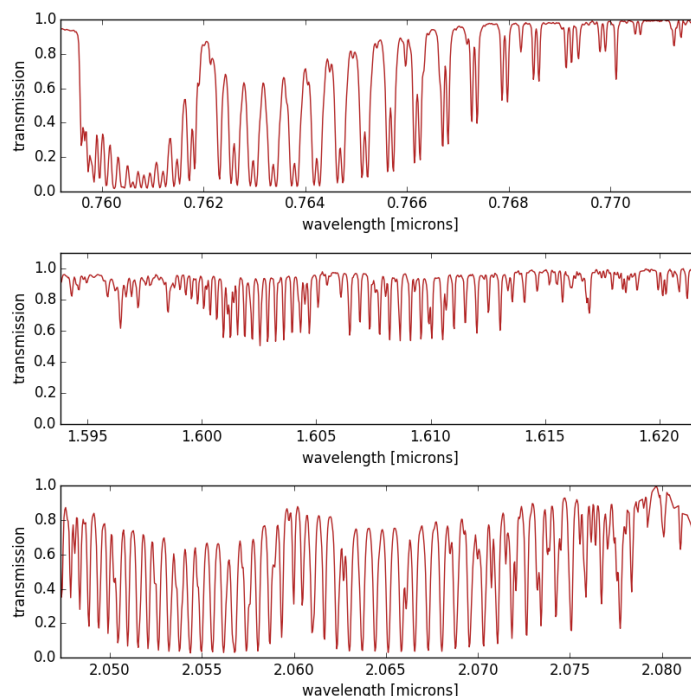


FIGURE 1.13 – Exemple d’observation réalisée le 13/06/2019 vers Aire-sur-l’Adour par le satellite OCO-2, pour les trois bandes spectrales qu’il mesure : bande A de l’ O_2 (haut), bande CO_2 dite « faible » (milieu) et bande CO_2 dite « forte ». Les intervalles en longueur d’onde des trois bandes sont un peu plus étroits que ceux donnés dans le tableau 1.1 car les mauvais pixels des extrémités des bandes mesures ont été filtrés (voir partie 3.4.1).

Depuis 7 ans maintenant, la mission fournit des X_{CO_2} dont les résultats de validation par rapport à TCCON s’améliorent au fil des versions de l’algorithme *Atmospheric CO₂ Observation from Space* (ACOS, 2021), qui réalise le traitement « officiel » des mesures d’OCO-2. Pour le mode d’observation au nadir, les estimations sur terre sont par exemple passées d’une précision évaluée à 1.31 ppm pour la B7 (Wunch et al., 2017), à 1.08 ppm pour la B8 (O’Dell et al., 2018), la B9 corrigeait des erreurs de la B8 (Kiel et al., 2019) et le reprocessing de toutes les données pour la B10 est actuellement en cours (O’Dell et al., 2021). Les colonnes totale de CO_2 produites par ACOS ont trouvé des applications pour l’estimation des flux de CO_2 à l’échelle globale (par exemple Crowell et al., 2019; Chevallier et al., 2019) ainsi que pour le prototypage de méthode dites « de panache » (par exemple Nassar et al., 2017; Reuter et al., 2019). Par ailleurs, au-delà d’ACOS, les mesures d’OCO-2 sont également exploitées par de nombreux groupes de recherche dans le monde (par exemple Reuter et al., 2017a; Wu et al., 2018; Somkuti et al., 2020; David et al., 2021).

L’*Orbiting Carbon Observatory-3* (OCO-3) est un instrument identique à OCO-2 qui a

été installé sur la Station Spatiale Internationale (ISS) en mai 2019. L’orbite particulière de l’ISS, très différente des orbites polaires héliosynchrones, a conduit à proposer une stratégie d’observation spécifique pour OCO-3. Elle inclut notamment un mode de visée nommé *Snapshot Area Map* (SAM) qui scanne intensément des cibles d’environ $80 \times 80 \text{ km}^2$ (les environs d’une mégapole comme Los Angeles par exemple) lorsque l’ISS les croise sur sa trajectoire. Ces SAM proposent ainsi des observations de X_{CO_2} très concentrées permettant de prototyper certaines méthodes d’étude des flux reposant sur l’imagerie de X_{CO_2} . Ces SAMs sont collectées pour une même cible sur différents jours mais aussi à différents heures de survol, offrant ainsi l’opportunité d’explorer la composante diurne du cycle du carbone (Eldering et al., 2019; Kiel et al., 2021).

TanSat Le satellite chinois TanSat a été mis en orbite en décembre 2016. Il repose sur un concept d’observation du rayonnement proche infrarouge assez similaire à celui d’OCO-2, avec un pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ néanmoins plus faible pour les deux bandes sensibles au CO_2 (~ 12500 pour TanSat, comparé à ~ 20000 pour OCO-2). En plus du spectromètre à réseau qui réalise ces mesures, le satellite compte notamment sur le *Cloud and Aerosol Polarimetry Imager* (CAPI) pour améliorer les contraintes sur les particules diffusantes présentes sur le chemin optique qui perturbent l’estimation de X_{CO_2} (voir partie 1.4.2). De premiers résultats ont été obtenus en utilisant seulement la bande sensible au CO_2 vers $1.6 \mu\text{m}$ (Yang et al., 2018; Liu et al., 2018). Des avancées sur la calibration de la bande sensible à l’ O_2 (nécessaire pour la connaître la longueur du chemin optique) ont permis plus récemment d’améliorer les estimations de X_{CO_2} réalisées à partir des mesures de TanSat (Yang et al., 2020).

PRISMA La mission satellite italienne *PRecursore IperSpettrale della Missione Applicativa* (PRISMA) réalise depuis son lancement en 2019 des mesures d’imagerie (fauchée de 30 km) dans le visible et le proche infrarouge à très basse résolution spectrale ($\lambda/\Delta\lambda \sim 140$ vers $1.6 \mu\text{m}$) mais très fine résolution spatiale (30 m). Ses mesures sont destinées à l’étude de l’environnement par télédétection avec des applications pour la connaissance des propriétés des sols, la gestion des écosystèmes, ressources forestières ou cultures (Cogliati et al., 2021). Malgré cette très faible résolution spectrale, ses mesures sont sensibles aux quantités intégrées de CO_2 et de CH_4 dans l’atmosphère, et peuvent être exploitées pour l’observation de panaches d’émissions anthropiques issus de sources ponctuelles (Cusworth et al., 2021a; Guanter et al., 2021).

1.4.2 Limites actuelles des observations de la colonne totale de CO_2 dans le proche infrarouge

L’expérience acquise grâce aux missions satellites passées et actuellement en vol a permis de mettre en lumière les limites actuelles des estimations de X_{CO_2} réalisées à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge. Ces limites tombent dans deux catégories assez

générales : (1) l'exactitude (*accuracy* in English) des estimations réalisées et (2) la résolution spatiale et la fréquence de revisite des missions actuelles.

Erreurs « systématiques » des estimations de X_{CO_2} Les premières estimations de X_{CO_2} réalisées à partir des mesures de SCIAMACHY ont permis d'identifier au-dessus du Sahara des erreurs systématiques corrélées à la saisonnalité de l'émission de poussières désertiques. Au Sahara mais au-dessus de tous les continents en général, une correction ou prise en compte de l'effet des aérosols sur les X_{CO_2} estimés est nécessaire pour réaliser des estimations de flux pertinentes (Houweling et al., 2005). En effet, des études synthétiques ont par exemple conclu qu'une perturbation systématique de quelques dixièmes de ppm des X_{CO_2} estimés (qui pourrait être causée par une mauvaise prise en compte des aérosols par exemple), cohérente à l'échelle régionale, suffisait à produire des effets délétères sur l'estimation des flux (par exemple Chevallier et al., 2007; Miller et al., 2007).

Ces résultats ont conduit à inclure l'inversion de paramètres associés aux nuages fins ou aérosols, maintenant considérée comme indispensable dans les algorithmes de traitement des mesures du rayonnement proche infrarouge. Néanmoins, l'évaluation des résultats qu'ils produisent par rapport aux colonnes totales de référence fournies par TCCON montrent que des biais systématiques persistent. Ceux-ci sont aussi bien causés par la nature fondamentalement mal-posée du problème de l'estimation de X_{CO_2} que par des erreurs de modélisation du transfert radiatif ou bien de calibration des instruments. Ainsi, des corrections empiriques de biais par rapport à des proxys de vérité comme TCCON ont été mises en place pour compenser ces erreurs systématiques persistantes (par exemple Cogan et al., 2012; Guerlet et al., 2013; Reuter et al., 2017a; O'Dell et al., 2018; Yang et al., 2020). Bien que ces résultats soient corrigés empiriquement de leurs biais, des différences significatives dans les flux inversés à partir de produits différents persistent (par exemple Chevallier et al., 2019).

Couverture spatiale et temporelles insuffisantes vis-à-vis des ambitions actuelles Les mesures de SCIAMACHY et GOSAT ont permis de détecter depuis l'espace des réhaussements de X_{CO_2} associés aux émissions anthropiques de CO_2 (par exemple Kort et al., 2012; Schneising et al., 2013; Janardanan et al., 2016). Cependant, leur géométrie d'observation ne permet pas de collecter des observations suffisamment fines, denses et fréquentes pour contraindre les émissions anthropiques. Les résultats issus de ces missions ont principalement été exploités pour l'étude des flux naturels de gaz à effet de serre, à l'échelle globale ou régionale. Quant à OCO-2, sa géométrie d'observation a permis de tester certaines approches dites « de panache » pour estimer les émissions anthropiques issues de sources ponctuelles (par exemple Nassar et al., 2017; Reuter et al., 2019; Zheng et al., 2020; Nassar et al., 2021). Cependant, du fait de la très petite fauchée d'OCO-2 (voir tableau 1.1), seuls quelques rares cas sont étudiés, et la fraction des émissions anthropiques finalement contrainte reste faible. Ce constat illustre de manière claire les potentiels apports de l'imagerie du X_{CO_2} réalisée par des instruments volant en constellation (dans la limite de la couverture nuageuse, voir partie 1.3.3).

1.5 Concepts planifiés ou à l'étude pour l'observation du CO₂ par satellite dans le proche infrarouge

Les prochaines missions satellites d'observation du CO₂ à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge visent à répondre à toutes ou partie des limites identifiées pour les missions passées et actuelles, et décrites précédemment. Cette section présente rapidement les caractéristiques et ambitions des futures missions déjà planifiées ou des concepts à l'étude. Celles de MicroCarb, Copernicus CO₂ Monitoring (CO₂M) et SCARBO sont détaillées dans le tableau 1.2 et celles de GOSAT-GW, CO2Image, et Carbon Mapper sont données dans le tableau 1.3. On donnera aussi quelques informations sur le concept TanSat-2 et sur celui de GeoCarb.

La mission française MicroCarb Avec un lancement prévu mi 2022 - fin 2023, la mission française MicroCarb vise principalement les flux naturels de CO₂ en proposant un concept d'observation proche de celui d'OCO-2, avec une haute résolution spectrale, une fine résolution spatiale et une fauchée étroite (voir tableau 1.2). Cette contribution française à l'observation du CO₂ atmosphérique par satellite permettra de faire le lien entre la mission OCO-2 et la mission européenne CO₂M prévue plus tard dans la décennie. En plus des trois bandes spectrales observées par OCO-2, MicroCarb mesurera le rayonnement proche infrarouge dans une bande sensible à l'O₂, vers 1.27 μm . L'information supplémentaire offerte par cette bande devrait permettre de mieux contraindre les paramètres liés aux particules diffusantes, et donc réduire les erreurs systématiques qu'elles peuvent causer (Bertaux et al., 2020; Jouglet et al., 2021).

Le concept européen Copernicus CO₂ Monitoring (CO₂M) CO₂M (ou Sentinel-7) est la composante spatiale d'un système européen de surveillance des émissions anthropiques de gaz à effet de serre, dont l'ambition est de contribuer à l'effort de vérification de l'Accord de Paris. Le concept repose sur l'imagerie de la colonne totale de CO₂ avec une résolution spectrale moyenne (comparée à OCO-2 ou MicroCarb), une résolution spatiale d'environ 2 km et une fauchée de 250 km (voir tableau 1.2). En plus des mesures dans les trois bandes spectrales usuelles du proche infrarouge (O₂ à 0.76 μm et CO₂ à 1.6 et 2.05 μm), CO₂M aura un imageur visible afin d'estimer la colonne totale de NO₂, dont les panaches d'émission anthropique sont plus facilement détectables que ceux du CO₂ (voir 1.3.3). Finalement, un polarimètre multi-angles (MAP), instrument dédié aux aérosols, sera également présent afin de contraindre ces paramètres et réduire leurs impacts délétères sur les estimations de X_{CO_2} (Meijer, 2020). La mission CO₂M comptera jusqu'à trois satellites pour augmenter la fréquence des revisites.

Le Space CARBON Observatory (SCARBO) Le projet du Space CARBON Observatory (SCARBO) est financé par le programme de recherche Horizon 2020 de la Commission Européenne et est piloté par Airbus Defence and Space. Il propose un concept de constellation de petits satellites à bas coût qui offrirait une revisite journalière voire pluri-quotidienne

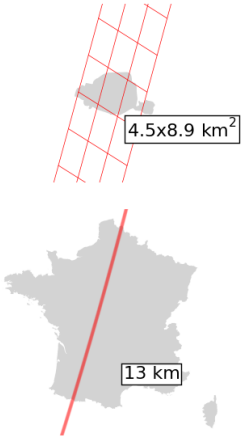
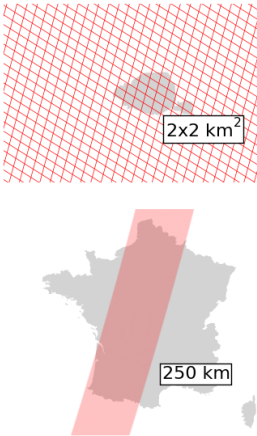
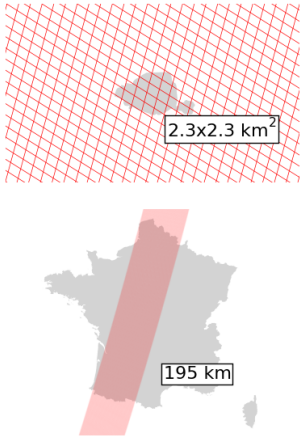
	MicroCarb	CO ₂ M	SCARBO
Lancement	mi 2022 - fin 2023	2025	-
Constellation	non	jusqu'à 3 satellites	~ 24 satellites
Masse (instr./sat.)	63 kg / 170 kg	~ 160 kg / ~ 1050 kg (CarbonSat, ESA, 2015)	~ 7 kg / < 100 kg
Orbite	649 km, héliosynchrone, passage à l'équateur 10:30	héliosynchrone, passage à l'équateur proche de 12:00	600 km, héliosynchrone (2 plans 12:00 / 14:00) ou dérivante ($i = 54^\circ$)
Fréquence de revisite	25 jours	< 7 jours	< 1 jour
Résolution spatiale (pixel/fauchée)	$4.5 \times 8.9 \text{ km}^2$ / 13.5 km	$2 \times 2 \text{ km}^2$ / > 250 km	$2.3 \times 2.3 \text{ km}^2$ / 195.5 km
Géométrie (Paris et la France pour échelle)			
Nature de l'instrument	Spectromètre à réseau	Spectromètre à réseau	Matrice d'interféromètres de Fabry-Perot
Bandes spectrales	0.758 - 0.769 μm (O ₂) 1.597 - 1.619 μm (CO ₂) 2.023 - 2.051 μm (CO ₂) 1.265 - 1.282 μm (O ₂)	0.747 - 0.773 μm (O ₂) 1.590 - 1.675 μm (CO ₂ , CH ₄) 1.990 - 2.095 μm (CO ₂)	sensible aux bandes à 0.76 μm (O ₂), 1.6 μm (CO ₂), 1.65 μm (CH ₄), 2.05 μm (CO ₂)
Pouvoirs de résolution ($\lambda/\Delta\lambda$)	~ 25400 ~ 25750 ~ 25800 ~ 25800	~ 6300 ~ 5400 ~ 5800	-
Facteurs d'échantillonnage spectral	~ 3 ~ 3 ~ 3 ~ 3	> 2.8 > 2.8 > 2.8	-
Mesures supplémentaires	-	Aérosols (MAP) et NO ₂	Aérosols (MAP)
Références	(Bertaux et al., 2020; Joulet et al., 2021)	(Meijer, 2020)	(Brooker et al., 2018; SCARBO, 2021a)

TABLE 1.2 – Caractéristiques des concepts MicroCarb, CO₂M et SCARBO. Les tracés de la géométrie d'observation sont inspirés d'O. Schneising (ESA, 2015).

des principales sources d'émission anthropique de CO₂. Une telle constellation pourrait par exemple combler les trous dans les revisites d'une mission de référence comme CO₂M qui, à moins de 6 satellites, n'offrira pas de couverture quotidienne globale. Pour réduire la taille des satellites – et les coûts –, le concept proposé par SCARBO compte sur un instrument très compact (~ 7 kg), nommé NanoCarb, qui imagerait des *interférogrammes tronqués* optimalement sensibles au CO₂ et CH₄ et non des spectres, sur une fauchée d'environ 200 km et avec une résolution spatiale de 2 km (Brooker et al., 2018; Gousset et al., 2019). Comme pour CO₂M, il serait accompagné d'un polarimètre multi-angles (MAP) pour mieux contraindre les aérosols sur le chemin optique. Ici, ce polarimètre serait SPEXone, un instrument développé par l'Institut néerlandais pour la recherche spatiale (Hasekamp et al., 2019). Aucune date de lancement n'est encore proposée, le projet SCARBO vise à réaliser la preuve de concept d'une telle constellation.

GOSAT-GW À la suite de GOSAT et GOSAT-2, l'Agence spatiale japonaise (JAXA), l'Institut national d'études environnementales (NIES) et le ministère japonais de l'environnement ont programmé la mission *Global Observing Satellite for Greenhouse gases and Water cycle* (GOSAT-GW). Elle réalisera de l'imagerie de la colonne totale de CO₂ selon deux géométries d'observation programmables (encore à l'étude, voir tableau 1.3), accompagnée de l'imagerie de NO₂ afin de faciliter la détection des panaches d'émissions anthropiques. Contrairement aux prochains concepts décrits précédemment, elle ne mesurera le rayonnement proche infrarouge que dans deux bandes spectrales, la première sensible à l'O₂ (0.76 μm) et la seconde au CO₂ (1.6 μm). Son lancement est prévu pour 2023 (Matsunaga and Team, 2021; Tsujihara and Team, 2021).

CO2Image La détectabilité des panaches d'émission anthropique de CO₂ est influencée par l'erreur aléatoire et la résolution spatiale de l'imagerie de X_{CO_2} . Les caractéristiques de CO₂M lui permettront de détecter les panaches issus de sources ponctuelles ou peu étalées dont l'émission est supérieure à 10 MtCO₂/an (Wilzewski et al., 2020; Strandgren et al., 2020). Pour couvrir des émissions anthropiques inférieures à 10 MtCO₂/an, la *Deutsches Zentrum für Luft-und Raumfahrt* (DLR, Agence spatiale allemande) propose le concept de CO2Image, basé sur la seule mesure de la bande proche infrarouge sensible au CO₂ à 2.0 μm , à une résolution spectrale très dégradée mais à la résolution spatiale très fine (voir tableau 1.3). Le concept a passé la phase d'étude de faisabilité et serait lancé en 2025.

Carbon Mapper Carbon Mapper Inc. est une société américaine à but non lucratif, lancée en 2021, qui rassemble différents parties prenantes autour d'un projet de constellation de satellites imageurs, afin de mieux informer les émissions anthropiques de CO₂ et de CH₄. Leur concept d'observation serait basé sur l'imageur à très fine résolution spatiale et très faible résolution spectrale AVIRIS-NG, développé par la NASA ¹⁹. Deux premiers satellites de démonstration seraient lancés en 2023, et la constellation serait opérationnelle en 2025.

19. <https://carbonmapper.org/>

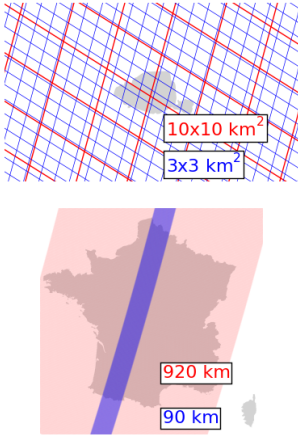
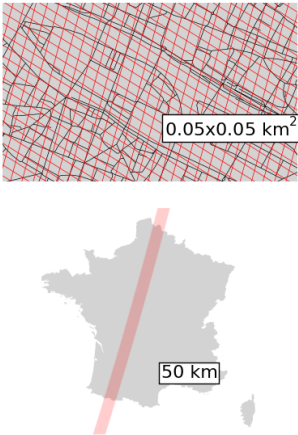
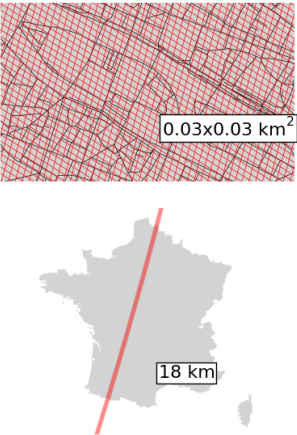
	GOSAT-GW	CO2Image	Carbon Mapper
Lancement	2023	2025	2023 - 2025
Constellation	non	oui	oui
Masse (instr./sat.)	non trouvée / ~ 2900 kg	90 kg / ~ 250 kg	70 kg / 175 kg
Orbite	666 km, héliosynchrone, passage à l'équateur 13:30	600 km héliosynchrone	400 km, héliosynchrone
Fréquence de revisite	3 jours	non trouvée	1 - 7 jours
Résolution spatiale (pixel/fauchée)	$10 \times 10 \text{ km}^2$ / 920 km $3 \times 3 \text{ km}^2$ / 90 km	$50 \times 50 \text{ m}^2$ / 50 km	$30 \times 30 \text{ km}^2$ / 18 km
Géométrie (Paris / l'Île de la Cité et la France pour échelle)			
Nature de l'instrument	Spectromètre à réseau	Spectromètre à réseau	Spectromètre à réseau
Bandes spectrales	$0.7 \mu\text{m}$ (O_2) $1.6 \mu\text{m}$ (CO_2)	$1.982 - 2.092 \mu\text{m}$ (CO_2)	$0.400 - 2.500 \mu\text{m}$
Pouvoirs de résolution ($\lambda/\Delta\lambda$)	> 14000 > 8000	~ 1600	360 - 400 (à 1.6 et $2.0 \mu\text{m}$)
Facteurs d'échantillonnage spectral	non trouvés	3	1
Mesures supplémentaires	NO_2 et cycle de l'eau	-	-
Références	(Matsunaga and Team, 2021; Tsujihara and Team, 2021)	(Strandgren et al., 2020; Wilzewski et al., 2020)	(Hamlin et al., 2011; Duren and Team, 2021)

TABLE 1.3 – Caractéristiques des concepts GOSAT-GW, CO2Image et Carbon Mapper. Les tracés de la géométrie d'observation sont inspirés d'O. Schneising (ESA, 2015).

TanSat-2 La mission chinoise TanSat-2 prévoit de mettre en place une constellation de satellites dont les mesures d'imagerie permettront d'estimer les colonnes totales de CO₂, CH₄, NO₂ et CO. Elles seront accompagnées d'un polarimètre mutli-angles pour mieux contraindre les particules diffusantes et un système de mesure active par Lidar est mentionné. Les lancements sont prévus pour 2025-2026 (Yang and Team, 2021).

GeoCarb La mission américaine GeoCarb propose d'étudier le cycle du carbone des deux Amériques (entre 50°N et 50°S) grâce la grande fréquence de revisite que peut offrir un satellite géostationnaire. Le concept d'observation aura une résolution spectrale proche de celle d'OCO-2 et permettra de réaliser des estimations de colonnes totales de CO₂, CH₄, CO ainsi que des estimations de Fluorescence induite par le Soleil. Les mesures auront une résolution spatiale comprise entre 5 et 10 km. Le lancement est prévu pour 2024 ou 2025 (Moore III et al., 2018; Somkuti et al., 2021).

1.6 Motivation du travail de thèse

La décennie qui s'ouvre s'annonce extrêmement riche en concepts d'observation de la concentration atmosphérique de CO₂ à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge. Après GOSAT et OCO-2 qui ont proposé des observations somme toute assez similaires, les prochains concepts déjà planifiés et ceux en cours d'étude explorent un univers beaucoup plus vaste de possibilités. Observation d'espèces co-émises comme le CO et le NO₂, instruments additionnels dédiés aux aérosols, choix des bandes spectrales observées, résolution spatiale et résolution spectrale, voire même nature de la mesure effectuée dans le cas du concept SCARBO : de nombreux paramètres de conception ont été repensés pour répondre à l'ambition globale d'un suivi des émissions anthropiques de CO₂ à partir de mesures spatiales. Mais quels sont donc les impacts des caractéristiques de ces prochains concepts sur la colonne totale de CO₂ estimée à partir de leurs mesures ? À quelle précision permettent-ils de l'estimer ? Comment le contenu en information géophysique des mesures est-il modifié ? Que deviennent les sensibilités des colonnes totales obtenues par télédétection à la (mé)connaissance de variables interférant dans les estimations ? Ou bien à la (mé)connaissance de paramètres essentiels à la modélisation des mesures comme ceux fournis par la spectroscopie des gaz étudiés ? **Ce travail de thèse propose ici de s'intéresser aux performances et sensibilités de l'estimation de la colonne totale de CO₂ pour les prochains concepts d'observation dans le proche infrarouge.**

Cette thèse a été financée par Airbus Defence and Space et s'inscrit en partie dans le cadre du projet européen SCARBO, qui vise à faire la preuve de concept d'une constellation de petits satellites mesurant des *interférogrammes tronqués* pour estimer la colonne totale de CO₂. La nature de cette mesure, effectuée par l'instrument NanoCarb, est tout à fait particulière comparée aux spectres mesurés par tous les autres concepts. Cette thèse vise donc en premier lieu à évaluer s'il est possible d'estimer X_{CO_2} à partir des interférogrammes

tronqués de NanoCarb et, si oui, à en dessiner les performances, limites et voies d'amélioration. Comme pour les concepts mesurant des spectres, ces estimations peuvent être polluées par la mauvaise connaissance des aérosols. On cherchera donc à établir l'intérêt de disposer d'un instrument dédié aux aérosols pour un tel concept.

La nature si atypique de la mesure effectuée par NanoCarb permet d'effectuer de l'imagerie à partir d'un instrument extrêmement compact. Pour beaucoup des prochains concepts reposant sur la mesure de spectres, la résolution spatiale et la fauchée nécessaires pour faire de l'imagerie sont obtenues au prix d'un compromis sur la résolution spectrale des observations. Ainsi, c'est au travers d'une exploration de l'impact de la résolution spectrale sur les performances et sensibilités de l'estimation de X_{CO_2} que l'on parcourt les prochains concepts d'observation dans le proche infrarouge, des plus faiblement (Carbon Mapper $\lambda/\Delta\lambda \sim 360$) aux plus fortement (MicroCarb $\lambda/\Delta\lambda \sim 25000$) résolus. Cette exploration vise à mettre en lumière ce qui rapproche ou éloigne les futurs concepts d'observation du CO_2 atmosphérique, dont les mesures ou résolutions spectrales seront extrêmement diverses.

1.7 Plan du manuscrit

Cette introduction a présenté le contexte du suivi de la concentration atmosphérique de CO_2 ainsi que les caractéristiques des prochains concepts qui chercheront à l'observer à partir de mesures satellites du rayonnement proche infrarouge.

Les chapitres 2 et 3 mettent en place les modélisations directe et inverse utilisées pour répondre aux objectifs de ce travail.

Le chapitre 2 traite de la *modélisation directe* du transfert radiatif et vise à illustrer les étapes essentielles qui permettent, à partir d'un état donné de l'atmosphère et de la surface terrestre, de simuler des observations satellites infrarouges. Partant de la spectroscopie et des équations fondamentales du transfert radiatif, il présente finalement le modèle de transfert radiatif 4A/OP utilisé pour cette thèse.

Le chapitre 3 décrit l'algorithme d'estimation optimale qui nous permet ici d'*inverser* le transfert radiatif. Ce travail de thèse a débuté par une implémentation de l'estimation optimale dans un code nommé Adaptable 4A Inversion (5AI) et basé sur le modèle de transfert radiatif direct 4A/OP. Elle est appliquée aux mesures réelles du satellite américain OCO-2, et les sensibilités des résultats obtenus à la connaissance de la spectroscopie ainsi qu'à la prise en compte de la diffusion par des aérosols sont étudiées.

Le chapitre 4 présente l'étude de performance du concept proposé dans le cadre du projet SCARBO pour l'estimation de la colonne totale de CO_2 . Le contenu en information des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb y est détaillé, ainsi que l'origine de certaines de ses limites. L'intérêt d'inclure un instrument dédié aux aérosols sur les satellites SCARBO est mis en évidence, et les résultats de performance obtenus sont généralisés au travers d'une approche par paramétrisation d'erreur. Une première tentative de traitement de mesures collectées par le prototype aéroporté de NanoCarb est finalement présentée.

Le chapitre 5 explore l'impact de la résolution spectrale sur les performances et sensibilités de l'estimation de X_{CO_2} à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge. Pour un instrument fictif, identique au concept de CO₂M sauf pour le pouvoir de résolution que l'on fait évoluer, on examine comment changent (1) les performances, quantités d'information et sensibilités verticales des estimations de X_{CO_2} ; (2) les sensibilités des estimations à la méconnaissance a priori des paramètres géophysiques interférants; (3) les sensibilités des estimations à la (mé)connaissance des paramètres spectroscopiques. Ces tests sont également effectués pour les concepts CO₂M, MicroCarb et SCARBO. La comparaison des résultats obtenus cherche à mettre en évidence ce qui rapproche ou éloigne les estimations de X_{CO_2} réalisées à partir des mesures d'un large ensemble de concepts d'observation du CO₂.

Finalement, le chapitre 6 résume les conclusions de cette thèse et en trace les perspectives.

Chapitre 2

Modélisation directe du transfert radiatif dans l'infrarouge pour l'atmosphère terrestre

2.1 Introduction

Les concepts d'observation étudiés dans ce travail réalisent des mesures du rayonnement atmosphérique dans le proche infrarouge dont l'inversion permet de déduire l'état de l'atmosphère et de la surface, et en particulier la concentration des gaz à effet de serre (voir 1.8). On qualifie d'*inverse* ce type de problème parce qu'il vise à remonter à l'état de l'atmosphère et de la surface (des causes inconnues) à partir d'observations par des instruments embarqués à bord de satellites (leurs conséquences). L'obtention d'une solution satisfaisante repose fondamentalement sur la résolution du problème *direct* qui, dans un mouvement opposé, consiste quant à lui à modéliser les observations des instruments (les conséquences) à partir de l'état de l'atmosphère et de la surface (leurs causes).

On appelle généralement « transfert radiatif » le domaine de la physique qui s'intéresse à la propagation des photons à travers un milieu matériel et aux diverses interactions qui la déterminent. La modélisation directe mise en oeuvre ici est celle du transfert radiatif dans l'atmosphère terrestre qui décrit plus particulièrement les interactions entre le rayonnement électromagnétique d'une part, et les divers constituants de notre atmosphère : molécules à l'état gazeux, nuages (eau liquide ou solide), aérosols et surface terrestre comme condition aux limites, d'autre part. La prise en compte de l'ensemble de ces interactions mobilise des concepts et résultats de domaines de recherche variés et très actifs, il n'est donc absolument pas possible d'en donner une vision exhaustive dans le cadre d'un manuscrit de thèse. Ainsi, ce chapitre vise simplement à illustrer les étapes essentielles qui permettent, à partir d'un état donné de l'atmosphère et de la surface terrestre, de simuler les observations infrarouges obtenues par les instruments et concepts étudiés dans ce travail.

Les ouvrages *An Introduction to Atmospheric Radiation* (Liou, 2002), *An Introduction to Atmospheric Physics* (Andrews, 2010), *Collisional Effects on Molecular Spectra* (Hartmann

et al., 2008) et *Aerosol Remote Sensing* (Lenoble et al., 2013) ont servi de base pour la rédaction.

Nous introduirons tout d’abord les définitions et concepts de base permettant de décrire la transmission atmosphérique. Ensuite, quelques notions de spectroscopie moléculaire viendront illustrer l’absorption du rayonnement par les gaz. Par la suite, nous présenterons les propriétés optiques essentielles qui permettent de décrire la diffusion du rayonnement par les différentes particules qu’il rencontre sur sa trajectoire. Ces premières étapes permettront d’établir la forme différentielle de l’équation du transfert radiatif, que l’on pourra intégrer sous des hypothèses simplifiées afin d’exprimer le rayonnement mesuré par un satellite depuis l’espace. Nous détaillerons alors finalement les outils numériques utilisés pour modéliser le transfert radiatif dans le cadre de cette thèse.

2.2 La transmission atmosphérique, à la base du transfert radiatif

Lorsqu’il traverse une épaisseur élémentaire de l’atmosphère ds , la variation d’intensité dI d’un rayonnement se propageant dans une direction \vec{s} donnée est fournie par l’équation de Beer-Bouguer-Lambert (voir figure 2.1) :

$$dI = -\sigma_{\text{ext}} I ds \quad (2.1)$$

avec σ_{ext} , le coefficient d’extinction de l’épaisseur élémentaire de l’atmosphère exprimé en cm^{-1} . Deux phénomènes contribuent à l’extinction atmosphérique dans une direction \vec{s} donnée :

- l’*absorption* : en présence de molécules à l’état gazeux ou de particules, le rayonnement est absorbé et l’énergie qu’il transporte change de nature.
- la *diffusion* : en présence de molécules à l’état gazeux ou de particules, le rayonnement est dévié de sa direction initiale pour être redistribuée selon toutes les directions.

On peut alors écrire :

$$\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{abs}} + \sigma_{\text{diff}} \quad (2.2)$$

avec σ_{abs} , le coefficient d’absorption et σ_{diff} , le coefficient de diffusion. Tous deux dépendent de la nature des gaz et des aérosols présents dans l’atmosphère, ainsi que des conditions de température et de pression.

En séparant les variables de l’équation 2.1 et en intégrant entre s_1 et s_2 , on obtient :

$$\ln(I_2) - \ln(I_1) = - \int_{s_1}^{s_2} \sigma_{\text{ext}} ds \quad (2.3)$$

En réarrangeant les termes on peut alors écrire la **transmission** entre s_1 et s_2 :

$$I_2 = I_1 \exp \left[- \int_{s_1}^{s_2} \sigma_{\text{ext}} ds \right] \quad (2.4)$$

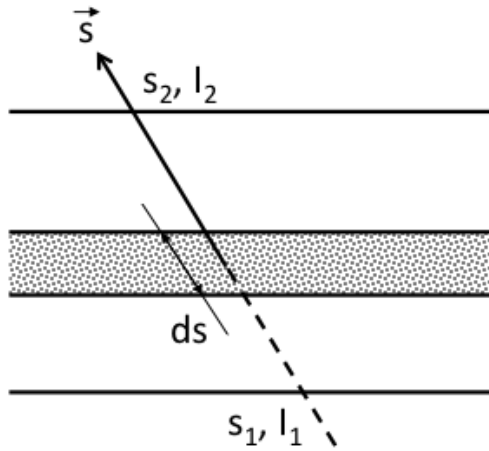


FIGURE 2.1 – Transmission d’un rayonnement lumineux se propageant dans une direction \vec{s} . Figure inspirée de Liou (2002).

Par ailleurs, on nomme **épaisseur optique**, notée τ , le terme intégral inclus dans l’exponentielle de la transmission :

$$\tau(s_1, s_2) = \int_{s_1}^{s_2} \sigma_{\text{ext}} ds \quad (2.5)$$

2.3 La spectroscopie moléculaire au service du calcul de l’absorption atmosphérique

Lorsqu’un rayonnement lumineux traverse une épaisseur élémentaire de l’atmosphère, celui-ci subit des phénomènes d’émission et d’absorption, causés par les gaz. La spectroscopie moléculaire étudie ces phénomènes et permet d’obtenir les coefficients d’absorption des gaz présents dans l’atmosphère.

2.3.1 Les raies d’absorption

À la manière des atomes, les molécules peuvent interagir avec le rayonnement électromagnétique en absorbant ou en émettant des photons dont les fréquences correspondent à des transitions entre des niveaux discrets d’énergie. Le lien entre une variation d’énergie $\Delta E > 0$ de la molécule et le nombre d’onde $\nu = 1/\lambda$ du photon absorbé ($\Delta E < 0$ dans le cas d’une émission, respectivement) est donné par :

$$\Delta E = hc\nu \quad (2.6)$$

avec h , la constante de Planck et c , la vitesse de la lumière dans le vide. Comme c et h sont des constantes, il est pratique d’exprimer directement les variations d’énergies avec le

nombre d'onde du photon émis ou absorbé, en cm^{-1} par exemple.

Vibration Modes

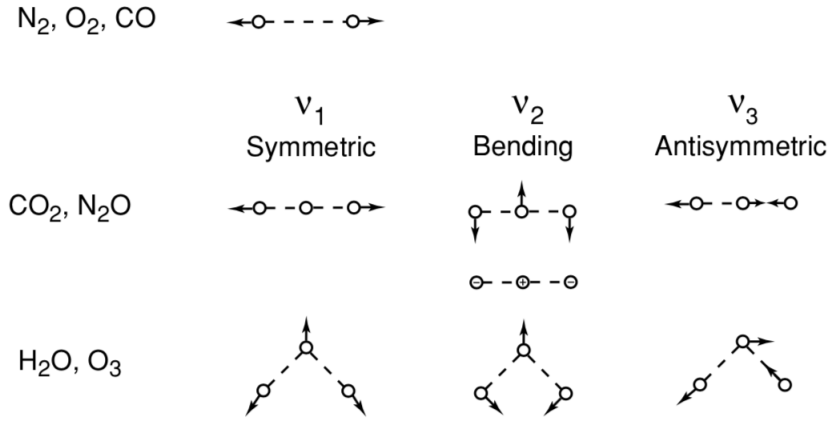


FIGURE 2.2 – Modes normaux de vibration pour quelques molécules usuelles. Figure tirée de Liou (2002).

En plus de son énergie cinétique moyenne, qui dépend linéairement de la température via la constante de Boltzmann, l'énergie interne d'une molécule peut être séparée en trois types d'énergies différents, qui ne peuvent prendre que des valeurs discrètes :

- **L'énergie rotationnelle** E_r est associée à la rotation de la molécule autour de son centre d'inertie. Pour une molécule linéaire diatomique modélisée comme un rotateur rigide, de moment d'inertie I , cette énergie s'exprime en fonction du nombre quantique de rotation J (un entier), et de la constante de rotation $B = h/8\pi^2 I c$:

$$E_r = B h c J(J + 1) \quad (2.7)$$

Les règles de sélection, qui garantissent qu'une transition d'un état d'énergie à un autre est possible, *autorisent* les transitions respectant $\Delta J = \pm 1$. Les énergies associées sont relativement faibles, de l'ordre de 1 cm^{-1} . Les raies d'absorption correspondant à des transitions de rotation pure ont donc lieu dans l'infrarouge lointain ou bien les micro-ondes.

- **L'énergie vibrationnelle** E_v est associée à la vibration des atomes de la molécule autour de leur position d'équilibre. Pour une molécule linéaire modélisée comme un oscillateur harmonique, cette énergie s'exprime en fonction du nombre quantique de vibration v_k (un entier), et de la fréquence de vibration $\tilde{\nu}_k$:

$$E_v = h \tilde{\nu}_k (v_k + 1/2) \quad (2.8)$$

avec k désignant les modes normaux de vibration qui identifient les possibles oscillations relatives des atomes, qui dépendent elles-mêmes de la géométrie de la molécule. La figure 2.2 illustre ces modes normaux pour quelques molécules usuelles. On peut noter par exemple dans le cas du CO_2 , une molécule à la géométrie linéaire, que les modes ν_1 et ν_3 correspondent à des vibrations le long de l'axe inter-noyaux, tandis que le mode ν_2 mobilise une dimension perpendiculaire à cet axe. Les règles de sélection autorisent les transitions vibrationnelles respectant $\nu_k = \pm 1$. Les énergies associées sont habituellement supérieures à 600 cm^{-1} .

- **L'énergie électronique** est associée à l'excitation des électrons des atomes qui composent la molécule. Les énergies associées aux transitions électroniques sont grandes, de l'ordre de $\sim 10^4 \text{ cm}^{-1}$, et les raies d'absorption correspondantes se trouvent donc dans le visible ou l'ultraviolet.

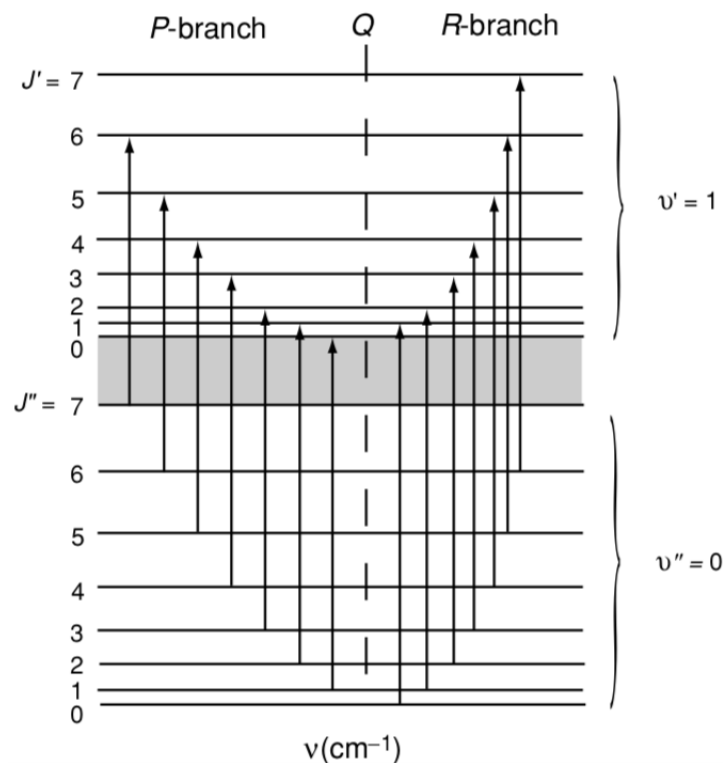


FIGURE 2.3 – Schéma des transitions vibro-rotationnelles pour une bande d'absorption présentant les branches P et R, pour une molécule linéaire modélisée comme un oscillateur harmonique rotateur rigide. Figure tirée de Liou (2002).

Les raies d'absorption observées dans les spectres infrarouges mesurés par les instruments IASI ou OCO-2 correspondent typiquement à des transitions entre niveaux d'énergie associant simultanément rotation et vibration. C'est notamment le cas pour les molécules de CO_2 .

L'énergie associée à une transition vibrationnelle étant largement supérieure à celle nécessaire pour une transition rotationnelle, les raies d'absorption du CO_2 se présentent sous la forme de bandes rovibrationnelles (groupement de raies de rotation-vibration) entourant le nombre d'onde associé à la transition de vibration pure. Ces bandes sont organisées en deux ou trois « branches » comme l'illustre la figure 2.3 pour une transition $(v', J') \leftarrow (v'' = 0, J'')$. Les nombres d'onde $\nu = (\Delta E_r + \Delta E_v)/hc$ des raies d'absorption correspondent aux transitions entre les niveaux d'énergie $(v'' = 0, J'')$ et (v', J') d'une molécule linéaire comme le CO_2 , modélisée comme un oscillateur harmonique rotateur rigide. Ces transitions correspondent aux changements de nombres quantiques $\Delta J = \pm 1$ et $\Delta v = 1$ autorisés ici par les règles de sélection (le nombre quantique de vibration ne peut devenir négatif pour un état initial à $v'' = 0$) :

- La branche P contient les raies des transitions vibro-rotationnelles associées à la variation simultanée du nombre quantique de rotation $\Delta J = -1$ et du nombre quantique de vibration $\Delta v = 1$. Elle est associée à des nombres d'onde inférieurs à celui de la transition vibrationnelle pure car la variation d'énergie rotationnelle $\Delta E_r = -2BhcJ''$ est ici négative.
- La branche R contient les raies des transitions vibro-rotationnelles associées à la variation simultanée du nombre quantique de rotation $\Delta J = +1$ et du nombre quantique de vibration $\Delta v = 1$. Elle est associée à des nombres d'onde supérieurs à celui de la transition vibrationnelle pure car la variation d'énergie rotationnelle $\Delta E_r = +2BhcJ'$ est ici positive.
- La branche Q est centrée sur le nombre d'onde associé à la transition vibrationnelle pure, et n'est pas représentée sur la figure 2.3. Elle correspond à une variation du nombre quantique de rotation $\Delta J = 0$ et du nombre quantique de vibration $\Delta v = 1$. Pour une molécule linéaire, la variation $\Delta J = 0$ est interdite par les règles de sélection, à moins que l'état vibrationnel de la molécule ne crée un moment électrique oscillant avec une composante perpendiculaire à l'axe inter-noyaux (ce qui est par exemple le cas pour CO_2 lorsque le mode normal v_2 est excité, voir figure 2.2).

L'illustration précédente est valable pour le cas idéal de la molécule linéaire modélisée comme un oscillateur harmonique rotateur rigide. La prise en compte de l'anharmonicité de la molécule réelle change les règles de sélection et autorise toutes les variations Δv des nombres quantiques de vibration. Par ailleurs, les transitions vibrationnelles peuvent aussi être simultanément associées à différents modes normaux donnant lieu à ce qui est appelé des « bandes de combinaison ». La figure 2.4 montre par exemple trois bandes d'absorption utilisées pour l'estimation de la concentration atmosphérique de CO_2 . La première bande (a) est localisée dans l'infrarouge thermique vers $15 \mu\text{m}$: elle est utilisée pour les estimations de colonnes troposphériques partielles de CO_2 à partir des mesures de IASI (Crevoisier et al., 2009). Elle est associée à la transition vibrationnelle fondamentale $\Delta v_2 = 1$. D'après les explications précédentes, l'excitation dans ce mode normal explique la présence de la branche Q. Les deuxième et troisième bandes (b) et (c) sont localisées dans le proche infrarouge, vers 1.6 et $2.05 \mu\text{m}$ respectivement : elles sont utilisées pour l'estimation de la colonne totale de CO_2 à partir des mesures OCO-2 par exemple (O'Dell et al., 2018). Ce sont quant à elle des

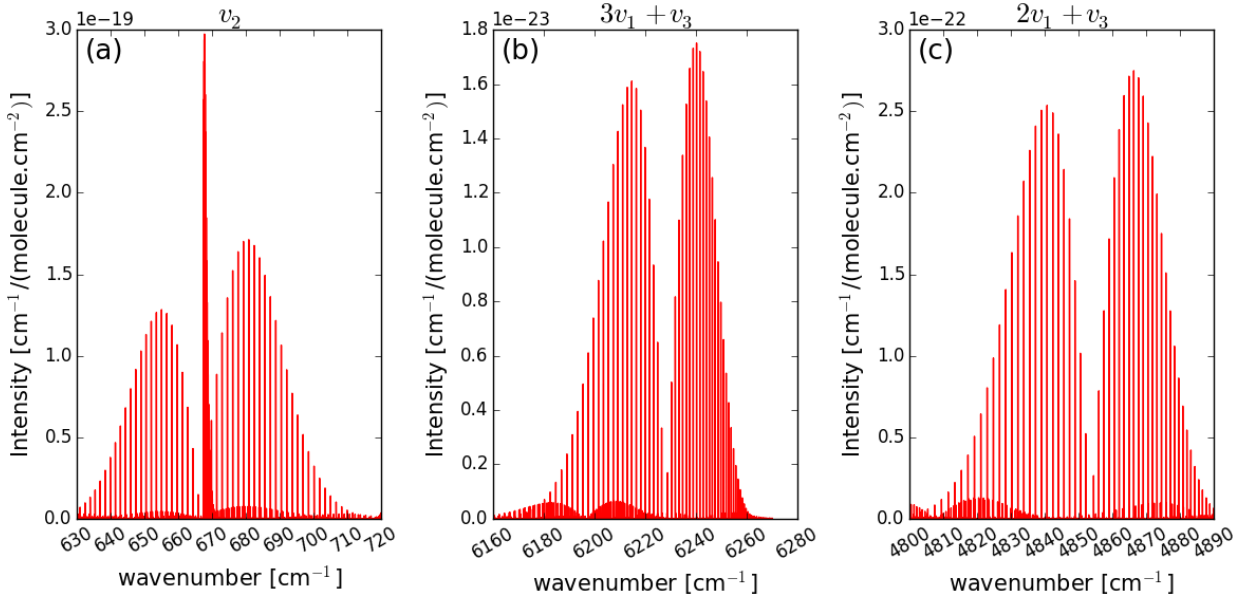


FIGURE 2.4 – Exemple de trois bandes de raies d’absorption vibro-rotationnelles du CO_2 , usuellement utilisées pour l’estimation de sa colonne partielle ou totale : (a) ν_2 ($15 \mu\text{m}$) (b) $3\nu_1 + \nu_3$ ($1.6 \mu\text{m}$) et (c) $2\nu_1 + \nu_3$ ($2.05 \mu\text{m}$). Les raies de plus faibles intensités également visibles correspondent à des isotopologues minoritaires du CO_2 .

bandes de combinaison associées aux transitions $3\nu_1 + \nu_3$ et $2\nu_1 + \nu_3$, respectivement. Elles ne présentent pas de branche Q. Finalement, il est important de noter sur la figure 2.4, pour la suite du travail, que l’espacement entre les raies n’est pas identique entre les branches P et Q. Cette évolution de l’espacement est due à la non-rigidité de la molécule réelle.

En plus de l’organisation des raies d’absorption dans quelques bandes usuelles du CO_2 , la figure 2.4 montre leurs intensités (à 296 K) qui ne sont pas toutes identiques. L’intensité S (pour *Strength*) d’une raie dépend de la probabilité que la transition correspondante, entre deux niveaux d’énergie, ait lieu. Cette probabilité dépend elle-même de la distribution de la population des molécules dans les niveaux d’énergie. Lorsque l’on suppose l’équilibre thermodynamique, la physique statistique montre que la population des molécules se répartit dans les niveaux d’énergie selon la loi de Boltzmann qui est elle-même pilotée par la température du milieu. On peut comprendre ces dépendances en cascade en expliquant par exemple que plus la température augmente, plus les molécules peuvent peupler des états d’énergie élevée, rendant alors plus probables les transitions associées à ces états, ce qui augmente l’intensité des raies d’absorption associées.

2.3.2 Modélisation des profils de raies

La description faite précédemment des raies d’absorption suggère qu’elles apparaissent ponctuellement dans le spectre, aux nombres d’onde ν associés aux transitions entre niveaux

d'énergie des molécules, et qu'elles pourraient donc être modélisées par une fonction de Dirac δ centrée sur ν . En réalité, différents phénomènes physiques *élargissent* les raies, qui s'étalent selon une fonction f autour de leur nombre d'onde central. On appelle la fonction f le *profil de raie*. Pour une raie centrée sur ν_0 et d'intensité S , le coefficient d'absorption par molécule k_ν , exprimé en $\text{cm}^2/\text{molécule}$, est défini par :

$$k_\nu = Sf(\nu - \nu_0) \text{ avec, } \int_{-\infty}^{+\infty} f(\nu - \nu_0) d\nu = 1 \quad (2.9)$$

L'expression du profil de raie f peut prendre en compte différents phénomènes physiques contribuant à l'élargissement (mais aussi au rétrécissement) d'une raie (Hartmann et al., 2008). Les deux principaux phénomènes d'élargissement sont présentés ici.

Élargissement par la pression : le profil de Lorentz Les collisions entre particules ont pour effet de décaler la fréquence d'émission ou d'absorption des photons. Comme le nombre de ces collisions augmente avec la pression du gaz, on parle d'élargissement par la pression. Dans ce cas, le profil de raie f s'écrit de la manière suivante :

$$f(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{(\nu - \nu_0)^2 + \alpha^2} \quad (2.10)$$

avec α , la largeur à mi-hauteur du profil de raie. Étant donné un élargissement mesuré en laboratoire α_0 , pour des conditions standard de température $T_0 = 273K$ et de pression $P_0 = 1013hPa$, la théorie cinétique des gaz donne :

$$\alpha = \alpha_0 (P/P_0) (T/T_0)^n \text{ avec, } 1/2 \leq n \leq 1 \quad (2.11)$$

L'élargissement des raies par la pression est dominant dans l'atmosphère terrestre jusqu'à 20-30 km d'altitude.

Élargissement Doppler À basse pression, en considérant que les collisions entre molécules n'ont plus lieu, l'effet Doppler décale le nombre d'onde ν_0 des raies du fait de la vitesse v des molécules par rapport à l'observateur. À l'équilibre thermodynamique, la vitesse v des molécules suit la distribution de Maxwell-Boltzmann qui dépend seulement de la température. Le profil de raie f_D lié à l'élargissement Doppler s'écrit, à la température absolue T pour une molécule de masse m :

$$f_D(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\alpha_D \sqrt{\pi}} \exp \left[- \left(\frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D} \right)^2 \right] \text{ avec, } \alpha_D = \nu_0 (2KT/mc^2)^{1/2} \quad (2.12)$$

et avec K , la constante de Boltzmann. La largeur à mi-hauteur de la raie est ici égale à $\alpha_D \sqrt{\ln(2)}$.

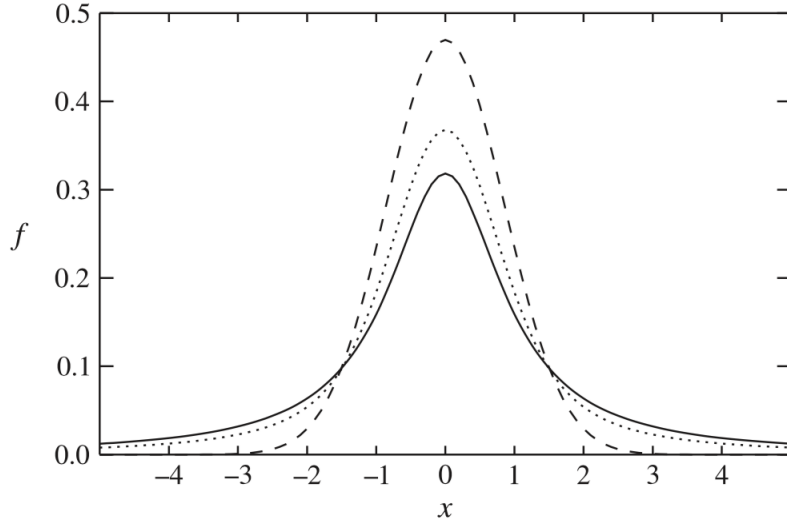


FIGURE 2.5 – Profil de Lorentz (continue), profil d’élargissement Doppler (tirets) et profil de Voigt (pointillés) tracés pour $x = (\nu - \nu_0)/\alpha$ avec α la largeur à mi-hauteur appropriée à chaque profil (aires sous les profils normalisées). Figure tirée d’Andrews (2010).

Profil de Voigt Pour des altitudes intermédiaires, supérieures à 20-30 km dans l’atmosphère terrestre, les collisions inter-moléculaires et l’effet Doppler contribuent simultanément à l’élargissement des raies. En supposant que ces deux phénomènes agissent séparément, chaque point de l’un des deux profils est simultanément élargi selon l’autre. Ainsi il convient d’utiliser la convolution des profils associés à l’élargissement par la pression f et à l’élargissement Doppler f_D pour représenter l’élargissement des raies à ces altitudes. On appelle ce nouveau profil f_v le *profil de Voigt* :

$$f_v(\nu - \nu_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u - \nu_0) f_D(\nu - \nu_0 - (u - \nu_0)) du \quad (2.13)$$

La figure 2.5 montre les profils de Lorentz, d’élargissement Doppler et de Voigt. On constate que le profil de Voigt combine un compromis entre les centres de raie des profils de Lorentz et d’élargissement Doppler et, loin de son centre, des ailes de raies similaires à celles du profil de Lorentz.

2.3.3 Autres effets collisionnels

L’impact des collisions entre molécules gazeuses sur l’absorption atmosphérique ne se limite pas à l’élargissement des profils de raies par la pression, modélisé avec le profil de Lorentz. D’autres phénomènes sont également à l’oeuvre et leur prise en compte est essentielle pour une correcte interprétation de spectres mesurés à haute résolution spectrale, comme ceux d’OCO-2 par exemple. Ces autres effets collisionnels se manifestent à l’échelle du profil de raie (dépendance en vitesse, mélange entre raies) mais aussi à l’échelle de larges bandes

spectrales (continua d'absorption, absorption induite par collisions). Bien que largement en-dehors du propos de ce travail de thèse, il est nécessaire d'évoquer ici superficiellement ces effets, dont l'impact de certains, pour l'estimation de la colonne totale de CO₂, sera évalué plus en avant dans le manuscrit. Pour une description précise de l'état de la recherche sur ces effets, on peut se référer à l'ouvrage *Collisional Effects on Molecular Spectra* (Hartmann et al., 2008).

Dépendance en vitesse des profils de raie L'élargissement et le décalage spectral des raies dépendent de la classe de vitesse $[v, v + dv]$ des molécules, dont la probabilité suit la distribution de Maxwell-Boltzmann. Après moyennage sur toutes les vitesses possibles, on observe des profils de raies asymétriques qui dévient du profil de Lorentz. La possible modification de la vitesse des molécules au cours des collisions est particulièrement importante pour correctement modéliser ces dépendances en vitesse. Ces phénomènes peuvent être pris en compte en introduisant de nouveaux modèles de profils de raies, que l'on dit dépendants en vitesse (*Speed-Dependent line shapes*, notés « SD »).

Effet de mélange entre raies Les collisions entre molécules entraînent, lorsqu'ils sont autorisés, des transferts de population entre différents niveaux d'énergie, mettant alors en interaction les raies d'absorption liées à ces niveaux d'énergie. Un phénomène de mélange des raies (*collisional Line Mixing*, noté « LM ») peut alors s'observer dans les spectres d'absorption atmosphérique, selon les conditions de température et de pression, ainsi que la nature des gaz en présence. Comparé à un modèle de raie isolée, il entraîne notamment un rétrécissement des structures du spectre qui renforce l'intensité des zones de forte absorption et diminue l'intensité des zones de faible absorption.

Les interactions entre n raies d'absorption sont décrites dans une matrice de relaxation carrée de taille $n \times n$, notée W . Les éléments diagonaux de W sont liés aux coefficients d'élargissement et de décalage par la pression des profils de raies, tandis que ses éléments hors-diagonale rendent compte des interférences collisionnelles entre raies. La prise en compte du *line mixing* pour le calcul de l'absorption atmosphérique peut se faire en utilisant toute la matrice W (approche *full-matrix*), ou bien en ne tenant compte que de la diagonale et des coefficients d'interférences entre raies de premier ordre (approche Y). Cette approximation permet d'exprimer le line-mixing sous une forme "raie à raie" (chaque raie est associée à un jeu de paramètres spécifiques), ce qui présente un avantage en matière de stockage (via les base de données spectro) et de temps de calcul.

Parmi ces modèles de profil de raie, on trouve notamment le profil dit Hartmann-Tran (Ngo et al., 2013) qui inclut des effets de dépendance en vitesse et la possibilité de prendre en compte l'approximation Y du *line-mixing*. Particulièrement facile à calculer contrairement à d'autres modèles de profil de raie sophistiqués, son utilisation est recommandée par un groupe de travail de l'*International Union of Pure and Applied Chemistry* (Tennyson et al., 2014; Hartmann et al., 2018).

Absorption induite par collision Les collisions entre molécules peuvent conduire à la formation de complexes transitoires de molécules, dits « supermolécules », dont le spectre d'absorption comprend de larges raies ressemblant à des continua, et dont l'intensité dépend du carré de la densité du gaz. On parle ici d'absorption induite par collisions (*Collision-Induced Absorption*, notée « CIA »). On peut trouver ce phénomène aux fréquences des raies vibro-rotationnelles autorisées pour les molécules impliquées dans ces complexes transitoires (Frommhold, 1994). Par exemple, la prise en compte de la CIA est déterminante pour contraindre la longueur du chemin optique à partir des mesures de la bande A de l'O₂ (localisée aux alentours de 0.76 μm).

Continua d'absorption Les collisions entre molécules provoquent des comportements non-Lorentziens dans les ailes de raies, dans les zones spectrales très éloignées de leurs centres. L'absorption cumulée de ces ailes de raies provoque alors l'apparition de continua d'absorption difficiles à modéliser. Des approches semi-empiriques ont par exemple été adoptées pour la vapeur d'eau dans l'infrarouge afin de rendre compte de ces phénomènes (Clough et al., 1989).

2.3.4 Les « sections efficaces »

Les paramètres de raies (position en nombre d'onde, intensité et élargissement) peuvent être déterminés à partir de mesures de laboratoire à très haute résolution spectrale, ou bien par des prédictions théoriques. Cependant, ces informations ne sont parfois pas toutes disponibles pour certaines molécules. C'est par exemple le cas pour des molécules lourdes comme les chlorofluorocarbures (CFCs), hydrochlorofluorocarbures (HCFCs) ou les hydrofluorocarbures (HFCs). Leur raies se chevauchent et sont indiscernables les unes des autres, ne donnant accès qu'à leur absorption combinée. Les « sections efficaces » (*absorption cross-sections*) qui s'affranchissent du formalisme de la raie permettent d'exprimer leur coefficient d'absorption. On exprime, pour un nombre d'onde donné ν , le coefficient d'absorption par molécule k_ν , comme :

$$k_\nu = \frac{-\ln [I(\nu)/I_0(\nu)]}{NL} \quad (2.14)$$

avec $I(\nu)$ et $I_0(\nu)$, les rayonnements transmis et incident mesurés en laboratoire au nombre d'onde ν , respectivement, N , la densité exprimée en molécules/cm³ et L , la longueur du chemin optique exprimée en cm.

2.3.5 Bases de données spectroscopiques

Les connaissances sur les caractéristiques spectroscopiques des gaz qui constituent les atmosphères planétaires sont rassemblées dans des bases de données spectroscopiques à partir des résultats de nombreuses équipes de recherche à travers le monde. Ces bases contiennent, pour différents gaz, les paramètres - pour le profil de Voigt - de leurs raies d'absorption (position en nombre d'onde, intensité, largeur à mi-hauteur, état d'énergie bas et excité, etc) ou leurs « sections efficaces ». Certaines bases commencent également à inclure des

paramètres pour des profils plus sophistiqués que celui de Voigt, comme le profil Tran-Hartmann par exemple (Gordon et al., 2017).

Ce travail de thèse repose sur la base de données spectroscopique GEISA (Gestion et Étude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques)¹. Elle a été créée en 1973 au Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) où elle est toujours maintenue et développée : sa dernière version date de 2020 (Delahaye et al., 2021). Elle contient :

- Une base de données de paramètres de raies pour 58 espèces (145 isotopologues), qui comprend un total de 6746982 raies localisées entre 10^{-6} et $35\,877.031\text{ cm}^{-1}$.
- Une base de « sections efficaces » pour différentes valeurs de température et de pression, avec 80 molécules incluses pour l’infrarouge.
- Une base de propriétés optiques pour les aérosols.

Depuis sa création, les évolutions entre différentes versions de GEISA ont été évaluées afin de s’assurer de leur pertinence. Récemment, cette évaluation est réalisée en examinant les différences calculées – observées (aussi appelées « résidus spectraux calc-obs ») obtenues entre des spectres simulés et les mesures des instruments IASI ou du réseau sol TCCON par exemple. Ces comparaisons sont réalisées par la chaîne SPARTE (*Spectroscopic Parameters And Radiative Transfer Evaluation*), également développée au LMD (Armante et al., 2016).

D’autres bases de données spectroscopiques existent mise à part GEISA. Beaucoup sont dédiées à des applications données, comme la base ATM.101 par exemple qui est notamment utilisée pour le traitement des spectres TCCON (Toon, 2015a). En revanche, seules les bases de données GEISA et *High resolution TRANsmissions* (HITRAN, Gordon et al., 2017) permettent à un instant donné d’avoir ce qui semblent être les meilleurs paramètres spectroscopiques pour une molécule donnée.

2.4 Propriétés optiques pour la prise en compte de la diffusion

Au contact des molécules gazeuses, de particules liquides ou bien solides, une fraction du rayonnement atmosphérique peut également être déviée de sa direction initiale pour être redirigée selon toutes les directions, on parle alors de diffusion. Les particules concernées comprennent les molécules gazeuses ($\sim 10^{-4}\ \mu\text{m}$), les aérosols ($\sim 1\ \mu\text{m}$), les gouttelettes d’eau ($\sim 10\ \mu\text{m}$), les cristaux de glace ($\sim 100\ \mu\text{m}$) voire même la grêle ($\sim 1\text{ cm}$). Leur nature, leur taille et aussi leur forme déterminent leurs propriétés optiques qui sont utilisées dans la modélisation du transfert radiatif pour rendre compte de la diffusion. Lorsqu’on néglige la polarisation de la lumière, trois propriétés optiques suffisent : le coefficient d’extinction, l’albédo de simple diffusion et la fonction de phase.

Encore une fois, l’étude des propriétés optiques des particules diffusantes est un sujet de recherche à part entière. La thèse de Peyridieu (2010) développe davantage la description succincte des propriétés optiques qui va suivre, et trace des exemples. L’ouvrage *Multiple*

1. La base de données GEISA est disponible sur la plateforme AERIS : <https://geisa.aeris-data.fr/>

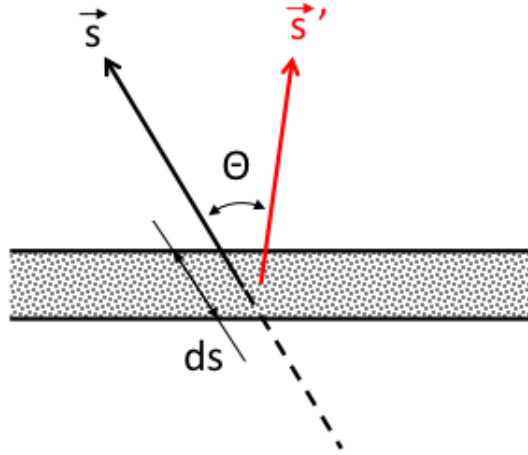


FIGURE 2.6 – Rayonnement se propageant dans la direction \vec{s} à travers une couche élémentaire de l’atmosphère. Au contact d’une particule (grise), une fraction (rouge) est diffusée dans la direction \vec{s}' faisant un angle Θ avec \vec{s} .

Scattering of Light by Particles (Mishchenko et al., 2006) est une référence sur ce domaine, et *Aerosol Remote Sensing* (Lenoble et al., 2013) a servi de base pour la rédaction.

Le coefficient d’extinction Les particules diffusantes contribuent par absorption et diffusion à l’extinction du rayonnement lorsqu’il traverse une couche élémentaire de l’atmosphère. La définition déjà donnée en début de chapitre (voir partie 2.2) reste valable pour la contribution seule des particules diffusantes, pour lesquelles on peut définir un coefficient d’extinction $\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{abs}} + \sigma_{\text{diff}}$.

L’albédo de simple diffusion La fraction de l’extinction causée par la diffusion est nommée l’albédo de simple diffusion noté ω :

$$\omega = \sigma_{\text{diff}}/\sigma_{\text{ext}} \quad (2.15)$$

La fonction de phase La distribution de l’intensité diffusée par une particule dans la sphère d’angle solide 4π est décrite par la fonction de phase, notée p , qui dépend de la direction d’incidence $\vec{s}(1, \theta, \phi)$ et de la direction de diffusion $\vec{s}'(1, \theta', \phi')$. Par conservation de l’énergie, la fonction de phase p doit vérifier :

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi p(\theta, \phi, \theta', \phi') \sin(\theta') d\theta' d\phi' = 1 \quad (2.16)$$

Dans le cas de particules sphériques ou orientées aléatoirement (hypothèse valable pour les molécules gazeuses ou les aérosols dans l’atmosphère terrestre), la fonction de phase

ne dépend cependant plus que de l'angle $\Theta \in [0, \pi]$ entre les directions d'incidence et de diffusion :

$$\Theta = \cos^{-1} \left[\cos(\theta) \cos(\theta') + \sqrt{1 - \cos^2(\theta)} \sqrt{1 - \cos^2(\theta')} \cos(\phi' - \phi) \right] \quad (2.17)$$

et peut alors s'exprimer en fonction du cosinus de cet angle. Habituellement (par praticité) on développe la fonction de phase p en une série de polynômes de Legendre P_l :

$$p(\Theta) = \sum_{l=0}^{l=L} \beta_l P_l(\cos(\Theta)), \text{ avec, } \beta_l = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 p(\Theta) P_l(\cos(\Theta)) d(\cos(\Theta)) \quad (2.18)$$

On définit particulièrement le **paramètre d'asymétrie**, noté g comme :

$$g = \langle \cos(\Theta) \rangle = \frac{\int_{-1}^1 p(\Theta) \cos(\Theta) d(\cos(\Theta))}{\int_{-1}^1 p(\Theta) d(\cos(\Theta))} = \frac{\beta_1}{3} \quad (2.19)$$

Ce paramètre d'asymétrie g donne la moyenne du cosinus de Θ pondérée par la probabilité de diffusion dans la direction de l'angle Θ . Compris entre -1 et 1 , il donne donc une information sur la direction moyenne des photons après diffusion :

- Si g est proche de 1 , on parle de « diffusion vers l'avant » car la majorité de l'énergie diffusée l'est dans une direction proche de celle d'incidence. La figure 2.6 montre par exemple en rouge un rayon diffusé vers l'avant.
- Si g est proche de 0 , on parle de « diffusion symétrique ». C'est le cas de la diffusion par les molécules (diffusion Rayleigh), pour laquelle on a exactement $g = 0$.
- Si g est proche de -1 , symétriquement à g proche de 1 , on parle de « diffusion vers l'arrière ».

Bien qu'il ne suffise pas pour reconstruire exactement la fonction de phase, le paramètre d'asymétrie g permet, via la fonction d'Henyey-Greenstein, d'en fournir une approximation acceptable :

$$p(\Theta) = \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos(\Theta))^{3/2}} \quad (2.20)$$

Dans la pratique : modèles de propriétés optiques À la manière des bases de données spectroscopiques qui donnent les paramètres d'absorption des gaz, il existe des bases de données rassemblant les propriétés optiques des différents types de particules diffusantes présentes dans l'atmosphère (gouttes d'eau, cristaux de glace, aérosols, etc). Celles-ci peuvent être déterminées à partir de mesures réalisées sur des échantillons en laboratoire ou bien grâce à des méthodes calculatoires reposant sur la résolution de l'équation d'onde électromagnétique (théorie de Lorenz-Mie, méthode T-matrix). On retrouve entre autres dans ces bases de données le coefficient d'extinction, l'albédo de simple diffusion et le paramètre d'asymétrie pour différentes longueurs d'onde. Parmi ces bases, on peut notamment citer OPAC (*Optical Properties of Aerosols and Clouds*) (Hess et al., 1998) dont les propriétés optiques sont distribuées pour différents types de particules diffusantes.

La diffusion Rayleigh La diffusion par les molécules de l'atmosphère (diffusion Rayleigh) peut se traiter analytiquement comme un cas particulier simplifié de la théorie de Lorenz-Mie. Elle a principalement lieu dans les longueurs d'onde inférieures au proche infrarouge ($\lambda < 1 \mu\text{m}$), et on retiendra que son coefficient de diffusion, et donc l'intensité diffusée associée, décroissent en $1/\lambda^4$. Dans le cadre de ce travail de thèse, la diffusion Rayleigh intervient principalement dans la bande A de l'O₂ situé vers $0.76 \mu\text{m}$.

2.5 L'équation du transfert radiatif

Les paramètres d'absorption des gaz, fournis par la spectroscopie moléculaire, et les propriétés optiques des particules diffusantes viennent nourrir l'équation du transfert radiatif. Nous l'établirons d'abord dans sa forme différentielle, puis nous l'intégrerons ensuite en faisant l'hypothèse d'une atmosphère non-diffusante. Trois hypothèses sont réalisées pour simplifier la position du problème :

1. **L'équilibre thermodynamique local est vérifié.** À l'équilibre thermodynamique, lorsque les collisions entre molécules d'un milieu sont assez importantes pour négliger leur émission spontanée, la température T du milieu suffit seule à décrire la distribution des molécules dans les différents niveaux d'énergie. Le rayonnement émis à la longueur d'onde λ par ce milieu est proportionnel à la fonction de Planck :

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/K\lambda T} - 1)} \quad (2.21)$$

avec h , la constante de Planck, K , la constante de Boltzmann et c , la vitesse de la lumière dans le vide. La conservation de l'équilibre thermodynamique implique par ailleurs que l'efficacité de l'absorption du rayonnement électromagnétique par le milieu soit égale à l'efficacité de l'émission du milieu : c'est la loi de Kirchhoff.

Sur Terre, bien que l'atmosphère ne soit pas uniforme en température, il est tout de même possible de considérer que l'équilibre thermodynamique est atteint pour des épaisseurs élémentaires d'atmosphère pouvant être associées à une température uniforme. On parle alors d'équilibre thermodynamique *local*. Cette hypothèse est valable tant que la densité est suffisante pour que les collisions entre particules dominent leur émission spontanée, jusqu'à 60-70 km d'altitude.

2. L'atmosphère est considérée comme **plan-parallèle**. Cela consiste à considérer que, vue depuis le satellite, l'atmosphère est une superposition de couches élémentaires planes s'étendant indéfiniment dans les deux directions perpendiculaires à la verticale. Ainsi, sous cette hypothèse, les variables géophysiques (pression, température, concentration des gaz, etc) ne dépendent que de l'altitude z .
3. **On néglige l'impact de la réfraction** sur la trajectoire du rayonnement : l'indice de réfraction de l'air est considéré égal à 1 pour toutes les couches de l'atmosphère. Cette hypothèse est valable lorsque les chemins optiques considérés ne font pas un trop grand angle avec la verticale. C'est par exemple le cas lorsque la géométrie de

visée du satellite est proche du nadir, la direction normale à la surface. Elle ne tient cependant plus dans le cas de la visée au limbe, lorsque la géométrie de visée tangente les couches atmosphériques.

2.5.1 Position de l'équation

Propriétés équivalentes de la couche Soit une couche élémentaire de l'atmosphère d'épaisseur dz contenant un mélange de n gaz et de m types de particules diffusantes. La connaissance des paramètres spectroscopiques des gaz et des propriétés optiques des particules permettent de déterminer, pour un nombre d'onde ν , les propriétés équivalentes du mélange (ACOS, 2021)² :

- **Le coefficient d'extinction totale de la couche**, noté $\bar{\sigma}_{\text{ext}}$. Il s'exprime comme la somme des absorptions individuelles k_ν des n gaz présents (multipliées par leur densité ρ), à laquelle s'ajoutent les coefficients d'extinction σ_{ext} des m différents types de particules diffusantes :

$$\bar{\sigma}_{\text{ext}} = \sum_{i=1}^n k_{\nu,i} \rho_i + \sum_{i=1}^m \sigma_{\text{ext},i} \quad (2.22)$$

- **Le coefficient de diffusion totale de la couche**, noté $\bar{\sigma}_{\text{diff}}$. Il s'exprime comme la somme des coefficients de diffusion $\omega \sigma_{\text{ext}}$ des m différents types de particules diffusantes :

$$\bar{\sigma}_{\text{diff}} = \sum_{i=1}^m \omega_i \sigma_{\text{ext},i} \quad (2.23)$$

- **L'albédo de simple diffusion équivalent de la couche**, noté $\bar{\omega}$. D'après sa définition, il s'exprime à l'aide des deux grandeurs précédentes :

$$\bar{\omega} = \bar{\sigma}_{\text{diff}} / \bar{\sigma}_{\text{ext}} \quad (2.24)$$

- **Le paramètre d'asymétrie équivalent du mélange**, noté \bar{g} . C'est une valeur intensive, qui s'exprime comme la moyenne des paramètres d'asymétrie des m types de particules diffusantes, pondérée par leur coefficient de diffusion respectif :

$$\bar{g} = \frac{1}{\bar{\sigma}_{\text{diff}}} \sum_{i=1}^m \sigma_{\text{diff},i} g_i \quad (2.25)$$

On peut alors déterminer la **fonction de phase équivalente du mélange**, notée \bar{p} , avec la fonction d'Henry-Greenstein donnée à l'équation 2.20.

2. Il est à noter que l'ATBD ACOS présente le problème de la combinaison des propriétés optiques pour un mélange de n modèles de particules diffusante formant une épaisseur optique *fixée*, tandis qu'ici l'impact de l'absorption des gaz est inclus, et une épaisseur optique propre ($\text{AOD} = \sigma_{\text{ext}} \times L$) est considérée connue pour chaque type de particule diffusante.

Épaisseur optique et transmission Cette couche élémentaire de l'atmosphère se situe à une altitude z . On considère un rayonnement se propageant vers le haut, dans une direction faisant un angle $\theta = \cos^{-1}(\mu)$ avec la verticale. Reprenant les termes définis en début de chapitre (voir partie 2.2), on note ici τ l'**épaisseur optique** intégrée *sur la verticale* entre notre couche et le sommet de l'atmosphère :

$$\tau(z) = \int_z^\infty \bar{\sigma}_{\text{ext}} dz \quad (2.26)$$

Lorsque z augmente, τ diminue. Ainsi, une variation élémentaire de l'épaisseur optique s'exprime comme :

$$d\tau = -\bar{\sigma}_{\text{ext}} dz \quad (2.27)$$

La loi de Beer-Bouguer-Lambert (voir équation 2.1) réécrite pour la direction inclinée $ds = dz/\mu$ donne la transmission atmosphérique entre la couche d'altitude z et le sommet de l'atmosphère $z = \infty$:

$$I_\infty = I(z)e^{-\tau(z)/\mu} \quad (2.28)$$

Cette équation est valable pour un rayonnement « montant », faisant un angle θ avec la verticale tel que $\mu = \cos(\theta) > 0$. Dans le cas d'un rayonnement « descendant », on note $-\mu$, avec $\mu = |\cos(\theta)| > 0$ le cosinus de l'angle entre la direction de propagation et la verticale. On peut alors écrire :

$$I(z) = I_\infty e^{\tau(z)/(-\mu)} \quad (2.29)$$

Ainsi, le terme en exponentielle $e^{-\tau/\mu}$ donne le **facteur de transmission**, quel que soit le sens de propagation, entre le sommet de l'atmosphère et notre couche élémentaire située à l'altitude z .

Forme différentielle de l'équation du transfert radiatif Considérons maintenant un rayonnement traversant cette couche élémentaire d'atmosphère dans la direction (μ, ϕ) faisant un angle $\theta = \cos^{-1}(\mu)$ avec la verticale (voir figure 2.7). Cette couche se trouve à une altitude z donnée, et on note τ l'épaisseur optique entre z et le sommet de l'atmosphère, définie à l'équation 2.26. Pour un nombre d'onde ν donné (omis pour alléger les notations), on note I la puissance rayonnée par unité de surface, d'angle solide et de nombre d'onde, nommée *luminance (spectrale)*, et exprimée en $\text{W}/\text{m}^2 \text{ str cm}^{-1}$. Sa variation dI s'exprime comme la somme de quatre termes distincts :

- (1) Le premier correspond à l'extinction du rayonnement au travers de la couche, d'après la loi de Beer-Bouguer-Lambert (voir équation 2.1).
- (2) Le deuxième terme correspond à la diffusion dans la direction (μ, ϕ) du flux solaire direct F_\odot (exprimé en $\text{W}/\text{m}^2 \text{ cm}^{-1}$) venant de la direction $(-\mu_0, \phi_0)$, et atténué par l'atmosphère entre son sommet et l'altitude z . Il est pondéré par $\bar{p}(\mu, \phi, -\mu_0, \phi_0)$, la probabilité qu'un rayonnement soit diffusé dans la direction (μ, ϕ) en provenant de $(-\mu_0, \phi_0)$.
- (3) Le troisième correspond, pour toute la sphère d'angle solide, à la contribution de tous les rayonnements diffus provenant des directions (μ', ϕ') et diffusés vers la

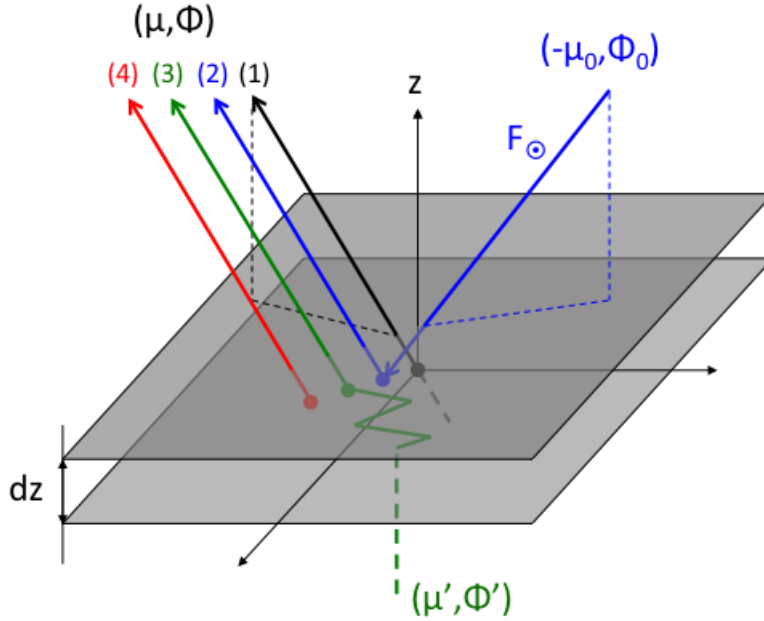


FIGURE 2.7 – Variations d'un rayonnement traversant une couche élémentaire d'atmosphère dans la direction (μ, ϕ) : (1) **absorption** par les gaz et particules diffusantes (2) **diffusion du rayonnement solaire direct** provenant de la direction $(-\mu_0, \phi_0)$ (3) **Diffusion du rayonnement diffus** provenant de la direction (μ', ϕ') (4) **Rayonnement émis par la couche**. Figure inspirée de Liou (2002).

direction (μ, ϕ) . Leurs luminances respectives sont pondérées par $\bar{p}(\mu, \phi, \mu', \phi')$ pour tenir compte de la probabilité qu'ils soient diffusés vers (μ, ϕ) .

- (4) Le dernier correspond à la contribution de l'émission thermique de la couche. Grâce à l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique, il est proportionnel à la fonction de Planck, évaluée à la température T de la couche, et le coefficient d'émission correspond, d'après la loi de Kirchhoff, au coefficient d'absorption.

$$\begin{aligned}
 dI(\tau, \mu, \phi) &= -\bar{\sigma}_{\text{ext}} I(\tau, \mu, \phi) \frac{dz}{\mu} \\
 &+ \frac{\bar{\sigma}_{\text{diff}}}{4\pi} F_{\odot} e^{-\tau/\mu_0} \bar{p}(\mu, \phi, -\mu_0, \phi_0) \frac{dz}{\mu} \\
 &+ \frac{\bar{\sigma}_{\text{diff}}}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 I(\tau, \mu', \phi') \bar{p}(\mu, \phi, \mu', \phi') d\mu' d\phi' \frac{dz}{\mu} \\
 &+ \bar{\sigma}_{\text{abs}} B(T(\tau)) \frac{dz}{\mu}
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

En notant $d\tau = -\bar{\sigma}_{\text{ext}} dz$ et en divisant l'équation 2.30 par $d\tau/\mu$, on obtient l'équation du transfert radiatif exprimée sous sa forme différentielle, pour le cas d'une atmosphère

diffusante :

$$\begin{aligned}
\mu \frac{dI(\tau, \mu, \phi)}{d\tau} &= +I(\tau, \mu, \phi) \\
&\quad - \frac{\bar{\omega}}{4\pi} F_{\odot} e^{-\tau/\mu_0} \bar{p}(\mu, \phi, -\mu_0, \phi_0) \\
&\quad - \frac{\bar{\omega}}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 I(\tau, \mu', \phi') \bar{p}(\mu, \phi, \mu', \phi') d\mu' d\phi' \\
&\quad - (1 - \bar{\omega}) B(T(\tau))
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Cette équation intégro-différentielle ne peut se résoudre analytiquement que dans des cas particuliers. Différentes méthodes numériques permettent néanmoins de la résoudre dans le cas général, nous présenterons celle utilisée dans le cadre de ce travail dans la partie 2.6.3.

2.5.2 Intégration dans le cas simplifié sans diffusion

Cas général Lorsque l'on néglige l'impact de la diffusion, il devient cependant possible d'écrire, sous la forme de termes intégrés, l'expression de la luminance mesurée par un satellite depuis l'espace. Reprenant les notations définies précédemment, l'hypothèse d'absence de diffusion donne $\bar{\sigma}_{\text{diff}} = 0 \iff \bar{\omega} = 0 \iff \bar{\sigma}_{\text{ext}} = \bar{\sigma}_{\text{abs}}$. Pour la luminance du rayonnement montant $I(\tau, \mu, \phi)$, l'équation 2.31 devient alors :

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu, \phi)}{d\tau} = I(\tau, \mu, \phi) - B(T(\tau)) \tag{2.32}$$

En séparant les variables et en multipliant les deux membres par $e^{-\tau/\mu} d\tau/\mu$, on obtient :

$$dI(\tau, \mu, \phi) e^{-\tau/\mu} - I(\tau, \mu, \phi) e^{-\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} = -B(T(\tau)) e^{-\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \tag{2.33}$$

En identifiant $d[I(\tau, \mu, \phi) e^{-\tau/\mu}]$ dans le membre de gauche et en intégrant entre la surface $\tau(z=0) = \tau^*$ et le sommet de l'atmosphère $\tau(z=\infty) = 0$, on obtient :

$$I(0, \mu, \phi) e^{-0/\mu} - I(\tau^*, \mu, \phi) e^{-\tau^*/\mu} = \int_{\tau^*}^0 -B(T(\tau)) e^{-\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \tag{2.34}$$

En réarrangeant les termes et en simplifiant, on obtient alors l'expression de la luminance mesurée au sommet de l'atmosphère par un satellite :

$$I(0, \mu, \phi) = I(\tau^*, \mu, \phi) e^{-\tau^*/\mu} + \int_0^{\tau^*} B(T(\tau)) e^{-\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \tag{2.35}$$

Il reste maintenant à déterminer l'expression de la luminance montante évaluée au niveau de la surface $I(\tau = \tau^*, \mu, \phi)$. Celle-ci s'exprime comme la somme de la luminance émise et réfléchiée par la surface dans la direction (μ, ϕ) . L'émission de la surface s'écrit comme

le produit de l'**émissivité** ε par la fonction de Planck évaluée à la température T_s de la surface :

$$I_{\text{emis}}(\tau^*, \mu, \phi) = \varepsilon B(T_s) \quad (2.36)$$

Pour une surface à l'équilibre thermodynamique, son émissivité ε est égale à son absorptivité A . Par conservation de l'énergie, la fraction du flux réfléchi par la surface, nommée l'**albédo** noté α , est égale à $1 - A = 1 - \varepsilon$. Pour une surface dite *lambertienne*, le flux incident $F^\downarrow(\tau = \tau^*)$ est par ailleurs réfléchi de manière isotrope : quelle que soit sa direction dans la demie-sphère d'angle solide, la luminance réfléchie $I_{\text{refl}}(\tau^*, \mu, \phi)$ vérifie donc :

$$\alpha F^\downarrow(\tau = \tau^*) = \pi I_{\text{refl}}(\tau^*, \mu, \phi) \quad (2.37)$$

La luminance du rayonnement descendant $I(\tau, -\mu, \phi)$ vérifie également l'équation 2.32 en changeant μ par $-\mu$:

$$-\mu \frac{dI(\tau, -\mu, \phi)}{d\tau} = I(\tau, -\mu, \phi) - B(T(\tau)) \quad (2.38)$$

En séparant les variables et en multipliant les deux membres par $-e^{\tau/\mu} d\tau/\mu$, on obtient :

$$dI(\tau, -\mu, \phi) e^{\tau/\mu} + I(\tau, -\mu, \phi) e^{\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} = B(T(\tau)) e^{\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \quad (2.39)$$

En identifiant $d[I(\tau, -\mu, \phi) e^{\tau/\mu}]$ dans le membre de gauche et en intégrant entre le sommet de l'atmosphère $\tau(z = \infty) = 0$ et la surface $\tau(z = 0) = \tau^*$, on obtient :

$$I(\tau^*, -\mu, \phi) e^{\tau^*/\mu} - I(0, -\mu, \phi) e^{-0/\mu} = \int_0^{\tau^*} B(T(\tau)) e^{\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \quad (2.40)$$

En réarrangeant les termes et en multipliant les deux membres par $e^{-\tau^*/\mu}$, on obtient alors l'expression de la luminance arrivant à la surface :

$$I(\tau^*, -\mu, \phi) = I(0, -\mu, \phi) e^{-\tau^*/\mu} + \int_0^{\tau^*} B(T(\tau)) e^{-(\tau^*-\tau)/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \quad (2.41)$$

Le flux descendant $F^\downarrow(\tau = \tau^*)$ s'exprime alors comme l'intégrale sur la demie-sphère d'angle solide de la projection de la luminance sur la verticale. Avec la luminance $I(0, -\mu, \phi)$ nulle partout au sommet de l'atmosphère, sauf pour $(-\mu, \phi) = (-\mu_0, \phi_0)$, la direction d'incidence du rayonnement solaire, on a :

$$\begin{aligned} F^\downarrow(\tau = \tau^*) &= \int_0^{2\pi} \int_0^1 I(\tau^*, -\mu, \phi) \mu d\mu d\phi \\ &= F_\odot \mu_0 e^{-\tau^*/\mu_0} + \int_0^{\tau^*} \pi B(T(\tau)) \frac{d}{d\tau} \left(2 \int_0^1 e^{-(\tau^*-\tau)/\mu} \mu d\mu \right) d\tau \end{aligned} \quad (2.42)$$

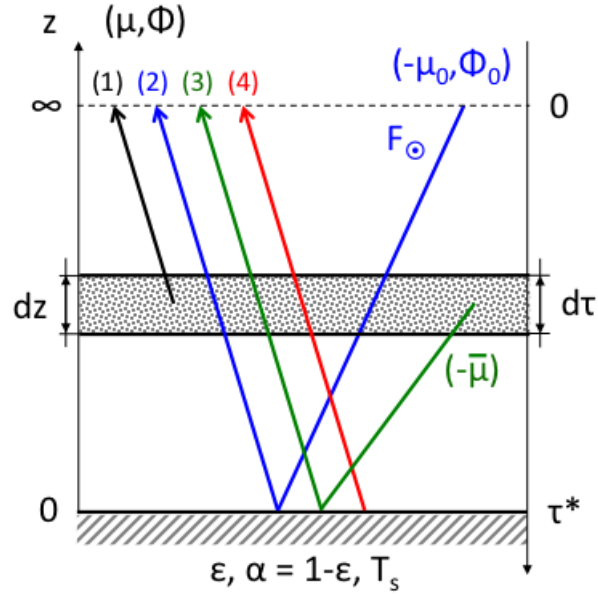


FIGURE 2.8 – Les quatre contributions à la luminance mesurée au sommet de l’atmosphère par un satellite dans la direction (μ, ϕ) : **(1) émission directe** montant de l’atmosphère **(2) réflexion du rayonnement solaire** provenant de la direction $(-\mu_0, \phi_0)$ **(3) réflexion de l’émission descendante** de l’atmosphère émergeant de l’angle effectif $\bar{\theta} = \cos^{-1}(\bar{\mu})$ **(4) émission de la surface**.

Une bonne approximation du terme entre parenthèses est $e^{-(\tau^* - \tau)/\bar{\mu}}$, avec $\bar{\theta} = \cos^{-1}(\bar{\mu})$ l’angle efficace d’émission par rapport à la verticale, par lequel toute l’émission thermique semble émerger. Dans la pratique cet angle $\bar{\theta}$ est choisi entre 53° et 60° (Liou, 2002, p. 127). En calculant la dérivée par rapport à τ de l’approximation, on obtient ainsi :

$$F^\downarrow(\tau = \tau^*) = F_\odot \mu_0 e^{-\tau^*/\mu_0} + \int_0^{\tau^*} \pi B(T(\tau)) e^{-(\tau^* - \tau)/\bar{\mu}} \frac{d\tau}{\bar{\mu}} \quad (2.43)$$

Finalement, la luminance mesurée au sommet de l’atmosphère $I(0, \mu, \phi)$ s’écrit grâce à mise en commun des équations 2.43 et 2.35, qui décrivent respectivement le transfert radiatif dans les directions descendantes et montantes, avec les équations 2.36 et 2.37 qui donnent les conditions à la surface. Ainsi, $I(0, \mu, \phi)$ s’exprime comme la somme de quatre termes, dont

la figure 2.8 explicite le sens physique :

$$\begin{aligned}
I(0, \mu, \phi) &= \int_0^{\tau^*} B(T(\tau)) e^{-\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \\
&+ e^{-\tau^*/\mu} \left[\alpha \frac{F_{\odot} \mu_0}{\pi} e^{-\tau^*/\mu_0} \right] \\
&+ e^{-\tau^*/\mu} \left[(1 - \varepsilon) \int_0^{\tau^*} B(T(\tau)) e^{-(\tau^* - \tau)/\bar{\mu}} \frac{d\tau}{\bar{\mu}} \right] \\
&+ e^{-\tau^*/\mu} [\varepsilon B(T_s)]
\end{aligned} \tag{2.44}$$

Cas particuliers de l'infrarouge thermique et du proche infrarouge Le spectre d'émission du Soleil à $T_{\odot} = 5900$ K et celui de la Terre à $T_s = 290$ K (environ, pour sa surface) sont relativement disjoints en nombres d'onde comme le montre la figure 2.9. Ainsi, il est habituel de négliger la contribution solaire lorsque l'on modélise le transfert radiatif pour l'infrarouge thermique ($\lambda \geq 2.5 \mu\text{m}$ ou $\nu \leq 4000 \text{ cm}^{-1}$). Cela revient à supprimer le terme (2) de l'équation 2.44. Au contraire, lorsqu'on s'intéresse au transfert radiatif dans le proche infrarouge (zone spectrale étudiée dans le cadre de ce travail de thèse : $\lambda \leq 2.5 \mu\text{m}$ ou $\nu \geq 4000 \text{ cm}^{-1}$), l'émission thermique de la surface et de l'atmosphère est alors négligeable, et seul subsiste le terme (2) de l'équation 2.44 dans le cas sans diffusion.

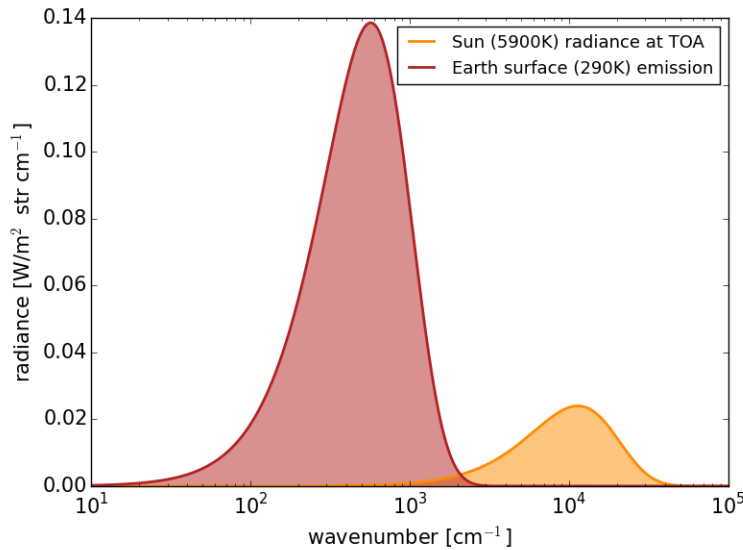


FIGURE 2.9 – Luminance solaire ($T_{\odot} = 5900$ K) au sommet de l'atmosphère et émission thermique de la surface terrestre ($T_s = 290$ K) en fonction du nombre d'onde ν .

2.6 Modèle numérique : 4A/OP

Des modèles de transfert radiatif implémentent dans sa forme différentielle ou intégrée (lorsque l'on néglige la diffusion) l'équation de transfert radiatif, permettant alors de simuler les observations infrarouges des satellites. Dans le cadre de ce travail de thèse, le modèle de transfert radiatif 4A/OP a été utilisée pour les simulations de transfert radiatif.

2.6.1 Description

Le modèle des *Atlas Automatisé des Absorptions Atmosphériques* (4A) est un code de transfert radiatif *raie-par-raie* qui a été développé au LMD (Scott and Chédin, 1981). Étant donnée une atmosphère discrétisée en n niveaux de pression délimitant $n - 1$ couches, pour laquelle des profils verticaux de température et de concentration des gaz ont été définis, 4A calcule les épaisseurs optiques $\Delta\tau$ des $n - 1$ couches comme la somme de l'absorption $k_{\nu,g}\rho_g\Delta z$ des différents gaz g présents. Ajustées au chemin optique, défini par les angles μ , μ_0 et $\bar{\mu}$, ces épaisseurs optiques permettent de résoudre l'équation du transfert radiatif dans sa forme intégrée et donc, en tenant compte des caractéristiques de la surface (T_s , ϵ), de simuler la luminance arrivant au sommet de l'atmosphère. Ce calcul est réalisé pour chacun des nombres d'onde ν qui échantillonnent un interval spectral donné en entrée par l'utilisateur, expliquant le nom « raie-par-raie » de la méthode. La mesure du satellite est finalement obtenue en convoluant la luminance arrivant au sommet de l'atmosphère avec la réponse spectrale de l'instrument embarqué. Si aucune convolution n'est réalisée, on dit que l'on reste à résolution « pseudo-infinie ».

Le calcul raie-par-raie pouvant être particulièrement long, l'originalité de 4A repose sur l'utilisation d'épaisseurs optiques pré-calculées et stockées dans un atlas d'absorptions atmosphériques, donnant alors son nom au modèle. Plus précisément, les épaisseurs optiques sont pré-calculées pour 12 atmosphères de référence, aux profils de température discrétisés sur 43 niveaux de pression (répartis entre 1050 et 0.0024 hPa) et espacés de 7 K, et pour des concentrations de gaz de référence. Cette discrétisation verticale et l'espacement des profils ont été choisis pour minimiser les erreurs lorsque les épaisseurs optiques sont ensuite interpolées en pression et en température, et ajustées en concentration des gaz, afin de correspondre aux profils définis par l'utilisateur en entrée du modèle.

En plus de la luminance, 4A fournit également leurs dérivées partielles par rapport à certaines variables géophysiques X , notée $\partial I/\partial X$ et appelées *Jacobiens* (Chérut et al., 1995). Ces dérivées partielles donnent l'évolution de la luminance correspondant à une variation élémentaire de la variable géophysique X . Parmi toutes les variables que l'on peut prendre en compte, on trouve particulièrement la température des couches du modèle, la concentration par couche des gaz atmosphériques, la pression de surface, les propriétés de surface (albédo, émissivité, température) ou encore l'épaisseur optique des particules diffusantes.

Le modèle 4A est développé et maintenu dans une version OPérationnelle (4A/OP) par les sociétés de service NOVELTIS et Thalès Services avec le soutien du CNES et l'expertise

scientifique du LMD³. 4A/OP a été choisi par le CNES comme modèle de transfert radiatif de référence pour la calibration/validation de l'instrument IASI, ainsi que pour la préparation des missions IASI-NG (Crevoisier et al., 2014), MicroCarb (Pascal et al., 2017) et Merlin (Ehret et al., 2017).

2.6.2 Calcul des atlas d'absorptions atmosphériques

Les atlas d'absorptions atmosphériques qui contiennent les épaisseurs optiques - par gaz - calculées pour les 12 atmosphères de référence sont générés grâce au code de transfert radiatif raie-par-raie et couche-à-couche STRANSAC (Scott, 1974). Par défaut, ces calculs sont réalisés à une résolution spectrale de 0.0005 cm^{-1} , la résolution des atlas, qui peut-être accrue si demande particulière. STRANSAC peut utiliser n'importe quelle base de données spectroscopiques en entrée, et lire les paramètres qu'elle contient pour calculer les profils de raie, et ensuite les épaisseurs optiques des couches de référence. Ainsi, par l'intermédiaire de ces atlas générés en amont, les calculs de transfert radiatif de 4A/OP peuvent s'effectuer en utilisant n'importe quelle base de données spectroscopiques. Cela rend alors par exemple possible l'évaluation des différences entre ces bases.

Par ailleurs, les effets collisionnels sur l'absorption atmosphérique (voir partie 2.3.3) peuvent également être pris en compte à cette étape de préparation des atlas. Les effets de mélange entre raies, avec ou sans dépendance en vitesse, sont par exemple ajoutés pour l'absorption du CO_2 (Lamouroux et al., 2010, 2015) ou de l' O_2 (Tran and Hartmann, 2008). Les continua et l'absorption induite par collisions (CIA) sont en revanche directement gérées dans 4A/OP.

2.6.3 Prise en compte de la diffusion : (V)LIDORT

Historiquement, le modèle 4A n'implémentait que la version intégrée de l'équation du transfert radiatif qui néglige l'impact de la diffusion. Cependant, 4A/OP a été couplé aux codes (*Vector*) *L*inearized *D*iscrete *O*rdinate *R*adiative *T*ransfer LIDORT (Spurr, 2002) et VLIDORT (Spurr, 2006) qui permettent de résoudre l'équation du transfert radiatif dans sa forme différentielle avec diffusion, ainsi que de fournir les Jacobiens des luminances simulées⁴. LIDORT est utilisé pour le transfert radiatif scalaire, tandis que VLIDORT permet de prendre en compte la polarisation en résolvant l'équation du transfert radiatif généralisée pour le vecteur de Stokes, qui décompose la lumière selon quatre composantes $\{I, Q, U, V\}$ témoignant des différents états possibles de polarisation de la lumière.

Après une expansion de la luminance I et de la fonction de phase p en série de Fourier sur les angles azimutaux ϕ , l'équation 2.31 n'inclut plus qu'une intégrale de la forme $\int_{-1}^1 f(\mu) d\mu$ sur le cosinus de l'angle par rapport à la verticale μ . La méthode implémentée dans (V)LIDORT pour résoudre ce problème est celle des « ordres discrets ». Présentée pour la première fois par Chandrasekhar (1950), elle propose d'approximer cette intégrale par une

3. <https://4aop.aeris-data.fr/>

4. Le code DISORT, auquel 4A/OP est également couplé, ne fournit pas les dérivées partielles.

quadrature de Gauss, évaluée sur un nombre discret de noeuds μ_i . On se retrouve alors avec un système d'équations différentielles qui est résolu numériquement.

Les temps de calcul sont considérablement allongés lorsque l'on prend en compte la diffusion. Ainsi, différentes stratégies ont été développées afin d'accélérer ces calculs moyennant quelques approximations. Parmi ces stratégies, 4A/OP implémente la méthode *Low Stream Interpolation* (LSI) proposée par O'Dell (2010). Elle consiste à corriger les erreurs de transfert radiatif commises par un calcul de basse précision (seulement 2 noeuds de quadrature μ_i , au lieu d'au moins 24) grâce à un modèle d'erreur entre haute et basse précision. Celui-ci a été échantillonné sur un nombre de points n_b , dans l'espace des épaisseurs optiques atteintes pour l'intervalle spectral considéré, bien plus faible que le nombre de longueurs d'onde à calculer ($n_b \ll n_\lambda$). Cette méthode ne nécessite donc que n_b calculs de haute précision, contre n_λ lorsqu'on ne l'utilise pas. Les réductions en temps de calcul peuvent atteindre 2 ordres de grandeur pour des erreurs restantes inférieures à 0.1%.

2.7 Conclusions

Ce chapitre a présenté les étapes essentielles qui permettent de simuler une observation infrarouge du rayonnement atmosphérique. Sur son chemin optique, celui-ci rencontre des gaz dont l'absorption est décrite par la spectroscopie moléculaire, et des particules dont les propriétés optiques décrivent comment il est diffusé. Ces paramètres viennent nourrir l'équation du transfert radiatif que nous avons établie dans sa forme différentielle, puis intégrée sous l'hypothèse d'une atmosphère non-diffusante. Le modèle de transfert radiatif 4A/OP, utilisé pour ce travail, implémente ces équations et les résout en tenant ou non compte de la diffusion.

Cet ensemble de phénomènes subits par le rayonnement lors de son trajet dans l'atmosphère est à l'origine de l'information géophysique qu'il transporte. L'*inversion* du transfert radiatif permet alors d'exploiter et d'interpréter quantitativement cette information, par exemple inscrite dans les raies d'absorption. Cela rend notamment possible l'estimation de la concentration atmosphérique des gaz à effet de serre. Le prochain chapitre présente l'inversion du transfert radiatif et l'algorithme d'*estimation optimale*, qui a été implémenté pour mener à bien le travail de modélisation inverse durant cette thèse. Nous appliquerons cette méthode pour l'estimation de la colonne totale de CO₂ à partir de mesures satellites dans le proche infrarouge. Les suivants discutent de l'influence des caractéristiques et de la nature des mesures réalisées sur les performances et sensibilités de cette modélisation inverse, pour l'estimation de la concentration atmosphérique des gaz à effet de serre.

Chapitre 3

Inversion du transfert radiatif pour l'estimation de la colonne totale de CO₂ à partir de mesures satellites dans le proche infrarouge

3.1 Introduction

Le chapitre précédent a illustré les étapes essentielles permettant de simuler le spectre de luminance du rayonnement atteignant le sommet de l'atmosphère. Il s'agissait alors de la modélisation *directe* du transfert radiatif : étant donnée une description géophysique de l'état de l'atmosphère et de la surface, le modèle 4A/OP résout l'équation du transfert radiatif et nous permet de simuler le spectre de luminance associé. Dans un mouvement opposé, ce chapitre traite maintenant de l'*inversion* du transfert radiatif. Il s'agit d'exploiter l'information présente dans les observations proche infrarouges, obtenues par les instruments et concepts étudiés dans le cadre de cette thèse, afin d'en déduire certains paramètres géophysiques inconnus qui décrivent l'état de l'atmosphère, parmi lesquels - et avant tout pour ce travail - la concentration atmosphérique de CO₂ (voir figure 1.8).

Le rayonnement proche infrarouge issu du sommet de l'atmosphère a été initialement émis par le Soleil. Il a donc traversé au total deux fois l'atmosphère sur toute son épaisseur, et est donc sensible à l'absorption du CO₂ intégrée sur toute sa verticale (pour rappel voir la figure 2.8 et l'équation 2.44). Ainsi, plus qu'à un profil discrétisé verticalement, les mesures du rayonnement proche infrarouge donnent accès à la concentration de CO₂ moyennée sur toute l'épaisseur de l'atmosphère, dite « colonne totale » de CO₂ et notée X_{CO_2} , déjà présentée en introduction de ce manuscrit (voir 1.3.2). En plus du CO₂, les mesures du proche infrarouge sont également sensibles aux concentrations de vapeur d'eau et de CH₄, à la température des couches atmosphériques, à l'albédo de surface ainsi qu'à la présence éventuelles d'aérosols sur le chemin optique par exemple.

Dans cette approche inverse, l'atmosphère compte beaucoup plus de paramètres inconnus

que la quantité d’information transportée par le rayonnement proche infrarouge. Le problème inverse qui nous intéresse ici est donc fondamentalement « mal-posé », et est d’autant plus difficile à résoudre que la nature intégró-différentielle de l’équation du transfert radiatif le rend hautement non-linéaire. Au fil de la mise en orbite des missions passées et actuelles, différents codes d’inversion ont été présentés pour fournir une solution satisfaisante à ce problème, et l’immense majorité implémente l’algorithme d’*estimation optimale* introduit par Rodgers (1976). Cet algorithme permet notamment d’évaluer l’incertitude des estimations de X_{CO_2} , ainsi que le contenu en information des mesures infrarouges utilisées en entrée. Il est donc très utile pour l’étude des performances de concepts d’observation dont les mesures diffèrent des concepts déjà en orbite et bien connus. L’estimation optimale a notamment été utilisée pour inverser X_{CO_2} à partir des mesures de SCIAMACHY (Frankenberg et al., 2005; Reuter et al., 2010) et sert de base au code développé au National Institute for Environmental Studies du Japon (NIES) pour traiter les mesures de GOSAT (Yokota et al., 2009; Yoshida et al., 2011, 2013), à celui de l’Université de Leicester (UoL-FP) pour traiter les mesures de GOSAT, OCO-2 et TanSat (Cogan et al., 2012; Somkuti et al., 2020; Yang et al., 2020), à l’*Atmospheric CO₂ Observation from Space* (ACOS, 2021) de la NASA pour traiter les mesures de GOSAT et d’OCO-2/3 (Boesch et al., 2006; Connor et al., 2008; Wunch et al., 2011b; O’Dell et al., 2018; Kiel et al., 2021) ou à l’algorithme *Fast atmOspheric traCe gAs retrievaL* de l’Université de Brême pour traiter OCO-2 et GOSAT (Reuter et al., 2017a,b; Noël et al., 2021). Le code RemoTeC développé au Netherlands Institute for Space Research (SRON) implémente une méthode proche de l’estimation optimale pour estimer X_{CO_2} à partir des mesures de GOSAT et d’OCO-2 (Butz et al., 2011; Wu et al., 2018). Tous ces codes inverses sont par ailleurs dits « *Full-Physics* » (noté FP) car ils reposent explicitement sur la modélisation physique directe du transfert radiatif pour estimer la colonne totale de CO₂. Ces simulations de transfert radiatif incluent pour leur large majorité une prise en compte de la diffusion qui, même optimisée, peut prendre un temps de calcul conséquent (voir 2.6.3). Alors que de nombreux concepts dédiés au suivi par imagerie du CO₂ et/ou d’autres gaz à effet de serre sont planifiés pour la décennie qui s’ouvre (voir 1.5), la quantité de données à traiter va considérablement augmenter, rendant nécessaire le développement de méthodes d’inversion toujours plus rapides. Les méthodes d’estimation par réseaux de neurones, qui sont extrêmement rapides à appliquer une fois l’apprentissage des réseaux terminé, pourraient être mises à contribution. De premiers tests ont été effectués par David et al. (2021) sur les mesures de la missions OCO-2 avec des résultats prometteurs. Leurs avantages et inconvénients vis-à-vis des résultats de l’approche *Full-Physics* restent cependant à mieux caractériser.

Afin de faciliter la comparaison de nos résultats à ceux obtenus par d’autres groupes, ainsi que pour les avantages qu’elle apporte pour l’étude des performances d’un concept d’observation du CO₂, nous avons réalisé ce travail de thèse à partir de la méthode de l’estimation optimale. Dans un premier temps, nous en décrirons le fonctionnement, appliqué à l’estimation de la colonne totale de CO₂, et nous présenterons l’Adaptable 4A Inversion (5AI), le code d’estimation optimale développé dans le cadre de ce travail de thèse. Ensuite, nous examinerons, sur un exemple de spectre typique d’une observation au-dessus de l’Europe,

les sensibilités aux variables géophysiques essentielles (pression de surface, température, gaz traces, aérosols) des observations dans les bandes usuelles du proche infrarouge. Ces sensibilités donnent une première illustration de l’information géophysique contenue dans le proche infrarouge. Nous présenterons alors une application de l’algorithme 5AI aux mesures de la mission américaine OCO-2, et nous discuterons finalement de la sensibilité des résultats d’inversion à la connaissance de la spectroscopie, à la prise en compte d’éventuels aérosols et à la compensation des différences systématiques entre deux modèles inverses distincts.

Les sections 3.2 et 3.4 ainsi que les deux derniers points de la section 3.5 ont été présentés dans le cadre d’une publication acceptée dans *Atmospheric Measurement Techniques*. Elle décrit 5AI et ses premières inversions de X_{CO_2} réalisées à partir de mesures proche infrarouge¹ acquises par la mission américaine OCO-2 (Dogniaux et al., 2021a).

3.2 L’algorithme d’estimation optimale appliqué à l’inversion de la colonne totale de CO_2

Le cadre théorique de l’estimation optimale a été présenté extensivement par Rodgers (2000). Après en avoir donné les principes généraux, nous expliquerons comment l’appliquer à l’inversion de X_{CO_2} et nous présenterons finalement l’Adaptable 4A Inversion (5AI), l’implémentation de l’algorithme d’estimation optimale, couplé à 4A/OP, qui a été développée et utilisée dans le cadre de cette thèse.

3.2.1 Principes généraux

Position du problème L’estimation de paramètres géophysiques à partir de mesures infrarouges est un problème inverse qui peut s’exprimer selon l’équation suivante :

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

avec :

- y , **le vecteur de mesure** infrarouge obtenue par l’instrument embarqué sur un satellite ou bien par une station au sol. Il contient les valeurs de luminances mesurées à tous les nombres d’ondes sélectionnés pour la résolution du problème inverse.
- x , **le vecteur d’état** qui contient tous les paramètres géophysiques que l’on souhaite ajuster à partir de l’information transportée par la mesure. C’est-à-dire ceux que l’on souhaite estimer, comme la concentration atmosphérique de CO_2 dans le cadre de ce travail, mais aussi tous ceux qui pourraient interférer avec l’estimation des variables qui nous intéressent (paramètres géophysiques interférants, paramètres instrumentaux mal connus, etc).

1. Par la suite l’expression « proche infrarouge » ne sera pas accordée afin de pouvoir lire le texte comme on pourrait habituellement l’entendre, sans la liaison à faire au pluriel. On gardera en tête que l’on parle ici de « mesures *du rayonnement* proche infrarouge » au lieu de « mesures proches infrarouges », plus étrange à lire et à dire.

- F , le **modèle direct** qui décrit le lien physique entre le vecteur d'état et la mesure. Dans notre cas, il s'agit du transfert radiatif dans l'infrarouge, abordé au chapitre 2.
- ε , le **vecteur de bruit de la mesure**, ici le bruit de l'instrument qui a réalisé l'observation infrarouge. Ce vecteur n'est pas connu explicitement car il est par définition aléatoire, mais la caractérisation de l'instrument permet d'en connaître la statistique.

Formalisme et hypothèses L'équation 3.1 inclut ε , le bruit instrumental de la mesure infrarouge utilisée pour l'estimation. Ce bruit, tirage aléatoire inconnu, introduit une incertitude dans l'estimation qui peut être faite à partir de la mesure. Le formalisme offert par l'estimation optimale propose de considérer les vecteurs de mesure y et d'état x non pas comme de simples vecteurs fixes, mais comme des **variables aléatoires** décrites par leurs densités de probabilités respectives. Cela permet en effet de prendre en compte la statistique du bruit instrumental, qui est quant à elle connue, et de la retranscrire, au cours de l'estimation, en incertitude sur l'état estimé.

Par ailleurs, l'estimation de paramètres géophysiques à partir de mesures infrarouges est un problème inverse très mal posé : l'atmosphère compte beaucoup plus de paramètres inconnus que la quantité d'information transportée dans une mesure. Ainsi, pour aider à l'obtention d'une solution satisfaisante, le cadre de l'estimation optimale compte sur une connaissance **a priori** des paramètres que l'on cherche à estimer. Cette connaissance a priori aide à la résolution du problème inverse mal posé en contraignant la recherche d'une solution satisfaisante à une partie réduite de tout l'espace des paramètres géophysiques possibles. L'a priori correspond en fait à la connaissance des paramètres géophysiques que l'on aurait avant d'utiliser l'information contenue dans la mesure infrarouge pour améliorer la connaissance de l'état géophysique. Dans la pratique, l'a priori provient de la climatologie des paramètres que l'on souhaite estimer, obtenues à partir de mesures in-situ, de simulations ou de modèles empiriques. Comme le vecteur d'état x , cette connaissance a priori est également une variable aléatoire.

Si l'on suppose que toutes les variables considérées suivent une loi gaussienne, et que l'on note S_a , la matrice de variance/covariance qui caractérise l'incertitude de l'état a priori x_a , et S_e , la matrice de variance/covariance qui décrit l'incertitude s'appliquant sur la mesure y , le problème d'estimation se réduit alors à la minimisation de la fonction de coût χ^2 suivante :

$$\chi^2 = (y - F(x))^T S_e^{-1} (y - F(x)) + (x - x_a)^T S_a^{-1} (x - x_a) \quad (3.2)$$

On peut alors voir l'état estimé qui minimise cette fonction de coût comme le résultat d'un compromis entre l'information apportée par la mesure y (premier terme de la somme) et l'information apportée par l'état a priori x_a (deuxième terme de la somme), pondérées par leurs incertitudes respectives.

Le cadre formel de l'estimation optimale repose finalement sur un modèle direct F linéaire. Lorsque la modélisation directe est non-linéaire, comme dans notre cas pour le transfert radiatif, il convient alors d'utiliser une **approximation linéaire locale**. On peut alors

réexprimer le modèle direct linéairement, comme ici autour de l'état a priori :

$$F(x) = F(x_a) + \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=x_a} (x - x_a) \quad (3.3)$$

Les dérivées partielles du modèle direct F sont appelées les Jacobiens. Elles donnent les variations de la mesure simulée suite à une perturbation élémentaire des paramètres présents dans le vecteur d'état x . Ces Jacobiens portent ainsi en eux le lien direct entre l'état géophysique et la mesure infrarouge. Ils sont habituellement exprimés sous la forme d'une matrice, dite Jacobienne, et notée K .

Résolution Le formalisme et les hypothèses précédentes permettent de déterminer l'état estimé, dit *a posteriori*. Comme la mesure et l'état a priori, l'état a posteriori est une variable aléatoire gaussienne. Sa moyenne est l'état de probabilité maximale, notée \hat{x} , et elle minimise la fonction de coût χ^2 exprimée à l'équation 3.2. Elle peut être calculée par itérations suivant :

$$x_{i+1} = x_i + [(1 + \gamma)S_a^{-1} + K_i^T S_e^{-1} K_i]^{-1} (K_i^T S_e^{-1} (y - F(x_i)) - S_a^{-1}(x_i - x_a)) \quad (3.4)$$

avec le facteur multiplicatif γ peut être fixé à 0 (itérations de Gauss-Newton) ou prendre une valeur qui évolue au cours des itérations afin d'éviter la divergence de l'inversion (méthode de Levenberg-Marquardt, pour laquelle la valeur de γ converge vers 0 au fil des itérations qui convergent bien). La matrice Jacobienne K_i donne les dérivées partielles du modèle direct de transfert radiatif F , évaluées à l'état x_i . Cette approche itérative pour obtenir \hat{x} peut être initialisée à n'importe quel état x_0 , mais il est pratique de choisir $x_0 = x_a$.

La matrice de variance/covariance de l'état a posteriori, notée \hat{S} , décrit quant à elle l'incertitude associée à l'état a posteriori. On la calcule ainsi :

$$\hat{S} = [S_a^{-1} + K^T S_e^{-1} K]^{-1} \quad (3.5)$$

Si la mesure est effectivement sensible aux variables géophysiques présentes dans le vecteur d'état (ce qui est équivalent à une matrice Jacobienne K non nulle), l'incertitude de l'état a posteriori décrite par \hat{S} est plus faible que celle décrite avant l'inversion par S_a . L'information apportée par la mesure, via ses sensibilités aux paramètres inversés, a alors permis d'améliorer la connaissance de l'état géophysique.

La sensibilité de l'état de probabilité maximale \hat{x} à une perturbation de la mesure y est donnée par la matrice de **gain**, notée G :

$$G = \frac{\partial \hat{x}}{\partial y} = [S_a^{-1} + K^T S_e^{-1} K]^{-1} K^T S_e^{-1} \quad (3.6)$$

La matrice de gain est particulièrement utile pour estimer l'impact, sur le résultat d'estimation, de perturbations de la mesure ou de sa modélisation (erreur dans la fonction d'instrument, mise à jour des paramètres spectroscopiques, etc).

Finalement, la sensibilité de l'état de probabilité maximale \hat{x} (le résultat d'inversion) par rapport à l'état vrai - mais inconnu - est donnée par la matrice **averaging kernel**, notée A :

$$A = \frac{\partial \hat{x}}{\partial x} = GK = [S_a^{-1} + K^T S_e^{-1} K]^{-1} K^T S_e^{-1} K \quad (3.7)$$

En plus de faire le lien entre le résultat d'estimation et l'état vrai - mais inconnu -, la matrice A donne une mesure de la quantité d'information disponible dans l'observation infrarouge : sa diagonale donne les *degrés de liberté* associés à chacun des paramètres du vecteur d'état, c'est à dire la quantité d'information indépendante que l'observation apporte pour chacun des paramètres (1 au maximum par paramètre). Dans le cas idéal d'une mesure parfaitement précise, A tend vers la matrice unité.

Utilisation de plusieurs mesures indépendantes Dans certaines situations, il est possible que l'on dispose pour une même situation atmosphérique de plusieurs (disons N) mesures indépendantes y_i , dont l'incertitude est décrite par $S_{e,i}$, respectivement. Ce sera par exemple le cas de l'instrument NanoCarb, dans le prochain chapitre, qui a une fréquence d'échantillonnage assez rapide pour faire plusieurs acquisitions d'un même point fixe au sol lors d'un survol (voir figure 4.9). Dans ce cas, on peut chercher à résoudre le problème inverse de l'estimation de paramètres géophysiques pour les différents y_i séparément, ou bien on peut chercher à résoudre le problème inverse en prenant tous les $\{y_i, i = 1, N\}$ en compte en même temps. Si les acquisitions sont indépendantes les unes des autres, en supposant que toutes les variables sont gaussiennes, cela revient alors à minimiser la fonction de coût χ^2 suivante :

$$\chi^2 = (x - x_a)^T S_a^{-1} (x - x_a) + \sum_{i=1}^N (y_i - F_i(x))^T S_{e,i}^{-1} (y_i - F_i(x)) \quad (3.8)$$

On cherche alors à estimer un unique état a posteriori \hat{x} à partir des N observations.

Sous les hypothèses de variables gaussiennes et d'un modèle direct linéaire, décrit par les matrices Jacobiennes K_i des mesures y_i , respectivement, on peut écrire la matrice de variance/covariance de l'état estimé \hat{S} :

$$\hat{S} = \left[S_a^{-1} + \sum_{i=1}^N K_i^T S_{e,i}^{-1} K_i \right]^{-1} \quad (3.9)$$

Or, pour les mesures y_i , on a également indépendamment :

$$\hat{S}_i = [S_a^{-1} + K_i^T S_{e,i}^{-1} K_i]^{-1} \quad (3.10)$$

La combinaison des équations 3.9 et 3.10 permet alors de calculer la matrice \hat{S} à partir des \hat{S}_i calculées indépendamment :

$$\hat{S}^{-1} = S_a^{-1} + \sum_{i=1}^N [\hat{S}_i^{-1} - S_a^{-1}] \quad (3.11)$$

Pour illustrer le sens de cette équation, il peut être intéressant de considérer que l'on fait N fois la même mesure, pour laquelle on la matrice a posteriori \hat{S}_* . L'équation 3.11 devient alors :

$$\hat{S}^{-1} = (1 - N)S_a^{-1} + N\hat{S}_*^{-1} \iff \hat{S} = \frac{1}{N} \left[\hat{S}_*^{-1} + \frac{1 - N}{N} S_a^{-1} \right]^{-1} \quad (3.12)$$

Lorsque N devient très grand on a $\hat{S} \approx (1/N) \left[\hat{S}_*^{-1} - S_a^{-1} \right]^{-1}$: la variance des paramètres du vecteur d'état diminue avec le nombre de points.

Dans un esprit similaire, l'état a posteriori estimé à partir des N mesures $\{y_i, i = 1, N\}$ considérées en même temps vérifie :

$$\hat{x} = x_a + \hat{S} \sum_{i=1}^N K_i^T S_{e,i}^{-1} (y_i - K_i x_a) \quad (3.13)$$

Les états a posteriori \hat{x}_i vérifient aussi indépendamment :

$$\hat{x}_i = x_a + \hat{S}_i K_i^T S_{e,i}^{-1} (y_i - K_i x_a) \quad (3.14)$$

La combinaison des équations 3.13 et 3.14 permet alors de calculer l'état \hat{x} à partir des états \hat{x}_i estimés indépendamment :

$$\hat{S}^{-1}(\hat{x} - x_a) = \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^{-1}(\hat{x}_i - x_a) \quad (3.15)$$

3.2.2 Application en pratique pour l'inversion de la colonne totale de CO₂

En pratique, la concentration atmosphérique de CO₂ est le plus souvent représentée dans le vecteur d'état sous la forme d'un profil vertical de concentration discrétisé selon des couches ou des niveaux. La colonne totale de CO₂, notée X_{CO_2} , est alors calculée à partir de la portion du vecteur d'état a posteriori \hat{x} contenant les concentrations par couches ou niveaux, notée \hat{x}_{CO_2} .

$$X_{\text{CO}_2} = h \cdot \hat{x}_{\text{CO}_2} \quad (3.16)$$

avec h , la fonction de pondération par la pression déjà présentée dans la partie 1.3.2. On extrait également des matrices \hat{S} et A les sous-matrices carrées \hat{S}_{CO_2} et A_{CO_2} , respectivement, qui correspondent aux paramètres CO₂ du vecteur d'état. L'incertitude de la colonne totale de CO₂, notée $\sigma_{X_{\text{CO}_2}}$ et son noyau d'estimation, noté a_{CO_2} , peuvent alors être calculés :

$$\sigma_{X_{\text{CO}_2}} = \sqrt{h^T \hat{S}_{\text{CO}_2} h} \quad (3.17)$$

$$(a_{\text{CO}_2})_j = \frac{\partial X_{\text{CO}_2}}{\partial x} = \frac{(h^T A_{\text{CO}_2})_j}{h_j} \quad (3.18)$$

Le noyau d'estimation a_{CO_2} décrit la sensibilité verticale de la colonne totale de CO₂ estimée par rapport au profil de concentration réel, mais inconnu. C'est un résultat à part entière de l'inversion : il est essentiel pour comparer des colonnes totales obtenues par divers instruments aux caractéristiques et géométries de visée différentes. La figure 1.9 montre, dans la partie 1.3.2, la sensibilité verticale typique à la colonne de CO₂ pour deux observations, une dans le proche infrarouge, et l'autre dans l'infrarouge thermique.

3.2.3 Un code d'estimation optimale adaptable basé sur 4A/OP : l'Adaptable 4A Inversion (5AI)

Le code Adaptable 4A Inversion (5AI) a été développé dans le cadre de ce travail de thèse. Il implémente l'algorithme d'estimation optimale en reposant sur la modélisation directe du transfert radiatif de 4A/OP (voir partie 2.6). Flexible, il peut être utilisé pour traiter les mesures de n'importe quel instrument, pourvu que sa réponse instrumentale ait été adaptée au formalisme de 4A/OP. Comme ce dernier, 5AI peut également changer facilement d'atlas d'absorptions atmosphériques afin de pouvoir tester l'impact de la spectroscopie sur les résultats d'inversion.

Concernant les paramètres de l'inversion, 5AI permet de rechercher l'état a posteriori en itérant selon le schéma de Gauss-Newton ou de Levenberg-Marquardt. À l'heure actuelle, le code 5AI peut inclure différentes variables géophysiques à estimer dans son vecteur d'état :

- La concentration atmosphérique des gaz traces inclus dans GEISA, décrits par leur profil vertical, ou bien par un facteur multiplicatif du profil de concentration a priori.
- La température, décrite par son profil vertical ou bien par un décalage global du profil de température a priori.
- La température de surface.
- La pression de surface.
- L'albédo ou l'émissivité de surface, décrits par bande spectrale avec un polynôme de degré jusqu'à 3.
- L'épaisseur optique de particules diffusantes dont la répartition verticale (altitude et épaisseur des couches) est fixée.

Le code d'estimation optimale 5AI est un code de recherche qui n'a pas de visée opérationnelle dans son état actuel : des optimisations, améliorations et ajustement d'hypothèses seraient à prévoir s'il devait un jour être industrialisé. Il a en effet été avant tout développé afin de pouvoir l'adapter facilement aux différentes questions de recherche qui peuvent se présenter. Ainsi, il a pu, avec des modifications relativement mineures, simuler et inverser les mesures très particulières de l'instrument NanoCarb (voir chapitre 4).

3.3 Sensibilités des mesures proche infrarouge aux variables géophysiques essentielles

Avant d'appliquer l'estimation optimale aux mesures de la mission OCO-2, il est tout d'abord nécessaire d'illustrer l'information géophysique présente dans les bandes spectrales usuelles des missions proche infrarouge. Celle-ci trouve son origine dans les sensibilités s_X du rayonnement aux variations des paramètres géophysiques X que l'on cherche à estimer : les dérivées partielles $\partial F/\partial X$ (Jacobiens) d'une observation infrarouge par rapport aux principales variables géophysiques d'intérêt X nous y donnent accès. On les multiplie par un facteur ΔX permettant de simuler une perturbation élémentaire qui correspond aux objec-

tifs de précision ou à la variabilité des variables auxquelles on s'intéresse.

$$s_X = F(X + \Delta X) - F(X) = \frac{\partial F(X)}{\partial X} \Delta X \quad (3.19)$$

On montre les sensibilités d'une mesure simulée pour les trois bandes usuelles des missions proche infrarouge (0.76 μm , 1.6 μm , 2.05 μm), et on s'intéresse en particulier aux perturbations élémentaires suivantes :

- H₂O +10 %
- CO₂ + 1 ppm
- CH₄ + 10 ppb
- Pression de surface + 1 hPa
- Décalage du profil de température d'1 K
- albédo + 0.002
- épaisseur optique des aérosols identifiables à des suies + 0.01
- épaisseur optique des aérosols minéraux + 0.01

La mesure est simulée pour des conditions atmosphériques et de surface ainsi que des paramètres d'observation typiques de l'Europe, pour un instrument fictif ayant un pouvoir de résolution de $\lambda/\Delta\lambda = 15000$:

- Un albédo représentatif d'une scène de végétation.
- Une inclinaison du Soleil par rapport à la verticale de 50° (*Solar Zenith Angle*, SZA).
- Une observation réalisée selon la verticale, au nadir : angle zénithal de vue (*Viewing Zenith Angle*, VZA) à 0°.
- Un profil de température et d'humidité typiques d'une situation aux moyennes latitudes, calculés comme la moyenne de la deuxième classe d'atmosphères de la base *Thermodynamic Initial Guess Retrieval* (TIGR, Chédin et al., 1985) développée et maintenue au LMD². On considère aussi des profils verticaux constants de CO₂ (395 ppm) et de CH₄ (1855 ppb).
- Des aérosols identifiables à des suies de combustion présents entre 0 et 2 km d'altitude, pour une épaisseur optique de 0.05, et des aérosols minéraux présents entre 2 et 4 km, avec une épaisseur optique de 0.015.

3.3.1 Bande A de l'oxygène ($\sim 0.76 \mu\text{m}$)

Le rapport de mélange de l'O₂ dans l'atmosphère étant parfaitement connu, les mesures de la bande A de l'O₂ localisée vers 0.76 μm (voir figure 3.1) permettent de retrouver la quantité intégrée d'O₂ traversée sur le chemin optique du rayonnement. On peut alors en déduire la longueur de ce chemin, essentielle pour la bonne interprétation des raies d'absorption du CO₂ présentes dans les autres bandes. La longueur du chemin optique est déterminée par la pression de surface ainsi que par les diverses couches de particules diffusantes qui peuvent l'allonger ou le raccourcir par le jeu des diffusions multiples. La figure 3.1 montre en

2. <https://ara.lmd.polytechnique.fr/index.php?page=tigr>

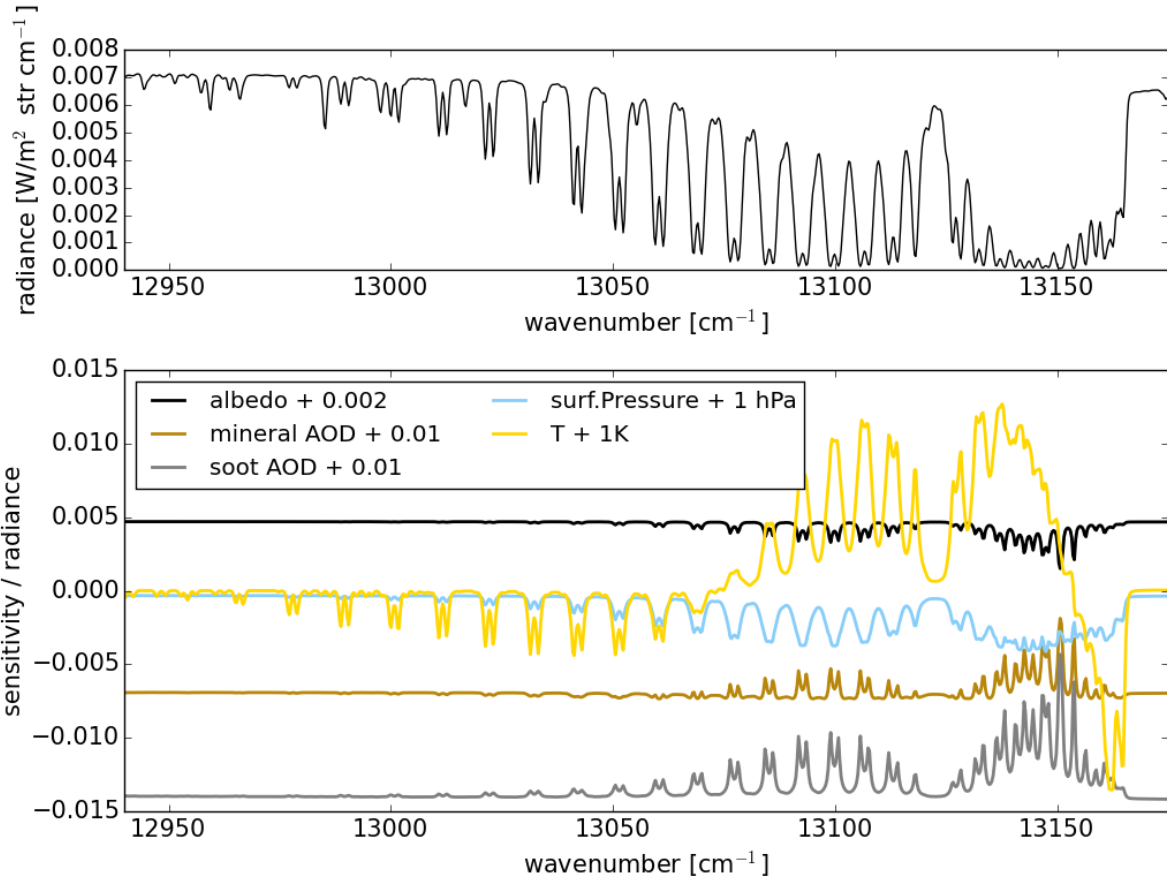


FIGURE 3.1 – Luminances et ses sensibilités, simulées pour la bande A de l' O_2 .

particulier les sensibilités à ces variables : la perturbation de l'épaisseur optique des aérosols a plus d'impact sur la luminance simulée que l'ajout d'1 hPa à la pression de surface (autant sur le fond du spectre que dans les raies d'absorption de l' O_2). On comprend ainsi l'importance qu'à la prise en compte des particules diffusantes pour l'interprétation des mesures réalisées dans le proche infrarouge. Pour finir, on constate une forte sensibilité à la température dans les raies d'absorption de l' O_2 , due au rôle qu'elle joue pour le calcul des coefficients d'absorption. Cette bande spectrale est également sensible à la fluorescence chlorophyllienne induite par le soleil (*Sun-Induced chlorophyll Fluorescence*, SIF) et permet de l'estimer (par exemple Frankenberg et al., 2011; Sun et al., 2018). Son effet n'est cependant pas représenté ici car sa modélisation n'est pas encore incluse dans 4A/OP.

3.3.2 Bande CO_2 faible ($\sim 1.6 \mu\text{m}$)

La bande dite de « CO_2 faible » se trouve vers $1.6 \mu\text{m}$ et présente, dans des branches P et R, des raies d'absorption non-saturées du CO_2 (voir figure 3.2 entre 6200 et 6250 cm^{-1} ,

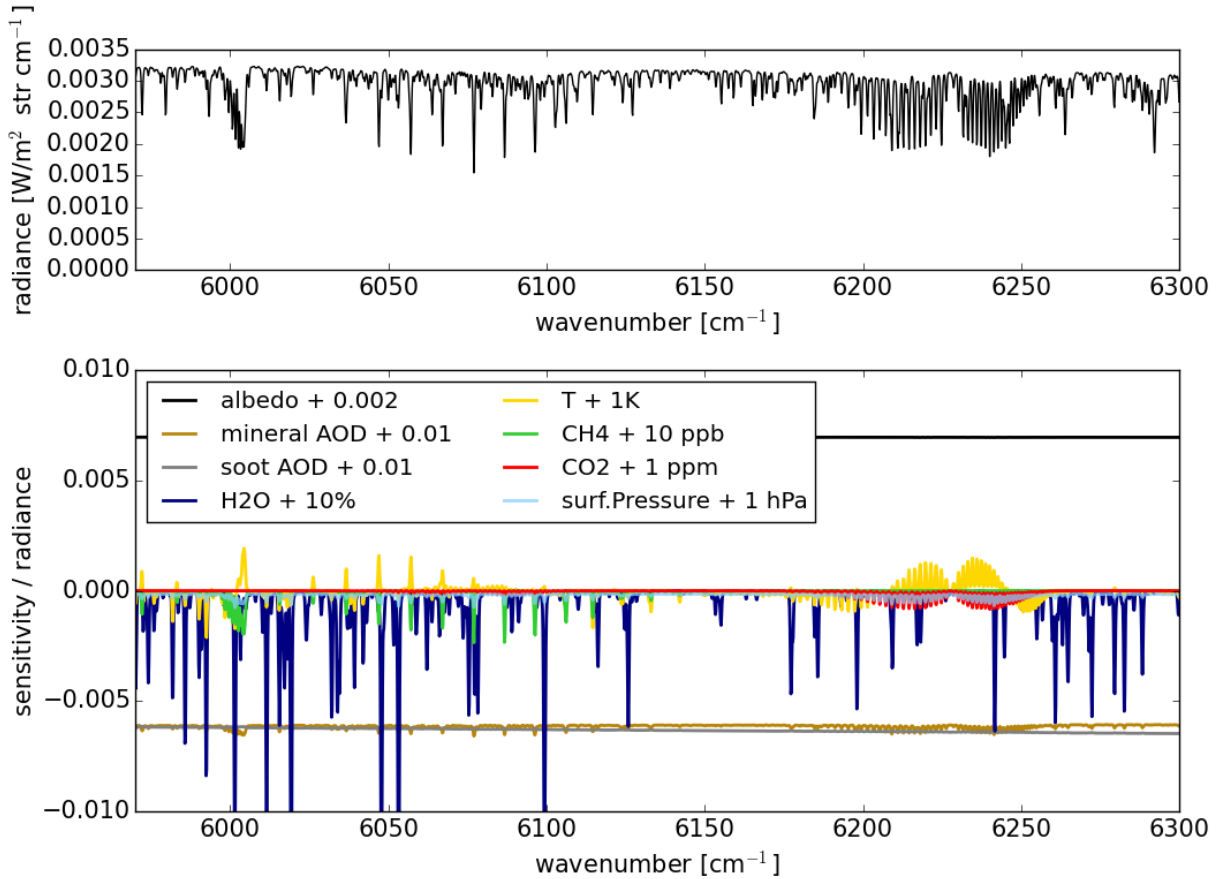


FIGURE 3.2 – Luminances et ses sensibilités, simulées pour la bande CO₂ faible.

en rouge). Ainsi, la variation de la concentration atmosphérique du CO₂ produit ici une modification quasiment linéaire de l’absorption observée dans le spectre. Non loin de cette bande se trouvent également des raies d’absorption du CH₄ (voir figure 3.2 entre 6000 et 6150 cm^{-1} , en vert). Elles servent dans le cadre du projet SCARBO (voir chapitre 4) et permettront d’estimer sa concentration pour la méthode du proxy dans le cadre de CO₂M.

Cette bande est polluée par des raies d’H₂O et les particules diffusantes y ont un impact proche de celui d’une variation d’albédo. On peut noter que la sensibilité aux aérosols connaît une dépendance spectrale, due à la variation de leur propriétés optiques selon la longueur d’onde. Finalement, on y trouve des sensibilités à la température et à la pression de surface, corrélées – différemment – à la sensibilité au CO₂.

3.3.3 Bande CO₂ fort ($\sim 2.05 \mu\text{m}$)

La bande dite de « CO₂ fort » se trouve vers $2.05 \mu\text{m}$ et présente des raies d’absorption saturées du CO₂. Comme la luminance y est faible, la perturbation de l’épaisseur optique

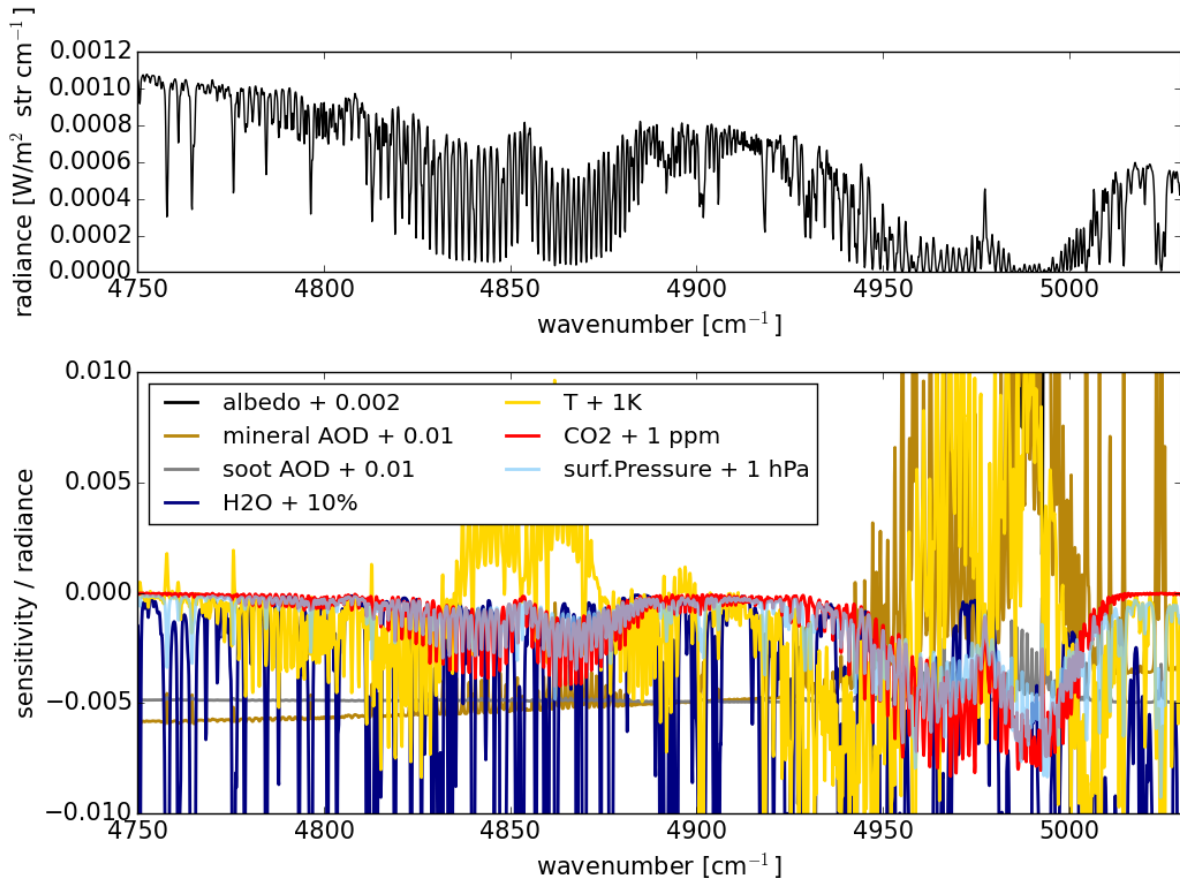


FIGURE 3.3 – Luminances et ses sensibilités, simulées pour la bande CO₂ fort.

des particules diffusantes est d'autant plus sensible, et permet donc de mieux contraindre les paramètres liés aux particules diffusantes lorsqu'elles sont présentes en quantité.

Comme pour la bande CO₂ faible, des raies d'H₂O polluent également cette bande, mais de manière beaucoup plus importante, et on voit à nouveau que les sensibilités à la température et à la pression de surface sont corrélées à celle du CO₂. Ainsi, on comprend que l'estimation de la concentration atmosphérique de CO₂ ne peut se passer d'un éventuel ajustement de la température et de la pression de surface grâce à des mesures indépendantes, comme celles de la bande A de l'O₂ par exemple.

3.4 Application aux mesures de la mission américaine OCO-2

Afin d'illustrer le bon fonctionnement de 5AI, on l'applique ici pour estimer la colonne totale de CO₂ à partir d'un échantillon des mesures proche infrarouge acquises par la mission

américaine OCO-2. Les mesures sélectionnées incluent (1) des mesures visant des stations de validation au sol TCCON (voir 1.3.4), de la meilleure qualité possible, entre 2014 et 2018 (2) un échantillon sur deux années complètes de mesures acquises au nadir sur les continents, avec une couverture globale. Pour des raisons de temps de calcul, 5AI est ici utilisé en négligeant l’impact éventuel des particules diffusantes pour l’estimation de X_{CO_2} . L’échantillon de mesures sélectionné cherche donc également à faire un compromis entre la couverture et les plus faibles valeurs d’épaisseur optique d’aérosols possibles (AOD, telles qu’analysées par ACOS, l’algorithme officiel pour le traitement des mesures OCO-2), afin d’éviter autant que possible les biais dûs à de fortes contaminations en aérosols.

Nous détaillerons d’abord la configuration de 5AI pour l’estimation de X_{CO_2} à partir des mesures OCO-2. Ensuite, nous décrivons les données OCO-2 et TCCON utilisées, et comment elles ont été sélectionnées. Finalement, nous présenterons les résultats de 5AI, que nous comparerons aux résultats d’ACOS ainsi qu’au produit officiel TCCON. En effet, TCCON constitue une référence pour la validation des algorithmes qui estiment X_{CO_2} à partir des instruments qui ont été ou sont encore en orbite comme SCIAMACHY (par exemple Reuter et al., 2011), GOSAT (par exemple Wunch et al., 2011b; Cogan et al., 2012; Inoue et al., 2016; Noël et al., 2021), OCO-2 (par exemple Reuter et al., 2017a; O’Dell et al., 2018; Wu et al., 2018; David et al., 2021) ou TanSat (par exemple Yang et al., 2020).

3.4.1 Configuration de l’algorithme 5AI pour OCO-2

Définition du vecteur d’état Les principaux paramètres géophysiques examinés dans la section 3.3 sont inclus dans le vecteur d’état de 5AI, décrit dans le tableau 3.1. Les valeurs a priori utilisées et leurs incertitudes incluses dans la matrice de variance/covariance de l’état a priori sont identiques à celles utilisées par ACOS, lues dans les données OCO-2.

Définition du vecteur de mesure Le spectromètre de la mission OCO-2 mesure le rayonnement solaire réfléchi par la Terre dans les trois bandes usuelles du proche infrarouge : la bande A de l’O₂ (0.7 μm), la bande dite du CO₂ faible (1.6 μm) et celle dite du CO₂ fort (2.05 μm). Les inversions de X_{CO_2} présentées ici sont réalisées à partir d’un vecteur de mesure qui inclut les luminances des trois bandes spectrales mesurées par l’instrument d’OCO-2. On enlève cependant quelques canaux au début et à la fin de chacune des bandes, qui subissent des problèmes de distortion optique et de caractérisation de la fonction d’instrument à leurs extrémités (Crisp et al., 2017).

Spectroscopie pour le transfert radiatif Les simulations de transfert radiatif réalisées ici par 5AI, qui repose sur 4A/OP, utilisent une correction empirique du modèle d’absorption induite par collisions (CIA) proposé par Tran and Hartmann (2008) et décrite dans l’Annexe A. L’absorption du CO₂ utilisée tient compte de l’effet de mélange entre raies et de l’élargissement par l’H₂O selon le modèle de Lamouroux et al. (2010) qui repose sur les raies de CO₂ incluses dans la base de données spectroscopiques HITRAN 2008 (Rothman et al., 2009). L’absorption de tous les autres gaz a été calculée à partir de la version 2015 de

Variable	Longueur	Valeur a priori	Incertitude a priori (1σ)	Notes
Facteur multiplicatif du profil d'H ₂ O	1	1.0	0.5 (même qu'ACOS)	-
Concentration du CO ₂ par couche	19 couches	a priori d'ACOS	matrice de variance/covariance a priori d'ACOS	voir O'Dell et al. (2012)
Pression de surface	1	a priori d'ACOS	4.0 hPa (même qu'ACOS)	-
Décalage global du profil de température	1	a priori d'ACOS	5.0 K (même qu'ACOS)	-
Albédo de surface (ordre 0 du polynôme)	3 bandes	a priori d'ACOS	1.0 (même qu'ACOS)	évalué à 0.77 μm , 1.615 μm et 2.06 μm pour les bandes O ₂ , CO ₂ faible et CO ₂ fort, respectivement
Pente de la dépendance spectrale de l'albédo (ordre 1 du polynôme)	3 bandes	a priori d'ACOS	1.0/cm ⁻¹ (même qu'ACOS)	-

TABLE 3.1 – Composition du vecteur d'état de 5AI pour l'estimation de X_{CO_2} à partir des mesures de la mission OCO-2.

la base de données spectroscopiques GEISA (voir 2.3.5). Le modèle de rayonnement solaire est celui fourni par Toon (2015b).

Approximations pour réduire le temps de calcul Les observations OCO-2 ont la particularité d'être sensibles à l'état de polarisation de la lumière. Ainsi, les effets de polarisation doivent être pris en compte pour le transfert radiatif direct si l'on souhaite modéliser de manière satisfaisante les mesures de l'instrument. Malheureusement, le couplage de 4A/OP avec VLIDORT (voir 2.6.3) n'est pas encore optimisé, et les simulations de transfert radiatif avec prise en compte de la polarisation sont extrêmement longues. Ainsi, d'autres hypothèses et approximations doivent être réalisées pour réduire les temps de calculs.

Tout d'abord, l'ensemble de mesures OCO-2 qui est considéré pour cette application de 5AI essaye d'inclure les plus faibles contaminations par des particules diffusantes possibles afin d'avoir seulement à prendre en compte la diffusion Rayleigh (voir 2.4) dans la bande A de l'O₂. Les simulations de transfert radiatif pour cette bande sont réalisées grâce au couplage entre 4A/OP et VLIDORT, et les coefficients de Stokes donnés par ACOS sont appliqués aux composantes du vecteur de Stokes sorti par 4A/OP + VLIDORT. Avec l'hypothèse d'une faible contamination par les particules diffusantes, nous négligeons cependant l'impact de la polarisation et de la diffusion pour les bandes CO₂ faible et forte. Pour celles-ci, seul le coefficient de Stokes de 0.5 est appliqué à la composante I du vecteur de Stokes.

Par ailleurs, négliger l'impact des particules diffusantes dans l'estimation de X_{CO_2} rend la modélisation directe, et donc le problème inverse, bien plus linéaires. On fait donc l'hypothèse

supplémentaire que la matrice Jacobienne K n'évolue que faiblement au cours de l'inversion, et qu'il n'est donc pas nécessaire de la mettre à jour au fil des itérations. Ainsi, pour cette application de 5AI aux mesures d'OCO-2, la matrice Jacobienne K n'est calculée qu'une seule fois pour toutes, pour l'état a priori. Nous avons effectué un test de sensibilité, et cette approximation ne change pas significativement les résultats d'inversion (non montré). Comme la plus grande partie du temps de calcul correspond à l'étape du calcul des Jacobiens pour la bande A de l'O₂ avec VLIDORT, cette approximation permet d'accélérer grandement le traitement des mesures OCO-2 par 5AI.

3.4.2 Données

Description des données La mission OCO-2 a trois modes d'observation distincts. Les modes nadir et glint (réflexion spéculaire sur les océans) sont les modes nomiaux d'observation scientifique qui représentent la vaste majorité des mesures. Par ailleurs, le mode *target* de la mission OCO-2 acquiert des données pour la validation des estimations de X_{CO_2} . Lors d'une session target, le satellite s'incline, vise une cible de validation (dont la plupart sont des stations TCCON) et scanne les environs de la cible pendant son survol. Ces sessions target fournissent ainsi des points d'observations OCO-2 densément co-localisés avec des cibles de validation (sur des surfaces aussi petites que $0.2^\circ \times 0.2^\circ$) et acquis en seulement quelques minutes (Wunch et al., 2017).

L'algorithme ACOS fournit les produits officiels de la mission OCO-2, utilisés ici dans leur version B8r (O'Dell et al., 2018), qui a été remplacée par la B10r depuis. Elles sont disponibles en téléchargement à partir de l'Archive de données OCO-2, maintenue au *NASA Goddard Earth Science Data and Information Services Center* (NASA GES-DISC)³. Parmi les produits de niveau 2, on distingue deux versions de la colonne totale de CO₂ : celle brute et celle corrigée du biais a posteriori. Le produit X_{CO_2} brut est la sortie directe de l'estimation *Full-Physics* réalisée par l'algorithme ACOS. Le produit X_{CO_2} corrigé du biais est quant à lui issu du X_{CO_2} brut, qui a ensuite subi des modifications empiriques afin de réduire ses différences (en moyenne et en écart-type) à des proxys de vérité comme TCCON ou des sorties de modèles de transport (O'Dell et al., 2018). Pour notre travail, les résultats de 5AI seront comparés au produit X_{CO_2} brut d'ACOS car 5AI n'inclut pas de correction empirique du biais.

Les résultats de 5AI seront par ailleurs comparés aux données TCCON. Le réseau sol de stations de validation TCCON utilise des spectromètres à transformée de Fourier à haute résolution spectrale pour estimer la colonne totale des gaz à effet de serre à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge. L'algorithme GGG2014 (Wunch et al., 2015) réalise ces estimations, dont les résultats sont partagés sur l'Archive de données TCCON⁴.

Sélection des données Le premier objectif de l'application de 5AI à des mesures OCO-2 est de comparer les résultats d'inversion de 5AI avec les données de validation du réseau

3. <https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets/>

4. <https://tccodata.org/>

Station TCCON	Coordonnées (latitude, longitude, altitude)	Nb. de sessions target	Plage temporelle (première et dernière sessions)	Références
Île de l'Ascension	7.92°S, 14.33°W, 0.01 km	4	16/01/2015 - 15/01/2018	Feist et al. (2014)
Bialystok (Pologne)	53.23°N, 23.03°E, 0.18 km	1	18/03/2015	Deutscher et al. (2019)
Bremen (Allemagne)	53.10°N, 8.85°E, 0.027 km	1	17/03/2016	Notholt et al. (2014)
Caltech (USA)	34.14°N, 118.13°W, 0.230 km	19	12/09/2014 - 16/09/2018	Wennberg et al. (2015)
Darwin (Australie)	12.424°S, 130.89°E, 0.03 km	8	15/05/2015 - 28/07/2017	Griffith et al. (2014a)
Edwards (USA)	34.96°N, 117.88°W, 0.700 km	1	22/08/2018	Iraci et al. (2016)
Eureka (Canada)	80.05°N, 86.42°W, 0.61 km	2	16/06/2015 - 28/06/2015	Strong et al. (2019)
Izana (Tenerife)	28.31°N, 16.50°W, 2.37 km	2	05/01/2018 - 24/03/2018	Blumenstock et al. (2017)
Karlsruhe (Allemagne)	49.10°N, 8.44°E, 0.116 km	1	12/09/2016	Hase et al. (2015)
Lamont (USA)	36.60°N, 97.49°W, 0.32 km	9	10/02/2015 - 11/11/2016	Wennberg et al. (2016)
Lauder (N-Z)	45.04°S, 169.68°E, 0.37 km	3	17/02/2015 - 06/02/2016	Sherlock et al. (2014)
Orléans (France)	47.97°N, 2.11°E, 0.13 km	1	08/04/2015	Warneke et al. (2019)
Paris (France)	48.85°N, 2.36°E, 0.06 km	1	25/08/2016	Té et al. (2014)
Park Falls (USA)	45.95°N, 90.27°W, 0.44 km	7	11/10/2014 - 21/04/2017	Wennberg et al. (2017)
Île de la Réunion	20.90°S, 55.49°E, 0.087 km	4	24/03/2015 - 01/08/2015	De Mazière et al. (2017)
Saga (Japon)	33.24°N, 130.29°E, 0.007 km	5	31/07/2015 - 02/12/2017	Kawakami et al. (2014)
Sodankylä (Finlande)	67.37°N, 26.63°E, 0.188 km	4	20/08/2015 - 17/07/2018	Kivi et al. (2014); Kivi and Heikkinen (2016)
Tsukuba (Japon)	36.05°N, 140.12°E, 0.03 km	6	14/11/2014 - 17/06/2017	Morino et al. (2018)
Wollongong (Australie)	34.40°S, 150.88°E, 0.03 km	13	23/09/2014 - 06/05/2018	Griffith et al. (2014b)

TABLE 3.2 – Données TCCON utilisées dans ce travail.

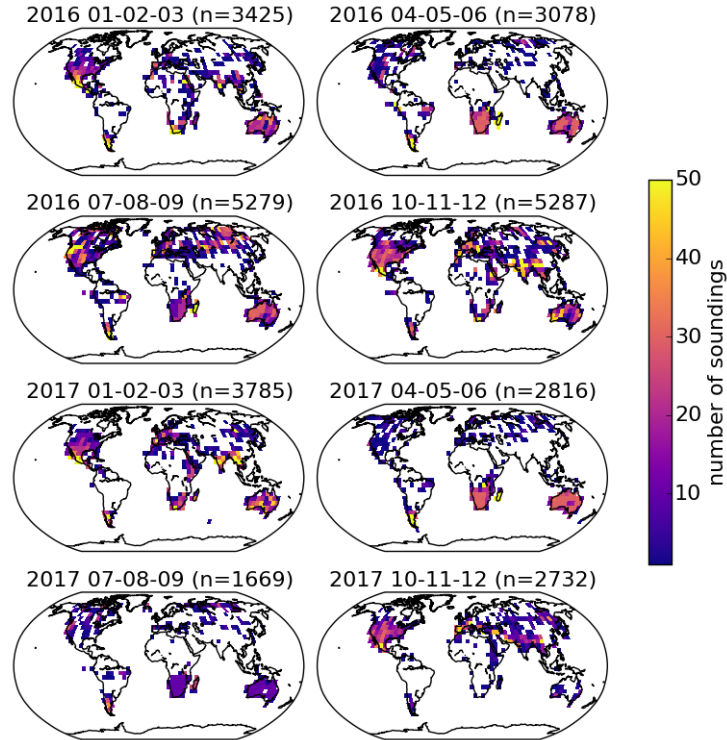


FIGURE 3.4 – Répartition spatio-temporelle de l'échantillon d'observations OCO-2 réalisées au nadir et sélectionnées pour les inversions de 5AI (saisons et bins de $5^\circ \times 5^\circ$). Les titres donnent le nombre exact d'observations pour la carte correspondante. Le faible nombre d'observations disponibles en Juillet-Septembre 2017 est dû à un trou dans les données lié au pilotage du satellite.

TCCON. D'abord, on sélectionne toutes les mesures OCO-2 du mode target entre 2014 et 2018 qui vérifient les meilleurs critères de qualité pour la mesure, l'issue de l'inversion et la pollution nuageuse. Dans un compromis avec le nombre de sessions target disponibles, on fixe une limite maximale de 0.5 (relativement haute) à l'AOD estimée par ACOS. Cet échantillon de mesures target OCO-2 compte 16414 observations, avec une AOD médiane estimée par ACOS de 0.05 et un percentile à 76% de 0.1.

En parallèle, on sélectionne toutes les données de référence TCCON acquises ± 2 heures par rapport à l'instant du survol d'OCO-2, et on ne garde que les sessions target qui rassemblent au moins cinq points TCCON et cinq résultats de 5AI qui passent les filtres a posteriori. L'ensemble final compte 9 449 points de référence TCCON issus de 19 stations de validation différentes, pour un total de 92 sessions target prises en compte. Les données TCCON utilisées pour ce travail sont listées dans le tableau 3.2.

En plus des données target, on sélectionne également un échantillon d'observations OCO-2 réalisées au nadir (l'un des modes nominaux de la mission) avec une couverture globale pour les années 2016-2017 (avec tous les meilleurs critères de qualité possibles). Pour chaque mois

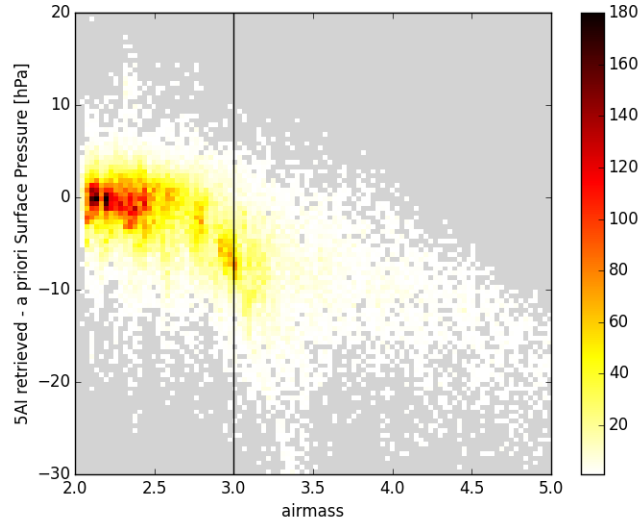


FIGURE 3.5 – Distribution selon la masse d’air de la différence entre pressions de surface estimée par 5AI et a priori, pour les observations OCO-2 target et nadir passant les filtres a posteriori sur la pression de surface, l’albédo mélangé et le χ^2 réduit. Le gris colore les zones sans résultat d’inversion de 5AI.

de ces deux années, et pour chaque bin de $5^\circ \times 5^\circ$, on sélectionne 25 (10 pour l’Amérique du Nord, le Sud de l’Afrique et l’Australie) observations avec les plus faibles AOD estimées par ACOS possibles. Pour 2016 et 2017, cette sélection est faite avec un critère d’AOD maximale de 0.035 et 0.045 donnant 17 069 observations pour 2016 et 11 002 pour 2017, respectivement. La répartition spatio-temporelle de cet échantillon est illustrée sur la figure 3.4.

3.4.3 Résultats

Filtrage a posteriori des résultats de 5AI Afin de s’assurer de la qualité des résultats d’inversion de 5AI, on leur applique les filtres a posteriori décrits dans le tableau 3.3. Le premier filtre sur la pression de surface retire les inversions pour lesquelles l’estimation de la longueur du chemin optique a été difficile, suggérant des erreurs dans la modélisation de la diffusion causant alors une large différence entre la pression de surface estimée et celle a priori. Le filtre sur le χ^2 réduit retire les observations pour lesquelles le spectre simulé ne correspond pas assez à celui mesuré. Seulement 5% des inversions de 5AI sont perdus après ces deux premiers filtres. Par ailleurs, le filtre sur l’albédo mélangé retire 12% des observations target, celles représentatives de surfaces enneigées ou recouvertes de glace (Wunch et al., 2011b). Finalement, avec la configuration d’inversion utilisée ici et présentée à la section 3.4.1, les résultats d’inversion de la pression de surface par 5AI montrent une dépendance en masse d’air illustrée sur la figure 3.5. Pour ce travail, toutes observations avec une masse d’air supérieure à 3.0 sont filtrées. De prochains travaux chercheront à améliorer la configuration d’inversion de 5AI afin de pouvoir traiter des observations à plus haute masse

d'air. Les résultats d'inversion de 5AI détaillés plus loin sont donc finalement basés sur les 9605 observations target et 21254 observations nadir qui ont réussi à passer tous ces filtres a posteriori.

Variable	Valeur minimum	Valeur maximum	Définition et référence	mode d'OCO-2
Pression de surface estimée	$P_{\text{nlev}-1}$	-	L'atmosphère est discrétisée en 20 niveaux encadrant 19 couches. On n'autorise pas la pression de surface estimée P_{nlev} à être inférieure à celle du niveau supérieur.	nadir, target
χ^2 réduit	-	7.0	Qualité générale de la correspondance des spectres simulés et observés. Voir Wu et al. (2018) pour la définition.	nadir, target
Albédo mélangé	-	0.8	$2.4 \times$ albédo bande A de l'O ₂ + $1.13 \times$ albédo bande CO ₂ fort (Wunch et al., 2011b, 2017).	target
Masse d'air	-	3.0	$1/\cos(\text{SZA}) + 1/\cos(\text{VZA})$ avec l'angle zénithal solaire SZA et l'angle zénithal de vue VZA (Wunch et al., 2011b).	nadir, target

TABLE 3.3 – Filtrés appliqués sur les résultats d'inversion de 5AI.

Résultats pour les observations target Pour chacune des sessions target, suivant l'exemple de Wu et al. (2018) ou d'O'Dell et al. (2018), on considère une unique moyenne des résultats d'inversion obtenus à partir des mesures OCO-2 ainsi qu'une unique moyenne des données de validation TCCON. Les sensibilités verticales, décrites par les noyaux d'estimation a_{CO_2} , des X_{CO_2} fournis par OCO-2 et TCCON ne sont pas exactement identiques. Il est donc nécessaire d'effectuer une correction des données TCCON avec les noyaux d'estimations des X_{CO_2} obtenus à partir des observations OCO-2, comme le fait O'Dell et al. (2018) à partir de Nguyen et al. (2014) :

$$X_{\text{OCO-2,TCCON}} = X_{\text{a priori}} + \left(\frac{\hat{X}_{\text{TCCON}}}{X_{\text{a priori}}} - 1 \right) \sum_j h_j(a_{\text{CO}_2})_j x_{\text{a priori},j} \quad (3.20)$$

avec $X_{\text{OCO-2,TCCON}}$, la colonne totale de CO₂ telle qu'elle aurait été inversée depuis une mesure OCO-2 si le X_{CO_2} co-localisé de TCCON était l'état vrai de l'atmosphère, $X_{\text{a priori}}$, la colonne totale de CO₂ a priori considérée très similaire entre les algorithmes d'inversion utilisés pour OCO-2 (ACOS) et TCCON (GGG2014). \hat{X}_{TCCON} est la colonne totale de CO₂ fournie par TCCON. h est la fonction de pondération par la pression. (a_{CO_2}) est le noyau d'estimation défini à l'équation 3.18, et $x_{\text{a priori}}$ est le profil vertical de concentration a priori de

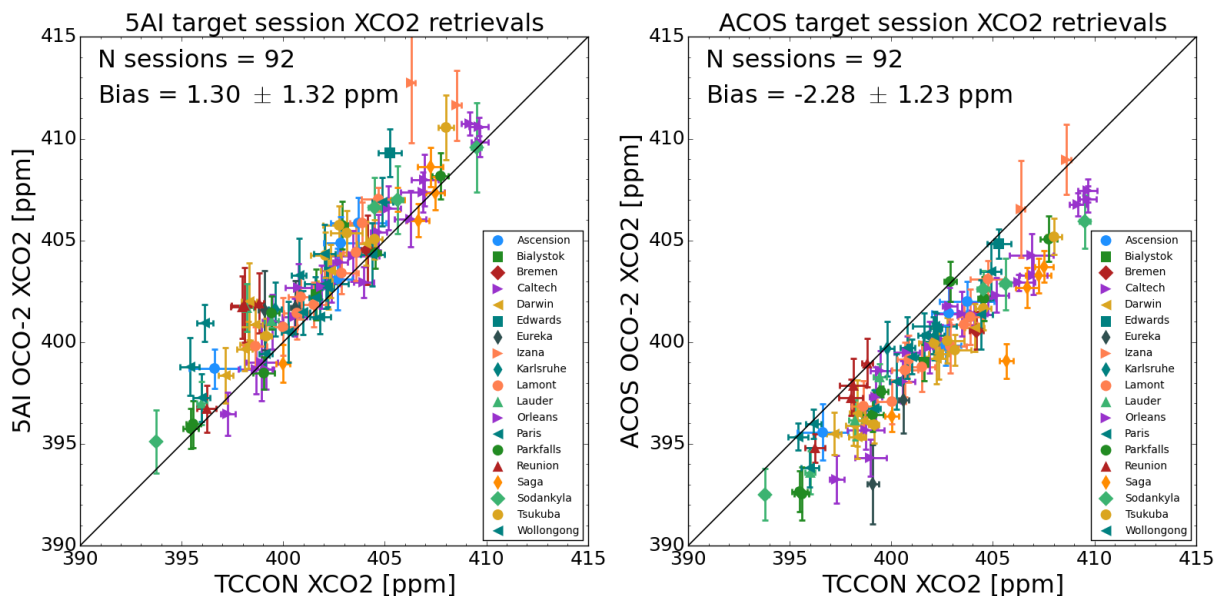


FIGURE 3.6 – Résultats d’estimation de X_{CO_2} obtenus par 5AI (gauche) et ACOS B8r brut (droite) et comparés aux X_{CO_2} officiel du réseau de validation TCCON. Les résultats d’inversion pour les observations ponctuelles sont moyennés par session target : les symboles désignent la moyenne par session tandis que les barres d’erreur montrent l’écart-type des résultats par session.

CO_2 . Cette correction entraîne un décalage positif du biais par rapport à TCCON d’environ 0.2 ppm pour l’échantillon d’observations OCO-2 considéré ici.

Après filtrage a posteriori des résultats 5AI, la figure 3.6 montrent les résultats d’inversion bruts de 5AI comparés au produit officiel de TCCON sur 92 sessions de validation target. Le biais systématique moyen (5AI - TCCON) de X_{CO_2} est de 1.30 ppm et son écart-type est de 1.32 ppm. Les résultats bruts de l’algorithme ACOS (B8r) pour l’échantillon d’observations OCO-2 correspondant sont également donnés par la figure 3.6. Son biais comparé à TCCON est de -2.28 ppm avec un écart-type de 1.23 ppm. Cette différence du biais par rapport à TCCON peut être très fortement influencée par les différences de modélisation directe et de configuration d’inversion entre 5AI et ACOS (liste des variables dans le vecteur d’état par exemple), comme nous le montrerons dans la section 3.5.

La différence entre les écart-types des biais de 5AI et d’ACOS par rapport à TCCON est consistante avec les résultats obtenus par d’autres algorithmes (sur différents ensembles d’observations OCO-2 cependant). Ainsi, le X_{CO_2} corrigé empiriquement du biais produit par FOCAL montre une différence de 0.67 ± 1.34 ppm avec TCCON (Reuter et al., 2017a), et RemoTeC une différence corrigée empiriquement du biais de 0.0 ± 1.36 ppm avec TCCON (Wu et al., 2018).

Les régressions temporelles et latitudinales des biais X_{CO_2} de 5AI et d’ACOS par rapport à TCCON sont montrées sur la figure 3.7. Les régressions sur les biais temporels ajustent une

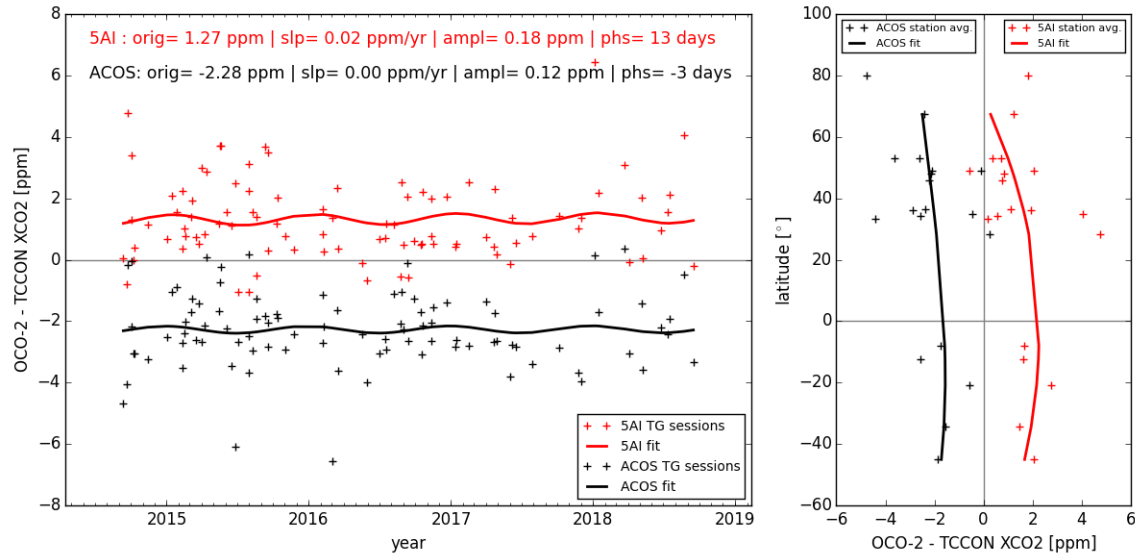


FIGURE 3.7 – Biais X_{CO_2} de 5AI (rouge) et d’ACOS (noir) par rapport à TCCON en fonction du temps (gauche) et de la latitude (droite). Les croix montrent les biais des sessions individuelles (gauche) ou les moyennes par station (droite). Les lignes montrent les régressions de ces biais pour toutes les sessions target.

droite à laquelle s’ajoute un cosinus. Elles affichent une pente quasi-nulle avec une amplitude d’oscillations annuelles d’environ 0.4 ppm pour 5AI et ACOS. Les régressions sur les biais latitudinaux sont réalisées avec toutes les stations TCCON à l’exception de celle d’Eureka. La différence entre 5AI et TCCON est plus forte dans l’hémisphère Sud que dans l’hémisphère Nord, mais cette tendance est relativement parallèle à celle d’ACOS, sauf pour les hautes latitudes où les résultats des deux algorithmes se rapprochent. La station Eureka, située à 80°N a été retirée des régressions car l’exploitation des mesures satellites à une si haute latitude est notoirement difficile (O’Dell et al., 2018).

Résultats pour les observations nadir Les résultats de 5AI sont maintenant comparés au X_{CO_2} brut d’ACOS sur l’échantillon de mesures OCO-2 effectuées au nadir décrit dans la partie 3.4.2, et illustré sur la figure 3.4. L’observation au nadir est le mode nominal de la mission OCO-2, il permet donc la comparaison des résultats de 5AI avec ACOS à une échelle spatiale plus grande que celle offerte par le seul mode target.

La figure 3.8 montre la différence moyenne, et son écart-type associé, entre le X_{CO_2} estimé par 5AI et celui produit par ACOS. La différence globale entre 5AI et ACOS est d’environ 3 ppm, avec une dépendance en latitude : elle est plus faible au-dessus des moyennes latitudes dans l’hémisphère Nord. On peut par ailleurs constater des différences plus grandes en Inde ou au-dessus du Sahara, des endroits qui connaissent parfois une forte contamination aux aérosols. Ces différences peuvent être due à l’absence de prise en compte de l’impact des particules diffusantes dans ces estimations de X_{CO_2} par 5AI. L’écart-type de la différence

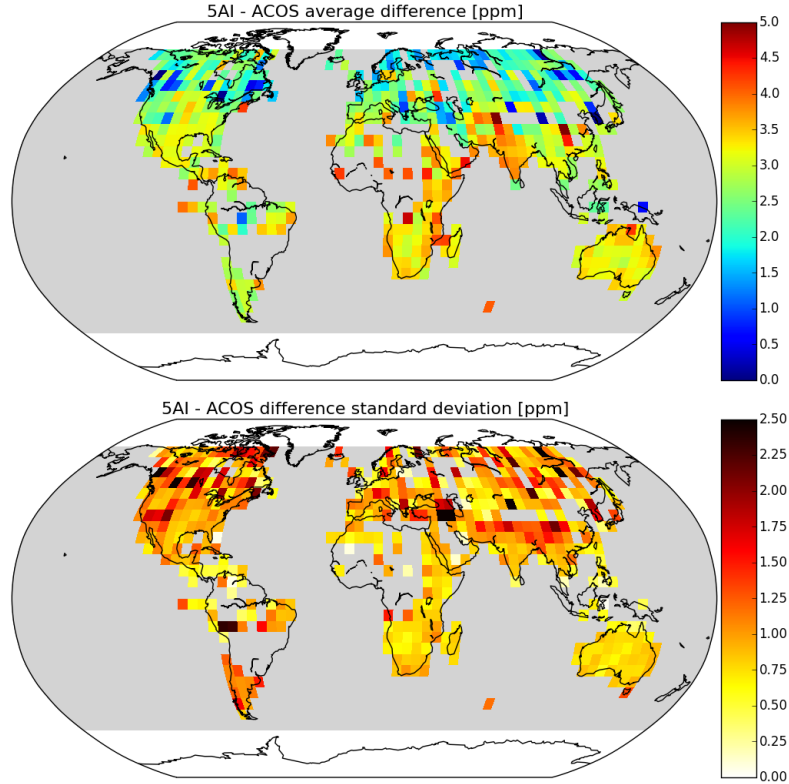


FIGURE 3.8 – Répartition spatiale de la différence entre 5AI et ACOS (moyenne, haut, et écart-type, bas), moyennée sur une grille de $5^\circ \times 5^\circ$, pour l'échantillon d'observations OCO-2 nadir.

entre 5AI et ACOS semble corrélé aux reliefs : il est plus élevé à proximité des massifs montagneux comme on peut le voir au niveau de l'Himalaya, des Rocheuses et ou bien des Alpes. Comme la topographie n'a pas été prise en compte pour la sélection de l'échantillon de mesures nadir OCO-2, sa plus grande variabilité dans les zones montagneuses peut provoquer une plus forte variabilité de la pression de surface estimée, elle-même fortement corrélée au X_{CO_2} retrouvé. Quant au trou de données et forts écart-types en Amérique du Sud, ils peuvent être expliqués par l'anomalie magnétique de l'Atlantique Sud (Crisp et al., 2017).

Comme le montre la figure 3.9, les variations latitudinales des X_{CO_2} produits par 5AI sont cohérentes avec celles d'ACOS, avec une différence presque constante de 3 ppm, sauf au-dessus des moyennes latitudes dans l'hémisphère Nord où la différence devient plus faible. Par ailleurs, ces différences en mode nadir sont cohérentes avec celles obtenues en mode target : la différence 5AI–ACOS est incluse dans l'intervalle d'incertitude $\pm 1\sigma$ des résultats nadir (avec σ , l'écart-type de la différence). La figure 3.10 montre quant à elle la variation temporelle des X_{CO_2} estimés par 5AI. L'augmentation à long terme de la concentration atmosphérique de CO_2 peut être observée dans les deux hémisphères et le cycle saisonnier, plus intense dans l'hémisphère Nord où la majorité de la respiration végétale et de la photosynthèse a lieu, est également visible. Les variations temporelles de la différence 5AI–ACOS sont également

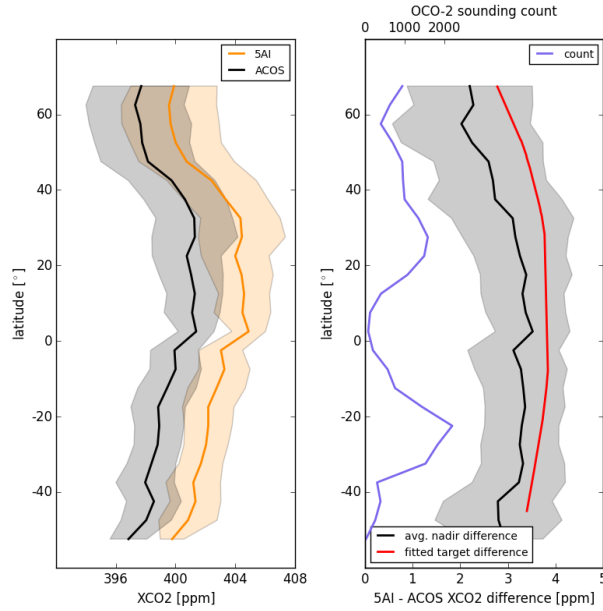


FIGURE 3.9 – Variations latitudinales des X_{CO_2} estimés par 5AI et ACOS (gauche) et leur différence (droite). La partie droite de la figure compare la différence obtenue entre 5AI et ACOS en mode nadir (noir) et target (rouge). Le nombre d’observations nadir disponibles est aussi donné en bleu.

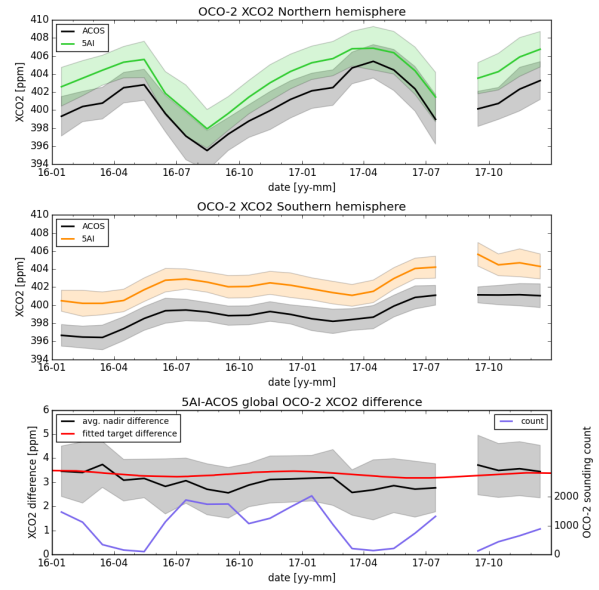


FIGURE 3.10 – Variations temporelles des X_{CO_2} estimés par 5AI et ACOS dans l’hémisphère Nord (haut), l’hémisphère Sud (milieu) et leur différence globale (bas). La partie basse de la figure compare la différence obtenue entre 5AI et ACOS en mode nadir (noir) et target (rouge). Le nombre d’observations nadir disponibles est aussi donné en bleu.

cohérentes entre les modes nadir et target.

3.5 Sensibilités des résultats d’inversion

Les résultats d’estimation obtenus par n’importe quel algorithme cherchant à estimer la colonne totale de CO_2 à partir de mesures du rayonnement atmosphérique dépendent fondamentalement de la modélisation directe sur laquelle repose l’inversion, ainsi que sur le choix des paramètres géophysiques ou instrumentaux inclus dans le vecteur d’état. L’objectif est ici de discuter de la sensibilité des résultats X_{CO_2} obtenus par 5AI à partir de mesures OCO-2. On examinera tout d’abord comment la connaissance de la spectroscopie influe sur les résultats d’estimation du X_{CO_2} et sur leur comparaison à des références de validation. Ensuite, on montrera l’impact de la prise en compte des particules diffusantes sur les résultats de 5AI et leur comparaison à ACOS. Finalement on verra qu’il est possible de compenser entièrement les différences systématiques entre 5AI et ACOS.

3.5.1 Sensibilités à la connaissance de la spectroscopie de l’O₂ et du CO₂

On propose de comparer des résultats d’inversion obtenus à partir de différents jeux de paramètres spectroscopiques, à la fois entre eux mais aussi par rapport à des références de validation.

Évolution des spectroscopies de l’O₂ et du CO₂ D’abord, on teste l’impact de la correction empirique du modèle d’absorption induite par collisions (CIA) de la bande A de l’O₂, décrite dans l’Annexe A et notée « LMD2019 », en comparant les résultats d’inversion obtenus avec le modèle de référence Tran and Hartmann (2008) et ceux obtenus avec LMD2019. Ensuite, on teste l’impact de l’évolution de la spectroscopie de CO₂ en comparant les résultats obtenus par deux modèles de mélange entre raies (*line-mixing*) pour les bandes CO₂ faibles et fortes (Lamouroux et al., 2010, 2015). Les paramètres de raies de CO₂ changent également entre ceux deux modèles : Lamouroux et al. (2010) repose sur les raies d’HITRAN 2008 (Rothman et al., 2009), tandis que Lamouroux et al. (2015) repose sur les raies d’HITRAN 2012 (Rothman et al., 2013). Finalement, l’impact de l’évolution simultanée des spectroscopies de l’O₂ et du CO₂ est également testé. Ainsi quatre jeux de spectroscopie différents sont considérés et le tableau 3.4 donne leurs noms, utilisés pour les figures qui vont suivre.

	(Tran and Hartmann, 2008)	LMD2019 (Annexe A)
(Lamouroux et al., 2010)	old spectro	just new O2
(Lamouroux et al., 2015)	just new CO2	new spectro

TABLE 3.4 – Noms utilisés dans les figures suivent pour les quatres jeux de paramètres spectroscopiques testés.

La situation de validation MAGIC 2019 Les profils verticaux de concentration de CO₂ obtenus par vol AirCore et AMULSE sont des références de validation particulièrement adaptées pour l’évaluation de l’impact de la spectroscopie sur les résultats de X_{CO_2} par 5AI. En effet, ces références apportent une bonne connaissance de la colonne de CO₂ et ne dépendent pas elles-mêmes d’une estimation de la concentration de CO₂ par télédétection reposant sur la spectroscopie, comme pour TCCON par exemple.

Les co-localisations entre profils verticaux réalisés par ballons et observations satellites sont rares car la mise en place de vols sous ballon demande beaucoup de personnel et de logistique. Le cadre offert par les campagnes annuelles multi-instruments MAGIC⁵ permet cependant de réunir toutes les conditions pour faire voler des ballons météorologiques dans

5. Pour rappel : *Monitoring of Atmospheric composition and Greenhouse gases through multi-Instrument Campaigns*

la trace des satellites. On se concentre ici sur quatre profils verticaux obtenus vers Aire-sur-l'Adour le 13 juin, lors de la campagne MAGIC 2019. Deux AirCores ont volé dans la matinée (AC_006 vers 8h et AC_008 vers 10h30) et l'AMULSE a acquis deux profils lors de son ascension (AM_ascent vers 11h30 et AM_descent vers 12h30). La figure 3.11 montre ces quatre profils verticaux.

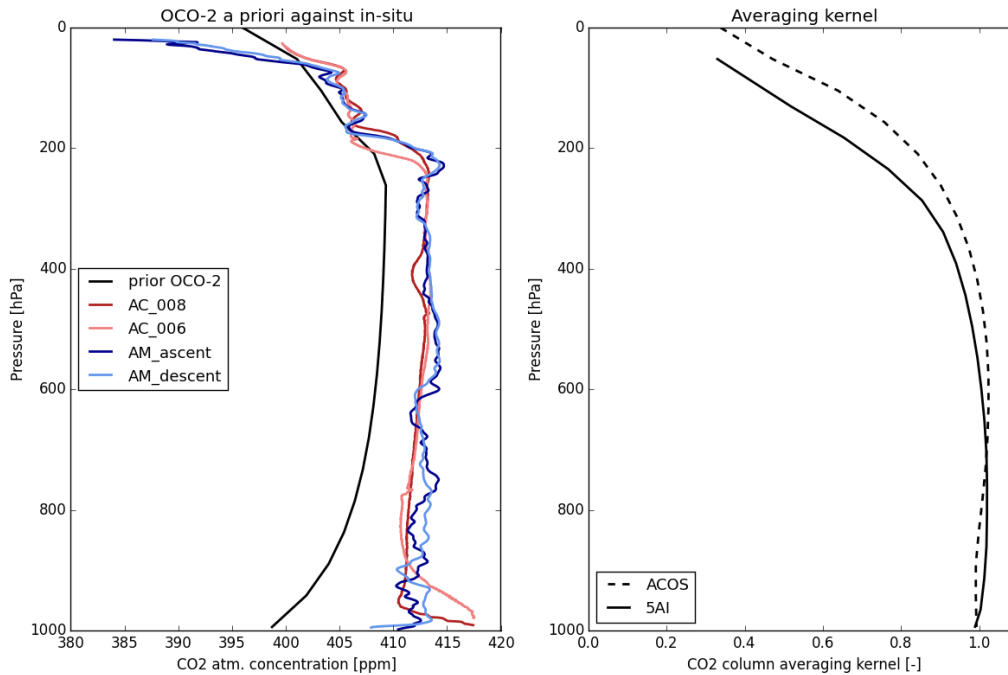


FIGURE 3.11 – Profils verticaux de la concentration atmosphérique de CO_2 acquis le 13 juin 2019 lors de la campagne MAGIC et profil a priori utilisé par ACOS et 5AI pour l'inversion des mesures OCO-2 (gauche) et sensibilités verticales moyennes des estimations de X_{CO_2} réalisées par ACOS et 5AI (droite).

Vers 13h, le satellite OCO-2 est passé en quelques secondes avec une trace au nadir située à ~ 60 km de la localisation moyenne des profils verticaux. Parmi toutes les observations réalisées par OCO-2, on ne conserve que celles localisées dans une boîte de $\pm 1^\circ$ autour d'Aire-sur-l'Adour, qui passent tous les tests de qualité d'ACOS et dont la pression de surface a priori est comprise dans un intervalle de ± 15 hPa par rapport à la pression de surface obtenue à l'atterrissage pour les quatre profils verticaux. Un total de 155 observations est rassemblé.

Ces observations sont traitées avec 5AI pour les quatre jeux de paramètres spectroscopiques du tableau 3.4, avec le même vecteur d'état que celui présenté dans le tableau 3.1. La matrice Jacobienne est en revanche mise à jour à chaque itération pour ne pas avoir à approximer la sensibilité verticale des colonnes estimées par celle calculée pour la grille de pression a priori. Mise à part cette différence, la configuration d'inversion reste la même. Les résultats de 5AI sont filtrés sur la qualité des résidus spectraux avec χ^2 réduit < 7.0 et finalement seules les observations qui passent ce filtre pour les quatre jeux de paramètres

spectroscopiques sont conservées.

La comparaison des résultats de 5AI avec les quatre profils verticaux requiert la prise en compte de la sensibilité verticale des estimations. Elle permet de calculer les colonnes totales $X_{\text{CO}_2}^{\text{v. prof}}$ qui aurait été estimées à partir des mesures OCO-2 si le profil vertical correspondait au profil vrai (mais inconnu) :

$$X_{\text{CO}_2}^{\text{v. prof}} = X_{\text{CO}_2}^a + \sum_j h_j a_{\text{CO}_2,j} (x_{\text{CO}_2,j}^{\text{v. prof}} - x_{\text{CO}_2,j}^a) \quad (3.21)$$

avec $X_{\text{CO}_2}^a$, la colonne totale de CO_2 a priori, h , la fonction de pondération par la pression, (a_{CO_2}) la sensibilité verticale de la colonne estimée (celles de 5AI et d'ACOS sont données sur la partie droite de la figure 3.11), ($x_{\text{CO}_2}^{\text{v. prof}}$), le profil vertical obtenu par l'AirCore ou l'AMULSE et finalement ($x_{\text{CO}_2}^a$), le profil a priori utilisé pour l'estimation.

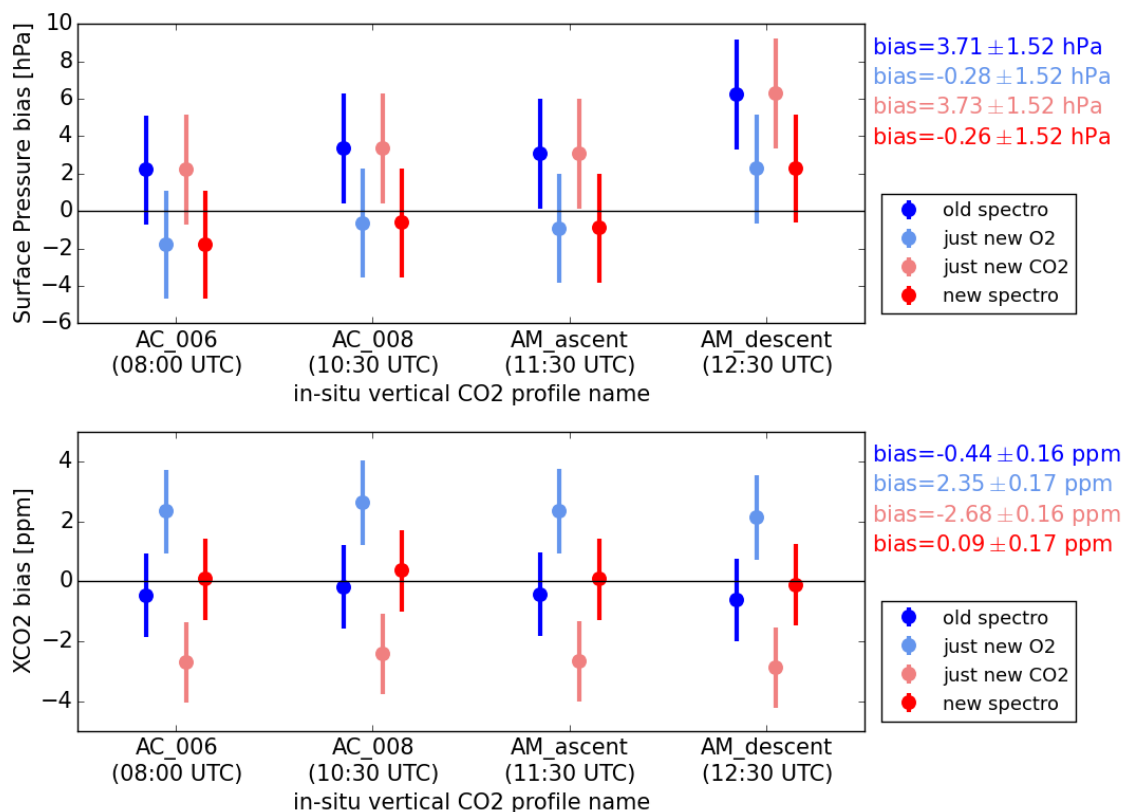


FIGURE 3.12 – Différences entre les résultats d'estimation de 5AI et les références de validation, pour les quatre profils verticaux de concentration atmosphérique de CO_2 (abscisses) et les quatre jeux de paramètres spectroscopiques (couleurs), pour la pression de surface (haut) et X_{CO_2} (bas).

La figure 3.12 donne les différences entre la pression de surface estimée par 5AI et celle mesurée à l'atterrissage du AirCore ou au décollage/atterrissage de l'AMULSE (haut) et les

différences entre le X_{CO_2} estimé par 5AI, et celui calculé à partir des profils verticaux $X_{\text{CO}_2}^{\text{v. prof}}$ (bas) pour les quatre profils verticaux et quatre jeux de paramètres spectroscopiques considérés. On y note :

- La correction empirique de la CIA dans la bande A de l' O_2 provoque un décalage de la pression de surface estimée par 5AI d'environ 4 hPa, et réduit le biais sur la pression de surface de 3.7 hPa à environ 0.3 hPa en valeur absolue. Ce décalage de la pression de surface estimée provoque un décalage d'environ 2.8 ppm de la colonne totale de CO_2 estimée par 5AI.
- L'évolution de la spectroscopie du CO_2 laisse la pression de surface quasiment inchangée et provoque une diminution d'environ -2.3 ppm de la colonne totale de CO_2 estimée.
- L'évolution simultanée des spectroscopies de l' O_2 et du CO_2 fait ainsi diminuer le biais de la pression de surface estimée de 3.7 hPa à environ 0.3 hPa en valeur absolue, mais ne modifie la colonne totale de CO_2 estimée à partir des observation d'OCO-2 que d'environ 0.5 ppm, avec un biais qui passe de -0.4 ppm à 0.1 ppm.

Ainsi, pour la situation de validation fournie grâce aux profils verticaux acquis le 13 juin lors de MAGIC 2019, la comparaison des résultats d'inversion des observations OCO-2 pour les quatre jeux de paramètres spectroscopiques montre – pour la configuration d'inversion proposée ici – que le jeu nommé « new spectro », combinant les évolutions des spectroscopies de l' O_2 et du CO_2 , permet d'obtenir des résultats qui se comparent mieux aux mesures de terrain. En effet, la compensation des impacts respectifs de l'évolution de la spectroscopie de l' O_2 et du CO_2 résulte seulement dans une petite amélioration du biais, mais dans une significative amélioration du biais sur la pression de surface. Il est cependant important de garder en tête que l'inversion d'observations satellites peut comporter des biais systématiques du fait des différents choix réalisés pour la configuration d'inversion. L'évaluation des impacts de l'évolution de paramètres spectroscopiques ne doit donc venir qu'après une analyse directe des résidus spectraux qui oriente au préalable vers les évolutions de paramètres spectroscopiques les plus pertinentes (voir Annexes A et B).

Validation sur un ensemble de stations TCCON Les résultats de validation obtenus précédemment ne sont valables que pour la seule situation géophysique (paramètres atmosphériques et conditions de surface) du 13 juin 2019 vers Aire-sur-l'Adour. Pour évaluer dans quelle mesure ces sensibilités des résultats d'estimation de 5AI sont valables pour d'autres situations, on reprend les 92 sessions target étudiées dans la section 3.4. Sans refaire tourner les 16414 situations target traitées précédemment, on constitue un échantillon rassemblant 10 observations OCO-2 maximum par session target, sélectionnées comme les plus proches de la moyenne des résultats 5AI pour chaque session. On obtient un ensemble de 869 observations OCO-2 que l'on traite avec les jeux « old spectro » et « new spectro » étudiés précédemment. Après application des filtres a posteriori et l'intersection des deux jeux de résultats de 5AI, 829 observations restent en commun pour 90 sessions target.

La figure 3.13 compare les colonnes totales de CO_2 estimées par 5AI en utilisant les jeux « old spectro » (gauche) et « new spectro » (milieu) aux résultats de référence de TCCON,

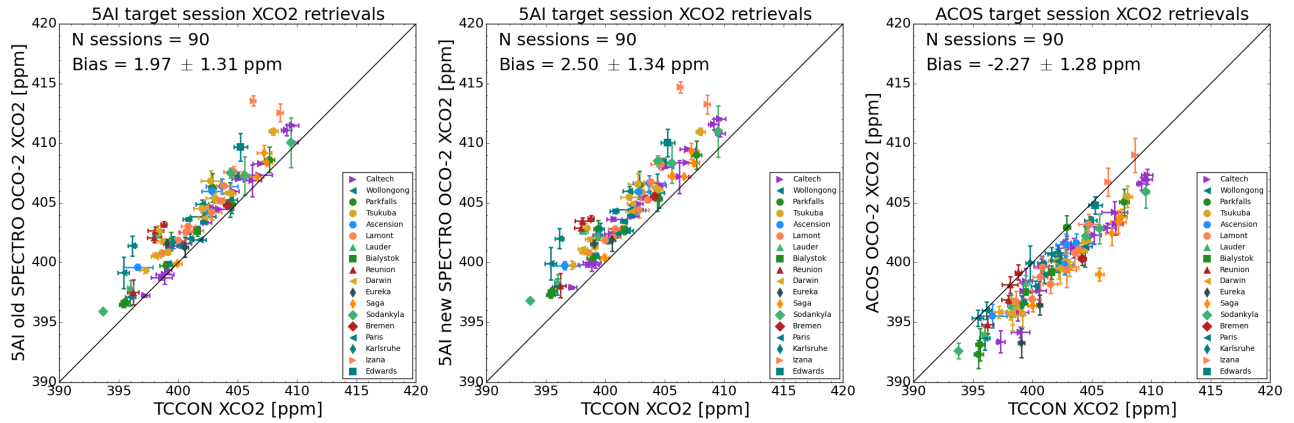


FIGURE 3.13 – Résultats d’estimation de X_{CO_2} obtenus par 5AI avec « old spectro » (gauche), 5AI avec « new spectro » (milieu) et ACOS B8r brut (droite) et comparés aux X_{CO_2} officiel du réseau de validation TCCON. Les résultats d’inversion pour les observations ponctuelles sont moyennés par session target : les symboles désignent la moyenne par session tandis que les barres d’erreur montrent l’écart-type des résultats par session.

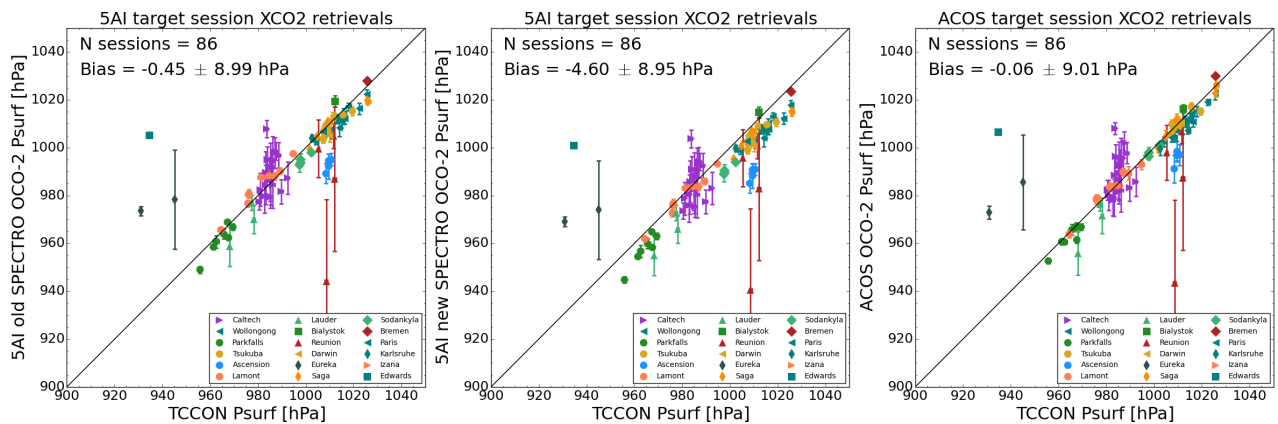


FIGURE 3.14 – Résultats d’estimation de la pression de surface obtenus par 5AI avec « old spectro » (gauche), 5AI avec « new spectro » (milieu) et ACOS B8r brut (droite) et comparés aux pressions de surface mesurées par les stations TCCON. Les résultats d’inversion pour les observations ponctuelles sont moyennés par session target : les symboles désignent la moyenne par session tandis que les barres d’erreur montrent l’écart-type des résultats par session.

et donne les estimations réalisées par ACOS également (droite). La figure 3.14 réalise la même comparaison pour la pression de surface sur 86 des 90 sessions target : un filtre à 2σ par rapport aux résultats d’ACOS a été appliqué pour retirer les points aberrants. En effet, des problèmes de géolocalisation des observations ainsi qu’une erreur de code touchant l’échantillonnage des modèles météorologiques dans la B8 d’ACOS provoquait des erreurs de le calcul de la pression de surface a priori (Kiel et al., 2019).

On peut tout d’abord noter que la sensibilité des résultats obtenus par 5AI correspond sur cet ensemble d’observations OCO-2 à celle déjà obtenue sur la situation de validation MAGIC 2019 : la pression de surface estimée par 5AI recule d’environ 4 hPa avec la correction empirique de la CIA dans la bande A de l’O₂, tandis que les X_{CO_2} estimés sont légèrement supérieurs d’environ 0.5 ppm par rapport à « old spectro ». En revanche, si l’on compare les résultats de 5AI avec les colonnes totales de CO₂ et les pressions de surface fournies par TCCON, les résultats obtenus par 5AI avec « new spectro » sont décevants. Le biais entre 5AI et TCCON augmente de 2 à 2.5 ppm, et la pression de surface estimée s’éloigne de celle de TCCON, passant de -0.45 hPa à -4.6 hPa.

Il n’est pas évident à ce stade de conclure sur l’origine de la mauvaise correspondance entre les résultats 5AI obtenus avec « new spectro » et ceux fournis par TCCON, particulièrement pour la pression de surface. Le prochain test sur l’impact de prise en compte des particules diffusantes sur les résultats de 5AI peut cependant apporter un nouvel éclairage sur cette question.

3.5.2 Sensibilités à la prise en compte de l’impact des particules diffusantes

La prise en compte de l’impact des particules diffusantes compte parmi les principales différences entre la configuration d’inversion utilisée par 5AI et celle utilisée par ACOS. En effet, ACOS considère dans sa modélisation directe cinq profils verticaux de forme gaussienne de différents types de particules diffusantes, pour chacun desquels trois paramètres sont inversés dans son vecteur d’état (O’Dell et al., 2018). Dans le même temps, pour réduire les temps de calcul, 5AI fait l’hypothèse que l’on peut négliger l’impact des particules diffusantes (résultats d’inversion notés 5AI-NS, pour *No Scattering* - sans diffusion - présentés dans la partie 3.4.3). Afin d’évaluer la sensibilité des résultats de 5AI à cette hypothèse, on propose ici de réaliser des estimations de X_{CO_2} avec 5AI à partir de mesures OCO-2 précédemment traités dans le cas 5AI-NS, tout en prenant cette fois-ci en compte des paramètres liés aux aérosols dans le vecteur d’état. La spectroscopie utilisée pour ce test de sensibilité est identique à celle utilisée pour les inversions menées dans la section 3.4 : les évolutions testées précédemment ne sont plus prises en compte.

Adaptations de la configuration d’inversion Plusieurs adaptations de la configuration d’inversion de 5AI sont requises pour ce test de sensibilité (dont les résultats seront notés 5AI-AER, pour AÉRosols). D’abord, on considère 2 couches d’aérosols d’épaisseur et d’altitude fixées. La première est représentative d’un mode grossier d’aérosols (OPAC micm00), située entre 800 hPa et 900 hPa et la seconde est représentative de suies de combustion fines (soot00), située entre 900 hPa et 1013 hPa. Seules leurs deux épaisseurs optiques par couche (définies à 755 nm) sont ajoutées au vecteur d’état de 5AI pour être inversées, avec un a priori de 0.025 et une incertitude associée de 0.15, identiques pour les deux couches. Sinon, le vecteur d’état et son a priori restent identiques à ce qui est décrit dans le tableau 3.1. Concernant la modélisation directe, elle repose toujours sur le couplage entre 4A/OP et

VLIDORT pour la bande A de l'O₂, et nous utilisons maintenant le couplage entre 4A/OP et LIDORT pour les bandes CO₂ faible et fort (en négligeant donc toujours les effets de polarisation pour ces bandes). Finalement, la prise en compte de particules diffusantes rend maintenant le transfert radiatif et donc le problème inverse bien moins linéaires, on recalcule donc la matrice Jacobienne à chaque itération.

Avec ces diverses adaptations, l'inversion d'une mesure OCO-2 par 5AI est environ 12 fois plus lente que lorsqu'on néglige l'impact des particules diffusantes. Vue cette augmentation considérable du temps de calcul, le test de sensibilité que l'on cherche à faire ici ne peut être réalisé que pour un petit sous-échantillon de mesures OCO-2. On choisit de s'intéresser ici à 15 sessions target (parmi les 92 présentées dans la partie 3.4.3) qui proposent des épaisseurs optiques d'aérosols obtenues par l'*AERosol RObotic NETwork* (AERONET, version 3; AOD level 2.0) \pm 2 heures par rapport au passage d'OCO-2 (Holben et al., 1998; Eck et al., 1999; Giles et al., 2019). Cette sélection permet ainsi de discuter des épaisseurs optiques estimées, également. Un total de 445 mesures OCO-2 ont été traitées par 5AI, et 228 restent finalement après filtrage sur la qualité des résidus spectraux (χ^2 réduit $<$ 7).

Impacts sur la pression de surface estimée La figure 3.15 montre comment la prise en compte de l'impact des particules diffusantes modifie l'estimation de la pression de surface. La dépendance en masse d'air de la pression de surface estimée, déjà présentée dans la figure 3.5, apparaît réduite, voire absente dans les résultats 5AI-AER.

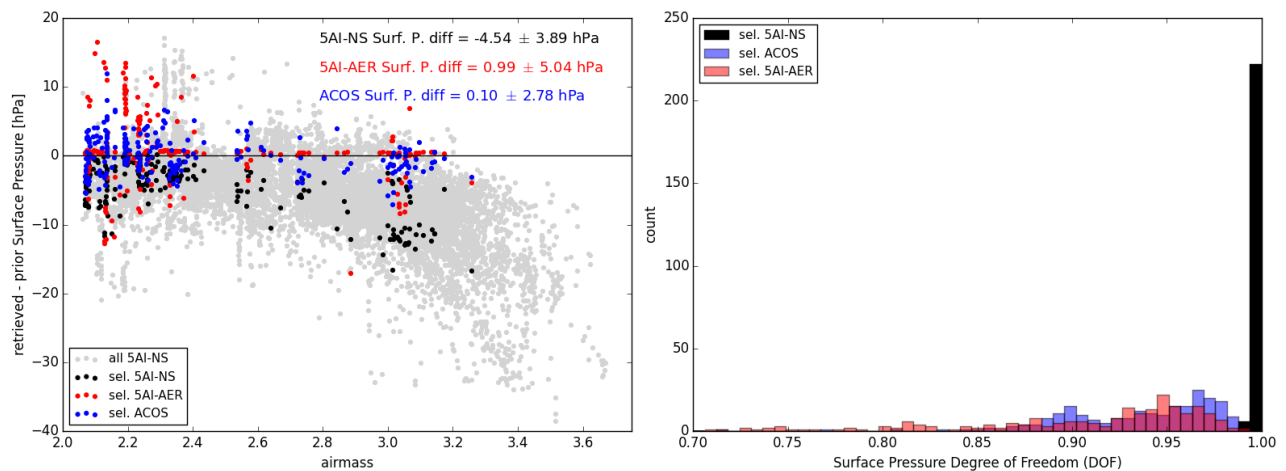


FIGURE 3.15 – Dépendance en masse d'air de la pression de surface estimée (gauche) pour tous les résultats 5AI-NS issus des mesures OCO-2 target (gris clair), les résultats 5AI-NS du sous-échantillon sélectionné pour ce test (noir), les résultats 5AI-AER correspondants (rouge) et pour ACOS (en bleu). La distribution des degrés de liberté pour la pression de surface est montrée (à droite) pour 5AI-NS (noir), 5AI-AER (rouge) et ACOS (bleu).

En effet, négliger l'impact des particules diffusantes revient à négliger les photons diffusés en arrière, ce qui conduit à une simulation a priori du spectre de luminance moins intense

que celui mesuré par le satellite. Cette différence est interprétée par l'algorithme d'estimation comme une sur-estimation a priori de la quantité d' O_2 sur le chemin optique, équivalent à une sur-estimation de la pression de surface qui est alors réduite par l'algorithme. On comprend alors le décalage moyen de -5 hPa entre la pression de surface estimée et la pression de surface a priori dans les résultats 5AI-NS. Dans le cas des résultats 5AI-AER, ce décalage tombe à 1 hPa. Par ailleurs, les mesures de spectres de luminance au sommet de l'atmosphère sont d'autant plus sensibles à la présence de particules diffusantes que le chemin optique est incliné (inclinaison traduite par la masse d'air). Ainsi, négliger leur impact conduit à la dépendance en masse d'air observée sur la figure 3.15.

L'ajout des paramètres liés aux aérosols dans le vecteur d'état interfère également avec l'estimation de la pression de surface car l'information sur les aérosols et celle sur la pression de surface sont entremêlées dans la bande A de l' O_2 . On peut en effet noter la corrélation de leurs sensibilités respectives sur la figure 3.1. Ainsi, comme on peut le voir sur la partie droite de la figure 3.15, la prise en compte des paramètres liés aux particules diffusantes dans le cas 5AI-AER conduit à des degrés de liberté pour la pression de surface plus faibles que dans le cas 5AI-NS. La distribution des degrés de liberté pour la pression de surface est d'ailleurs beaucoup plus proche de celle d'ACOS dans le cas 5AI-AER que dans le cas 5AI-NS. Quand des paramètres liés aux particules diffusantes sont inclus dans le vecteur d'état, les plus faibles degrés de liberté pour la pression de surface illustrent alors une plus forte influence de l'a priori sur la pression de surface estimée. Celle-ci est alors plus proche de sa valeur a priori ce qui peut aider à réduire voire à supprimer sa dépendance en masse d'air.

Ainsi, pour des raisons liées à la fois au transfert radiatif direct mais aussi à la méthode d'estimation elle-même, la prise en compte de paramètres liés aux particules diffusantes dans le vecteur d'état modifie la différence moyenne entre la pression de surface estimée et son a priori. Elle aide aussi à réduire, voire à supprimer, la dépendance en masse d'air de la pression de surface estimée dans les résultats 5AI-NS.

Colonnes totales de CO_2 et épaisseurs optiques estimées La figure 3.16 montre le X_{CO_2} estimé à partir des observations OCO-2 target du sous-échantillon considéré pour ce test par 5AI-NS (gauche), 5AI-AER (milieu) et ACOS (droite). L'impact de la prise en compte des particules diffusantes dans les inversions 5AI-AER se convertit directement depuis la pression de surface jusqu'au X_{CO_2} : la différence d'environ 3 ppm entre les résultats 5AI-NS et ceux d'ACOS est réduite à une différence proche de 1 ppm dans le cas 5AI-AER. Cela montre que la prise en compte des particules diffusantes permet d'expliquer une grande partie des différences entre 5AI-NS et ACOS. La figure 3.17 montre finalement l'épaisseur optique totale retrouvée par 5AI-AER (gauche) et ACOS (droite) comparée à l'épaisseur optique d'AERONET interpolée à 755 nm. 5AI-AER a une différence moyenne à AERONET plus grande qu'ACOS, mais les deux algorithmes ont une dispersion significative de leur résultats comparés à AERONET.

Des améliorations sont en cours pour améliorer le couplage entre 4A/OP et (V)LIDORT afin de pouvoir traiter à l'avenir de plus grandes quantités de données OCO-2. Une fois

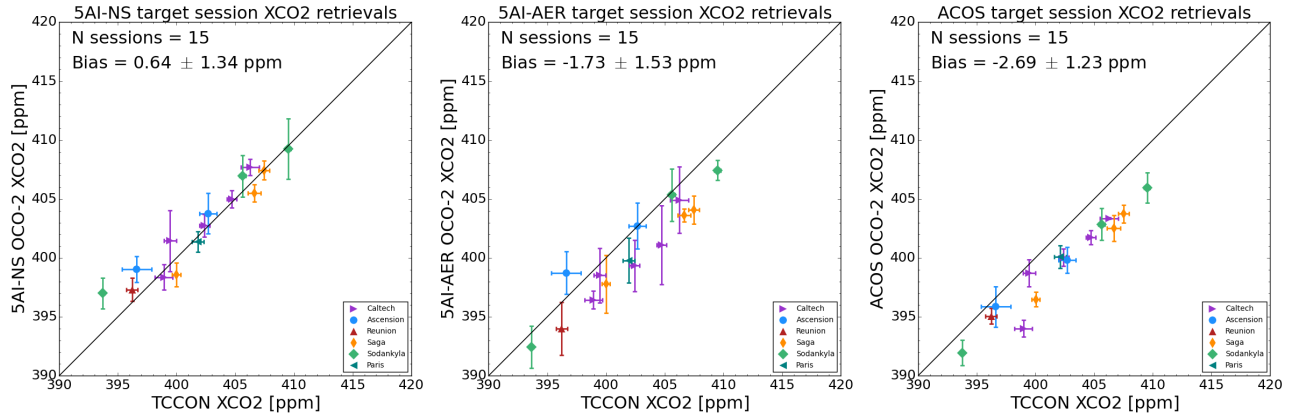


FIGURE 3.16 – Résultats d’estimation de X_{CO_2} obtenus avec 5AI-NS (gauche), 5AI-AER (milieu) et par ACOS (droite) à partir d’observations target OCO-2 et comparés au X_{CO_2} produit par TCCON. Les résultats d’inversion pour les observations ponctuelles sont moyennés par session target : les symboles désignent la moyenne par session tandis que les barres d’erreur montrent l’écart-type des résultats par session.

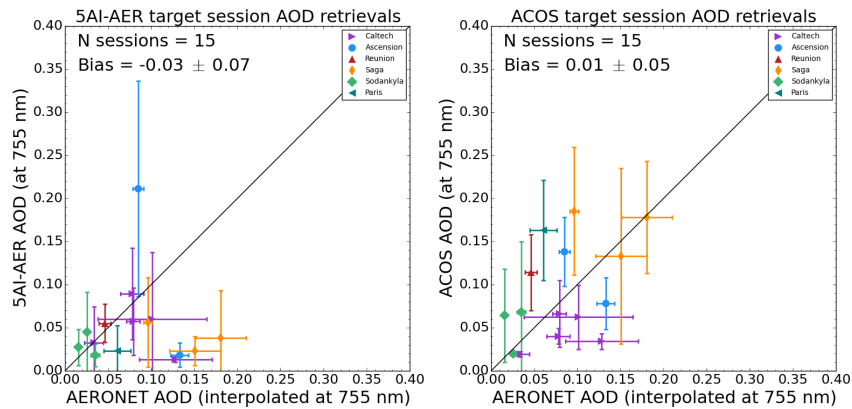


FIGURE 3.17 – Épaisseurs optiques totales des aérosols estimées par 5AI-AER (gauche) et ACOS (droite) à partir de mesures OCO-2 target, et comparées aux épaisseurs optiques fournies par AERONET interpolées à 755 nm. Les résultats d’inversion pour les observations ponctuelles sont moyennés par session target : les symboles désignent la moyenne par session tandis que les barres d’erreur montrent l’écart-type des résultats par session.

complétés, ces améliorations permettront de raffiner la configuration d’inversion de 5AI avec particules diffusantes, en considérant plus de types d’aérosols, en ajoutant l’impact des cirrus, en autorisant une altitude des couches variables, etc. Ces améliorations pourraient permettre d’améliorer la correspondance entre les épaisseurs optiques estimées avec 5AI-AER et les valeurs AERONET de référence.

Retour sur les sensibilités à la connaissance de la spectroscopie Pour rappel (voir figures 3.13 et 3.14), les résultats obtenus par 5AI en utilisant « new spectro » se dégradent en augmentant le biais par rapport à TCCON jusqu'à +2.5 ppm pour X_{CO_2} , et -4.6 hPa pour la pression de surface. Ces résultats obtenus dans une configuration 5AI-NS sont à mettre en regard de la sensibilité à la prise en compte de l'impact des particules diffusantes qui a été constatée ici. En effet, la pression de surface estimée augmente d'environ +5.5 hPa, produisant un décalage de la colonne totale estimée d'environ -2.4 ppm pour la configuration 5AI-AER proposée ici. Sous l'hypothèse que ces sensibilités seraient semblables pour des inversions 5AI-AER utilisant les deux jeux de paramètres spectroscopiques « old spectro » et « new spectro », la prise en compte des aérosols permettrait de retrouver des résultats plus avantageux pour « new spectro ». Ces inversions n'ont pas encore été menées.

Ces résultats suggèrent encore une fois que la prise en compte des particules diffusantes est – en moyenne – indispensable pour l'estimation de la colonne totale de CO_2 dans le proche infrarouge, et que ceux obtenus sur les données MAGIC du 13 juin 2019 pourraient être expliqués par l'absence d'aérosols à ce moment précis. D'après les réanalyses du *Copernicus Atmospheric Monitoring System* (CAM5) pour les aérosols (Flemming et al., 2017), l'épaisseur optique des aérosols était pourtant d'environ 0.1 aux alentours d'Aire-sur-l'Adour ce jour là. On pourrait arguer ici des critiques usuelles vis-à-vis des réanalyses ou des modèles, aller chercher d'autres produits pour discuter de cette valeur, etc. Au-delà de cette discussion, cette situation de validation montre l'intérêt qu'il pourrait y avoir à inclure des mesures d'épaisseur optique des aérosols (à la façon d'AERONET) lors des campagnes MAGIC afin de disposer non seulement de réanalyses, mais aussi de données réelles.

3.5.3 Compensation des différences systématiques entre 5AI et ACOS

Sans prise en compte des aérosols, on constate une différence d'environ 3 ppm entre les résultats de 5AI présentés dans la partie 3.4.3 et ceux d'ACOS. Le test de sensibilité réalisé précédemment (voir 3.5.2) a montré que négliger l'impact des particules diffusantes, pour des raisons de temps de calcul, peut expliquer une majeure partie de la différence entre 5AI et ACOS. Cependant, la configuration d'inversion de 5AI-AER ne reproduit pas exactement celle d'ACOS car des différences de vecteur d'état, de modélisation directe et même d'origine des paramètres spectroscopiques persistent. Toutes ces différences peuvent être prises en compte au travers d'une analyse des résidus spectraux moyens « calculés – observés » (notés calc-obs). Cette analyse consiste à simuler avec 4A/OP, le code de transfert radiatif sur lequel 5AI est basé, une observation OCO-2 à partir des résultats d'inversion d'ACOS (grille de pression, profils de température, d' H_2O , de CO_2 et albédos par bandes avec leurs pentes spectrales a posteriori) et à soustraire le spectre réellement observé à celui simulé. Les éventuelles différences de fond continu entre le spectre simulé et l'observation OCO-2 sont compensées en multipliant l'observation par un facteur déterminé empiriquement, afin de faire correspondre le niveau du fond continu entre la simulation et l'observation. Si on réalise cette analyse pour un ensemble de mesures spatialement et temporellement non-biaisé avec une géométrie d'observation homogène (pour compenser d'éventuelles dépendances), la différence spectrale moyenne entre l'observation et la simulation (aussi appelée « résidus

calc-obs ») permet de compenser, au niveau des mesures, les différences systématiques entre deux algorithmes d'inversion aux configurations différentes. Ainsi, on choisit ici une moitié aléatoire de toutes les observations OCO-2 nadir sélectionnées en 2016 (voir figure 3.8 dans la partie 3.4.2) avec une masse d'air inférieure à 3.0 (6790 au total). La figure 3.18 montre, pour cet ensemble d'observations, les résidus calc-obs obtenus dans les trois bandes spectrales d'OCO-2.

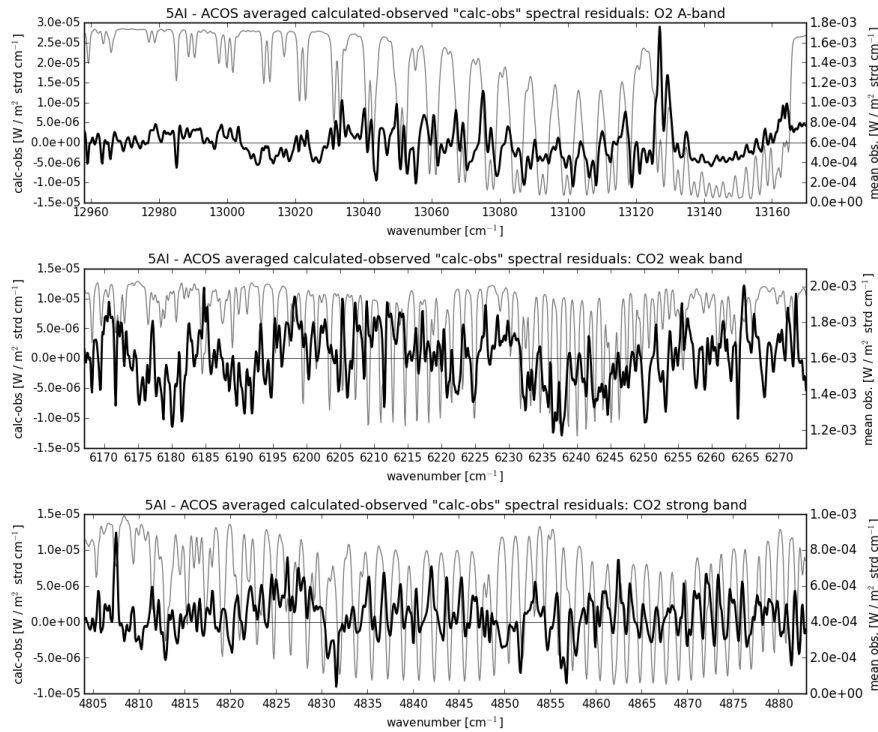


FIGURE 3.18 – Résidus spectraux calc-obs moyens entre 5AI et ACOS (noir gras, échelle de gauche) pour la bande A de l'O₂ (haut), la bande CO₂ faible (milieu) et CO₂ fort (bas). Un spectre de luminance typique est montré en gris clair et fin (échelle de droite).

Afin de comparer les résultats d'inversion de 5AI avec ACOS tout en compensant les différences systématiques avec ACOS, les résidus spectraux calc-obs illustrés sur la figure 3.18 sont ajoutés à chaque observation OCO-2 comprise dans l'autre moitié complémentaire des observations nadir sélectionnées en 2016. On applique alors 5AI à ces nouvelles observations. La figure 3.19 compare les distributions des résultats d'inversion obtenus avec et sans ajout des résidus calc-obs aux observations OCO-2. Les différences systématiques entre les résultats 5AI et ACOS pour $X_{\text{H}_2\text{O}}$, X_{CO_2} , la pression de surface et le décalage global du profil de température sont complètement compensées par l'ajout des résidus calc-obs (les différences moyennes restantes sont négligeables devant l'écart-type). Cela montre que 5AI peut en moyenne reproduire les résultats d'ACOS quand leurs différences respectives sont compensées au travers des calc-obs. Cependant, l'ajout des résidus calc-obs provoque une augmentation de l'écart-type des différences 5AI–ACOS. En effet, seuls les résultats a pos-

teriori d'ACOS compatibles avec le vecteur d'état de 5AI ont été utilisés pour générer les résidus calc-obs, et d'autres paramètres du vecteur d'état d'ACOS comme les particules diffusantes par exemple n'ont pas été pris en compte. Leur impact a pu être compensé en partie par l'ajustement empirique du fond des spectres qui, lorsqu'il est désactivé, ne conduit pas à cette augmentation de l'écart-type. Cependant, sans cet ajustement du fond des spectres, un biais systématique de 1.9 ppm persiste entre les résultats de 5AI et d'ACOS pour X_{CO_2} . Cela illustre la difficulté de l'intercomparaison des résultats d'inversion entre différents algorithmes, et cela montre l'impact très important de la configuration d'inversion et de la modélisation directe sur les résultats d'estimation de la colonne totale de CO_2 .

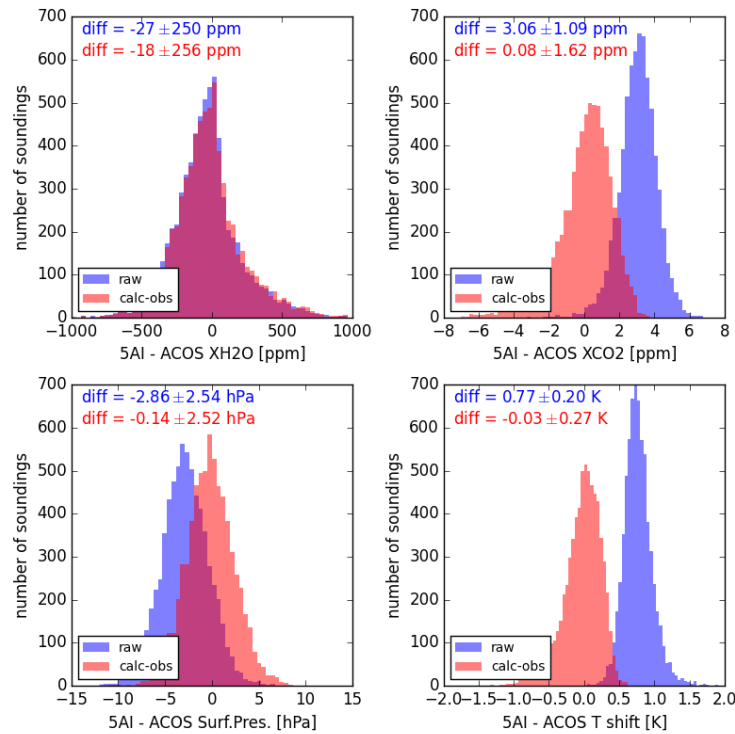


FIGURE 3.19 – Distributions des différences entre 5AI et ACOS pour X_{H_2O} (haut gauche), X_{CO_2} (haut droit), la pression de surface (bas gauche) et le décalage global du profil de température (bas droit) obtenues sans les résidus calc-obs (bleu) et avec les résidus calc-obs (rouge).

3.6 Conclusions

Ce chapitre a présenté l'estimation optimale, méthode inverse sur laquelle est basé le travail réalisé dans cette thèse. Elle a été implémentée dans l'Adaptable 4A Inversion (5AI) qui repose sur le code de transfert radiatif 4A/OP pour la modélisation directe. L'estimation optimale exploite l'information géophysique présente dans une observation bruitée du rayon-

nement infrarouge afin d'améliorer la connaissance des paramètres géophysiques auxquels elle est sensible. Dans le cas du proche infrarouge, région spectrale étudiée dans cette thèse, la bande A de l'O₂ (vers 0.76 μm) permet de contraindre la longueur du chemin optique en étant sensible à la pression de surface et aux particules diffusantes, ainsi qu'à la température. Les bandes à 1.6 et 2.06 μm sont sensibles au CO₂, aux particules diffusantes, à la vapeur d'eau et à la température. L'utilisation conjointe de ces trois bandes spectrales permet d'estimer la colonne totale de CO₂ (notée X_{CO_2}) tout en prenant en compte l'influence interférente de ces autres paramètres géophysiques.

Les observations de la mission américaine OCO-2 réalisent des mesures dans ces trois bandes du proche infrarouge. Nous avons testé l'algorithme 5AI sur un échantillon d'environ 44k observations d'OCO-2 pour l'estimation de X_{CO_2} : en négligeant l'impact des particules diffusantes, pour réduire les temps de calcul, on obtient une différence moyenne de 1.30 ± 1.32 ppm par rapport au produit de validation TCCON, un écart-type comparable à ceux obtenus par d'autres algorithmes. Les résultats de 5AI capturent également de manière satisfaisante l'augmentation à long terme, le cycle saisonnier et les variations latitudinales du X_{CO_2} . Ses résultats sont cohérents avec ceux d'ACOS, l'algorithme de référence pour la mission OCO-2.

Les différences systématiques entre 5AI et des références de validation, comme les profils verticaux mesurés lors de MAGIC 2019 ou les produits TCCON, peuvent en partie s'expliquer par la connaissance inexacte de la spectroscopie. En effet, nous avons par exemple montré qu'une correction empirique du modèle de CIA dans la bande A de l'O₂ accompagnée d'une mise à jour de la spectroscopie de CO₂ permettent de décaler les colonnes totales de CO₂ estimées par 5AI d'environ 0.5 ppm. Une telle évolution de la spectroscopie apparaît améliorer la validation des estimations réalisées avec 5AI par rapport à des profils verticaux de concentration de CO₂ acquis lors de la campagne MAGIC 2019. Par ailleurs, la différence systématique de 3 ppm entre 5AI et ACOS peut s'expliquer en partie par la non-prise en compte de l'impact des particules diffusantes dans les estimations réalisées par 5AI. Cette différence se réduit en effet à 1 ppm lorsqu'on inclut des paramètres aérosols dans le vecteur d'état de 5AI, et la dépendance en masse d'air des résultats d'inversion de 5AI est également réduite. Une compensation des différences systématiques entre 5AI et ACOS est finalement possible grâce à une correction par les résidus spectraux calc-obs. Ainsi, on voit que les résultats produits par la méthode de l'estimation optimale sont extrêmement sensibles à la configuration du vecteur d'état ainsi qu'à la modélisation directe et aux paramètres spectroscopiques sur lesquelles elle repose.

Pour des conditions favorables (meilleurs critères de qualité, le moins de contamination aérosols possible), l'algorithme 5AI apparaît comme une implémentation fiable de la méthode de l'estimation optimale, dont les résultats sont comparables à différentes références de validation. La structure de 5AI a été développée afin de le rendre facilement adaptable à différents concepts instrumentaux, aussi bien pour étudier leurs performances pour l'estimation de X_{CO_2} que pour traiter leurs mesures réelles. Le prochain chapitre applique ainsi 5AI à l'étude des performances du concept d'observation proposé dans le cadre du projet Space CARBon Observatory (SCARBO).

Chapitre 4

Performances du concept proposé dans le cadre du projet Space CARBon Observatory (SCARBO)

4.1 Introduction

Une partie du travail réalisé dans cette thèse s’inscrit dans le cadre du projet Space CARBon Observatory¹ (SCARBO, Brooker et al., 2018) qui est piloté par Airbus Defence and Space. Il cherche à étudier la faisabilité d’un système innovant – et à faible coût – pour l’observation du rayonnement proche infrarouge, afin d’en estimer la concentration atmosphérique de CO₂ (et de CH₄). Ce système reposerait sur une constellation de petits satellites embarquant deux instruments. Le premier se nomme NanoCarb, et mesure des *interférogrammes tronqués* sensibles, entre autres, au CO₂. Le second est un polarimètre multi-angles nommé SPEXone, et dédié aux aérosols.

Le projet SCARBO (2017-2021) a été financé par l’Union Européenne dans le cadre de son programme de recherche et d’innovation Horizon 2020. Il poursuit deux objectifs parallèles : (1) le développement d’un prototype de l’instrument NanoCarb qui sera déployé lors d’une campagne aéroportée aux côtés de la version aéroportée de SPEX (Smit et al., 2019) ; (2) une étude de performance du concept combinant NanoCarb et SPEXone pour l’estimation de la colonne totale de CO₂ (produit de niveau 2, dit L2) et pour l’estimation des flux de CO₂ (produits de niveau 4, dit L4).

Ce chapitre présente l’étude de performance pour l’estimation de X_{CO_2} du concept proposé dans le cadre du projet SCARBO (sans être commentés, les résultats pour X_{CH_4} sont donnés dans l’Annexe D). Elle est réalisée grâce au code 5AI, présenté et testé au chapitre précédent sur les mesures de la mission américaine OCO-2. Il a été adapté afin de pouvoir appliquer l’algorithme d’estimation optimale *directement* aux interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb.

1. <https://scarbo-h2020.eu/>

Dans un premier temps, nous décrirons plus précisément le concept, les instruments et la constellation proposés par SCARBO. Ensuite, nous présenterons l’approche suivie pour cette étude de performance, les méthodes et paramètres de simulation utilisés. Le contenu en information des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb sera examiné et certaines limites actuelles du concept mises en évidence. On détaillera ensuite les résultats de performance obtenus pour deux scénarios de conception, sans et avec l’instrument SPEXone, étudiés pour établir l’intérêt d’accompagner NanoCarb de mesures dédiées à l’observation des aérosols. Ces résultats seront paramétrisés afin de produire des fonctions de performance L2 généralisées. Finalement, on s’éloignera de l’étude synthétique des performances afin d’illustrer, sur les données réelles du prototype de l’instrument NanoCarb acquises lors de la campagne aéroportée, certaines des limites de la version actuelle du concept SCARBO.

L’étude de performance (toutes les sections de ce chapitre sauf la dernière) a été présentée en format plus condensé dans le cadre d’une publication soumise au journal *Atmospheric Measurement Techniques* (en revue, Dogniaux et al., 2021b).

4.2 Le Space Carbon Observatory

Le projet SCARBO propose un concept de constellation de petits satellites embarquant deux instruments : NanoCarb et SPEXone. On présentera d’abord le concept d’observation, son ambition et ses objectifs. Ensuite, les instruments NanoCarb et SPEXone seront décrits, puis finalement, le dimensionnement de la constellation sera abordé.

4.2.1 Présentation détaillée du projet et de ses objectifs

Le concept proposé par SCARBO ambitionne de répondre au besoin émergent d’une augmentation de la fréquence de revisite des principales sources d’émission de gaz à effet de serre grâce à la mise en place d’une constellation de petits satellites.

Ils embarqueraient un instrument miniaturisé nommé NanoCarb ($\sim 7\text{-}9$ kg). C’est un interféromètre imageur statique qui mesure des interférogrammes tronqués, échantillonnés à des différences de marche associées aux signatures spectrales des gaz à effet de serre dans le proche infrarouge (Ferrec et al., 2019; Gousset et al., 2019). Cette approche originale rend possible la miniaturisation de l’instrument et se distingue radicalement parmi l’ensemble des concepts de suivi des gaz à effet de serre actuellement en préparation ou à l’étude, dont l’immense majorité repose sur des mesures de spectres. Dans ses paramètres de conception actuels, l’imageur NanoCarb aurait une fauchée d’environ 200 km, avec une résolution spatiale de 2.3×2.3 km², compatible avec la détection de panaches d’émission provenant de mégapoles ou de centrales énergétiques émettant plus de 10 MtCO₂/an. Par ailleurs, NanoCarb serait associé au polarimètre multi-angles SPEXone (van Amerongen et al., 2019; Hasekamp et al., 2019), instrument dédié aux aérosols dont les mesures permettraient de réduire leurs impacts délétères sur les estimations de colonnes totales de CO₂ (Rusli et al., 2021).

Embarqués ensemble sur de petites plateformes satellites ($< 50\text{-}100\text{ kg}$), avec un objectif de précision d'1 ppm pour X_{CO_2} (et 6 ppb pour X_{CH_4}), une constellation de satellites SCARBO pourrait être un complément pertinent à la mission CO_2M . En effet, avec environ 20 satellites, elle pourrait fournir une revisite journalière (voire pluri-quotidienne selon la région) des mégapoles et principales sources d'émission de CO_2 , et ainsi compléter les revisites bien moins fréquentes de CO_2M .

4.2.2 L'instrument compact NanoCarb

Le concept de l'instrument NanoCarb a été proposé par l'Université de Grenoble Alpes (UGA) et l'Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales (ONERA). C'est un interféromètre imageur statique qui mesure des *interférogrammes tronqués* échantillonnés à des différences de marche (*Optical Path Differences*, notées OPD par la suite) optimalement sensibles aux paramètres géophysiques nécessaires à l'estimation de X_{CO_2} . Son principe repose sur la signature spectrale périodique des raies d'absorption des gaz à effet de serre (voir l'allure des branches P(Q)R sur la figure 2.4 par exemple). Dans le domaine de Fourier, l'information liée à ces raies est associée à des zones d'OPD très restreintes, que NanoCarb cherche à échantillonner. Ce principe de mesure, les composants du système optique (voir figure 4.1), la méthode de sélection optimale des OPDs et les premières performances attendues sont décrites précisément par Gousset et al. (2019).

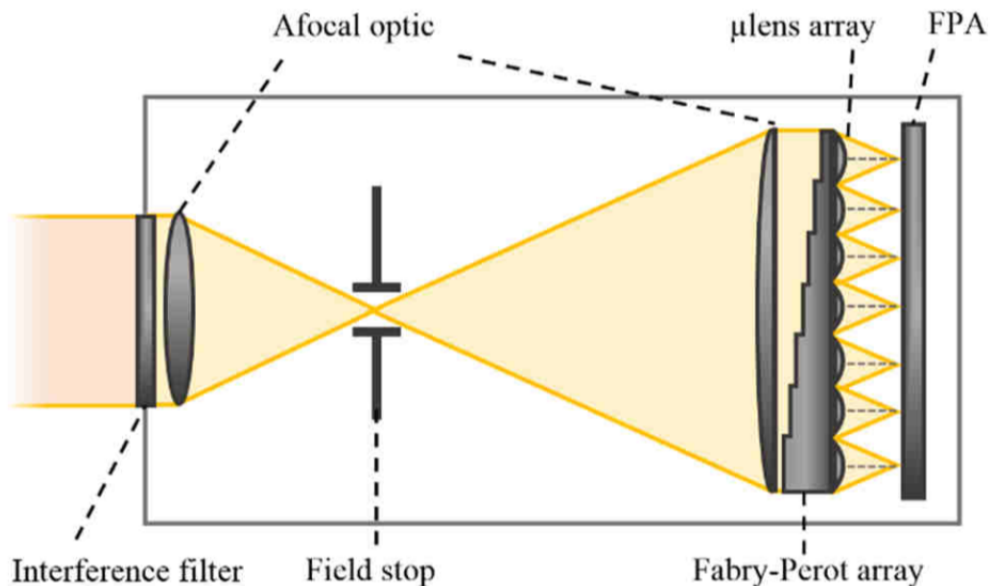


FIGURE 4.1 – Système optique pour une bande de NanoCarb : la lumière incidente est sélectionnée par un filtre à bande étroite (*interference filter*) et éclaire, à travers un système afocal (*Afocal optic*), une matrice d'interféromètres de Fabry-Perot (*Fabry-Perot array*) qui produit sur le détecteur (FPA) une image du champ de vue modulée par des anneaux d'interférence. figure tirée d'un document interne au projet SCARBO (2021a).

Filtres à bande étroite Des filtres à bande étroite, caractérisés par leur nombre d'onde central et leur largeur à mi-hauteur (FWHM), sélectionnent tout d'abord la bande spectrale de la lumière provenant d'un champ de vue (*Field Of View*, noté FOV) donné. Le tableau 4.1 décrit les paramètres des quatre bandes spectrales exploitées par NanoCarb. Pour la suite du travail, il est important de noter que le nombre d'onde central ν_0 de ces filtres se décale légèrement vers de plus grands nombres d'onde avec θ , l'angle d'incidence du rayonnement par rapport à la normale au filtre (Smith, 2008, chapitre 11, p. 246). On a :

$$\frac{1}{\nu_0(\theta)} = \frac{1}{n\nu_0(0)} \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta} \quad (4.1)$$

avec n , l'indice effectif des couches de revêtement optique du filtre (habituellement compris entre 1.5 et 1.9).

	Bande 1 : bande A de l'O₂	Bande 2 : CO₂ faible	Bande 3 : CH₄	Bande 4 : CO₂ fort
Région spectrale	0.76 μm	1.6 μm	1.66 μm	1.06 μm
Mesure	Pression de surface, aérosols	CO ₂ , H ₂ O	CH ₄	CO ₂ , aérosols
Nombre d'onde central du filtre à bande étroite ν_0	13093 cm^{-1}	6213 cm^{-1}	6078 cm^{-1}	4840 cm^{-1}
FWHM du filtre à bande étroite	35 cm^{-1}	24 cm^{-1}	69 cm^{-1}	18 cm^{-1}
Limites de simulation du transfert radiatif	12940 - 13175 cm^{-1}	6180 - 6280 cm^{-1}	6000 - 6200 cm^{-1}	4820 - 5010 cm^{-1}

TABLE 4.1 – Bandes spectrales exploitées par NanoCarb, et caractéristiques de leurs filtres à bande étroite.

Interféromètres de Fabry-Perot Pour chaque bande spectrale, les interférogrammes tronqués sont obtenus grâce à une matrice d'interféromètres de Fabry-Perot à faible finesse associés à des OPDs δ qui varient avec l'angle d'incidence θ autour de valeurs de référence fixées. Avec quelques hypothèses, leur transmission T_{FP} s'écrit :

$$T_{\text{FP}} \approx \frac{1}{1 + M \sin^2(\varphi/2)}, \text{ avec } \varphi = 2\pi\nu\delta(\theta) \quad (4.2)$$

avec M , le terme de finesse de l'interféromètre, ici environ égal à 2, et ν , le nombre d'onde de la lumière incidente. Du fait de la dépendance en θ des OPDs, ces interféromètres produisent sur le détecteur de l'instrument des images de tout le FOV modulées par des anneaux d'interférence. Ainsi, une image de tout le FOV est acquise pour chacune des bandes spectrales

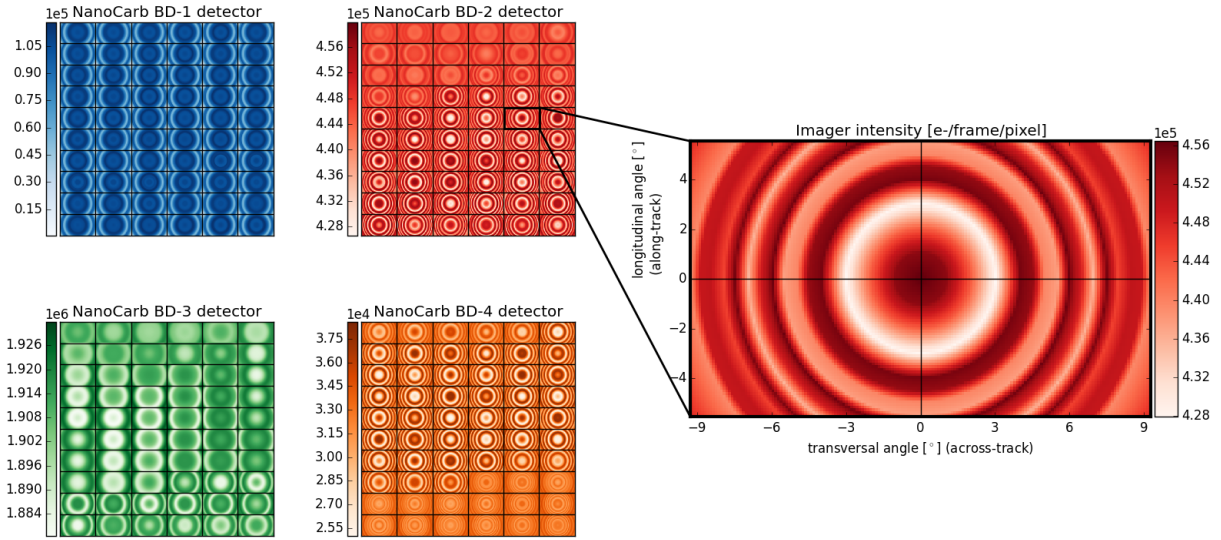


FIGURE 4.2 – Exemple de mesure NanoCarb complète. La partie gauche montre les intensités mesurées pour chacune des quatre bandes spectrales sur le détecteur (notées BD sur la figure), pour leurs 60 OPDs respectives et tous les pixels du FOV. La partie droite zoome sur l’intensité qui évolue dans le FOV pour une OPD donnée de la bande spectrale dite « CO₂ faible ». Cet exemple a été calculé pour une atmosphère tempérée avec un type de surface végétal, avec un angle zénithal solaire de 25°.

et pour chacune de leurs OPDs respectives et, réciproquement, un interférogramme tronqué est mesuré aux OPDs sélectionnées dans les quatre bandes spectrales pour tous les pixels du FOV. La figure 4.2 montre comment les bandes spectrales, les OPDs et les images du FOV sont organisées sur les détecteurs de l’instrument. L’intensité que l’on mesure sur un pixel dépend à la fois de la situation atmosphérique et de surface considérée, mais aussi de la bande spectrale, de l’OPD et de la localisation du pixel dans le FOV, décrite par l’angle d’incidence $\theta = \sqrt{\theta_T^2 + \theta_L^2}$, avec θ_T , l’angle transversal (direction perpendiculaire à la trajectoire du satellite) et θ_L , l’angle longitudinal (direction parallèle à la trajectoire du satellite).

La figure 4.3 montre quant à elle un interférogramme tronqué mesuré par NanoCarb sur un des pixels centraux du FOV. On y distingue pour chaque bande spectrale des oscillations entre des franges claires (les maxima) et des franges sombres (les minima). Cette forme provient de la transmission de l’interféromètre de Fabry-Perot T_{FP} lue comme un filtre en fréquence des structures du spectre pour un angle θ fixé. La figure 4.4 donne T_{FP} pour deux OPDs différentes en fonction du nombre d’onde pour la bande CO₂ faible. Lorsque la transmission de l’interféromètre et les structures d’absorption du CO₂ sont en phase, on obtient les franges sombres (gauche) plus sensibles au CO₂, et lorsqu’elles sont déphasées, on obtient les franges claires (droite), moins sensibles au CO₂.

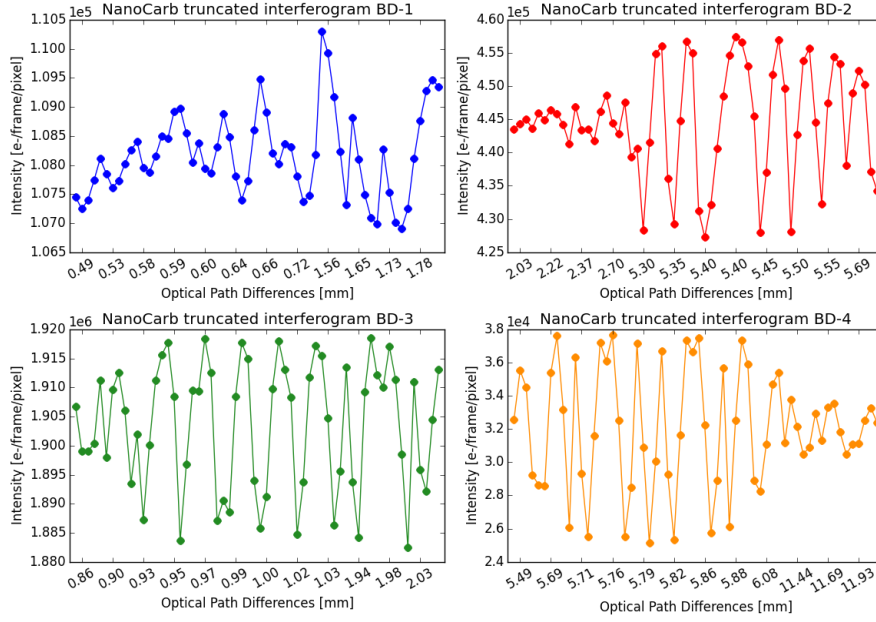


FIGURE 4.3 – Exemple d’un interférogamme tronqué NanoCarb pour les quatre bandes spectrales (notées BD sur la figure), pour un des pixels centraux du FOV et simulée pour la même situation que pour la figure 4.2. Les intensités sont tracées en fonction de l’indice qui dénombre les OPDs, car leur échantillonnage est très discontinu.

Fréquence temporelle d’acquisition La fréquence d’acquisition de l’intensité sur le détecteur de l’instrument est réglée de telle façon que l’on enregistre une image « snapshot » de tous les pixels du FOV à chaque fois que le FOV avance d’un pixel dans la direction longitudinale, parallèle à la trajectoire du satellite.

Version du concept SCARBO utilisée Le dimensionnement de NanoCarb est réalisé à l’UGA et l’ONERA, et a évolué tout au long du projet SCARBO. Deux premières itérations ont été testées en début de thèse, dans le cadre d’études de performance moins fouillées. Le travail présenté dans ce manuscrit repose sur la troisième itération du dimensionnement de l’instrument NanoCarb, la plus complète. L’optimisation des caractéristiques des filtres à bande étroite et la sélection des 60 OPDs par bande spectrale (voir partie gauche de la figure 4.2) a été réalisée pour le centre du FOV pour $\theta = 0^\circ$ en considérant des variations de 10%, 1 ppm et 10 ppb pour O_2 , CO_2 et CH_4 . Elles prennent en compte le possible entremêlement des signaux O_2 et aérosols, CO_2 et H_2O , CH_4 et H_2O et CO_2 et aérosols pour les quatre bandes classées dans l’ordre, respectivement, sous l’hypothèse d’un profil de température connu ainsi que d’un albédo connu et sans dépendance spectrale sur les quatre bandes. À cette sélection de 60 OPDs par bande spectrale correspond un champ de vue qui compte 170 (direction transversale, θ_T compris entre -9.3° et 9.3°) \times 102 (θ_L compris entre -5.5° et 5.5°) pixels dont la surface au sol est de $1.15 \times 1.15 \text{ km}^2$ (voir partie droite de la figure 4.2). Ce dimensionnement permet d’atteindre les 200 km de fauchée nécessaires pour tenir les

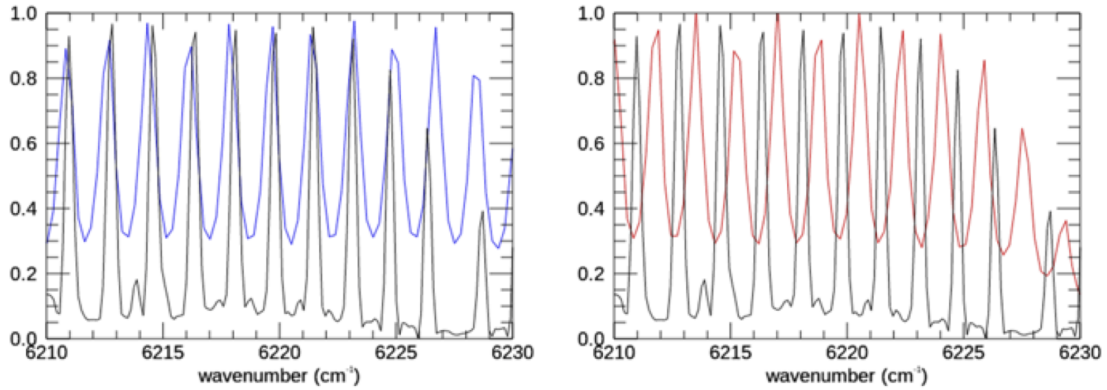


FIGURE 4.4 – (Gauche) Transmission de l’interféromètre de Fabry-Pérot T_{FP} pour une OPD donnée (en **bleu**), en phase avec la signature spectrale du CO_2 normalisée dans la bande CO_2 faible (en **noir**) ; (Droite) Transmission de l’interféromètre de Fabry-Pérot T_{FP} pour une autre OPD donnée (en **rouge**), en opposition de phase avec la signature spectrale du CO_2 normalisée dans la bande CO_2 faible (en **noir**). Figure produite par les équipes travaillant sur l’instrument NanoCarb, tirée d’un document interne au projet SCARBO (SCARBO, 2021a).

objectifs de revisite du concept SCARBO avec une constellation de taille raisonnable (voir plus loin, partie 4.2.4).

Ici, nous utilisons pour NanoCarb un modèle instrumental mis au point à l’UGA et l’ONERA (Gousset, communication personnelle). Il implémente la réponse angulaire des filtres à bande étroite (équation 4.1) ainsi que l’approximation de la transmission des interféromètres de Fabry-Perot (équation 4.2). L’intensité mesurée par le détecteur de l’instrument s’obtient par l’intégration du produit de la luminance incidente et de la transmission T_{FP} sur l’intervalle de définition du filtre, multipliée par les bons facteurs de conversion associés aux caractéristiques optiques et radiométriques des composants envisagés pour l’instrument. Ainsi, étant donnés ses divers paramètres instrumentaux, un spectre de luminance calculé grâce à un code de transfert radiatif à résolution pseudo-infinie et des valeurs pour θ_T et θ_L désignant un pixel du FOV, le modèle instrumental de NanoCarb fournit l’interférogramme tronqué associé. Il ne rend cependant pas compte des possibles imperfections d’un système optique réel, ni de la fonction d’étalement du point sur le détecteur.

4.2.3 Le polarimètre multi-angles SPEXone

SPEX (*Spectro-Polarimeter for Planetary Exploration*) est un acronyme qui désigne une famille d’instruments dédiés aux aérosols qui a été développée par l’Institut néerlandais pour la recherche spatiale (SRON) et ses partenaires académiques et industriels. SPEXone est le polarimètre multi-angles le plus récent et le plus compact de cette famille d’instruments (6 dm³). Il est développé par le SRON avec le soutien de l’expertise en systèmes optiques d’Airbus Defence and Space Netherlands et de l’Organisation néerlandaise pour l’optique

appliquée (van Amerongen et al., 2019). Cet instrument mesure la lumière visible sur 5 angles de vue $\pm 50^\circ$, $\pm 20^\circ$ et 0° le long de la trajectoire du satellite et utilise la technique de modulation spectrale (Snik et al., 2009) pour inscrire le degré de polarisation linéaire (DoLP) dans le spectre mesuré. Le DoLP peut alors être retrouvé avec une très grande précision ce qui permet l'estimation de propriétés micro-physiques et optiques des aérosols en plus de leur épaisseur optique (Hasekamp et al., 2019). Concernant l'épaisseur optique en particulier, SPEXone a pour objectif de l'estimer avec une précision de 0.02. Ses performances données plus loin dans ce chapitre (voir figure 4.10) montrent que cet objectif n'est pas tenu pour toutes les situations d'observation atmosphérique.

Dans le cadre du projet SCARBO, l'analyse linéaire de la performance de SPEX a été menée au SRON par Lianghai Wu et Otto Hasekamp.

4.2.4 Dimensionnement de la constellation de petits satellites

Le dimensionnement de la constellation SCARBO vise à garantir un survol pluri-quotidien de la plus grande fraction possible des sources d'émissions anthropiques de CO_2 . Toutes ne sont cependant pas détectables avec un instrument permettant d'estimer la colonne totale de CO_2 avec une précision d'1 ppm. Dans cette perspective, Wang et al. (2019) ont réalisé un traitement de la base de données *Open Source Data Inventory of Anthropogenic CO₂* (ODIAC, Oda et al., 2018) afin d'identifier les agrégats de sources d'émission dont le panache est détectable par un instrument embarqué sur un satellite volant aux alentours de midi, pour différentes précisions sur l'estimation de X_{CO_2} . La figure 4.5 montre la répartition géographique des *hotspots* d'émission compatibles avec l'objectif SCARBO d'une précision d'1 ppm pour l'estimation de X_{CO_2} . Elle donne également les statistiques de revisite de ces *hotspots* pour une constellation de 22, 24 et 26 satellites embarquant des instruments ayant une fauchée de 200 km, volant sur une orbite héliosynchrone à 600 km d'altitude et répartis équitablement sur deux plans orbitaux à 10h et 14h. Avec 24 satellites, une constellation SCARBO fournit une couverture globale et un survol quotidien de tous les *hotspots*, avec une revisite pluri-quotidienne pour les 73% d'entre eux situés au-delà de $\pm 30^\circ$ de latitude. Ce nombre de satellites est un compromis acceptable entre la couverture offerte par la constellation, son coût et les technologies de lancement et de déploiement disponibles.

Ce travail de dimensionnement de la constellation SCARBO a été effectué par les équipes d'Airbus Defence and Space. Il est présenté dans le *White Paper* du projet SCARBO (SCARBO, 2021a).

4.3 Méthodologie de l'étude de performance

L'évaluation de la contribution potentielle d'une mission satellite à la connaissance des flux de CO_2 requiert la production de larges quantités de résultats de performance L2. La préparation de missions planifiées inclut habituellement des Expériences de Simulation de Système d'Observation (OSSE) qui construisent un modèle réaliste de l'atmosphère, simulent l'orbite de l'instrument et testent les algorithmes d'estimation sur des mesures synthétiques.

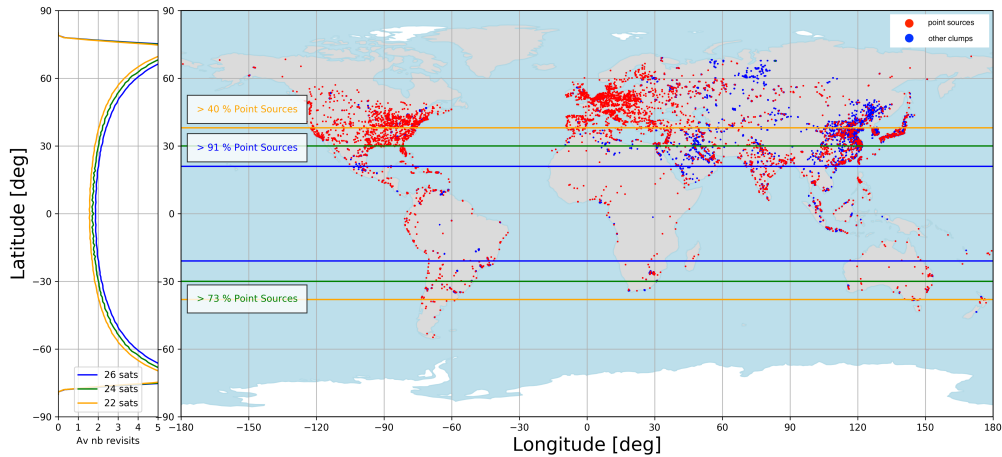


FIGURE 4.5 – Carte des sources anthropiques de CO_2 (sources ponctuelles en **rouge** et autres agrégats en **bleu**) dont le panache d’émission est détectable aux alentours de midi avec un instrument d’une précision d’1 ppm pour l’estimation de X_{CO_2} . Les lignes **jaunes**, **vertes** et **bleues** donnent la latitude minimale pour un survol pluri-quotidien de la zone par une constellation de 22, 24 et 26 satellites, respectivement. La partie gauche de la figure donne, avec les mêmes couleurs, le nombre moyen de survols en fonction de la latitude pour une constellation de 22, 24 et 26 satellites, respectivement. Figure produite par les équipes d’Airbus Defence and Space travaillant sur le design de la constellation SCARBO, tirée d’un document interne au projet SCARBO (SCARBO, 2021a).

Cette approche, très coûteuse en temps de calcul, n’est cependant pas pertinente compte tenu de la maturité actuelle du concept d’interférogramme tronqué proposé avec NanoCarb. On se propose donc ici de suivre une approche simplifiée, par paramétrisation de la performance.

Après avoir présenté cette approche, on décrira le modèle atmosphérique utilisé puis les situations d’observation atmosphérique considérées pour cette étude de performance. On détaillera ensuite la configuration d’inversion de 5AI et comment l’impact du FOV sur la performance est pris en compte. Finalement, on présentera les deux scénarios de conception considérés pour cette étude.

4.3.1 Approche générale

L’étude de performance menée ici suit l’approche proposée par Buchwitz et al. (2013) pour évaluer les performances de la mission CarbonSat (non retenue par l’ESA en 2015). Elle consiste à sélectionner quelques paramètres atmosphériques, de surface ou d’observation auxquels les erreurs d’estimation du X_{CO_2} sont très sensibles. On évalue alors la performance du concept étudié sur un nombre très restreint de situations d’observation atmosphérique qui explorent simplement ces quelques paramètres d’intérêt. Pour cette étude de performance, cinq paramètres d’observation atmosphérique ont été sélectionnés. Ils sont présentés dans

la partie 4.3.3. En plus de ces cinq paramètres explorés, on réalise cette étude pour deux scénarios de conception d'un satellite SCARBO : sans et avec l'instrument SPEXone. Les configurations synthétiques associées à ces deux scénarios sont décrites dans la partie 4.3.6.

On simule alors des mesures synthétiques non-bruitées pour le concept étudié, pour des situations d'observation atmosphérique qui explorent les paramètres sélectionnés sur des intervalles de valeurs réalistes. Le transfert radiatif inverse nous permet alors d'évaluer la performance pour chacune de ces situations en fournissant erreurs systématique et aléatoire ainsi que sensibilité verticale des X_{CO_2} estimés (voir chapitre 3).

Ces erreurs sont finalement paramétrisées comme des fonctions des paramètres étudiés, afin d'obtenir des modèles de performance L2 faciles et rapides à utiliser. En simulant les orbites envisagées, on peut alors échantillonner des climatologies des paramètres étudiés afin d'y appliquer ces modèles de performance paramétrisée. On obtient ainsi finalement les données nécessaires à l'évaluation de la contribution potentielle du concept pour l'étude des flux de CO_2 (voir section 4.6).

La figure 4.6 schématise cette approche et donne les liens entre les différentes section qui vont suivre.

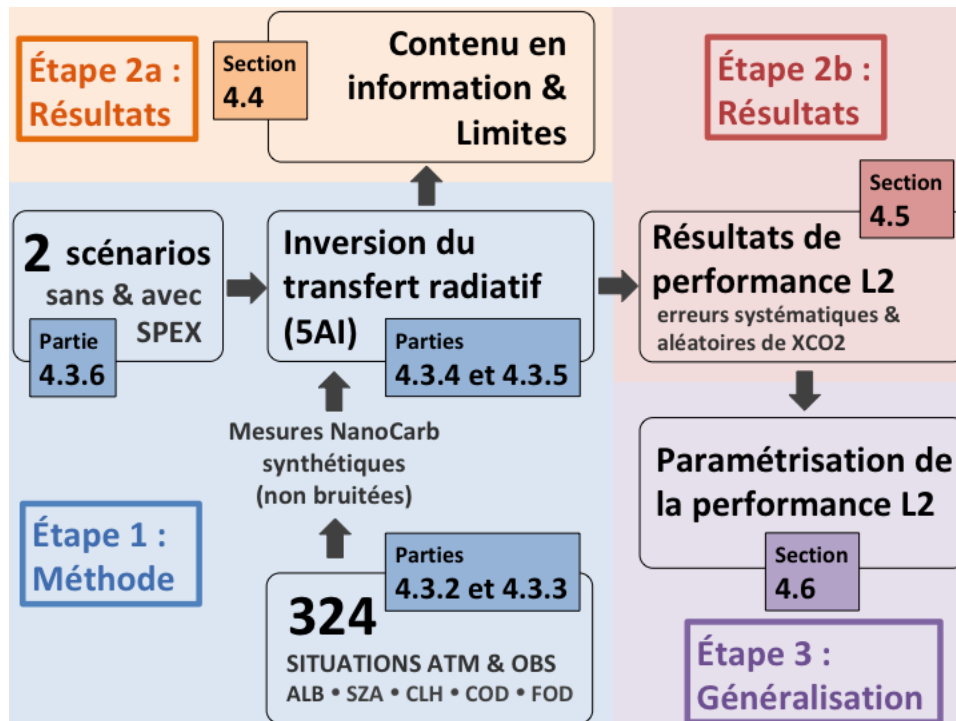


FIGURE 4.6 – Approche générale de l'étude de performance du concept SCARBO. Trois étapes se distinguent : la première, sujet de cette présente section concerne les méthodes de l'étude, la seconde présente d'abord les résultats liés au contenu en information, puis ceux associés aux erreurs d'estimation, et finalement la troisième généralise les résultats de performance par paramétrisation.

4.3.2 Modèles d’atmosphère et d’aérosols

L’étude de performance est menée pour la moyenne des situations atmosphériques incluses dans la deuxième classe de la base TIGR, représentative de situations tempérées aux latitudes moyennes, par exemple typiques de l’Europe. Elle est discrétisée sur 20 niveaux de pression (19 couches) définis selon les règles proposées par l’algorithme ACOS (2021) comme des fractions de la pression de surface, réglée à 1013 hPa. On utilise des profils verticaux de concentration atmosphérique des gaz à effet de serre constants, fixés à 394.85 ppm et 1855.3 ppb pour le CO₂ et le CH₄, respectivement.

On fait l’hypothèse de la présence de deux couches d’aérosols dans l’atmosphère : une de mode fin et une de mode grossier. Cette hypothèse est cohérente avec les choix réalisés pour l’étude de performance de SPEXone qui a été menée par Hasekamp et al. (2019), et si l’on exclut les cirrus, elle suit également les choix fait pour l’algorithme d’estimation Full-Physics développé à l’Université de Leicester (UoL-FP, Cogan et al., 2012). Ici, le mode fin d’aérosols est représentatif d’aérosols non-organiques industriels et on suppose qu’ils sont confinés entre 0 et 2 km d’altitude. Quant au mode grossier, il est représentatif de poussières minérales et se situe à une altitude variable. Les propriétés optiques de ces modèles d’aérosols ont été fournies par le SRON et utilisées dans 4A/OP et 5AI. Elles sont identiques à celles utilisées pour les travaux sur l’instrument SPEXone menés au SRON. Pour toute cette étude de performance, elles sont considérées comme parfaitement connues.

4.3.3 Paramètres d’observation atmosphérique explorés pour l’étude de performance

Les cinq paramètres d’observation atmosphérique sélectionnés pour cette étude sont étroitement liés à l’erreur associée à la diffusion : le modèle d’albédo, l’angle zénithal solaire, l’altitude de la couche d’aérosols de mode grossier, l’épaisseur optique de la couche d’aérosols de mode grossier et l’épaisseur optique de la couche d’aérosols de mode fin. Des paramètres proches ou similaires ont déjà été utilisés dans des études sur la performance L2 d’autres concepts (Boesch et al., 2011; Buchwitz et al., 2013). Ils influencent en effet fortement la longueur du chemin optique ou la quantité globale de photons atteignant l’instrument au sommet de l’atmosphère.

Pour l’albédo, noté « ALB », on considère trois modèles représentatifs d’un sol nu (SOL), d’une scène de végétation (VEG) et d’une scène désertique (DES), générés à partir des modèles rassemblés dans la bibliothèque spectrale ASTER (Baldrige et al., 2009). Comme décrit précédemment dans la partie 4.2.2, les hypothèses de dimensionnement actuelles du concept NanoCarb considèrent un modèle d’albédo connu et constant sur les intervalles de définition des bandes spectrales. Les calculs directs et inverses mis en oeuvre ici respectent ces hypothèses. La figure 4.7 présente ces trois modèles d’albédo sur les quatre bandes spectrales de NanoCarb.

On considère quatre valeurs possibles pour l’angle zénithal solaire, noté « SZA » : 0°, 25°, 50° et 70°. Même s’il est possible d’acquérir des mesures dans le proche infrarouge pour des valeurs de SZA supérieures à 70°, l’expérience du filtrage a posteriori des résultats d’ACOS

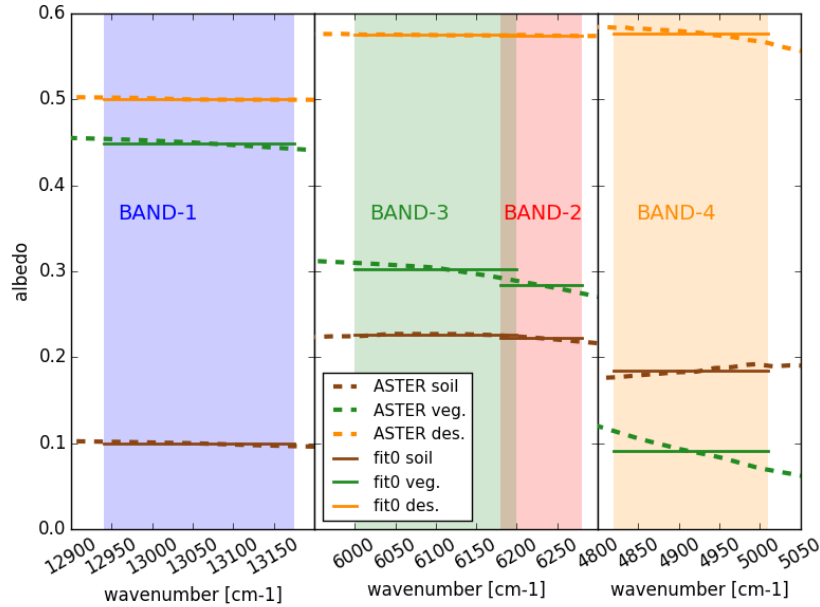


FIGURE 4.7 – Dépendance spectrale (tirets) des modèles d’albédo utilisés pour l’étude de performance, sur les intervalles de définition des bandes spectrales de NanoCarb. Les valeurs constantes utilisées sont montrées en trait plein.

sur OCO-2 montre que l’on retire souvent ceux associés à de forts SZA (O’Dell et al., 2018). Le choix d’un maximum de 70° semble donc un bon compromis.

Pour l’altitude de la couche d’aérosols de mode grossier (*Coarse Layer Height*), notée « CLH », on considère 3 valeurs possibles de 2, 4 et 6 km. Son épaisseur optique (*Coarse Optical Depth*), notée « COD », explore 0.001, 0.05 et 0.15 à la longueur d’onde de référence de 550 nm. L’épaisseur optique de la couche d’aérosols de mode fin (*Fine Optical Depth*), notée « FOD », prend elle pour valeurs 0.001, 0.12 et 0.22 à la longueur d’onde de référence de 550 nm. Les profils d’aérosols ainsi générés cherchent à représenter : (1) les épaisseurs optiques d’aérosols de fond, arbitrairement attribuées au mode fin correspondant à des aérosols non-organiques d’origine industrielle (comme celles attendues sous le vent de forts points d’émission de CO_2), avec des épaisseurs optiques par exemple cohérentes avec les moyennes issues des observations de l’instrument *MODerate resolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS, par exemple Palacios-Peña et al., 2019) ; (2) les couches passagères de particules minérales, transportées au-dessus de l’Europe et pouvant être observées de la fin du printemps jusqu’au début de l’automne à des altitudes variables (par exemple Papayannis et al., 2008).

L’exploration des 3 modèles d’albédo, 4 valeurs de SZA, 3 valeurs de CLH, 3 valeurs de COD et 3 valeurs de FOD constitue l’ensemble de **324 situations d’observation atmosphérique** sur lequel est basé l’étude des performance L2 du concept proposé dans le cadre de SCARBO.

4.3.4 Méthode d'inversion : le code 5AI

Les résultats produits par l'estimation optimale permettent d'obtenir les grandeurs clés qui décrivent la performance d'un concept dédié à l'estimation de la colonne totale de CO_2 . En reprenant les notations du chapitre 3, on définit :

- **L'erreur systématique** d'estimation du X_{CO_2} comme la différence entre l'état estimé \hat{x} et l'état vrai synthétique x_t . Ces différences proviennent par exemple d'un biais systématique de la connaissance a priori des paramètres géophysiques, ou bien d'erreurs de modélisation directe (transfert radiatif, paramètres spectroscopiques, etc). De manière opérationnelle, une erreur vraiment systématique à l'échelle globale et sur toute une mission peut-être retirée a posteriori, mais encore faut-il réussir à se rendre compte de son existence. Pour cette étude, on utilise le terme erreur « systématique » abusivement dans le sens où il désigne ici les déviations dues à une méconnaissance a priori locale des paramètres liés aux aérosols, mais pas forcément une méconnaissance a priori globale.
- **L'erreur aléatoire** d'estimation du X_{CO_2} , calculée à partir de \hat{S} , la matrice de variance/covariance a posteriori du vecteur d'état. Cette erreur est issue du bruit instrumental aléatoire qui vient polluer la mesure d'interférogramme (ou de spectre). Formellement on devrait également ajouter à la matrice de variance/covariance de la mesure les erreurs de modélisation du transfert radiatif, mais en pratique elles ne sont pas faciles à déterminer².
- **La sensibilité verticale** du X_{CO_2} estimé. Elle se calcule à partir de la matrice *averaging kernel* A selon l'équation 3.18. Elle donne les couches de l'atmosphère auxquelles l'estimation de X_{CO_2} est sensible, pour une mesure et géométrie d'observation données.

Ici, nous utilisons le code d'estimation optimale 5AI avec un vecteur d'état qui contient certaines des principales variables auxquelles le rayonnement proche infrarouge est sensible. Les éléments du vecteur d'état, leurs valeurs et incertitudes a priori sont donnés dans le tableau 4.2. La méconnaissance du profil de température n'est pas prise en compte dans ce vecteur d'état car l'influence de la température n'a pas été considérée pour le dimensionnement et la sélection des OPDs, pour cette version actuelle de l'instrument NanoCarb. Bien que l'influence de l'albédo ait également été négligée pour le dimensionnement de la version actuelle de NanoCarb, on choisit tout de même de l'inclure ici dans le vecteur d'état car c'est une variable géophysique essentielle au transfert radiatif dans le proche infrarouge. C'est en effet elle qui influence le plus le niveau moyen de l'interférogramme tronqué (ou le fond sans absorption des spectres). En revanche, de manière cohérente avec les hypothèses de dimensionnement, on néglige ici sa dépendance spectrale et on utilise sa valeur vraie synthétique comme a priori. Par ailleurs, à part pour les incertitudes a priori des paramètres liés aux aérosols qui dépendent du scénario de conception, les incertitudes des paramètres du vecteur

2. C'est parce qu'on ne considère habituellement que le bruit instrumental dans cette matrice que les erreurs aléatoires, obtenues pour des colonnes estimées à partir d'OCO-2 par exemple, sont bien inférieures aux écarts-types que l'on constate par rapport à TCCON par exemple.

d'état on été choisies larges à dessein. Cela permet de laisser toute l'amplitude à la mesure pour apporter de l'information sur les variables du vecteur d'état, et ainsi évaluer le contenu en information des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb. Finalement, le modèle de bruit instrumental $\varepsilon_{i,j}$ utilisé dans les estimations de 5AI est le suivant :

$$\varepsilon_{i,j} = \sqrt{I_{i,j} + r_j^2} \quad (4.3)$$

avec $\varepsilon_{i,j}$, l'écart-type a priori du bruit instrumental pour la i -ième OPD de la bande spectrale j , $I_{i,j}$ l'intensité de l'interférogramme tronqué pour la i -ième OPD de la bande spectrale j , et r_j , le bruit de décodage (*readout noise*) du détecteur.

Paramètres	Taille	Valeur a priori	Incertitude a priori
Facteur multiplicatif du profil d'H₂O	1 facteur	1.0	0.1
Facteur multiplicatif du profil de CO₂	1 facteur	1.0	0.1
Facteur multiplicatif du profil de CH₄	1 facteur	1.0	0.1
Pression de surface	1	1013.0 hPa	4.0 hPa
Albédo constant par bande	4 bandes spectrales	Valeur vraie synthétique	1.0
Épaisseur optique de la couche de mode grossier d'aérosols (COD)	1 couche	<i>Dépend du scénario de conception</i>	<i>Dépend du scénario de conception</i>
Épaisseur optique de la couche de mode fin d'aérosols (FOD)	1 couche	<i>Dépend du scénario de conception</i>	<i>Dépend du scénario de conception</i>

TABLE 4.2 – Vecteur d'état de 5AI pour l'étude de performance du concept proposé par SCARBO

Pour ses simulations de transfert radiatif, 5AI repose ici sur le couplage de 4A/OP avec le code LIDORT (voir 2.6.3, Spurr, 2002) pour la prise en compte de la diffusion par les aérosols. Il utilise ici des atlas calculés avec la version 2015 de GEISA (Jacquinet-Husson et al., 2016) qui prennent en compte les effets de mélange entre raies et d'absorption par collision dans la bande A de l'O₂ (Tran and Hartmann, 2008) et les effets de mélange entre raies et d'élargissement par la vapeur d'eau des raies de CO₂ dans les bandes à 1.6 et 2.05 μm (Lamouroux et al., 2010).

Cette étude de performance reposant uniquement sur l'exploitation des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb, le code 5AI a été adapté pour inclure le modèle instrumental de NanoCarb. Pour toutes les bandes listées dans le tableau 4.1, on calcule un spectre à résolution pseudo-infinie et ses dérivées partielles (Jacobiens) par rapport aux variables

incluses dans le vecteur d'état. Ils sont alors utilisés en entrée du modèle de NanoCarb couplé à 5AI. Ce dernier produit alors un interférogramme tronqué et ses dérivées partielles qui sont finalement utilisés dans l'estimation réalisée par 5AI. La figure 4.8 montre la dérivée de l'interférogramme tronqué donné sur la figure 4.3 pour les différents éléments du vecteur d'état.

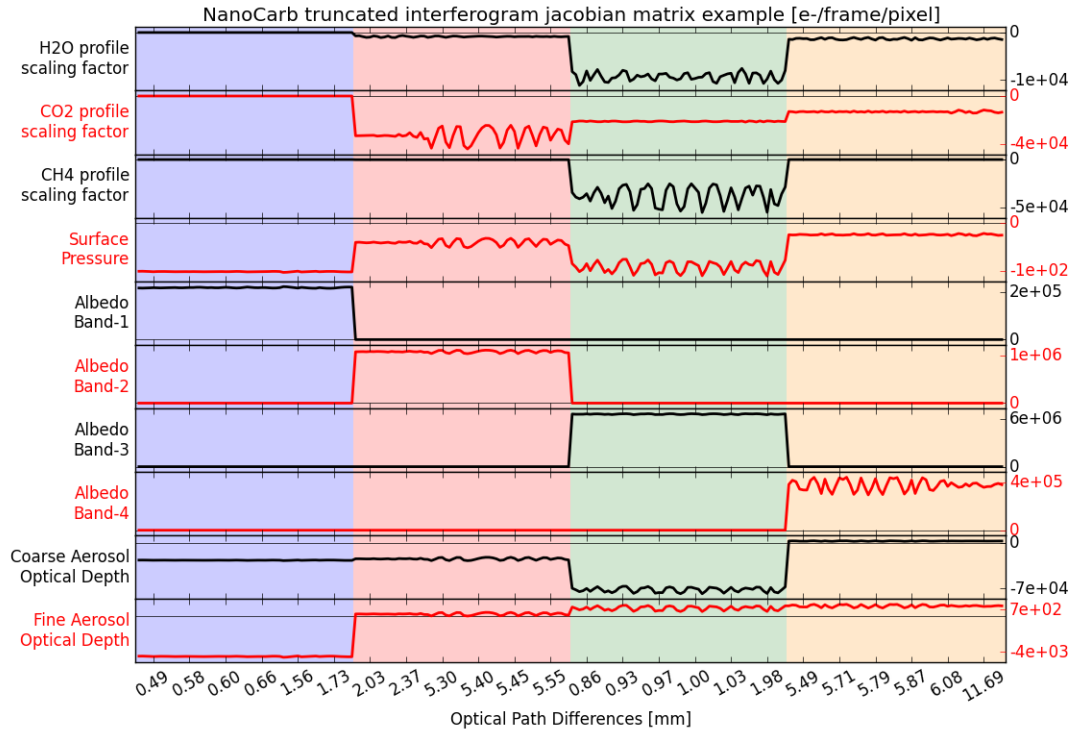


FIGURE 4.8 – Exemple de matrice Jacobienne pour l'interférogramme tronqué montré sur la figure 4.3 pour les variables géophysiques considérées dans le vecteur d'état de 5AI. À nouveau, les valeurs de la matrice sont données en fonction de l'indice qui dénombre les OPDs, car leur échantillonnage est très discontinu. Les fonds de couleur bleue, rouge, verte et orange illustrent les quatres bandes spectrales considérées par NanoCarb, respectivement.

4.3.5 Prise en compte du champ de vue

Une mesure de NanoCarb n'est pas constituée d'un seul interférogramme tronqué, mais de 170 (direction transversale) \times 102 (direction longitudinale) interférogrammes tronqués mesurés pour tout le FOV en un seul *snapshot*. Comme la durée entre deux acquisitions consécutives correspond à l'avancée du FOV d'un pixel au sol, jusqu'à 102 interférogrammes tronqués indépendants peuvent être mesurés pour un même point fixe au sol lors du survol par un satellite SCARBO. La figure 4.9 illustre cette stratégie d'observation pour trois positions du satellite lors de son survol d'un point fixe au sol (pixel noir fixe).

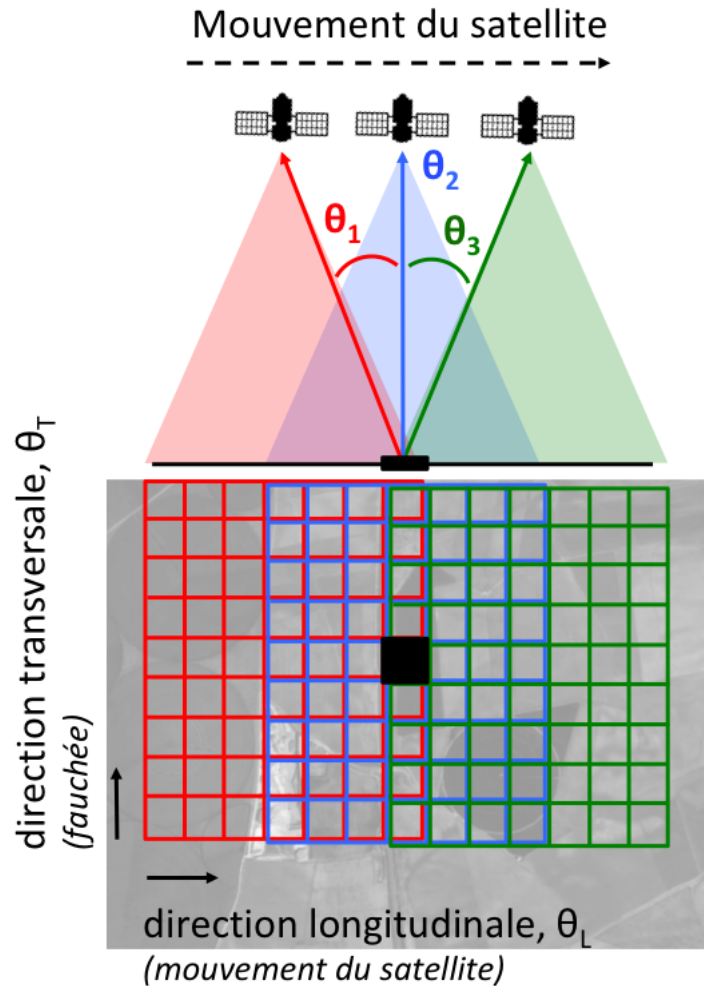


FIGURE 4.9 – Stratégie d’observation du concept SCARBO : un même point au sol est observé sous plusieurs angles de vue à mesure que le satellite le survole, en apparaissant successivement à différentes positions longitudinales dans l’imageur en deux dimensions de l’instrument.

La stratégie pour atteindre les objectifs de précision d’1 ppm et de 6 ppb pour l’estimation du X_{CO_2} et du X_{CH_4} , respectivement, consiste alors à combiner, pour chacune des positions transversales dans la fauchée, décrites par un angle θ_T , toutes leurs mesures faites respectivement dans la direction longitudinale, parallèle à la trajectoire du satellite, et d’estimer un unique état géophysique par position transversale. **Ainsi, en plus de dépendre des paramètres d’observation atmosphérique sélectionnés pour cette étude, les résultats de performance dépendent également de la position transversale θ_T dans la fauchée.**

Le calcul des performances pour les 17340 pixels présents dans le champ de vue serait

intenable en temps de calcul, d'autant plus que 324 situations d'observation atmosphériques sont considérées dans cette étude. Pour réduire les temps de calcul, une méthode d'approximation par interpolation de la performance dans le champ de vue a été mise en place, et est décrite dans l'Annexe C. Concrètement, à partir de 23 pixels du FOV choisis soigneusement, il est possible d'interpoler la performance pour l'estimation de X_{CO_2} (erreurs systématiques et aléatoires pour la colonne) pour tous les autres pixels du FOV. Parce que le champ de vue est considéré comme homogène, les résultats sont ensuite combinés dans la direction longitudinale pour toutes les positions transversales. Pour ce faire, on applique, pour la colonne X_{CO_2} *scalaire*, l'approche détaillée dans le paragraphe *Utilisation de plusieurs mesures indépendantes* de la partie 3.2.1. L'utilisation de cette méthode de combinaison a été choisie suite à l'approximation des résultats L2 dans le FOV, mais elle est doublement abusive. En effet, (1) elle n'est théoriquement valable que pour l'inversion d'un problème linéaire alors qu'ici les aérosols apportent une forte non-linéarité et (2) elle suppose que l'estimation de X_{CO_2} est indépendante de celle des autres variables, ce qui n'est pas le cas comme on le verra plus loin (voir section 4.4). Ces limites illustrent le travail qu'il reste à faire pour imaginer des approches assez rapides afin de traiter l'ensemble des interférogrammes que pourraient produire un concept SCARBO opérationnel.

4.3.6 Deux scénarios de conception : sans et avec SPEXone

Deux scénarios de conception des satellites SCARBO sont étudiés pour l'étude de performance : sans et avec SPEXone. La comparaison des résultats associés à ces deux scénarios vise à mettre en avant l'apport de l'instrument SPEX pour la performance de l'estimation de X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb. Le tableau 4.3 résume les hypothèses réalisées pour chacun des deux scénarios : elles ne concernent que la configuration de l'a priori du vecteur d'état de 5AI.

Scénario de conception sans SPEXone Le premier scénario, noté « sans-SPEX » (*no-SPEX* sur les figures), simule un satellite SCARBO qui n'embarquerait que l'instrument NanoCarb. Ce scénario utilise ainsi des valeurs a priori de COD et FOD fixes, ainsi qu'une CLH fixée à 2 km et non inversée, quelle que soit la situation d'observation atmosphérique considérée. Les incertitudes a priori pour les paramètres COD et FOD sont réglées à 0.5, une valeur (identique à celle utilisée pour les calculs de performance de SPEXone) choisie large à dessein afin d'illustrer la mauvaise connaissance a priori que l'on a des paramètres liés aux aérosols dans ce scénario de conception.

Scénario de conception avec SPEXone Le deuxième scénario, noté « avec-SPEX » (*with-SPEX* sur les figures), simule un satellite SCARBO qui embarque NanoCarb et SPEX ensemble, et fournit donc des mesures co-localisées pour les deux instruments. Pour ce scénario, le traitement des mesures co-localisées est envisagé en deux étapes successives. Dans un premier temps, les mesures de SPEXone sont analysées et les résultats qu'elles permettent de produire sur la connaissance des aérosols sont, dans un second temps, utilisés comme a

Paramètre	A priori	Scénario sans-SPEX	Scénario avec-SPEX
Épaisseur optique de la couche d'aérosols de mode grossier (COD)	Valeur a priori	0.05	Valeur vraie synthétique
	Incertitude a priori	0.5	Résultat de l'analyse linéaire des erreurs de SPEXone (voir figure 4.10)
Épaisseur optique de la couche d'aérosols de mode fin (FOD)	Valeur a priori	0.12	Valeur vraie synthétique
	Incertitude a priori	0.5	Résultat de l'analyse linéaire des erreurs de SPEXone (voir figure 4.10)
Altitude de la couche d'aérosols de mode grossier (<i>non inversée</i>)	Valeur a priori	2 km	Valeur vraie synthétique

TABLE 4.3 – Résumé des hypothèses utilisées pour décrire les deux scénarios de conception sans et avec SPEXone

priori dans les estimations de X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb. Pour cette étude des performances du concept proposé dans SCARBO, la première étape a été réalisée au SRON avec une analyse linéaire des erreurs de SPEXone sur les 324 situations d'observation atmosphérique considérées (Lianghai Wu, communication personnelle). La méthodologie de cette analyse a été décrite par Hasekamp et al. (2019). Cette étude ne correspond malheureusement pas une estimation complète des paramètres liés aux aérosols (valeurs et incertitudes a posteriori), et ne fournit que les incertitudes a posteriori des paramètres COD et FOD, présentés sur la figure 4.10. Les cinq panneaux du haut de la figure 4.10 sont à vocation descriptive, ils rappellent les valeurs des paramètres ALB, SZA, CLH, COD et FOD pour les 324 situations considérées. Ainsi, le premier tiers de l'axe des abscisses est consacré aux situations avec un modèle d'albédo représentatif du sol nu, le deuxième tiers est consacré au modèle d'albédo de végétation et le dernier à un modèle d'albédo désertique. Pour chacun de ces modèles, toutes les valeurs de SZA sont explorées, et il en est de même pour tous les cas de CLH, COD et FOD, classant ainsi les 324 situations sur une seule dimension. Ce classement est également utilisé sur les figures 4.11, 4.18, 4.19 et 4.20.

Concernant les résultats fournis par l'analyse linéaire des erreurs de SPEXone, les incertitudes a posteriori issues de SPEXone pour COD et FOD sont corrélées aux valeurs mêmes de COD et FOD et sont plus élevées pour le mode grossier que pour le mode fin. Les incertitudes sont par ailleurs plus élevées pour le modèle d'albédo désertique que pour les deux autres car le ratio entre les nombres de photons réfléchis par la surface et diffusés par les aérosols est plus défavorable dans ce cas. Les incertitudes issues de SPEXone pour COD et FOD diminuent lorsque le SZA augmente. Ceci peut être expliqué par l'augmentation de

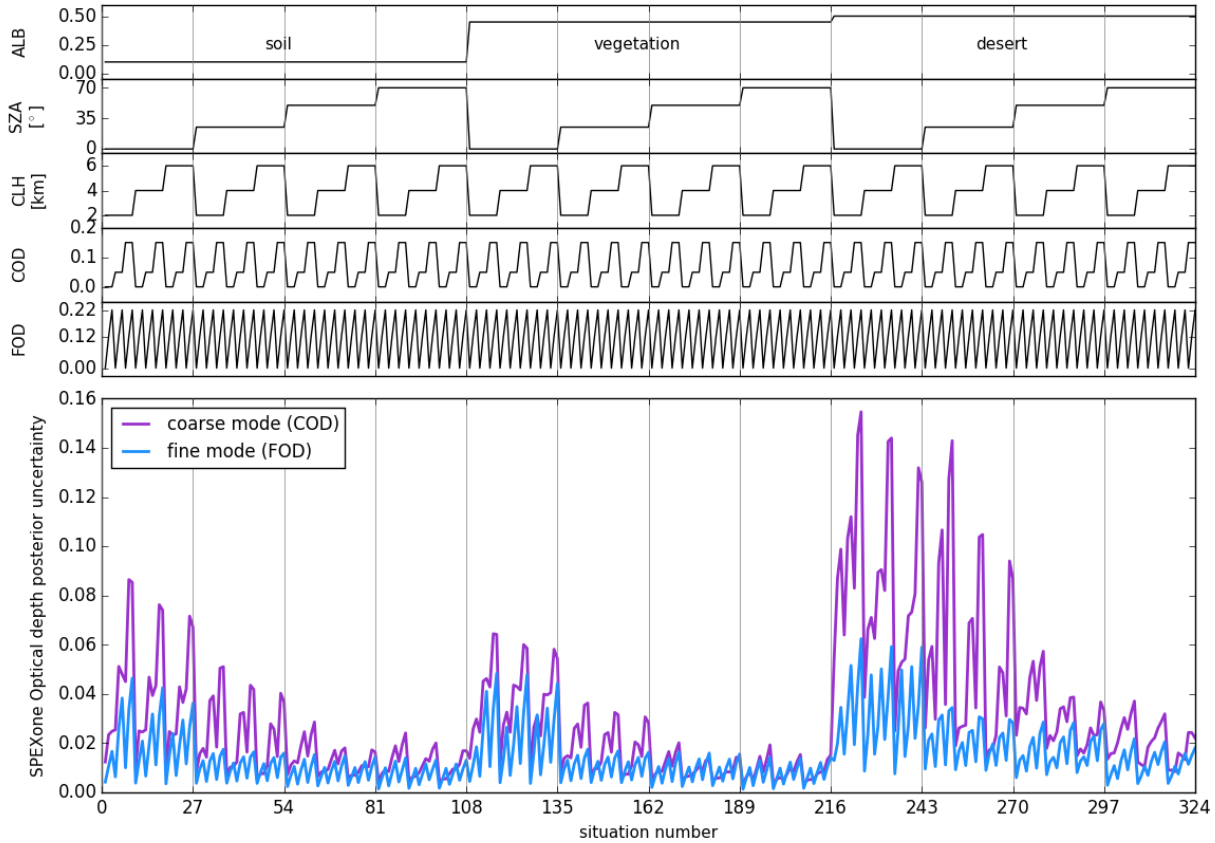


FIGURE 4.10 – Résultats de l’analyse linéaire des erreurs de SPEXone pour les 324 situations d’observation atmosphériques considérées dans cette étude. Les incertitudes a posteriori sur les paramètres COD et FOD issues de l’analyse des mesures de SPEXone sont tracées en fonction du numéro de la situation considérée. Les cinq panneaux du haut de la figure donnent les valeurs des paramètres ALB (à $0.7 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent chacune des 324 situations.

la longueur du chemin optique dans la couche d’aérosols ainsi que par le fait que l’on rencontre typiquement des angles de diffusion plus favorables aux SZAs élevés (Fougnie et al., 2020). L’incertitude sur COD diminue lorsque CLH augmente car on mesure plus de photons diffusés lorsque l’altitude de la couche diffusante se rapproche du satellite.

Pour le scénario avec-SPEX, les incertitudes a posteriori sur COD et FOD, issues de l’analyse linéaire des erreurs réalisée pour SPEXone, sont utilisées comme incertitudes a priori pour l’estimation de X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb. Par ailleurs, en l’absence d’inversion complète des valeurs de COD et FOD d’après les mesures de SPEXone, on fait l’hypothèse que ces dernières permettent d’estimer exactement les épaisseurs optiques des deux modes d’aérosols, alors identiques à leurs valeurs vraies synthétiques. Finalement, comme les mesures de SPEXone donnent également une information sur l’altitude des couches d’aérosols, on considère dans ce scénario que CLH est identique à sa valeur vraie synthétique.

4.4 Contenu en information de la mesure NanoCarb

Avant d'analyser les erreurs d'estimation systématique et aléatoire du X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb, il est d'abord nécessaire de s'arrêter sur le contenu en information des interférogrammes tronqués eux-mêmes. On examinera d'abord les degrés de liberté obtenus pour les paramètres géophysiques inclus dans le vecteur d'état, ainsi que la sensibilité verticale des colonnes totales estimées. On mettra ensuite en évidence l'entremêlement de l'information géophysique dans les mesures NanoCarb entre différentes variables du vecteur d'état. Finalement, les effets dépendant du champ de vue seront abordés.

Les résultats présentés dans cette section correspondent à l'étape 2a de l'approche générale résumée sur la figure 4.6.

4.4.1 Degrés de liberté et sensibilités verticales

Pour cette étude de performance, la colonne totale de CO_2 est directement estimée à partir des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb. Cette nature particulière de la mesure proposée par le concept SCARBO diffère fortement de celle des concepts actuellement en vol ou en préparation, qui mesurent ou mesureront tous des spectres. La diagonale de la matrice *averaging kernel* A , issue de l'estimation optimale, donne les degrés de liberté associés à chacun des paramètres du vecteur d'état, qui décrivent la quantité d'information indépendante apportée par la mesure, quelle que soit sa nature (Rodgers, 2000). L'examen des degrés de liberté issus des estimations de X_{CO_2} reposant sur les mesures NanoCarb permet donc d'évaluer leur contenu en information géophysique.

Degrés de liberté sans-SPEX La figure 4.11 montre les degrés de liberté (*Degrees of Freedom*, notés DOFs) pour tous les éléments du vecteur d'état, moyenné sur les 23 pixels sélectionnés dans le FOV, pour toutes les situations d'observation atmosphérique considérées dans cette étude de performance, pour les scénarios sans-SPEX (milieu) et avec-SPEX (bas). Les zones grisées correspondent à des situations pour lesquelles l'estimation optimale n'a pas convergé de manière satisfaisante. De manière générale, on peut constater que les DOFs pour le CO_2 (et le CH_4) sont proches de 1, confirmant la sensibilité des mesures NanoCarb à leur concentration atmosphérique. Dans le scénario sans-SPEX, le DOF du COD est également proche de 1, montrant donc que les mesures de NanoCarb sont sensibles au mode grossier d'aérosols. Tous les albdédos constants par bande ont un DOF de 1 et, pour les autres variables (facteur multiplicatif du profil d' H_2O , pression de surface et FOD) les estimations ne tirent que peu d'information des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb. Pour ces paramètres, cela signifie que les estimations reposent sur la connaissance a priori de l'atmosphère, ce qui peut possiblement provoquer des biais systématiques dans les résultats de X_{CO_2} si l'a priori est biaisé par rapport à l'état vrai de l'atmosphère. Dans le scénario de conception sans-SPEX, l'évolution des DOFs entre les différentes situations est principalement expliquée par la forte sensibilité des mesures NanoCarb au COD. Elle augmente en effet pour $SZA=70^\circ$ car les mesures effectuées depuis l'espace sont particulièrement

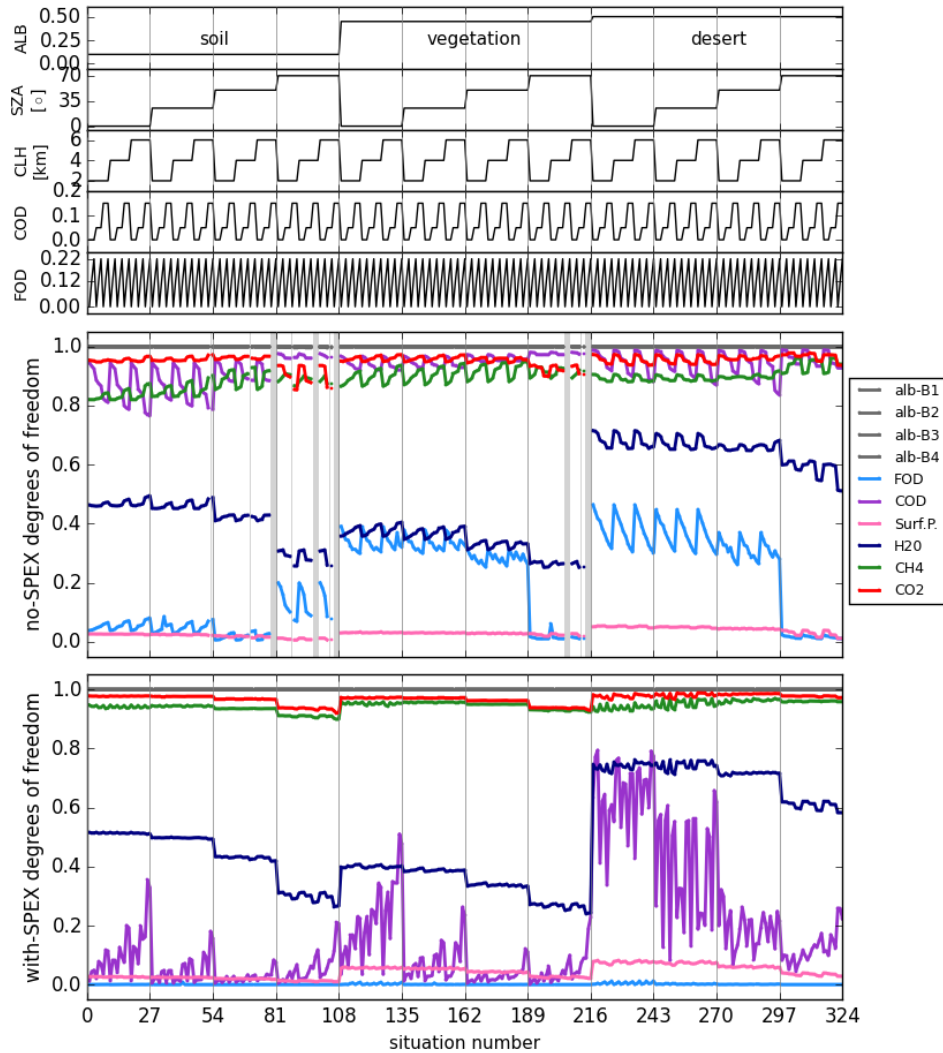


FIGURE 4.11 – Degrés de liberté pour tous les éléments du vecteur d'état utilisé pour l'estimation de X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb, moyennés sur les 23 pixels pour lesquels les estimations sont réalisées exactement. Les degrés de liberté sont donnés pour les scénarios de conception sans-SPEX (milieu) et avec-SPEX (bas). Les cinq panneaux du haut de la figure donnent les valeurs des paramètres ALB (à $0.7 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent chacune des 324 situations. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l'estimation optimale n'a pas convergé de manière satisfaisante.

sensibles à la diffusion pour les chemins optiques très inclinés. Cela explique symétriquement la baisse des DOFs pour les autres paramètres du vecteur d'état, pour lesquels est consacré moins d'information apportée par la mesure. Pour toutes les autres variables géophysiques mis à part les albédos et la pression de surface, l'évolution de leur DOFs est corrélée au COD. L'incertitude a priori choisie à 0.5 pour le COD dans le scénario sans-SPEX n'apporte

en effet qu'une contrainte très lâche à son estimation, qui laisse donc le COD déterminer le contenu en information pour les autres variables.

Degrés de liberté avec-SPEX Le scénario de conception avec-SPEX (voir figure 4.11, bas) montre des DOFs bien plus faibles pour les paramètres COD et FOD liés aux aérosols. En effet, ce scénario a été conçu afin que ce soit l'instrument SPEXone qui apporte le plus d'information sur les paramètres liés aux aérosols, grâce à l'amélioration de l'incertitude a priori sur les paramètres COD et FOD qu'il rend possible. De manière cohérente avec la performance de SPEXone pour le FOD, montrée sur la figure 4.10, les DOFs du FOD sont quasiment nuls grâce à la bonne performance de SPEX pour le mode fin d'aérosols, accompagnée de la plus faible sensibilité des mesures NanoCarb au mode fin. Quant aux DOFs du mode grossier, ils sont le résultats de la moins bonne performance de SPEXone ainsi que de la plus forte sensibilité des mesures NanoCarb pour ce mode : dans le cas avec-SPEX les DOFs pour le COD sont bien corrélés avec l'erreur a posteriori de SPEX pour le COD (voir 4.10). Par ailleurs, dans les situations où les performances de SPEXone pour les modes grossier et fin sont identiques, pour des albédos de sol nu ou de végétation avec des SZAs élevés, les DOFs du COD restent supérieurs à ceux du FOD, soulignant ainsi d'autant plus la forte sensibilité des mesures NanoCarb au mode grossier. Pour les faibles valeurs de SZA dans les situations avec un albédo désertique, où les performances de SPEXone sont les moins bonnes avec de larges incertitudes restantes pour le mode grossier, les DOFs du COD sont élevés. Cela signifie que les mesures de NanoCarb peuvent contribuer à contraindre les aérosols de mode grossier pour les situations où la performance de SPEXone est la moins bonne. Finalement, la fraction de l'information apportée par les mesures NanoCarb qui n'est plus utilisée pour contraindre les paramètres aérosols, grâce à SPEXone, aide à mieux contraindre les autres variables géophysiques. On note ainsi que les DOFs de la pression de surface et des gaz à effet de serre sont supérieurs pour le scénario avec-SPEX comparé au scénario sans-SPEX. Cette évolution des DOFs entre les deux scénarios illustre un *entremêlement* de l'information géophysique entre ces dernières variables et les paramètres liés aux aérosols, dans les interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb.

Sensibilités verticales La sensibilité verticale de la colonne totale de CO_2 (notée AK, pour *column Averaging Kernel*) montre les couches atmosphériques qui contribuent le plus à l'information sur le CO_2 contenue dans la mesure. Typiquement, le rayonnement proche infrarouge est sensible à toute l'épaisseur de l'atmosphère avec des AKs qui atteignent leur maximum à proximité de la surface et décroissent à mesure que l'altitude augmente à partir de la moyenne troposphère (par exemple Boesch et al., 2011). La figure 4.12 présente les AKs des X_{CO_2} estimés à partir des mesures NanoCarb pour tous les modèles d'albédo et les valeurs de SZA, ainsi que pour les valeurs minimale (haut) et maximale (bas) d'épaisseur optique d'aérosols totale. On y constate qu'à l'image des missions proche infrarouge usuelles, les colonnes estimées à partir des mesures de NanoCarb sont sensibles à toutes les couches de l'atmosphère. De plus, les AKs de NanoCarb, obtenus pour la valeur minimale d'épaisseur optique d'aérosols totale, se comparent de manière satisfaisante avec les AKs produits par

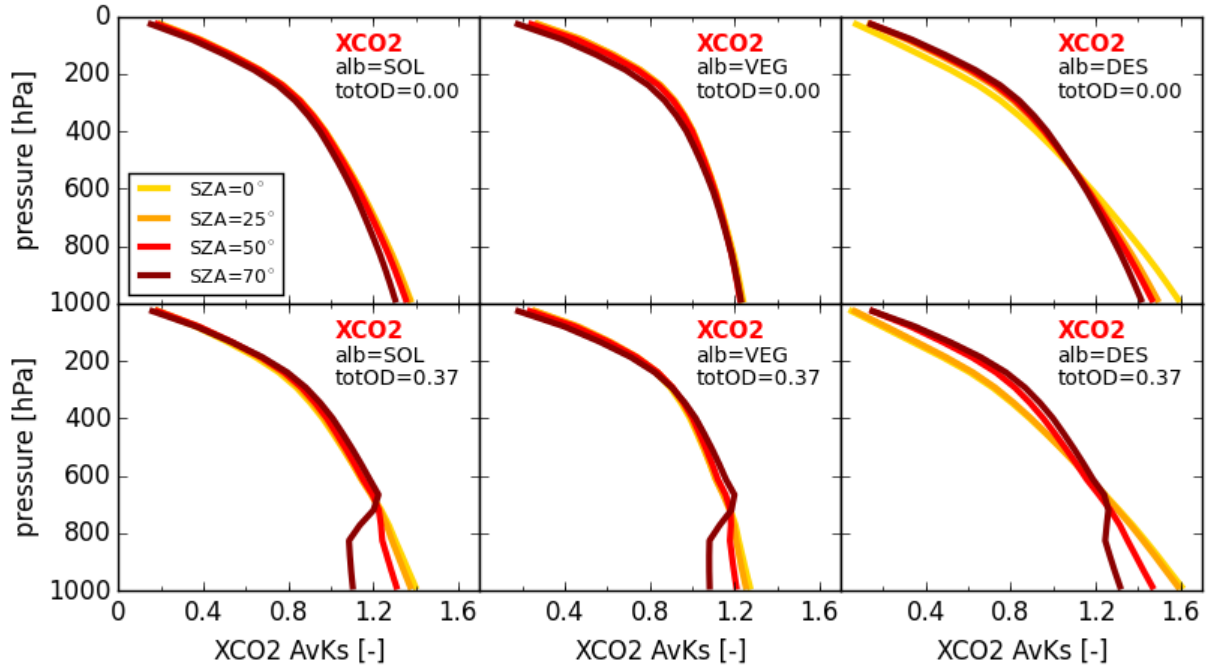


FIGURE 4.12 – Sensibilités verticales (*column averaging kernels*) du X_{CO_2} estimé à partir des mesures NanoCarb, moyennées sur les 23 pixels pour lesquels les estimations sont réalisées exactement. On les montre pour les trois modèles d'albédo : sol nu (gauche), végétation (milieu) et désert (droite), pour toutes les valeurs de SZA (échelle de couleurs) et pour les valeurs minimale (haut) et maximale (bas) d'épaisseur optique d'aérosols explorées.

l'algorithme WFM-DOAS en inversant un facteur multiplicatif de concentration de CO_2 à partir des mesures de l'instrument basse-résolution SCIAMACHY (Bovensmann et al., 1999; Buchwitz et al., 2005). Concernant les AKs de NanoCarb obtenus pour les plus fortes valeurs d'épaisseur optique totale, on constate une baisse de sensibilité dans les couches contenant les aérosols, particulièrement aux forts SZAs. Bien que la comparaison soit difficile du fait de mesures et de configurations d'inversion radicalement différentes, un tel comportement se retrouve pour les AKs obtenus à partir des mesures d'OCO-2 (Boesch et al., 2011).

4.4.2 Entremêlement de l'information géophysique dans la mesure NanoCarb

L'utilisation d'un facteur multiplicatif du profil de CO_2 ou de CH_4 dans le vecteur d'état a l'avantage de fixer une limite supérieure de 1.0 aux DOFs liés à ces paramètres. Si cette limite était atteinte pour tous les paramètres du vecteur d'état utilisé ici par 5AI, avec une matrice *averaging kernel* A égale à la matrice unité, cela signifierait que toutes les variables géophysiques peuvent être estimées de manière indépendantes les unes des autres. Ce n'est cependant pas le cas ici, comme on peut le voir sur la figure 4.11 : on peut noter que les DOFs

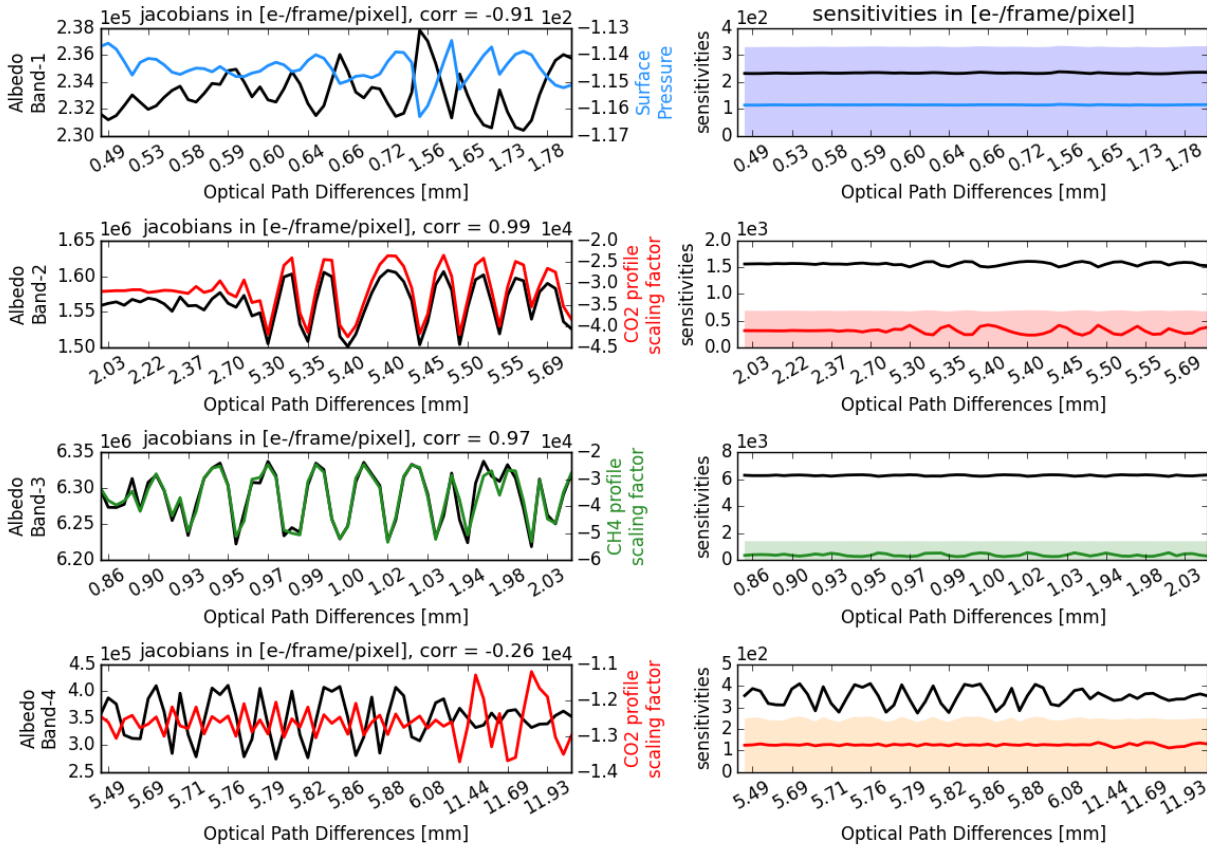


FIGURE 4.13 – Jacobiens bruts (gauche) et sensibilités (droite) pour les quatre bandes spectrales considérées par NanoCarb (de haut en bas). Les Jacobiens et sensibilités relatifs à l’albédo, à la **pression de surface**, au **CO₂** et au **CH₄** sont donnés en **noir**, **bleu**, **rouge** et **vert**, respectivement. Les sensibilités représentées à droite correspondent à une variation de 0.001 d’albédo, à une variation d’1 hPa de pression de surface et de -1% pour les colonnes de CO₂ et de CH₄. Le niveau du bruit instrumental pour un pixel du FOV de NanoCarb est donné en fond coloré.

des paramètres liés à CO₂ ou CH₄ n’atteignent pas 1.0. L’estimation de ces paramètres est donc corrélée à celles d’autres variables géophysiques.

Une façon d’identifier les principaux entremêlements d’information entre différentes variables géophysiques consiste à examiner la corrélation des Jacobiens ou des sensibilités entre ces variables. En effet, si les Jacobiens de deux variables sont corrélés, leurs impacts respectifs sur la mesure deviennent moins discernables pour l’algorithme d’estimation qui risque de fournir des résultats corrélés pour ces variables. En plus de l’entremêlement déjà identifié entre les informations sur les gaz atmosphériques et les aérosols (on a des DOFs plus élevés dans le scénario avec-SPEX pour les paramètres H₂O, CO₂ et CH₄, comparé à sans-SPEX), on peut noter un entremêlement des informations entre les gaz atmosphériques et les albé-

dos des bandes. La figure 4.13 compare les Jacobiens et sensibilités à ces variables pour les quatre bandes spectrales de NanoCarb.

On peut y constater que les Jacobiens relatifs à la pression de surface, au CO_2 et au CH_4 présentent d’abord des impacts sur le niveau moyen des mesures NanoCarb, de quelques ordres de grandeur inférieurs à celui du Jacobien relatif à l’albédo, selon les bandes. Ces Jacobiens agissent également tous sur l’amplitude des franges, avec des impacts fortement corrélés entre les Jacobiens albédo et pression de surface, CO_2 et CH_4 , sur les bandes 1, 2 et 3, respectivement. De telles similarités entre Jacobiens rend les impacts de perturbations des variables géophysiques sur la mesure NanoCarb indiscernables entre eux. Par ailleurs, bien que les Jacobiens CO_2 et CH_4 modifient fortement le niveau des franges par rapport aux Jacobiens liés à l’albédo, une forte perturbation des colonnes de CO_2 et CH_4 est nécessaire pour que l’évolution des franges devienne significative par rapport au bruit. Ainsi, vis-à-vis du niveau de bruit instrumental, l’impact des perturbations de paramètres géophysiques sur le niveau moyen de l’interférogramme est plus significatif que celui sur l’amplitude des franges. Cela favorise donc l’albédo dans les estimations, auquel le niveau moyen de l’interférogramme est plus sensible qu’au CO_2 ou CH_4 , laissant alors les DOFs pour le CO_2 et CH_4 inférieurs à 1.0. Concernant la pression de surface dans la bande 1, on peut constater que les sensibilités à l’évolution de l’albédo ou de la pression de surface sont indiscernables, presque sans aucun impact sur l’amplitude des franges, avec un plus fort impact de l’albédo sur le niveau moyen de l’interférogramme. Ainsi, seul l’albédo est retrouvé depuis les mesures de la bande 1 de NanoCarb, avec des DOFs très faibles pour la pression de surface. Une explication possible à cette faible sensibilité à la pression de surface est l’hypothèse de dimensionnement qui a étudié une perturbation de 10% de la colonne d’ O_2 alors que l’on cherche à être sensible à une perturbation de l’ordre d’1 hPa, environ 100 fois plus faible que celle utilisée pour le dimensionnement. Finalement, la 4^{ème} bande de NanoCarb, qui observe la bande dite « CO_2 fort », montre un comportement différent, où une perturbation de la colonne de CO_2 n’a que peu d’impact sur l’amplitude des franges. Il est vraisemblable que ce comportement particulier s’explique par la saturation des raies de CO_2 dans cette bande.

Ainsi, l’estimation de la colonne totale de CO_2 , de CH_4 ou de la pression de surface à partir des mesures de NanoCarb apparaît corrélée aux estimations des valeurs d’albédo. Un dernier test permet de s’en assurer : on obtient des DOFs de 1.0 pour le CO_2 lorsqu’on retire les paramètres liés aux albédo du vecteur d’état. Les DOFs relatifs aux CH_4 se rapprochent seulement de 1.0, car un entremêlement de l’information sur le CH_4 et la vapeur d’eau apparaît également.

4.4.3 Effets dans le champ de vue et limites de conception

La figure 4.14 reproduit la figure 4.11 cette fois-ci en y traçant, pour le CO_2 seul, les degrés de libertés obtenus pour différentes valeurs de θ , l’angle décrivant la distance angulaire entre le centre du FOV et le pixel considéré. On y constate que la quantité d’information sur le CO_2 n’est pas uniforme dans le champ de vue : elle est comparable pour une large partie centrale du FOV ($\theta \lesssim 6^\circ$) et diminue ensuite pour les larges valeurs de θ , à mesure que l’on s’éloigne du centre du FOV. Il est nécessaire de s’attarder un instant sur l’origine de cette

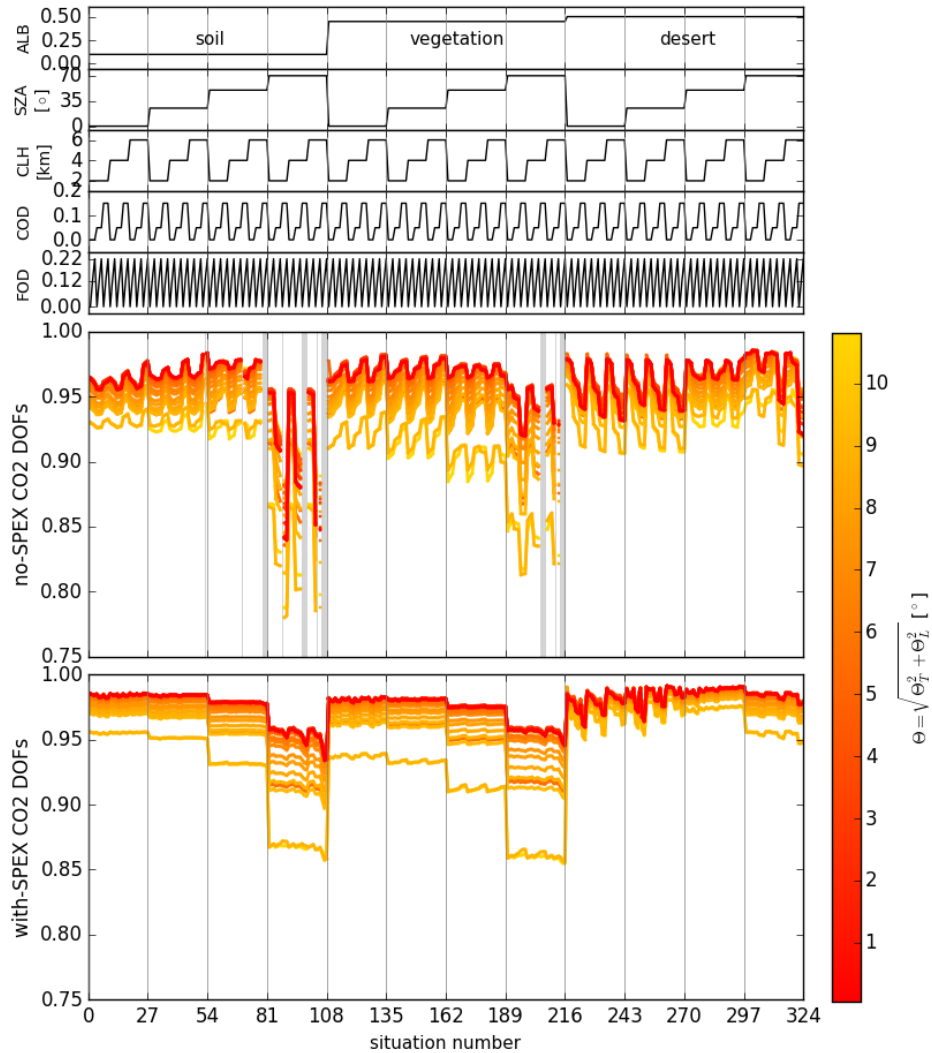


FIGURE 4.14 – Degrés de liberté pour l’élément CO_2 du vecteur d’état, tracés pour les pixels sélectionnés dans le FOV avec une échelle de couleur illustrant leur distance au centre du FOV. Les degrés de liberté sont donnés pour les scénarios de conception sans-SPEX (milieu) et avec-SPEX (bas). Les cinq panneaux du haut de la figure donnent les valeurs des paramètres ALB (à $0.7 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent chacune des 324 situations. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l’estimation optimale n’a pas convergé de manière satisfaisante.

dépendance de la sensibilité au CO_2 à la position dans le champ de vue.

Celle-ci trouve son origine dans le décalage du nombre d’onde central du filtre à bande étroite avec l’angle θ . Sur sa partie gauche, la figure 4.15 illustre pour la bande CO_2 faible de NanoCarb la localisation du filtre pour $\theta = 0^\circ$ et pour $\theta = 10.8^\circ$, l’angle maximum atteint dans les coins du FOV. Au centre de l’imageur, le filtre sélectionne principalement la

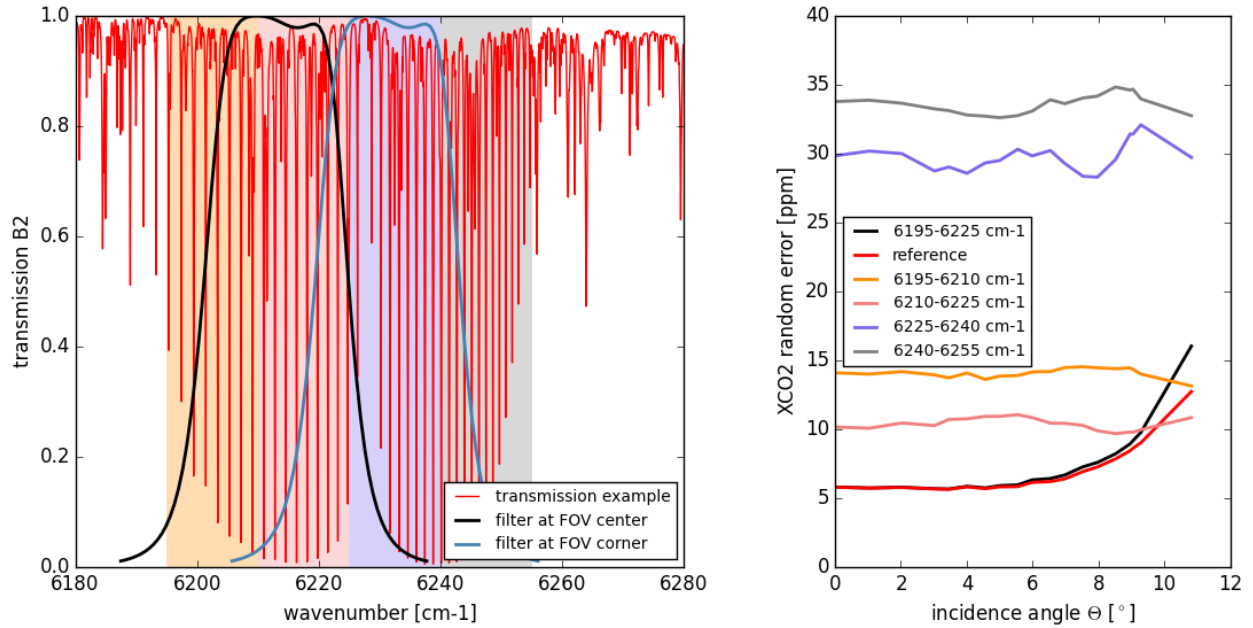


FIGURE 4.15 – Bande d’absorption du CO_2 faible (gauche), mesurée par la deuxième bande de NanoCarb avec les filtres à bande étroite correspondants au centre du champ de vue (**noir**) et à un coin du champ de vue (**bleu acier**). On distingue par ailleurs quatre intervalles spectraux larges de 15 cm^{-1} sur cette bande : les deux premiers entre $6195\text{-}6210$ et $6210\text{-}6225 \text{ cm}^{-1}$ couvrent la branche P de la bande d’absorption, tandis que les deux suivants $6225\text{-}6240$ et $6240\text{-}6255$ couvrent principalement la branche R. Erreur aléatoire d’estimation du X_{CO_2} en fonction de la position θ du pixel dans le FOV, pour différents cas – dont certains fictifs – de spectroscopie du CO_2 (droite, voir texte).

branche P de la bande d’absorption du CO_2 , et se décale vers la zone de faible absorption laissée par la branche Q ici absente, puis vers la branche R, tandis que l’angle θ augmente. Or, la sélection des OPDs des 60 interféromètres de Fabry-Perot utilisés dans cette bande a été menée pour la position $\theta = 0^\circ$ qui sélectionne principalement la branche P. Comme la transmission T_{FP} des interféromètres de Fabry-Perot (voir équation 4.2) peut être vue comme un filtre en fréquence des structures spectrales du spectre, ces OPDs ont été adaptées pour un espacement des raies d’absorption du CO_2 plutôt spécifique à la branche P, et différent de celui de la branche R (voir partie 2.3.1).

Pour tester cette affirmation, il est possible de tirer avantage du découpage des atlas utilisés par 4A/OP en paquets élémentaires de 15 cm^{-1} . Dans le cadre d’une configuration d’inversion 5AI simplifiée, ne reposant que sur la bande 2 de NanoCarb, avec un vecteur d’état comprenant seulement un facteur multiplicatif du profil de concentration de CO_2 et l’albédo de la bande, on se propose ici d’examiner la dépendance angulaire en θ de l’erreur aléatoire d’estimation du X_{CO_2} pour différents cas de spectroscopies, dont certaines fictives :

- On conserve les paramètres spectroscopiques de référence (en **rouge**).

- On remplace les paramètres spectroscopiques compris entre 6225-6255 cm^{-1} par ceux compris entre 6195-6225 cm^{-1} : la branche P est dupliquée (en **noir**).
- On remplace les paramètres spectroscopiques compris entre 6195-6255 cm^{-1} par ceux compris entre 6195-6210 cm^{-1} . La première partie de la branche P est utilisée quatre fois (en **orange**).
- On remplace les paramètres spectroscopiques compris entre 6195-6255 cm^{-1} par ceux compris entre 6210-6225 cm^{-1} . La deuxième partie de la branche P est utilisée quatre fois (en **rose**).
- On remplace les paramètres spectroscopiques compris entre 6195-6255 cm^{-1} par ceux compris entre 6225-6240 cm^{-1} . La première partie de la branche R est utilisée quatre fois (en **bleu**).
- On remplace les paramètres spectroscopiques compris entre 6195-6255 cm^{-1} par ceux compris entre 6240-6255 cm^{-1} . La deuxième partie de la branche R est utilisée quatre fois (en **gris**).

La dépendance en θ pour l'erreur aléatoire d'estimation du X_{CO_2} est donnée sur la partie droite de la figure 4.15. Dans les quatre cas où seul un intervalle de paramètres spectroscopiques de 15 cm^{-1} est utilisé pour remplacer tous les autres, on peut constater que la forte monotonie de la dépendance en θ de l'erreur aléatoire disparaît. À partir d'une incertitude a priori proche de 39.5 ppm, on obtient les incertitudes a posteriori les plus faibles pour les cas où l'intervalle de paramètres spectroscopiques de 15 cm^{-1} utilisé provient de la branche P (DOFs aux alentours de 0.9 dans ces cas), tandis que l'on obtient les incertitudes les plus élevées lorsque les intervalles utilisés proviennent de la branche R (DOFs aux alentours de 0.3-0.5 dans ces cas). Ces résultats montrent que la sélection actuelle des OPDs pour la bande 2 de NanoCarb est préférentiellement sensible à l'espacement des raies d'absorption du CO_2 de la branche P, mais pas totalement insensible à celui des raies de la branche R non plus car l'erreur aléatoire pour ces cas ne correspond pas parfaitement à l'incertitude a priori (les DOFs ne sont pas tout à fait nuls). La meilleure performance – qui montre une dépendance claire en θ – est celle obtenue par la spectroscopie de référence, illustrant que toute la bande contribue à la sensibilité de la mesure au CO_2 , même si la branche P contribue le plus.

Ainsi, le décalage du filtre à bande étroite avec θ éloigne la portion sélectionnée du spectre de la branche P, pour laquelle la sélection des OPDs est optimale, et les mesures NanoCarb deviennent alors moins sensibles au CO_2 , provoquant une augmentation de l'erreur aléatoire. Concrètement, la figure 4.16 illustre l'impact de l'angle θ sur le Jacobien lié au facteur multiplicatif du profil de CO_2 . On constate qu'ils sont relativement identiques entre 0° et 6° environ (même impact sur le niveau moyen de l'interférogramme tronqué et même amplitude d'évolution des franges). À partir de $\theta = 6^\circ$, l'impact sur le niveau moyen de l'interférogramme augmente en valeur absolue tandis que l'impact sur l'évolution des franges diminue, avec θ qui continue à augmenter. L'ampleur de son impact sur le niveau des franges diminuant, le Jacobien CO_2 se distingue alors moins de celui de l'albédo : la mesure portant une information moins discernable sur le CO_2 , l'erreur aléatoire augmente.

Le décalage des filtres à bande étroite pour les quatre bandes spectrales de NanoCarb est illustré sur la figure 4.17. Celui-ci est particulièrement conséquent pour la bande 1 où le filtre

sort complètement de la bande A de l'O₂ pour les plus grandes valeurs de θ . Surprenante, cette perte de sensibilité aux angles extrêmes est le fruit d'évolutions parallèles, mais étudiées séparément, entre les deuxième et troisième itérations du dimensionnement de NanoCarb : mise à jour de paramètres optiques vers des valeurs plus réalistes (grandissement du système afocal, indice effectif du filtre) et élargissement de la fauchée pour atteindre un objectif de 200 km.

Pour un objectif de précision et un point de fonctionnement et d'optimisation donnés, l'évolution dans le champ de vue des sensibilités aux variables géophysiques ciblées par SCARBO est déterminée par le décalage en nombre d'onde du filtre à bande étroite, et a un impact significatif sur la fauchée réellement atteignable par le concept. Les choix technologiques qui déterminent les paramètres du système optique, les objectifs sur la largeur de la fauchée et la sélection du point de fonctionnement doivent être déterminés et évalués ensemble afin de s'assurer que tous permettent effectivement d'atteindre la précision souhaitée pour toute la fauchée.

Concernant cette étude de performance, on se restreint pour la suite à une position angulaire $|\theta_T|$ dans la fauchée inférieure à 6° . Cela permet ainsi d'écarter les résultats de performance qui souffrent d'être trop loin du point de fonctionnement pour lequel la version actuelle du concept a été optimisée.

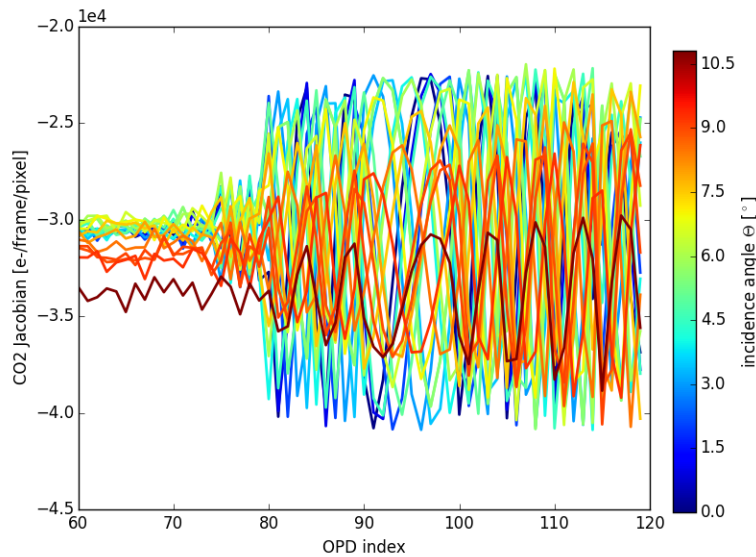


FIGURE 4.16 – Évolution du Jacobien du facteur multiplicatif du profil de CO₂ pour la bande 2 de NanoCarb en fonction de l'angle d'incidence θ de la lumière par rapport au filtre.

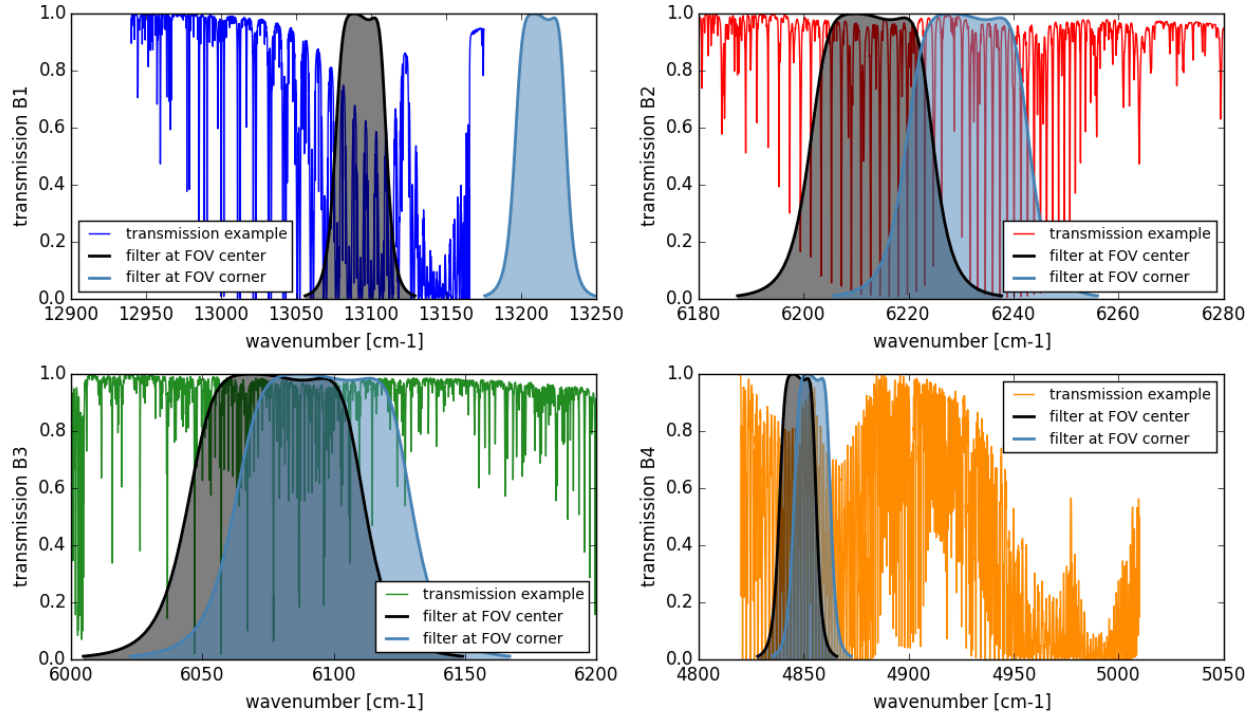


FIGURE 4.17 – Localisation des filtres à bande étroite pour les quatre bandes spectrales considérées dans la mesure NanoCarb, pour le pixel au centre du FOV et les pixels dans les coins extrêmes du FOV.

4.5 Erreurs systématiques et aléatoires pour l'estimation de X_{CO_2}

Après avoir examiné le contenu en information des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb, et mis en lumière les limites à une information indépendante sur la colonne totale de CO_2 , on montre maintenant les erreurs systématiques et aléatoires d'estimation du X_{CO_2} obtenues pour les 324 situations d'observation atmosphérique. On considèrera d'abord les résultats du scénario de conception sans-SPEX, puis ceux du scénario avec-SPEX. Cela permettra de mettre en lumière les avantages de l'utilisation conjointe des instruments NanoCarb et SPEXone.

Les résultats présentés dans cette section correspondent à l'étape 2b de l'approche générale résumée sur la figure 4.6.

4.5.1 Résultats sans SPEXone

La figure 4.18 montre, pour les 324 situations d'observation atmosphériques considérées et toutes les positions dans la fauchée définies par $|\theta_T| < 6^\circ$, les erreurs systématiques (milieu) et aléatoires (bas) d'estimation du X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb, pour le scénario de

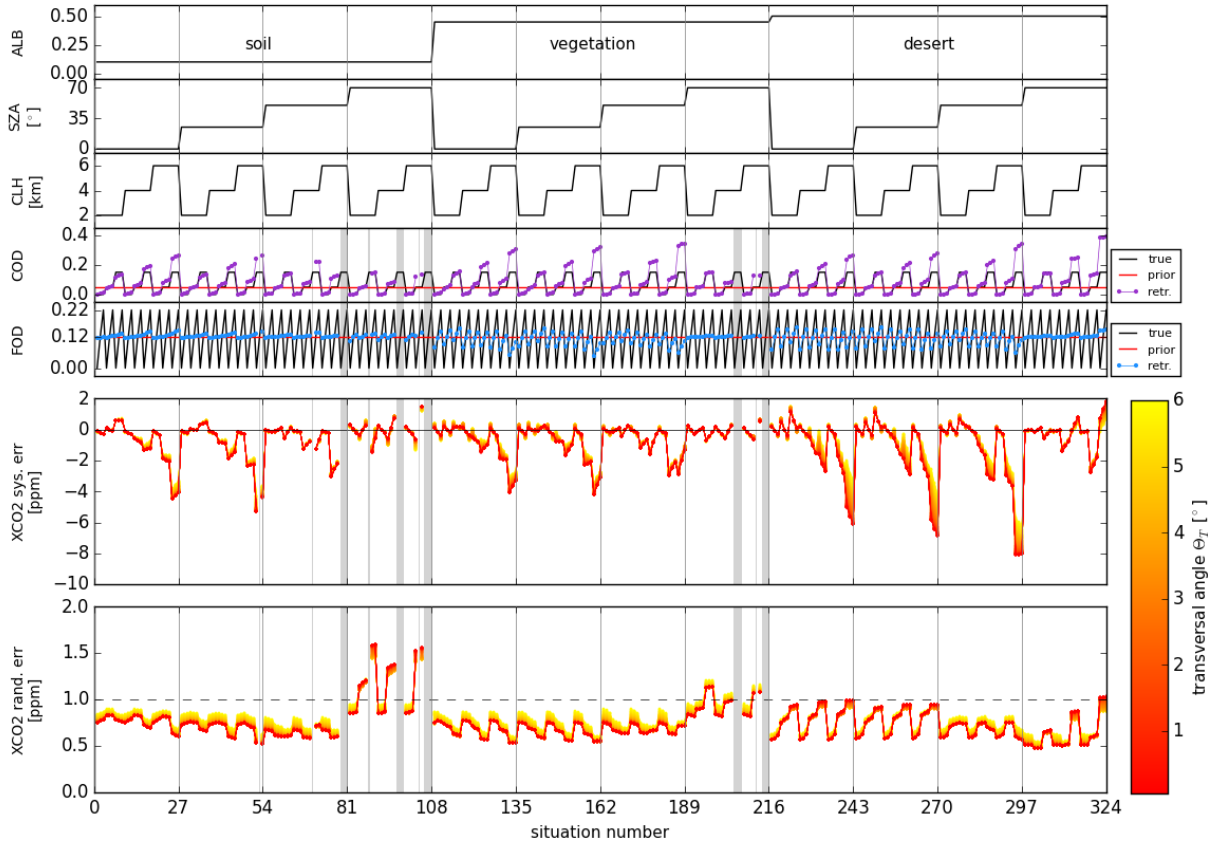


FIGURE 4.18 – Erreurs systématiques (milieu) et aléatoires (bas) pour l’estimation du X_{CO_2} obtenues à partir des mesures NanoCarb pour les 324 situations d’observation atmosphérique, dans le cas du scénario de conception sans-SPEX. Les résultats sont tracés en fonction du numéro de la situation : les cinq panneaux du haut rappellent les valeurs des paramètres ALB ($0.7 \mu m$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent les situations. Les valeurs a priori et estimées des paramètres COD et FOD sont également données. La dépendance des résultats selon la position transversale $|\theta_T|$ dans la fauchée est donnée par l’échelle de couleurs : les couleurs plus foncées signifient une valeur de $|\theta_T|$ plus proche de zéro. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l’estimation optimale n’a pas convergé de manière satisfaisante.

conception sans-SPEX. Comme pour la figure 4.10, les 5 panneaux du haut rappellent les valeurs des paramètres ALB, SZA, CLH, COD et FOD qui définissent les situations, et les valeurs a priori et estimées sont également données pour COD et FOD. La grande majorité des estimations réalisées pour ce scénario de conception convergent de manière satisfaisante, cependant certaines situations restent difficiles à inverser, lorsque le COD ou CLH sont loins de leur a priori, particulièrement à fort SZA et pour les deux modèles d’albédo les plus sombres. Les situations pour lesquelles l’estimation n’a pas convergé de manière satisfaisante sont désignées par une zone grisée.

Ici, dans le scénario sans-SPEX, les erreurs systématiques proviennent de la méconnaissance a priori des paramètres liés aux aérosols : l'épaisseur optique des couches ou bien l'altitude de la couche de mode grossier. Parmi les particules diffusantes, les mesures de NanoCarb sont sensibles au mode grossier dont on arrive à estimer l'épaisseur optique quand l'état vrai n'est pas trop loin de l'état a priori. Les épaisseurs optiques de mode fin diffèrent rarement et peu de l'a priori, montrant que les estimations menées ici sont peu sensibles à ce mode. Ici, les erreurs systématiques d'estimation du X_{CO_2} peuvent atteindre 8 ppm en valeur absolue, ce qui correspond à environ 10 fois l'erreur aléatoire. Ces erreurs systématiques sont principalement corrélées aux erreurs d'estimation de COD qui sont elles-mêmes corrélées avec la méconnaissance a priori de l'altitude de la couche d'aérosols de mode grossier (fixée a priori à 2 km et non inversée) ainsi qu'à l'épaisseur optique de la couche d'aérosols de mode fin. Les maximums atteints (en valeur absolue) par l'erreur systématique d'estimation du X_{CO_2} évoluent également avec le SZA : ils augmentent entre 0° et 25° (ou 50° pour l'albédo désertique) pour diminuer ensuite dans le cas $\text{SZA} = 70^\circ$. Les fonctions de phase asymétriques issues des propriétés optiques des aérosols peuvent vraisemblablement contribuer à expliquer ce comportement particulier. Finalement, la dépendance des résultats dans la fauchée est donnée par l'échelle de couleurs : elle est le plus visible pour les fortes valeurs d'erreur systématique, dans les situations où le COD vrai est loin de l'a priori.

Les erreurs aléatoires obtenues pour le scénario sans-SPEX, pour les positions $|\theta_T| < 6^\circ$ dans la fauchée atteignent voire dépassent l'objectif de précision d'1 ppm pour les valeurs de SZA inférieures ou égales à 50° , dans le cas des albédos représentatifs de végétation ou de sol nu. Dans le cas d'une surface désertique, l'objectif d'1 ppm est atteint voire dépassé pour toutes les valeurs de SZA. Dans le formalisme de l'estimation optimale, l'erreur aléatoire sur un paramètre du vecteur d'état est corrélée avec l'incertitude a posteriori : lorsqu'il y a plus d'information apportée par la mesure sur une variable géophysique, son erreur aléatoire diminue. Ainsi, comme on a pu le constater pour les DOFs sur la figure 4.11, l'erreur aléatoire d'estimation du X_{CO_2} évolue principalement avec le modèle d'albédo, le COD et le SZA. La plupart des positions transversales $|\theta_T|$ dans la fauchée présentent une erreur aléatoire similaire, sauf lorsque l'on commence à s'approcher de 6° (voir partie 4.4.3).

4.5.2 Résultats avec SPEXone

Comme détaillé dans le tableau 4.3, le profil vertical de particules diffusantes a priori est exactement identique au profil vrai synthétique dans le scénario de conception avec-SPEX. Cette nouvelle configuration de 5AI permet de simuler la meilleure connaissance des paramètres associés aux aérosols qui est apportée par le traitement des mesures de l'instrument SPEXone. Du fait de cette très forte hypothèse sur l'exactitude de SPEXone, les résultats de performance L2 n'ont plus d'erreur systématique. Afin d'étudier la sensibilité de l'erreur systématique d'estimation du X_{CO_2} , on utilise la matrice *averaging kernel* A pour propager aux autres variables du vecteur d'état une méconnaissance a priori des paramètres liés aux aérosols. Avec les notations du chapitre 3, on a :

$$d\hat{x} = \frac{\partial \hat{x}}{\partial x} dx = A [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \delta_{\text{COD}}, \delta_{\text{FOD}}]^T \quad (4.4)$$

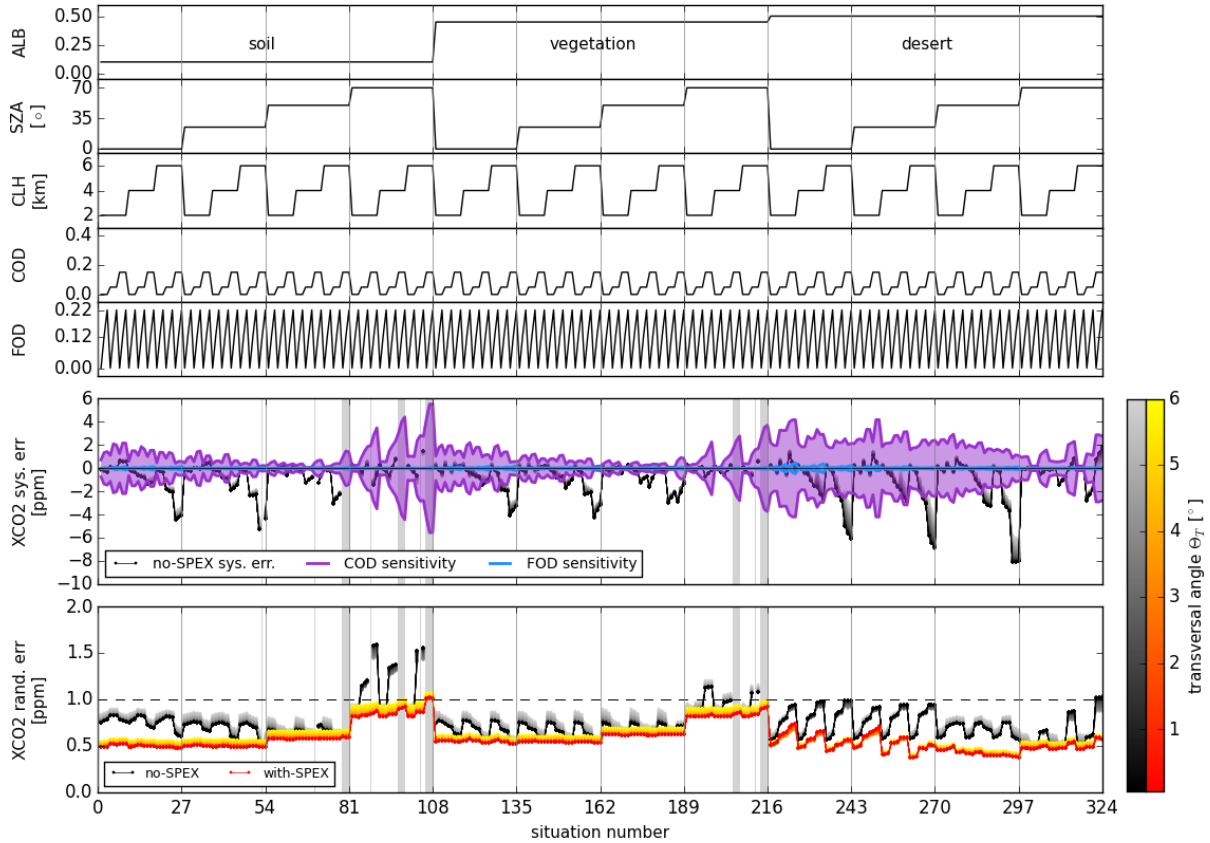


FIGURE 4.19 – Sensibilités de NanoCarb à la méconnaissance a priori des paramètres COD et FOD (milieu) et aléatoires (bas) pour l’estimation du X_{CO_2} obtenues à partir des mesures NanoCarb pour les 324 situations d’observation atmosphérique, dans le cas du scénario de conception avec-SPEX. Les résultats sont tracés en fonction du numéro de la situation : les cinq panneaux du haut rappellent les valeurs des paramètres ALB ($0.7 \mu m$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent les situations. Les valeurs a priori et estimées des paramètres COD et FOD sont également données. La dépendance des résultats selon la position transversale $|\theta_T|$ dans la fauchée est donnée par l’échelle de couleurs : les couleurs plus foncées signifient une valeur de $|\theta_T|$ plus proche de zéro. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l’estimation optimale n’a pas convergé de manière satisfaisante. Les résultats du scénario de conception sans-SPEX sont reproduits avec une échelle gris-noire pour faciliter la comparaison des deux scénarios.

avec δ_{COD} et δ_{FOD} des perturbations différentielles des paramètres COD et FOD, respectivement.

La figure 4.19 est similaire à la figure 4.18 mais y ajoute les résultats de performance L2 obtenus pour le scénario de conception avec-SPEX. À la place d’une erreur systématique, elle présente la sensibilité de l’erreur systématique d’estimation du X_{CO_2} à la perturbation des paramètres COD et FOD correspondant à leur incertitude σ déterminée par l’analyse

des mesures de SPEXone : $\delta_{\text{COD}} = \pm\sigma_{\text{COD}}$ et $\delta_{\text{FOD}} = \pm\sigma_{\text{FOD}}$. Ce test de sensibilité est conservatif selon différentes perspectives. D’abord, la perturbation des paramètres COD et FOD par l’erreur aléatoire a posteriori issue du traitement des mesures de SPEXone est au moins deux fois plus importante que les erreurs systématiques sur l’estimation de l’épaisseur optique obtenues dans Hasekamp et al. (2019). Par ailleurs, la séparation des perturbations sur COD et FOD, comme présentée dans la figure 4.19, ne permet pas de prendre en compte une compensation partielle des erreurs entre ces deux paramètres qui pourrait réduire l’erreur systématique sur X_{CO_2} . La sensibilité de l’erreur systématique d’estimation du X_{CO_2} aux perturbations des paramètres COD et FOD est montrée pour les maxima et minima obtenus sur toute la partie centrale de la fauchée $|\theta_T| < 6^\circ$. Un biais sur le paramètre COD estimé à partir de SPEXone peut conduire à une erreur de ± 5.5 ppm sur le X_{CO_2} estimé à partir de NanoCarb. Il est intéressant de noter que malgré une précision de SPEXone similaire pour $\text{SZA} = 50^\circ$ et $\text{SZA} = 70^\circ$, sur tous les modèles d’albédo, les perturbations sur le COD ont un plus grand impact à $\text{SZA} = 70^\circ$ qu’à $\text{SZA} = 50^\circ$. Cela souligne la sensibilité particulière des mesures NanoCarb au mode grossier d’aérosols, particulièrement aux fortes valeurs de SZA. La sensibilité aux imprécisions sur le COD touche aussi les situations à l’albédo désertique avec de faibles valeurs de SZA, où la performance de SPEXone est la moins grande. Concernant le mode fin d’aérosols, un biais du paramètre FOD estimé à partir de SPEXone peut conduire à une erreur de ± 0.4 ppm sur le X_{CO_2} estimé à partir de NanoCarb. Ces sensibilités aux perturbations de FOD sont considérablement plus faibles grâce à la meilleure performance de SPEXone pour le mode fin d’aérosols, ainsi que grâce au plus faible impact du mode fin sur les mesures NanoCarb.

En comparant les résultats entre les scénarios sans-SPEX et avec-SPEX, il est possible de conclure que l’information sur les aérosols apportée par SPEXone a le potentiel de réduire significativement les erreurs systématiques d’estimation du X_{CO_2} causées par des aérosols de mode fin. Concernant le mode grossier, l’apport de SPEXone est plus nuancé. D’une part, SPEXone montre sa meilleure performance pour COD dans les situations où les estimations de X_{CO_2} réalisées pour le scénario sans-SPEX sont le plus touchées par la méconnaissance de COD, aux SZAs élevés pour de fortes valeurs de COD. Symétriquement, les erreurs systématiques du scénario sans-SPEX sont plus faibles que l’impact de l’incertitude sur COD issue de SPEXone dans les situations avec de faibles SZAs. Ainsi, la performance de SPEXone pour le COD apparaît complémentaire de la sensibilité à la méconnaissance du COD des estimations de X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb. Considérant une situation typiquement européenne avec un albédo de végétation et un $\text{SZA} = 50^\circ$, l’information apportée par les mesures de SPEXone est critique pour réduire les erreurs d’estimation du X_{CO_2} causée par les aérosols de mode grossier. Cependant, les situations dans lesquelles les estimations de COD et FOD à partir des mesures de SPEXone sont moins précises peuvent rester difficile à traiter. Ce serait par exemple le cas lors de contaminations passagères par des aérosols de mode grossier au-dessus d’un albédo désertique éclairé par un faible SZA.

La figure 4.19 montre aussi les erreurs aléatoires d’estimation du X_{CO_2} pour le scénario de conception avec-SPEX : elles sont plus faibles que celles obtenues pour le scénario sans-SPEX. En effet, du fait de l’entremêlement des informations CO_2 et aérosols mis en évidence

dans la partie 4.4.1, la meilleure contrainte des paramètres aérosols apportée par l'instrument SPEXone permet de consacrer plus d'information apportée par la mesure NanoCarb à l'estimation des paramètres liés aux gaz traces. Ainsi, pour le scénario de conception avec-SPEX, l'objectif de précision d'1 ppm pour l'estimation de X_{CO_2} est atteint voire dépassé pour presque toutes les situations.

4.6 Paramétrisation de la performance du concept SCARBO

Afin de généraliser l'évaluation de la performance L2 du concept SCARBO produite pour 324 situations d'observation atmosphérique, et présentée dans la section précédente, on poursuit la démarche proposée par Buchwitz et al. (2013) en paramétrisant les résultats obtenus en fonction des paramètres sélectionnés pour cette étude. Cette dernière étape correspond à l'étape 3 de l'approche générale résumée sur la figure 4.6.

On présentera d'abord la paramétrisation par régression linéaire de la performance du concept et l'erreur d'approximation associée, évaluée sur les 324 situations sélectionnées pour cette étude. Finalement, on illustrera l'application de cette paramétrisation de la performance sur la journée du 1^{er} juillet 2015 au-dessus de l'Europe.

4.6.1 Paramétrisation par régression linéaire

La paramétrisation par régression linéaire proposée ici consiste à déterminer les coefficients c et a_i tels que l'on puisse exprimer une quantité décrivant la performance de SCARBO, arbitrairement notée Y , comme une combinaison linéaire de paramètres X_i issus des paramètres explorés pour l'étude de performance :

$$Y = c + \sum_{i=1}^n a_i X_i \quad (4.5)$$

avec Y , une quantité comme l'erreur systématique, aléatoire ou la sensibilité verticale pour une couche de l'atmosphère, à paramétriser comme une fonction de n paramètres (linéaires et non linéaires) déterminés de manière heuristique, et exprimés comme des combinaisons des paramètres ALB, SZA, CLH, COD et FOD auxquels s'ajoute θ_T qui décrit la position dans la fauchée. En considérant ALB_NIR, ALB_SWIR-1 et ALB_SWIR-2 pour noter les valeurs des modèles d'albédo à 0.7, 1.6 et 2.0 μm , respectivement, le tableau 4.4 liste les paramètres X_i utilisés pour les paramétrisations des erreurs systématique et aléatoire d'estimation du X_{CO_2} , ainsi que pour celles de la sensibilité verticale (AK), par couche atmosphérique.

La figure 4.20 montre pour X_{CO_2} les résultats de la paramétrisation de la performance L2 pour les scénarios de conception sans-SPEX et avec-SPEX. Pour le scénario sans-SPEX, les résultats sont paramétrisés pour une épaisseur optique totale estimée $\text{COD} + \text{FOD} < 0.25$ afin d'émuler une sorte de filtre a posteriori qui pourrait être appliqué dans une chaîne de traitement opérationnelle. Pour les erreurs systématiques, la paramétrisation capture les

Paramètre	Définition du paramètre pour l'erreur systématique ($n = 9$)	Unité à utiliser
X_1	$1/\cos(\pi\text{SZA}/180)$	°
X_2	ALB_SWIR-2	-
X_3	$\log(\text{FOD})$	-
X_4	$\log(\text{COD})$	-
X_5	$\max(\text{CLH}, 2)$	km
X_6	$1/\cos(\pi\theta_T/180)$	°
X_7	$(X_5 - 2) \times X_4$	-
X_8	ALB_NIR	-
X_9	$X_6 \times X_4$	-
Paramètre	Définition du paramètre pour l'erreur aléatoire ($n = 9$)	Unité à utiliser
X_1	$1/\cos(\pi\text{SZA}/180)$	°
X_2	ALB_NIR	-
X_3	$(-\text{ALB_SWIR-2} + 0.2)$	-
X_4	$\log(\text{FOD})$	-
X_5	$\log(\text{COD})$	-
X_6	$1/\cos(\pi\theta_T/180)$	°
X_7	$X_6 \times X_6$	-
X_8	X_3/X_1	-
X_9	$X_1 \times X_6$	-
Paramètre	Définition du paramètre pour une valeur d'AK sur une couche ($n = 8$)	Unité à utiliser
X_1	$1/\cos(\pi\text{SZA}/180)$	°
X_2	ALB_NIR	-
X_3	ALB_SWIR-1	-
X_4	FOD	-
X_5	COD	-
X_6	$\max(\text{CLH}, 2)$	°
X_7	ALB_SWIR-2	-
X_8	$X_1 \times X_5$	-

TABLE 4.4 – Paramètres déterminés de manière heuristique et utilisés pour la paramétrisation de la performance L2 du concept proposé dans le cadre du projet SCARBO.

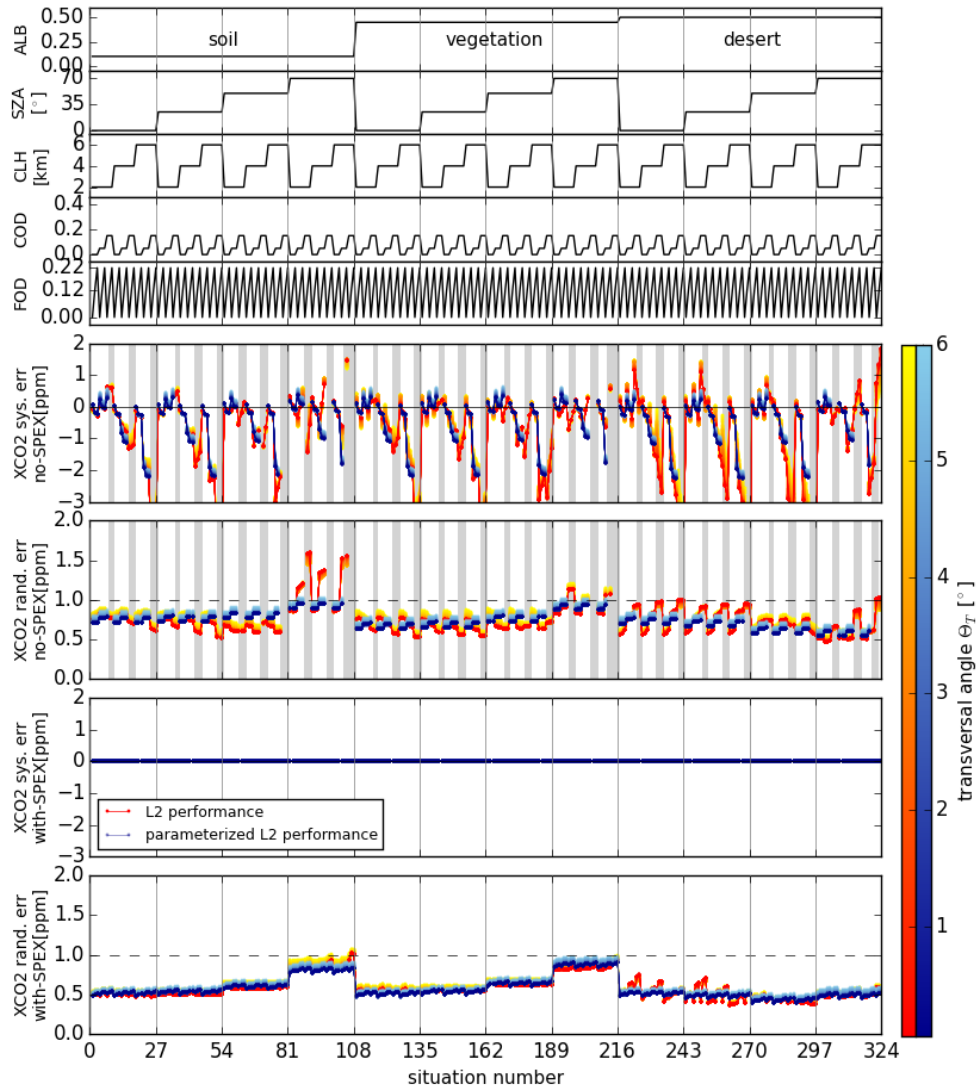


FIGURE 4.20 – Erreurs systématiques (6^{ème} et 8^{ème} panneaux) et aléatoires (7^{ème} et 9^{ème} panneaux) pour l’estimation du X_{CO_2} obtenues à partir des mesures NanoCarb pour les 324 situations d’observation atmosphérique, pour les scénarios de conception sans-SPEX (6^{ème} et 7^{ème} panneaux) et avec-SPEX (8^{ème} et 9^{ème} panneaux). Les résultats tracés en échelle de couleurs **rouge** sont ceux calculés exactement, tandis que ceux tracés en échelle de couleurs **bleue** sont ceux issus de la paramétrisation des performances L2. Les résultats sont tracés en fonction du numéro de la situation : les cinq panneaux du haut rappellent les valeurs des paramètres ALB ($0.7 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent les situations. Les valeurs a priori et estimées des paramètres COD et FOD sont également données. La dépendance des résultats selon la position transversale $|\theta_T|$ dans la fauchée est donnée par l’échelle de couleurs : les couleurs plus foncées signifient une valeur de $|\theta_T|$ plus proche de zéro. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l’estimation optimale n’a pas convergé de manière satisfaisante, ou les situations filtrées selon la valeur des COD et FOD.

tendances combinées liées aux paramètres COD, SZA et CLH, ainsi qu’une part de la dépendance en $|\theta_T|$. Concernant les erreurs aléatoires, la paramétrisation capture les tendances liées à l’albédo et au SZA (à l’exception du cas d’un albédo de sol nu pour $SZA = 70^\circ$), mais échoue à reproduire les tendances corrélées au COD pour les albédos représentatifs de sol nu ou de végétation, du fait de l’importance de cette tendance pour l’albédo désertique. La dépendance sur la position dans la fauchée est bien capturée. La paramétrisation pour le scénario de conception avec-SPEX est assez exacte et reproduit de manière satisfaisante la plupart des tendances dans les résultats de performance L2 (pour ce scénario on filtre tout de même les situations avec $COD < 0.6$ et $FOD < 0.6$).

Évaluée sur ces 324 situations, l’erreur d’approximation par la paramétrisation a une moyenne nulle, avec un écart-type de 0.36 ppm et de 0.11 ppm pour les erreurs systématiques et aléatoires dans le scénario sans-SPEX, et un écart-type de 0.05 ppm sur l’erreur aléatoire dans le scénario avec-SPEX. L’approximation de la sensibilité verticale par la paramétrisation fait une erreur par couche atmosphérique également nulle, avec un écart-type maximal de 0.04 sur toutes les couches.

4.6.2 Application de la paramétrisation : exemple du 1^{er} juillet 2015

L’application des paramétrisations générées précédemment nécessite de rassembler des jeux de données auxiliaires pour produire de larges cartes spatio-temporelles des cinq paramètres sélectionnés pour cette étude de performance : ALB (à $0.7 \mu\text{m}$, $1.6 \mu\text{m}$ et $2.0 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD. Dans le cadre du projet SCARBO, ces jeux de données ont été rassemblés par l’entreprise NOVELTIS (Bojan Sic, communication personnelle). L’application des paramétrisations sur ces cartes permet d’obtenir la performance du concept SCARBO à grande échelle spatio-temporelle et d’utiliser ensuite ces données pour des études de performance d’inversion des flux de CO_2 .

Jeux de données auxiliaires La constellation SCARBO considérée ici pour le calcul des traces au sol est composée de 28 satellites sur des orbites héliosynchrones à 605 km d’altitude et séparés sur deux plans orbitaux : un premier observant à 10 heures et le second observant à 14 heures (heures locales). Les paramètres orbitaux sont ajustés pour obtenir un cycle de répétition long de 7 jours, et pour que le second plan répète les traces au sol du premier. Comme la performance paramétrisée inclut déjà la combinaison des pixels de l’imageur dans la direction parallèle à la trajectoire du satellite, seule la fauchée a besoin d’être simulée. Les observations sont échantillonnées à une résolution spatiale de ~ 2.3 km dans la direction transversale, produisant 85 points de mesure dans les 200 km de fauchée, pour des θ_T compris entre 0° et 9° en valeur absolue.

Seules les observations par ciel clair sont conservées : l’identification des nuages est réalisée avec le masque nuageux produit par l’instrument MODIS (Ackerman and Frey, 2015), et l’identification des surfaces continentales ou océaniques est issue du *Global Multi-resolution Terrain Elevation Data* à $30''$ de résolution spatiale (GMTED2010, Danielson and Gesch, 2011). Étant donné la date et l’heure, la géolocalisation des observations permet de calculer le jeu de données du SZA.

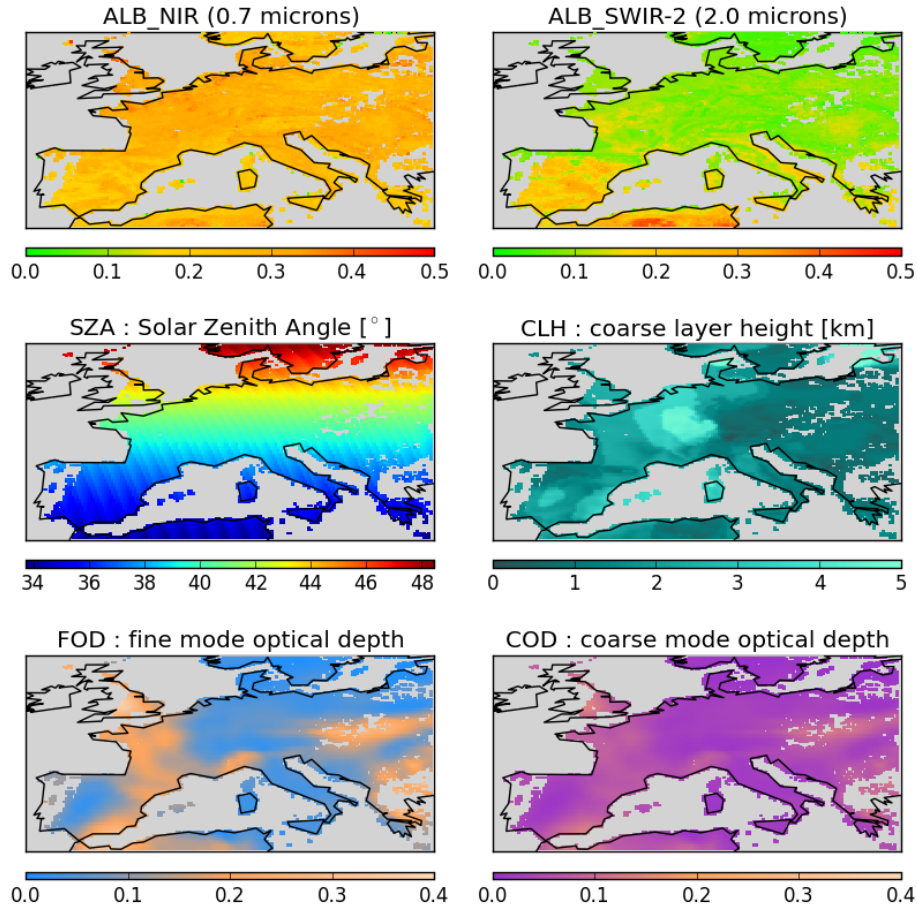


FIGURE 4.21 – Carte pour le 1^{er} juillet 2015 des paramètres ALB_NIR, ALB_SWIR-2, SZA, CLH, FOD et COD, filtrés pour le ciel clair et moyennés sur une grille de $0.2^\circ \times 0.2^\circ$.

Les paramètres liés aux aérosols COD, FOD et CLH sont générés à partir des réanalyses T255 du *Copernicus Atmospheric Monitoring System* (CAMS) pour les aérosols (Flemming et al., 2017) interpolées à $15''$ de résolution spatiale. Les différents types d'aérosols sont répartis selon leur taille effective en deux classes, un mode fin et un mode grossier. Les jeux de données COD et FOD sont ensuite générés en faisant la somme de l'épaisseur optique des aérosols appartenant à chacune des deux classes. Finalement, le profil vertical du rapport de mélange des aérosols classés dans le mode grossier est analysé pour fournir l'altitude de la masse moyenne, utilisée pour le paramètre CLH.

Le jeu de données pour l'albédo à trois longueurs d'onde de référence a été créé grâce à la climatologie de l'ESA *A surface reflectance Database for ESA's earth observation Missions* (ADAM, Bacour et al., 2020) qui repose sur les données MODIS de réflectance de surface. L'extrapolation des valeurs de réflectance aux trois longueurs d'onde de référence est réalisée grâce aux données du projet ANR français intitulé « Étude CLImatologique des Propriétés optiques de fonds de Sol » (ECLIPS, mentionné dans Bacour, 2019). On obtient

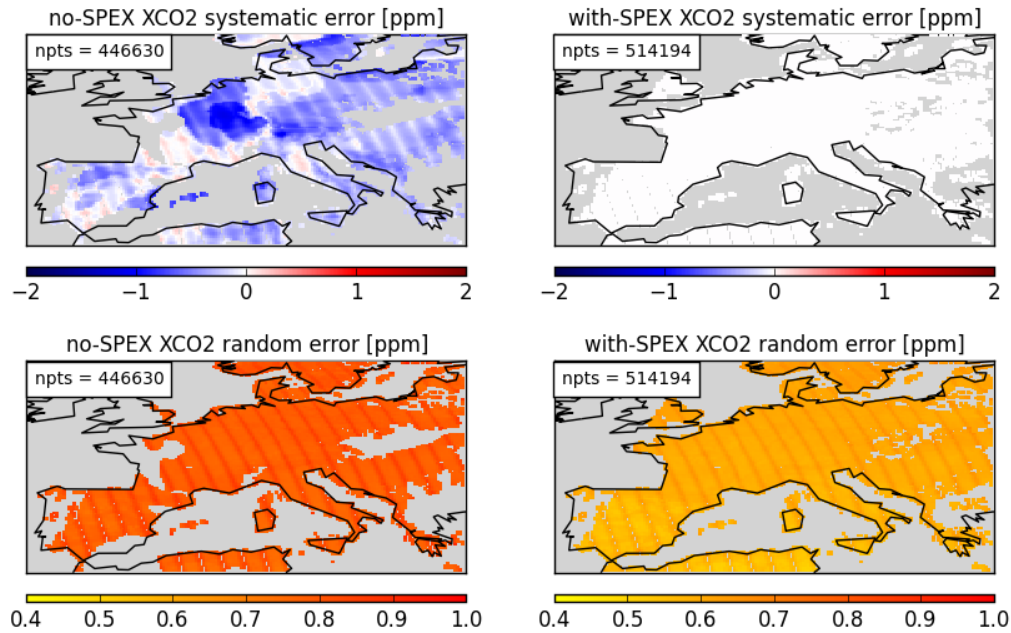


FIGURE 4.22 – Erreurs systématiques (haut) et aléatoires (bas) d’estimation du X_{CO_2} pour les scénarios de conception sans-SPEX (gauche) et avec-SPEX (droite), calculées par paramétrisation et moyennées sur une grille de $0.2^\circ \times 0.2^\circ$ pour le 1^{er} juillet 2015.

alors les paramètres ALB_NIR, ALB_SWIR-1 et ALB_SWIR-2 nécessaires à l’application des paramétrisations de performance.

Exemple d’application pour le 1^{er} juillet 2015 au-dessus de l’Europe Afin d’illustrer l’application des paramétrisations de la performance L2, on utilise les paramètres des jeux de données auxiliaires rassemblés pour le 1^{er} juillet 2015 au-dessus de l’Europe afin de calculer les erreurs systématique et aléatoire d’estimation du X_{CO_2} pour les satellites du plan orbital volant à 10h. La figure 4.21 montre les cartes, filtrées pour le ciel clair et moyennées sur $0.2^\circ \times 0.2^\circ$, pour les paramètres ALB_NIR, ALB_SWIR-2, SZA, CLH, COD et FOD. Sans surprise, les valeurs d’albédo sont principalement représentative des modèles de végétation (voir figure 4.7), avec un albédo plutôt élevé vers $0.7 \mu m$ et un faible albédo vers $2.0 \mu m$. Le Sud de l’Espagne, de l’Italie ainsi que le Maghreb ont des albédos plus représentatifs de surfaces désertiques. Pour le 1^{er} juillet 2015, les aérosols des réanalyses de CAMS sont principalement présents au-dessus du Maghreb, de l’Est de l’Espagne, de la France, du Royaume-Uni et de l’Europe de l’Est, avec des épaisseurs optiques plus élevées pour le mode fin que pour le mode grossier. Les aérosols de mode grossier ont une altitude plutôt basse, excepté au-dessus de l’Allemagne où ils atteignent 5 km d’altitude (mais pour de faibles épaisseurs optiques).

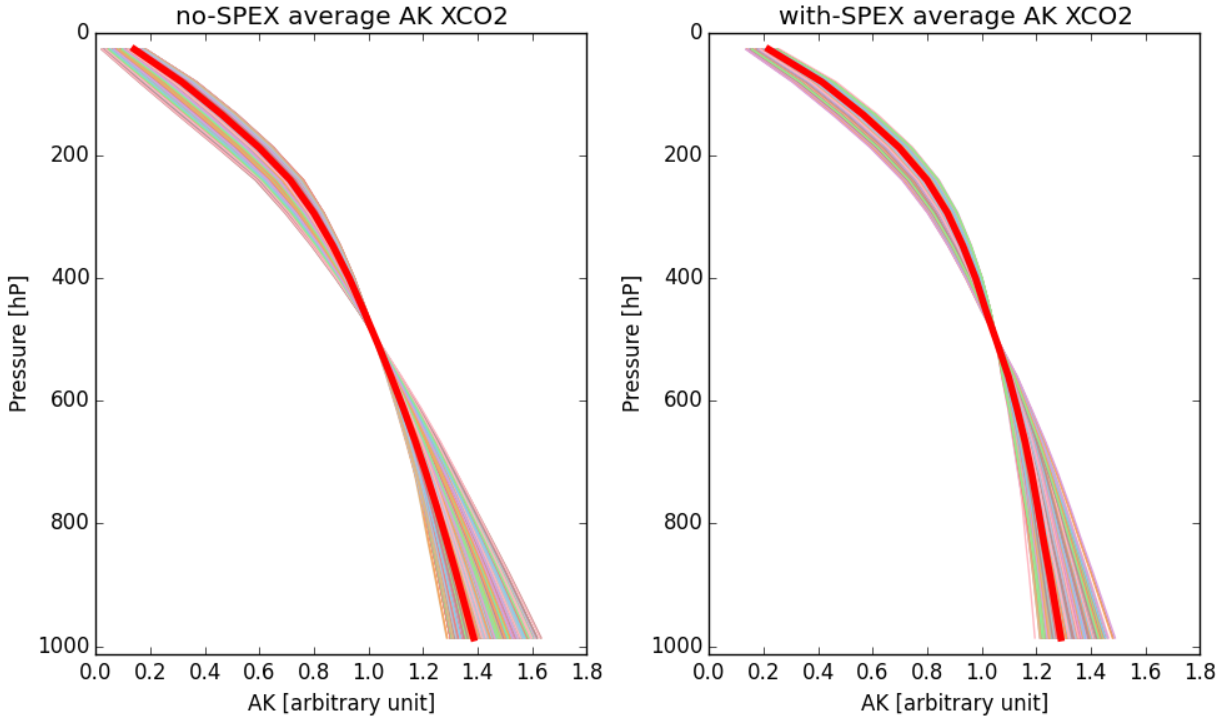


FIGURE 4.23 – Exemples d’AKs (sensibilités verticales de la colonne totale de CO_2) obtenus par paramétrisation (traits fins) et leur moyenne (trait épais rouge) pour les scénarios de conception sans-SPEX (gauche) et avec-SPEX (droite).

La figure 4.22 montre les erreurs systématiques et aléatoires d’estimation du X_{CO_2} calculées par paramétrisation à partir des données auxiliaires présentées dans la figure 4.21 pour les scénarios de conception sans-SPEX et avec-SPEX. Les erreurs ont été calculées pour les positions dans la fauchée telles que $|\theta_T| < 6^\circ$ car ses bords ont été exclus (voir partie 4.4.3). Les points de sondage ont été filtrés avec $\text{COD} + \text{FOD} < 0.25$, et $\text{COD} < 0.6$ et $\text{FOD} < 0.6$ pour les scénarios sans-SPEX et avec-SPEX, respectivement, expliquant ainsi la différence dans le nombre de points disponibles entre les deux scénarios. L’erreur systématique pour le scénario sans-SPEX est principalement corrélée aux paramètres COD et CLH comme on pouvait déjà le noter dans la figure 4.18, alors qu’aucune erreur systématique n’apparaît pour le cas avec-SPEX du fait des hypothèses utilisées. Concernant les erreurs aléatoires, elles sont plus faibles pour le scénario avec-SPEX et diminuent pour les albédos plus clairs se rapprochant des situations désertiques, comme on peut le voir dans le Sud de l’Italie, de l’Espagne ou au Maghreb.

Partie intégrante de la performance L2, la figure 4.23 donne une illustration des sensibilités verticales obtenues par paramétrisation pour ces points du 1^{er} juillet 2015, pour les deux scénarios de conception. On y retrouve de manière satisfaisante l’allure des sensibilités verticales données à la figure 4.12. D’après cette dernière, le SZA et l’albédo jouent sur la dispersion des sensibilités verticales que l’on peut noter pour les couches atmosphériques les

plus proches de la surface.

4.7 Campagne aéroportée SCARBO : première tentative d'inversion des mesures acquises par le prototype de NanoCarb

Le travail présenté précédemment concernait la version spatiale du concept SCARBO et ses performances pour l'estimation de la colonne totale de CO_2 . Cette dernière section avant la conclusion du chapitre décrit une première tentative d'inversion des mesures du prototype de NanoCarb. Elles ont été acquises lors de la campagne aéroportée SCARBO qui a eu lieu en octobre 2020, et les résultats obtenus permettent d'illustrer certaines des limites identifiées pour le concept. Pour plus de détails sur toute la campagne aéroportée, on peut se reporter à la présentation qui en a été faite lors du *User Advisory Board* du projet SCARBO, qui s'est tenu le 17/09/2021 (SCARBO, 2021b).

Après avoir rapidement décrit la campagne aéroportée d'octobre 2020, on présentera l'algorithme de « première intention » mis en place pour traiter les mesures collectées. Une étude de sensibilité est réalisée sur un interférogramme tronqué, puis on montrera les résultats obtenus pour une scène complète. Cette première tentative d'inversion de mesures réelles de l'instrument NanoCarb permet de tirer quelques enseignements et de tracer des perspectives que l'on décrira pour terminer.

4.7.1 Présentation de la campagne aéroportée SCARBO

La campagne aéroportée du projet SCARBO devait initialement avoir lieu en mai 2020 afin de bénéficier de la météo parfois clémente du ciel européen à cette saison. Malheureusement, la pandémie de COVID-19 a dévasté tous les plans initiaux, construits de longue date, et la campagne a été décalée au mois d'octobre de la même année. Elle a été menée par la section SAFIRE³ qui opérait le Falcon 20 de la recherche française, à bord duquel les instruments avaient été embarqués.

Instruments à bord Le Falcon20 a embarqué deux instruments :

- **Le prototype de NanoCarb.** Il comprend 2 voies : une dédiée au CO_2 et l'autre au CH_4 . Chacune mesure des interférogrammes tronqués pour 80 valeurs de différences de marche (OPDs). Pour le développement qui suit, on se concentrera principalement sur les résultats associés au CO_2 . Le champ de vue du prototype explore des angles transversaux et longitudinaux inférieurs à 6.6° , pour des scènes carrées d'environ 2.3 km de côté, discrétisées sur 47×47 pixels. La fréquence d'échantillonnage des mesures fait qu'environ 200 interférogrammes tronqués sont acquis pour un même point fixe au sol, lors de son survol par l'instrument.

3. Service des Avions Français Instrumentés pour la Recherche en Environnement : <https://www.safire.fr/fr/>

- **La version aéroportée de SPEX** (Smit et al., 2019), dont il ne sera pas question ici.

Les plans initiaux incluait l'instrument aéroporté MAMAP, déjà évoqué en introduction, dont la capacité à détecter des panaches d'émissions anthropiques de CO_2 a déjà été bien établie (Bovensmann et al., 2010). Les résultats d'estimation de X_{CO_2} à partir des mesures de MAMAP auraient pu servir de référence de validation pour les estimations menées à partir des mesures du prototype de NanoCarb. Malheureusement, le chamboulement des plans causés par la pandémie de COVID-19 n'a pas permis d'avoir MAMAP à bord du Falcon 20 au mois d'octobre.

Vols effectués Cinq vols ont pu être effectués durant le mois d'octobre 2020. Malheureusement, aucun n'a permis de collecter des mesures permettant de valider les estimations réalisées à partir de NanoCarb (pas de station TCCON croisée), ni des mesures dans lesquelles chercher l'impact d'un panache d'émission anthropique de CO_2 issu d'une source ponctuelle.

4.7.2 Algorithme de traitement et exemple pour une scène complète : détermination de l'a priori

Une suite de traitements a été mise en place pour estimer la concentration atmosphérique de CO_2 à partir des mesures du prototype de l'instrument NanoCarb. L'approche proposée ici est une première tentative construite à partir du travail effectué pour le modèle spatial. Elle comporte des défauts – dont certains mettent en lumière des difficultés inhérentes aux interférogrammes tronqués – que l'on discutera dans les parties suivantes.

Étape 0 : Coordonnées Une scène complète ne fait qu'environ 2.3 km de côté, et est acquise sur quelques secondes. Ces ordres de grandeur sont bien inférieurs à la résolution des réanalyses ERA5 désarchivées à l'étape suivante (résolutions de 30 km et 1 heure). Les coordonnées spatio-temporelles de n'importe quelle mesure parmi celles de la scène sont donc suffisantes pour la suite.

La scène test considérée ici se trouve à la sortie des Pyrénées, du côté espagnol (1.14534°W 41.64797°N) et a été acquise le 18/10/2020 vers 11h. La figure 4.24 donne le contexte de la scène observée avec une caméra visible : on y distingue des parcelles agricoles de différentes formes et de différentes couleurs, laissant supposer divers niveaux d'irrigation. Des axes routiers traversent la scène et une zone avec du sol nu (carrière, zone de stockage, zone industrielle?) se distingue.

Étape 1 : A priori météorologiques On consulte les réanalyses ERA5 pour obtenir la pression de surface et les profils de température et de vapeur d'eau, que l'on considère identiques pour toute la scène.



FIGURE 4.24 – Contexte de la scène test (caméra visible).

Étape 2 : Profils verticaux a priori de CO_2 et de CH_4 On utilise le programme stand-alone de génération de profils verticaux de gaz à effet de serre fournis par TCCON (Toon and Wunch, 2015). Il n'utilise que la latitude, la date et l'altitude de la tropopause (en mètres) en entrées.

Étape 3 : Réduction de la taille des données Pour chacun des 47×47 pixels au sol que compte une scène, environ 200 interférogrammes tronqués ont été acquis sous environ 50 angles de vue différents. Afin de réduire le nombre d'interférogrammes à traiter, on filtre d'abord les mesures contenant des valeurs absurdes, puis on moyenne les interférogrammes acquis selon un même angle de vue. On divise ainsi par un peu plus de 4 le nombre d'interférogrammes tronqués à traiter.

La scène considérée ici compte $\sim 427\text{k}$ interférogrammes tronqués. Après filtrage des données aux valeurs absurdes dues à de possibles poussières ou pixels morts (voir figure 4.25), il reste $\sim 332\text{k}$ interférogrammes tronqués à traiter. Finalement, le moyennage des interférogrammes acquis selon le même angle de vue laisse $\sim 80\text{k}$ interférogrammes à traiter pour cette scène test.

Étape 4 : Calcul de l'albédo a priori Pour chaque pixel au sol, on calcule l'albédo a priori en faisant la moyenne d'*albedos apparents* calculés pour chacun des interférogrammes tronqués mesurés sous différents angles de vue, pour ce pixel au sol. Pour un interférogramme tronqué donné, l'albédo apparent associé est calculé comme le rapport entre la moyenne de l'interférogramme tronqué mesuré et la moyenne d'un interférogramme tronqué simulé avec un albédo égal à 1.

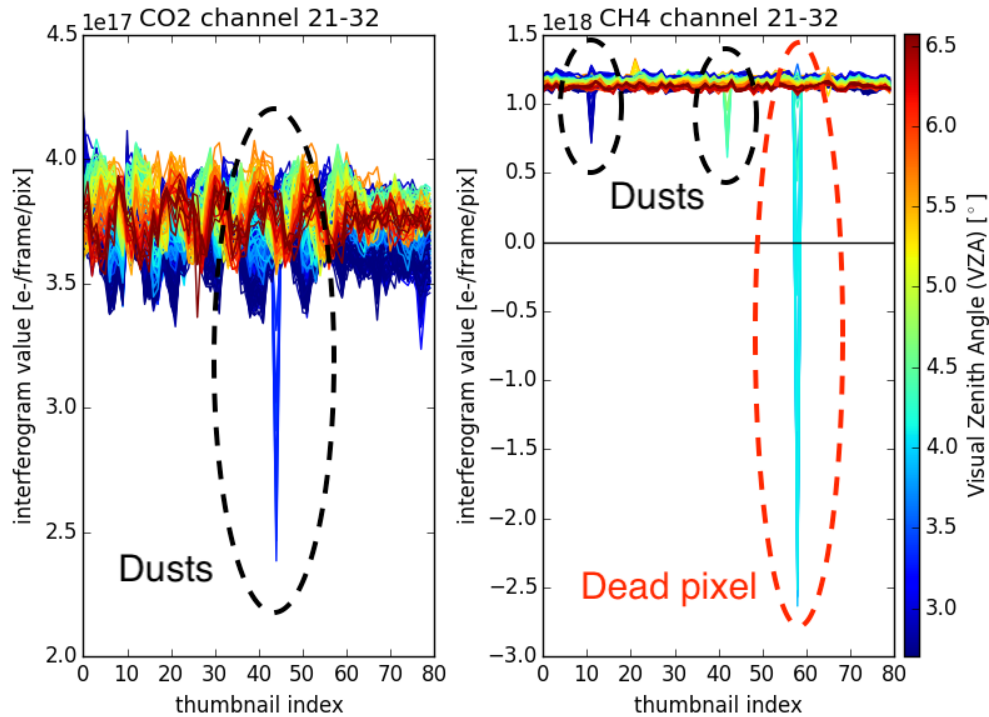


FIGURE 4.25 – Interférogrammes tronqués acquis pour un même pixel au sol, pour les voies CO_2 (gauche) et CH_4 (droite), pour tous les angles d’observation de ce pixel au sol (échelle de couleurs). Différentes discontinuités apparaissant dans ces interférogrammes, certainement causées par des poussières ou des pixels morts.

La figure 4.26 donne l’albédo a priori utilisé pour la voie CO_2 ainsi que l’écart maximal obtenu entre les différents albédos apparents calculés pour chacun des pixels de la scène. On retrouve bien dans l’albédo a priori les différents éléments identifiables sur l’image de contexte (voir figure 4.24). Les surfaces les moins irriguées ou de sol nu montrent un albédo plus élevé que les surfaces sombres des cultures qui ont l’air plus irriguées. Les pixels qui montrent les plus grands écarts sur les albédos apparents calculés sont associés aux frontières entre différentes parcelles agricoles ou bien aux routes. Cela suggère principalement une hétérogénéité de surface à l’intérieur du pixel ainsi que d’éventuelles erreurs de co-localisations des interférogrammes entre pixels adjacents.

4.7.3 Étude de sensibilités sur une mesure

Avant d’inverser les interférogrammes tronqués mesurés par le prototype aéroporté, il est nécessaire d’examiner leurs sensibilités aux variations de colonne de CO_2 ainsi qu’à celles de l’albédo. Jusqu’à la fin de cette section, on se concentrera principalement sur la voie CO_2 et les résultats associés.

La figure 4.27 montre un interférogramme tronqué simulé pour la voie CO_2 , ses sensibilités

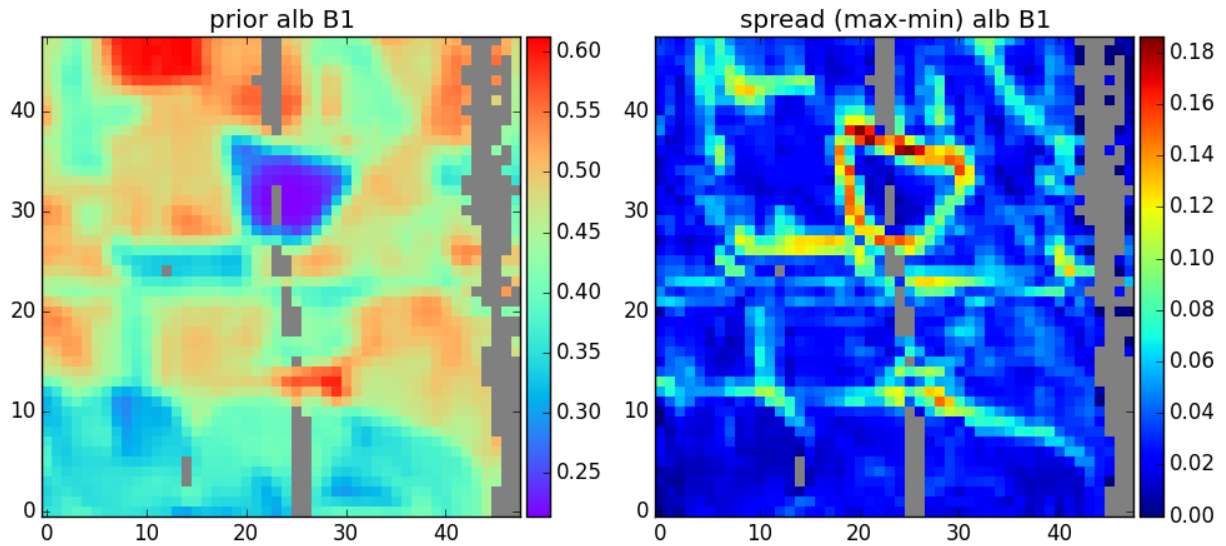


FIGURE 4.26 – Albédo a priori utilisé pour la voie CO₂ (gauche) et écart maximal obtenu entre les différents albédos apparents calculés pour chacun des pixels (droite). Les pixels gris désignent les pixels pour lesquels tous les interférogrammes acquis ont été filtrés.

à des perturbations comprises entre 0 et -10% de la colonne totale de CO₂, ainsi que sa sensibilité à une variation de +0.002 d'albédo. Comme constaté précédemment avec le modèle de l'instrument spatial (voir figure 4.13), on note ici qu'une perturbation de l'albédo a des conséquences sur la mesure très similaires à celles d'une perturbation de la colonne de CO₂. Ainsi, comme pour le modèle spatial, l'information sur l'albédo et le CO₂ est entremêlée dans les mesures du prototype aéroporté. Pour une perturbation de -1% de la colonne de CO₂ et une perturbation de 0.01 de l'albédo, la figure 4.27 donne l'inégalité suivante :

$$\text{CO}_2(-1\%) \stackrel{\times 5}{<} \text{bruit}(1\sigma) \stackrel{\times 5}{<} \text{albédo}(+0.01) \quad (4.6)$$

pour l'évolution du niveau moyen de l'interférogramme tronqué. L'évolution de l'amplitude des franges n'est quant à elle significative par rapport au bruit instrumental que pour des perturbations de la colonne totale de CO₂ supérieures à 10%.

Cette figure met ainsi en lumière deux messages importants :

1. Le niveau moyen de l'interférogramme tronqué est le signal le plus significatif par rapport au bruit instrumental et a un rapport de sensibilités favorable à l'estimation de l'albédo plutôt que de la colonne de CO₂.
2. Par la sensibilité du niveau moyen de l'interférogramme à la perturbation de la colonne de CO₂, on déduit que le calcul de l'albédo a priori à partir d'albédos apparents, tel que proposé dans l'algorithme de traitement, peut « absorber » le signal d'un réhaussement de la colonne de CO₂ dans l'albédo a priori calculé. C'est un défaut

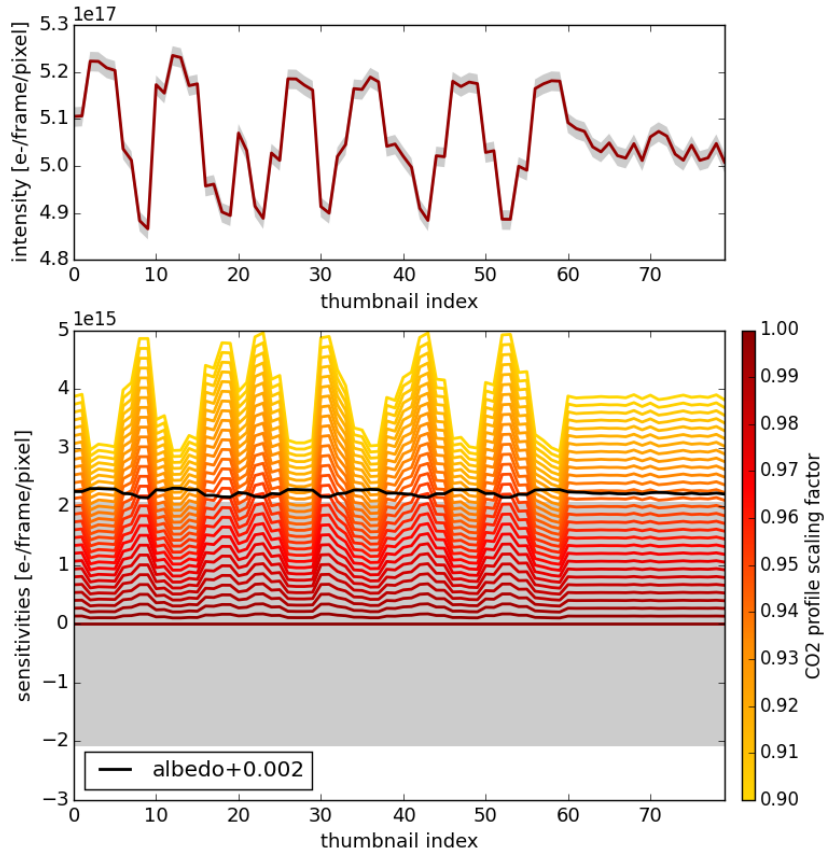


FIGURE 4.27 – Interférogramme tronqué simulé pour la voie CO_2 du prototype aéroporté de l’instrument NanoCarb (haut) et sensibilités à la perturbation de la colonne totale de CO_2 (échelle jaune-rouge) et de l’albédo (noir,bas). Les zones grisées illustrent l’intervalle $\pm 1\sigma$ du bruit instrumental.

majeur de cet algorithme de traitement proposé ici en première intention. Idéalement, l’entremêlement des informations CO_2 et albédo exigerait qu’on détermine l’albédo a priori sans avoir recours à l’interférogramme.

4.7.4 Algorithme de traitement et exemple pour une scène complète : résultats d’inversion

On continue ici les étapes de l’algorithme de traitement des mesures du prototype aéroporté de NanoCarb, avec l’inversion des $\sim 80\text{k}$ interférogrammes, puis la combinaison des résultats pour chacun des pixels au sol.

Étape 5 : Inversion des interférogrammes individuels Pour chaque pixel au sol, on inverse indépendamment les interférogrammes tronqués moyennés par angle de vue. On utilise pour cela 5AI, couplé au modèle instrumental du prototype de NanoCarb, qui applique l'estimation optimale avec des itérations Levenberg-Marquardt et le vecteur d'état décrit dans le tableau 4.5. Les incertitudes a priori appliquées aux albédos sont faibles comparées aux incertitudes a priori de 10% utilisées pour les facteurs multiplicatifs des profils de CO₂ et CH₄. On vise ainsi à orienter l'information contenue dans les mesures vers les paramètres liés au CO₂ et au CH₄.

Pour l'inversion d'une mesure seule, on a typiquement un degré de liberté compris entre 0.7 et 0.9 pour le CO₂, corrélé positivement à la valeur de l'albédo, et un degré de liberté compris entre 0.97 et 0.99 pour l'albédo. L'inversion des ~ 80k interférogrammes de cette scène test a demandé environ 190 heures de calcul.

Paramètres	Taille	Valeur a priori	Incertitude a priori
Facteur multiplicatif du profil d'H₂O	1 facteur	1.0 (ERA 5)	0.1
Facteur multiplicatif du profil de CO₂	1 facteur	1.0 (Toon and Wunch, 2015)	0.1
Facteur multiplicatif du profil de CH₄	1 facteur	1.0 (Toon and Wunch, 2015)	0.1
Albédo voie CO₂	1 voie	Valeur apparente moyennée sur les ~ 50 angles de vue	0.01
Albédo voie CH₄	1 voie	Valeur apparente moyennée sur les ~ 50 angles de vue	0.01

TABLE 4.5 – Vecteur d'état de 5AI utilisé pour la première tentative de traitement des mesures du prototype aéroporté de NanoCarb.

Étape 6 : Combinaison des résultats d'inversion On applique les équations du paragraphe *Utilisation de plusieurs mesures indépendantes* de la partie 3.2.1 aux colonnes scalaires estimées, pour les différents angles de vue, pour chacun des pixels de la scène. Comme précédemment, cette méthode de combinaison des résultats fait l'hypothèse doublement abusive (1) que l'on inverse un problème linéaire et (2) que l'estimation des différents paramètres du vecteur d'état n'est pas corrélée (\hat{S} diagonale).

La figure 4.28 donne les images de l'évolution entre les résultats a posteriori et a priori pour le facteur multiplicatif du profil de CO₂ et l'albédo de la voie CO₂, pour la scène complète. On y constate que les plus grands changements de colonne de CO₂ sont localisés sur la zone où l'albédo apparent est le plus étalé, sur les pixels qui font la transition entre le champ très irrigué et les autres moins irrigués. L'inspection visuelle des résultats pour le CO₂ et l'albédo de la voie CO₂ permet de constater une certaine corrélation spatiale dans l'évolution entre états a priori et a posteriori pour ces deux variables. La figure 4.29 trace

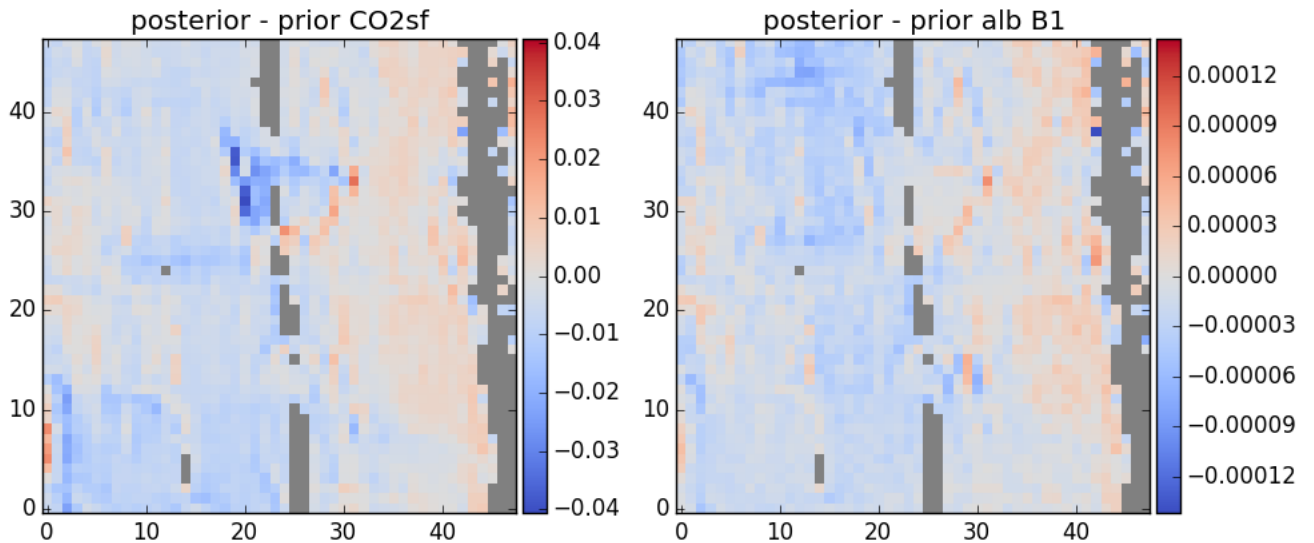


FIGURE 4.28 – Évolution entre l'état a priori et a posteriori du facteur multiplicatif du profil de CO_2 (gauche, une variation de 0.01 du facteur multiplicatif correspond à 1% de variation sur la colonne) et de l'albédo de la voie CO_2 (droite), pour la scène complète de 47×47 pixels.

l'évolution du facteur multiplicatif du profil de CO_2 en fonction de l'évolution de l'albédo de la voie CO_2 . On y note bien une corrélation entre les deux évolutions (coefficient de corrélation de Pearson égal à 0.73) ainsi que les rapports de sensibilités : pour une infime évolution de l'albédo de la voie CO_2 (< 0.0001 en valeur absolue, l'albédo a priori correspond déjà en effet au niveau moyen des interférogrammes tronqués pour chaque pixel) correspondent des évolutions de la colonne de CO_2 comprises entre -4% et 3%. Finalement, les résultats d'estimation combinés ici donnent une erreur aléatoire pour la colonne totale de CO_2 un petit peu inférieure à 1%, pour la plupart des pixels de la scène.

Ces résultats suggèrent que, pour cet algorithme de première intention, l'estimation de la colonne totale de CO_2 n'est pas séparée de celle de l'albédo.

4.7.5 Difficultés, enseignements et perspectives

L'application d'un algorithme de première intention pour traiter les mesures du prototype aéroporté de NanoCarb a permis de souligner deux difficultés majeures en plus de l'absence de référence de validation :

- L'entremêlement de l'information géophysique du CO_2 et de l'albédo, notamment dans le niveau moyen de l'interférogramme, rend difficile la détermination de l'albédo a priori à utiliser pour l'inversion.

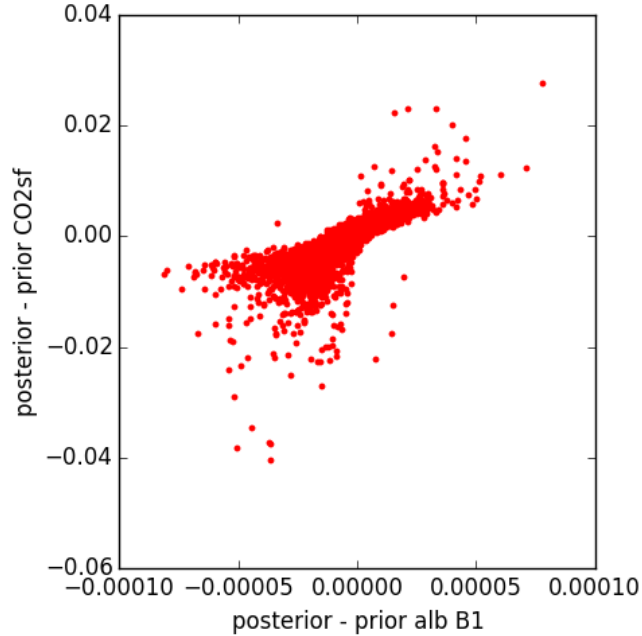


FIGURE 4.29 – Évolution entre l’état a priori et a posteriori du facteur multiplicatif du profil de CO_2 tracée en fonction de celle de l’albédo de la voie CO_2 , pour les 47×47 pixels de la scène test.

- Le rapport de sensibilités des interférogrammes tronqués favorise l’inversion de l’albédo par rapport à celle du CO_2 .

Les 190 heures de calcul (sans prise en compte de la diffusion) nécessaires pour inverser les $\sim 80\text{k}$ interférogrammes soulignent cruellement que l’approche par estimation optimale n’est pas adaptée pour traiter la masse de données qu’un concept comme SCARBO serait amené à produire. Les grosses approximations pour la dépendance des résultats dans le champ de vue (voir Annexe C) qui ont été nécessaires pour étudier la performance du modèle spatial conduisent à la même conclusion.

L’imageur hyperspectral AVIRIS-NG de la NASA, et les méthodes utilisées pour traiter ses mesures peuvent aider à envisager d’autres approches pour le traitement de la grande masse de données que serait amené à produire un concept comme SCARBO. L’approche par *matched filter* pourrait par exemple être explorée. Elle est inspirée de méthodes de traitement du signal et consiste à estimer directement la contribution d’un signal cible, dû à un réhaussement de la colonne de CO_2 par exemple, à partir de l’écart entre la mesure pour un pixel donné et la variabilité des mesures dans la scène observée (par exemple Foote et al., 2020). Reste à évaluer si cette approche pourrait être adaptée et pertinente pour les interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb.

4.8 Conclusions

Ce chapitre a présenté le concept d'observation proposé dans le cadre du projet SCARBO. Sa performance pour l'estimation de la colonne totale de CO_2 a été évaluée par inversion du transfert radiatif avec le code 5AI, pour 324 situations d'observation atmosphérique explorant cinq paramètres critiques pour les erreurs liées à la diffusion.

Les interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb constituent une approche très originale d'observation du rayonnement atmosphérique comparée à l'immense majorité des autres concepts qui mesurent des spectres. Ainsi, dans un premier temps, le contenu en information de ces interférogrammes a été analysé. Les degrés de liberté associés au CO_2 sont proche de 1.0, témoignant d'une sensibilité certaine à la concentration atmosphérique de CO_2 . Les sensibilités verticales associées aux colonnes totales de CO_2 estimées à partir des mesures de NanoCarb sont par ailleurs typiques du proche infrarouge, avec une sensibilité aux couches atmosphériques proches de la surface.

Dans le but d'établir l'intérêt d'accompagner NanoCarb avec l'instrument sensible aux aérosols SPEXone, l'étude de performance a été menée pour deux scénarios de conception : sans-SPEX et avec-SPEX. Les erreurs systématiques d'estimation de X_{CO_2} dues à la présence d'aérosols de mode fin sont grandement réduites grâce à SPEXone. Par ailleurs SPEXone est particulièrement performant pour réduire les erreurs systématiques associées au mode grossier d'aérosols là où elles sont les plus élevées, comme par exemple pour une situation typiquement européenne ($\text{alb} = \text{VEG}$ et $\text{SZA} = 50^\circ$). Les situations désertiques contaminées avec des aérosols de mode grossier peuvent cependant rester difficiles à traiter.

Les estimations de X_{CO_2} à partir des mesures de NanoCarb ont une erreur aléatoire comprise entre 0.5 et 1 ppm pour les pixels de la fauchée associés à des angles transversaux inférieurs à 6° en valeur absolue (dans le cas avec-SPEX). Ces résultats atteignent voire dépassent l'objectif de précision de 1 ppm fixé pour SCARBO.

Ces résultats de performance pour la colonne totale de CO_2 ont été paramétrisés en fonction de cinq paramètres critiques pour l'erreur liée à la diffusion : le modèle d'albédo, l'angle zénithal solaire, l'altitude d'une couche d'aérosols de mode grossier et les épaisseurs optiques de deux couches d'aérosols. Cette paramétrisation permet de généraliser les résultats de cette étude de performance, et de produire rapidement les larges quantités de données L2 simulées pour de premières études de performance d'estimation des flux de CO_2 .

Cette étude des performances du concept SCARBO menées sur des mesures synthétiques a éclairé le potentiel que peuvent avoir les mesures de NanoCarb pour l'observation du CO_2 atmosphérique depuis l'espace. Comme pour toutes les études basées sur des simulations, il ne faut cependant pas négliger toutes les hypothèses implicites qu'elles supposent. Par exemple, ici, seules des situations atmosphériques critiques pour les erreurs de diffusion ont été explorées en supposant une connaissance parfaite de tous les autres paramètres de l'atmosphère et de la surface. En particulier, le nombre de couche d'aérosols, leur type et propriétés optiques sont considérés comme parfaitement connus. L'instrument NanoCarb est

aussi considéré comme idéal. Une prochaine étape de l'étude de ses performances pourrait inclure l'impact de défauts instrumentaux.

Cette toute première étude des performances du concept SCARBO a également permis de mettre en évidence l'entremêlement d'information géophysique dans les interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb. Leur sensibilité au CO_2 apparaît en effet fortement corrélée à leur sensibilité à l'albédo, rendant difficile l'estimation indépendante de ces deux variables. Une première tentative de traitement par estimation optimale des mesures du prototype aéroporté de NanoCarb a notamment permis d'illustrer cette difficulté sur des données réelles. Par ailleurs, le décalage en nombre d'onde des filtres à bande étroite éloigne le rayonnement qu'ils sélectionnent du point d'optimisation de NanoCarb. Combiné à l'entremêlement des informations CO_2 et albédo, le concept actuel montre une augmentation de l'erreur aléatoire d'estimation de X_{CO_2} à mesure que l'on s'éloigne du centre du champ de vue. Pour un objectif de précision donné, cette spécificité limite la taille de la fauchée atteignable, qui elle-même influence le dimensionnement de la constellation entière. Ainsi, en identifiant les limites de la sensibilité au CO_2 des interférogrammes tronqués, cette étude de performance a aussi permis de préparer les futures améliorations du concept NanoCarb.

Chapitre 5

Performances et sensibilités de l'estimation de la colonne totale de CO₂ à partir de mesures proche infrarouge : exploration de l'impact de la résolution spectrale

5.1 Introduction

Après avoir décrit la modélisation directe du transfert radiatif au chapitre 2, le chapitre 3 en a présenté l'inversion par la méthode de l'estimation optimale qui a été appliquée aux mesures réelles de la mission américaine OCO-2. Cela a notamment été l'occasion de présenter les sensibilités de cette approche à la connaissance de la spectroscopie et à la prise en compte de paramètres liés aux particules diffusantes dans le vecteur d'état. Le chapitre 4 a ensuite introduit le concept proposé dans le cadre du projet Space CARBOn Observatory (SCARBO) et en a présenté les performances. Par l'instrument NanoCarb qui mesure des interférogrammes tronqués, le concept proposé par SCARBO se distingue radicalement de l'immense majorité des autres concepts planifiés ou à l'étude pour le suivi de la concentration atmosphérique de CO₂. En effet, ces derniers reposent sur des mesures de spectres, tout en explorant cependant différentes stratégies de dimensionnement selon leurs objectifs (voir section 1.5). Notamment, les concepts d'imagerie de CO₂ atmosphérique réalisent un plus ou moins grand compromis sur la résolution spectrale afin d'atteindre la résolution spatiale souhaitée. Ainsi, partant d'AVIRIS-NG ($\lambda/\Delta\lambda \sim 360$), base de travail pour CarbonMapper, en passant par CO2Image ($\lambda/\Delta\lambda \sim 1600$ pour l'unique bande CO₂ fort) et Copernicus CO₂ Monitoring (CO₂M, $\lambda/\Delta\lambda \sim 5870$) jusqu'à MicroCarb ($\lambda/\Delta\lambda \sim 25000$), la résolution spectrale, ici illustrée par le pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$, apparaît comme un paramètre de dimensionnement critique pour explorer la multitude des concepts planifiés, en préparation ou à l'étude.

Cette question du choix de la résolution spectrale adaptée pour réaliser des observations de la concentration atmosphérique de CO_2 à partir de mesures satellites infrarouges a déjà été abordée dans de précédents travaux. On peut particulièrement noter Galli et al. (2014); Wu et al. (2020) ou Wilzewski et al. (2020) qui ont précédemment pris le parti de dégrader spectralement des mesures d’instruments réels comme GOSAT et/ou OCO-2. Ces approches ont notamment permis d’observer l’impact de la résolution spectrale sur l’erreur aléatoire des estimations de X_{CO_2} en incluant les contributions des difficultés réelles posées par la modélisation du transfert radiatif direct.

Ce chapitre propose d’explorer finalement les performances, contenu en information et sensibilités de l’estimation de la colonne totale de CO_2 à partir de mesures proche infrarouge dont le pouvoir de résolution varie de $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, afin de couvrir tout l’intervalle des résolutions actuellement considérées pour de futurs concepts. Par ailleurs, on compare les résultats obtenus avec ceux issus de la meilleure représentation possible des futures missions planifiées CO_2M et MicroCarb ainsi qu’avec ceux du concept SCARBO , permettant de mieux mettre en lumière ses spécificités par rapport aux missions reposant sur des spectres. Contrairement aux travaux précédemment cité, ces comparaisons seront faites exclusivement sur des mesures synthétiques afin de pouvoir inclure le concept SCARBO pour lequel aucune mesure réelle (dans sa configuration spatiale) n’est encore disponible.

Après avoir détaillé la méthodologie, on examinera dans un premier temps les performances et contenu en information des mesures proche infrarouge en fonction de la résolution spectrale, du rapport signal à bruit, des bandes spectrales disponibles ou de la représentation du CO_2 dans le vecteur d’état. Ces premiers résultats permettront d’éclairer l’évolution selon la résolution spectrale des sensibilités à la méconnaissance a priori des variables géophysiques essentielles du proche infrarouge. Finalement, on détaillera les sensibilités des estimations de colonne totale de CO_2 à la méconnaissance de la spectroscopie de l’ O_2 et du CO_2 .

5.2 Méthodologie

5.2.1 Approche « performance » de l’estimation optimale

L’approche « performance » Le formalisme de l’estimation optimale permet de déterminer les matrices de variance/covariance du vecteur d’état \hat{S} , de gain G et la matrice *averaging kernel* A à partir desquelles performances et sensibilités des estimations de X_{CO_2} peuvent être obtenues (voir section 3.2). Les degrés de liberté, erreurs aléatoires d’estimation du X_{CO_2} (issues du bruit instrumental) et sensibilités verticales découlent directement de A et \hat{S} . Les sensibilités des estimations à la méconnaissance de la spectroscopie $d\hat{x}^{\text{sp}}$ se calculent quant à elle en propageant une erreur de modélisation dy^{sp} avec la matrice de gain :

$$d\hat{x}^{\text{sp}} = \frac{\partial \hat{x}}{\partial y} dy^{\text{sp}} = G dy^{\text{sp}} \quad (5.1)$$

Les sensibilités des estimations à la méconnaissance a priori de paramètres géophysiques présents dans le vecteur d’état, notées $d\hat{x}_{\text{ap}}$, sont obtenues en propageant la méconnaissance

a priori dx_{ap} avec la matrice A :

$$d\hat{x}_{\text{ap}} = \frac{\partial \hat{x}}{\partial x} dx_{\text{ap}} = A dx_{\text{ap}} \quad (5.2)$$

Vecteurs d'état utilisés On utilise ici un vecteur d'état qui comprend les principales variables géophysiques essentielles à l'interprétation de mesures proche infrarouge. Il est décrit dans le tableau 5.1 et compte quelques variations selon le test de sensibilité réalisé ou l'instrument considéré.

Variable	Longueur	Incertitude a priori (1σ)	Notes
Facteur multiplicatif du profil d'H ₂ O	1	0.5 (même qu'ACOS)	-
Concentration du CO ₂ par couche	19 couches	a priori d'ACOS, voir O'Dell et al. (2012)	-
Pression de surface	1	4.0 hPa (même qu'ACOS)	-
Décalage global du profil de température	1	5.0 K (même qu'ACOS)	-
Albédo de surface (ordre 0 du polynôme)	1-3 bande(s)	1.0 (même qu'ACOS)	-
Pente de la dépendance spectrale de l'albédo (ordre 1 du polynôme)	1-3 bande(s)	1.0/cm ⁻¹ (même qu'ACOS)	<i>ce paramètre n'est pas pris en compte pour l'instrument NanoCarb</i>
Épaisseur optique de la couche d'aérosols de mode grossier	1	0.1	<i>ce paramètre n'est pas pris en compte pour la section 5.5, voir Annexe F</i>
Épaisseur optique de la couche d'aérosols de mode fin	1	0.1	<i>ce paramètre n'est pas pris en compte pour la section 5.5, voir Annexe F</i>

TABLE 5.1 – Composition du vecteur d'état pour l'étude des performances et sensibilités de l'estimation de X_{CO_2} à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge

Modélisation du bruit instrumental Le bruit instrumental ε des concepts mesurant des spectres est modélisé à partir d'une luminance de référence L_{ref} et d'un rapport signal à bruit (*Signal to Noise Ratio*, SNR_{ref}) associé, tel que décrit par Buchwitz et al. (2013) :

$$\varepsilon = \begin{cases} L_{\text{ref}}/\text{SNR}_{\text{ref}} & \text{si } L < L_{\text{ref}} \\ L / \left(\text{SNR}_{\text{ref}} \sqrt{L/L_{\text{ref}}} \right) & \text{si } L \geq L_{\text{ref}} \end{cases} \quad (5.3)$$

avec L , la luminance mesurée. Pour l'instrument NanoCarb, on reprend le modèle de bruit instrumental donné à l'équation 4.3.

5.2.2 Situations d’observation atmosphérique

On reprend ici l’atmosphère et les paramètres considérés dans le chapitre 4 (voir partie 4.3.3) pour constituer un ensemble de 12 situations d’observation atmosphérique sur lesquelles les résultats de performances et sensibilités vont être comparés. Ces situations explorent les trois modèles d’albédo SOL, VEG et DES et les quatre valeurs de $SZA = 0^\circ, 25^\circ, 50^\circ$ et 70° déjà utilisées pour l’étude de performance du concept SCARBO. On ne considèrera cependant qu’une seule situation faiblement contaminée par des aérosols, avec $COD = 0.02$ et $FOD = 0.05$ (mêmes modèles d’aérosols OPAC que ceux utilisés pour la partie 3.5.2).

5.2.3 Instruments considérés

La comparaison des performances et sensibilités de l’estimation de X_{CO_2} à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge est ici réalisée pour trois instruments planifiés ou à l’étude : CO_2M , MicroCarb et NanoCarb. La figure 5.1 donne une illustration de leurs mesures respectives ou des intervalles spectraux utilisés pour simuler leurs mesures.

Copernicus CO_2 Monitoring (CO_2M) Le cahier des charges de la mission CO_2M fourni par l’ESA (Meijer, 2020) donne un pouvoir de résolution moyen de $\lambda/\Delta\lambda = 5870$ pour l’instrument considéré, avec un échantillonnage spectral 3 fois plus petit que la résolution spectrale. Les caractéristiques des trois bandes spectrales que mesurera CO_2M sont incluses dans le tableau 5.2.

Bande	1 (O ₂ A-band)	2 (CO ₂ faible)	3 (CO ₂ fort)
Intervalle en longueur d’onde (μm)	0.747 – 0.773	1.590 – 1.675	1.990 – 2.095
Pouvoir de résolution	~ 5870	~ 5870	~ 5870
Facteur d’échantillonnage spectral	3	3	3
Luminance de référence ($W/m^2 \text{ strd } cm^{-1}$)	9.66×10^{-4}	6.81×10^{-4}	7.30×10^{-4}
SNR de référence	330	400	400

TABLE 5.2 – Caractéristiques instrumentales de CO_2M prises en compte pour ce travail

MicroCarb La mission française MicroCarb mise sur un haut pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda \sim 25000$ avec un échantillonnage spectral 3 fois supérieur à la résolution spectrale. La mesure d’une bande additionnelle sensible à l’O₂ (aux alentours de $1.27 \mu m$) devrait permettre de

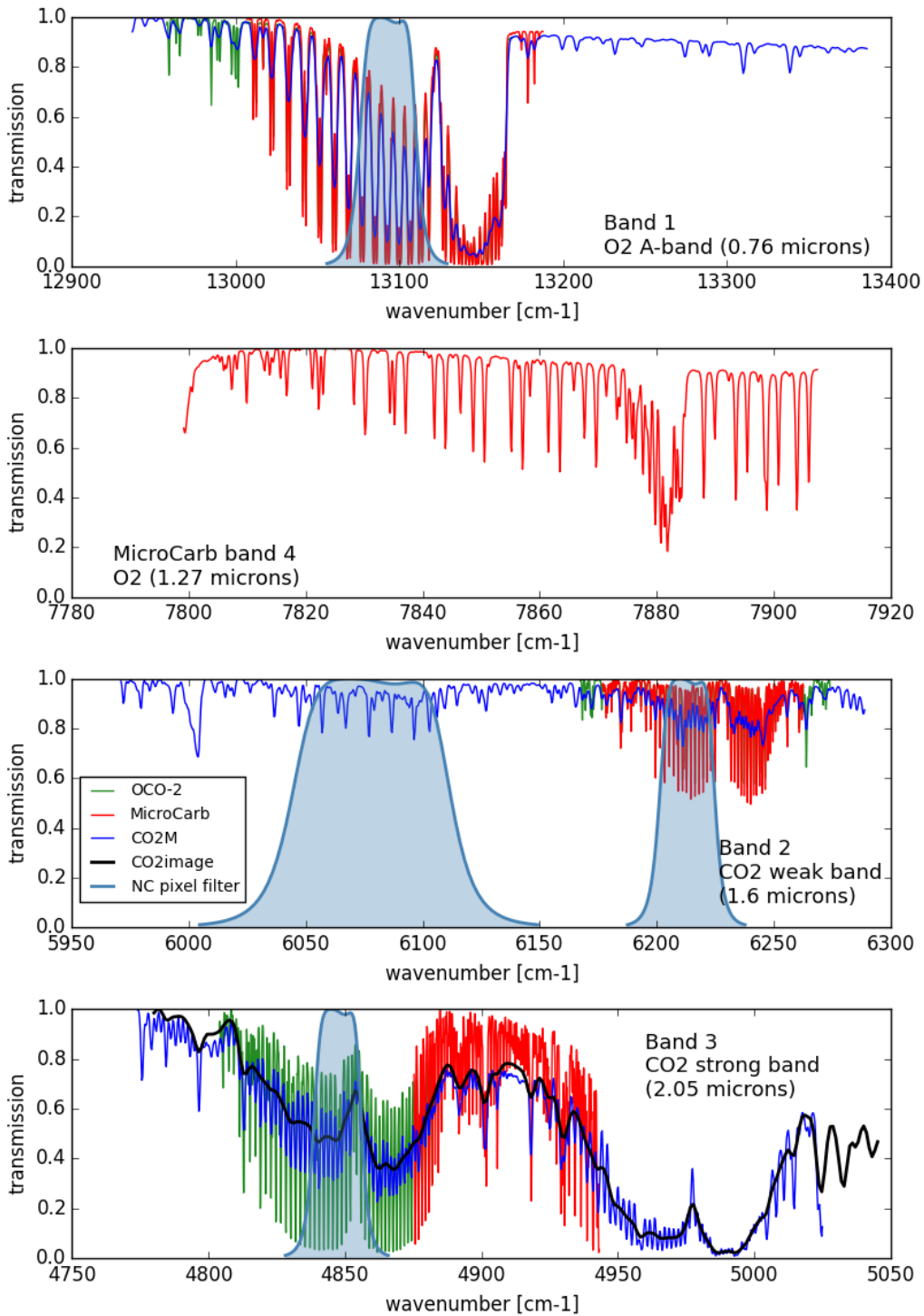


FIGURE 5.1 – Transmissions typiques pour **OCO-2** ($\lambda/\Delta\lambda \sim 20000$), **MicroCarb** ($\lambda/\Delta\lambda \sim 25000$), **CO₂M** ($\lambda/\Delta\lambda \sim 5870$) et **CO2Image** ($\lambda/\Delta\lambda \sim 1600$). Les gabarits des filtres des quatre bandes de NanoCarb pour le pixel central du FOV sont également donnés.

mieux contraindre les particules diffusantes qui perturbent les estimations de X_{CO_2} . Les caractéristiques des quatre bandes spectrales mesurées par MicroCarb sont incluses dans le tableau 5.3, avec des luminances et SNR de référence tirés de Bertaux et al. (2020).

Bande	1 (O₂ A-band)	2 (CO₂ faible)	3 (CO₂ fort)	4 (O₂ 1.27 μm)
Intervalle en longueur d'onde (μm)	0.758 – 0.769	1.597 – 1.619	2.023 – 2.051	1.265 – 1.282
Pouvoir de résolution	~ 25000	~ 25000	~ 25000	~ 25000
Facteur d'échantillonnage spectral	3	3	3	3
Luminance de référence ($\text{W}/\text{m}^2 \text{ strd } \text{cm}^{-1}$)	4.38×10^{-3}	2.69×10^{-3}	9.95×10^{-4}	2.97×10^{-3}
SNR de référence	480	579	249	503

TABLE 5.3 – Caractéristiques instrumentales de MicroCarb prises en compte pour ce travail

NanoCarb On utilise le même modèle instrumental de NanoCarb que pour le chapitre 4, en ne considérant que le pixel central du FOV (« NC pixel » sur les figures qui suivent) ou les résultats combinés dans la direction longitudinale pour la colonne de pixels située au centre de la fauchée (« NC comb. » sur les figures qui suivent). Ce dernier cas n'est montré que pour la colonne X_{CO_2} scalaire ou autres variables scalaires du vecteur d'état : la méthode de combinaison des résultats dans la direction longitudinale utilisée (voir partie 4.3.5) ne permet pas d'obtenir les degrés de liberté et sensibilités verticales équivalents pour la combinaison.

CO₂M-var (fictif) Une multitude de paramètres sont à explorer lorsque l'on souhaite concevoir un instrument pour suivre la concentration atmosphérique de CO₂ à partir du rayonnement proche infrarouge : nombre, localisations et largeurs des bandes spectrales incluses, résolution spectrale, échantillonnage spectral, caractéristiques du système optique, du détecteur, etc. Si l'on souhaite explorer l'impact de la résolution spectrale sur la performance et les sensibilités de l'estimation du X_{CO_2} , il est donc nécessaire de faire des choix et de fixer les autres paramètres.

On propose ici de repartir de la configuration de CO₂M décrite précédemment en ne faisant varier que le pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ supposé constant et identique sur les trois bandes spectrales. On note ce cas « CO₂M-var » pour la suite de ce chapitre. Intervalles de définition des bandes et facteurs d'échantillonnage restent identiques. CO₂M ayant des bandes spectrales assez large, ce choix permet de faire un compromis acceptable entre les instruments à haute résolution dont les bandes sont assez étroites (par exemple OCO-2 ou MicroCarb, voir figure 5.1) et ceux à très basse résolution comme par exemple AVIRIS-NG qui mesure un spectre continu entre 0.4 et 2.5 μm . Ainsi, on peut garder en tête que les

résultats obtenus pour CO₂M-var correspondent à la mesure de bandes fictivement larges pour les hautes résolutions spectrales, tandis qu'ils correspondent à une sélection de fenêtre pour les instruments à basse résolution spectrale qui mesurent un spectre continu.

5.3 Performances et contenu en information

Les caractéristiques finales d'une mission spatiale (résolution spectrale, bandes spectrales disponibles, rapport signal à bruit, résolution spatiale, etc.) ont un impact direct sur le contenu en information géophysique des spectres mesurés, et donc sur la performance des estimations de colonne totale de CO₂. Cette section explore tout d'abord comment résolution spectrale et rapport signal à bruit – ces deux variables évoluant en même temps lors de la conception d'un détecteur – influencent le contenu en information des mesures proche infrarouge et la performance des estimations de X_{CO_2} . Certains concepts à l'étude comme CO2Image ne considèrent cependant qu'une seule bande spectrale. On étudiera donc ensuite l'impact des bandes spectrales disponibles. Finalement, on montrera comment la représentation du CO₂ dans le vecteur peut en particulier influencer la sensibilité verticale des estimations de X_{CO_2} . Les résultats sont montrés dans le corps du texte pour la situation alb = VEG et SZA = 25°, les résultats pour toutes les situations sont donnés dans l'Annexe E.

5.3.1 Impact du rapport signal à bruit

La figure 5.2 donne, pour la situation alb = VEG et SZA = 25°, l'erreur aléatoire d'estimation du X_{CO_2} et les degrés de liberté des éléments du vecteur d'état liés au CO₂ (DOFs), obtenus à partir de l'instrument fictif CO₂M-var dont on fait varier le pouvoir de résolution entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Ces résultats sont montrés pour 11 valeurs de SNR évoluant entre 0.1 et 10 fois le SNR de référence donné dans le tableau 5.2.

Résultats CO₂M-var Pour les valeurs de SNR de référence (en **noir**), l'erreur aléatoire d'estimation du X_{CO_2} évolue de 1.7 ppm pour $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à 0.14 ppm pour $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Cette évolution est corrélée à celle des DOFs qui augmentent avec le pouvoir de résolution : plus d'information sur le CO₂ permet de réduire l'incertitude sur la colonne totale. Un changement du SNR a des effets similaires : moins la mesure est bruitée (a priori) plus elle apporte d'information sur le CO₂ et permet alors d'en réduire l'incertitude.

Dans le sens des $\lambda/\Delta\lambda$ croissants illustrés sur la figure 5.3 pour la bande d'absorption CO₂ faible à 1.6 μm , trois étapes se distinguent. D'abord, en partant des faibles résolutions spectrales, l'allure globale des bandes d'absorption apparaît progressivement jusqu'à $\lambda/\Delta\lambda \sim 1000$, et les résultats obtenus par l'instrument fictif CO₂M-var marquent une première rupture de pente. Les raies d'absorption apparaissent alors au fur et à mesure que $\lambda/\Delta\lambda$ augmente et, une fois toutes saisies par la mesure, les résultats marquent une deuxième rupture de pente qui a globalement lieu vers $\lambda/\Delta\lambda \sim 5000 - 10000$. Une meilleure résolution

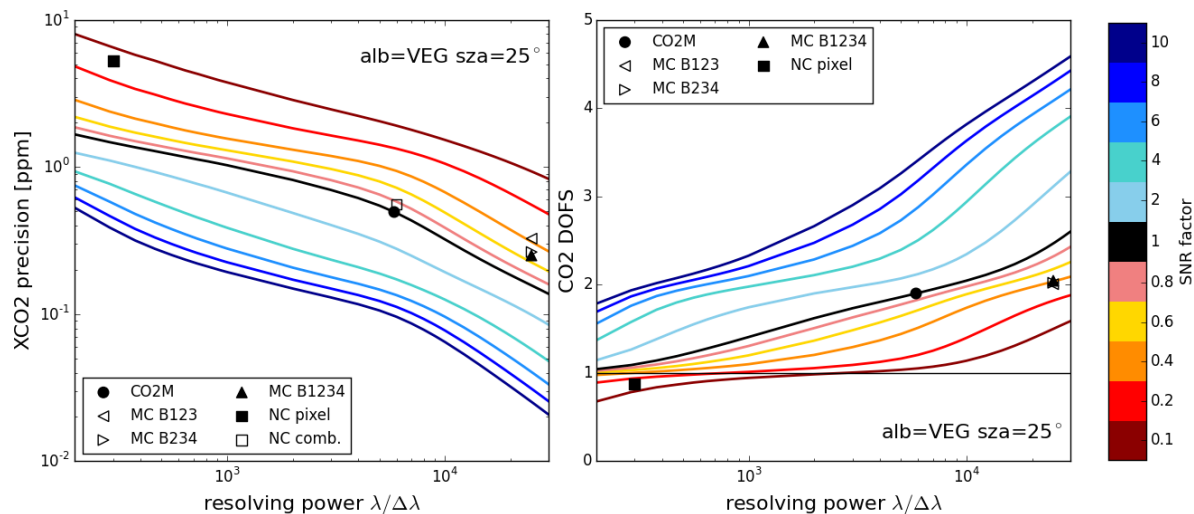


FIGURE 5.2 – Erreur aléatoire d’estimation du X_{CO_2} (gauche) et degrés de liberté associés au CO_2 (droite) pour un instrument fictif CO_2M -var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, pour la situation $alb = VEG$ et $SZA = 25^\circ$. Différents SNR sont testés (échelle de couleurs). Les symboles donnent les résultats pour NanoCarb (NC, carrés), CO_2M (cercle) et MicroCarb (MC, triangles).

des raies continue par la suite à améliorer la quantité d’information transportée par la mesure sur le CO_2 , et continue donc à réduire l’erreur aléatoire d’estimation du X_{CO_2} . Selon le SNR, ces ruptures de pentes n’ont pas lieu pour le même pouvoir de résolution et sont plus ou moins nettes : l’observation des raies individuelles doit être significative par rapport au niveau de bruit pour apporter de l’information et réduire l’incertitude sur X_{CO_2} . Ainsi, on peut par exemple noter que les résultats des plus hautes valeurs de SNR aux faibles $\lambda/\Delta\lambda$ correspondent à ceux des petites valeurs de SNR aux forts $\lambda/\Delta\lambda$. Dans la configuration proposée ici, gagner un ordre de grandeur en SNR correspond à gagner entre 1 et 1.5 ordre de grandeur en pouvoir de résolution : une sorte de symétrie dans les impacts respectifs de la résolution spectrale et du SNR apparaît donc.

Résultats pour les concepts CO_2M , MicroCarb et NanoCarb La figure 5.2 montre également les résultats calculés pour les instruments CO_2M , MicroCarb (avec et sans la B1 ou B4) et NanoCarb tels que décrits dans la partie 5.2.3. On note :

- **Pour CO_2M** , une erreur aléatoire de 0.5 ppm. Ce résultat se compare de manière satisfaisante au cahier des charges de CO_2M qui requiert 0.6 ppm d’erreur aléatoire venant du SNR pour la situation $alb = VEG$ et $SZA = 50^\circ$ (voir figure E.1 en Annexes, et Meijer, 2020).
- **Pour MicroCarb**, une erreur aléatoire de 0.25 ppm. Ce résultat se compare de manière satisfaisante au dernier budget de performance de la mission MicroCarb (Jouglet et al., 2021), qui prévoit entre 0.15 et 0.95 ppm d’erreur aléatoire provenant du SNR,

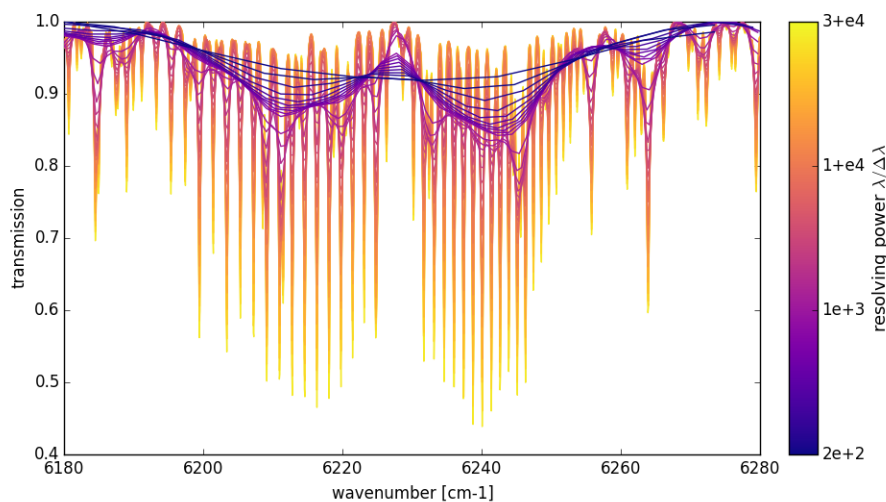


FIGURE 5.3 – Bande d’absorption CO_2 faible à $1.6 \mu\text{m}$ vue avec un pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ évoluant de 200 à 30000.

avec une médiane de 0.35 ppm. L’absence d’une des deux bandes sensibles à l’ O_2 dégrade l’erreur aléatoire, car moins d’information est alors disponible pour contraindre des paramètres géophysiques interférant avec l’estimation de X_{CO_2} .

- **Pour NanoCarb**, on retrouve une erreur aléatoire de l’ordre de 5 – 6 ppm pour l’estimation de X_{CO_2} à partir d’un unique interférogramme tronqué, pour un pixel du FOV pris isolément (NC pixel, voir Annexe C). La combinaison des résultats L2 sur toute la direction longitudinale pour la colonne centrale de pixels du FOV donne une erreur aléatoire divisée par 10 environ. L’instrument NanoCarb n’a pas de résolution spectrale particulière, on a donc attribué les pouvoirs de résolution utilisés en abscisses avec l’idée de donner une référence de comparaison aux résultats de obtenus à partir de NanoCarb. Pour un interférogramme tronqué pris seul, la performance de NanoCarb se compare donc à celle obtenue à partir d’un spectre à basse résolution spectrale et bas SNR (cas « NC pixel » fixé à $\lambda/\Delta\lambda = 300$). Grâce à la stratégie d’observation qui sur-échantillonne les mesures d’interférogrammes tronqués au-dessus d’un même point fixe au sol, on obtient une erreur aléatoire comparable à celle de CO_2M (cas « NC comb. » fixé à $\lambda/\Delta\lambda = 6000$).

Sensibilités verticales La figure 5.4 montre les sensibilités verticales (AKs) de la colonne totale de CO_2 estimée à partir des mesures de l’instrument fictif $\text{CO}_2\text{M-var}$, dont on fait varier le pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ entre 200 et 30000 et le SNR a priori entre 0.1 et 10 fois sa valeur de référence. Comme pour leurs impacts sur les erreurs aléatoires ou les DOFs, ces deux paramètres font évoluer de manière très similaire les AKs des colonnes estimées à partir de $\text{CO}_2\text{M-var}$. Pour les plus faibles valeurs de $\lambda/\Delta\lambda$ et de SNR simultanément, les

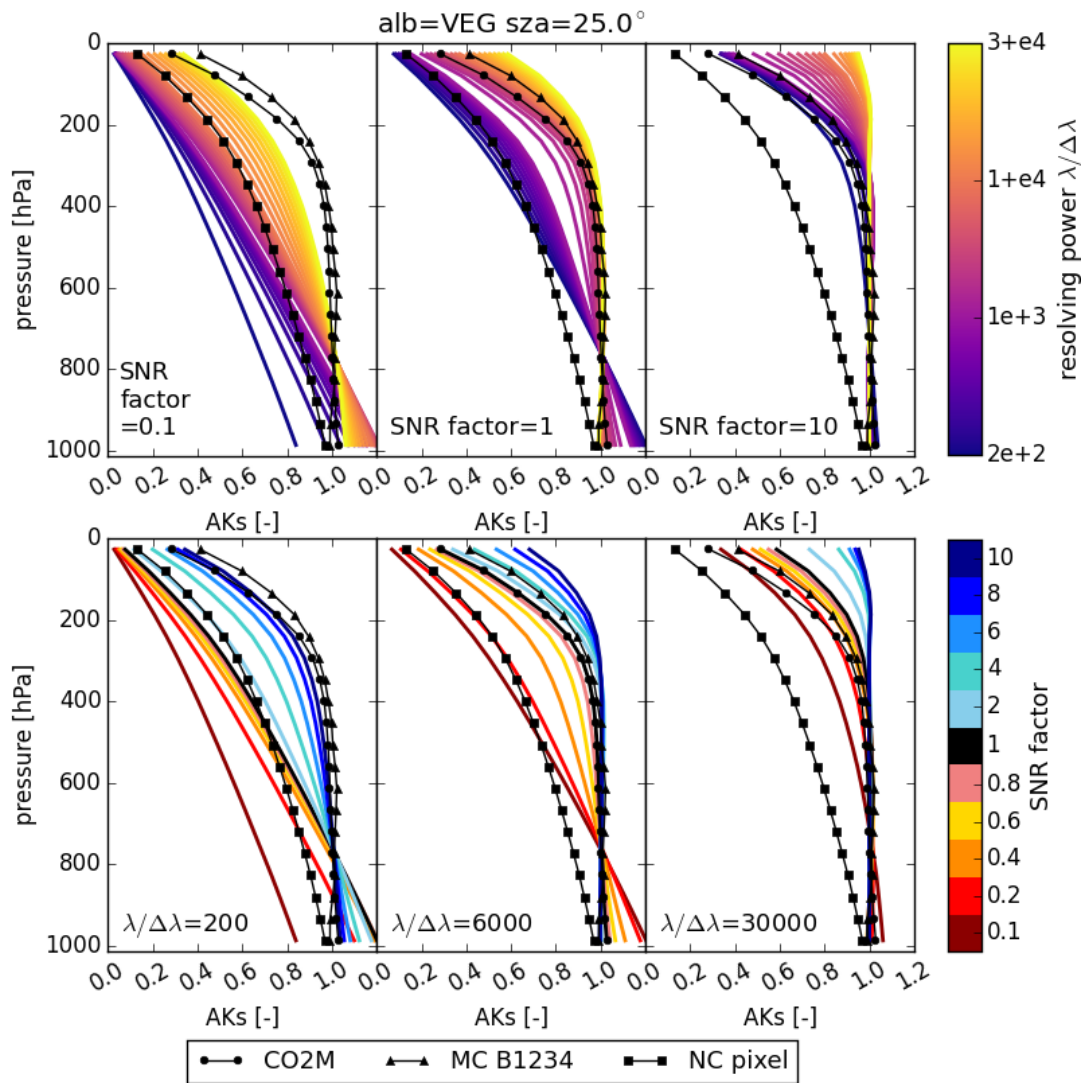


FIGURE 5.4 – Sensibilités verticales (AKs) en fonction du pouvoir de résolution pour trois facteurs multiplicatifs de SNR (haut) et en fonction du SNR pour trois valeurs de pouvoir de résolution (bas), données pour la situation alb = VEG et SZA = 25°. Les lignes avec symboles donnent les sensibilités verticales de CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

AKs atteignent leurs maximums pour la couche atmosphérique la plus proche de la surface, avec une sensibilité inférieure à 1.0 et une sensibilité nulle au sommet de l’atmosphère. Une augmentation du SNR ou du pouvoir de résolution améliorent la sensibilité aux couches proches de la surface qui dépassent progressivement 1.0. Pour des valeurs de $\lambda/\Delta\lambda$ et de

SNR moyennes, ainsi que pour CO₂M ou MicroCarb, les sensibilités verticales sont proches de 1.0 pour toutes les couches de pression de la surface jusqu'à environ 200 hPa, puis elles décroissent. Pour les valeurs de $\lambda/\Delta\lambda$ et de SNR les plus élevées, la sensibilité verticale tend vers 1.0 pour toutes les couches de l'atmosphère. Finalement, on peut constater que la sensibilité verticale de NanoCarb ne reproduit pas exactement l'allure de celles de CO₂M, MicroCarb ou des CO₂M-var. Pour les couches proches de la surface, elle correspond à celle d'un instrument CO₂M-var de faibles pouvoir de résolution et SNR, tandis que pour les couches supérieures de l'atmosphère elle correspond à celle d'un instrument à $\lambda/\Delta\lambda$ moyen et SNR faible (ou vice versa).

On retiendra particulièrement pour la suite de ce chapitre que, dans le cas d'un SNR de référence, les estimations de X_{CO_2} réalisées à partir des mesures d'un instrument à faible pouvoir de résolution tendent à surestimer l'impact de la méconnaissance du CO₂ dans les couches les plus proches de la surface.

5.3.2 Impact des bandes spectrales comprises dans la mesure

Parmi l'ensemble des concepts programmés ou à l'étude (voir section 1.5), certains ne prévoient pas de mesurer l'ensemble des trois bandes « usuelles » du proche infrarouge (bande A de l'O₂, CO₂ faible et fort). Par exemple, le concept à l'étude CO2Image de la DLR prévoit de ne mesurer que la bande CO₂ fort avec un pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda \sim 1600$, ou GOSAT-GW que la bande A de l'O₂ accompagnée de la bande CO₂ faible. On propose donc d'examiner l'impact des bandes spectrales disponibles pour l'estimation de la colonne totale de CO₂ à partir de mesures proche infrarouge.

Résultats CO₂M-var La figure 5.5 montre l'erreur aléatoire d'estimation du X_{CO_2} et les degrés de liberté (DOFs) associés au CO₂ pour différentes configurations de bandes spectrales disponibles dans la mesure, pour le SNR de référence. On peut tout d'abord y noter que la présence de la bande A de l'O₂ (B1 sur la figure, et ci-après) permet d'augmenter les DOFs associés au CO₂ : la présence de cette bande spectrale sensible à la pression de surface, à la température et aux aérosols permet en effet d'apporter une contrainte indépendante à ces paramètres, dont les sensibilités sont corrélées à celles du CO₂ dans les bandes CO₂ faibles (B2 ci-après) et fort (B3 ci-après). Les DOFs sont par ailleurs toujours supérieurs dans les cas B3/B13 comparés aux cas B2/B12. Cela peut certainement être expliqué par le fait que la B3 de l'instrument fictif CO₂M-var mesure deux bandes d'absorption complètes du CO₂ (dont une plus saturée que l'autre) parmi les trois présentes vers 2.05 μm , alors qu'une seule bande d'absorption est mesurée dans la B2 et que les deux bandes ont un SNR égal. Ce classement des DOFs entre les cas B2/B12, B3/B13 et B23/B123 retrouve bien son symétrisme dans le classement des variances a posteriori des paramètres liés au CO₂ dans le vecteur d'état. En revanche, du fait de la différence entre les mesures et les informations qu'elles transportent respectivement, les covariances ne sont pas identiques, résultant dans des erreurs aléatoires sur X_{CO_2} qui ne conservent pas le classement visible dans les DOFs.

La figure 5.6 donne les DOFs pour les autres paramètres inclus dans le vecteur d'état excepté ceux associés à l'albédo (dont les DOFs sont égaux à 1), pour différentes configurations

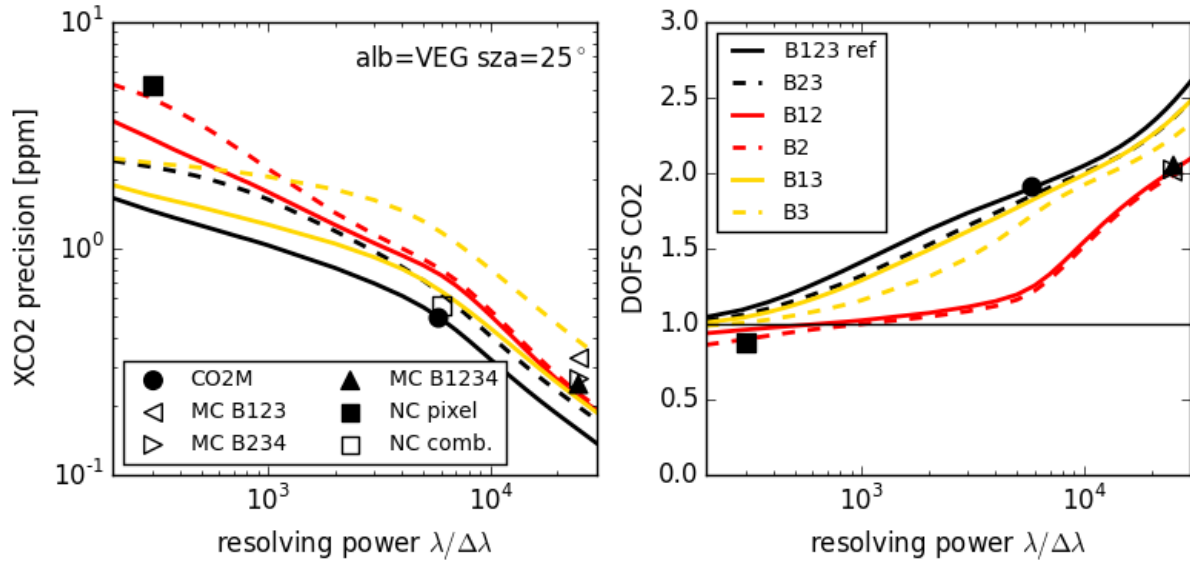


FIGURE 5.5 – Erreur aléatoire d’estimation du X_{CO_2} (gauche) et degrés de liberté associés au CO_2 (droite) pour un instrument fictif CO_2M -var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, pour la situation $\text{alb} = \text{VEG}$ et $\text{SZA} = 25^\circ$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l’ O_2 (B1), et avec les deux bandes CO_2 faible et fort (**noir**, B23), la bande seule bande CO_2 faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO_2 fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

de bandes spectrales disponibles dans la mesure et pour le SNR de référence. Globalement, les DOFs associés à ces variables auxiliaires, qui interfèrent avec l’estimation de X_{CO_2} , sont inférieurs à 1.0 et s’en rapprochent à mesure que le pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ augmente. Les différentes configurations de bandes spectrales disponibles soulignent particulièrement l’intérêt de la B1 pour contraindre les paramètres influant sur la longueur du chemin optique : pression de surface, épaisseurs optiques des couches d’aérosols. En effet, les DOFs associés à ces paramètres dans les cas sans B1 sont (largement, pour la pression de surface et l’épaisseur optique de la couche de mode fin d’aérosols) inférieurs à ceux des cas avec B1, et même à haute résolution spectrale ils n’atteignent pas 1.0. Ces résultats sont rendus possibles grâce à l’hypothèse de modèles d’aérosols (et donc de dépendances spectrales de leurs propriétés optiques) connus, permettant un transfert d’information entre la B1 et les B2 et B3.

Résultats pour les concepts CO_2M , MicroCarb et NanoCarb Les instruments CO_2M et MicroCarb ont des DOFs égaux à 1 (ou très proches dans le cas de l’épaisseur optique de la couche d’aérosols de mode fin) pour tous ces paramètres auxiliaires interférant

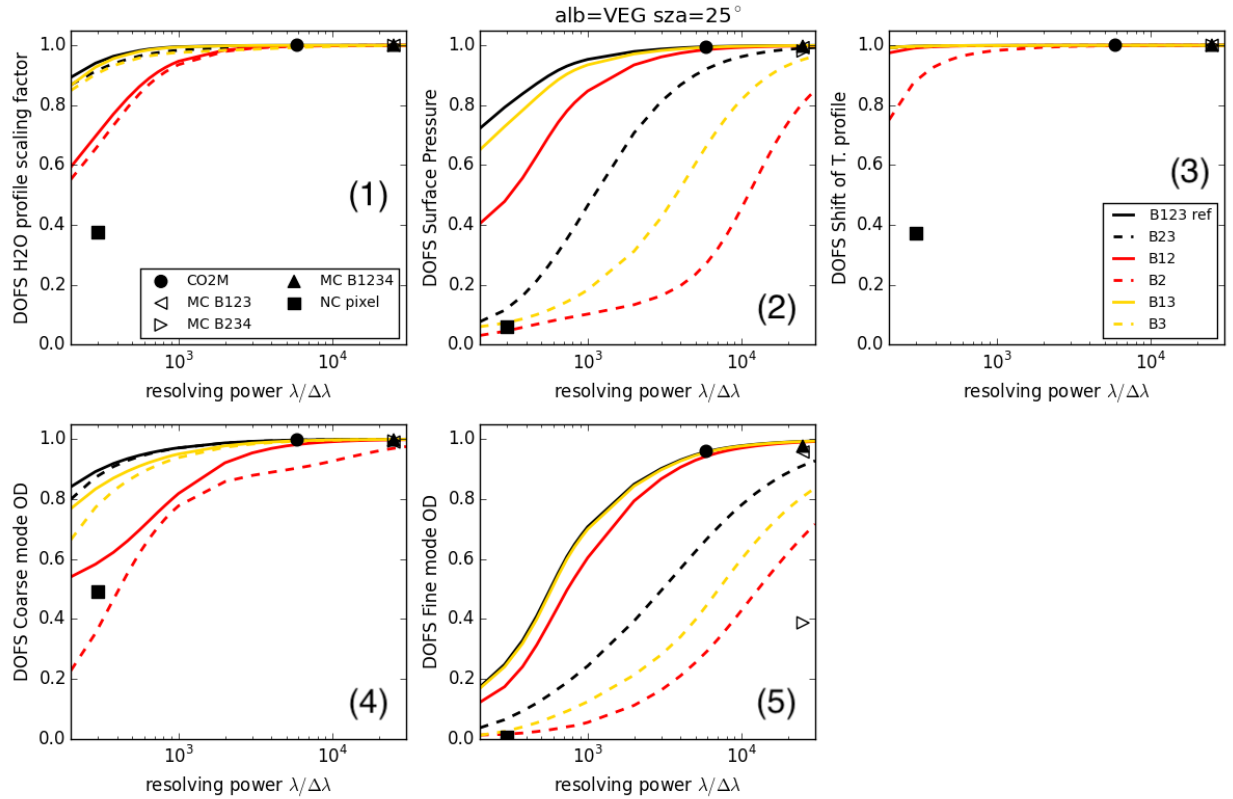


FIGURE 5.6 – Degrés de liberté associés (1) au facteur multiplicatif du profil d' H_2O (2) à la pression de surface (3) au décalage global du profil de température (4) à l'épaisseur optique de la couche de mode grossier d'aérosols et (5) à l'épaisseur optique de la couche de mode fin d'aérosols pour un instrument fictif CO_2M -var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, pour la situation $\text{alb} = \text{VEG}$ et $\text{SZA} = 25^\circ$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l' O_2 (B1), et avec les deux bandes CO_2 faible et fort (**noir**), la bande seule bande CO_2 faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO_2 fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

avec l'estimation de X_{CO_2} . Ainsi, dans un cas idéal où l'atmosphère est parfaitement décrite par les éléments du vecteur d'état, l'erreur systématique associée à une méconnaissance de ces variables auxiliaires sera donc très proche de zéro. NanoCarb montre cependant des résultats différents : il a des DOFs plus faibles que tous ceux obtenus pour CO_2M -var pour le facteur multiplicatif du profil d' H_2O , le décalage du profil de température et l'épaisseur optique de la couche de mode fin d'aérosols. Ses DOFs pour la pression de surface et le mode grossier d'aérosols sont faibles également. Cela signifie qu'il peut être très difficile de contraindre les variables auxiliaires interférant avec l'estimation de X_{CO_2} à partir des mesures NanoCarb. Une méconnaissance de ces variables peut potentiellement résulter dans des erreurs systématiques conséquentes.

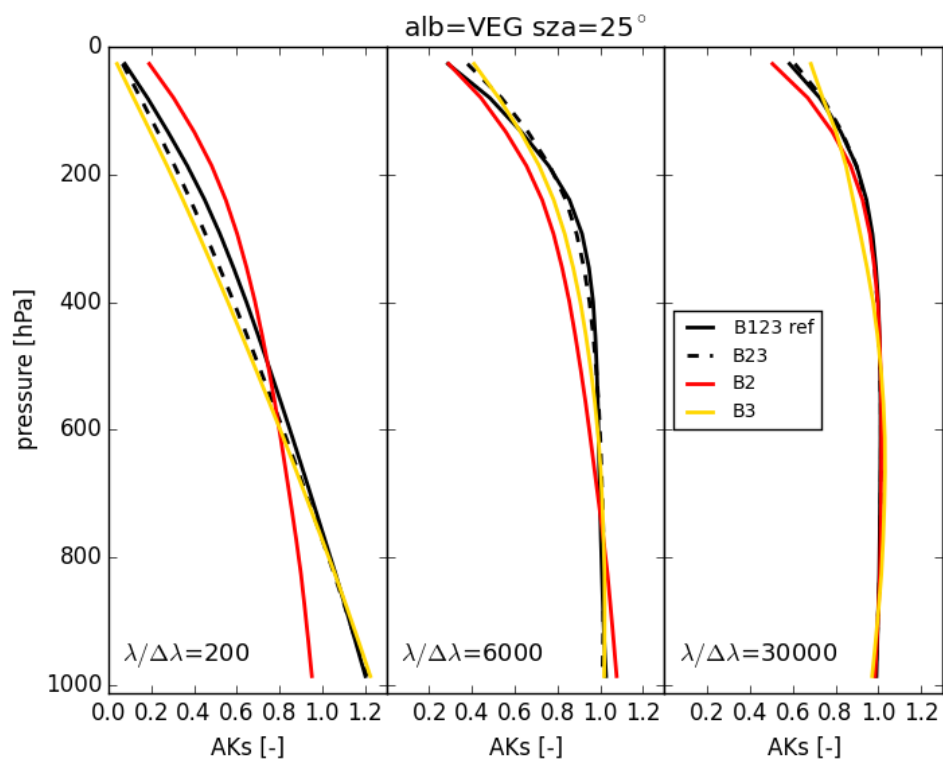


FIGURE 5.7 – Sensibilités verticales (AKs) pour différentes configurations de bandes spectrales disponibles et pour trois valeurs de pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$: 200 (gauche), 6000 (milieu) et 30000 (droite), pour la situation alb = VEG et SZA = 25°.

Sensibilités verticales La figure 5.7 donne les sensibilités verticales des colonnes estimées à partir de l’instrument fictif CO₂M-var qui explore différentes configurations de bandes spectrales disponibles ainsi que différents pouvoirs de résolution. Aux basses résolutions spectrales, les configurations qui incluent B3 montrent une plus forte sensibilité aux couches atmosphériques proches du sol que celles qui n’incluent que B2. En effet, la B3 comprenant des raies saturées de CO₂ (voir figure 5.1), le spectre mesuré y est plus sensible aux variations du CO₂ proche de la surface. Comme noté précédemment, pour des pouvoirs de résolution moyens ou élevé, les sensibilités verticales se rapprochent de 1.0 entre la surface et 200 hPa, et ce pour toutes les configurations de bandes spectrales disponibles.

5.3.3 Impact de la représentation de la concentration de CO₂ dans le vecteur d’état

Les AKs représentés sur la figure 5.4 pour l’instrument NanoCarb ne correspondent pas à ceux montrés dans le chapitre 4 (voir figure 4.12), qui avaient été obtenus en estimant un facteur multiplicatif du profil de concentration atmosphérique du CO₂. Afin d’illustrer l’im-

pact de la représentation du CO_2 dans le vecteur d'état, la figure 5.8 compare les sensibilités verticales obtenues à partir de l'instrument fictif CO_2M -var selon que les estimations soient menées avec un profil de concentration de CO_2 par couche ou un facteur multiplicatif du profil de concentration de CO_2 (incertitude a priori de 10%). On constate que, pour tous les pouvoirs de résolution, les sensibilités verticales obtenues dans le cas du facteur multiplicatif évoluent entre ~ 1.6 à la surface et ~ 0.2 au sommet de l'atmosphère. Même pour les plus hautes résolutions spectrales, les AKs restent éloignés de 1.0 pour les couches situées entre la surface et 200 hPa, contrairement aux AKs obtenus en inversant un profil par couches. Ces différences sont très vraisemblablement causées par les parfaites corrélations implicites qui sont introduites entre les couches atmosphériques par le facteur multiplicatif. Ainsi, on retiendra pour la suite de ce chapitre que l'examen des AKs issus des estimations est important, car leur allure peut être grandement influencée par le choix de la représentation du CO_2 dans le vecteur d'état par exemple.

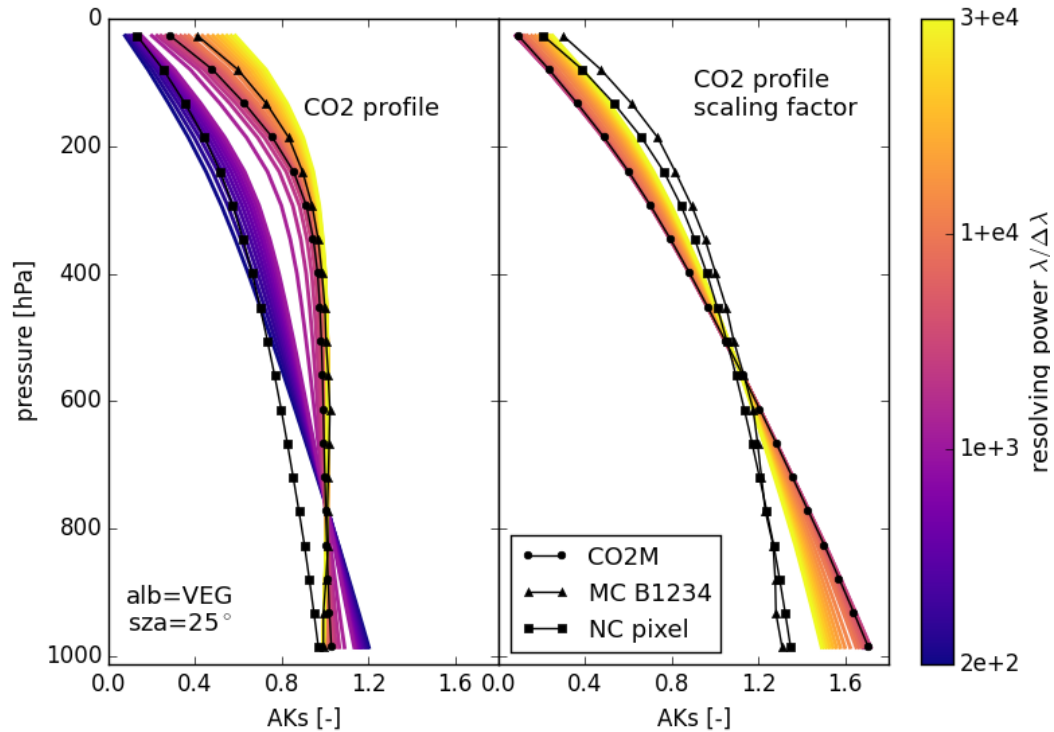


FIGURE 5.8 – Sensibilités verticales (AKs) en fonction du pouvoir de résolution lorsque l'on inverse un profil de concentration de CO_2 par couche (gauche) ou un facteur multiplicatif du profil de concentration de CO_2 (droite), données pour la situation $\text{alb} = \text{VEG}$ et $\text{SZA} = 25^\circ$. Les lignes avec symboles donnent les sensibilités verticales de CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés) pour les deux cas.

5.4 Sensibilités aux perturbations des variables géophysiques essentielles

La section précédente a exploré comment la résolution spectrale influence le contenu en information, la sensibilité verticale ainsi que les performances d'estimation du X_{CO_2} à partir de mesures proche infrarouge, pour différents niveaux de bruit radiométrique, différentes configurations de bandes spectrales disponibles ou représentations du CO_2 dans le vecteur d'état. Tous ces paramètres agissent sur l'information géophysique transportée dans la mesure ainsi que sur les corrélations entre les différentes variables incluses – ou non – dans le vecteur d'état, dont certaines peuvent perturber l'estimation de X_{CO_2} . Dans la continuité des résultats obtenus précédemment, cette section propose maintenant d'étudier les impacts de la méconnaissance a priori des paramètres inclus dans le vecteur d'état sur l'estimation de X_{CO_2} , notamment en fonction du pouvoir de résolution.

Dans un premier temps, on examinera la sensibilité des estimations de X_{CO_2} à la méconnaissance a priori des paramètres auxiliaires contenus dans le vecteur d'état, comme la vapeur d'eau, le décalage du profil de température, l'albédo, etc. Ensuite, on comparera comment les estimations de X_{CO_2} réalisées à partir de différents concepts planifiés ou à l'étude sont spécifiquement sensibles à la méconnaissance a priori de l'épaisseur optique des couches d'aérosols. Finalement, on examinera la sensibilité des estimations de X_{CO_2} à une perturbation anthropique du profil vertical de concentration de CO_2 . Plus particulièrement, on notera comment l'évolution des sensibilités verticales selon la résolution spectrale biaise les estimations de flux de CO_2 obtenues par l'analyse du panache d'un point source.

5.4.1 Sensibilités à la perturbation des variables géophysiques auxiliaires

Du fait de l'entremêlement de l'information géophysique dans les mesures infrarouges, qui dépend de la nature de la mesure, de sa résolution spectrale et radiométrique ainsi que des bandes spectrales disponibles, la méconnaissance a priori de paramètres auxiliaires au CO_2 inclus dans le vecteur d'état peut provoquer des biais de X_{CO_2} . La figure 5.9 donne, suivant l'équation 5.2, les sensibilités du X_{CO_2} estimé à la méconnaissance a priori (1) du contenu en vapeur d'eau, perturbé de +10% (2) de la pression de surface, perturbée d'1 hPa (3) du profil de température, décalé d'1 K (4) de l'albédo de la bande CO_2 faible, décalé de +0.05 (5) de l'épaisseur optique de la couche de mode grossier d'aérosols et (6) de l'épaisseur optique de la couche de mode fin d'aérosols, pour les 12 situations d'observation atmosphériques considérées dans ce chapitre. Ces sensibilités sont données pour l'instrument fictif CO_2M -var dont on fait varier le pouvoir de résolution entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ et $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, ainsi que les configurations des bandes spectrales disponibles. La figure 5.9 montre aussi les sensibilités obtenues pour les concepts CO_2M , MicroCarb et NanoCarb.

On retrouve sur la figure 5.9 les conséquences directes des résultats présentés dans la section précédente. Aux faibles résolutions spectrales, il n'est pas possible d'obtenir une information indépendante sur la vapeur d'eau, la pression de surface, le décalage du profil

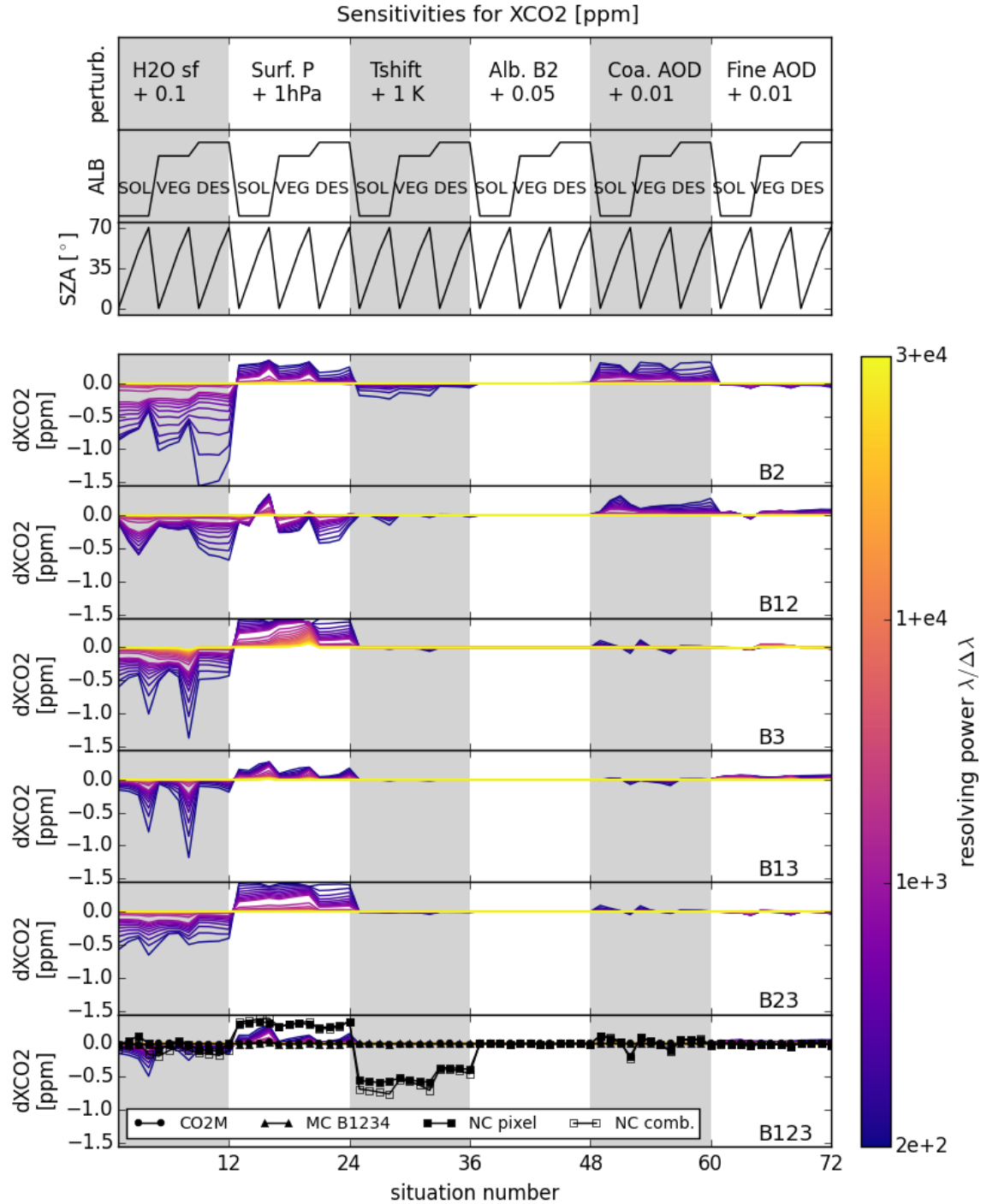


FIGURE 5.9 – Sensibilités du X_{CO_2} estimé à la méconnaissance a priori du contenu en vapeur d'eau, de la pression de surface, du décalage global du profil de température, de l'albédo sur la bande CO_2 faible, de l'épaisseur optique des modes grossiers et fins d'aérosols, pour les 12 situations d'observation atmosphériques considérées dans ce chapitre. Elles sont données pour l'instrument fictif CO_2M -var explorant différents pouvoirs de résolution et configurations de bandes spectrales disponibles, ainsi que pour les concepts CO_2M , MicroCarb et NanoCarb.

de température ou les épaisseurs optiques d'aérosols. Pour le cas de la vapeur d'eau, par exemple, ces faibles résolutions ne permettent pas de distinguer les raies d'H₂O des raies de CO₂, très proches voire superposées dans les bandes CO₂ faible et forte. Une méconnaissance a priori de la vapeur entraîne donc des conséquences sur le X_{CO_2} estimé. De même, aux faibles résolutions spectrales, albédo, pression de surface et épaisseurs optiques d'aérosols s'entremêlent et une erreur a priori sur un des paramètres en entraîne d'autres sur tous ces autres paramètres qui touchent alors le X_{CO_2} estimé. Ces entremêlements d'information sont réduits à mesure que l'on augmente en résolution spectrale ou que l'on ajoute des bandes spectrales.

D'une manière générale, sans détailler chaque aspect de la figure 5.9, on retiendra surtout ici que les basses résolutions spectrales ($\lambda/\Delta\lambda \lesssim 2000$) ne permettent pas de séparer correctement les quelques variables auxiliaires interférant avec l'estimation de X_{CO_2} . Il est donc très vraisemblable que les concepts d'imagerie à fine résolution spatiale mais grossière résolution spectrale ne permettront pas de produire des résultats de X_{CO_2} *Full-Physics* bruts faciles à valider de manière absolue. Si ces biais qui viendront perturber leurs résultats sont homogènes à l'intérieur et en-dehors des panaches que ces concepts cherchent à imager, ceux-ci devraient alors se compenser dans le calcul des réhaussements.

Résultats pour les concepts CO₂M, MicroCarb et NanoCarb Les mesures CO₂M et MicroCarb transportent assez d'information géophysique pour contraindre séparément les quelques paramètres auxiliaires inclus dans le vecteur d'état et étudiés ici dans la figure 5.9. Ce n'est pas le cas pour NanoCarb qui montre des sensibilités à la méconnaissance a priori de la vapeur d'eau, de la pression de surface, de l'albédo de la bande CO₂ faible (quasiment dans l'épaisseur du trait) et des épaisseurs optiques des deux couches d'aérosols. Ces sensibilités sont explicables par le fort entremêlement de l'information géophysique dans les mesures de NanoCarb décrit au chapitre 4. On constate surtout par ailleurs une sensibilité à la méconnaissance a priori du profil de température, dont l'impact interférant dans les estimations n'a pas été pris en compte pour le dimensionnement actuel de l'instrument. Mis à part cette sensibilité à la température, les résultats de NanoCarb sont comparables en valeur absolue à ceux de l'instrument fictif CO₂M-var (dont on a retiré la B1, si on regarde la sensibilité à la méconnaissance de la pression de surface) pour de basses résolutions spectrales.

5.4.2 Sensibilités à des perturbations de l'épaisseur optique des aérosols

L'étude des sensibilités du concept SCARBO à la méconnaissance des aérosols menée dans le chapitre 4 appelle à réaliser un exercice similaire qui confronte tous les concepts considérés ici. Pour les 12 situations d'observation atmosphérique considérées dans ce chapitre, on considère quatre valeurs pour le paramètre COD (0.001, 0.05, 0.10, et 0.15) ainsi que quatre valeurs pour les paramètres FOD (0.001, 0.08, 0.12, 0.22) et on calcule la sensibilité des X_{CO_2} estimés à la méconnaissance a priori de ces paramètres, partant d'un a priori de COD = 0.02 et FOD = 0.05. La figure 5.10 donne pour l'instrument fictif CO₂M-var, dont on

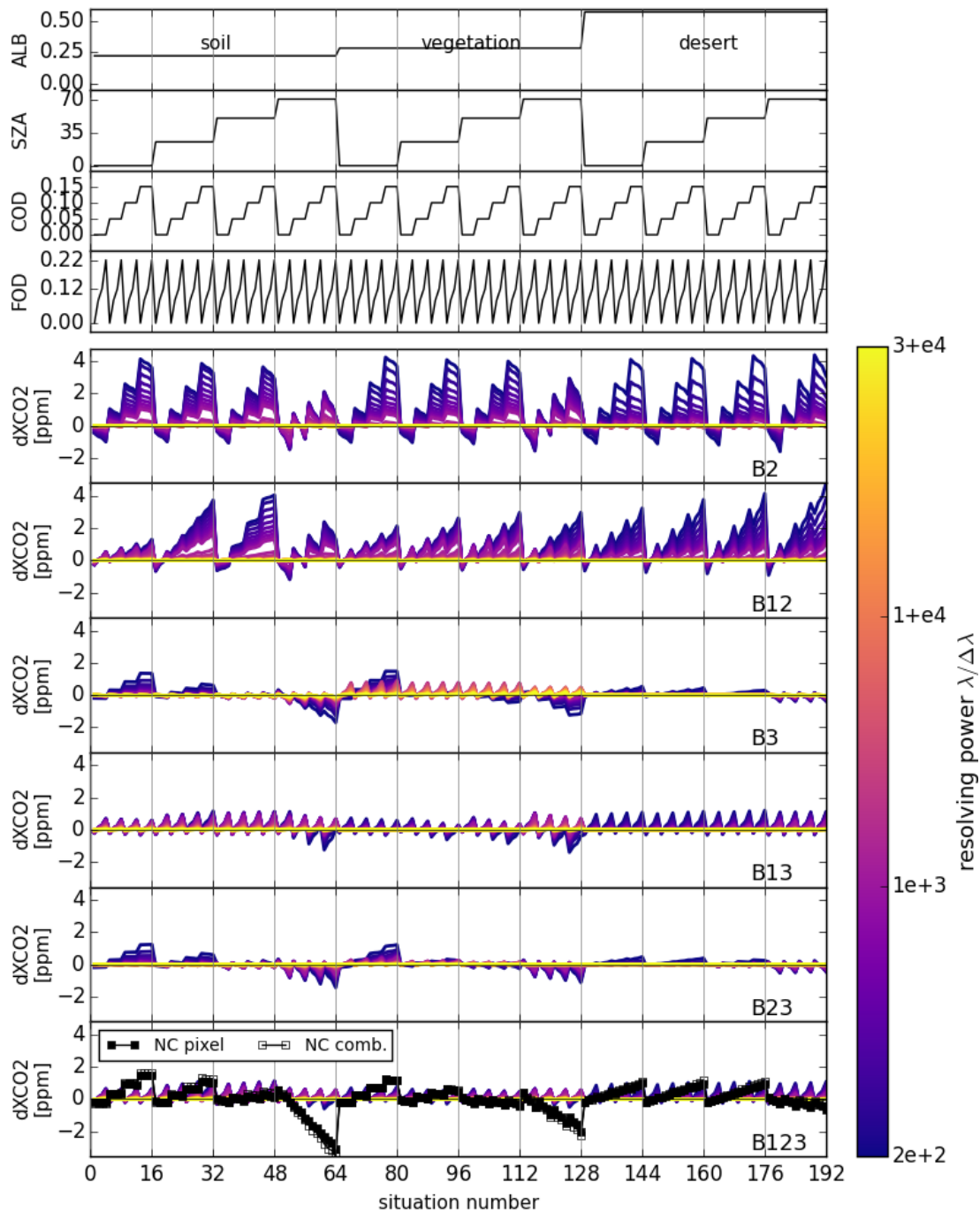


FIGURE 5.10 – Sensibilités du X_{CO_2} estimé à la méconnaissance a priori des épaisseurs optiques des modes grossiers et fins d’aérosols, pour 192 situations d’observation atmosphériques. Elles sont données pour l’instrument fictif CO_2M -var explorant différents pouvoirs de résolution et configurations de bandes spectrales disponibles, ainsi que pour le concept NanoCarb.

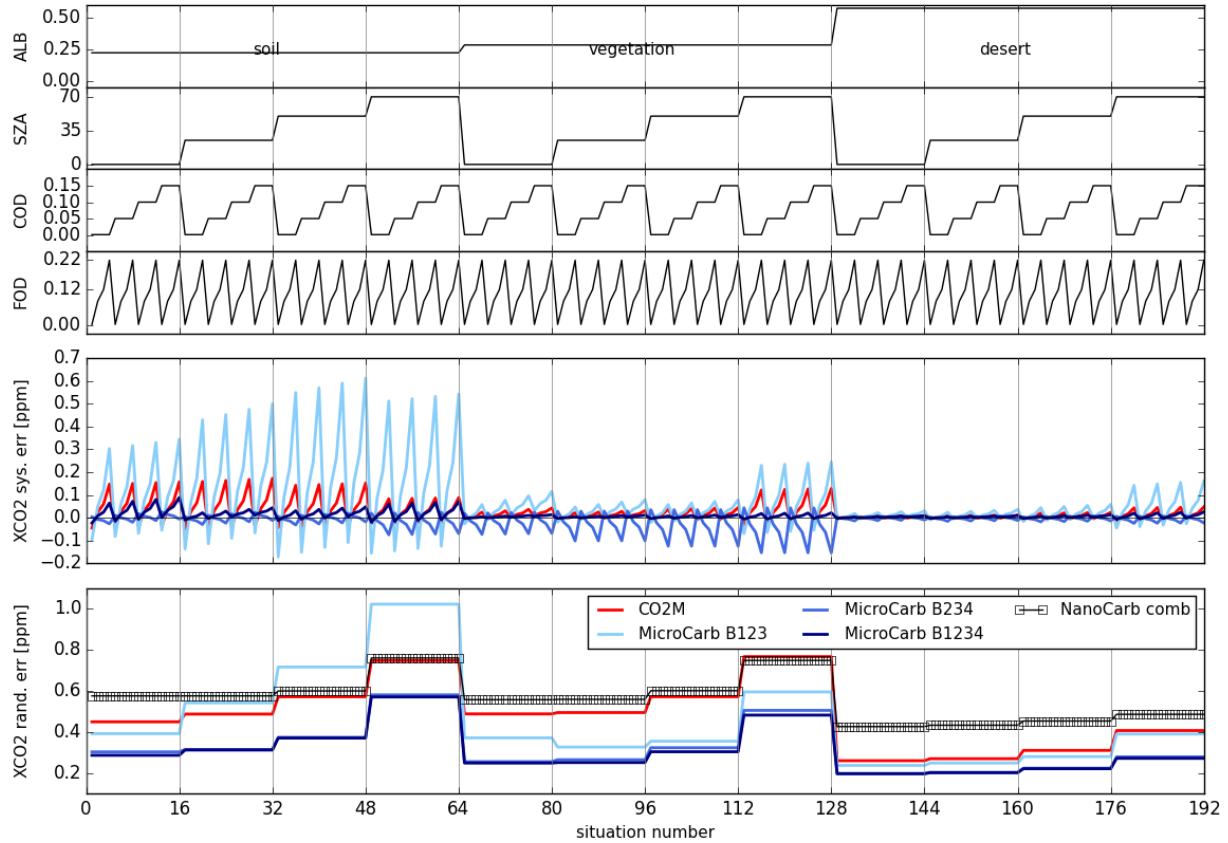


FIGURE 5.11 – Sensibilités du X_{CO_2} estimé à la méconnaissance a priori des épaisseurs optiques des modes grossiers et fins d’aérosols, pour 192 situations d’observation atmosphériques. Elles sont données pour les concepts CO_2M et MicroCarb. Différentes configurations de bandes spectrales sont étudiées pour ce dernier (B123, B234, B1234).

fait varier le pouvoir de résolution ainsi que la configuration des bandes spectrales disponibles, les sensibilités associées à la méconnaissance a priori des épaisseurs optiques pour les 192 situations d’observation atmosphérique considérées.

Avec ou sans la B1, la figure 5.10 montre que la bande CO_2 faible apporte peu d’information sur les épaisseurs optiques des deux couches d’aérosols aux faibles résolutions spectrales ($\lambda/\Delta\lambda \lesssim 2000$). En effet, les sensibilités des X_{CO_2} estimés peuvent atteindre jusqu’à ~ 4 ppm en valeur absolue et sont corrélées à la fois avec les valeurs de COD et de FOD. Ces résultats sont cohérents avec les DOFs de la figure 5.6 ou de celles données en Annexe E. C’est moins le cas pour la bande CO_2 forte, pour laquelle les sensibilités sont plus faibles, et les DOFs associés plus élevés. On retrouve ici une des conclusions de Wilzewski (2021) qui sélectionnent cette bande pour CO_2Image car elle contient plus d’information sur les aérosols. Pour le cas B3 seul, aux très faibles résolutions spectrales, les sensibilités sont corrélées au paramètre COD, mais sinon apparaissent principalement corrélées à FOD pour les résolutions intermédiaires, et entièrement corrélées dans le cas B13. Finalement, lorsque

les deux bandes sensibles au CO_2 sont incluses, les résultats sont assez similaires à ceux du cas B13, avec des sensibilités pour $\lambda/\Delta\lambda \lesssim 5000$ plus faibles cependant.

Résultats pour les concepts CO_2M , MicroCarb et NanoCarb La figure 5.10 donne également les résultats de sensibilités pour le concept NanoCarb, qui sont corrélés à la valeur de COD, comme déjà identifié au chapitre 4. Pour les albédos SOL et VEG à $\text{SZA} = 25^\circ$ ou 50° et pour toutes les situations désertiques, elles sont comparables en valeur absolue aux résultats de CO_2M -var obtenus pour de faibles résolutions spectrales. Les sensibilités plus fortes obtenues à $\text{SZA} = 70^\circ$ pour les albédos SOL et VEG sont cohérentes avec celles de la figure 4.19 et atteignent jusqu'à environ 3 ppm en valeur absolue.

Pour plus de lisibilité, les résultats pour les concepts MicroCarb et CO_2M ont été mis à l'écart dans la figure 5.11. Les erreurs aléatoires associées à ces sensibilités ont été retracées afin de reproduire la disposition utilisée dans le chapitre 4, même si elles ont déjà été commentées dans la section précédente. Les degrés de liberté associés au paramètre COD étant très proches de 1.0 pour CO_2M et MicroCarb, les sensibilités du X_{CO_2} estimé ne sont que peu touchées par la méconnaissance a priori du COD, et sont donc principalement corrélées avec celle du FOD, pour lequel les DOFs sont plus éloignés de 1.0. Dans le cas de MicroCarb, les plus fortes sensibilités apparaissent lorsque la B1 est présente sans la B4, pour le modèle d'albédo SOL, et atteignent jusqu'à 0.6 ppm. Lorsque la B4 est présente seule ou lorsque les deux sont présentes, les sensibilités à la méconnaissance de COD et FOD de MicroCarb sont comparables voire plus faibles que celles de CO_2M . Ainsi, dans le cadre très restreint de cet exercice synthétique qui ne considère que deux paramètres méconnus pour les aérosols, MicroCarb (B1234) est moins sensible à leur méconnaissance a priori que CO_2M . Ces résultats pour MicroCarb apparaissent cohérents avec ceux d'autres études présentées lors des réunions du groupe de travail L2 pour la mission MicroCarb. Il faut cependant garder en tête que les situations atmosphériques réelles seront plus complexes que celles considérées ici, et les sensibilités réelles des concepts seront bien plus significatives. Les mesures proche infrarouge de CO_2M seront par ailleurs complétées par celles d'un polarimètre multi-angles qui apporteront de l'information supplémentaire pour mieux contraindre les paramètres liés aux aérosols (non considéré ici, Rusli et al., 2021).

5.4.3 Sensibilités à une perturbation anthropique du profil de concentration de CO_2

Certains des concepts en cours de développement réalisent un compromis sur la résolution spectrale et/ou le nombre de bandes spectrales disponibles afin d'atteindre la résolution spatiale nécessaire pour imager les panaches d'émissions anthropiques de CO_2 (par exemple Wilzewski et al., 2020). On propose donc ici d'examiner finalement comment la sensibilité à la perturbation du profil vertical de concentration de CO_2 , par un panache d'émission anthropique, évolue selon la résolution spectrale des mesures proche infrarouge depuis l'espace. On en évaluera pour finir les conséquences sur l'estimation du flux émis par le point source.

Simulation d'un panache d'émission anthropique On utilise ici une simulation de panache d'émission anthropique de CO_2 par un point source, réalisée dans le cadre du projet SCARBO par la société NOVELTIS (Bojan Sic, communication personnelle). Elle considère la situation de la centrale à charbon de Jänschwalde (51.83°N , 51.46°E) comme une source ponctuelle d'émission de CO_2 , avec un flux constant de $27.4 \text{ MtCO}_2/\text{an}$. La simulation est initialisée avec les analyses du *Global Forecast System* (GFS, NCEP, 2007) et couple le modèle de prévision numérique de la météo WRF (Skamarock et al., 2008) avec le modèle de transport CHIMERE (Mailler et al., 2017) sur un domaine de $34 \times 34 \text{ km}^2$, centré sur Jänschwalde et discrétisé à une résolution spatiale de $2 \times 2 \text{ km}^2$. Elle court sur une période de 10 jours entre les 18 et 28 mai 2018, avec un pas de temps d'une heure et fournit, pour tous ses points de grille, un profil de concentration verticale de CO_2 , noté x . On l'utilise alors pour calculer la colonne totale $X_{\text{CO}_2, \text{sim}} = h \cdot x$, avec h , la fonction de pondération par la pression.

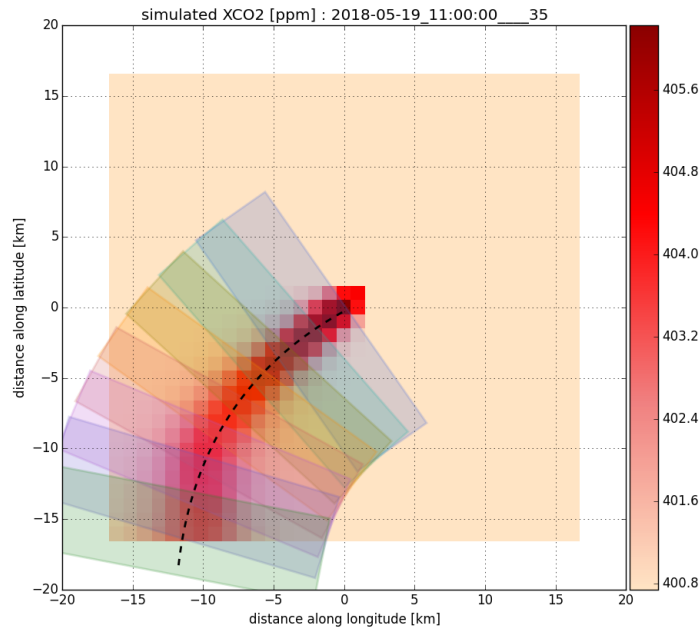


FIGURE 5.12 – Image de X_{CO_2} montrant un panache d'émission anthropique simulé pour un point source. L'axe du panache apparaît en pointillés et les huit boîtes transversales de calcul y sont représentées.

Estimation du flux issu d'un point source Comme détaillé en introduction (voir partie 1.3.3), l'analyse des images de panaches d'émission de CO_2 issus de points sources avec une connaissance de la vitesse des vents permet de déduire les flux de CO_2 associés. L'algorithme

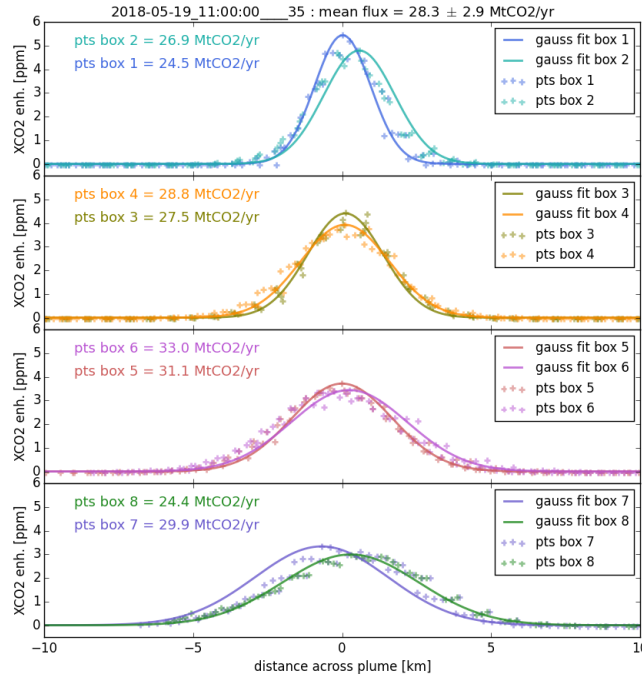


FIGURE 5.13 – Réhaussements ΔX simulés (croix) et ajustés par une fonction gaussienne (traits) pour chacune des huit boîtes transversales de calcul présentées dans la figure 5.12.

illustratif détaillé ci-après, inspiré de Reuter et al. (2019) et Kuhlmann et al. (2020), permet de retrouver, avec un faible biais, le flux de CO₂ issu du point source simulé de Jänschwalde, à partir des images de X_{CO_2} produites avec la simulation de NOVELTIS :

1. Sélection des pixels tels que $X_{\text{CO}_2} > \bar{X}_{\text{CO}_2} + \sigma_{X_{\text{CO}_2}}$ comme appartenant au panache d'émission.
2. Paramétrisation de l'axe du panache en fonction de la distance r à la centrale de Jänschwalde (tirets sur la figure 5.12).
3. Pour huit boîtes transversales de calcul se répartissant le long de l'axe du panache (voir figures 5.12 et 5.13), ajustement d'une fonction gaussienne de maximum α (en ppm) et d'écart-type β (en km) sur le réhaussement $\Delta X = X_{\text{CO}_2} - X_{\text{CO}_2, \text{bg}}$, avec $X_{\text{CO}_2, \text{bg}}$, la colonne de fond hors du panache.
4. Pour chacune des huit boîtes, calcul du flux transversal de CO₂, noté f_{CO_2} et exprimé en MtCO₂/an, selon une méthode approximative inspirée de la proposition de Reuter et al. (2019) : $f_{\text{CO}_2} = 0.53 \times (p_{\text{surf}}/p_{\text{surf,ref}}) \times \alpha \times \beta \times U$, avec U , la vitesse du vent simulé par WRF et exprimée en m/s, moyennée sur la couche limite pour le pixel correspondant au maximum de ΔX , p_{surf} , la pression de surface et $p_{\text{surf,ref}} = 1013$ hPa, la pression de surface de référence.

- Le flux F_{CO_2} associé à l'image du panache est calculé comme la moyenne des f_{CO_2} calculés sur les huit boîtes transversales.

La figure 5.14 montre les résultats obtenus par l'algorithme illustratif pour les panaches simulés de jour (entre 8 heures et 17 heures inclus). L'ensemble des flux estimés a un biais de 7.3 ± 26.6 MtCO₂/an par rapport à la valeur simulée de 27.4 MtCO₂/an, et un filtrage à 2σ , qui retire les cas pour lesquels la forme du panache n'est pas exploitable, donne un biais de 2.3 ± 11.4 MtCO₂/an. Finalement, pour mettre en évidence l'impact de la résolution spectrale sur la sensibilité aux perturbations anthropiques du profil vertical de concentration de CO₂, on ne conserve que les situations pour lesquelles le flux estimé est distant de moins d'un quart du flux simulé.

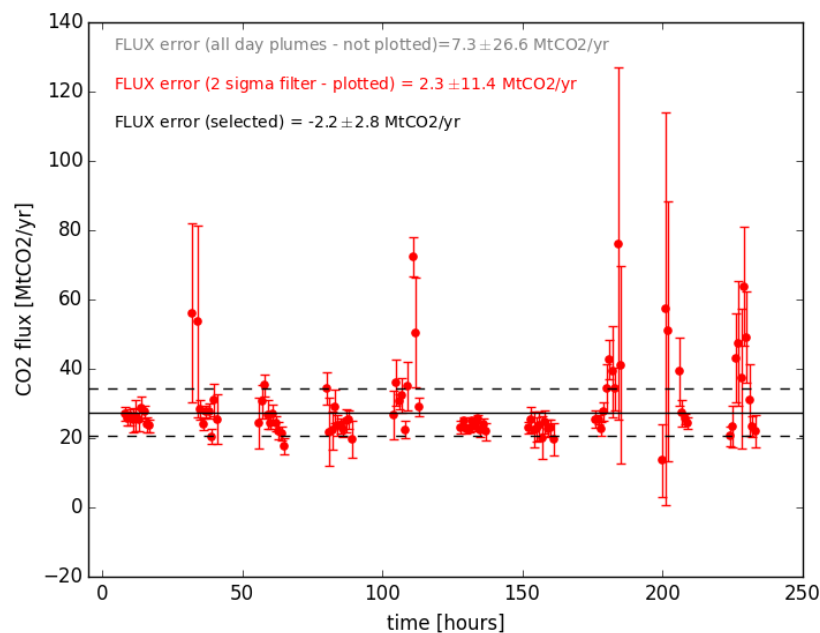


FIGURE 5.14 – Série temporelle des flux (filtrés à 2σ) estimés à partir des images de X_{CO_2} simulées pour une source ponctuelle d'émission correspondant à 27.4 MtCO₂/an. Seules les situations comprises entre les lignes avec tirets sont utilisées pour la suite du travail.

Observation du panache depuis l'espace : impact de la résolution spectrale sur la sensibilité verticale et l'estimation des flux Depuis l'espace (ou un avion), les images de X_{CO_2} sont produites par inversion du transfert radiatif, permettant d'interpréter les mesures proche infrarouge en termes de concentration atmosphérique de CO₂ (voir chapitre 3). Ces résultats sont donc perturbés par une erreur aléatoire, issue entre autres du bruit radiométrique de l'instrument, ainsi que lissés par la sensibilité verticale de la colonne. Le niveau d'erreur aléatoire, qui est influencé par la résolution spectrale et le bruit instrumental comme l'a montré la partie 5.3.1, perturbe la détectabilité du panache, qui dépend également

de la résolution spatiale des mesures car une résolution spatiale plus fine permet d’obtenir des réhaussements de X_{CO_2} plus forts (voir par exemple Wilzewski et al., 2020; Strandgren et al., 2020). La résolution spatiale étant fixée à 2 km dans cette simulation réalisée par NOVELTIS, cet aspect du problème lié à la détectabilité du panache n’est pas considéré ici.

Pour l’instrument fictif CO₂M-var (B123, ici présenté pour la situation alb = VEG et SZA = 25°) dont on fait varier le pouvoir de résolution entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ et $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, on simule les X_{CO_2} observés depuis le satellite par lissage des profils verticaux x de concentration de CO₂ produits par la simulation WRF, en appliquant les sensibilités verticales associées au pouvoir de résolution (voir figure 5.4) :

$$X_{\text{CO}_2,\text{obs}} = X_{\text{ap}} + \sum_{i=1}^{n_{\text{lay}}} h_i a_i (x_i - x_{i,\text{ap}}) \quad (5.4)$$

avec $X_{\text{CO}_2,\text{obs}}$, la colonne totale observée depuis l’espace, X_{ap} la colonne totale a priori, n_{lay} , le nombre de couches utilisé pour discrétiser verticalement l’atmosphère pour l’inversion du transfert radiatif, x et x_{ap} les profils verticaux de concentration de CO₂ simulés et a priori (ce dernier considéré constant et de valeur égale à celle de fond), a , la sensibilité verticale de la colonne estimée et h , la fonction de pondération par la pression.

La figure 5.15 montre les différences moyennes entre les réhaussements de colonne totale de CO₂ observés $\Delta X_{\text{obs}} = X_{\text{CO}_2,\text{obs}} - X_{\text{CO}_2,\text{bg,obs}}$ (obtenus avec l’équation 5.4) et ceux calculés directement depuis les sorties de WRF $\Delta X_{\text{sim}} = X_{\text{CO}_2,\text{sim}} - X_{\text{CO}_2,\text{bg,sim}}$, avec $X_{\text{CO}_2,\text{sim}} = h \cdot x$, ainsi que les différences entre les flux estimés associées, pour différents pouvoirs de résolution $\lambda/\Delta\lambda$.

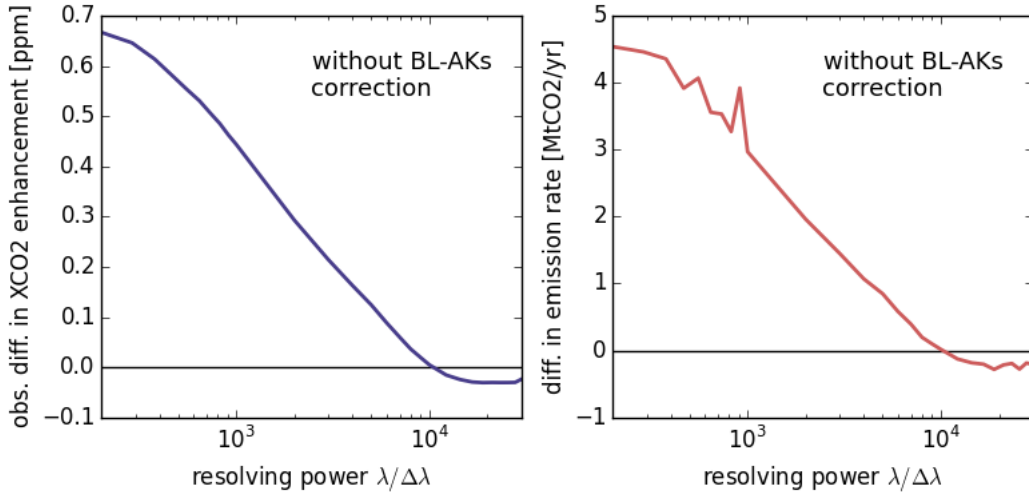


FIGURE 5.15 – Différences entre le réhaussement de X_{CO_2} observé depuis l’espace et celui calculé directement à partir des profils simulés par WRF (gauche) et différences entre les flux estimés à partir des X_{CO_2} observés depuis l’espace et ceux calculés directement à partir des X_{CO_2} fournis par la simulation WRF (droite).

On y constate que les flux estimés aux résolutions spectrales les plus faibles à partir des colonnes observées depuis l'espace dévient jusqu'à $+4.5 \text{ MtCO}_2/\text{an}$ des flux directement estimés à partir des colonnes simulées, correspondant ici à la vérité synthétique. Cette déviation se réduit à mesure que la résolution spectrale des mesures satellites augmente, et ce comportement est complètement corrélé¹ à la différence entre les réhaussements ΔX_{obs} et ΔX_{sim} obtenus pour le panache. Cette déviation trouve son origine dans les valeurs de couche limite des sensibilités verticales des colonnes estimées depuis des mesures proche infrarouge : lorsque la sensibilité verticale est différente de 1.0, la colonne totale de CO_2 estimée n'est pas fidèle aux différences entre le vrai profil de concentration (inconnu en pratique) et le profil a priori (voir équation 5.4). Lorsque l'on réalise finalement la différence entre deux colonnes, celle du panache et celle de fond, cela se traduit par un étirement (sensibilité > 1.0) ou une contraction (sensibilité < 1.0) des réhaussements observés depuis l'espace, provoquant directement un biais dans les flux estimés. Sur la ligne du haut de la figure 5.15, on retrouve donc les conséquences de l'évolution des sensibilités verticales de l'instrument CO_2M -var selon le pouvoir de résolution, donnée sur la figure 5.4. Aux plus faibles valeurs de $\lambda/\Delta\lambda$, la sensibilité verticale est proche d'1.2, provoquant un étirement de $+20\%$ du réhaussement observé par rapport à la vérité synthétique et donc un biais sur le flux estimé, tandis que pour les hautes résolutions spectrales la sensibilité verticale est égale à 1.0 dans la couche limite, permettant d'estimer correctement le flux associé au panache observé.

Ainsi, au travers du formalisme d'inversion du transfert radiatif, la résolution spectrale des mesures proche infrarouge a des conséquences sur les colonnes totales de CO_2 observées qui peuvent perturber leur utilisation pour l'estimation des flux avec les méthodes dites « de panache ». Il est nécessaire de tenir compte de la sensibilité verticale des colonnes estimées afin d'« assimiler » correctement les résultats d'inversion du transfert radiatif. En supposant que le panache est confiné à la couche limite, une solution proposée par Krings et al. (2011) pourrait être de diviser les réhaussements de X_{CO_2} par la valeur moyenne de la sensibilité verticale dans la couche limite. Cependant, cette approche n'est pas complètement satisfaisante car elle brise l'optimalité de la solution qui a été déterminée en inversant le transfert radiatif. Une solution alternative pourrait être de n'estimer qu'une concentration de CO_2 dans la couche limite, à la place d'un profil sur toute la verticale de l'atmosphère. Selon les missions, cela pourrait demander d'envisager différents types de produits L2, certains adaptés pour les études d'inversion atmosphérique des flux « classiques » et d'autres adaptés à l'utilisation des méthodes dites « de panache ».

L'« assimilation » des réhaussements de X_{CO_2} (ou de X_{GHG} en général) est à la base des différentes méthodes d'inversion de panache pour estimer le flux issu d'une source d'émission ponctuelle (Varon et al., 2018), et devrait donc logiquement faire mention de la prise en compte des sensibilités verticales. Cependant, la publication de Varon et al. (2018) explique explicitement que « les estimations issues du proche infrarouge ont une sensibilité verticale proche de 1.0 [...] qui peut être ignorée ». Les résultats montrés précédemment pour X_{CO_2} avec différentes résolutions spectrales, configurations d'inversion et de bandes spectrales montrent

1. Un effet de seuil de détection des panaches crée la discontinuité visible pour les flux.

que ce n'est pas toujours le cas. L'allure de la sensibilité verticale dépendant de nombreux facteurs et choix arbitraires propres à chaque algorithme (dont la représentation du CO_2 dans le vecteur d'état, ainsi que sa covariance), il apparaît plus indiqué d'être vigilant et de toujours examiner la sensibilité verticale des estimations avant d'appliquer des méthodes d'inversion de panache. La thèse de Wilzewski (2021) recense de nombreuses études appliquant les méthodes de panaches pour exploiter les mesures de l'imageur hyperspectral aéroporté AVIRIS-NG, du satellite italien PRISMA ou de l'instrument aéroporté allemand MAMAP (voir section 1.4 et partie 1.3.4, respectivement). Trois méthodes différentes sont principalement appliquées pour inverser leur mesures infrarouges.

- La première est celle du *matched filter*, déjà présentée au chapitre 4 : la mention d'une sensibilité verticale² des estimations issues de cette méthode n'apparaît pas dans les nombreuses études qui l'appliquent (par exemple Thorpe et al., 2013; Thompson et al., 2015; Cusworth et al., 2020; Guanter et al., 2021), mais peut-être n'en a-t-elle pas par construction ?
- La deuxième méthode, IMAP-DOAS (Frankenberg et al., 2005), est basée sur l'estimation optimale et produit donc bien une sensibilité verticale dans son formalisme. En revanche, il n'en est pas fait mention dans les études identifiées appliquant cette méthode (Thorpe et al., 2014; Cusworth et al., 2021a,b).
- La troisième méthode est WFM-DOAS (Buchwitz et al., 2000, 2005). Son formalisme produit bien une sensibilité verticale pour les estimations qu'elle réalise, et Krings et al. (2011) recommandent – de manière non satisfaisante – de corriger les réhaussements estimés à partir des mesures MAMAP en divisant par la valeur de la sensibilité verticale dans la couche limite. La même correction est faite par Borchardt et al. (2021) pour des réhaussements estimés à partir de mesures AVIRIS-NG. Krautwurst et al. (2017) ne font cependant pas mention d'une telle correction.

Bien que leurs sensibilités verticales soient proches de 1.0 dans la couche limite, mention n'en est pas non plus faite dans les études identifiées appliquant l'inversion de panache à partir de mesures OCO-2 (Nassar et al., 2017; Reuter et al., 2019) ou de simulations CO_2M (Kuhlmann et al., 2020).

Ainsi, il apparaît que la sensibilité verticale des colonnes utilisées dans les études de panache actuelles n'est pas toujours mentionnée (prise en compte?) selon les instruments considérés et méthodes d'inversion appliquées. Peut-être est-ce une évidence implicite ? Néanmoins, les résultats présentés ici soulignent l'importance que peut avoir cette sensibilité verticale sur les flux estimés – notamment pour les pouvoirs de résolution les plus faibles – et suggèrent qu'elle devrait être a minima toujours mentionnée pour mieux caractériser les réhaussements de X_{CO_2} (ou de X_{GHG} en général) utilisés.

2. Recherches de texte 'averaging kernel' et 'vertical sensitivity'.

5.5 Sensibilités à la connaissance de la spectroscopie de l'O₂ et du CO₂

La partie 3.5.1 a montré pour des mesures réelles de la mission OCO-2 les sensibilités des résultats d'estimation de X_{CO_2} à l'évolution de la spectroscopie. On propose maintenant d'évaluer ici ces sensibilités en testant les mêmes évolutions de paramètres spectroscopiques pour les concepts CO₂M, MicroCarb et NanoCarb, ainsi que pour l'instrument fictif CO₂M-var dont on fait varier le pouvoir de résolution entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Comme pour la partie 5.3.2, on considèrera également l'impact des bandes spectrales disponibles dans la mesure afin de pouvoir mieux caractériser l'origine des sensibilités observées.

Après avoir donné quelques précisions sur la méthode, on présentera dans un premier temps les sensibilités des résultats d'estimation de X_{CO_2} à une évolution de la spectroscopie de CO₂ seule. On s'intéressera ensuite à celles issues d'une évolution de la spectroscopie de l'O₂ seule, et finalement on examinera leurs sensibilités à des évolutions simultanées des spectroscopies de l'O₂ et du CO₂. Afin d'alléger le corps du texte, seuls les résultats de sensibilités pour la colonne totale de CO₂ sont donnés ici. Les résultats de sensibilités pour la pression de surface sont donnés en Annexe G.

5.5.1 Précisions sur la méthode

Sur l'interprétation des signes L'impact de la méconnaissance de la spectroscopie sur les estimations de X_{CO_2} est évalué ici en propageant une erreur de modélisation directe liée à la spectroscopie dy^{sp} grâce à la matrice de gain G (voir équation 5.1). Si on note y^{old} , la mesure simulée avec la version la spectroscopie la plus ancienne, et y^{new} , la mesure simulée avec la version plus récente de la spectroscopie, on a :

$$dy^{\text{sp}} = y^{\text{new}} - y^{\text{old}} \quad (5.5)$$

En réécrivant (abusivement) l'estimation optimale sous une forme linéaire avec $y_{\text{OCO-2}}$, la mesure réelle de l'instrument OCO-2, la partie 3.5.1 évalue l'impact $d\hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{sp}}$ de la spectroscopie sur des mesures réelles :

$$d\hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{sp}} = \hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{new}} - \hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{old}} \text{ avec } \begin{cases} \hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{old}} = x_a + G^{\text{old}} [y_{\text{OCO-2}} - y_a^{\text{old}}] \\ \hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{new}} = x_a + G^{\text{new}} [y_{\text{OCO-2}} - y_a^{\text{new}}] \end{cases} \quad (5.6)$$

En considérant que l'impact du changement des matrices Jacobiennes est petit devant celui des différences de modélisation sur la mesure (voir Annexe F), on peut écrire $G = G^{\text{old}} = G^{\text{new}}$, et l'équation 5.6 devient :

$$d\hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{sp}} = \hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{new}} - \hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{old}} = G [y_a^{\text{old}} - y_a^{\text{new}}] \quad (5.7)$$

Ainsi, par construction, la propagation $d\hat{x}^{\text{sp}}$ de l'erreur de modélisation $dy^{\text{sp}} = y^{\text{new}} - y^{\text{old}}$ étudiée ici aura un signe contraire à celui observé pour $d\hat{x}_{\text{OCO-2}}^{\text{sp}}$ dans la partie 3.5.1.

Sur l’adaptation du vecteur d’état Pour cette étude de sensibilités, les épaisseurs optiques des deux couches d’aérosols ont été retirées du vecteur d’état (voir tableau 5.1) afin de rester dans une configuration comparable aux tests menés sur les mesures réelles d’OCO-2 (voir partie 3.5.1), ainsi que pour échapper aux fortes non-linéarités qu’apporte la prise en compte des aérosols (voir Annexe F).

5.5.2 Sensibilités à l’évolution de la spectroscopie du CO₂

On commence par examiner les sensibilités de l’estimation de X_{CO_2} à la méconnaissance de la spectroscopie du CO₂, calculée ici comme une erreur de modélisation directe égale à la différence de deux spectres simulés. Le premier spectre de référence, noté y^{old} , est calculé à partir de la spectroscopie du CO₂ décrite par Lamouroux et al. (2010), qui propose un modèle de mélange entre raies et d’élargissement par la vapeur d’eau reposant sur les raies de CO₂ incluses dans la base de données spectroscopiques HITRAN 2008 (Rothman et al., 2009). Le deuxième spectre, noté y^{new} , est calculé à partir de la spectroscopie du CO₂ décrite par Lamouroux et al. (2015), qui propose un autre modèle de mélange entre raies et d’élargissement par la vapeur d’eau, reposant lui sur les raies de CO₂ incluses dans la base de données spectroscopiques HITRAN 2012 (Rothman et al., 2013). L’erreur de modélisation calculée ici touche les bandes CO₂ faible et fort.

Résultats CO₂M-var La figure 5.16 donne les sensibilités des colonnes totales estimées à la méconnaissance de la spectroscopie du CO₂ pour un instrument fictif CO₂M-var dont on fait varier le pouvoir de résolution entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, ainsi que la configuration des bandes spectrales disponibles. Lorsque les trois bandes spectrales de CO₂M-var sont incluses dans la mesure, la sensibilité du X_{CO_2} estimé évolue (selon la situation) entre environ 1 – 6 ppm pour le plus faible pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda = 200$, jusqu’à un maximum compris entre 3 – 14 ppm atteint entre $\lambda/\Delta\lambda = 1000$ et $\lambda/\Delta\lambda = 10000$ ³. Les sensibilités du X_{CO_2} estimé stagnent ou diminuent ensuite pour les plus fortes valeurs de pouvoir de résolution.

Les différentes configurations de bandes spectrales disponibles donnent un éclairage sur l’origine de ces sensibilités. Lorsque B2 est disponible seule ou avec B1, les sensibilités n’évoluent que très peu selon la résolution spectrale, restant aux alentours de 2 ppm. Lorsque B3 est disponible seule ou avec B1, les sensibilités reproduisent le même comportement que celui décrit par le cas qui comprend les trois bandes spectrales, en plus intense encore. Ainsi, des deux bandes spectrales sensibles au CO₂, c’est les sensibilités à la méconnaissance de la spectroscopie du CO₂ de la B3 qui influence le plus celle du cas B123. Ce résultats suit une conclusion déjà notée pour la figure 5.5 : la B3 de CO₂M-var apporte plus d’information sur

3. L’origine du maximum de sensibilité atteint entre $\lambda/\Delta\lambda = 1000$ et $\lambda/\Delta\lambda = 10000$ lorsque la B3 est présente est vraisemblablement à chercher dans la saturation des raies de CO₂ de cette bande. Des tests ont été réalisés avec jusqu’à un centième du niveau actuel de la concentration atmosphérique dans le but de désaturer les raies de CO₂ (un tiers et un dixième ne suffisent pas), mais les sensibilités deviennent si petites qu’elles ne sont plus représentatives vis-à-vis de l’incertitude a posteriori. Bref, pour l’instant les résultats sont difficiles à interpréter.

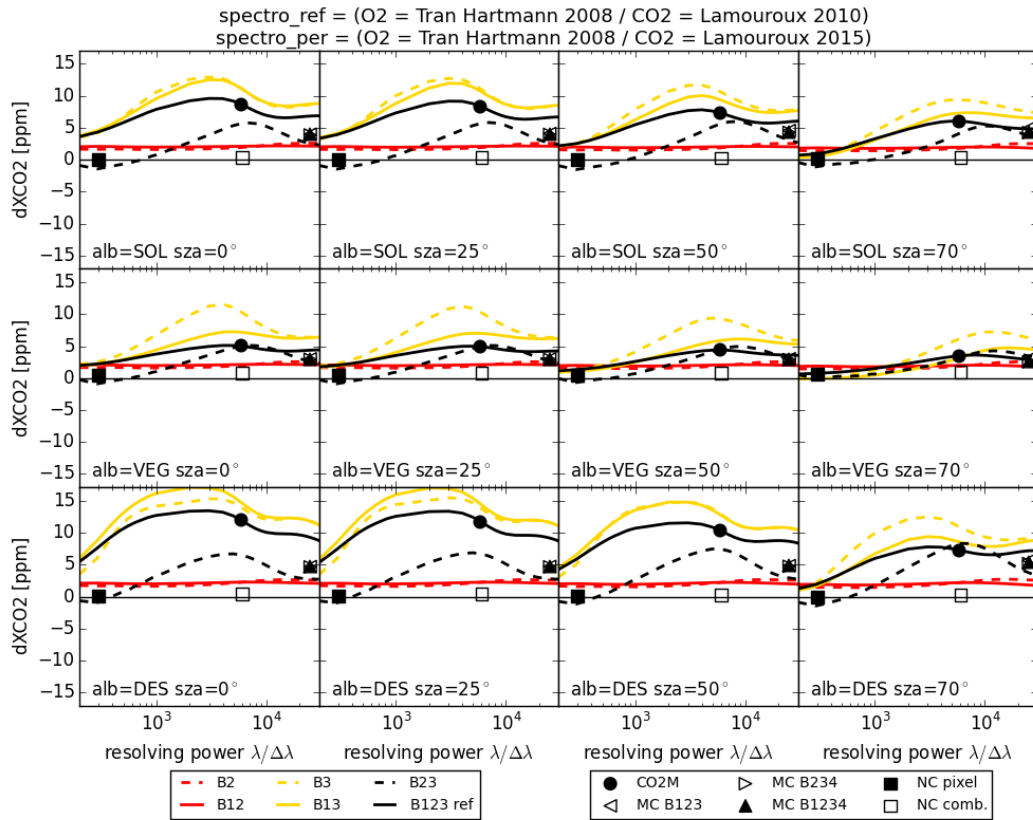


FIGURE 5.16 – Sensibilités de l’estimation de X_{CO_2} à la méconnaissance de la spectroscopie du CO_2 en fonction du pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ et de différentes configurations de bandes spectrales disponibles, pour les 12 situations d’observations atmosphériques considérées dans ce chapitre. Les symboles donnent les résultats pour les concepts CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

le CO_2 que la B2 car la B3 compte deux bandes d’absorption du CO_2 pour une seule dans la B2, et ce alors que les deux bandes ont le même SNR.

D’importants enseignements peuvent être tirés de la figure 5.16. Considérons tout d’abord la contrainte d’une erreur systématique inférieure à 0.5 ppm, donnée pour les objectifs de la mission CO_2M (Meijer, 2020). Les résultats obtenus pour CO_2M -var montrent que considérer la qualité des paramètres spectroscopiques reste important si l’on cherche à valider les estimations de X_{CO_2} réalisées à partir des mesures de CO_2M -var, et ce pour n’importe quel pouvoir de résolution testé, même les plus faibles. Ils soulignent donc la pertinence des travaux d’amélioration des paramètres spectroscopiques pour toutes les résolutions spectrales d’observation du rayonnement proche infrarouge (si l’objectif est une validation « absolue » du résultat *Full-Physics* brut). Par ailleurs, si l’on considère exclusivement la « résilience » (au sens de faible sensibilité) à la méconnaissance de la spectroscopie du CO_2 , les plus basses

résolutions spectrales, qui moyennent la méconnaissance sur de larges intervalles spectraux lors de la convolution avec la fonction d'instrument, apparaissent plus intéressantes que les hautes résolutions (lorsque la B3 est utilisée). Cependant, cette affirmation est à mettre en perspective avec la quantité d'information sur le CO_2 contenue dans la mesure du cas CO_2M -var considéré. La confrontation des figures 5.16 et 5.5 ou E.7 révèle que les résolutions spectrales les plus résilientes à la méconnaissance de la spectroscopie du CO_2 sont celles pour lesquelles les estimations montrent les degrés de liberté associés au CO_2 les plus faibles. Ainsi, le compromis idéal qui chercherait à allier meilleure sensibilité au CO_2 et meilleure résilience à la méconnaissance de sa spectroscopie semblerait plutôt se trouver aux alentours de $\lambda/\Delta\lambda = 10000$ (lorsque la B3 est incluse).

Importance de la bande A de l' O_2 La figure G.1 montre sous un autre jour l'utilité d'une bande sensible à l' O_2 : lorsque la B3 est présente mais la B1 absente, la pression de surface dévie de sa valeur de référence du fait de l'entremêlement des informations sur le CO_2 et la pression de surface dans la B3. Dans le cas où seule B2 est disponible, sans B1, la pression de surface dévie peu de sa valeur de référence, possiblement parce que les raies de CH_4 , présentes dans la B2 de l'instrument fictif CO_2M -var, aident à contraindre la pression de surface (CH_4 est supposé parfaitement connu, non inclus dans le vecteur d'état).

Résultats pour les concepts CO_2M , MicroCarb et NanoCarb Les sensibilités des concepts CO_2M et MicroCarb à la méconnaissance de la spectroscopie du CO_2 sont également représentées sur la figure 5.16. Les résultats pour CO_2M suivent naturellement les impacts décrits précédemment pour CO_2M -var. Concernant MicroCarb, les sensibilités du X_{CO_2} estimé sont plus proches de celles des cas B2/B12 que de celles des cas B3/B13 de CO_2M -var pour les résolutions spectrales comparables. En effet, la B3 de MicroCarb est beaucoup moins large que celle de CO_2M et le SNR associé à cette bande est plus de deux fois plus faible que celui de la B2 : la B2 pèse donc plus dans les estimations. Pour la situation alb = VEG et SZA = 25° , la sensibilité d'environ 2.5 ppm affichée par MicroCarb est proche des résultats obtenus avec OCO-2 sur la situation de validation fournie par la campagne MAGIC 2019 (voir partie 3.5.1).

Concernant NanoCarb, les sensibilités du X_{CO_2} estimé à partir des interférogrammes tronqués du pixel central ne dépassent pas 0.6 ppm (NC pixel, sur la figure 5.16), et celles combinées pour la colonne longitudinale de pixels située au centre de la fauchée ne dépassent pas 0.9 ppm (NC comb., sur la figure 5.16). Trois hypothèses différentes – peut-être en manque-t-il, les deux premières sont d'ailleurs contradictoires – sont à explorer pour expliquer cette faible sensibilité des résultats pour NanoCarb (sans ordre d'importance) :

- Le chapitre 4 a montré que les estimations de X_{CO_2} à partir des interférogrammes tronqués de NanoCarb ne sont pas parfaitement sensibles au CO_2 , avec des DOFs inférieurs à 1.0 du fait de l'entremêlement de l'information CO_2 avec celle liée à l'albédo. Comme pour l'argument développé précédemment pour les résultats CO_2M -var, cette faible sensibilité est à mettre en regard de la performance de l'estimation de X_{CO_2} à partir des interférogrammes tronqués de NanoCarb.

- Pour la plupart des situations, les DOFs pour le CO₂ du pixel central de NanoCarb correspondent à ceux de l’instrument fictif CO₂M-var dans les cas B2/B12 au pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda = 300$ (voir figure E.7). Or, pour des DOFs comparables, les sensibilités des estimations NanoCarb à la méconnaissance de la spectroscopie du CO₂ restent inférieures à celles de CO₂M-var dans les cas B2/B12 pour $\lambda/\Delta\lambda = 300$. Cette comparaison suggère que la mesure NanoCarb, intrinsèquement sensible à l’espacement entre les raies de CO₂, serait par essence moins sensible – et donc plus résiliente – à la méconnaissance de la spectroscopie qu’un concept basé sur la mesure de spectres.
- L’examen des Jacobiens et sensibilités de NanoCarb sur la figure 4.13 montre que pour une même variation de la colonne de CO₂, les sensibilités de la mesure NanoCarb se distinguent mieux par leur impact sur l’amplitude des franges dans la bande 2 (CO₂ faible) que dans la bande 4 (CO₂ fort), certainement parce que les raies ne sont pas saturées dans la bande 2. Cela suggère que l’information sur le CO₂ proviendrait principalement de la bande 2 de NanoCarb. Ainsi, les sensibilités des estimations NanoCarb à la méconnaissance de la spectroscopie du CO₂ seraient à comparer principalement les résultats B2/B12 de l’instrument fictif CO₂M-var.

Des tests supplémentaires (modifier les bandes disponibles et/ou les paramètres inclus dans le vecteur d’état, etc) seraient nécessaires pour établir si et dans quelle mesure ces hypothèses peuvent expliquer la faible sensibilité des résultats NanoCarb à la méconnaissance de la spectroscopie du CO₂.

5.5.3 Sensibilités à la correction empirique du modèle de CIA dans la bande A de l’O₂

On considère maintenant les sensibilités de l’estimation de X_{CO_2} à la méconnaissance de la spectroscopie de l’O₂, calculée comme une erreur de modélisation directe égale à la différence de deux spectres simulés. Le premier spectre de référence, noté y^{old} , est calculé à partir de la spectroscopie de l’O₂ décrite par Tran and Hartmann (2008), qui propose un modèle d’absorption induite par collisions (CIA) et de mélange entre raies reposant sur la base de données spectroscopiques HITRAN 2008 (Rothman et al., 2009). Le deuxième spectre, noté y^{new} , est calculé à partir d’une correction empirique du modèle de CIA proposé par Tran and Hartmann (2008). Cette correction est notée « LMD2019 » et est décrite dans l’Annexe A. L’erreur de modélisation calculée ici touche donc la bande A de l’O₂, et plus particulièrement le modèle d’« absorption continue » de la bande : les paramètres des raies utilisés ne changent entre les deux spectres.

Résultats CO₂M-var La figure 5.17 donne les sensibilités des colonnes totales estimées à la méconnaissance de la spectroscopie de l’O₂ (ici représentée par l’impact de la correction empirique du modèle de CIA décrite dans l’Annexe A) pour un instrument fictif CO₂M-var dont on fait varier le pouvoir de résolution entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$, ainsi que la configuration des bandes spectrales disponibles (lorsque B1 est disponible). Cette sensibilité

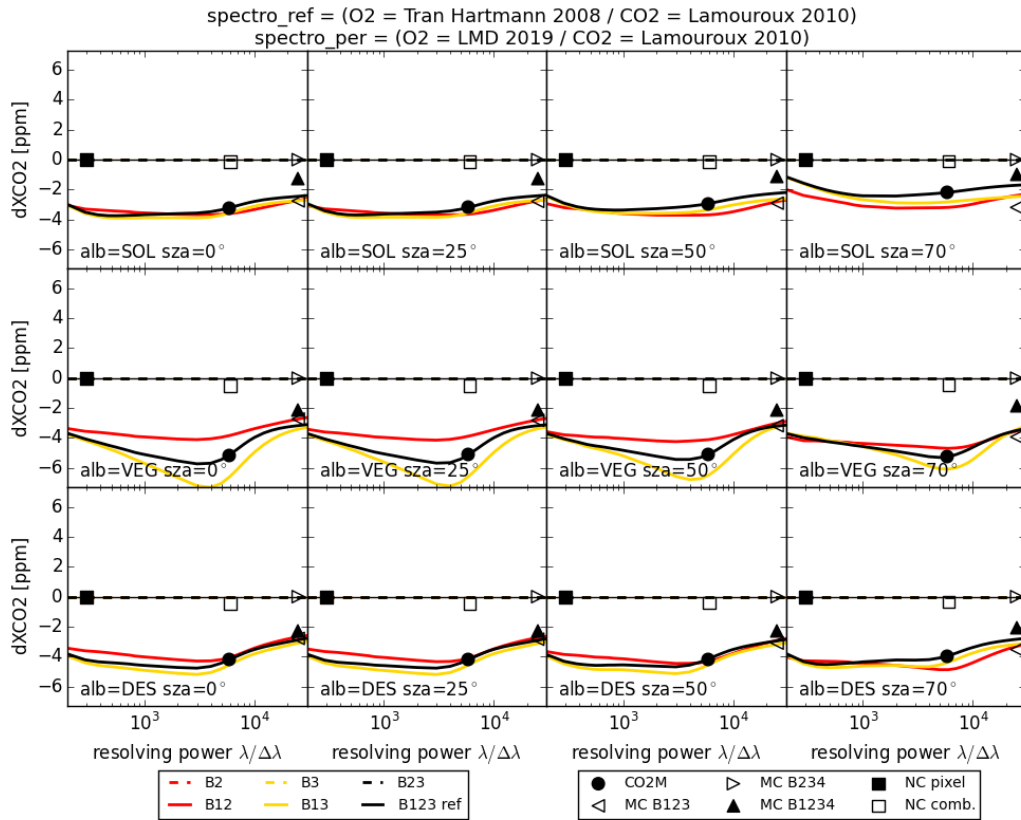


FIGURE 5.17 – Sensibilités de l’estimation de X_{CO_2} à la méconnaissance de la spectroscopie de l’ O_2 en fonction du pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ et de différentes configurations de bandes spectrales disponibles, pour les 12 situations d’observations atmosphériques considérées dans ce chapitre. Les symboles donnent les résultats pour les concepts CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

de la colonne totale de CO_2 à une perturbation de la spectroscopie de l’ O_2 trouve son origine dans l’erreur réalisée sur la pression de surface estimée, ainsi que dans l’entremêlement de l’information sur le CO_2 et la pression de surface dans les raies de CO_2 (voir figures 3.2 et 3.3).

Pour les plus bas pouvoirs de résolution, entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ et $\lambda/\Delta\lambda = 5000$, les sensibilités du X_{CO_2} à la correction empirique du modèle de CIA affichent deux comportements différents selon les cas d’albédo : pour les modèles SOL et DES, elles restent plutôt constantes vers environ -4 ppm, tandis qu’elles évoluent de -4 à environ -6 ppm dans le cas d’un albédo représentatif de la végétation. Ce comportement est exacerbé pour le cas où seule B3 est disponible en plus de B1, tandis qu’il n’apparaît pas lorsque seule B2 est disponible, pointant donc le rôle de la faible valeur de réflectance vers $2.0 \mu m$ dans le cas d’une surface représentative de végétation (voir figure 4.7) ainsi que les entremêlements d’information entre CO_2 et pression de surface (voir figure 3.3). Les sensibilités de la pression de surface estimée ne se

distinguent pas particulièrement dans le cas de l'albédo de végétation (voir figure G.2). Ces résultats de sensibilités aux faibles valeurs de pouvoir de résolution s'expliquent par l'impact similaire sur le spectre qu'à une correction de modèle d'« absorption continue » tant que la mesure n'est pas assez résolue pour y distinguer les raies de l'O₂ dans cette bande saturée.

Pour les plus forts pouvoirs de résolution, à partir d'environ $\lambda/\Delta\lambda = 5000$, les raies sont de plus en plus discernables dans les observations. Elles n'ont pas été modifiées dans l'évolution de la spectroscopie testée ici. Ainsi, les sensibilités des résultats d'inversion aux fortes résolutions spectrales sont le produit d'un compromis entre l'information apportée par les raies (inchangée) et celles apportées par le fond continu (perturbée). Ce compromis rapproche les sensibilités de 0.0 comparées aux plus faibles résolutions spectrales.

Naturellement, lorsque la B1 est absente des configurations de bandes spectrales testées (tirets sur la figure 5.17), les sensibilités sont nulles.

Résultats pour les concepts CO₂M, MicroCarb et NanoCarb Les sensibilités des concepts CO₂M et MicroCarb à la méconnaissance de la spectroscopie de l'O₂ sont également représentées sur la figure 5.17. Les résultats pour CO₂M suivent naturellement les impacts décrits précédemment pour CO₂M-var. Concernant MicroCarb, les sensibilités du X_{CO_2} estimé dépendent de la configuration de bandes spectrales testées. Sauf pour les situations alb = SOL et SZA = 50° ou 70°, les sensibilités du X_{CO_2} estimé par MicroCarb dans la configuration B123 sont très proches des résultats de l'instrument fictif CO₂M-var pour $\lambda/\Delta\lambda = 25000$. Lorsque la B1 de MicroCarb n'est pas utilisée, les résultats ne montrent naturellement aucune sensibilité, et la configuration B1234 où toutes les bandes spectrales sont utilisées a des sensibilités intermédiaires, situées entre celles des deux configurations précédentes. Pour la situation alb = VEG et SZA = 25°, la sensibilité un peu inférieure à 3 ppm affichée en valeur absolue par MicroCarb pour le cas B123 est proche des résultats obtenus avec OCO-2 sur la situation de validation fournie par la campagne MAGIC 2019 (voir partie 3.5.1).

Concernant NanoCarb, les sensibilités du X_{CO_2} estimé à partir des interférogrammes tronqués du pixel central ne dépassent pas 0.01 ppm (NC pixel, sur la figure 5.17), et celles combinées pour la colonne longitudinale de pixels située au centre de la fauchée ne dépassent pas 0.5 ppm (NC comb., sur la figure 5.17). Le chapitre 4 a notamment montré le fort entremêlement de l'information sur la pression de surface avec celle sur l'albédo dans la bande 1 de l'instrument NanoCarb. Comme commenté dans la section précédente, différentes hypothèses seraient à étudier avec des tests plus spécifiques pour mieux expliquer ces faibles sensibilités des estimations issues de NanoCarb à la correction empirique de CIA.

5.5.4 Sensibilités à l'évolution combinée de la spectroscopie de l'O₂ et du CO₂

Pour terminer, on examine les sensibilités de l'estimation de X_{CO_2} à l'évolution combinée de la spectroscopie de l'O₂ et du CO₂, en appliquant simultanément les erreurs de modélisations étudiées séparément dans les deux parties précédentes. L'erreur de modélisa-

tion calculée touche donc à la fois la bande A de l'O₂ avec une modification du modèle de CIA et aux bandes CO₂ faible et fort avec les différences entre Lamouroux et al. (2010) et Lamouroux et al. (2015).

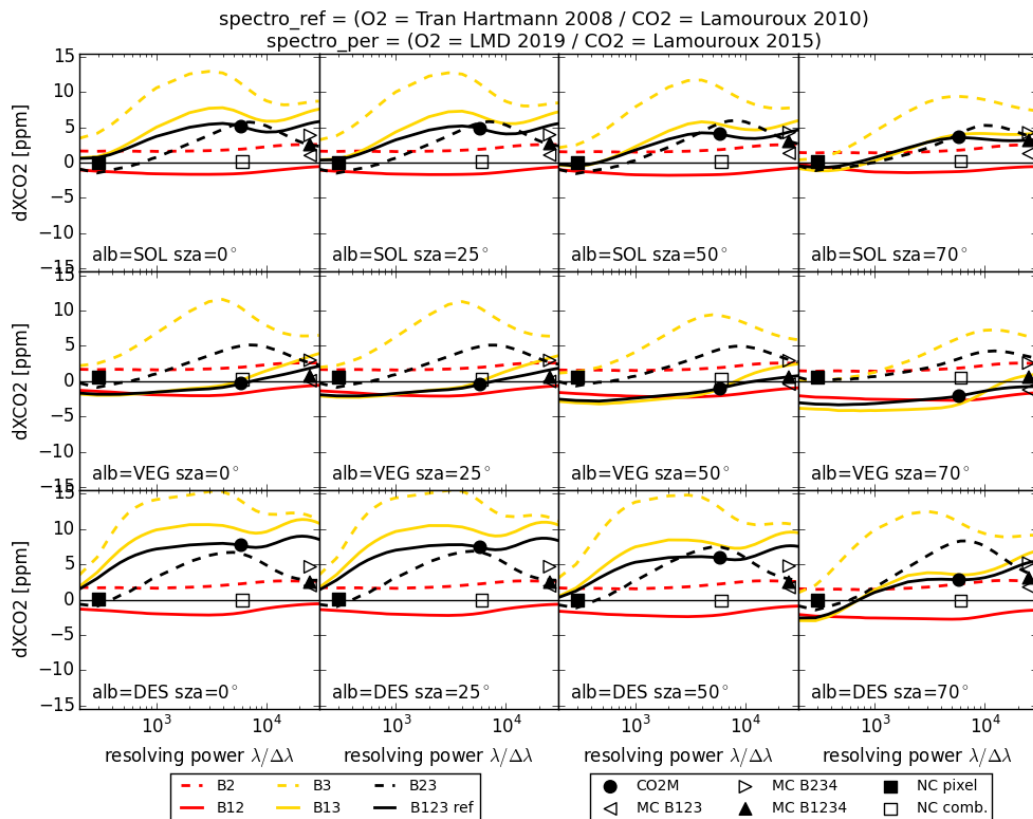


FIGURE 5.18 – Sensibilités de l’estimation de X_{CO_2} à la méconnaissance de la spectroscopie de l’O₂ et du CO₂ en fonction du pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ et de différentes configurations de bandes spectrales disponibles, pour les 12 situations d’observations atmosphériques considérées dans ce chapitre. Les symboles donnent les résultats pour les concepts CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

Une combinaison des sensibilités détaillées précédemment La figure 5.18 présente les sensibilités de l’estimation de X_{CO_2} à l’évolution combinée de la spectroscopie de l’O₂ et du CO₂ pour un instrument fictif CO₂M-var, dont on fait varier le pouvoir de résolution et la configuration des bandes spectrales disponibles, ainsi que pour les concepts CO₂M, MicroCarb et NanoCarb. On peut remarquer ici que les résultats de CO₂M-var pour les configurations de bandes spectrales qui incluent la B1 ont la même allure que ceux obtenus pour l’étude de sensibilités à la connaissance de la spectroscopie du CO₂ seule (voir figure 5.16), simplement décalés d’entre -3 ppm et -6 ppm, correspondant à la sensibilité à l’évolution de

la spectroscopie de l'O₂. Les résultats obtenus pour les configurations de bandes spectrales sans B1 n'ont quant à eux pas changé. Ainsi, on peut donc se rapporter aux explications des parties précédentes pour expliquer les résultats de la figure 5.18, à la fois pour l'instrument fictif CO₂M-var mais aussi pour les concepts CO₂M, MicroCarb et NanoCarb.

Quelles situations pour la validation d'évolutions de la spectroscopie (et des estimations *Full-Physics* brutes en général) ? La comparaison des résultats de la figure 5.18 pour les 12 situations d'observation atmosphérique considérées dans ce chapitre vient finalement offrir les derniers enseignements de ce travail d'analyse des sensibilités de l'estimation de X_{CO_2} à la (mé)connaissance de la spectroscopie. On peut constater que pour la situation alb = VEG et SZA = 25°, qui est proche des conditions d'albédo et de SZA du point de validation MAGIC 2019, la sensibilité obtenue pour MicroCarb dans la configuration B123 est très proche de 0.0, comme celle obtenue avec OCO-2 (voir partie 3.5.1). La figure 5.19 compare les albédos estimés à partir des mesures de validation OCO-2 utilisées au chapitre 3 avec les modèles de la base ASTER (Baldrige et al., 2009). On y voit que les situations de validations explorées restent proches de valeurs d'albédo représentatives d'un mélange de sol nu et de végétation, particulièrement avec de faibles valeurs aux alentours de 2.05 μm .

Le fait que les sensibilités aux évolutions des spectroscopies d'O₂ et de CO₂ se compensent quasiment pour les situations sur lesquelles elles ont été testées est un hasard complet : d'autres évolutions de spectroscopie auraient pu être choisies pour ce test. Néanmoins, la comparaison des résultats de sensibilités (pour B123) entre le modèle VEG et les modèles SOL et DES sur la figure 5.18 montre l'intérêt qu'il y aurait à inclure plus de diversité dans les albédos explorés pour les points de validation. Viser des surfaces plus claires permettrait notamment d'être plus sensible à la méconnaissance de la spectroscopie sur la bande CO₂ fort, associée à des albédos faibles pour les scènes comprenant de la végétation. De telles cibles très claires sont déjà utilisées pour la calibration radiométrique des détecteurs (par exemple Crisp et al., 2017; Wunch et al., 2017; Yu et al., 2020), il n'y manquerait donc plus que des mesures de colonnes totales de CO₂ (TCCON, EM27 ou AirCore)⁴. Une telle démarche a par exemple déjà été entreprise dans le cadre de COCCON en Namibie (Frey et al., 2021). Ainsi, pour les missions planifiées dans la décennie qui débute, augmenter la diversité des scènes observées ouvrirait de nouvelles possibilités pour mieux évaluer les biais résiduels dans les résultats *Full-Physics* bruts, et offrirait un échantillon de situations plus large pour mettre en place les corrections empiriques de biais.

5.6 Synthèse et conclusions

À travers une exploration des impacts de l'évolution de la résolution spectrale et du rapport signal à bruit, ce chapitre a examiné le contenu en information des mesures de

4. sans présumer de la difficulté certaine de l'entreprise, les déserts n'étant pas les zones les plus sûres et accessibles au monde.

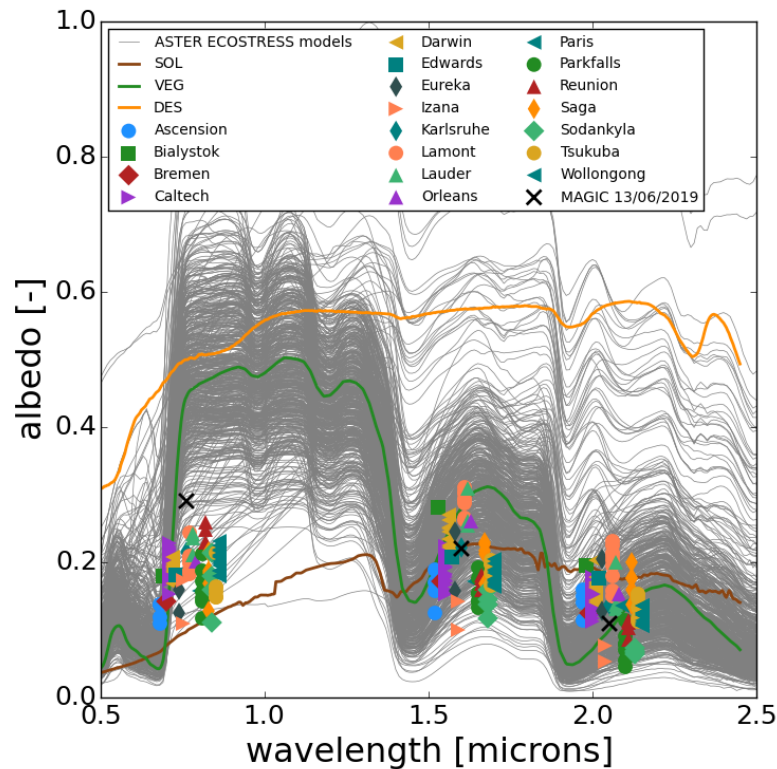


FIGURE 5.19 – Albédos estimés pour les trois bandes spectrales mesurées par OCO-2 pour les sessions de validation (TCCON et MAGIC) considérées au chapitre 3 (les longueurs d’onde en abscisses ont été étalées dans l’intervalle $\pm 0.1 \mu\text{m}$ autour des centres des trois bandes spectrales pour plus de lisibilité). Ils sont comparés aux trois modèles SOL, VEG et DES utilisés dans le chapitre 4 et dans celui-ci, ainsi qu’à l’ensemble des modèles d’albédo de végétation de la base ASTER (en traits gris fins, Baldrige et al., 2009).

différents concepts d’observation du CO_2 dans le proche infrarouge.

Il apparaît que la résolution spectrale et le rapport signal à bruit agissent de manière très similaire sur le contenu en information et les performances des estimations de X_{CO_2} . Lorsqu’ils augmentent, les degrés de liberté pour le CO_2 s’accroissent, l’erreur aléatoire liée au bruit radiométrique diminue et les sensibilités verticales tendent vers l’unité pour toutes les couches de l’atmosphère. Aux faibles résolutions spectrales, elles sur-représentent les couches les plus proches de la surface dans les colonnes estimées. On note particulièrement une baisse des degrés de libertés associés aux variables auxiliaires interférant avec l’estimation de X_{CO_2} pour les résolutions spectrales les plus faibles.

Quant à NanoCarb, pris individuellement, les estimations de X_{CO_2} associées à un pixel unique du champ de vue montrent des performances, contenus en information et sensibilités verticales comparables à celles d’un instrument mesurant des spectres avec une faible résolu-

tion spectrale, et un faible rapport signal à bruit. Lorsque l'on combine les différents résultats obtenus pour un même point au sol, l'erreur aléatoire associée au bruit instrumental pour NanoCarb est comparable à celle de CO₂M.

Le choix des bandes spectrales disponibles agit également sur le contenu en information des concepts mesurant des spectres. On note particulièrement l'importance de mesures sensibles à l'O₂ pour contraindre les paramètres influant sur la longueur du chemin optique : pression de surface, épaisseurs optiques des couches d'aérosols.

Les entremêlements des informations associées aux différentes variables géophysiques pour les faibles résolutions spectrales ($\lambda/\Delta\lambda \lesssim 5000$) rendent l'estimation de X_{CO_2} moins indépendante de la méconnaissance des variables auxiliaires interférentes, provoquant des biais dans les résultats. Les erreurs systématiques qui seront engendrées pourront se compenser par calcul du réhaussement de X_{CO_2} pour le traitement d'un panache local, si elles affectent indifféremment tout le champ de vue. Le réhaussement calculé reste cependant influencé par la sensibilité verticale des estimations de X_{CO_2} dans la couche limite, qui doit impérativement être prise en compte pour qu'il soit fidèle à la réalité. À l'échelle globale, vues les contraintes sur les erreurs systématiques pour l'étude du cycle naturel du carbone, il est peu probable que les missions à faibles résolution spectrale puissent facilement (sans correction de biais difficile à mettre en place) fournir des résultats utiles pour l'étude du cycle naturel du carbone. C'est également le cas pour NanoCarb car, comme pour ses performances, les sensibilités de ses résultats à la méconnaissance a priori de paramètres géophysiques interférants sont globalement comparables à celles d'instruments à basse résolution spectrale.

Finalement, on note que toutes les résolutions spectrales sont sensibles à une évolution de la spectroscopie de l'O₂ et du CO₂. Une bonne connaissance de la spectroscopie est donc nécessaire si l'on souhaite pouvoir valider les estimations *Full-Physics* de X_{CO_2} bruts, même pour les plus basses résolution spectrales. Au travers des différentes situations d'observation atmosphérique étudiées, il apparaît également qu'une large variété d'albédo de surface est désirable pour constituer un ensemble de situations sur lesquelles valider des évolutions de spectroscopie. Finalement, les sensibilités de NanoCarb à l'évolution de la spectroscopie sont largement plus faibles que pour les concepts mesurant des spectres. Des travaux supplémentaires seront nécessaires afin de tester différentes hypothèses pour expliquer ce résultat.

Chapitre 6

Conclusions

Dans le résumé pour décideurs de leur dernier rapport publié au cours de l'été 2021, les scientifiques du premier groupe de travail du GIEC fournissent un bilan glaçant (IPCC, 2021). L'influence des activités humaines a sans équivoque réchauffé l'atmosphère, les océans et les continents, avec des conséquences répandues sur l'ensemble du globe. Ces changements très rapides sont sans précédents depuis des siècles voire plusieurs millénaires. Par exemple, la concentration atmosphérique de CO_2 culmine en 2019 à un niveau jamais atteint depuis au moins 2 millions d'années. Ce gaz à effet de serre s'accumule en effet dans l'atmosphère progressivement, année après année, depuis la révolution industrielle et le début de l'exploitation des énergies fossiles.

Les activités humaines perturbent un cycle naturel du carbone qui a – jusqu'à présent – compensé environ 55% de leurs émissions de CO_2 , absorbées par la biosphère continentale et dissoutes dans les océans. L'étude des phénomènes qui régissent ou contribuent au cycle naturel du carbone est particulièrement importante pour suivre l'évolution des puits d'absorption du CO_2 , qui pourraient subir les impacts du changement climatique. Les mesures au sol ou les estimations de la concentration de CO_2 réalisées à partir de mesures satellites infrarouges peuvent notamment participer à ce suivi du cycle du carbone grâce à l'inversion du transport atmosphérique.

Différentes missions satellites mesurent le rayonnement proche infrarouge afin d'estimer la concentration atmosphérique de CO_2 . Ces mesures sont sensibles à toute les couches de l'atmosphère, et particulièrement à celles proches du sol, au niveau duquel les sources et puits de carbone se situent. On trouve notamment la mission japonaise *Greenhouse Gas Observing SATellite* (GOSAT) ou la mission américaine *Orbiting Carbon Observatory-2* (OCO-2) parmi les missions actuellement en vol. Elles réalisent des mesures à haute résolution spectrales ($\lambda/\Delta\lambda \gtrsim 20000$). L'estimation de la colonne totale de CO_2 (notée X_{CO_2}) à partir de mesures satellites repose fondamentalement sur la modélisation directe du transfert radiatif, qui requiert elle-même une bonne connaissance des paramètres d'absorption des gaz apportés par la spectroscopie moléculaire. Des erreurs de modélisation directe, causées par une mauvaise représentation des particules diffusantes sur le chemin optique ou bien une mauvaise spectroscopie par exemple, peuvent causer des erreurs systématiques dans les X_{CO_2} retrouvés. Ces biais peuvent alors provoquer à leur tour des erreurs systématiques non né-

gligeables dans les méthodes d'inversion du transport atmosphérique pour le suivi des flux de CO_2 et l'étude du cycle du carbone. C'est pourquoi la validation des estimations de X_{CO_2} réalisées à partir de mesures satellites est très importante. Le réseau de stations sol *Total Carbon Column Observing Network* (TCCON) sert de référence principale pour la validation des missions proche infrarouge.

Suite à la signature de l'Accord de Paris en 2015, des inventaires globaux des émissions anthropiques de CO_2 vont être organisés tous les cinq ans à partir de 2023. L'ambition globale des missions satellites programmées ou à l'étude pour la décennie qui s'ouvre est d'y participer en réalisant des mesures du rayonnement proche infrarouge adaptées au suivi des émissions anthropiques. Les missions déjà en orbite comme GOSAT ou OCO-2 ont en effet été principalement conçues pour le suivi des flux naturels de CO_2 . Le suivi des émissions anthropiques passe quant à lui par l'imagerie de X_{CO_2} , réalisée grâce à des instruments à large fauchée et fine résolution spatiale. Ces observations permettent en effet de distinguer les panaches d'émissions anthropiques de CO_2 issus de sources ponctuelles (centrales à charbon) ou très localisées (mégapoles), et d'en déduire leurs émissions. Une telle résolution spatiale est souvent obtenue au prix d'un compromis sur la résolution spectrale. Parmi tous les concepts à l'étude, on peut particulièrement distinguer le projet du Space CARBon Observatory (SCARBO) qui pousse ce compromis encore plus loin en proposant de ne mesurer que des interférogrammes tronqués sensibles au CO_2 , afin de pouvoir obtenir un instrument extrêmement miniaturisé, nommé NanoCarb.

La décennie qui s'ouvre s'annonce extrêmement riche en concepts d'observation de la concentration atmosphérique de CO_2 à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge. Qu'ils soient déjà programmés ou à l'étude, ces concepts explorent de nombreux paramètres de conception et ce travail de thèse s'est intéressé aux impacts de leurs caractéristiques sur les colonnes totales de CO_2 qu'ils permettent d'estimer. En partie inscrite dans le cadre du projet SCARBO, cette thèse a notamment examiné l'impact de la nature de la mesure avec le cas des interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb. Quant aux concepts basés sur la mesure de spectres, c'est au travers d'une exploration de l'impact de la résolution spectrale sur les performances et sensibilités de l'estimation de X_{CO_2} qu'ils ont été parcourus.

Ce dernier chapitre revient sur les développements réalisés au cours de cette thèse, sur les résultats qui ont été obtenus ainsi que sur les perspectives de recherche qui peuvent en être tirées.

6.1 Inversion du transfert radiatif avec l'Adaptable 4A Inversion (5AI)

L'algorithme d'estimation optimale permet d'estimer la colonne totale de CO_2 à partir de mesures satellites infrarouges réelles, et offre également un formalisme idéal pour évaluer performances et sensibilités de concepts d'observation en cours de préparation.

6.1.1 Un code d'estimation optimale adaptable, testé sur OCO-2

Dans le cadre de cette thèse, l'estimation optimale a été implémentée en Fortran 90 dans un code nommé Adaptable 4A Inversion (5AI) qui repose sur le modèle de transfert radiatif 4A/OP, développé au Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) depuis les années 1980s. Ce code d'inversion, aussi flexible que 4A/OP, peut simuler de nombreux instruments et n'importe quelle situation d'observation atmosphérique. Construction du vecteur d'état et de sa matrice de covariance, définition des mesures et de son modèle de bruit instrumental associé, le code permet d'adapter différentes entrées et paramètres de l'estimation optimale au choix de l'utilisateur. Il peut également être modifié très facilement afin d'être couplé à des modèles instrumentaux plus atypiques, comme celui de NanoCarb par exemple.

Ici, nous avons testé l'algorithme 5AI sur un échantillon d'environ 44k observations d'OCO-2 pour l'estimation de X_{CO_2} en négligeant l'impact des particules diffusantes afin de réduire les temps de calcul. Une différence moyenne de 1.30 ± 1.32 ppm par rapport au produit de validation TCCON a été obtenue. Cet écart-type est comparable à ceux obtenus par d'autres algorithmes. Les résultats de 5AI capturent également de manière satisfaisante l'augmentation à long terme, le cycle saisonnier et les variations latitudinales du X_{CO_2} et ses résultats sont cohérents avec ceux d'ACOS, l'algorithme de référence pour la mission OCO-2. La méconnaissance de la spectroscopie, la prise en compte des particules diffusantes dans les estimations ainsi que la compensation par résidus spectraux « calc-obs » des différences systématiques entre 5AI et ACOS sont discutées, et permettent d'éclairer les différences entre les résultats obtenus par ces deux codes d'inversion. Ainsi, l'algorithme 5AI apparaît comme une implémentation fiable de la méthode de l'estimation optimale. Ces résultats ont conduit à la publication d'un article dans *Atmospheric Measurement Techniques* pour présenter le code d'inversion 5AI (Dogniaux et al., 2021a).

6.1.2 Perspectives

Le développement de 5AI et les tests réalisés dans le cadre de cette thèse ont ouvert la porte à la construction d'un outil généraliste permettant de (1) traiter les mesures réelles de missions satellites infrarouges ou d'instruments basés au sol et (2) de réaliser des études de performance pour de nouveaux concepts d'observation.

Des améliorations nécessaires dans la prise en compte de la diffusion L'état de l'art et de nombreux résultats obtenus dans le cadre de ce travail de thèse pointent l'importance capitale d'une prise en compte des particules diffusantes dans les estimations réalisées à partir de mesures du proche infrarouge. Pour l'instant, 5AI offre la possibilité d'estimer les épaisseurs optiques de couches d'aérosols dont l'épaisseur en pression et l'altitude sont fixées, pour des propriétés optiques de particules fixées a priori.

La représentation des particules diffusantes dans le vecteur d'état pourrait être améliorée afin d'offrir la possibilité d'inverser l'altitude des couches d'aérosols ou de nuages fins, mais aussi leur épaisseur en pression. Le développement d'une paramétrisation gaussienne des profils de particules diffusantes (à la manière d' ACOS, 2021) pourrait par exemple être

une première piste. Cette approche suppose la connaissance de leurs propriétés optiques, fixées a priori. Une autre approche pourrait être de ne plus fixer de type de particule, mais d’inverser directement les propriétés optiques de diffusion des couches atmosphériques. Cela pourrait potentiellement réduire les erreurs associées au choix de mauvais types de particules diffusantes a priori.

Au-delà de la représentation des particules diffusantes dans le vecteur d’état, la prise en compte de la diffusion dans 5AI repose fondamentalement sur celle de 4A/OP, qui réalise des simulations couplées avec les modèles LIDORT et VLIDORT (voir partie 2.6.3). Les temps de calcul des simulations de transfert radiatif avec prise en compte de la diffusion sont autrement plus conséquents que lorsqu’on la néglige, aussi bien pour 4A/OP et pour tous les autres codes de transfert radiatif. Des méthodes existent pour accélérer les calculs avec diffusion, parmi lesquelles LSI (voir 2.6.3) qui a été déjà implémentée dans 4A/OP. Néanmoins, lorsque la polarisation doit être prise en compte comme c’est le cas pour OCO-2, les temps de calculs sont encore augmentés (malgré l’utilisation de LSI) et ne permettent que de réaliser des tests à $\sim 100k$ observations, et encore avec de fortes hypothèses qui sont en-deçà de l’état de l’art actuel. C’est cependant à l’échelle globale ($> 1M$ observations) que l’on peut évaluer concrètement la qualité d’un code visant à traiter opérationnellement une mission. Pour le cas d’OCO-2 par exemple, une approche à la 2OS (Natraj et al., 2008; ACOS, 2021) qui déconstruit le calcul de la luminance en combinant LIDORT et VLIDORT pourrait être ajoutée dans 4A/OP en plus de LSI. Le prolongement des efforts consacrés à l’accélération de la diffusion dans 4A/OP permettrait le traitement d’un plus grand nombre d’observations, et de mener des inversions au plus proche de l’état de l’art en complexifiant les profils de particules diffusantes considérés.

Il est par ailleurs extrêmement important de noter que l’amélioration des temps de calculs avec prise en compte de la diffusion est d’autant plus critique que la décennie qui s’ouvre vient avec une vague déferlante de données qui accompagnera tous les prochains concepts d’imagerie qui ont été annoncés. D’ailleurs, de nouvelles approches d’inversion plus rapides que l’estimation optimale *Full-Physics* seront certainement nécessaire pour parvenir à traiter toutes les observations. Cependant, le développement de ces nouvelles méthodes devra initialement partir de capacités et de modèles efficaces pour le transfert radiatif direct dans le proche infrarouge.

Études de l’impact de la connaissance de la spectroscopie au niveau 2 Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse ont montré l’intérêt de tester les évolutions de la spectroscopie au niveau 2, une fois que l’amélioration sur la modélisation directe a été établie au niveau 1 sur les résidus « calc-obs ». Par ailleurs, les profils verticaux acquis lors de la campagne MAGIC 2019 ont également montré leur intérêt pour ces exercices de comparaison de résultats d’inversion. Plusieurs perspectives se distinguent sur ces questions :

- Prolonger les tests en cours sur les spectroscopies d’O₂ et de CO₂, notamment en évaluant sur les données OCO-2, les impacts respectifs dans B2 et B3 pour l’évolution de la spectroscopie. Les profils verticaux fournissent également les profils de température et de vapeur d’eau qui pourraient être utilisés en a priori non inversé pour ces

études d'impacts de la spectroscopie. Cela permettrait de réduire les décalages des X_{CO_2} estimés dus à la méconnaissance de ces variables.

- Étendre les tests d'évolution de la spectroscopie à d'autres évolutions, notamment de la spectroscopie du CO_2 avec des tests sur la nouvelle base GEISA 2020 (Delahaye et al., 2021), avec différentes approximations des modèles de mélange entre raies (approche Y, dépendance en vitesse, etc.).
- Agrandir la base de co-localisations entre OCO-2 et des profils verticaux AirCore ou AMULSE. De telles données co-localisées constituent une chance unique pour l'évaluation des conséquences de l'évolution de la spectroscopie, mais aussi de comparer les codes d'inversion et corrections empiriques de biais avec une bien meilleure référence que celle apportée par TCCON par exemple. Comme montré au chapitre 5, il faudrait explorer différents types d'albédo, et pourquoi pas de latitudes également. Idéalement, une telle base de données serait constituée avant la fin de la mission OCO-2.

D'une manière générale, ces études de validation des résultats d'estimation obtenus, et de l'impact qu'y joue la spectroscopie, poussent vers l'ambition d'une réduction des erreurs systématiques, et donc vers une diminution des corrections empiriques à ajouter sur les X_{CO_2} *Full-Physics* bruts.

Perspectives pour l'inversion dans le proche infrarouge en général De premières pistes ont été ouvertes vers un possible futur traitement complet des mesures d'OCO-2/3 avec 5AI. Celui-ci devra notamment reposer sur une accélération de la prise en compte de la diffusion, mais aussi sur une amélioration de la représentation des aérosols dans le vecteur d'état. Le code 5AI pourrait aussi contribuer au traitement opérationnel d'autres missions proche infrarouge, comme par exemple Sentinel5-P qui réalise de l'imagerie de méthane. Une capacité de traitement d'ordre opérationnel (période significative, échelle globale) permettrait également de mieux mettre en avant l'intérêt d'améliorations de la spectroscopie dans les bandes spectrales observées par les missions proche infrarouge.

Perspectives pour les futures missions spatiales : proche infrarouge et infrarouge thermique Le satellite Metop-SG, dont le lancement est prévu en 2023, embarquera (1) l'instrument Sentinel5/UVNS mesurant le rayonnement proche infrarouge dans des bandes spectrales sensibles au CH_4 et (2) l'instrument IASI-NG, dont les mesures dans l'infrarouge thermique sont entre autres sensibles au CH_4 . Reposant sur 4A/OP dont les qualités dans l'infrarouge thermique ne sont plus à démontrer, le code 5AI pourrait contribuer à étudier l'intérêt d'une combinaison des mesures proche infrarouge (SWIR) et infrarouge thermique (TIR) pour le suivi de la concentration atmosphérique de méthane. Après un stage sur la possibilité d'une synergie TIR+SWIR pour l'estimation du CO_2 , Rémy Orset, qui débute sa thèse dans l'équipe ABC(t), explorera justement les synergies possibles entre TIR+SWIR pour l'estimation du méthane avec Metop-SG.

6.2 Le concept du Space CARBon Observatory (SCARBO)

Le Space CARBon Observatory (SCARBO) propose une constellation de petits satellites à bas coût qui offrirait une revisite journalière voire pluri-quotidienne des principales sources d'émission anthropique de CO_2 . Pour réduire la taille des satellites – et les coûts –, le concept proposé par SCARBO compte sur un instrument très compact (~ 7 kg), nommé NanoCarb, qui imagerait des *interférogrammes tronqués* optimalement sensibles au CO_2 et CH_4 et non des spectres, sur une fauchée d'environ 200 km et avec une résolution spatiale de 2 km (Brooker et al., 2018; Gousset et al., 2019). Il serait accompagné du polarimètre multi-angles (MAP) nommé SPEXone pour mieux contraindre les aérosols sur le chemin optique et de réduire leurs impacts délétères sur les estimations de X_{CO_2} .

6.2.1 Performances et limites actuelles

La performance du concept SCARBO pour l'estimation de la colonne totale de CO_2 a été évaluée par inversion du transfert radiatif avec le code 5AI, pour 324 situations d'observation atmosphérique explorant cinq paramètres critiques pour les erreurs liées à la diffusion.

Les interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb sont indéniablement sensibles à la concentration atmosphérique de CO_2 , avec des degrés de liberté associés proches de 1.0. Les colonnes totales estimées à partir des mesures de NanoCarb sont typiques du proche infrarouge en montrant une sensibilité aux couches atmosphériques proches de la surface. L'erreur aléatoire des X_{CO_2} estimés atteint l'objectif d'1 ppm que s'est donné SCARBO. Elle est en effet comprise entre 0.5 et 1 ppm, pour les pixels situés dans une large partie centrale de la fauchée de 200 km. Comme pour les concepts reposant sur la mesure de spectres, une mauvaise prise en compte des particules diffusantes a des effets délétères sur les estimations de X_{CO_2} réalisées à partir des mesures de NanoCarb. L'ajout du polarimètre multi-angles SPEXone, instrument dédié aux aérosols, a le potentiel de réduire les erreurs systématiques qu'elles peuvent provoquer, notamment pour des situations d'observation atmosphérique typiquement européennes.

Cette toute première étude des performances du concept SCARBO a également permis de mettre en évidence l'entremêlement d'information géophysique dans les interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb. Leur sensibilité au CO_2 apparaît en effet fortement corrélée à leur sensibilité à l'albédo, rendant difficile l'estimation indépendante de ces deux variables. Une première tentative de traitement par estimation optimale des mesures du prototype aéroporté de NanoCarb a notamment permis d'illustrer cette difficulté sur des données réelles. Cet entremêlement des informations CO_2 et albédo contribue par ailleurs à l'augmentation de l'erreur aléatoire d'estimation de X_{CO_2} à mesure que l'on se rapproche des bords de la fauchée. Pour un objectif de précision donné, cette spécificité limite la taille de la fauchée atteignable, qui elle-même influence le dimensionnement de la constellation entière. Ainsi, en identifiant les limites de la sensibilité au CO_2 des interférogrammes tronqués, cette étude de performance a aussi permis de préparer les futures améliorations du concept NanoCarb.

6.2.2 Perspectives

Séparer les sensibilités aux gaz à effet de serre et celles aux variables auxiliaires

L'entremêlement des sensibilités au CO_2 et à l'albédo dans les interférogrammes tronqués mesurés par NanoCarb représente une difficulté critique pour le traitement opérationnel de cet instrument. Idéalement, l'analyse des mesures devrait permettre – comme pour les spectres – de déterminer un albédo a priori sans risque d'absorber un possible signal associé à un réhaussement de la colonne de CO_2 . Par ailleurs, des tests ont montré que la dépendance spectrale de l'albédo peut également contribuer à des biais en X_{CO_2} évoluant dans le champ de vue, du fait du décalage en nombre d'onde des filtres à bande étroite.

Les équipes de l'Université de Grenoble et de l'ONERA ont pris note de ces résultats et diverses solutions sont envisagées pour résoudre cette difficulté. L'une d'elle consiste par exemple à compléter les interférogrammes avec une voie de mesures hyperspectrales à très basse résolution, afin de contraindre l'albédo et sa dépendance spectrale sans avoir recours à l'interférogramme tronqué seul.

Les résultats du chapitre 5 montrent également qu'un entremêlement entre les informations sur le CO_2 et la température perturbent les estimations de X_{CO_2} à partir des mesures de NanoCarb. Des mesures sensibles à la température mais non au CO_2 permettraient également de résoudre cette difficulté, par exemple en ajoutant un sondeur micro-ondes miniaturisé pour l'estimation du profil de température. Une telle approche est déjà utilisée pour séparer CO_2 et température dans les estimations de colonne troposphérique de CO_2 réalisées à partir de IASI.

OSSE locale pour la détection de panache Les vols effectués durant la campagne aéroportée d'octobre 2020 n'ont malheureusement pas permis de survoler un panache issu d'une forte source ponctuelle d'émission anthropique. La première tentative de traitement des mesures du prototype de NanoCarb a par ailleurs montré qu'il est possible que le calcul de l'albédo a priori « absorbe » les conséquences d'un réhaussement de la colonne totale de CO_2 . Devant toutes ces questions, au-dessus d'une scène où l'albédo est réel, variable et méconnu, les capacités des mesures de NanoCarb à (1) détecter et (2) permettre d'estimer correctement le réhaussement de la colonne totale de CO_2 restent encore très floues.

Afin de répondre à ces questions, il serait très intéressant de mettre en place une OSSE à l'échelle locale où l'on combinerait une scène d'albédo variable et a priori méconnu (comme le montre la caméra de contexte sur la figure 4.24) avec les simulations de panaches réalisées par la société NOVELTIS dans le cadre de SCARBO (voir figure 5.12). On générerait alors des interférogrammes tronqués synthétiques pour le prototype aéroporté ou bien pour différentes versions du modèle spatial. Ces simulations permettraient selon l'instrument considéré :

- De tester la capacité des mesures du prototype actuel à permettre la détection d'un panache, voire l'estimation des émissions anthropiques associées, et de considérer et tester différentes méthodes de traitement.
- De tester – dans un environnement synthétique simplifié – différentes solutions à l'entremêlement des informations sur le CO_2 et l'albédo, ainsi que d'en évaluer les mérites respectifs.

Le défi du traitement opérationnel des données d'imagerie Après filtrage et réduction des données grâce au moyennage des interférogrammes acquis pour un même angle de vue, la scène test acquise en quelques secondes par le prototype de NanoCarb compte $\sim 80k$ interférogrammes à traiter. Sans pourtant prendre en compte la diffusion, 190 heures de calcul ont été nécessaires pour produire les résultats montrés dans la section 4.7. De tels temps de calculs ne sont pas envisageables pour le traitement opérationnel d'une mission d'imagerie si intense en observations comme celle proposée par SCARBO. Ce problème est commun à toutes les missions d'imagerie : les méthodes pour traiter l'immense quantité d'observations qu'elles fourniront restent encore à imaginer, et leurs mérites et défauts respectifs vis-à-vis de l'état de l'art des approches *Full-Physics* restent encore à établir.

6.3 Exploration de l'impact des caractéristiques instrumentales

Les concepts d'imagerie du CO_2 atmosphérique réalisent, selon leurs objectifs, un compromis sur la résolution spectrale afin d'atteindre les résolutions spatiales nécessaires à la détection de panaches d'émissions anthropiques plus ou moins intenses. Ainsi, partant d'AVIRIS-NG ($\lambda/\Delta\lambda \sim 360$), base de travail pour CarbonMapper, en passant par CO2Image ($\lambda/\Delta\lambda \sim 1600$ pour l'unique bande CO_2 fort) et Copernicus CO_2 Monitoring (CO_2M , $\lambda/\Delta\lambda \sim 5870$) jusqu'à MicroCarb ($\lambda/\Delta\lambda \sim 25000$), la résolution spectrale, ici illustrée par le pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$, apparaît comme un paramètre de dimensionnement critique pour explorer la multitude des concepts planifiés, en préparation ou à l'étude.

6.3.1 Impact de la résolution spectrale

Résolution spectrale et rapport signal à bruit agissent de manière très similaire sur le contenu en information et les performances des estimations de X_{CO_2} à partir de mesures proche infrarouge. Lorsqu'ils augmentent, les degrés de liberté pour le CO_2 s'accroissent, l'erreur aléatoire liée au bruit radiométrique diminue et les sensibilités verticales tendent vers l'unité pour toutes les couches de l'atmosphère. Aux faibles résolutions spectrales, elles sur-représentent les couches les plus proches de la surface dans les colonnes estimées. On note particulièrement une baisse des degrés de libertés associés aux variables auxiliaires interférant avec l'estimation de X_{CO_2} pour les résolutions spectrales les plus faibles. Les résultats obtenus avec un seul interférogramme tronqué mesuré par NanoCarb correspondent à ceux des résolutions spectrales les plus faibles.

L'entremêlement des informations associées aux différentes variables géophysiques pour les faibles résolutions spectrales ($\lambda/\Delta\lambda \lesssim 5000$) rendent l'estimation de X_{CO_2} moins indépendante de la méconnaissance des variables auxiliaires interférentes, provoquant des biais dans les résultats. Par ailleurs, les moyennes voire faibles résolutions spectrales restent significativement sensibles à la méconnaissance de la spectroscopie de l' O_2 et du CO_2 . Les erreurs systématiques qui seront engendrées pourront se compenser par calcul du réhaussement de

X_{CO_2} pour le traitement d'un panache local, si elles affectent indifféremment tout le champ de vue. Cependant, le réhaussement calculé reste influencé par la sensibilité verticale des estimations de X_{CO_2} dans la couche limite, qui doit impérativement être prise en compte pour qu'il soit fidèle à la réalité. À l'échelle globale, vues les contraintes sur les erreurs systématiques pour l'étude du cycle naturel du carbone, il est peu probable que les missions à faible résolution spectrale puissent facilement (sans correction de biais difficile à mettre en place) fournir des résultats utiles pour l'étude du cycle naturel du carbone.

6.3.2 Perspectives

Vers des abaques générales pour la conception de missions satellites ? Le travail effectué dans le chapitre 5 explore l'impact du choix de la résolution spectrale sur les performances et sensibilités de l'estimation de X_{CO_2} à partir de mesures du rayonnement proche infrarouge. Tous les autres paramètres de conception ont été figés, mis à part le rapport signal à bruit et la configuration de bandes spectrales disponibles pour certains des tests effectués.

L'approche par « abaque » proposée à l'occasion de ce chapitre pour la résolution spectrale seule pourrait être élargie à d'autres paramètres de conception, à d'autres régions spectrales allant de l'ultraviolet jusqu'à l'infrarouge thermique, à d'autres espèces gazeuses, modèles d'aérosols ou variables géophysiques, etc. In fine, un outil didactique (à interface graphique ?) pourrait être conçu à partir de mesures et jacobiens pré-calculés pour explorer visuellement l'impact de tel ou tel paramètre sur les performances d'un concept d'observation. Il permettrait par exemple de chercher s'il existe des solutions pour décorrélérer l'estimation de deux variables géophysiques, sinon entremêlées, lorsque l'on conçoit une mission satellite. Un tel outil pourrait par exemple être destiné à des laboratoires, agences spatiales ou industriels pour s'épargner de nombreuses simulations de transfert radiatif lors de phases exploratoires.

Quels futurs besoins d'observation satellite pour le CO_2 ? Une majorité des futurs concepts d'observation passive du CO_2 ont des résolutions spectrales dégradées afin d'imager les panaches d'émissions anthropiques de CO_2 (avec les exceptions notables de MicroCarb et GeoCarb, concepts à hautes résolutions spectrales). Du fait de l'entremêlement de l'information géophysique dans les mesures à la résolution spectrale grossière, les résultats que produiront les concepts les moins bien résolus devraient être difficiles à utiliser pour l'étude du cycle naturel du carbone à l'échelle globale.

Un créneau pour une ou plusieurs missions de référence, permettant la meilleure estimation possible de la colonne totale de CO_2 , reste donc ouvert pour prendre la suite de MicroCarb au-delà de 2030. Par exemple, des concepts géostationnaires bien résolus spectralement comme GeoCarb et orientés vers l'Europe-Afrique ou l'Asie-Pacifique pourraient être envisagés. Des missions à orbite polaire pourraient prendre la suite de MicroCarb avec une combinaison de mesures idéale selon l'état de l'art actuel (tout ou partie de NO_2 , aérosols, proche infrarouge et infrarouge thermique, voire micro-ondes pour contraindre température et la vapeur d'eau ?). Ce travail de thèse s'est focalisé sur l'observation passive du rayonnement atmosphérique, mais des approches actives comme celle testée dans l'avant-projet

A-SCOPE pourraient venir en complément. Idéalement, de telles observations spatiales viendraient compléter celles de réseaux de stations au sol étendus, afin de contribuer au suivi des sources et puits de carbone qui, d'ici à 2030, subiront les conséquences d'un changement climatique accru.

Annexe A

Correction empirique du modèle d'absorption induite par collisions (CIA) pour la bande A de l'O₂

Résidus spectraux et correction empirique du modèle de CIA L'analyse des résidus spectraux « calculés – observés » dans la bande A de l'O₂ (0.76 μm) a mis en évidence certains défauts de la spectroscopie proposée par le modèle de Tran and Hartmann (2008). Ceux-ci montrent en effet des résidus négatifs sur la ligne base entre 13000 et 13025 cm^{-1} et des résidus largement positifs entre environ 13075 cm^{-1} et 13175 cm^{-1} (voir « **Old spectro** » sur la figure A.1). Ces résultats suggèrent une surestimation de l'absorption de l'O₂ en début de bande, et une sous-estimation dans la majeure partie de la bande. Il semblerait que le modèle de mélange entre raies (LM) dans la bande soit plus en cause que celui d'absorption induite pas collisions (CIA).

Cette analyse a motivé l'ajustement d'une correction empirique des biais indentifiés précédemment, qui est ajoutée au modèle d'absorption induite par collisions proposé par Tran and Hartmann (2008). En partant de 3 spectres TCCON mesurés pour des conditions atmosphériques similaires à la station de Parkfalls pour 3 masses d'air différentes (2, 3 et 6), une correction empirique s'ajoutant au modèle de CIA de Tran and Hartmann (2008) est déterminée empiriquement pour constituer un nouveau modèle de CIA dans cette bande, noté « LMD2019 » (travail réalisé par Thibault Delahaye). La figure A.2 donne l'intensité de l'absorption par CIA des modèles de Tran and Hartmann (2008) et LMD2019.

L'analyse des résidus spectraux obtenus avec LMD2019 (voir « **New spectro** » sur la figure A.1) montrent que ceux-ci sont significativement plus proches de 0 que pour ceux obtenus avec le modèle de Tran and Hartmann (2008). Ces résultats motivent des tests plus poussés de sensibilités des résultats d'inversion à cette correction empirique du modèle de CIA (voir parties 3.5.1 et 5.5.3).

Dépendance en masse d'air d'un facteur multiplicatif de la colonne d'O₂ Avant d'utiliser cette correction empirique de la CIA dans les inversions de X_{CO_2} à partir des mesures OCO-2, il est intéressant d'examiner comment elle modifie l'inversion d'un facteur

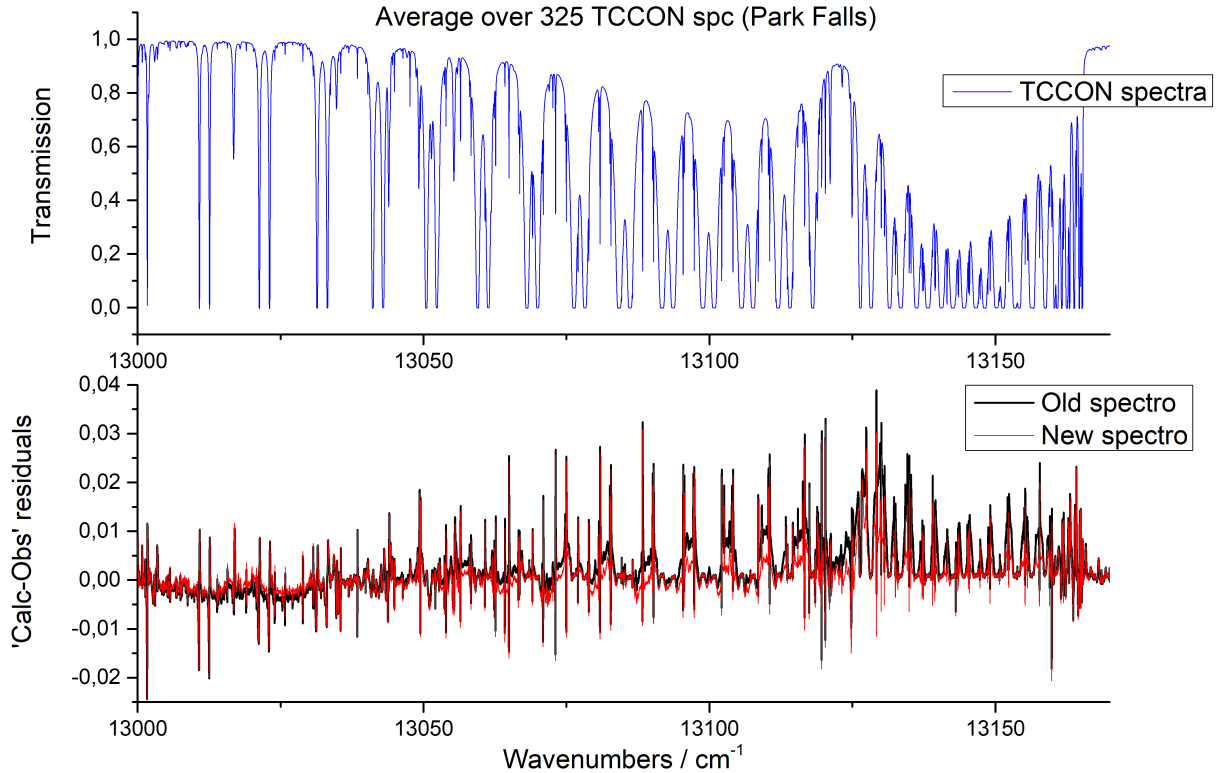


FIGURE A.1 – Transmission typique dans la bande A de l’O₂ moyennée sur 325 spectres TCCON mesurés à Parkfalls (haut) et résidus spectraux « calculés – observés » (bas) pour le modèle de Tran and Hartmann (2008) en **noir** (Old spectro) et pour le modèle LMD2019 en **rouge** (New spectro). Figure et travail réalisé par Thibault Delahaye.

multiplicatif de la colonne d’O₂ à partir de spectres TCCON. En effet, la concentration d’O₂ dans l’atmosphère a l’excellent goût d’être constante sur toute la verticale, avec une valeur d’environ 0.2095 molécules/molécules. L’ampleur des déviations par rapport à 1.0 des facteurs multiplicatifs estimés à partir des mesures TCCON et leur dépendance en masse d’air peut donner une idée de la qualité de l’évolution de la spectroscopie.

On propose de réaliser ces estimations pour un ensemble de mesures TCCON provenant de trois stations : Caltech, Parkfalls et Lamont. N’étant pas calibrées en luminance, la première étape consiste à corriger les mesures en ajustant leur ligne de base sur celle d’une simulation directe réalisée avec 4A/OP, afin de leur donner une unité interprétable. Ensuite, on utilise 5AI pour estimer un facteur multiplicatif de la colonne d’O₂ avec 5AI placé dans une configuration assimilable à une estimation aux moindres-carrés (incertitude a priori = 100000000%, 1 itération de Gauss-Newton), à partir des mesures entre 12950 – 13175 cm⁻¹.

La figure A.3 donne en fonction de la masse d’air les facteurs multiplicatifs obtenus pour le modèle de Tran and Hartmann (2008) (symboles en échelle de gris) et pour LMD2019 (symboles en échelle de rouge). Les facteurs multiplicatifs > 1 obtenus pour le modèle de Tran and Hartmann (2008) montrent bien que l’absorption de l’O₂ était sous-estimée. Ceux

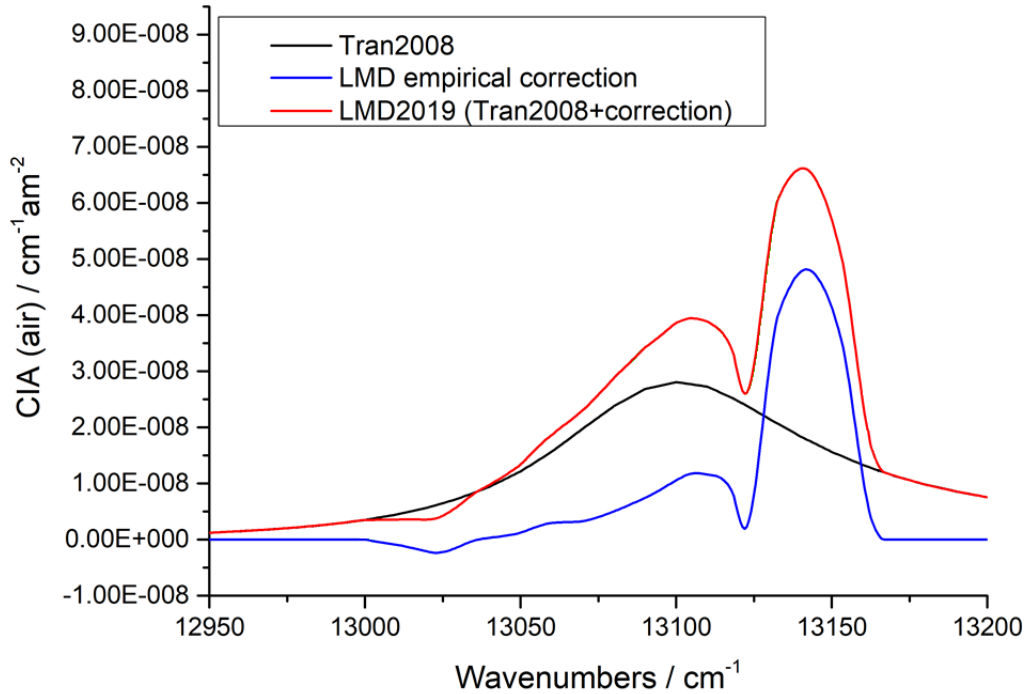


FIGURE A.2 – Intensité d’absorption induite par collisions sur la bande A de l’O₂ pour le modèle de Tran and Hartmann (2008) en **noir** et pour le modèle LMD2019 en **rouge**. La correction empirique ajustée sur trois spectres TCCON mesurés à Parkfalls, qui s’ajoute au modèle de Tran and Hartmann (2008) pour donner LMD2019 est représentée en **bleu**. Figure et travail réalisé par Thibault Delahaye.

obtenus pour LMD2019 sont plus faibles et proches de 1.0 du fait de l’absorption plus intense de ce dernier modèle.

Les deux modèles montrent cependant une dépendance en masse d’air qui illustre que des erreurs de modélisation de l’absorption persistent : elles augmentent à mesure que le chemin optique s’allonge. Les dépendances en masse d’air étant difficiles à comparer entre les deux modèles, la figure A.3 trace également le rapport entre les facteurs multiplicatifs estimés à partir des deux modèles (new / old). La valeur inférieure à 1.0 de ce rapport tient du fait que les facteurs multiplicatifs estimés avec LMD2019 sont plus faibles que ceux estimés avec Tran and Hartmann (2008). En revanche, ce rapport diminue à mesure que la masse d’air augmente : LMD 2019 montre donc une dépendance en masse d’air inférieure à celle de Tran and Hartmann (2008). Après l’amélioration des résidus spectraux, ce résultat montre à nouveau l’amélioration proposée par LMD2019 comparé à Tran and Hartmann (2008).

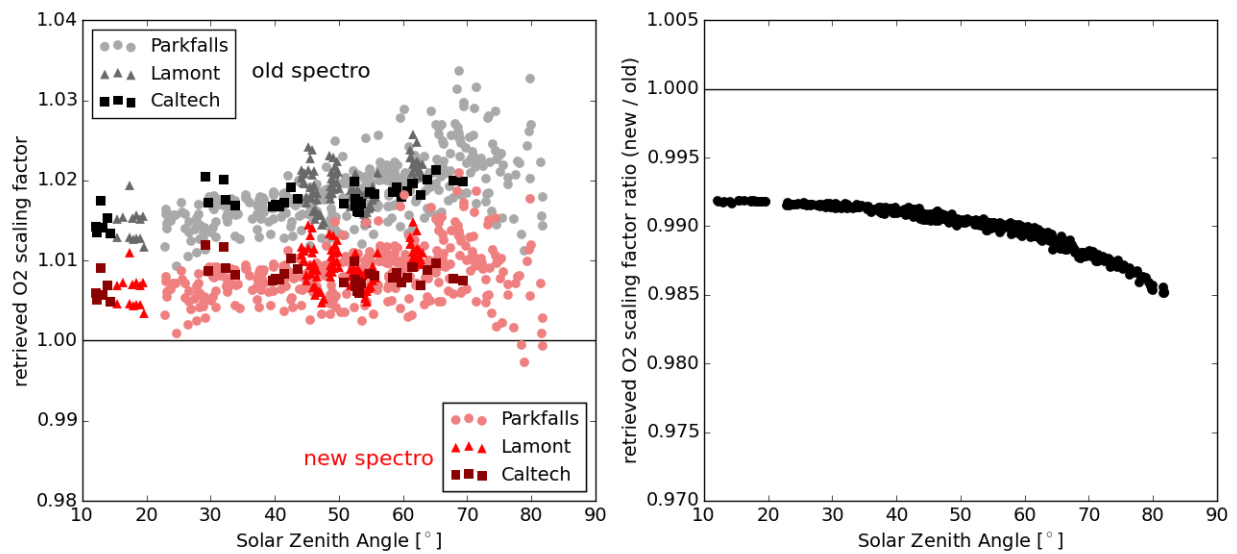


FIGURE A.3 – Facteur multiplicatifs de la colonne d'O₂ estimés à partir de Tran and Hartmann (2008) et de LMD2019 en fonction de la masse d'air (gauche) et rapport entre les facteurs estimés avec LMD2019 et ceux estimés avec Tran and Hartmann (2008) en fonction de la masse d'air (droite).

Annexe B

Impacts sur les résidus spectraux d'une mise à jour de la spectroscopie du CO₂

Comme réalisé pour l'Annexe A, on compare ici les résidus spectraux obtenus avec « old spectro » (Lamouroux et al., 2010) et « new spectro » (Lamouroux et al., 2015), sur les bandes CO₂ faible (1.6 μm) et fort (2.05 μm).

La figure B.1 montre que le passage de la spectroscopie de Lamouroux et al. (2010) à celle de Lamouroux et al. (2015) ne produit pas de grosse différence sur les résidus spectraux pour la bande CO₂ faible, si ce n'est un déplacement des pics de résidus vers les valeurs négatives.

La figure B.2 montre que le passage de la spectroscopie de Lamouroux et al. (2010) à celle de Lamouroux et al. (2015) réduit l'amplitude des résidus spectraux aux alentours de 4820 cm^{-1} ainsi qu'après 4880 cm^{-1} , pour la bande CO₂ fort.

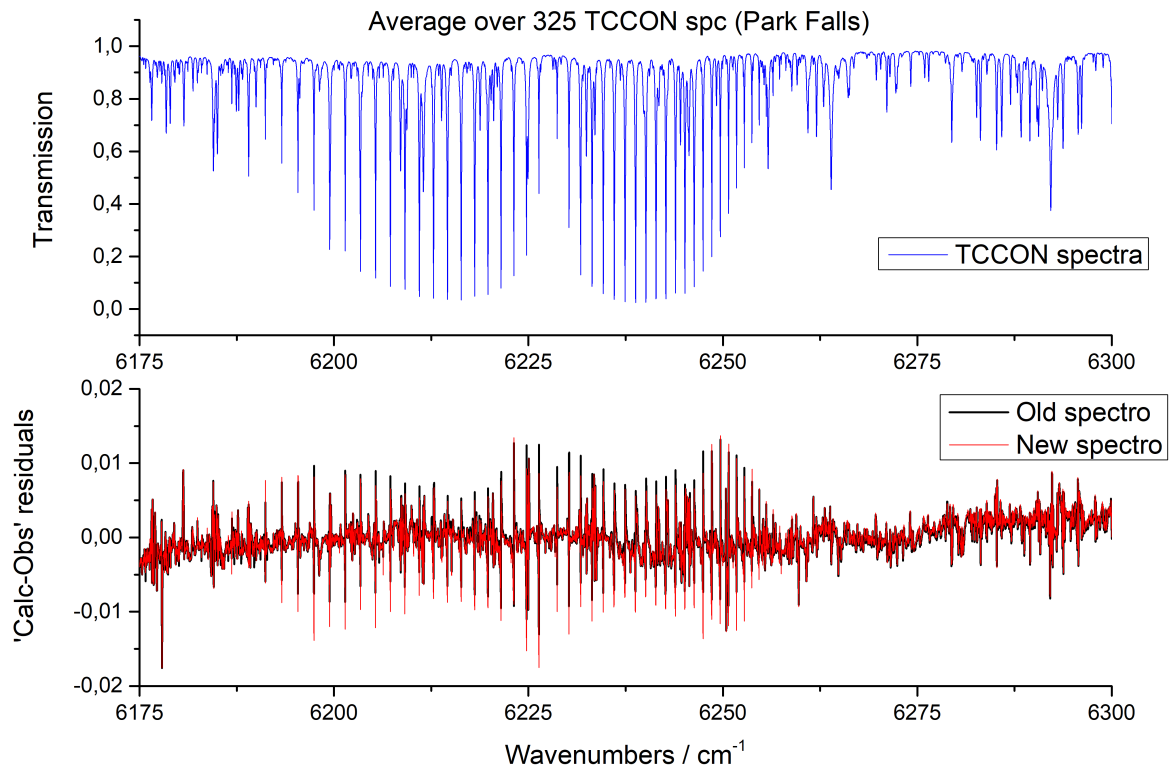


FIGURE B.1 – Transmission typique dans la bande CO_2 faible moyennée sur 325 spectres TCCON mesurés à Parkfalls (haut) et résidus spectraux « calculés – observés » (bas) pour la spectroscopie de Lamouroux et al. (2010) en **noir** (Old spectro) et pour la spectroscopie de Lamouroux et al. (2015) en **rouge** (New spectro). Figure et travail réalisé par Thibault Delahaye.

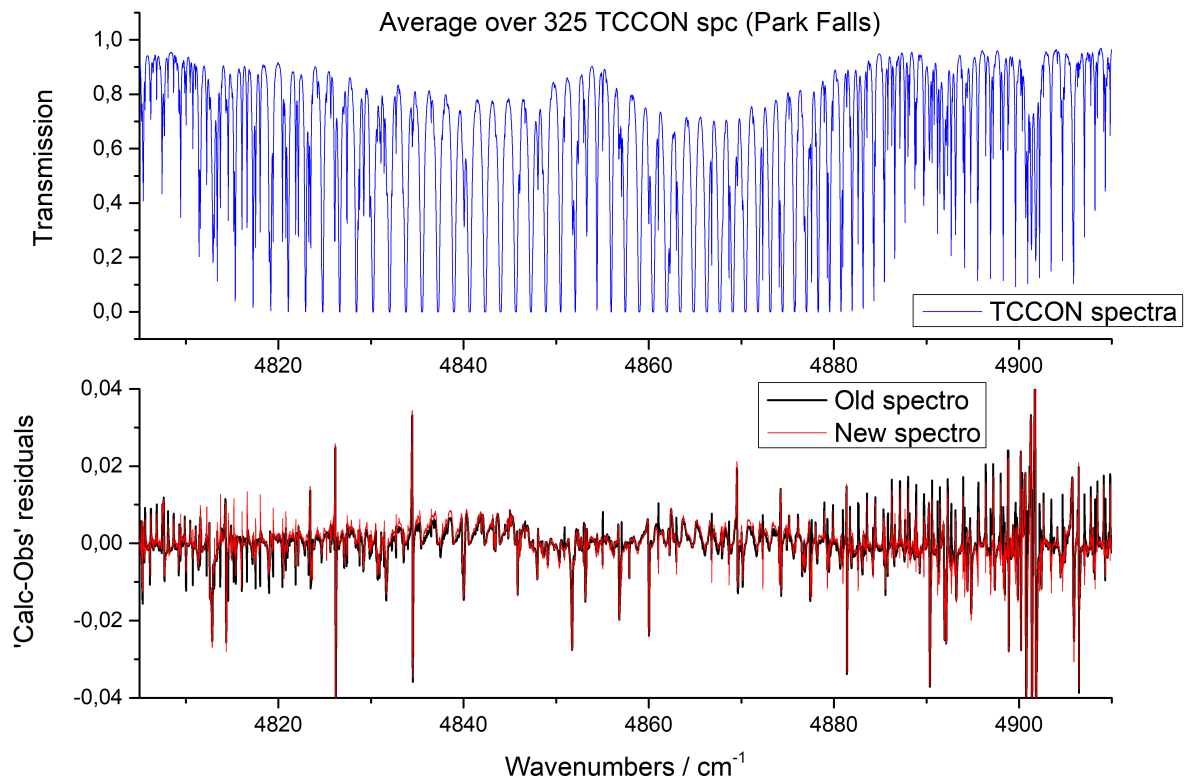


FIGURE B.2 – Transmission typique dans la bande CO₂ fort moyennée sur 325 spectres TCCON mesurés à Parkfalls (haut) et résidus spectraux « calculés – observés » (bas) pour la spectroscopie de Lamouroux et al. (2010) en **noir** (Old spectro) et pour la spectroscopie de Lamouroux et al. (2015) en **rouge** (New spectro). Figure et travail réalisé par Thibault Delahaye.

Annexe C

Approximation de la dépendance des résultats L2 dans le champ de vue de NanoCarb

Hypothèses d’orientation Afin de ne pas avoir à calculer le transfert radiatif pour tous les 17340 pixels du FOV, différentes hypothèses sont faites sur la géométrie d’observation. Tout d’abord, on considère que la situation d’observation atmosphérique est parfaitement uniforme (même atmosphère et même albédo). Après avoir déterminé la performance L2 pour chacun des pixels du FOV, on combine ces résultats dans la direction longitudinale (en appliquant les équations du paragraphe *Utilisation de plusieurs mesures indépendantes* de la partie 3.2.1), pour toutes les positions transversales θ_T dans la fauchée, afin de produire les résultats L2 finaux pour la situation donnée. Les résultats de performance ne dépendent donc alors plus que de θ_T pour chaque situation considérée.

Par ailleurs, on considère aussi que la trajectoire du satellite est parfaitement alignée sur l’azimut du Soleil qui éclaire depuis le Sud. Ainsi, les résultats L2 sont parfaitement symétriques par rapport à l’axe longitudinal de l’imageur (il ne suffit de montrer les résultats que pour $\theta_T > 0$, non montré). En fait, sans la prise en compte de la diffusion par les aérosols (dont la fonction de phase n’est pas symétrique par rapport à l’angle de vue) les résultats L2 au niveau des pixels du FOV auraient une symétrie parfaitement circulaire par rapport au centre du FOV, du fait de la nature particulière des images prises par NanoCarb (non montré, voir les anneaux d’interférence sur la figure 4.2). La présence d’aérosols fait que les résultats n’observent qu’une « presque-symétrie » centrale par rapport au centre du FOV.

Approximation de la dépendance des résultats L2 dans le FOV On se propose d’exploiter la « presque-symétrie » centrale des résultats L2, qui découle des hypothèses faites sur l’orientation du FOV par rapport au Soleil, afin de raccourcir les temps de calcul. On propose donc une sélection réfléchie de 23 pixels parmi le FOV sur lesquels on effectue les calculs d’inversion du transfert radiatif, et à partir desquels on interpole ensuite les résultats L2 pour tout le FOV. Ces pixels sélectionnés sont identifiés sur la figure C.1 par des cercles pleins épais.

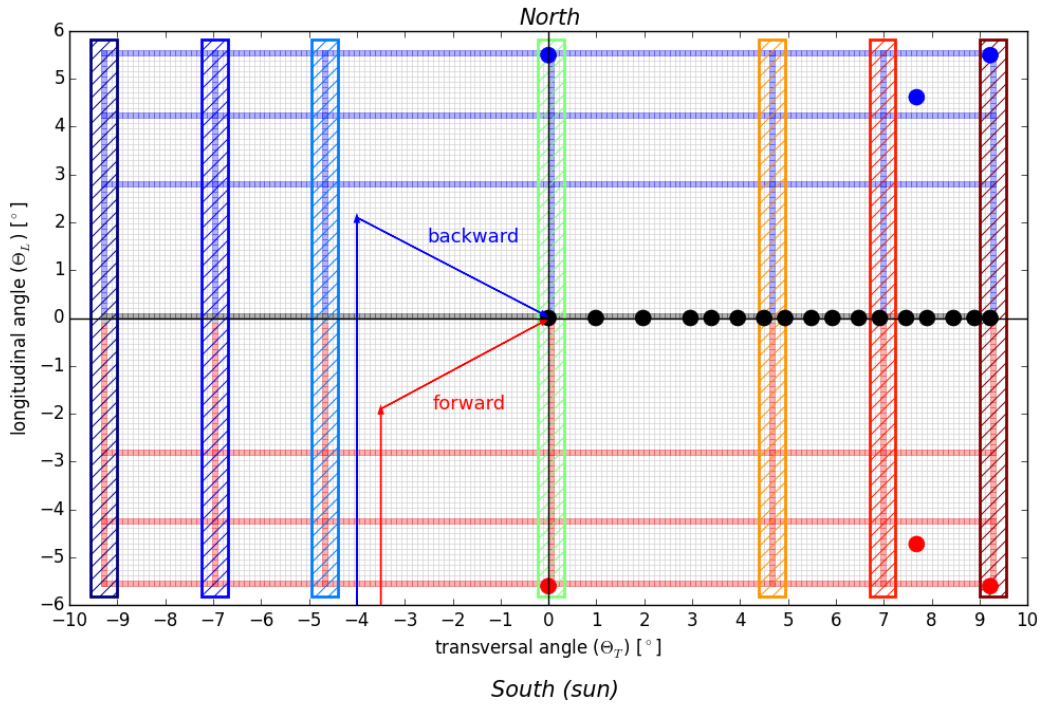


FIGURE C.1 – Plan d’identification des pixels du FOV. Tous les pixels surlignés en **rouge clair**, **bleu clair** et **gris clair** ont été utilisés pour illustrer la dépendance des résultats L2 dans le FOV obtenue pour une situation test sur une large sélection de pixels (voir figure C.2). Ils identifient les pixels pour lesquels le chemin principal du transfert radiatif (du sol vers le satellite) est parcouru vers l’arrière, vers l’avant ou sur l’axe de symétrie de l’imageur, respectivement, par rapport à la direction du rayonnement solaire incident. Les 23 pixels sélectionnés, et à partir desquels tous les résultats L2 sont interpolés, sont identifiés par des cercles pleins et épais. Les boîtes hachurées identifient les colonnes longitudinales de pixels pour lesquelles on compare les résultats L2 individuels et ceux interpolés sur la figure C.4.

Pour une situation test typique de l’Europe (albédo de végétation et angle zénithal solaire de 50°) et des épaisseurs optiques d’aérosols a priori différentes de leur valeur vraie (afin que l’erreur systématique ne soit pas nulle : cas non-SPEX COD=0.15, FOD=0.08 et CLH=2, voir partie 4.3.3), on cherche maintenant à décrire et illustrer la stratégie d’interpolation des résultats L2 dans le FOV, ainsi qu’à évaluer l’erreur d’approximation. Pour une large sélection de pixels du FOV, identifiés en couleurs claires sur la figure C.1, la figure C.2 montre l’évolution de l’erreur systématique et aléatoire de X_{CO_2} en fonction de l’angle $\theta = \sqrt{\theta_T^2 + \theta_L^2}$. On constate que cet angle explique en effet beaucoup de la dépendance des

résultats de performance dans le FOV. Par ailleurs, pour l’erreur systématique, on peut noter que sa dépendance en θ suit des allures semblables pour trois clusters de pixels. Le premier cluster de pixels, identifié en **bleu clair** sur les figures C.1 et C.2, correspond aux pixels de l’imageur associés à un chemin optique principal (du sol vers le satellite) parcouru vers l’arrière par rapport à la direction du rayonnement solaire incident. Les pixels en **rouge clair** correspondent quant à eux à un chemin optique principal parcouru dans une direction identique à celle du rayonnement solaire incident. Finalement les pixels identifiés en **gris clair** correspondent à ceux situés exactement sur l’axe de symétrie de l’imageur. Cette différence d’erreur systématique d’estimation du X_{CO_2} selon la position du pixels provient vraisemblablement des fonctions de phase asymétriques issues des propriétés optiques utilisées pour modéliser les aérosols.

Prenant acte de cette dépendance en θ des résultats L2, mais aussi de sa déformation selon la direction longitudinale pour les hypothèses d’observation faites au début, on propose trois modèles d’erreur (systématique ou aléatoire) en fonction de θ . Le premier, noté f^c , correspond à la dépendance en θ interpolée entre les 17 pixels sélectionnés sur l’axe transversal de l’imageur, identifiés par d’épais cercles **noirs** sur les figures C.1 et C.2. Ce premier modèle d’erreur est ensuite transformé pour donner f^+ (respectivement f^-) en le multipliant par un facteur dépendant de θ afin d’intercepter les résultats obtenus pour les trois pixels sélectionnés dans la zone $\theta_L > 0$ (respectivement $\theta_L < 0$) identifiés par d’épais cercles **bleus** (respectivement **rouges**).

Le modèle f^c est principalement correct vers le centre de l’imageur tandis que les modèles f^+ et f^- sont principalement corrects pour les fortes valeurs de θ_L . On note f^\pm le modèle correct pour les fortes valeurs de θ_L , quel que soit son signe, et définit tel que :

$$f^\pm = \begin{cases} f^+ & \text{si } \theta_L > 0 \\ f^- & \text{si } \theta_L < 0 \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Afin de proposer un compromis entre f^c et f^\pm , on calcule les erreurs d’estimation dans le FOV (systématiques ou aléatoires), arbitrairement notées Y , comme une combinaison linéaire du modèle f^c et du modèle f^\pm pondérés par des poids ω^c et ω^\pm . Ces derniers sont calculés avec des fonctions sigmoïdes et évoluent selon θ_L et θ_T :

$$Y(\theta_T, \theta_L) = \omega^c(\theta_T, \theta_L)f^c(\theta) + \omega^\pm(\theta_T, \theta_L)f^\pm(\theta) \quad (\text{C.2})$$

La figure C.3 illustre les modèles f^c et f^\pm pour les erreurs systématique et aléatoire de X_{CO_2} , et donne aussi l’évolution des poids ω^c et ω^\pm dans le FOV.

Ces résultats L2 obtenus pour la colonne X_{CO_2} , scalaire, pour tous les pixels du FOV, peuvent ensuite être combinés dans la direction longitudinale, parallèle à la trajectoire du satellite, en appliquant une version scalaire¹ des équations du paragraphe intitulé *Utilisa-*

1. on néglige donc ici implicitement la covariance du facteur multiplicatif du profil de CO_2 avec les autres paramètres inclus dans le vecteur d’état, et on fait l’hypothèse abusive que le problème inverse considéré est linéaire (il ne l’est pas : plusieurs itérations sont nécessaires et les Jacobiens sont mis à jour à chacune d’entre elles du fait de la non-linéarité apportée par les aérosols). Des tentatives ont été faites pour interpoler non pas l’erreur aléatoire de X_{CO_2} seulement, mais les matrices \hat{S} elles-mêmes. Malheureusement, l’inversion de sommes de matrices interpolées et inversées s’est avérée être un exercice numériquement hasardeux produisant des résultats absurdes, dont des variances négatives.

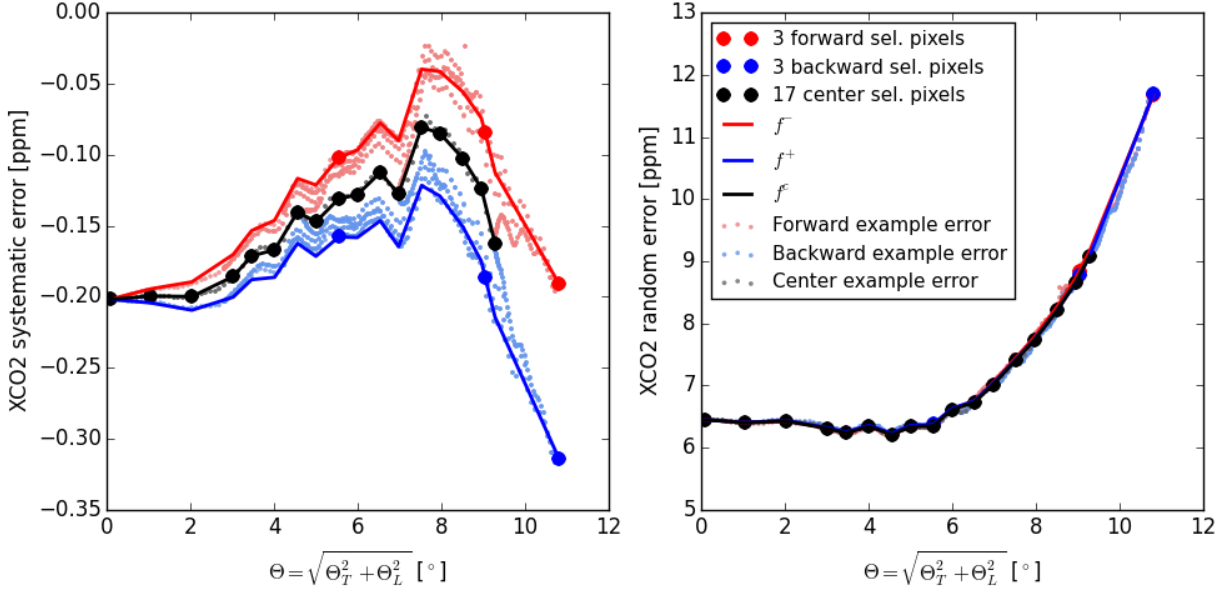


FIGURE C.2 – Dépendance en θ de l’erreur systématique (gauche) et de l’erreur aléatoire (droite) pour X_{CO_2} , calculée sur une large sélection illustrative de pixels (petits points en couleurs claires). Les modèles interpolés d’erreurs f^c (noir), f^+ (bleu) et f^- (rouge) apparaissent en traits plein, tandis que les 23 pixels pour lesquels le calcul de performance est réalisé apparaissent en gros cercles pleins.

tion de plusieurs mesures indépendantes de la partie 3.2.1. On obtient alors, pour le FOV homogène, les résultats finaux de performance L2 qui ne dépendent plus que de la position θ_T dans la fauchée.

Par ailleurs, la large sélection de pixels réalisée pour illustrer la dépendance en θ des résultats d’estimation inclut notamment sept colonnes longitudinales de pixels pour lesquelles la performance a été calculée exactement. Elles sont identifiées par des boîtes hachurées sur la figure C.1. La figure C.4 compare les résultats obtenus exactement avec ceux interpolés pour ces sept colonnes longitudinales. Si on constate en effet des différences locales pour certaines positions θ_L entre résultats calculés exactement et résultats interpolés, une fois combinés dans la direction longitudinale, le maximum de l’erreur d’approximation sur les sept colonnes longitudinales ne dépasse en revanche pas 0.01 ppm. Sur cette situation test (dont on espère que les résultats se comportent comme ceux des autres situations qui seront étudiées), la méthode d’approximation par interpolation des résultats L2 dans le FOV apparaît donc satisfaisante.

Cette approche par interpolation pour obtenir la dépendance des résultats L2 dans le FOV permet de diviser le temps de calcul par 750 environ, tout en fournissant des résultats pour le FOV entier.

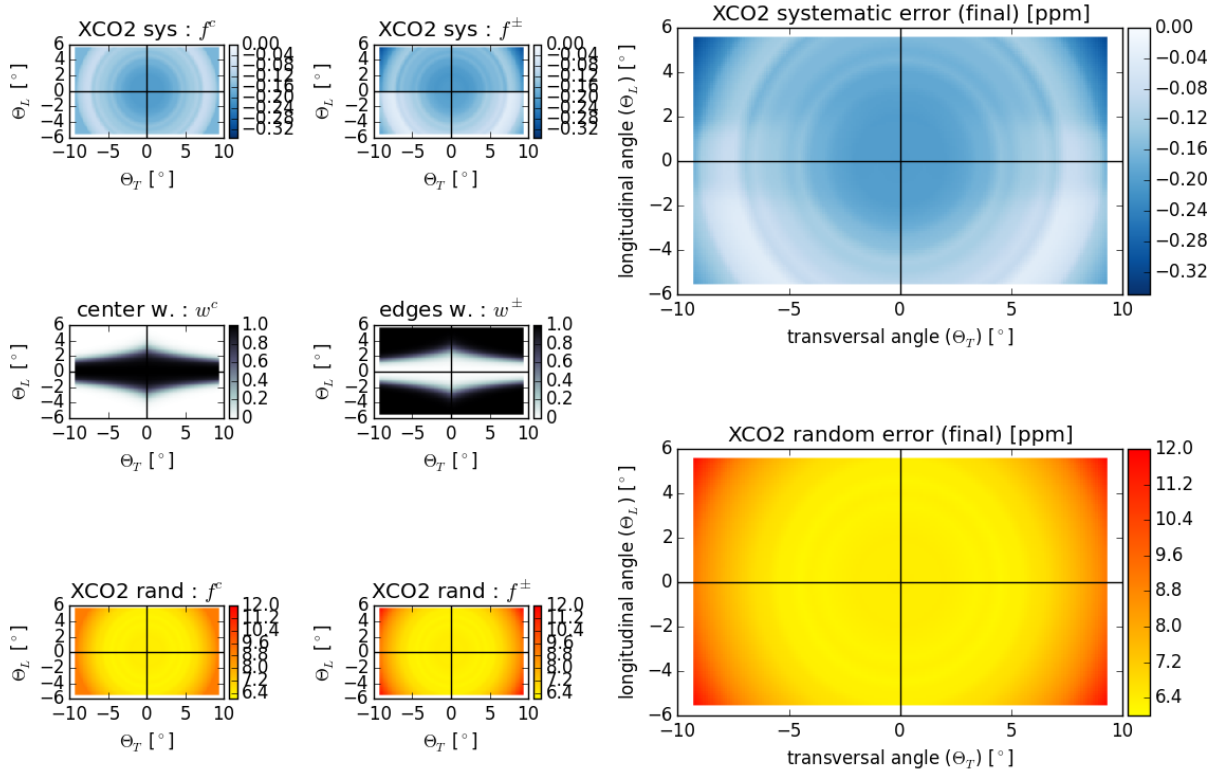


FIGURE C.3 – Erreur systématique d’estimation du X_{CO_2} finales (haut droite) et erreur aléatoire d’estimation du X_{CO_2} (bas droite) finales et interpolées pour tout le FOV. Les étapes de calcul intermédiaires f^c (colonne de gauche) et f^\pm (colonne de droite) sont montrées pour les erreurs systématique (haut) et aléatoire (bas) de X_{CO_2} , en même temps que les poids de pondération ω^c (ligne du milieu, gauche) et ω^\pm (ligne du milieu, droite).

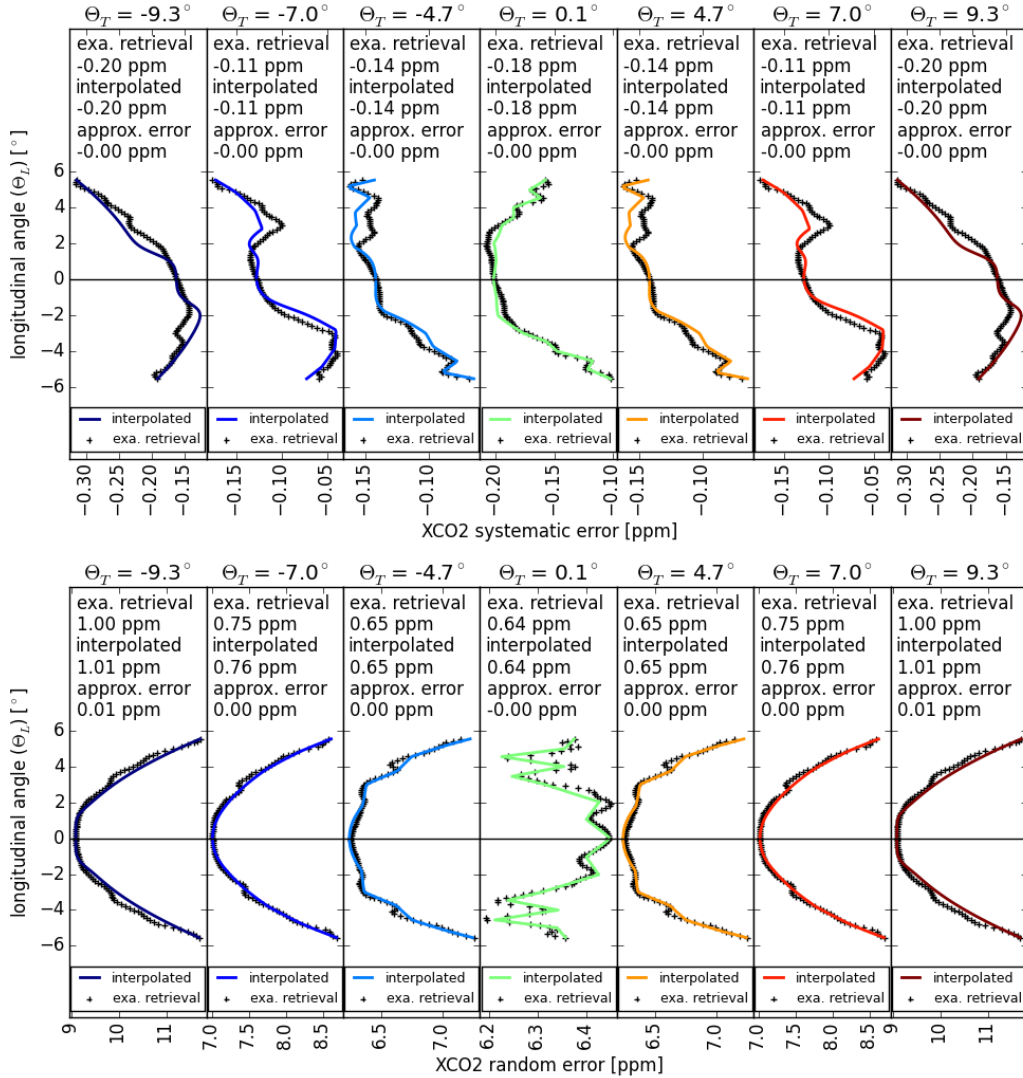


FIGURE C.4 – Comparaison des erreurs systématique (haut) et aléatoire (bas) d’estimation du X_{CO_2} obtenues par calcul exact (points noirs) et interpolation des résultats issus des 23 pixels sélectionnés (lignes pleines colorées), pour sept colonnes longitudinales de pixels, décrites par un angle θ_T et identifiées sur la figure C.1 par des boîtes hachurées.

Annexe D

Performances du concept SCARBO pour l'estimation de X_{CH_4}

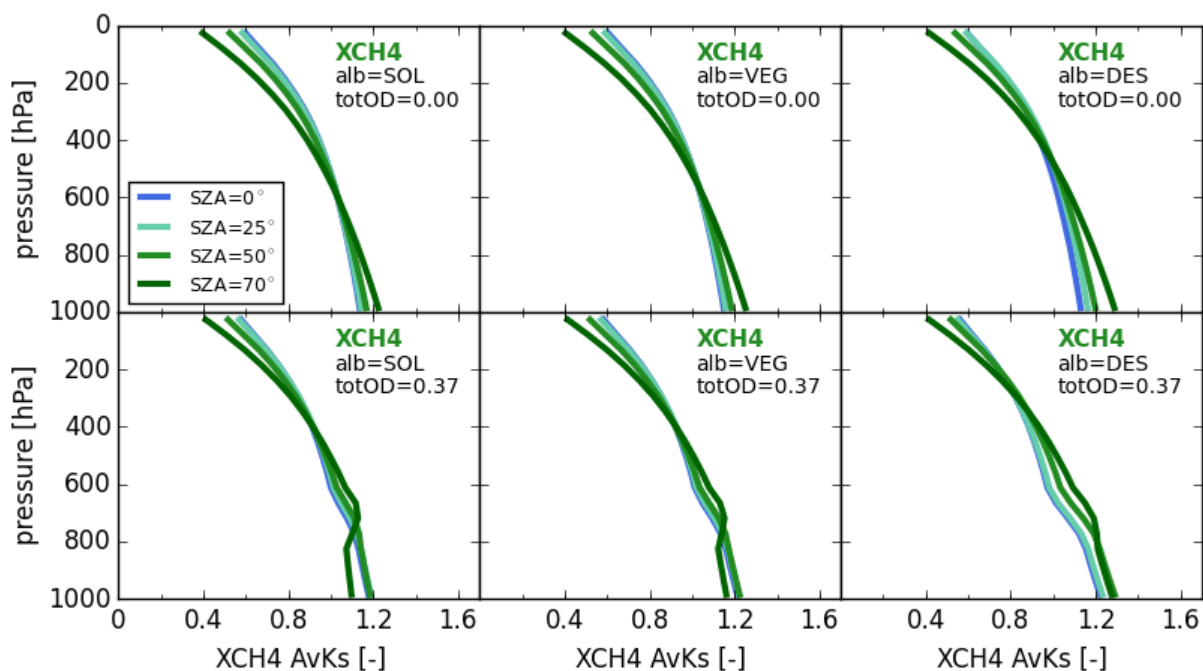


FIGURE D.1 – Sensibilités verticales (*column averaging kernels*) du X_{CH_4} estimé à partir des mesures NanoCarb, moyennées sur les 23 pixels pour lesquels les estimations sont réalisées exactement. On les montre pour les trois modèles d'albédo : sol nu (gauche), végétation (milieu) et désert (droite), pour toutes les valeurs de SZA (échelle de couleurs) et pour les valeurs minimale (haut) et maximale (bas) d'épaisseur optique d'aérosols explorées.

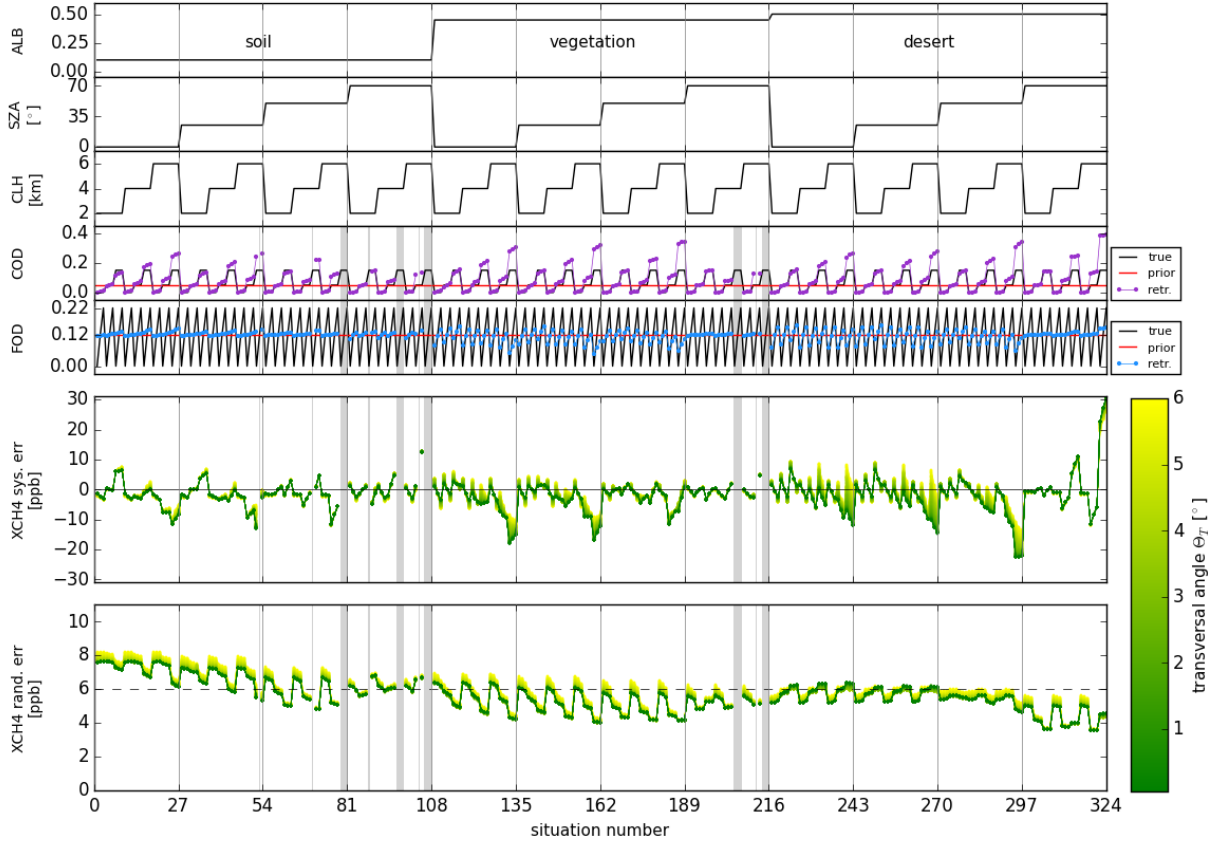


FIGURE D.2 – Erreurs systématiques (milieu) et aléatoires (bas) pour l’estimation du X_{CH_4} obtenues à partir des mesures NanoCarb pour les 324 situations d’observation atmosphérique, dans le cas du scénario de conception sans-SPEX. Les résultats sont tracés en fonction du numéro de la situation : les cinq panneaux du haut rappellent les valeurs des paramètres ALB ($0.7 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent les situations. Les valeurs a priori et estimées des paramètres COD et FOD sont également données. La dépendance des résultats selon la position transversale $|\theta_T|$ dans la fauchée est donnée par l’échelle de couleurs : les couleurs plus foncées signifient une valeur de $|\theta_T|$ plus proche de zéro. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l’estimation optimale n’a pas convergé de manière satisfaisante.

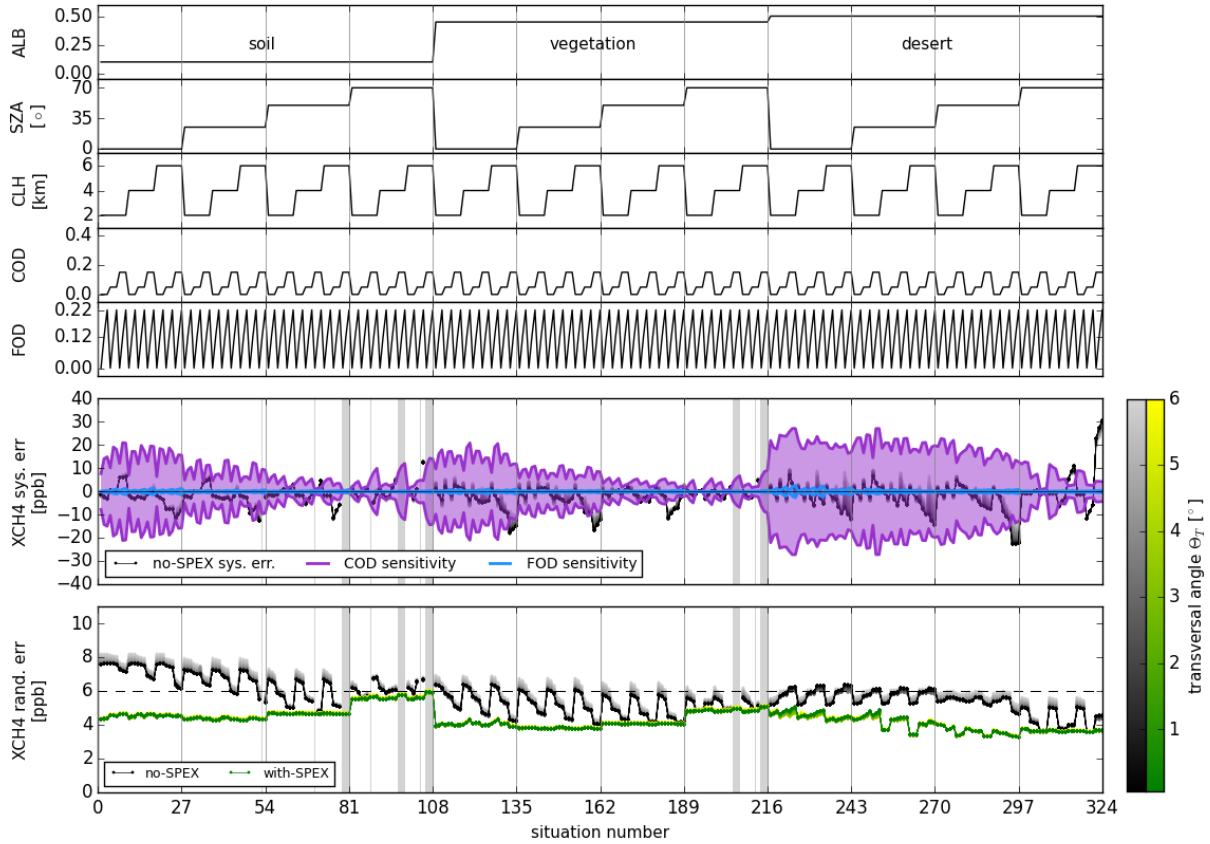


FIGURE D.3 – Sensibilités de NanoCarb à la méconnaissance a priori des paramètres COD et FOD (milieu) et aléatoires (bas) pour l’estimation du X_{CH_4} obtenues à partir des mesures NanoCarb pour les 324 situations d’observation atmosphérique, dans le cas du scénario de conception avec-SPEX. Les résultats sont tracés en fonction du numéro de la situation : les cinq panneaux du haut rappellent les valeurs des paramètres ALB ($0.7 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent les situations. Les valeurs a priori et estimées des paramètres COD et FOD sont également données. La dépendance des résultats selon la position transversale $|\theta_T|$ dans la fauchée est donnée par l’échelle de couleurs : les couleurs plus foncées signifient une valeur de $|\theta_T|$ plus proche de zéro. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l’estimation optimale n’a pas convergé de manière satisfaisante. Les résultats du scénario de conception sans-SPEX sont reproduits avec une échelle gris-noire pour faciliter la comparaison des deux scénarios.

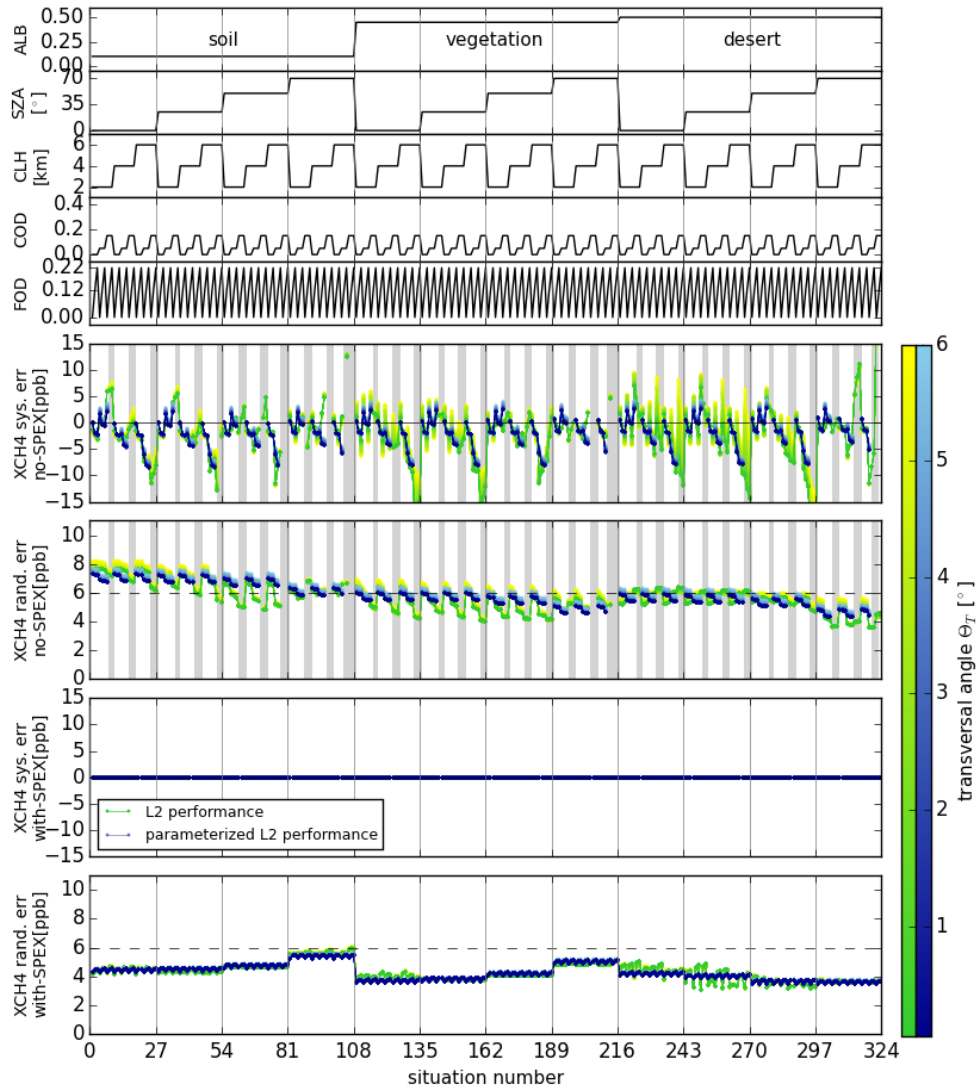


FIGURE D.4 – Erreurs systématiques (6^{ème} et 8^{ème} panneaux) et aléatoires (7^{ème} et 9^{ème} panneaux) pour l’estimation du X_{CH_4} obtenues à partir des mesures NanoCarb pour les 324 situations d’observation atmosphérique, pour les scénarios de conception sans-SPEX (6^{ème} et 7^{ème} panneaux) et avec-SPEX (8^{ème} et 9^{ème} panneaux). Les résultats tracés en échelle de couleurs **verte** sont ceux calculés exactement, tandis que ceux tracés en échelle de couleurs **bleue** sont ceux issus de la paramétrisation des performances L2. Les résultats sont tracés en fonction du numéro de la situation : les cinq panneaux du haut rappellent les valeurs des paramètres ALB ($0.7 \mu\text{m}$), SZA, CLH, COD et FOD qui définissent les situations. Les valeurs a priori et estimées des paramètres COD et FOD sont également données. La dépendance des résultats selon la position transversale $|\theta_T|$ dans la fauchée est donnée par l’échelle de couleurs : les couleurs plus foncées signifient une valeur de $|\theta_T|$ plus proche de zéro. Les zones grisées signalent les situations pour lesquelles l’estimation optimale n’a pas convergé de manière satisfaisante, ou les situations filtrées selon la valeur des COD et FOD.

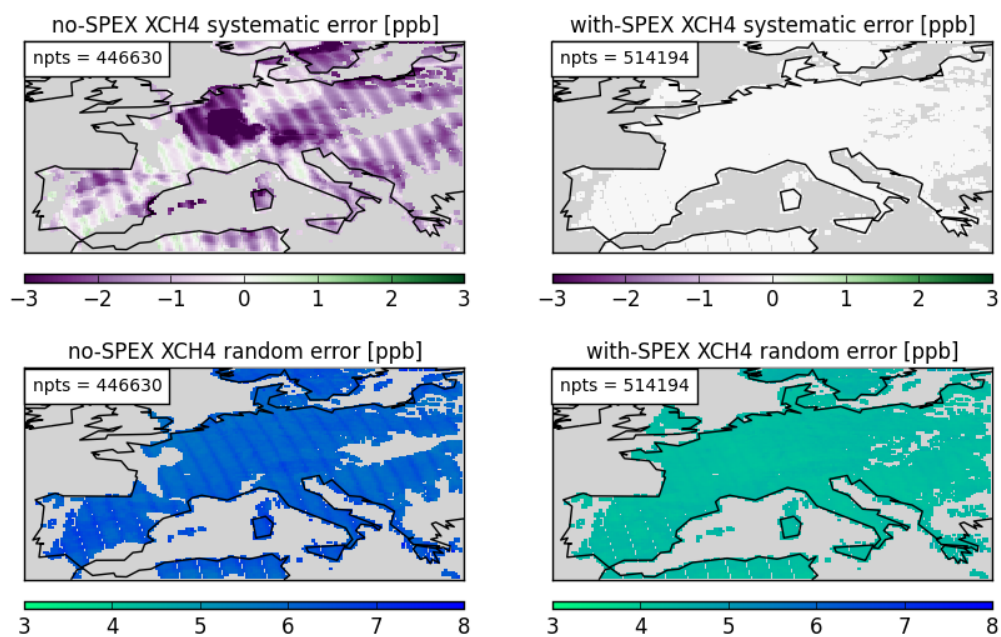


FIGURE D.5 – Erreurs systématiques (haut) et aléatoires (bas) d’estimation du X_{CH_4} pour les scénarios de conception sans-SPEX (gauche) et avec-SPEX (droite), calculées par paramétrisation et moyennées sur une grille de $0.2^\circ \times 0.2^\circ$ pour le 1^{er} juillet 2015.

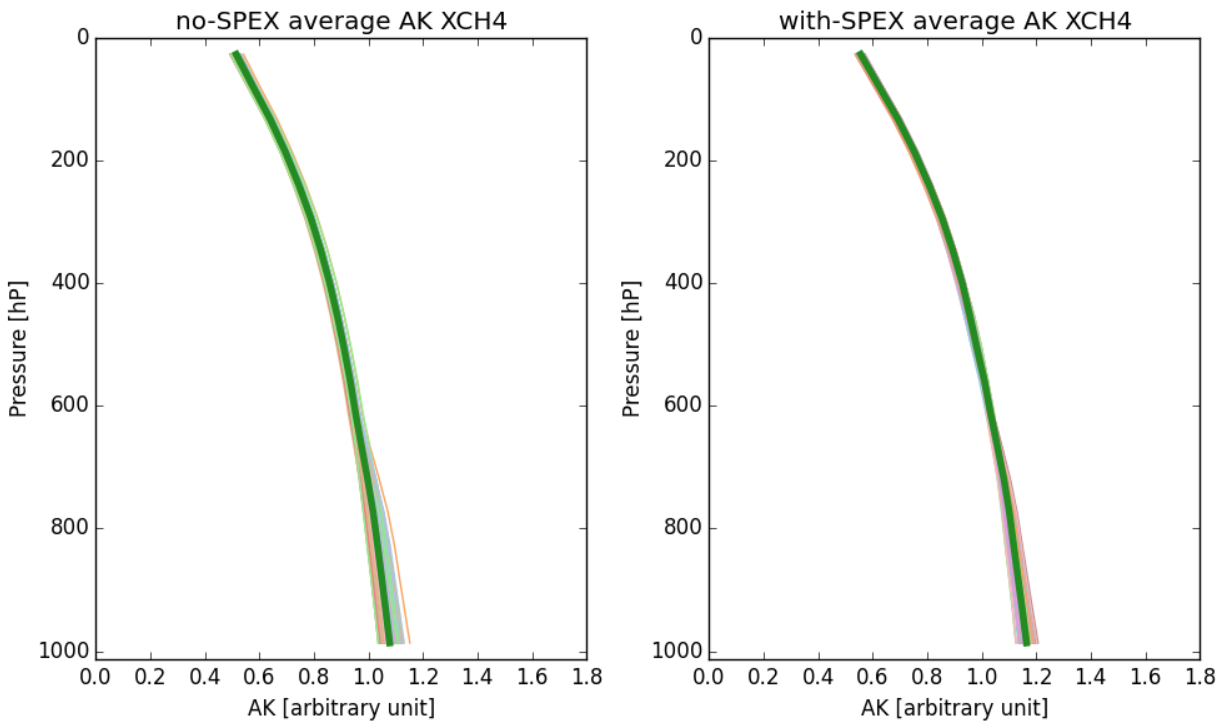


FIGURE D.6 – Exemples d’AKs (sensibilités verticales de la colonne totale de CH_4) obtenus par paramétrisation (traits fins) et leur moyenne (trait épais **vert**) pour les scénarios de conception sans-SPEX (gauche) et avec-SPEX (droite).

Annexe E

Performances et contenu en information pour les 12 situations d'observation atmosphérique

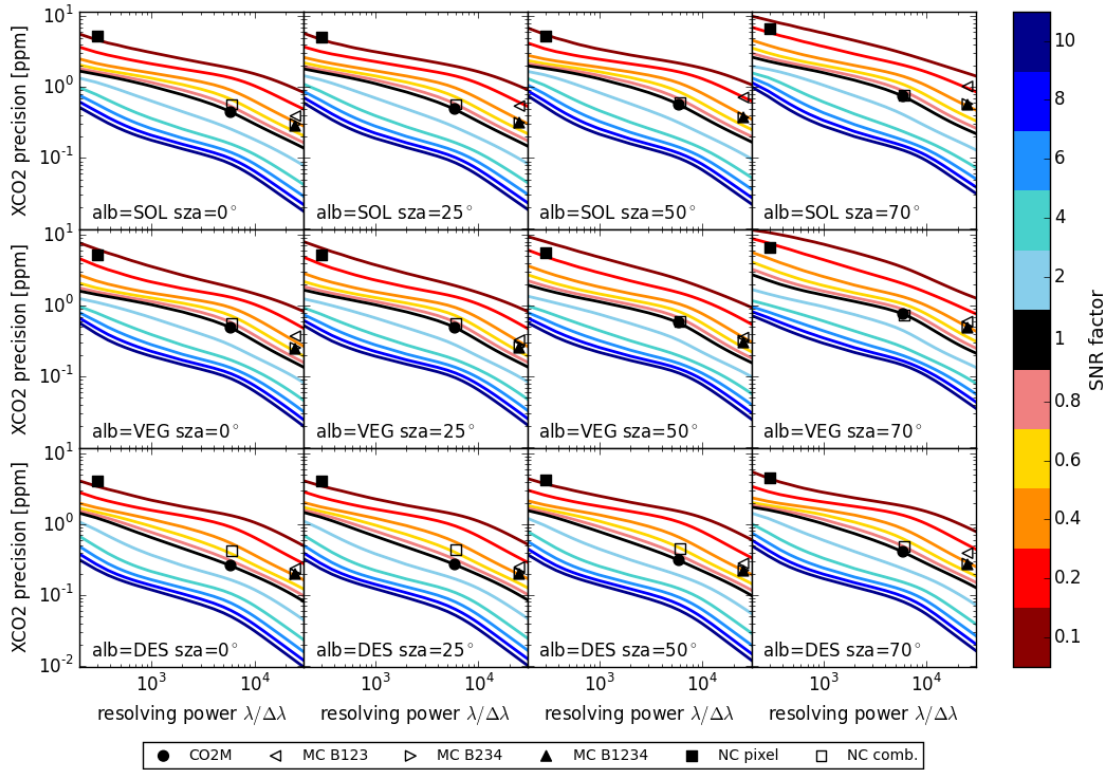


FIGURE E.1 – Erreur aléatoire d’estimation du X_{CO_2} pour un instrument fictif CO_2M -var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différents SNR sont testés (échelle de couleurs). Les symboles donnent les résultats pour NanoCarb (NC, carrés), CO_2M (cercle) et MicroCarb (MC, triangles).

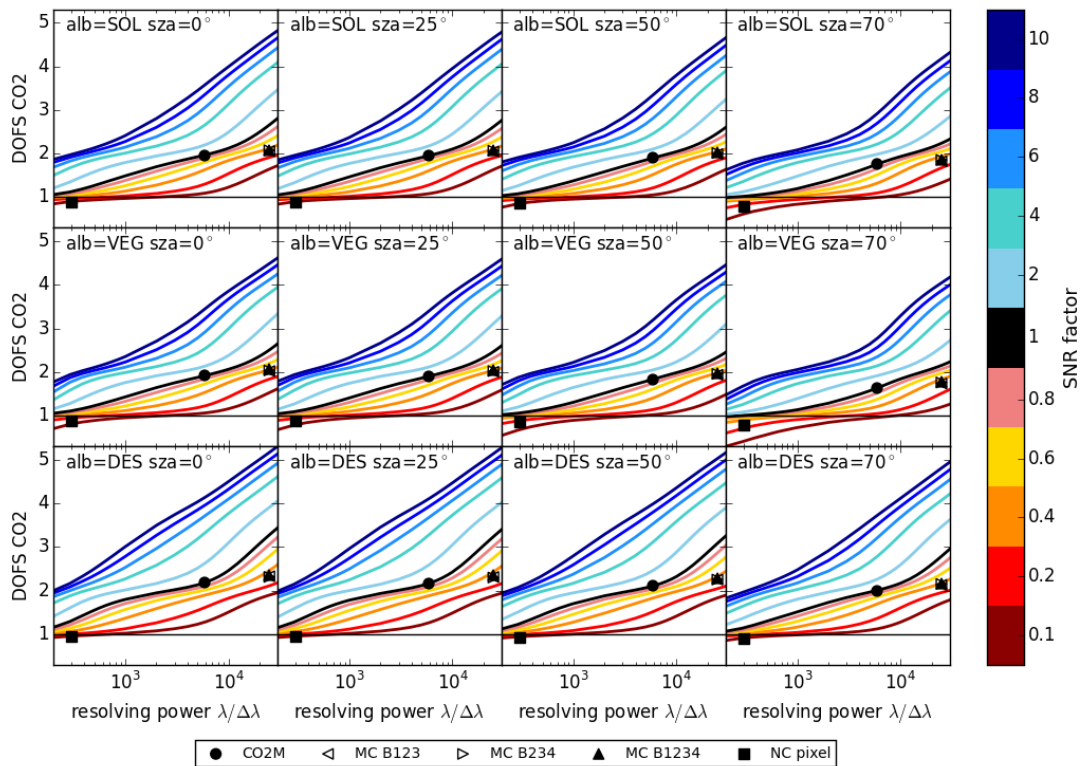


FIGURE E.2 – Degrés de liberté (DOFs) liés au CO_2 pour un instrument fictif CO_2M -var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différents SNR sont testés (échelle de couleurs). Les symboles donnent les résultats pour NanoCarb (NC, carrés), CO_2M (cercle) et MicroCarb (MC, triangles).

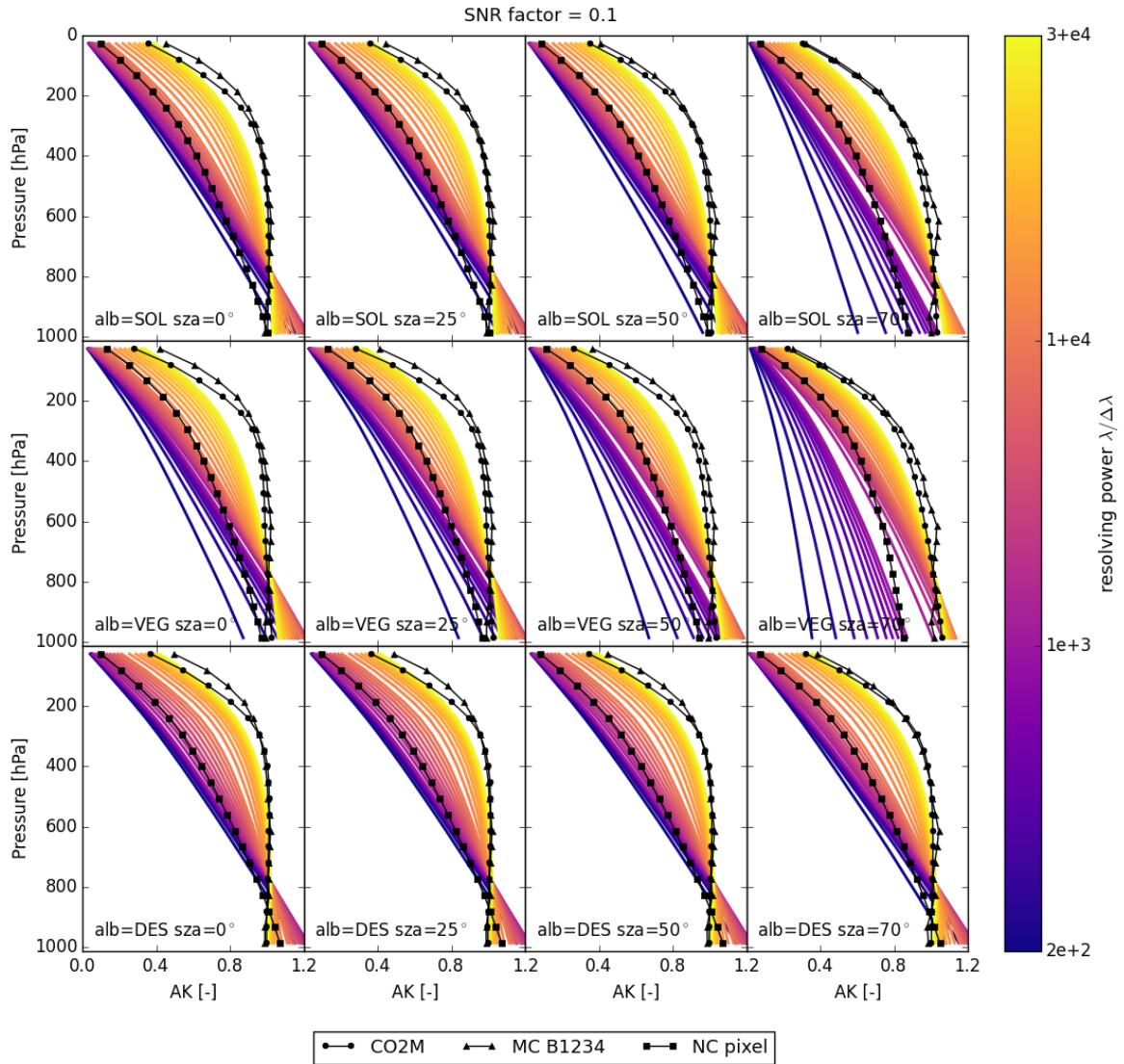


FIGURE E.3 – Sensibilités verticales (AKs) en fonction du pouvoir de résolution, pour un SNR égal à un dixième du SNR de référence, données pour les 12 situations d’observation atmosphériques considérées dans le chapitre 5. Les lignes avec symboles donnent les sensibilités verticales de CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

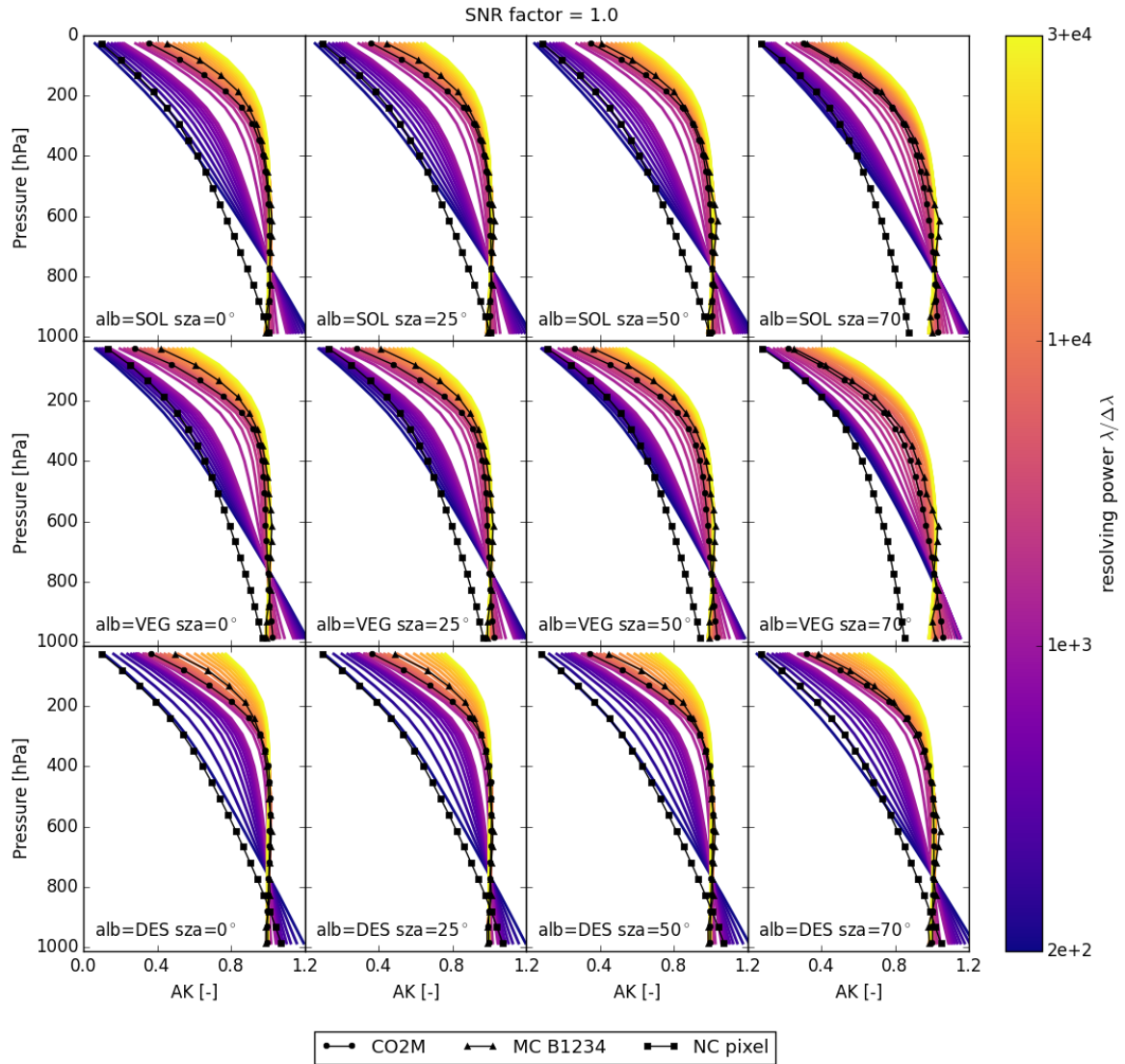


FIGURE E.4 – Sensibilités verticales (AKs) en fonction du pouvoir de résolution, pour un SNR égal au SNR de référence, données pour les 12 situations d’observation atmosphériques considérées dans le chapitre 5. Les lignes avec symboles donnent les sensibilités verticales de CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

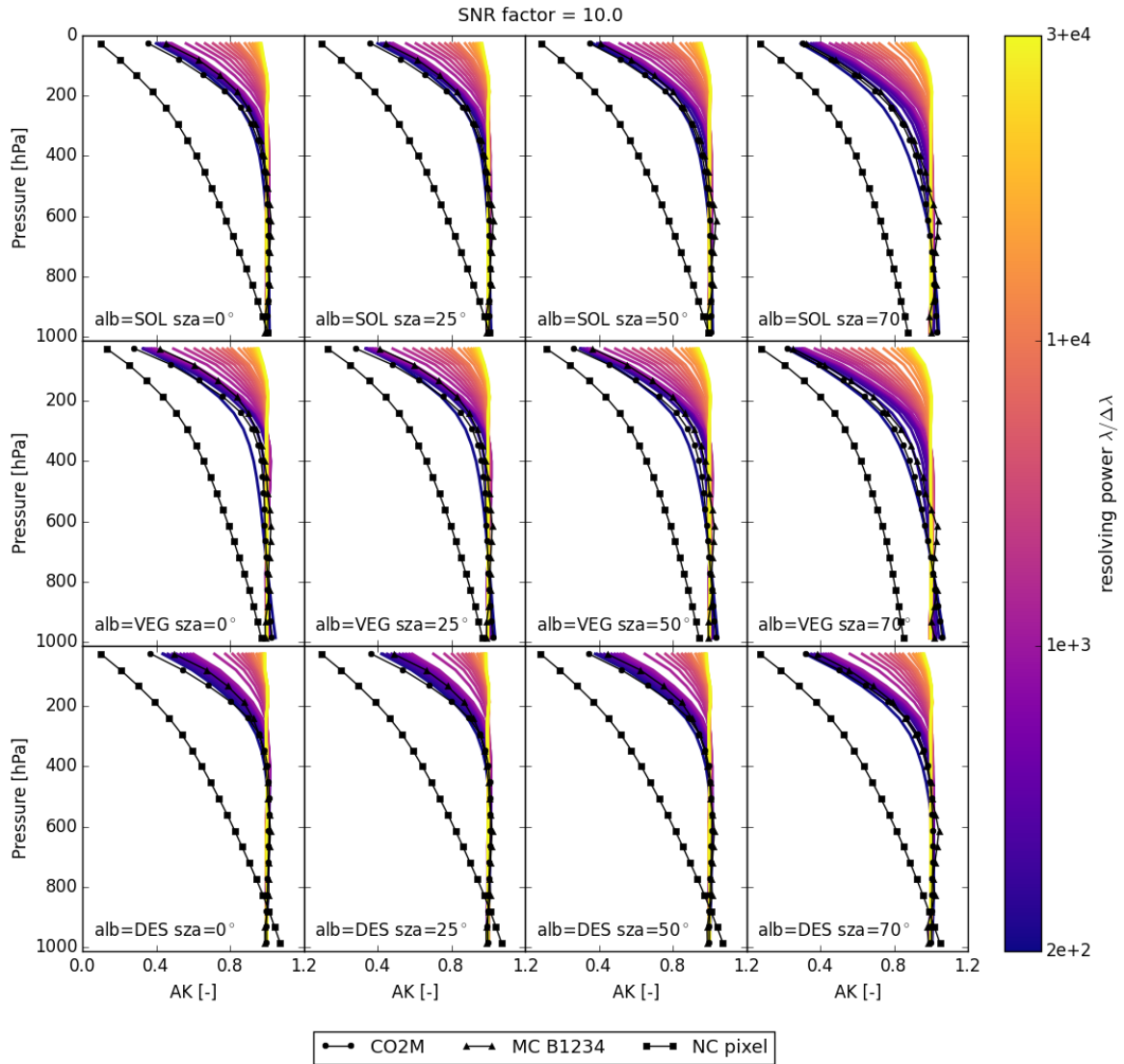


FIGURE E.5 – Sensibilités verticales (AKs) en fonction du pouvoir de résolution, pour un SNR égal à 10 fois le SNR de référence, données pour les 12 situations d’observation atmosphériques considérées dans le chapitre 5. Les lignes avec symboles donnent les sensibilités verticales de CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

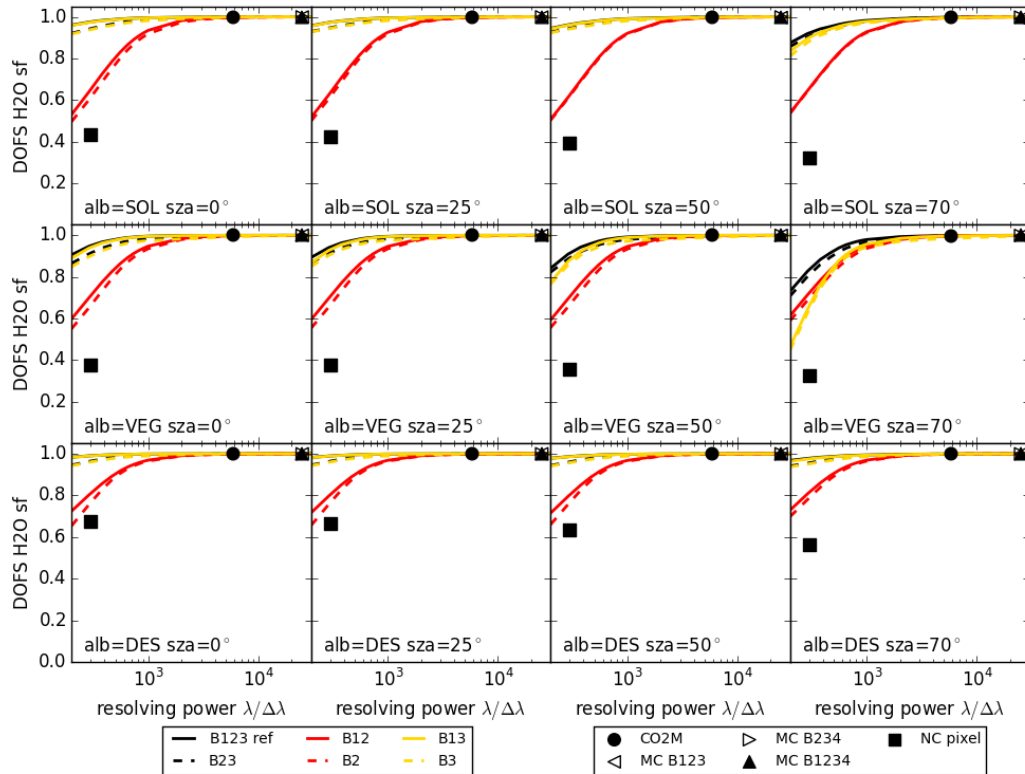


FIGURE E.6 – Degrés de liberté associés au facteur multiplicatif du profil de vapeur d’eau pour un instrument fictif CO₂M-var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l’O₂ (B1), et avec les deux bandes CO₂ faible et fort (**noir**), la bande seule bande CO₂ faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO₂ fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

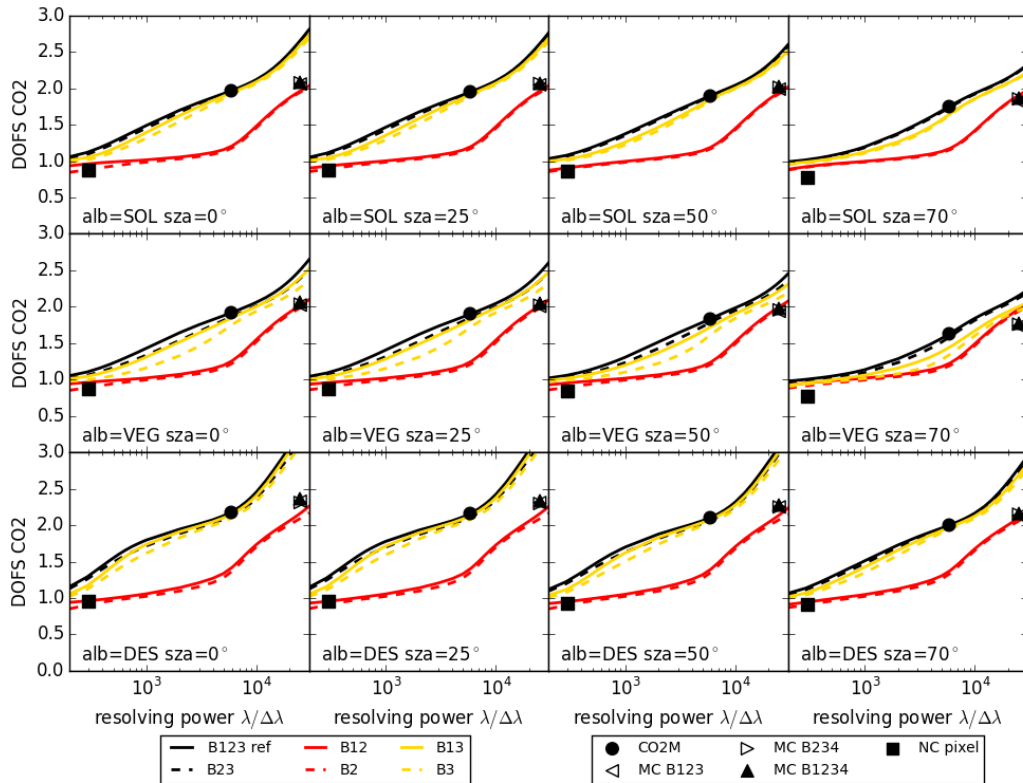


FIGURE E.7 – Degrés de liberté associés au CO_2 pour un instrument fictif CO_2M -var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l' O_2 (B1), et avec les deux bandes CO_2 faible et fort (**noir**), la bande seule bande CO_2 faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO_2 fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

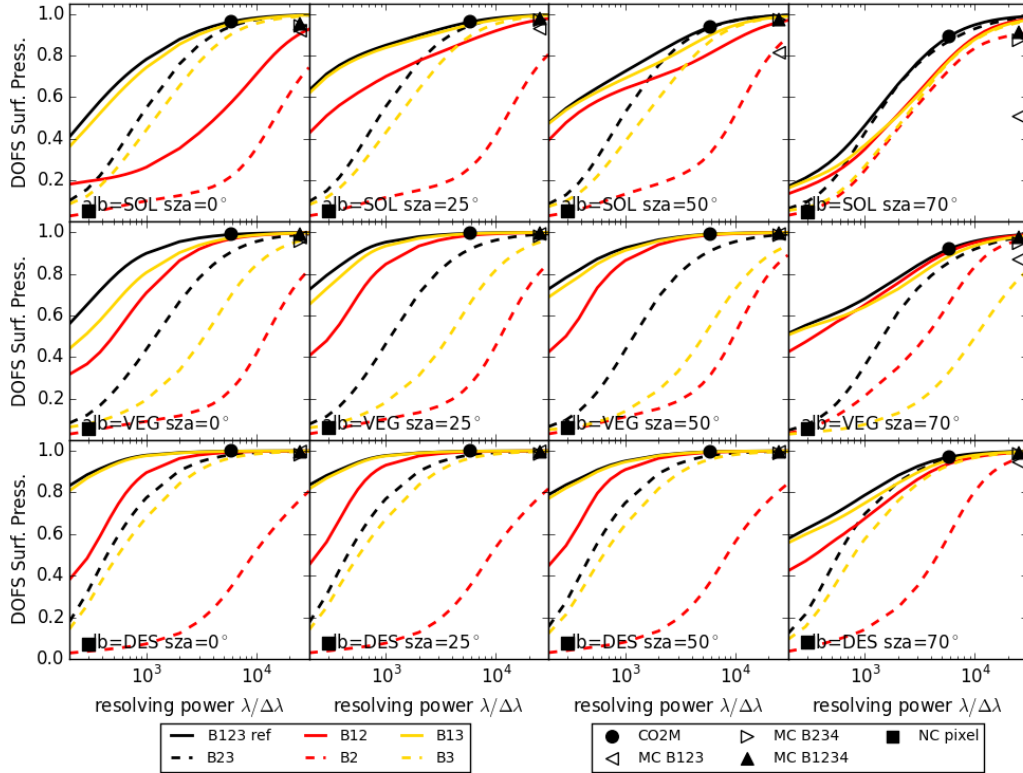


FIGURE E.8 – Degrés de liberté associés à la pression de surface pour un instrument fictif CO₂M-var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l'O₂ (B1), et avec les deux bandes CO₂ faible et fort (**noir**), la bande seule bande CO₂ faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO₂ fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

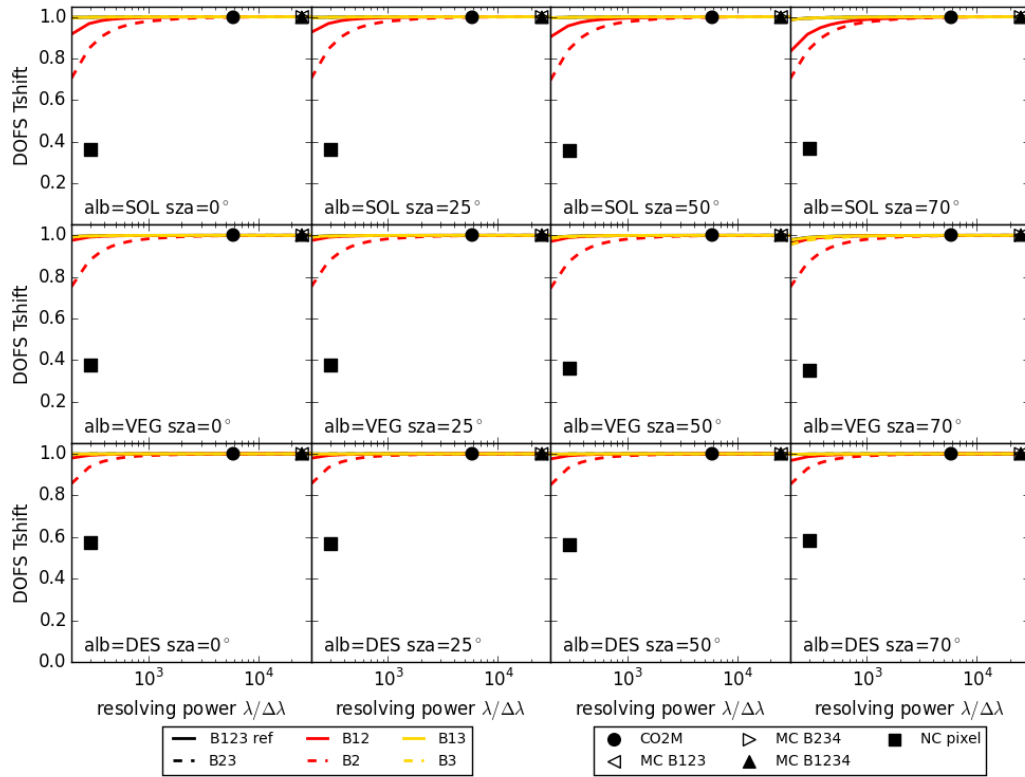


FIGURE E.9 – Degrés de liberté associés au décalage global du profil de température pour un instrument fictif CO₂M-var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l'O₂ (B1), et avec les deux bandes CO₂ faible et fort (**noir**), la bande seule bande CO₂ faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO₂ fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

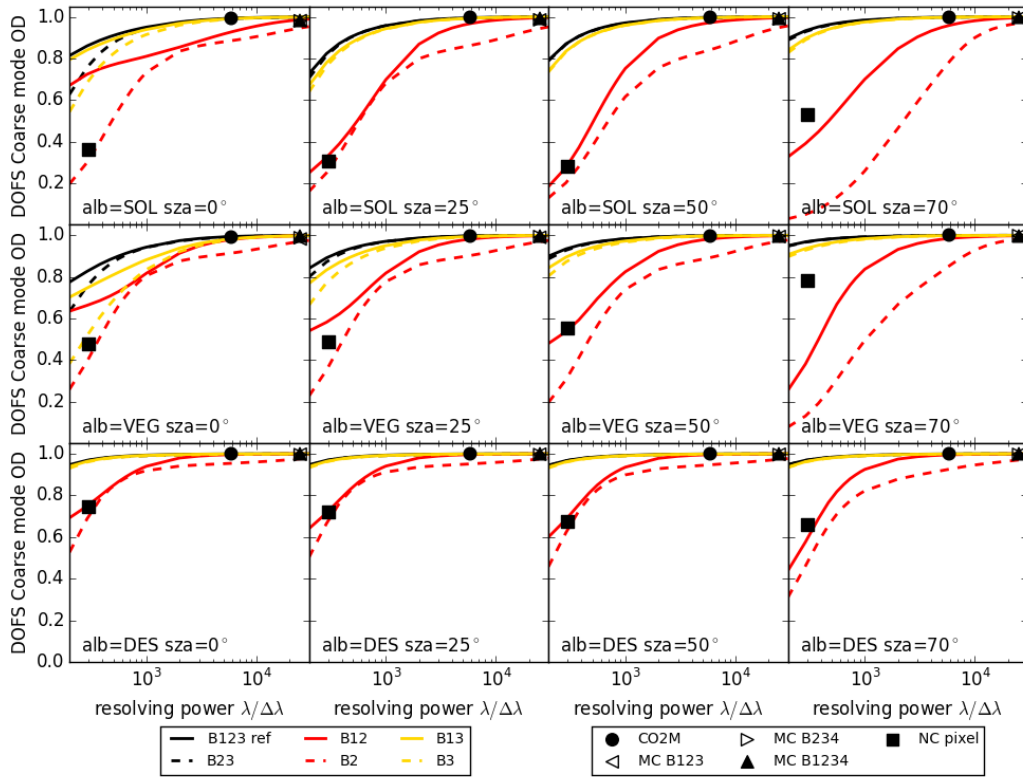


FIGURE E.10 – Degrés de liberté associés à l'épaisseur optique de la couche d'aérosols de mode grossier pour un instrument fictif CO₂M-var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l'O₂ (B1), et avec les deux bandes CO₂ faible et fort (**noir**), la bande seule bande CO₂ faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO₂ fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

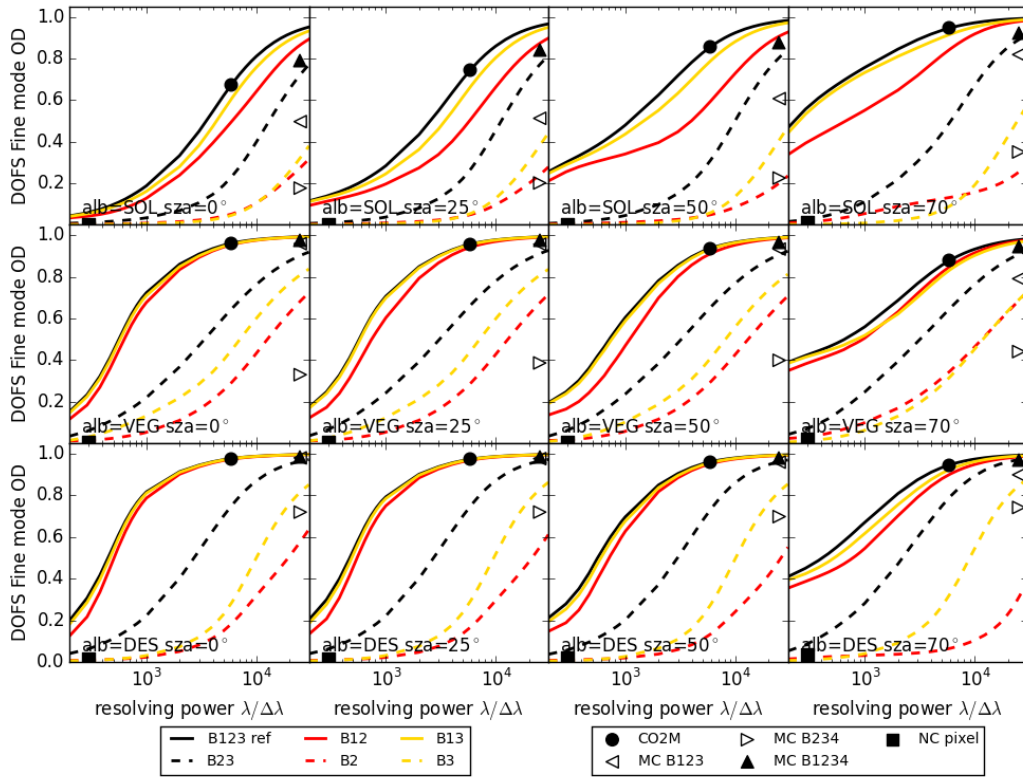


FIGURE E.11 – Degrés de liberté associés à l'épaisseur optique de la couche d'aérosols de mode fin pour un instrument fictif CO₂M-var dont le pouvoir de résolution varie entre $\lambda/\Delta\lambda = 200$ à $\lambda/\Delta\lambda = 30000$. Différentes configurations de bandes spectrales disponibles sont testées : avec (traits pleins) et sans (tirets) la bande A de l'O₂ (B1), et avec les deux bandes CO₂ faible et fort (**noir**), la bande seule bande CO₂ faible (**rouge**, B2) ou la seule bande CO₂ fort (**jaune**, B3). Les symboles donnent les résultats pour CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

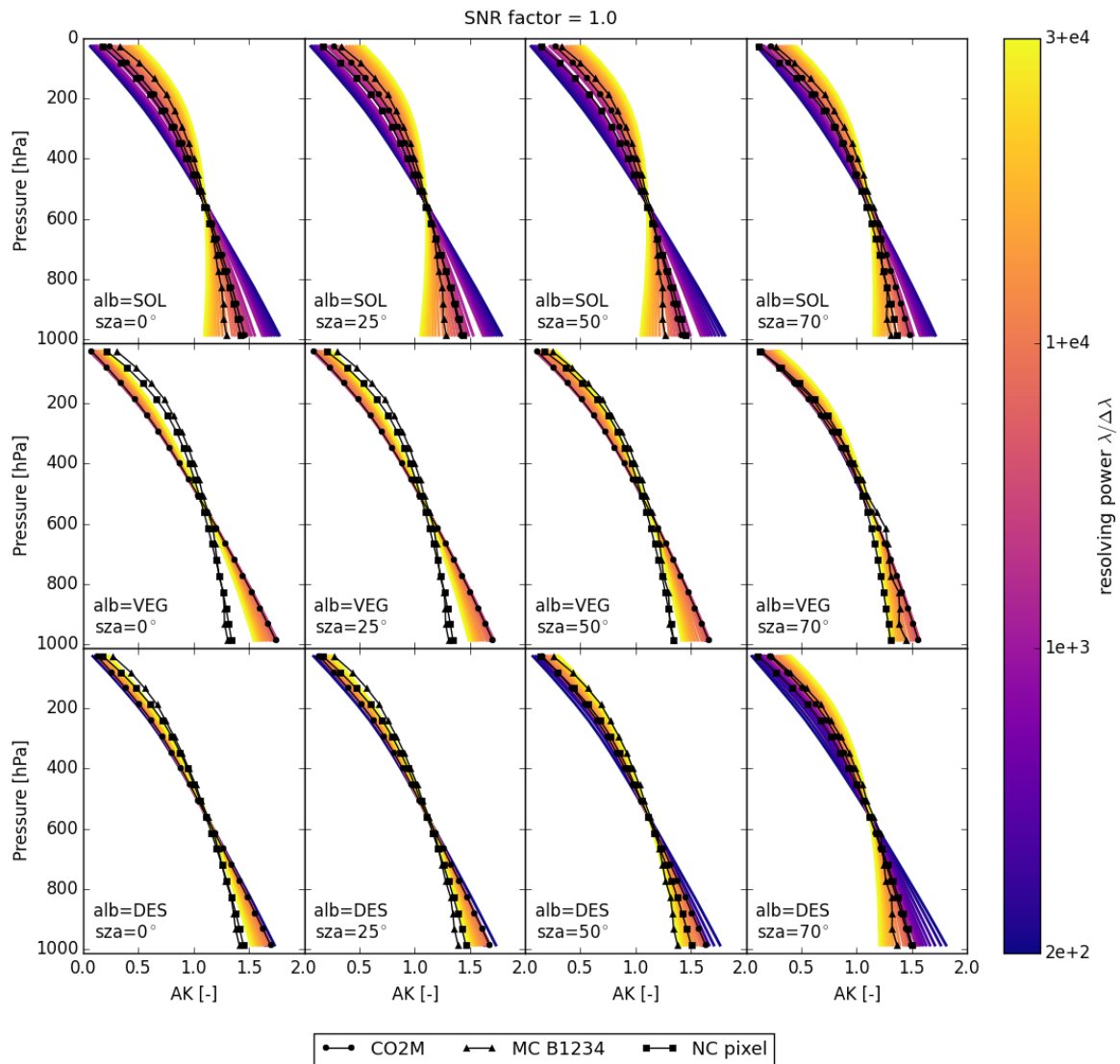


FIGURE E.12 – Sensibilités verticales (AKs) en fonction du pouvoir de résolution, pour un SNR égal au SNR de référence, données pour les 12 situations d’observation atmosphériques considérées dans le chapitre 5, pour une configuration d’inversion estimant un facteur multiplicatif du profil de concentration de CO_2 . Les lignes avec symboles donnent les sensibilités verticales de CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

Annexe F

Test de cohérence avec OCO-2 pour l'étude des sensibilités à la connaissance de la spectroscopie

On cherche ici à s'assurer que l'on peut reproduire de manière satisfaisante les résultats obtenus sur la scène MAGIC 2019 (voir partie 3.5.1) avec l'approche de propagation linéaire d'une erreur de modélisation dans la matrice de gain (voir équation 5.1).

Émulation d'OCO-2 On émule ici les observations d'OCO-2 pour la situation MAGIC 2019 avec $\text{alb} = \text{VEG}$ et $\text{SZA} = 25^\circ$, ainsi qu'avec les mêmes outils que ceux développés pour le calcul des performances de l'instrument fictif CO₂M-var : avec un bruit instrumental modélisé selon l'équation 5.3, et avec un pouvoir de résolution constant sur les trois bandes spectrales usuelles du proche infrarouge. Le vecteur d'état n'inclut pas les particules diffusantes pour émuler le travail fait dans la partie 3.5.1. Le tableau F.1 donne les caractéristiques utilisées pour l'émulation des observations OCO-2.

La figure F.1 donne **en noir**, pour l'évolution simultanée de la spectroscopie d'O₂ et de CO₂ testée dans les parties 3.5.1 et 5.5.4, la sensibilité $d\hat{x}^{\text{sp}} = G^{\text{old}} [y^{\text{new}} - y^{\text{old}}]$ de la pression de surface et des X_{CO_2} estimés à partir d'un concept semblable à celui d'OCO-2 décrit dans le tableau F.1, mais dont on fait varier le pouvoir de résolution $\lambda/\delta\lambda$. Les résultats obtenus pour l'émulation exacte d'OCO-2 à $\lambda/\delta\lambda = 20000$ sont signalés avec de gros cercles noirs : on a $dP_{\text{surf}} = +4.59$ hPa et $dX_{\text{CO}_2} = -0.24$ ppm. Le tableau F.2 compare ces résultats avec ceux obtenus sur les données de MAGIC 2019 ainsi qu'en utilisant G^{new} au lieu de G^{old} . On constate d'une part que les résultats obtenus que l'on utilise G^{new} ou G^{old} sont assez proches pour supposer que $G = G^{\text{new}} = G^{\text{old}}$ comme dans la partie 5.5.1. Bien que le signe soit naturellement l'opposé de ce que l'on trouve pour MAGIC 2019 (voir partie 5.5.1), les résultats obtenus par l'émulation sont relativement proche (en valeur et ordre de grandeur) de ceux obtenus pour la situation MAGIC. On en déduit que la propagation d'une erreur de modélisation dans la matrice de gain fournira pour la section 5.5 des résultats relativement réalistes.

Bande	1 (O ₂ A-band)	2 (CO ₂ faible)	3 (CO ₂ fort)	Commentaires
Intervalle nombre d'onde (cm^{-1})	12958 – 13170	6167 – 6274	4804 – 4883	-
Pouvoir de résolution	~ 20000	~ 20000	~ 20000	-
Facteur d'échantillonnage spectral	3	3	3	-
Luminance de référence ($W/m^2 \text{ strd } cm^{-1}$)	9.66×10^{-4}	6.81×10^{-4}	7.30×10^{-4}	à défaut d'information, supposées identiques à celles de CO ₂ M
SNR de référence	500	500	300	valeur grossière, évaluée sur une des observations OCO-2 de la situation MAGIC 2019

TABLE F.1 – Émulation des observations OCO-2 pour la scène MAGIC 2019.

La figure F.1 montre également comment se modifie la dépendance en $\lambda/\Delta\lambda$ lorsqu'on modifie les éléments du tableau F.1 pour nous rapprocher de CO₂M et du concept fictif CO₂M-var. On a :

- **En bleu** : les bandes spectrales ont des intervalles de définition identiques à ceux de CO₂M, voir tableau 5.2.
- **En violet** : les bandes spectrales ont des intervalles de définition et des SNR identiques à ceux de CO₂M, voir tableau 5.2. On retrouve ici en **violet** les mêmes courbes que sur les figures 5.18 et G.3.
- **En rouge** : les bandes spectrales ont des intervalles de définition et des SNR identiques à ceux de CO₂M, voir tableau 5.2. Les épaisseurs optiques des deux couches d'aérosols sont également ajoutées dans la construction du vecteur d'état utilisé pour l'étude de sensibilité. Les sensibilités de la pression de surface dénotent fortement des précédentes et on constate que la propagation linéaire $G^{\text{old}} dy^{\text{sp}}$ prescrit dans ce cas des épaisseurs optiques négatives pour les couches d'aérosols (non montré). Ainsi, pour rester dans la configuration où le problème d'évaluation des sensibilités à la méconnaissance de la spectroscopie reste linéaire, et donc comparable au travail réalisé sur la situation MAGIC 2019 dans la partie 3.5.1, **on choisit de ne pas inclure les épaisseurs optiques des deux couches d'aérosols dans la construction du vecteur d'état pour le travail de la section 5.5.**

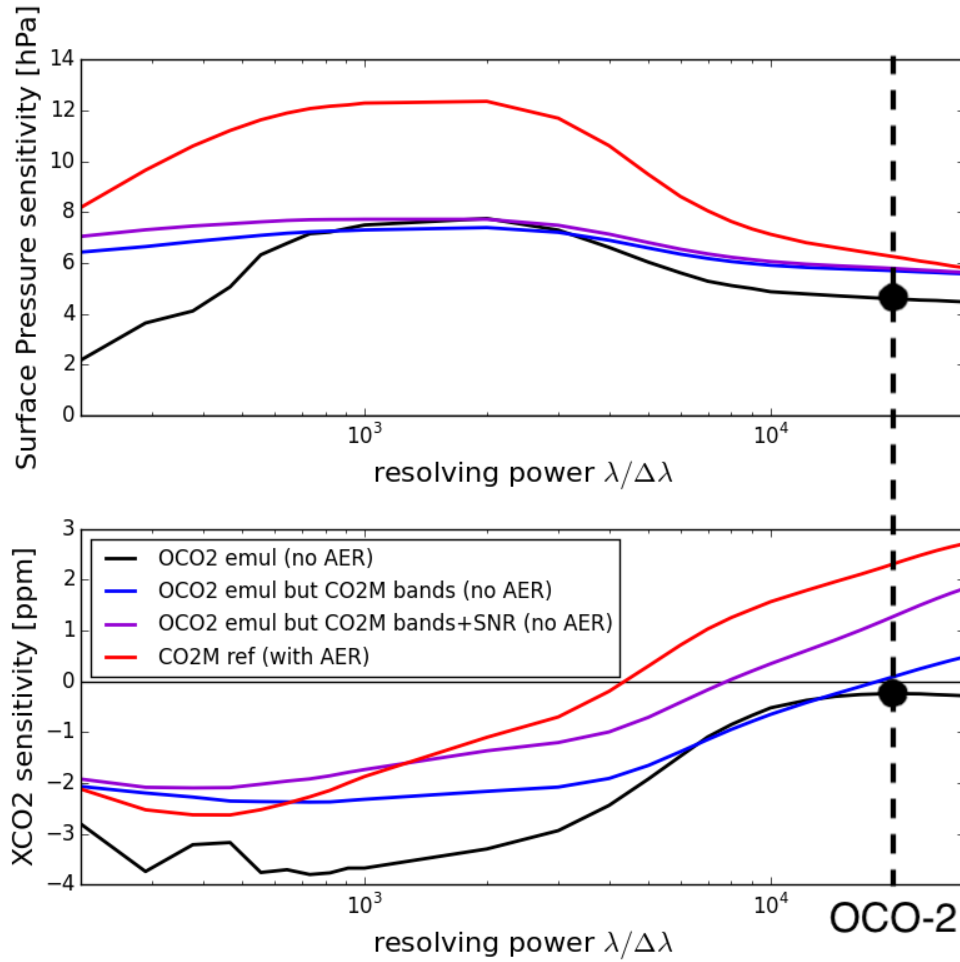


FIGURE F.1 – Sensibilités de la pression de surface (haut) et du X_{CO_2} (bas) estimés pour différents concepts instrumentaux dont on a fait varier le pouvoir de résolution.

	$d\hat{x}^{\text{sp}} = G^{\text{old}} dy^{\text{sp}}$	$d\hat{x}^{\text{sp}} = G^{\text{new}} dy^{\text{sp}}$	MAGIC 2019
dP _{surf}	+4.59 hPa	+4.68 hPa	-3.97 hPa
dX _{CO₂}	-0.24 ppm	-0.28 ppm	+0.53 ppm

TABLE F.2 – Comparaison des sensibilités OCO-2 émulées et calculées pour la situation MAGIC 2019.

Annexe G

Sensibilités à la connaissance de la spectroscopie : figures pour la pression de surface

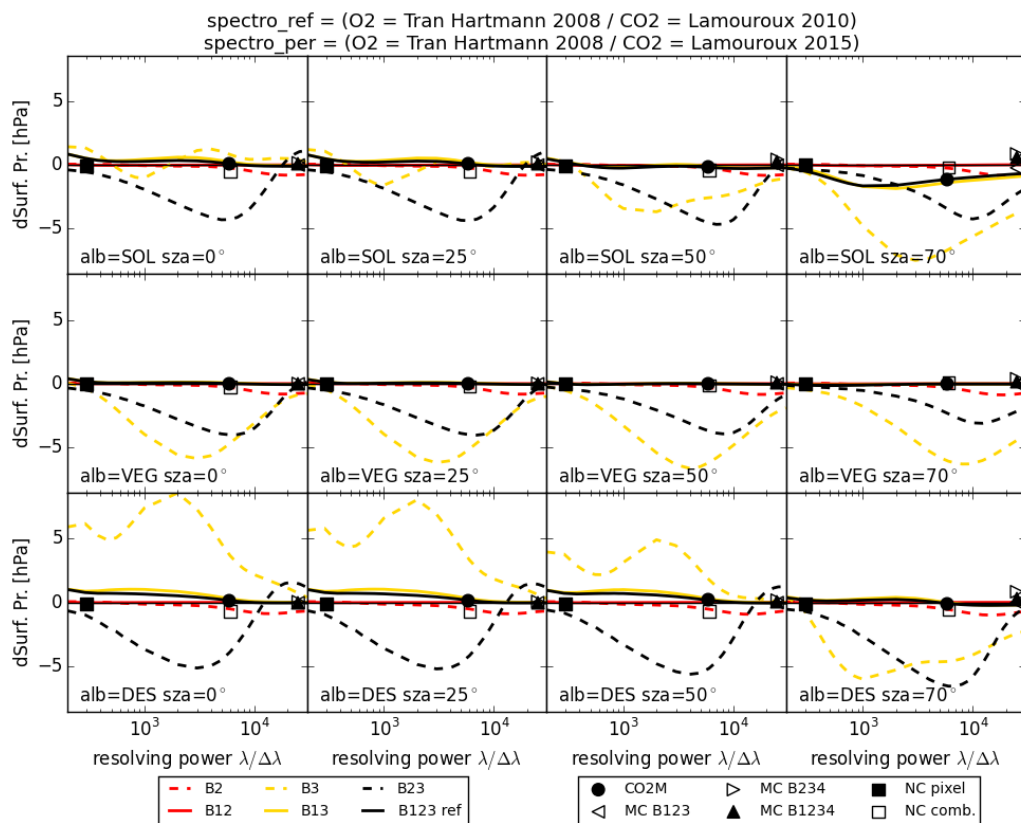


FIGURE G.1 – Sensibilités de l’estimation de la pression de surface à la méconnaissance de la spectroscopie du CO_2 en fonction du pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ et de différentes configurations de bandes spectrales disponibles, pour les 12 situations d’observations atmosphériques considérées dans ce chapitre. Les symboles donnent les résultats pour les concepts CO_2M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

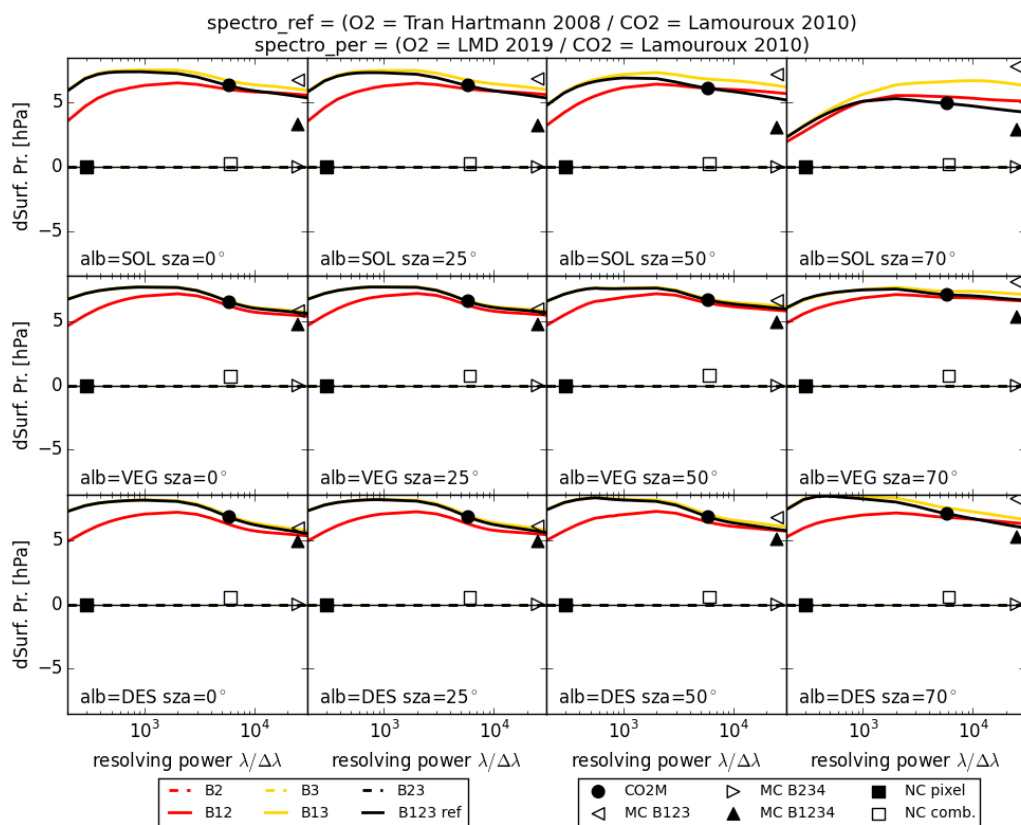


FIGURE G.2 – Sensibilités de l’estimation de la pression de surface à la méconnaissance de la spectroscopie de l’O₂ en fonction du pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ et de différentes configurations de bandes spectrales disponibles, pour les 12 situations d’observations atmosphériques considérées dans ce chapitre. Les symboles donnent les résultats pour les concepts CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

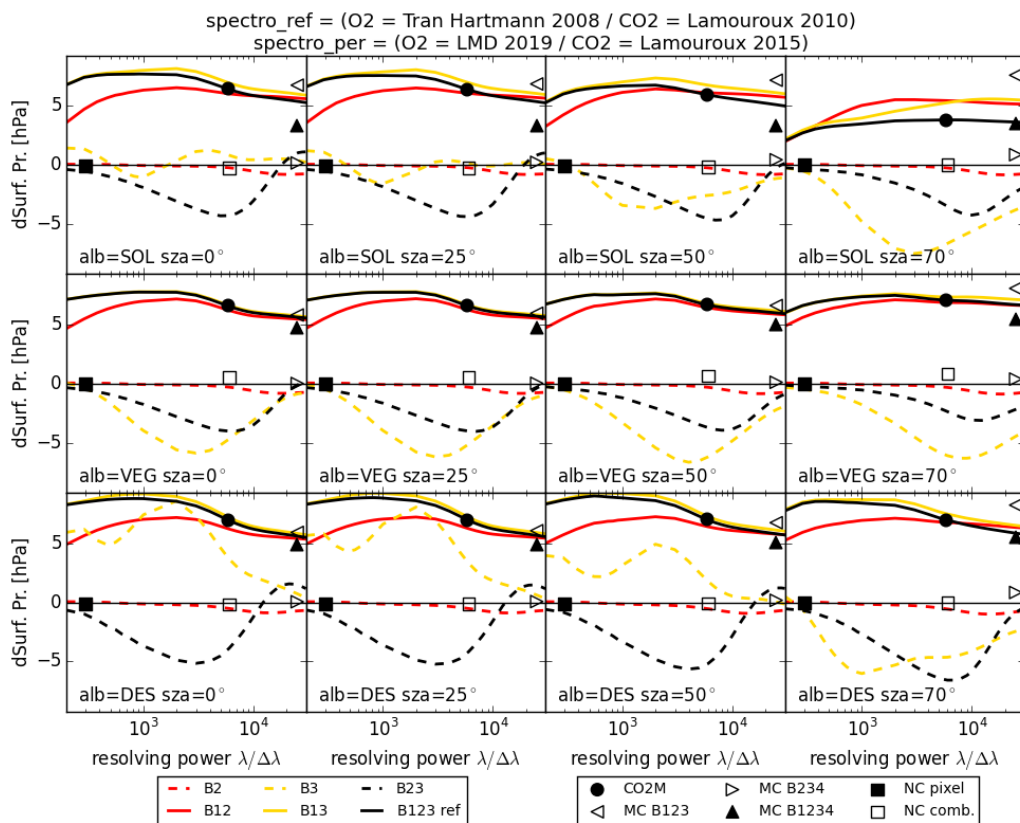


FIGURE G.3 – Sensibilités de l’estimation de la pression de surface à la méconnaissance de la spectroscopie de l’O₂ et du CO₂ en fonction du pouvoir de résolution $\lambda/\Delta\lambda$ et de différentes configurations de bandes spectrales disponibles, pour les 12 situations d’observations atmosphériques considérées dans ce chapitre. Les symboles donnent les résultats pour les concepts CO₂M (cercles), MicroCarb (triangles) et NanoCarb (carrés).

Bibliographie

- Ackerman, S. A. and Frey, R. : MODIS Atmosphere L2 Cloud Mask Product (35_L2), NASA MODIS Adaptive Processing System, Goddard Space Flight Center, doi :http://dx.doi.org/10.5067/MODIS/MOD35_L2.006;http://dx.doi.org/10.5067/MODIS/MYD35_L2.006, 2015.
- ACOS : Orbiting Carbon Observatory-2 & 3 - Level 2 Full Physics Retrieval Algorithm Theoretical Basis, Tech. rep., National Aeronautics and Space Administration (NASA), URL https://docserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OC0/OC0_L2_ATBD.pdf, 2021.
- Andrews, D. G. : An Introduction to Atmospheric Physics, Cambridge University Press, 2 edn., doi :10.1017/CBO9780511800788, 2010.
- Archer, D. : The Global Carbon Cycle, Princeton University Press, URL <http://www.jstor.org/stable/j.ctvc4m4hx8>, 2010.
- Armante, R., Scott, N., Crevoisier, C., Capelle, V., Crepeau, L., Jacquinet, N., and Chédin, A. : Evaluation of spectroscopic databases through radiative transfer simulations compared to observations. Application to the validation of GEISA 2015 with IASI and TCCON, Journal of Molecular Spectroscopy, 327, 180 – 192, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jms.2016.04.004>, URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002228521630056X>, new Visions of Spectroscopic Databases, Volume II, 2016.
- Bacour, C. : A SURFACE REFLECTANCE DATABASE FOR ESA'S EARTH OBSERVATION MISSIONS (ADAM), NOV-FE-0724-NT-006 v2.1, Tech. rep., NOVELTIS, URL https://adam.noveltis.fr/?next=/pdfs/NOV-FE-0724-NT-006_v2.1.pdf, 2019.
- Bacour, C., Bréon, F.-M., Gonzalez, L., Price, I., Muller, J.-P., and Straume, A. G. : Simulating Multi-Directional Narrowband Reflectance of the Earth's Surface Using ADAM (A Surface Reflectance Database for ESA's Earth Observation Missions), Remote Sensing, 12, doi :10.3390/rs12101679, URL <https://www.mdpi.com/2072-4292/12/10/1679>, 2020.
- Baker, D. F., Law, R. M., Gurney, K. R., Rayner, P., Peylin, P., Denning, A. S., Bousquet, P., Bruhwiler, L., Chen, Y.-H., Ciais, P., Fung, I. Y., Heimann, M., John, J., Maki, T., Maksyutov, S., Masarie, K., Prather, M., Pak, B., Taguchi, S., and Zhu, Z. : TransCom

- 3 inversion intercomparison : Impact of transport model errors on the interannual variability of regional CO₂ fluxes, 1988–2003, *Global Biogeochemical Cycles*, 20, doi :<https://doi.org/10.1029/2004GB002439>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2004GB002439>, 2006.
- Baldridge, A., Hook, S., Grove, C., and Rivera, G. : The ASTER spectral library version 2.0, *Remote Sensing of Environment*, 113, 711–715, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2008.11.007>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425708003441>, 2009.
- Balsamo, G., Engelen, R., Thiemert, D., Agustí-Panareda, A., Bousserez, N., Broquet, G., Brunner, D., Buchwitz, M., Chevallier, F., Choulga, M., Denier Van Der Gon, H., Florentie, L., Haussaire, J.-M., Janssens-Maenhout, G., Jones, M. W., Kaminski, T., Krol, M., Le Quéré, C., Marshall, J., McNorton, J., Prunet, P., Reuter, M., Peters, W., and Scholze, M. : The CO₂ Human Emissions (CHE) Project : First Steps Towards a European Operational Capacity to Monitor Anthropogenic CO₂ Emissions, *Frontiers in Remote Sensing*, 2, 32, doi :10.3389/frsen.2021.707247, URL <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/frsen.2021.707247>, 2021.
- Basu, S., Guerlet, S., Butz, A., Houweling, S., Hasekamp, O., Aben, I., Krummel, P., Steele, P., Langenfelds, R., Torn, M., Biraud, S., Stephens, B., Andrews, A., and Worthy, D. : Global CO₂ fluxes estimated from GOSAT retrievals of total column CO₂, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13, 8695–8717, doi :10.5194/acp-13-8695-2013, URL <https://acp.copernicus.org/articles/13/8695/2013/>, 2013.
- Basu, S., Baker, D. F., Chevallier, F., Patra, P. K., Liu, J., and Miller, J. B. : The impact of transport model differences on CO₂ surface flux estimates from OCO-2 retrievals of column average CO₂, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18, 7189–7215, doi :10.5194/acp-18-7189-2018, URL <https://acp.copernicus.org/articles/18/7189/2018/>, 2018.
- Bergamaschi, P., Frankenberg, C., Meirink, J. F., Krol, M., Villani, M. G., Houweling, S., Dentener, F., Dlugokencky, E. J., Miller, J. B., Gatti, L. V., Engel, A., and Levin, I. : Inverse modeling of global and regional CH₄ emissions using SCIAMACHY satellite retrievals, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 114, doi :<https://doi.org/10.1029/2009JD012287>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JD012287>, 2009.
- Berner, R. A. : The long-term carbon cycle, fossil fuels and atmospheric composition, *Nature*, 426, 323–326, doi :10.1038/nature02131, URL <https://doi.org/10.1038/nature02131>, 2003.
- Bertaux, J.-L., Hauchecorne, A., Lefèvre, F., Bréon, F.-M., Blanot, L., Jougllet, D., Lafrrique, P., and Akaev, P. : The use of the 1.27 μm O₂ absorption band for greenhouse gas

- monitoring from space and application to MicroCarb, *Atmospheric Measurement Techniques*, 13, 3329–3374, doi :10.5194/amt-13-3329-2020, URL <https://amt.copernicus.org/articles/13/3329/2020/>, 2020.
- Blumenstock, T., Hase, F., Schneider, M., García, O. E., and Sepúlveda, E. : TCCON data from Izana (ES), Release GGG2014.R1, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.IZANA01.R1, URL <https://data.caltech.edu/records/302>, 2017.
- Boesch, H., Toon, G. C., Sen, B., Washenfelder, R. A., Wennberg, P. O., Buchwitz, M., de Beek, R., Burrows, J. P., Crisp, D., Christi, M., Connor, B. J., Natraj, V., and Yung, Y. L. : Space-based near-infrared CO₂ measurements : Testing the Orbiting Carbon Observatory retrieval algorithm and validation concept using SCIAMACHY observations over Park Falls, Wisconsin, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 111, doi :10.1029/2006JD007080, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JD007080>, 2006.
- Boesch, H., Baker, D., Connor, B., Crisp, D., and Miller, C. : Global Characterization of CO₂ Column Retrievals from Shortwave-Infrared Satellite Observations of the Orbiting Carbon Observatory-2 Mission, *Remote Sensing*, 3, 270–304, doi :10.3390/rs3020270, URL <http://dx.doi.org/10.3390/rs3020270>, 2011.
- Borchardt, J., Gerilowski, K., Krautwurst, S., Bovensmann, H., Thorpe, A. K., Thompson, D. R., Frankenberg, C., Miller, C. E., Duren, R. M., and Burrows, J. P. : Detection and quantification of CH₄ plumes using the WFM-DOAS retrieval on AVIRIS-NG hyperspectral data, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 1267–1291, doi :10.5194/amt-14-1267-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/1267/2021/>, 2021.
- Bovensmann, H., Burrows, J. P., Buchwitz, M., Frerick, J., Noël, S., Rozanov, V. V., Chance, K. V., and Goede, A. P. H. : SCIAMACHY : Mission Objectives and Measurement Modes, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 56, 127–150, doi :10.1175/1520-0469(1999)056<0127:SMOAMM>2.0.CO;2, URL [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1999\)056<0127:SMOAMM>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1999)056<0127:SMOAMM>2.0.CO;2), 1999.
- Bovensmann, H., Buchwitz, M., Burrows, J. P., Reuter, M., Krings, T., Gerilowski, K., Schneising, O., Heymann, J., Tretner, A., and Erzinger, J. : A remote sensing technique for global monitoring of power plant CO₂ emissions from space and related applications, *Atmospheric Measurement Techniques*, 3, 781–811, doi :10.5194/amt-3-781-2010, URL <https://amt.copernicus.org/articles/3/781/2010/>, 2010.
- Bréon, F. M., Broquet, G., Puygrenier, V., Chevallier, F., Xueref-Remy, I., Ramonet, M., Dieudonné, E., Lopez, M., Schmidt, M., Perrussel, O., and Ciais, P. : An attempt at estimating Paris area CO₂ emissions from atmospheric concentration measurements, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 15, 1707–1724, doi :10.5194/acp-15-1707-2015, URL <https://acp.copernicus.org/articles/15/1707/2015/>, 2015.

- Brooker, L., Bovensmann, H., Crevoisier, C., Croizé, L., Le Coarer, E., Klonecki, A., Pica, U., Van Amerongen, A., and the SCARBO consortium : CONSTELLATION OF SMALL SATELLITES FOR THE MONITORING OF GREENHOUSE GASES, in : International Astronautical Federation (IAF), pp. IAC-18-B1.2.6, 69th International Astronautical Congress (IAC), 2018.
- Broquet, G., Chevallier, F., Bréon, F.-M., Kadygrov, N., Alemanno, M., Apadula, F., Hammer, S., Haszpra, L., Meinhardt, F., Morguí, J. A., Necki, J., Piacentino, S., Ramonet, M., Schmidt, M., Thompson, R. L., Vermeulen, A. T., Yver, C., and Ciais, P. : Regional inversion of CO₂ ecosystem fluxes from atmospheric measurements : reliability of the uncertainty estimates, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13, 9039–9056, doi :10.5194/acp-13-9039-2013, URL <https://acp.copernicus.org/articles/13/9039/2013/>, 2013.
- Broquet, G., Bréon, F.-M., Renault, E., Buchwitz, M., Reuter, M., Bovensmann, H., Chevallier, F., Wu, L., and Ciais, P. : The potential of satellite spectro-imagery for monitoring CO₂ emissions from large cities, *Atmospheric Measurement Techniques*, 11, 681–708, doi :10.5194/amt-11-681-2018, URL <https://amt.copernicus.org/articles/11/681/2018/>, 2018.
- Buchwitz, M., Rozanov, V. V., and Burrows, J. P. : A near-infrared optimized DOAS method for the fast global retrieval of atmospheric CH₄, CO, CO₂, H₂O, and N₂O total column amounts from SCIAMACHY Envisat-1 nadir radiances, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 105, 15 231–15 245, doi :<https://doi.org/10.1029/2000JD900191>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2000JD900191>, 2000.
- Buchwitz, M., de Beek, R., Burrows, J. P., Bovensmann, H., Warneke, T., Notholt, J., Meirink, J. F., Goede, A. P. H., Bergamaschi, P., Körner, S., Heimann, M., and Schulz, A. : Atmospheric methane and carbon dioxide from SCIAMACHY satellite data : initial comparison with chemistry and transport models, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 941–962, doi :10.5194/acp-5-941-2005, URL <https://www.atmos-chem-phys.net/5/941/2005/>, 2005.
- Buchwitz, M., Reuter, M., Bovensmann, H., Pillai, D., Heymann, J., Schneising, O., Rozanov, V., Krings, T., Burrows, J. P., Boesch, H., Gerbig, C., Meijer, Y., and Löscher, A. : Carbon Monitoring Satellite (CarbonSat) : assessment of atmospheric CO₂ and CH₄ retrieval errors by error parameterization, *Atmospheric Measurement Techniques*, 6, 3477–3500, doi :10.5194/amt-6-3477-2013, URL <https://amt.copernicus.org/articles/6/3477/2013/>, 2013.
- Butz, A., Guerlet, S., Hasekamp, O., Schepers, D., Galli, A., Aben, I., Frankenberg, C., Hartmann, J.-M., Tran, H., Kuze, A., Keppel-Aleks, G., Toon, G., Wunch, D., Wennberg, P., Deutscher, N., Griffith, D., Macatangay, R., Messerschmidt, J., Notholt, J., and

- Warneke, T. : Toward accurate CO₂ and CH₄ observations from GOSAT, *Geophysical Research Letters*, 38, doi :10.1029/2011GL047888, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2011GL047888>, 2011.
- Chahine, M., Barnet, C., Olsen, E. T., 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, doi :<https://doi.org/10.1029/2005GL024165>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2005GL024165>, 2005.
- Chandrasekhar, S. : *Radiative Transfer*, Oxford University Press, 1950.
- Chevallier, F. : Validation report for the CO₂ fluxes estimated by atmospheric inversion, v20r1 Version 1.0, Tech. rep., Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS), URL https://atmosphere.copernicus.eu/sites/default/files/2020-12/CAMS73_2018SC2_D73.1.4.1-2019-v4_202011_v1.pdf, 2020.
- Chevallier, F., Fisher, M., Peylin, P., Serrar, S., Bousquet, P., Bréon, F.-M., Chédin, A., and Ciais, P. : Inferring CO₂ sources and sinks from satellite observations : Method and application to TOVS data, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 110, doi : <https://doi.org/10.1029/2005JD006390>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2005JD006390>, 2005.
- Chevallier, F., Bréon, F.-M., and Rayner, P. J. : Contribution of the Orbiting Carbon Observatory to the estimation of CO₂ sources and sinks : Theoretical study in a variational data assimilation framework, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 112, doi :10.1029/2006JD007375, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JD007375>, 2007.
- Chevallier, F., Palmer, P. I., Feng, L., Boesch, H., O'Dell, C. W., and Bousquet, P. : Toward robust and consistent regional CO₂ flux estimates from in situ and spaceborne measurements of atmospheric CO₂, *Geophysical Research Letters*, 41, 1065–1070, doi : <https://doi.org/10.1002/2013GL058772>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2013GL058772>, 2014.
- Chevallier, F., Remaud, M., O'Dell, C. W., Baker, D., Peylin, P., and Cozic, A. : Objective evaluation of surface- and satellite-driven carbon dioxide atmospheric inversions, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19, 14 233–14 251, doi :10.5194/acp-19-14233-2019, URL <https://acp.copernicus.org/articles/19/14233/2019/>, 2019.
- Chevallier, F., Zheng, B., Broquet, G., Ciais, P., Liu, Z., Davis, S. J., Deng, Z., Wang, Y., Bréon, F.-M., and O'Dell, C. W. : Local Anomalies in the Column-Averaged Dry Air Mole Fractions of Carbon Dioxide Across the Globe During the First Months of the Coronavirus Recession, *Geophysical Research Letters*, 47, e2020GL090244, doi : <https://doi.org/10.1029/2020GL090244>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2020GL090244>, e2020GL090244 2020GL090244, 2020.

- Chédin, A., Scott, N. A., Wahiche, C., and Moulinier, P. : The Improved Initialization Inversion Method : A High Resolution Physical Method for Temperature Retrievals from Satellites of the TIROS-N Series, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 24, 128 – 143, doi :10.1175/1520-0450(1985)024<0128:TIHIMA>2.0.CO;2, URL https://journals.ametsoc.org/view/journals/apme/24/2/1520-0450_1985_024_0128_tiiima_2_0_co_2.xml, 1985.
- Chédin, A., Serrar, S., Scott, N. A., Crevoisier, C., and Armante, R. : First global measurement of midtropospheric CO₂ from NOAA polar satellites : Tropical zone, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 108, doi :<https://doi.org/10.1029/2003JD003439>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2003JD003439>, 2003.
- Chéruy, F., Scott, N., Armante, R., Tournier, B., and Chedin, A. : Contribution to the development of radiative transfer models for high spectral resolution observations in the infrared, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 53, 597–611, doi :[https://doi.org/10.1016/0022-4073\(95\)00026-H](https://doi.org/10.1016/0022-4073(95)00026-H), URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002240739500026H>, 1995.
- Ciais, P., Rayner, P., Chevallier, F., Bousquet, P., Logan, M., Peylin, P., and Ramonet, M. : Atmospheric inversions for estimating CO₂ fluxes : methods and perspectives, *Climatic Change*, 103, 69–92, doi :10.1007/s10584-010-9909-3, URL <https://doi.org/10.1007/s10584-010-9909-3>, 2010.
- Ciais, P., Sabine, C., Bala, G., Bopp, L., Brovkin, V., Canadell, J., Chhabra, A., DeFries, R., Galloway, J., Heimann, M., Jones, C., Le Quéré, C., Myneni, R., Piao, S., and Thornton, P. : *Climate Change 2013 : The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, book section Carbon and Other Biogeochemical Cycles, p. 465–570, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, doi :10.1017/CBO9781107415324.015, URL www.climatechange2013.org, 2013.
- Ciais, P., Dolman, A. J., Bombelli, A., Duren, R., Peregón, A., Rayner, P. J., Miller, C., Gobron, N., Kinderman, G., Marland, G., Gruber, N., Chevallier, F., Andres, R. J., Balsamo, G., Bopp, L., Bréon, F.-M., Broquet, G., Dargaville, R., Battin, T. J., Borges, A., Bovensmann, H., Buchwitz, M., Butler, J., Canadell, J. G., Cook, R. B., DeFries, R., Engelen, R., Gurney, K. R., Heinze, C., Heimann, M., Held, A., Henry, M., Law, B., Luysaert, S., Miller, J., Moriyama, T., Moulin, C., Myneni, R. B., Nussli, C., Obersteiner, M., Ojima, D., Pan, Y., Paris, J.-D., Piao, S. L., Poulter, B., Plummer, S., Quegan, S., Raymond, P., Reichstein, M., Rivier, L., Sabine, C., Schimel, D., Tarasova, O., Valentini, R., Wang, R., van der Werf, G., Wickland, D., Williams, M., and Zehner, C. : Current systematic carbon-cycle observations and the need for implementing a policy-relevant carbon observing system, *Biogeosciences*, 11, 3547–3602, doi :10.5194/bg-11-3547-2014, URL <https://bg.copernicus.org/articles/11/3547/2014/>, 2014.

- Clough, S., Kneizys, F., and Davies, R. : Line shape and the water vapor continuum, *Atmospheric Research*, 23, 229–241, doi :[https://doi.org/10.1016/0169-8095\(89\)90020-3](https://doi.org/10.1016/0169-8095(89)90020-3), URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0169809589900203>, 1989.
- Cogan, A. J., Boesch, H., Parker, R. J., Feng, L., Palmer, P. I., Blavier, J.-F. L., Deutscher, N. M., Macatangay, R., Notholt, J., Roehl, C., Warneke, T., and Wunch, D. : Atmospheric carbon dioxide retrieved from the Greenhouse gases Observing SATellite (GOSAT) : Comparison with ground-based TCCON observations and GEOS-Chem model calculations, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 117, doi :10.1029/2012JD018087, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2012JD018087>, 2012.
- Cogliati, S., Sarti, F., Chiarantini, L., Cosi, M., Lorusso, R., Lopinto, E., Miglietta, F., Genesio, L., Guanter, L., Damm, A., Pérez-López, S., Scheffler, D., Tagliabue, G., Panigada, C., Rascher, U., Dowling, T., Giardino, C., and Colombo, R. : The PRISMA imaging spectroscopy mission : overview and first performance analysis, *Remote Sensing of Environment*, 262, 112 499, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112499>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425721002170>, 2021.
- Connor, B. J., Boesch, H., Toon, G., Sen, B., Miller, C., and Crisp, D. : Orbiting Carbon Observatory : Inverse method and prospective error analysis, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 113, doi :<https://doi.org/10.1029/2006JD008336>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JD008336>, 2008.
- Crevoisier, C., Heillette, S., Chédin, A., Serrar, S., Armante, R., and Scott, N. A. : Mid-tropospheric CO₂ concentration retrieval from AIRS observations in the tropics, *Geophysical Research Letters*, 31, doi :<https://doi.org/10.1029/2004GL020141>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2004GL020141>, 2004.
- Crevoisier, C., Chédin, A., Matsueda, H., Machida, T., Armante, R., and Scott, N. A. : First year of upper tropospheric integrated content of CO₂ from IASI hyperspectral infrared observations, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9, 4797–4810, doi :10.5194/acp-9-4797-2009, URL <https://www.atmos-chem-phys.net/9/4797/2009/>, 2009.
- Crevoisier, C., Sweeney, C., Gloor, M., Sarmiento, J. L., and Tans, P. P. : Regional US carbon sinks from three-dimensional atmospheric CO₂ sampling, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107, 18 348–18 353, doi :10.1073/pnas.0900062107, URL <https://www.pnas.org/content/107/43/18348>, 2010.
- Crevoisier, C., Clerbaux, C., Guidard, V., Phulpin, T., Armante, R., Barret, B., Camy-Peyret, C., Chaboureaud, J.-P., Coheur, P.-F., Crépeau, L., Dufour, G., Labonnote, L., Lavanant, L., Hadji-Lazarou, J., Herbin, H., Jacquinet-Husson, N., Payan, S., Péquignot, E., Pierangelo, C., Sellitto, P., and Stubenrauch, C. : Towards IASI-New Generation (IASI-NG) : impact of improved spectral resolution and radiometric noise on the retrieval of thermodynamic, chemistry and climate variables, *Atmospheric Measurement Techniques*,

7, 4367–4385, doi :10.5194/amt-7-4367-2014, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/7/4367/2014/>, 2014.

Crisp, D., Atlas, R., Breon, F.-M., Brown, L., Burrows, J., Ciais, P., Connor, B., Doney, S., Fung, I., Jacob, D., Miller, C., O'Brien, D., Pawson, S., Randerson, J., Rayner, P., Salawitch, R., Sander, S., Sen, B., Stephens, G., Tans, P., Toon, G., Wennberg, P., Wofsy, S., Yung, Y., Kuang, Z., Chudasama, B., Sprague, G., Weiss, B., Pollock, R., Kenyon, D., and Schroll, S. : The Orbiting Carbon Observatory (OCO) mission, *Advances in Space Research*, 34, 700–709, doi :<https://doi.org/10.1016/j.asr.2003.08.062>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0273117704003539>, trace Constituents in the Troposphere and Lower Stratosphere, 2004.

Crisp, D., Fisher, B. M., O'Dell, C., Frankenberg, C., Basilio, R., Bösch, H., Brown, L. R., Castano, R., Connor, B., Deutscher, N. M., Eldering, A., Griffith, D., Gunson, M., Kuze, A., Mandrake, L., McDuffie, J., Messerschmidt, J., Miller, C. E., Morino, I., Natraj, V., Notholt, J., O'Brien, D. M., Oyafuso, F., Polonsky, I., Robinson, J., Salawitch, R., Sherlock, V., Smyth, M., Suto, H., Taylor, T. E., Thompson, D. R., Wennberg, P. O., Wunch, D., and Yung, Y. L. : The ACOS CO₂ retrieval algorithm ; Part II : Global XCO₂ data characterization, *Atmospheric Measurement Techniques*, 5, 687–707, doi :10.5194/amt-5-687-2012, URL <https://amt.copernicus.org/articles/5/687/2012/>, 2012.

Crisp, D., Pollock, H. R., Rosenberg, R., Chapsky, L., Lee, R. A. M., Oyafuso, F. A., Frankenberg, C., O'Dell, C. W., Bruegge, C. J., Doran, G. B., Eldering, A., Fisher, B. M., Fu, D., Gunson, M. R., Mandrake, L., Osterman, G. B., Schwandner, F. M., Sun, K., Taylor, T. E., Wennberg, P. O., and Wunch, D. : The on-orbit performance of the Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) instrument and its radiometrically calibrated products, *Atmospheric Measurement Techniques*, 10, 59–81, doi :10.5194/amt-10-59-2017, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/10/59/2017/>, 2017.

Crowell, S., Baker, D., Schuh, A., Basu, S., Jacobson, A. R., Chevallier, F., Liu, J., Deng, F., Feng, L., McKain, K., Chatterjee, A., Miller, J. B., Stephens, B. B., Eldering, A., Crisp, D., Schimel, D., Nassar, R., O'Dell, C. W., Oda, T., Sweeney, C., Palmer, P. I., and Jones, D. B. A. : The 2015–2016 carbon cycle as seen from OCO-2 and the global in situ network, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19, 9797–9831, doi :10.5194/acp-19-9797-2019, URL <https://acp.copernicus.org/articles/19/9797/2019/>, 2019.

Cusworth, D. H., Duren, R. M., Thorpe, A. K., Tseng, E., Thompson, D., Guha, A., Newman, S., Foster, K. T., and Miller, C. E. : Using remote sensing to detect, validate, and quantify methane emissions from California solid waste operations, *Environmental Research Letters*, 15, 054 012, doi :10.1088/1748-9326/ab7b99, URL <https://doi.org/10.1088/1748-9326/ab7b99>, 2020.

Cusworth, D. H., Duren, R. M., Thorpe, A. K., Eastwood, M. L., Green, R. O., Dennison, P. E., Frankenberg, C., Heckler, J. W., Asner, G. P., and Miller, C. E. : Quantifying

- Global Power Plant Carbon Dioxide Emissions With Imaging Spectroscopy, *AGU Advances*, 2, e2020AV000350, doi :<https://doi.org/10.1029/2020AV000350>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2020AV000350>, e2020AV000350 2020AV000350, 2021a.
- Cusworth, D. H., Duren, R. M., Thorpe, A. K., Pandey, S., Maasackers, J. D., Aben, I., Jervis, D., Varon, D. J., Jacob, D. J., Randles, C. A., Gautam, R., Omara, M., Schade, G. W., Dennison, P. E., Frankenberg, C., Gordon, D., Lopinto, E., and Miller, C. E. : Multisatellite Imaging of a Gas Well Blowout Enables Quantification of Total Methane Emissions, *Geophysical Research Letters*, 48, e2020GL090864, doi :<https://doi.org/10.1029/2020GL090864>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2020GL090864>, e2020GL090864 2020GL090864, 2021b.
- Danielson, J. and Gesch, D. B. : Global multi-resolution terrain elevation data 2010 (GMTED2010), U.S. Geol. Surv., Open-File, 2011.
- David, L., Bréon, F.-M., and Chevallier, F. : XCO₂ estimates from the OCO-2 measurements using a neural network approach, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 117–132, doi :[10.5194/amt-14-117-2021](https://doi.org/10.5194/amt-14-117-2021), URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/117/2021/>, 2021.
- De Mazière, M., Sha, M. K., Desmet, F., Hermans, C., Scolas, F., Kumps, N., Metzger, J.-M., Dufлот, V., and Cammas, J.-P. : TCCON data from Réunion Island (RE), Release GGG2014.R1, doi :[10.14291/TCCON.GGG2014.REUNION01.R1](https://doi.org/10.14291/TCCON.GGG2014.REUNION01.R1), URL <https://data.caltech.edu/records/322>, 2017.
- Delahaye, T., Armante, R., Scott, N., Jacquinet-Husson, N., Chédin, A., Crépeau, L., Crevoisier, C., Douet, V., Perrin, A., Barbe, A., Boudon, V., Campargue, A., Couderc, L., Ebert, V., Flaud, J.-M., Gamache, R., Jacquemart, D., Jolly, A., Kwabia Tchana, F., Kyuberis, A., Li, G., Lyulin, O., Manceron, L., Mikhailenko, S., Moazzen-Ahmadi, N., Müller, H., Naumenko, O., Nikitin, A., Perevalov, V., Richard, C., Starikova, E., Tashkun, S., Tyuterev, V., Vander Auwera, J., Vispoel, B., Yachmenev, A., and Yurchenko, S. : The 2020 edition of the GEISA spectroscopic database, *Journal of Molecular Spectroscopy*, p. 111510, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jms.2021.111510>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022285221000928>, 2021.
- Deutscher, N. M., Notholt, J., Messerschmidt, J., Weinzierl, C., Warneke, T., Petri, C., and Grupe, P. : TCCON data from Bialystok (PL), Release GGG2014.R2, doi :[10.14291/TCCON.GGG2014.BIALYSTOK01.R2](https://doi.org/10.14291/TCCON.GGG2014.BIALYSTOK01.R2), URL <https://data.caltech.edu/records/1300>, 2019.
- Dlugokencky, E. and Tans, P. : Trends in Atmospheric Carbon Dioxide, Methane and Nitrous Oxide, Tech. rep., National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA), URL <https://gml.noaa.gov/ccgg/trends/>, 2021.

- Dogniaux, M., Crevoisier, C., Armante, R., Capelle, V., Delahaye, T., Cassé, V., De Mazière, M., Deutscher, N. M., Feist, D. G., Garcia, O. E., Griffith, D. W. T., Hase, F., Iraci, L. T., Kivi, R., Morino, I., Notholt, J., Pollard, D. F., Roehl, C. M., Shiomi, K., Strong, K., Té, Y., Velazco, V. A., and Warneke, T. : The Adaptable 4A Inversion (5AI) : description and first XCO₂ retrievals from Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) observations, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 4689–4706, doi :10.5194/amt-14-4689-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/4689/2021/>, 2021a.
- Dogniaux, M., Crevoisier, C., Gousset, S., Le Coarer, E., Ferrec, Y., Croizé, L., Wu, L., Hasekamp, O., Sic, B., and Brooker, L. : The Space CARBOn Observatory (SCARBO) concept : Assessment of X_{CO₂} and X_{CH₄} retrieval performance, *Atmospheric Measurement Techniques Discussions*, 2021, 1–38, doi :10.5194/amt-2021-224, URL <https://amt.copernicus.org/preprints/amt-2021-224/>, 2021b.
- Duren, M. and Team : Carbon Mapper : global tracking of methane and CO₂ point-sources, in : IWGGMS-17, URL https://cce-datasharing.gsfc.nasa.gov/files/conference_presentations/Talk_Duren_48_25.pdf, 2021.
- Duren, R. M. and Miller, C. E. : Measuring the carbon emissions of megacities, *Nature Climate Change*, 2, 560–562, doi :10.1038/nclimate1629, URL <https://doi.org/10.1038/nclimate1629>, 2012.
- Eck, T. F., Holben, B. N., Reid, J. S., Dubovik, O., Smirnov, A., O’Neill, N. T., Slutsker, I., and Kinne, S. : Wavelength dependence of the optical depth of biomass burning, urban, and desert dust aerosols, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 104, 31 333–31 349, doi :<https://doi.org/10.1029/1999JD900923>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/1999JD900923>, 1999.
- Ehret, G., Bousquet, P., Pierangelo, C., Alpers, M., Millet, B., Abshire, J., Bovensmann, H., Burrows, J., Chevallier, F., Ciais, P., and et al. : MERLIN : A French-German Space Lidar Mission Dedicated to Atmospheric Methane, *Remote Sensing*, 9, 1052, doi :10.3390/rs9101052, URL <http://dx.doi.org/10.3390/rs9101052>, 2017.
- El Kattar, M.-T., Auriol, F., and Herbin, H. : Instrumental characteristics and potential greenhouse gas measurement capabilities of the Compact High-Spectral-Resolution Infrared Spectrometer : CHRIS, *Atmospheric Measurement Techniques*, 13, 3769–3786, doi :10.5194/amt-13-3769-2020, URL <https://amt.copernicus.org/articles/13/3769/2020/>, 2020.
- Eldering, A., Taylor, T. E., O’Dell, C. W., and Pavlick, R. : The OCO-3 mission : measurement objectives and expected performance based on 1 year of simulated data, *Atmospheric Measurement Techniques*, 12, 2341–2370, doi :10.5194/amt-12-2341-2019, URL <https://amt.copernicus.org/articles/12/2341/2019/>, 2019.

- ESA : Report for Mission Selection : CarbonSat ESA SP-1330/1 (2 volume series), Tech. rep., European Space Agency (ESA), URL https://esamultimedia.esa.int/docs/EarthObservation/SP1330-1_CarbonSat.pdf, 2015.
- ESA : EnviSat (Environmental Satellite) - ESA Earth Observation Portal, URL <https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions/e/envisat#mission-status>, 2021a.
- ESA : GOSAT - ESA Earth Observation Portal, URL <https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions/g/gosat>, 2021b.
- ESA : OCO-2 - ESA Earth Observation Portal, URL <https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions/o/oco-2>, 2021c.
- Feist, D. G., Arnold, S. G., John, N., and Geibel, M. C. : TCCON data from Ascension Island (SH), Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.ASCENSION01.R0/1149285, URL <https://data.caltech.edu/records/210>, 2014.
- Feng, L., Palmer, P. I., Parker, R. J., Deutscher, N. M., Feist, D. G., Kivi, R., Morino, I., and Sussmann, R. : Estimates of European uptake of CO₂ inferred from GOSAT X_{CO₂} retrievals : sensitivity to measurement bias inside and outside Europe, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16, 1289–1302, doi :10.5194/acp-16-1289-2016, URL <https://acp.copernicus.org/articles/16/1289/2016/>, 2016.
- Ferrec, Y., Bonnery, G., Brooker, L., Croizé, L., Gousset, S., and Coarer, E. L. : NanoCarb part 1 : compact snapshot imaging interferometer for CO₂ monitoring from space, in : International Conference on Space Optics — ICSO 2018, edited by Sodnik, Z., Karafolas, N., and Cugny, B., vol. 11180, pp. 771 – 779, International Society for Optics and Photonics, SPIE, URL <https://doi.org/10.1117/12.2535992>, 2019.
- Flemming, J., Benedetti, A., Inness, A., Engelen, R. J., Jones, L., Huijnen, V., Remy, S., Parrington, M., Suttie, M., Bozzo, A., Peuch, V.-H., Akritidis, D., and Katragkou, E. : The CAMS interim Reanalysis of Carbon Monoxide, Ozone and Aerosol for 2003–2015, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 17, 1945–1983, doi :10.5194/acp-17-1945-2017, URL <https://acp.copernicus.org/articles/17/1945/2017/>, 2017.
- Foote, M. D., Dennison, P. E., Thorpe, A. K., Thompson, D. R., Jongaramrungruang, S., Frankenberg, C., and Joshi, S. C. : Fast and Accurate Retrieval of Methane Concentration From Imaging Spectrometer Data Using Sparsity Prior, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 58, 6480–6492, doi :10.1109/TGRS.2020.2976888, 2020.
- Forster, P., Ramaswamy, V., Artaxo, P., Berntsen, T., Betts, R., Fahey, D., Haywood, J., Lean, J., Lowe, D., Myhre, G., Nganga, J., Prinn, R., Raga, G., Schulz, M., and Van Dorland, R. : Climate Change 2007 : The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, book section Changes in Atmospheric Constituents and in Radiative Forcing, pp.

129–234, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, URL <https://www.ipcc.ch/>, 2007.

Fougnie, B., Chimot, J., Vázquez-Navarro, M., Marbach, T., and Bojkov, B. : Aerosol retrieval from space – how does geometry of acquisition impact our ability to characterize aerosol properties, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 256, 107304, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2020.107304>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407320305860>, 2020.

Frankenberg, C., Platt, U., and Wagner, T. : Iterative maximum a posteriori (IMAP)-DOAS for retrieval of strongly absorbing trace gases : Model studies for CH₄ and CO₂ retrieval from near infrared spectra of SCIAMACHY onboard ENVISAT, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 9–22, doi :[10.5194/acp-5-9-2005](https://doi.org/10.5194/acp-5-9-2005), URL <https://acp.copernicus.org/articles/5/9/2005/>, 2005.

Frankenberg, C., Fisher, J. B., Worden, J., Badgley, G., Saatchi, S. S., Lee, J.-E., Toon, G. C., Butz, A., Jung, M., Kuze, A., and Yokota, T. : New global observations of the terrestrial carbon cycle from GOSAT : Patterns of plant fluorescence with gross primary productivity, *Geophysical Research Letters*, 38, doi :<https://doi.org/10.1029/2011GL048738>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2011GL048738>, 2011.

Frankenberg, C., Kulawik, S. S., Wofsy, S. C., Chevallier, F., Daube, B., Kort, E. A., O'Dell, C., Olsen, E. T., and Osterman, G. : Using airborne HIAPER Pole-to-Pole Observations (HIPPO) to evaluate model and remote sensing estimates of atmospheric carbon dioxide, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16, 7867–7878, doi :[10.5194/acp-16-7867-2016](https://doi.org/10.5194/acp-16-7867-2016), URL <https://acp.copernicus.org/articles/16/7867/2016/>, 2016.

Frey, M., Hase, F., Blumenstock, T., Groß, J., Kiel, M., Mengistu Tsidu, G., Schäfer, K., Sha, M. K., and Orphal, J. : Calibration and instrumental line shape characterization of a set of portable FTIR spectrometers for detecting greenhouse gas emissions, *Atmospheric Measurement Techniques*, 8, 3047–3057, doi :[10.5194/amt-8-3047-2015](https://doi.org/10.5194/amt-8-3047-2015), URL <https://amt.copernicus.org/articles/8/3047/2015/>, 2015.

Frey, M., Sha, M. K., Hase, F., Kiel, M., Blumenstock, T., Harig, R., Surawicz, G., Deutscher, N. M., Shiomi, K., Franklin, J. E., Bösch, H., Chen, J., Grutter, M., Ohyama, H., Sun, Y., Butz, A., Mengistu Tsidu, G., Ene, D., Wunch, D., Cao, Z., Garcia, O., Ramonet, M., Vogel, F., and Orphal, J. : Building the COCCON : long-term stability and ensemble performance of the EM27/SUN Fourier transform spectrometer, *Atmospheric Measurement Techniques*, 12, 1513–1530, doi :[10.5194/amt-12-1513-2019](https://doi.org/10.5194/amt-12-1513-2019), URL <https://amt.copernicus.org/articles/12/1513/2019/>, 2019.

Frey, M. M., Hase, F., Blumenstock, T., Dubravica, D., Groß, J., Göttsche, F., Handjaba, M., Amadhila, P., Mushi, R., Morino, I., Shiomi, K., Sha, M. K., de Mazière, M., and Pollard, D. F. : Long-term column-averaged greenhouse gas observations using a

- COCCON spectrometer at the high-surface-albedo site in Gobabeb, Namibia, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 5887–5911, doi :10.5194/amt-14-5887-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/5887/2021/>, 2021.
- Friedlingstein, P. : Carbon cycle feedbacks and future climate change, *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 373, 20140 421, doi :10.1098/rsta.2014.0421, URL <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.2014.0421>, 2015.
- Friedlingstein, P., O’Sullivan, M., Jones, M. W., Andrew, R. M., Hauck, J., Olsen, A., Peters, G. P., Peters, W., Pongratz, J., Sitch, S., Le Quéré, C., Canadell, J. G., Ciais, P., Jackson, R. B., Alin, S., Aragão, L. E. O. C., Arneeth, A., Arora, V., Bates, N. R., Becker, M., Benoit-Cattin, A., Bittig, H. C., Bopp, L., Bultan, S., Chandra, N., Chevallier, F., Chini, L. P., Evans, W., Florentie, L., Forster, P. M., Gasser, T., Gehlen, M., Gilfillan, D., Gkritzalis, T., Gregor, L., Gruber, N., Harris, I., Hartung, K., Haverd, V., Houghton, R. A., Ilyina, T., Jain, A. K., Joetzjer, E., Kadono, K., Kato, E., Kitidis, V., Korsbakken, J. I., Landschützer, P., Lefèvre, N., Lenton, A., Lienert, S., Liu, Z., Lombardozzi, D., Marland, G., Metzl, N., Munro, D. R., Nabel, J. E. M. S., Nakaoka, S.-I., Niwa, Y., O’Brien, K., Ono, T., Palmer, P. I., Pierrot, D., Poulter, B., Resplandy, L., Robertson, E., Rödenbeck, C., Schwinger, J., Séférian, R., Skjelvan, I., Smith, A. J. P., Sutton, A. J., Tanhua, T., Tans, P. P., Tian, H., Tilbrook, B., van der Werf, G., Vuichard, N., Walker, A. P., Wanninkhof, R., Watson, A. J., Willis, D., Wiltshire, A. J., Yuan, W., Yue, X., and Zaehle, S. : Global Carbon Budget 2020, *Earth System Science Data*, 12, 3269–3340, doi :10.5194/essd-12-3269-2020, URL <https://essd.copernicus.org/articles/12/3269/2020/>, 2020.
- Friend, A. D., Arneeth, A., Kiang, N. Y., Lomas, M., Ogée, J., Rödenbeck, C., Running, S. W., Santaren, J.-D., Sitch, S., Viovy, N., Ian Woodward, F., and Zaehle, S. : FLUXNET and modelling the global carbon cycle, *Global Change Biology*, 13, 610–633, doi :<https://doi.org/10.1111/j.1365-2486.2006.01223.x>, URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1365-2486.2006.01223.x>, 2007.
- Frommhold, L. : *Collision-induced Absorption in Gases*, Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics, Cambridge University Press, doi :10.1017/CBO9780511524523, 1994.
- Fujinawa, T., Kuze, A., Suto, H., Shiomi, K., Kanaya, Y., Kawashima, T., Kataoka, F., Mori, S., Eskes, H., and Tanimoto, H. : First Concurrent Observations of NO₂ and CO₂ From Power Plant Plumes by Airborne Remote Sensing, *Geophysical Research Letters*, 48, e2021GL092685, doi :<https://doi.org/10.1029/2021GL092685>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2021GL092685>, e2021GL092685 2021GL092685, 2021.
- Galli, A., Guerlet, S., Butz, A., Aben, I., Suto, H., Kuze, A., Deutscher, N. M., Notholt, J., Wunch, D., Wennberg, P. O., Griffith, D. W. T., Hasekamp, O., and Landgraf, J. : The impact of spectral resolution on satellite retrieval accuracy of CO₂ and CH₄, *Atmospheric*

- Measurement Techniques, 7, 1105–1119, doi :10.5194/amt-7-1105-2014, URL <https://amt.copernicus.org/articles/7/1105/2014/>, 2014.
- Gerilowski, K., Tretner, A., Krings, T., Buchwitz, M., Bertagnolio, P. P., Belemezov, F., Erzinger, J., Burrows, J. P., and Bovensmann, H. : MAMAP – a new spectrometer system for column-averaged methane and carbon dioxide observations from aircraft : instrument description and performance analysis, Atmospheric Measurement Techniques, 4, 215–243, doi : 10.5194/amt-4-215-2011, URL <https://amt.copernicus.org/articles/4/215/2011/>, 2011.
- Giles, D. M., Sinyuk, A., Sorokin, M. G., Schafer, J. S., Smirnov, A., Slutsker, I., Eck, T. F., Holben, B. N., Lewis, J. R., Campbell, J. R., Welton, E. J., Korkin, S. V., and Lyapustin, A. I. : Advancements in the Aerosol Robotic Network (AERONET) Version 3 database – automated near-real-time quality control algorithm with improved cloud screening for Sun photometer aerosol optical depth (AOD) measurements, Atmospheric Measurement Techniques, 12, 169–209, doi :10.5194/amt-12-169-2019, URL <https://amt.copernicus.org/articles/12/169/2019/>, 2019.
- Gisi, M., Hase, F., Dohe, S., Blumenstock, T., Simon, A., and Keens, A. : XCO₂-measurements with a tabletop FTS using solar absorption spectroscopy, Atmospheric Measurement Techniques, 5, 2969–2980, doi :10.5194/amt-5-2969-2012, URL <https://amt.copernicus.org/articles/5/2969/2012/>, 2012.
- Gordon, I., Rothman, L., Hill, C., Kochanov, R., Tan, Y., Bernath, P., Birk, M., Boudon, V., Campargue, A., Chance, K., Drouin, B., Flaud, J.-M., Gamache, R., Hodges, J., Jacquemart, D., Perevalov, V., Perrin, A., Shine, K., Smith, M.-A., Tennyson, J., Toon, G., Tran, H., Tyuterev, V., Barbe, A., Császár, A., Devi, V., Furtenbacher, T., Harrison, J., Hartmann, J.-M., Jolly, A., Johnson, T., Karman, T., Kleiner, I., Kyuberis, A., Loos, J., Lyulin, O., Massie, S., Mikhailenko, S., Moazzen-Ahmadi, N., Müller, H., Naumenko, O., Nikitin, A., Polyansky, O., Rey, M., Rotger, M., Sharpe, S., Sung, K., Starikova, E., Tashkun, S., Auwera, J. V., Wagner, G., Wilzewski, J., Wcisło, P., Yu, S., and Zak, E. : The HITRAN2016 molecular spectroscopic database, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 203, 3–69, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2017.06.038>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407317301073>, HITRAN2016 Special Issue, 2017.
- Gousset, S., Croizé, L., Le Coarer, E., Ferrec, Y., Rodrigo-Rodrigo, J., Brooker, L., and the SCARBO consortium : NanoCarb hyperspectral sensor : on performance optimization and analysis for greenhouse gas monitoring from a constellation of small satellites, CEAS Space Journal, 11, 507–524, doi :10.1007/s12567-019-00273-9, URL <https://doi.org/10.1007/s12567-019-00273-9>, 2019.
- Griffith, D. W., Deutscher, N. M., Velazco, V. A., Wennberg, P. O., Yavin, Y., Keppel-Aleks, G., Washenfelder, R. A., Toon, G. C., Blavier, J.-F., Paton-Walsh, C., Jones,

- N. B., Kettlewell, G. C., Connor, B. J., Macatangay, R. C., Roehl, C., Ryzcek, M., Glowacki, J., Culgan, T., and Bryant, G. W. : TCCON data from Darwin (AU), Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.DARWIN01.R0/1149290, URL <https://data.caltech.edu/records/269>, 2014a.
- Griffith, D. W., Velazco, V. A., Deutscher, N. M., Paton-Walsh, C., Jones, N. B., Wilson, S. R., Macatangay, R. C., Kettlewell, G. C., Buchholz, R. R., and Riggensbach, M. O. : TCCON data from Wollongong (AU), Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.WOLLONGONG01.R0/1149291, URL <https://data.caltech.edu/records/291>, 2014b.
- Guanter, L., Irakulis-Loitxate, I., Gorroño, J., Sánchez-García, E., Cusworth, D. H., Varon, D. J., Cogliati, S., and Colombo, R. : Mapping methane point emissions with the PRISMA spaceborne imaging spectrometer, *Remote Sensing of Environment*, 265, 112 671, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112671>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425721003916>, 2021.
- Guerlet, S., Butz, A., Schepers, D., Basu, S., Hasekamp, O. P., Kuze, A., Yokota, T., Blavier, J.-F., Deutscher, N. M., Griffith, D. W., Hase, F., Kyro, E., Morino, I., Sherlock, V., Sussmann, R., Galli, A., and Aben, I. : Impact of aerosol and thin cirrus on retrieving and validating XCO₂ from GOSAT shortwave infrared measurements, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 118, 4887–4905, doi :<https://doi.org/10.1002/jgrd.50332>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jgrd.50332>, 2013.
- Hamazaki, T., Kaneko, Y., and Kuze, A. : Carbon dioxide monitoring from the GOSAT satellite, in : Proc. ISPRS, URL https://www.researchgate.net/profile/Akihiko-Kuze/publication/228789404_Carbon_dioxide_monitoring_from_the_GOSAT_satellite/links/00b49517b0c2d40b45000000/Carbon-dioxide-monitoring-from-the-GOSAT-satellite.pdf, 2004.
- Hamlin, L., Green, R. O., Mouroulis, P., Eastwood, M., Wilson, D., Dudik, M., and Paine, C. : Imaging spectrometer science measurements for Terrestrial Ecology : AVIRIS and new developments, in : 2011 Aerospace Conference, pp. 1–7, doi :10.1109/AERO.2011.5747395, 2011.
- Hartmann, D., Klein Tank, A., Rusticucci, M., Alexander, L., Bronnimann, S., Charabi, Y., Dentener, F., Dlugokencky, E., Easterling, D., Kaplan, A., Soden, B., Thorne, P., Wild, M., and Zhai, P. : Climate Change 2013 : The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, book section Observations : Atmosphere and Surface, p. 159–254, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, doi : 10.1017/CBO9781107415324.008, URL <https://www.ipcc.ch/>, 2013.
- Hartmann, J.-M., Boulet, C., and Robert, D. : Collisional effects on molecular spectra laboratory experiments and models, consequences for applications, Elsevier Science, Amsterdam ;, 1st ed. edn., 2008.

- Hartmann, J.-M., Tran, H., Armante, R., Boulet, C., Campargue, A., Forget, F., Gianfrani, L., Gordon, I., Guerlet, S., Gustafsson, M., Hodges, J. T., Kass, S., Lisak, D., Thibault, F., and Toon, G. C. : Recent advances in collisional effects on spectra of molecular gases and their practical consequences, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 213, 178–227, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2018.03.016>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407318300864>, 2018.
- Hase, F., Blumenstock, T., Dohe, S., Groß, J., and Kiel, M. : TCCON data from Karlsruhe (DE), Release GGG2014.R1, doi :[10.14291/TCCON.GGG2014.KARLSRUHE01.R1/1182416](https://doi.org/10.14291/TCCON.GGG2014.KARLSRUHE01.R1/1182416), URL <https://data.caltech.edu/records/278>, 2015.
- Hase, F., Frey, M., Kiel, M., Blumenstock, T., Harig, R., Keens, A., and Orphal, J. : Addition of a channel for XCO observations to a portable FTIR spectrometer for greenhouse gas measurements, *Atmospheric Measurement Techniques*, 9, 2303–2313, doi :[10.5194/amt-9-2303-2016](https://doi.org/10.5194/amt-9-2303-2016), URL <https://amt.copernicus.org/articles/9/2303/2016/>, 2016.
- Hasekamp, O. P., Fu, G., Rusli, S. P., Wu, L., Di Noia, A., aan de Brugh, J., Landgraf, J., Martijn Smit, J., Rietjens, J., and van Amerongen, A. : Aerosol measurements by SPEXone on the NASA PACE mission : expected retrieval capabilities, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 227, 170–184, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2019.02.006>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407318308653>, 2019.
- Hess, M., Koepke, P., and Schult, I. : Optical Properties of Aerosols and Clouds : The Software Package OPAC, *Bulletin of the American Meteorological Society*, 79, 831 – 844, doi :[10.1175/1520-0477\(1998\)079<0831:OPOAAC>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0477(1998)079<0831:OPOAAC>2.0.CO;2), URL https://journals.ametsoc.org/view/journals/bams/79/5/1520-0477_1998_079_0831_opoaac_2_0_co_2.xml, 1998.
- Holben, B., Eck, T., Slutsker, I., Tanré, D., Buis, J., Setzer, A., Vermote, E., Reagan, J., Kaufman, Y., Nakajima, T., Lavenu, F., Jankowiak, I., and Smirnov, A. : AERONET—A Federated Instrument Network and Data Archive for Aerosol Characterization, *Remote Sensing of Environment*, 66, 1–16, doi :[https://doi.org/10.1016/S0034-4257\(98\)00031-5](https://doi.org/10.1016/S0034-4257(98)00031-5), URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425798000315>, 1998.
- Houweling, S., Hartmann, W., Aben, I., Schrijver, H., Skidmore, J., Roelofs, G.-J., and Breon, F.-M. : Evidence of systematic errors in SCIAMACHY-observed CO₂ due to aerosols, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 3003–3013, doi :[10.5194/acp-5-3003-2005](https://doi.org/10.5194/acp-5-3003-2005), URL <https://acp.copernicus.org/articles/5/3003/2005/>, 2005.
- Houweling, S., Aben, I., Breon, F.-M., Chevallier, F., Deutscher, N., Engelen, R., Gerbig, C., Griffith, D., Hungershofer, K., Macatangay, R., Marshall, J., Notholt, J., Peters, W., and Serrar, S. : The importance of transport model uncertainties for the estimation of CO₂ sources and sinks using satellite measurements, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10, 9981–9992, doi :[10.5194/acp-10-9981-2010](https://doi.org/10.5194/acp-10-9981-2010), URL <https://acp.copernicus.org/articles/10/9981/2010/>, 2010.

- Houweling, S., Krol, M., Bergamaschi, P., Frankenberg, C., Dlugokencky, E. J., Morino, I., Notholt, J., Sherlock, V., Wunch, D., Beck, V., Gerbig, C., Chen, H., Kort, E. A., Röckmann, T., and Aben, I. : A multi-year methane inversion using SCIAMACHY, accounting for systematic errors using TCCON measurements, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14, 3991–4012, doi :10.5194/acp-14-3991-2014, URL <https://acp.copernicus.org/articles/14/3991/2014/>, 2014.
- Houweling, S., Baker, D., Basu, S., Boesch, H., Butz, A., Chevallier, F., Deng, F., Dlugokencky, E. J., Feng, L., Ganshin, A., Hasekamp, O., Jones, D., Maksyutov, S., Marshall, J., Oda, T., O'Dell, C. W., Oshchepkov, S., Palmer, P. I., Peylin, P., Poussi, Z., Reum, F., Takagi, H., Yoshida, Y., and Zhuravlev, R. : An intercomparison of inverse models for estimating sources and sinks of CO₂ using GOSAT measurements, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 120, 5253–5266, doi :<https://doi.org/10.1002/2014JD022962>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2014JD022962>, 2015.
- Inoue, M., Morino, I., Uchino, O., Nakatsuru, T., Yoshida, Y., Yokota, T., Wunch, D., Wennberg, P. O., Roehl, C. M., Griffith, D. W. T., Velazco, V. A., Deutscher, N. M., Warneke, T., Notholt, J., Robinson, J., Sherlock, V., Hase, F., Blumenstock, T., Rettinger, M., Sussmann, R., Kyrö, E., Kivi, R., Shiomi, K., Kawakami, S., De Mazière, M., Arnold, S. G., Feist, D. G., Barrow, E. A., Barney, J., Dubey, M., Schneider, M., Iraci, L. T., Podolske, J. R., Hillyard, P. W., Machida, T., Sawa, Y., Tsuboi, K., Matsueda, H., Sweeney, C., Tans, P. P., Andrews, A. E., Biraud, S. C., Fukuyama, Y., Pittman, J. V., Kort, E. A., and Tanaka, T. : Bias corrections of GOSAT SWIR XCO₂ and XCH₄ with TCCON data and their evaluation using aircraft measurement data, *Atmospheric Measurement Techniques*, 9, 3491–3512, doi :10.5194/amt-9-3491-2016, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/9/3491/2016/>, 2016.
- IPCC : Climate Change 2013 : The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, book section Summary for Policymakers, p. 1–30, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, doi :10.1017/CBO9781107415324.004, URL <https://www.ipcc.ch/>, 2013.
- IPCC : Climate Change 2014 : Impacts, Adaptation, and Vulnerability. Part A : Global and Sectoral Aspects. Contribution of Working Group II to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, book section Summary for Policymakers, pp. 1–32, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, URL <https://www.ipcc.ch/>, 2014.
- IPCC : Global Warming of 1.5°C. An IPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5°C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty, book section Summary for Policymakers, pp. 1–32, World Meteorological Organization (WMO), Geneva, Switzerland, URL <https://www.ipcc.ch/>, 2018.

- IPCC : Climate Change 2021 : The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, book section Summary for Policymakers, Cambridge University Press, URL <https://www.ipcc.ch/>, 2021.
- Iraci, L. T., Podolske, J. R., Hillyard, P. W., Roehl, C., Wennberg, P. O., Blavier, J.-F., Landeros, J., Allen, N., Wunch, D., Zavaleta, J., Quigley, E., Osterman, G. B., Albertson, R., Dunwoody, K., and Boyden, H. : TCCON data from Edwards (US), Release GGG2014.R1, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.EDWARDS01.R1/1255068, URL <https://data.caltech.edu/records/270>, 2016.
- Jacquinet-Husson, N., Armante, R., Scott, N., Chédin, A., Crépeau, L., Boutammine, C., Bouhdaoui, A., Crevoisier, C., Capelle, V., Boone, C., Poulet-Crovisier, N., Barbe, A., Benner, D. C., Boudon, V., Brown, L., Buldyreva, J., Campargue, A., Coudert, L., Devi, V., Down, M., Drouin, B., Fayt, A., Fittschen, C., Flaud, J.-M., Gamache, R., Harrison, J., Hill, C., Hodnebrog, O., Hu, S.-M., Jacquemart, D., Jolly, A., Jiménez, E., Lavrentieva, N., Liu, A.-W., Lodi, L., Lyulin, O., Massie, S., Mikhailenko, S., Müller, H., Naumenko, O., Nikitin, A., Nielsen, C., Orphal, J., Perevalov, V., Perrin, A., Polovtseva, E., Predoi-Cross, A., Rotger, M., Ruth, A., Yu, S., Sung, K., Tashkun, S., Tennyson, J., Tyuterev, V., Auwera, J. V., Voronin, B., and Makie, A. : The 2015 edition of the GEISA spectroscopic database, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 327, 31 – 72, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jms.2016.06.007>, URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022285216301011>, new Visions of Spectroscopic Databases, Volume II, 2016.
- Janardanan, R., Maksyutov, S., Oda, T., Saito, M., Kaiser, J. W., Ganshin, A., Stohl, A., Matsunaga, T., Yoshida, Y., and Yokota, T. : Comparing GOSAT observations of localized CO₂ enhancements by large emitters with inventory-based estimates, *Geophysical Research Letters*, 43, 3486–3493, doi :<https://doi.org/10.1002/2016GL067843>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2016GL067843>, 2016.
- Joly, L., Maamary, R., Decarpenterie, T., Cousin, J., Dumelié, N., Chauvin, N., Legain, D., Tzanos, D., and Durré, 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, doi :10.3390/s16101609, URL <https://www.mdpi.com/1424-8220/16/10/1609>, 2016.
- Joly, L., Coopmann, O., Guidard, V., Decarpenterie, T., Dumelié, N., Cousin, J., Burgalat, J., Chauvin, N., Albora, G., Maamary, R., Miftah El Khair, Z., Tzanos, D., Barrié, J., Moulin, E., Aressy, P., and Belleudy, A. : The development of the Atmospheric Measurements by Ultra-Light Spectrometer (AMULSE) greenhouse gas profiling system and application for satellite retrieval validation, *Atmospheric Measurement Techniques*, 13, 3099–3118, doi :10.5194/amt-13-3099-2020, URL <https://amt.copernicus.org/articles/13/3099/2020/>, 2020.

- Jougllet, D., Landiech, P., and Bréon, F.-M. : MicroCarb, first European program for CO₂ monitoring : nearing development conclusion before launch, in : IWGGMS-17, URL https://cce-datasharing.gsfc.nasa.gov/files/conference_presentations/Talk_Jougllet_35_25.pdf, 2021.
- Karion, A., Sweeney, C., Tans, P., and Newberger, T. : AirCore : An Innovative Atmospheric Sampling System, *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 27, 1839 – 1853, doi :10.1175/2010JTECHA1448.1, URL https://journals.ametsoc.org/view/journals/atot/27/11/2010jtecha1448_1.xml, 2010.
- Kataoka, F., Knuteson, R. O., Kuze, A., Suto, H., Shiomi, K., Harada, M., Garms, E. M., Roman, J. A., Tobin, D. C., Taylor, J. K., Revercomb, H. E., Sekio, N., Higuchi, R., and Mitomi, Y. : TIR Spectral Radiance Calibration of the GOSAT Satellite Borne TANSO-FTS With the Aircraft-Based S-HIS and the Ground-Based S-AERI at the Railroad Valley Desert Playa, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 52, 89–105, doi : 10.1109/TGRS.2012.2236561, 2014.
- Kataoka, F., Crisp, D., Taylor, T. E., O'Dell, C. W., Kuze, A., Shiomi, K., Suto, H., Bruegge, C., Schwandner, F. M., Rosenberg, R., Chapsky, L., and Lee, R. A. M. : The Cross-Calibration of Spectral Radiances and Cross-Validation of CO₂ Estimates from GOSAT and OCO-2, *Remote Sensing*, 9, doi :10.3390/rs9111158, URL <https://www.mdpi.com/2072-4292/9/11/1158>, 2017.
- Kawakami, S., Ohyama, H., Arai, K., Okumura, H., Taura, C., Fukamachi, T., and Sakashita, M. : TCCON data from Saga (JP), Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.SAGA01.R0/1149283, URL <https://data.caltech.edu/records/288>, 2014.
- Kiel, M., O'Dell, C. W., Fisher, B., Eldering, A., Nassar, R., MacDonald, C. G., and Wennberg, P. O. : How bias correction goes wrong : measurement of XCO₂ affected by erroneous surface pressure estimates, *Atmospheric Measurement Techniques*, 12, 2241–2259, doi : 10.5194/amt-12-2241-2019, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/12/2241/2019/>, 2019.
- Kiel, M., Eldering, A., Roten, D. D., Lin, J. C., Feng, S., Lei, R., Lauvaux, T., Oda, T., Roehl, C. M., Blavier, J.-F., and Iraci, L. T. : Urban-focused satellite CO₂ observations from the Orbiting Carbon Observatory-3 : A first look at the Los Angeles megacity, *Remote Sensing of Environment*, 258, 112314, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112314>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425721000328>, 2021.
- Kivi, R. and Heikkinen, P. : Fourier transform spectrometer measurements of column CO₂ at Sodankylä, Finland, *Geoscientific Instrumentation, Methods and Data Systems*, 5, 271–279, doi :10.5194/gi-5-271-2016, URL <https://gi.copernicus.org/articles/5/271/2016/>, 2016.

- Kivi, R., Heikkinen, P., and Kyrö, E. : TCCON data from Sodankylä (FI), Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.SODANKYLA01.R0/1149280, URL <https://data.caltech.edu/records/289>, 2014.
- Kort, E. A., Frankenberg, C., Miller, C. E., and Oda, T. : Space-based observations of megacity carbon dioxide, *Geophysical Research Letters*, 39, doi :<https://doi.org/10.1029/2012GL052738>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2012GL052738>, 2012.
- Krautwurst, S., Gerilowski, K., Jonsson, H. H., Thompson, D. R., Kolyer, R. W., Iraci, L. T., Thorpe, A. K., Horstjann, M., Eastwood, M., Leifer, I., Vigil, S. A., Krings, T., Borchardt, J., Buchwitz, M., Fladeland, M. M., Burrows, J. P., and Bovensmann, H. : Methane emissions from a Californian landfill, determined from airborne remote sensing and in situ measurements, *Atmospheric Measurement Techniques*, 10, 3429–3452, doi :10.5194/amt-10-3429-2017, URL <https://amt.copernicus.org/articles/10/3429/2017/>, 2017.
- Krings, T., Gerilowski, K., Buchwitz, M., Reuter, M., Tretner, A., Erzinger, J., Heinze, D., Pflüger, U., Burrows, J. P., and Bovensmann, H. : MAMAP – a new spectrometer system for column-averaged methane and carbon dioxide observations from aircraft : retrieval algorithm and first inversions for point source emission rates, *Atmospheric Measurement Techniques*, 4, 1735–1758, doi :10.5194/amt-4-1735-2011, URL <https://amt.copernicus.org/articles/4/1735/2011/>, 2011.
- Kuhlmann, G., Broquet, G., Marshall, J., Clément, V., Löscher, A., Meijer, Y., and Brunner, D. : Detectability of CO_2 emission plumes of cities and power plants with the Copernicus Anthropogenic CO_2 Monitoring (CO2M) mission, *Atmospheric Measurement Techniques*, 12, 6695–6719, doi :10.5194/amt-12-6695-2019, URL <https://amt.copernicus.org/articles/12/6695/2019/>, 2019.
- Kuhlmann, G., Brunner, D., Broquet, G., and Meijer, Y. : Quantifying CO_2 emissions of a city with the Copernicus Anthropogenic CO_2 Monitoring satellite mission, *Atmospheric Measurement Techniques*, 13, 6733–6754, doi :10.5194/amt-13-6733-2020, URL <https://amt.copernicus.org/articles/13/6733/2020/>, 2020.
- Kulawik, S. S., Jones, D. B. A., Nassar, R., Irion, F. W., Worden, J. R., Bowman, K. W., Machida, T., Matsueda, H., Sawa, Y., Biraud, S. C., Fischer, M. L., and Jacobson, A. R. : Characterization of Tropospheric Emission Spectrometer (TES) CO_2 for carbon cycle science, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10, 5601–5623, doi :10.5194/acp-10-5601-2010, URL <https://acp.copernicus.org/articles/10/5601/2010/>, 2010.
- Kuze, A., Suto, H., Shiomi, K., Urabe, T., Nakajima, M., Yoshida, J., Kawashima, T., Yamamoto, Y., Kataoka, F., and Buijs, H. : Level 1 algorithms for TANSO on GOSAT : processing and on-orbit calibrations, *Atmospheric Measurement Techniques*, 5, 2447–2467,

- doi :10.5194/amt-5-2447-2012, URL <https://amt.copernicus.org/articles/5/2447/2012/>, 2012.
- Kuze, A., Suto, H., Shiomi, K., Kawakami, S., Tanaka, M., Ueda, Y., Deguchi, A., Yoshida, J., Yamamoto, Y., Kataoka, F., Taylor, T. E., and Buijs, H. L. : Update on GOSAT TANSO-FTS performance, operations, and data products after more than 6 years in space, *Atmospheric Measurement Techniques*, 9, 2445–2461, doi :10.5194/amt-9-2445-2016, URL <https://amt.copernicus.org/articles/9/2445/2016/>, 2016.
- Kuze, A., Suto, H., Kibuchi, N., Shiomi, K., and Kataoka, F. : Status, new Products, and Role of GOSAT after more than twelve years in space, in : IWGGMS-17, URL https://cce-datasharing.gsfc.nasa.gov/files/conference_presentations/Talk_Kuze_12_25.pdf, 2021.
- Lamouroux, J., Tran, H., Laraia, A., Gamache, R., Rothman, L., Gordon, I., and Hartmann, J.-M. : Updated database plus software for line-mixing in CO₂ infrared spectra and their test using laboratory spectra in the 1.5–2.3 μm region, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111, 2321 – 2331, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2010.03.006>, URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407310000920>, xVIth Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2009), 2010.
- Lamouroux, J., Régalia, L., Thomas, X., Vander Auwera, J., Gamache, R., and Hartmann, J.-M. : CO₂ line-mixing database and software update and its tests in the 2.1 μm and 4.3 μm regions, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 151, 88–96, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.09.017>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407314003896>, 2015.
- Lenoble, J., Remer, L., and Tanre, D. : *Aerosol Remote Sensing*, Springer, doi :10.1007/978-3-642-17725-5, 2013.
- Liou, K.-N. : An introduction to atmospheric radiation [electronic resource] / K.N. Liou., International geophysics series ; v. 84, Academic Press, Amsterdam ;, 2nd ed. edn., 2002.
- Liu, Y., Wang, J., Yao, L., Chen, X., Cai, Z., Yang, D., Yin, Z., Gu, S., Tian, L., Lu, N., and Lyu, D. : The TanSat mission : preliminary global observations, *Science Bulletin*, 63, 1200–1207, doi :<https://doi.org/10.1016/j.scib.2018.08.004>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2095927318303797>, 2018.
- Liuzzi, G., Masiello, G., Serio, C., Venafrà, S., and Camy-Peyret, C. : Physical inversion of the full IASI spectra : Assessment of atmospheric parameters retrievals, consistency of spectroscopy and forward modelling, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 182, 128–157, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2016.05.022>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407316301248>, 2016.

- Machida, T., Matsueda, H., Sawa, Y., Nakagawa, Y., Hirokuni, K., Kondo, N., Goto, K., Nakazawa, T., Ishikawa, K., and Ogawa, T. : Worldwide Measurements of Atmospheric CO₂ and Other Trace Gas Species Using Commercial Airlines, *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 25, 1744 – 1754, doi :10.1175/2008JTECHA1082.1, URL https://journals.ametsoc.org/view/journals/atot/25/10/2008jtecha1082_1.xml, 2008.
- Mailler, S., Menut, L., Khvorostyanov, D., Valari, M., Couvidat, F., Siour, G., Turquety, S., Briant, R., Tuccella, P., Bessagnet, B., Colette, A., Létinois, L., Markakis, K., and Meleux, F. : CHIMERE-2017 : from urban to hemispheric chemistry-transport modeling, *Geoscientific Model Development*, 10, 2397–2423, doi :10.5194/gmd-10-2397-2017, URL <https://gmd.copernicus.org/articles/10/2397/2017/>, 2017.
- Maksyutov, S., Takagi, H., Valsala, V. K., Saito, M., Oda, T., Saeki, T., Belikov, D. A., Saito, R., Ito, A., Yoshida, Y., Morino, I., Uchino, O., Andres, R. J., and Yokota, T. : Regional CO₂ flux estimates for 2009–2010 based on GOSAT and ground-based CO₂ observations, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13, 9351–9373, doi :10.5194/acp-13-9351-2013, URL <https://acp.copernicus.org/articles/13/9351/2013/>, 2013.
- Masson-Delmotte, V., Schulz, M., Abe-Ouchi, A., Beer, J., Ganopolski, A., Gonzalez Rouco, J., Jansen, E., Lambeck, K., Luterbacher, J., Naish, T., Osborn, T., Otto-Bliesner, B., Quinn, T., Ramesh, R., Rojas, M., Shao, X., and Timmermann, A. : Climate Change 2013 : The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, book section Information from Paleoclimate Archives, p. 383–464, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, doi :10.1017/CBO9781107415324.013, URL <https://www.ipcc.ch/>, 2013.
- Matsunaga, T. and Team : The Status of GOSAT and GOSAT-2 Higher Level Products, in : IWGGMS-17, URL https://cce-datasharing.gsfc.nasa.gov/files/conference_presentations/Talk_Matsunaga_61_25.pdf, 2021.
- Meijer, Y. : Copernicus CO₂ Monitoring Mission Requirement Document, Tech. rep., European Space Agency (ESA), URL https://esamultimedia.esa.int/docs/EarthObservation/CO2M_MRD_v2.0_Issued20190927.pdf, 2020.
- Membrive, O. : 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., Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2016.
- Miller, C. E., Crisp, D., DeCola, P. L., Olsen, S. C., Randerson, J. T., Michalak, A. M., Alkhaled, A., Rayner, P., Jacob, D. J., Suntharalingam, P., Jones, D. B. A., Denning, A. S., Nicholls, M. E., Doney, S. C., Pawson, S., Boesch, H., Connor, B. J., Fung, I. Y., O’Brien, D., Salawitch, R. J., Sander, S. P., Sen, B., Tans, P., Toon, G. C., Wennberg, P. O., Wofsy, S. C., Yung, Y. L., and Law, R. M. : Precision requirements for space-based XCO₂ data, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 112, doi :<https://doi.org/10.1029/>

2006JD007659, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JD007659>, 2007.

Mishchenko, M. I., Travis, L. D., and Lacis, A. A. : Multiple Scattering of Light by Particles : Radiative Transfer and Coherent Backscattering, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.

Monteil, G., Broquet, G., Scholze, M., Lang, M., Karstens, U., Gerbig, C., Koch, F.-T., Smith, N. E., Thompson, R. L., Lujckx, I. T., White, E., Meesters, A., Ciais, P., Ganesan, A. L., Manning, A., Mischurov, M., Peters, W., Peylin, P., Tarniewicz, J., Rigby, M., Rödenbeck, C., Vermeulen, A., and Walton, E. M. : The regional European atmospheric transport inversion comparison, EUROCOM : first results on European-wide terrestrial carbon fluxes for the period 2006–2015, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 20, 12063–12091, doi :10.5194/acp-20-12063-2020, URL <https://acp.copernicus.org/articles/20/12063/2020/>, 2020.

Moore III, B., Crowell, S. M. R., Rayner, P. J., Kumer, J., O'Dell, C. W., O'Brien, D., Utembe, S., Polonsky, I., Schimel, D., and Lemen, J. : The Potential of the Geostationary Carbon Cycle Observatory (GeoCarb) to Provide Multi-scale Constraints on the Carbon Cycle in the Americas, *Frontiers in Environmental Science*, 6, 109, doi :10.3389/fenvs.2018.00109, URL <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fenvs.2018.00109>, 2018.

Morino, I., Matsuzaki, T., and Horikawa, M. : TCCON data from Tsukuba (JP), 125HR, Release GGG2014.R2, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.TSUKUBA02.R2, URL <https://data.caltech.edu/records/958>, 2018.

Nassar, R., Hill, T. G., McLinden, C. A., Wunch, D., Jones, D. B. A., and Crisp, D. : Quantifying CO₂ Emissions From Individual Power Plants From Space, *Geophysical Research Letters*, 44, 10,045–10,053, doi :<https://doi.org/10.1002/2017GL074702>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2017GL074702>, 2017.

Nassar, R., Mastrogiacomo, J.-P., Bateman-Hemphill, W., McCracken, C., MacDonald, C. G., Hill, T., O'Dell, C. W., Kiel, M., and Crisp, D. : Advances in quantifying power plant CO₂ emissions with OCO-2, *Remote Sensing of Environment*, 264, 112579, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112579>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425721002996>, 2021.

Natraj, V., Boesch, H., Spurr, R. J. D., and Yung, Y. L. : Retrieval of from simulated Orbiting Carbon Observatory measurements using the fast linearized R-2OS radiative transfer model, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 113, doi :10.1029/2007JD009017, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2007JD009017>, 2008.

NCEP : NCEP Global Forecast System (GFS) Analyses and Forecasts, URL <https://doi.org/10.5065/D65Q4TSG>, 2007.

- Ngo, N., Lisak, D., Tran, H., and Hartmann, J.-M. : An isolated line-shape model to go beyond the Voigt profile in spectroscopic databases and radiative transfer codes, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 129, 89–100, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.05.034>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407313002422>, 2013.
- Nguyen, H., Osterman, G., Wunch, D., O'Dell, C., Mandrake, L., Wennberg, P., Fisher, B., and Castano, R. : A method for colocating satellite X_{CO₂} data to ground-based data and its application to ACOS-GOSAT and TCCON, *Atmospheric Measurement Techniques*, 7, 2631–2644, doi :10.5194/amt-7-2631-2014, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/7/2631/2014/>, 2014.
- Noël, S., Reuter, M., Buchwitz, M., Borchardt, J., Hilker, M., Bovensmann, H., Burrows, J. P., Di Noia, A., Suto, H., Yoshida, Y., Buschmann, M., Deutscher, N. M., Feist, D. G., Griffith, D. W. T., Hase, F., Kivi, R., Morino, I., Notholt, J., Ohyama, H., Petri, C., Podolske, J. R., Pollard, D. F., Sha, M. K., Shiomi, K., Sussmann, R., Té, Y., Velasco, V. A., and Warneke, T. : XCO₂ retrieval for GOSAT and GOSAT-2 based on the FOCAL algorithm, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 3837–3869, doi :10.5194/amt-14-3837-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/3837/2021/>, 2021.
- Notholt, J., Petri, C., Warneke, T., Deutscher, N. M., Palm, M., Buschmann, M., Weinzierl, C., Macatangay, R. C., and Grupe, P. : TCCON data from Bremen (DE), Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.BREMEN01.R0/1149275, URL <https://data.caltech.edu/records/268>, 2014.
- Oda, T., Maksyutov, S., and Andres, R. J. : The Open-source Data Inventory for Anthropogenic CO₂, version 2016 (ODIAC2016) : a global monthly fossil fuel CO₂ gridded emissions data product for tracer transport simulations and surface flux inversions, *Earth System Science Data*, 10, 87–107, doi :10.5194/essd-10-87-2018, URL <https://essd.copernicus.org/articles/10/87/2018/>, 2018.
- O'Dell, C., McGarragh, G., Somkuti, P., Taylor, T., Ott, L., Weir, B., Basu, S., Chatterjee, A., and Crowell, S. : Use of a Pessimistic End-to-End OSSE Simulation to Assess Potential Impacts of OCO-2 XCO₂ Observations on Quantifying Global Carbon Fluxes, in : IWGGMS-17, URL https://cce-datasharing.gsfc.nasa.gov/files/conference_presentations/Talk_ODell_118_25.pdf, 2021.
- O'Dell, C. W. : Acceleration of multiple-scattering, hyperspectral radiative transfer calculations via low-streams interpolation, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 115, doi :<https://doi.org/10.1029/2009JD012803>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JD012803>, 2010.
- O'Dell, C. W., Connor, B., Bösch, H., O'Brien, D., Frankenberg, C., Castano, R., Christi, M., Eldering, D., Fisher, B., Gunson, M., McDuffie, J., Miller, C. E., Natraj, V., Oyafuso, F.,

- Polonsky, I., Smyth, M., Taylor, T., Toon, G. C., Wennberg, P. O., and Wunch, D. : The ACOS CO₂ retrieval algorithm – Part 1 : Description and validation against synthetic observations, *Atmospheric Measurement Techniques*, 5, 99–121, doi :10.5194/amt-5-99-2012, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/5/99/2012/>, 2012.
- O’Dell, C. W., Eldering, A., Wennberg, P. O., Crisp, D., Gunson, M. R., Fisher, B., Frankenberg, C., Kiel, M., Lindqvist, H., Mandrake, L., Merrelli, A., Natraj, V., Nelson, R. R., Osterman, G. B., Payne, V. H., Taylor, T. E., Wunch, D., Drouin, B. J., Oyafuso, F., Chang, A., McDuffie, J., Smyth, M., Baker, D. F., Basu, S., Chevallier, F., Crowell, S. M. R., Feng, L., Palmer, P. I., Dubey, M., García, O. E., Griffith, D. W. T., Hase, F., Iraci, L. T., Kivi, R., Morino, I., Notholt, J., Ohyama, H., Petri, C., Roehl, C. M., Sha, M. K., Strong, K., Sussmann, R., Te, Y., Uchino, O., and Velazco, V. A. : Improved retrievals of carbon dioxide from Orbiting Carbon Observatory-2 with the version 8 ACOS algorithm, *Atmospheric Measurement Techniques*, 11, 6539–6576, doi :10.5194/amt-11-6539-2018, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/11/6539/2018/>, 2018.
- Palacios-Peña, L., Jiménez-Guerrero, P., Baró, R., Balzarini, A., Bianconi, R., Curci, G., Landi, T. C., Pirovano, G., Prank, M., Riccio, A., Tuccella, P., and Galmarini, S. : Aerosol optical properties over Europe : an evaluation of the AQMEII Phase 3 simulations against satellite observations, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19, 2965–2990, doi :10.5194/acp-19-2965-2019, URL <https://acp.copernicus.org/articles/19/2965/2019/>, 2019.
- Palmer, P. I. and Rayner, P. : Failure to launch, *Nature Geoscience*, 2, 247–247, doi :10.1038/ngeo495, URL <https://doi.org/10.1038/ngeo495>, 2009.
- Papayannis, A., Amiridis, V., Mona, L., Tsaknakis, G., Balis, D., Bösenberg, J., Chaikovski, A., De Tomasi, F., Grigorov, I., Mattis, I., Mitev, V., Müller, D., Nickovic, S., Pérez, C., Pietruczuk, A., Pisani, G., Ravetta, F., Rizi, V., Sicard, M., Trickl, T., Wiegner, M., Gerding, M., Mamouri, R. E., D’Amico, G., and Pappalardo, G. : Systematic lidar observations of Saharan dust over Europe in the frame of EARLINET (2000–2002), *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 113, doi :<https://doi.org/10.1029/2007JD009028>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2007JD009028>, 2008.
- Pascal, V., Buil, C., Loesel, J., Tauziede, L., Jouglet, D., and Buisson, F. : An improved microcarb dispersive instrumental concept for the measurement of greenhouse gases concentration in the atmosphere, in : *International Conference on Space Optics — ICSSO 2014*, edited by Sodnik, Z., Cugny, B., and Karafolas, N., vol. 10563, pp. 1028 – 1036, International Society for Optics and Photonics, SPIE, doi :10.1117/12.2304219, URL <https://doi.org/10.1117/12.2304219>, 2017.
- Peylin, P., Law, R. M., Gurney, K. R., Chevallier, F., Jacobson, A. R., Maki, T., Niwa, Y., Patra, P. K., Peters, W., Rayner, P. J., Rödenbeck, C., van der Laan-Luijkx, I. T.,

- and Zhang, X. : Global atmospheric carbon budget : results from an ensemble of atmospheric CO₂ inversions, *Biogeosciences*, 10, 6699–6720, doi :10.5194/bg-10-6699-2013, URL <https://bg.copernicus.org/articles/10/6699/2013/>, 2013.
- Peyridieu, S. : Établissement d'une climatologie des propriétés des aérosols de poussières à partir d'observations hyperspectrales dans l'infrarouge, Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2010.
- Pillai, D., Buchwitz, M., Gerbig, C., Koch, T., Reuter, M., Bovensmann, H., Marshall, J., and Burrows, J. P. : Tracking city CO₂ emissions from space using a high-resolution inverse modelling approach : a case study for Berlin, Germany, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16, 9591–9610, doi :10.5194/acp-16-9591-2016, URL <https://acp.copernicus.org/articles/16/9591/2016/>, 2016.
- Rayner, P. J. and O'Brien, D. M. : The utility of remotely sensed CO₂ concentration data in surface source inversions, *Geophysical Research Letters*, 28, 175–178, doi :10.1029/2000GL011912, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2000GL011912>, 2001.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., Heymann, J., Bovensmann, H., and Burrows, J. P. : A method for improved SCIAMACHY CO₂ retrieval in the presence of optically thin clouds, *Atmospheric Measurement Techniques*, 3, 209–232, doi :10.5194/amt-3-209-2010, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/3/209/2010/>, 2010.
- Reuter, M., Bovensmann, H., Buchwitz, M., Burrows, J. P., Connor, B. J., Deutscher, N. M., Griffith, D. W. T., Heymann, J., Keppel-Aleks, G., Messerschmidt, J., Notholt, J., Petri, C., Robinson, J., Schneising, O., Sherlock, V., Velasco, V., Warneke, T., Wennberg, P. O., and Wunch, D. : Retrieval of atmospheric CO₂ with enhanced accuracy and precision from SCIAMACHY : Validation with FTS measurements and comparison with model results, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 116, doi :<https://doi.org/10.1029/2010JD015047>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2010JD015047>, 2011.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Hilker, M., Heymann, J., Schneising, O., Pillai, D., Bovensmann, H., Burrows, J. P., Bösch, H., Parker, R., Butz, A., Hasekamp, O., O'Dell, C. W., Yoshida, Y., Gerbig, C., Nehr Korn, T., Deutscher, N. M., Warneke, T., Notholt, J., Hase, F., Kivi, R., Sussmann, R., Machida, T., Matsueda, H., and Sawa, Y. : Satellite-inferred European carbon sink larger than expected, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14, 13 739–13 753, doi :10.5194/acp-14-13739-2014, URL <https://acp.copernicus.org/articles/14/13739/2014/>, 2014.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., Noël, S., Bovensmann, H., and Burrows, J. : A Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval for Hyperspectral Instruments Approximating Multiple Scattering—Part 2 : Application to XCO₂ Retrievals from OCO-2, *Remote Sensing*, 9, 1102, doi :10.3390/rs9111102, URL <http://dx.doi.org/10.3390/rs9111102>, 2017a.

- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., Noël, S., Rozanov, V., Bovensmann, H., and Burrows, J. : A Fast Atmospheric Trace Gas Retrieval for Hyperspectral Instruments Approximating Multiple Scattering—Part 1 : Radiative Transfer and a Potential OCO-2 XCO₂ Retrieval Setup, *Remote Sensing*, 9, 1159, doi :10.3390/rs9111159, URL <http://dx.doi.org/10.3390/rs9111159>, 2017b.
- Reuter, M., Buchwitz, M., Schneising, O., Krautwurst, S., O'Dell, C. W., Richter, A., Bovensmann, H., and Burrows, J. P. : Towards monitoring localized CO₂ emissions from space : co-located regional CO₂ and NO₂ enhancements observed by the OCO-2 and S5P satellites, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19, 9371–9383, doi :10.5194/acp-19-9371-2019, URL <https://acp.copernicus.org/articles/19/9371/2019/>, 2019.
- Roche, S., Strong, K., Wunch, D., Mendonca, J., Sweeney, C., Baier, B., Biraud, S. C., Laughner, J. L., Toon, G. C., and Connor, B. J. : Retrieval of atmospheric CO₂ vertical profiles from ground-based near-infrared spectra, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 3087–3118, doi :10.5194/amt-14-3087-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/3087/2021/>, 2021.
- Rodgers, C. D. : Retrieval of atmospheric temperature and composition from remote measurements of thermal radiation, *Reviews of Geophysics*, 14, 609–624, doi :<https://doi.org/10.1029/RG014i004p00609>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/RG014i004p00609>, 1976.
- Rodgers, C. D. : *Inverse Methods for Atmospheric Sounding*, WORLD SCIENTIFIC, doi : 10.1142/3171, URL <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/3171>, 2000.
- Roelfsema, M., van Soest, H. L., Harmsen, M., van Vuuren, D. P., Bertram, C., den Elzen, M., Höhne, N., Iacobuta, G., Krey, V., Krieglner, E., Luderer, G., Riahi, K., Ueckerdt, F., Després, J., Drouet, L., Emmerling, J., Frank, S., Fricko, O., Gidden, M., Humpeöder, F., Huppmann, D., Fujimori, S., Fragkiadakis, K., Gi, K., Keramidis, K., Köberle, A. C., Aleluia Reis, L., Rochedo, P., Schaeffer, R., Oshiro, K., Vrontisi, Z., Chen, W., Iyer, G. C., Edmonds, J., Kannavou, M., Jiang, K., Mathur, R., Safonov, G., and Vishwanathan, S. S. : Taking stock of national climate policies to evaluate implementation of the Paris Agreement, *Nature Communications*, 11, 2096, doi :10.1038/s41467-020-15414-6, URL <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15414-6>, 2020.
- Rothman, L., Gordon, I., Barbe, A., Benner, D., Bernath, P., Birk, M., Boudon, V., Brown, L., Campargue, A., Champion, J.-P., Chance, K., Coudert, L., Dana, V., Devi, V., Fally, S., Flaud, J.-M., Gamache, R., Goldman, A., Jacquemart, D., Kleiner, I., Lacome, N., Lafferty, W., Mandin, J.-Y., Massie, S., Mikhailenko, S., Miller, C., Moazzen-Ahmadi, N., Naumenko, O., Nikitin, A., Orphal, J., Perevalov, V., Perrin, A., Predoi-Cross, A., Rinsland, C., Rotger, M., Simeckova, M., Smith, M., Sung, K., Tashkun, S., Tennyson, J., Toth, R., Vandaele, A., and Auwera, J. V. : The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110, 533 – 572,

doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2009.02.013>, URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407309000727>, hITRAN, 2009.

Rothman, L., Gordon, I., Babikov, Y., Barbe, A., Chris Benner, D., Bernath, P., Birk, M., Bizzocchi, L., Boudon, V., Brown, L., Campargue, A., Chance, K., Cohen, E., Couderc, L., Devi, V., Drouin, B., Fayt, A., Flaud, J.-M., Gamache, R., Harrison, J., Hartmann, J.-M., Hill, C., Hodges, J., Jacquemart, D., Jolly, A., Lamouroux, J., Le Roy, R., Li, G., Long, D., Lyulin, O., Mackie, C., Massie, S., Mikhailenko, S., Müller, H., Naumenko, O., Nikitin, A., Orphal, J., Perevalov, V., Perrin, A., Polovtseva, E., Richard, C., Smith, M., Starikova, E., Sung, K., Tashkun, S., Tennyson, J., Toon, G., Tyuterev, V., and Wagner, G. : The HITRAN2012 molecular spectroscopic database, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130, 4–50, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.07.002>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407313002859>, hITRAN2012 special issue, 2013.

Rusli, S. P., Hasekamp, O., aan de Brugh, J., Fu, G., Meijer, Y., and Landgraf, J. : Anthropogenic CO₂ monitoring satellite mission : the need for multi-angle polarimetric observations, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 1167–1190, doi :10.5194/amt-14-1167-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/1167/2021/>, 2021.

Saitoh, N., Kimoto, S., Sugimura, R., Imasu, R., Kawakami, S., Shiomi, K., Kuze, A., Machida, T., Sawa, Y., and Matsueda, H. : Algorithm update of the GOSAT/TANSO-FTS thermal infrared CO₂ product (version 1) and validation of the UTLS CO₂ data using CONTRAIL measurements, *Atmospheric Measurement Techniques*, 9, 2119–2134, doi :10.5194/amt-9-2119-2016, URL <https://amt.copernicus.org/articles/9/2119/2016/>, 2016.

SCARBO : White Paper of the SCARBO Consortium - Internal document of the SCARBO project, Tech. rep., 2021a.

SCARBO : User Advisory Board presentation 17/09/2019 - Internal document of the SCARBO project, Tech. rep., 2021b.

Schneising, O., Heymann, J., Buchwitz, M., Reuter, M., Bovensmann, H., and Burrows, J. P. : Anthropogenic carbon dioxide source areas observed from space : assessment of regional enhancements and trends, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13, 2445–2454, doi :10.5194/acp-13-2445-2013, URL <https://acp.copernicus.org/articles/13/2445/2013/>, 2013.

Schuh, A. E., Denning, A. S., Corbin, K. D., Baker, I. T., Uliasz, M., Parazoo, N., Andrews, A. E., and Worthy, D. E. J. : A regional high-resolution carbon flux inversion of North America for 2004, *Biogeosciences*, 7, 1625–1644, doi :10.5194/bg-7-1625-2010, URL <https://bg.copernicus.org/articles/7/1625/2010/>, 2010.

Schuh, A. E., Jacobson, A. R., Basu, S., Weir, B., Baker, D., Bowman, K., Chevallier, F., Crowell, S., Davis, K. J., Deng, F., Denning, S., Feng, L., Jones, D., Liu, J., and Palmer,

- P. I. : Quantifying the Impact of Atmospheric Transport Uncertainty on CO₂ Surface Flux Estimates, *Global Biogeochemical Cycles*, 33, 484–500, doi :<https://doi.org/10.1029/2018GB006086>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2018GB006086>, 2019.
- Scott, N. : 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, 691–704, doi :[https://doi.org/10.1016/0022-4073\(74\)90116-2](https://doi.org/10.1016/0022-4073(74)90116-2), URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022407374901162>, 1974.
- Scott, N. A. and Chédin, A. : A Fast Line-by-Line Method for Atmospheric Absorption Computations : The Automatized Atmospheric Absorption Atlas, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 20, 802 – 812, doi :10.1175/1520-0450(1981)020<0802:AFLBLM>2.0.CO;2, URL https://journals.ametsoc.org/view/journals/apme/20/7/1520-0450_1981_020_0802_aflblm_2_0_co_2.xml, 1981.
- Sherlock, V., Connor, B., Robinson, J., Shiona, H., Smale, D., and Pollard, D. F. : TCCON data from Lauder (NZ), 125HR, Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.LAUDER02.R0/1149298, URL <https://data.caltech.edu/records/281>, 2014.
- Skamarock, W. C., Klemp, J. B., Dudhia, J., Gill, D. O., Barker, D. M., Wang, W., and Powers, J. G. : A description of the Advanced Research WRF version 3. NCAR/TN-475+STR, Tech. rep., National Center for Atmospheric Research (NCAR), doi :<http://dx.doi.org/10.5065/D68S4MVH>, 2008.
- Smit, J. M., Rietjens, J. H. H., van Harten, G., Noia, A. D., Laauwen, W., Rheingans, B. E., Diner, D. J., Cairns, B., Wasilewski, A., Knobelspiesse, K. D., Ferrare, R., and Hasekamp, O. P. : SPEX airborne spectropolarimeter calibration and performance, *Appl. Opt.*, 58, 5695–5719, doi :10.1364/AO.58.005695, URL <http://ao.osa.org/abstract.cfm?URI=ao-58-21-5695>, 2019.
- Smith, W. J. : *Modern Optical Engineering : The Design of Optical Systems*, Fourth Edition, McGraw-Hill Education, New York, 4th ed. edn., URL <content/book/9780071476874>, 2008.
- Snik, F., Karalidi, T., and Keller, C. U. : Spectral modulation for full linear polarimetry, *Appl. Opt.*, 48, 1337–1346, doi :10.1364/AO.48.001337, URL <http://ao.osa.org/abstract.cfm?URI=ao-48-7-1337>, 2009.
- Somkuti, P., Bösch, H., and Parker, R. J. : The Significance of Fast Radiative Transfer for Hyperspectral SWIR XCO₂ Retrievals, *Atmosphere*, 11, doi :10.3390/atmos11111219, URL <https://www.mdpi.com/2073-4433/11/11/1219>, 2020.
- Somkuti, P., O’Dell, C. W., Crowell, S., Köhler, P., McGarragh, G. R., Cronk, H. Q., and Burgh, E. B. : Solar-induced chlorophyll fluorescence from the Geostationary Carbon Cycle Observatory (GeoCarb) : An extensive simulation study, *Remote Sensing of*

- Environment, 263, 112 565, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2021.112565>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425721002856>, 2021.
- Spurr, R. : Simultaneous derivation of intensities and weighting functions in a general pseudo-spherical discrete ordinate radiative transfer treatment, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 75, 129 – 175, doi :[https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(01\)00245-X](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00245-X), URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002240730100245X>, 2002.
- Spurr, R. J. : VLIDORT : A linearized pseudo-spherical vector discrete ordinate radiative transfer code for forward model and retrieval studies in multilayer multiple scattering media, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 102, 316 – 342, doi :<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2006.05.005>, URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407306001191>, 2006.
- Strandgren, J., Krutz, D., Wilzewski, J., Paproth, C., Sebastian, I., Gurney, K. R., Liang, J., Roiger, A., and Butz, A. : Towards spaceborne monitoring of localized CO₂ emissions : an instrument concept and first performance assessment, *Atmospheric Measurement Techniques*, 13, 2887–2904, doi :10.5194/amt-13-2887-2020, URL <https://amt.copernicus.org/articles/13/2887/2020/>, 2020.
- Strong, K., Roche, S., Franklin, J. E., Mendonca, J., Lutsch, E., Weaver, D., Fogal, P. F., Drummond, J. R., Batchelor, R., and Lindenmaier, R. : TCCON data from Eureka (CA), Release GGG2014.R3, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.EUREKA01.R3, URL <https://data.caltech.edu/records/1171>, 2019.
- Sun, Y., Frankenberg, C., Jung, M., Joiner, J., Guanter, L., Köhler, P., and Maigney, T. : Overview of Solar-Induced chlorophyll Fluorescence (SIF) from the Orbiting Carbon Observatory-2 : Retrieval, cross-mission comparison, and global monitoring for GPP, *Remote Sensing of Environment*, 209, 808–823, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2018.02.016>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425718300221>, 2018.
- Suto, H., Kataoka, F., Kikuchi, N., Knuteson, R. O., Butz, A., Haun, M., Buijs, H., Shiomi, K., Imai, H., and Kuze, A. : Thermal and near-infrared sensor for carbon observation Fourier transform spectrometer-2 (TANSO-FTS-2) on the Greenhouse gases Observing SATellite-2 (GOSAT-2) during its first year in orbit, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 2013–2039, doi :10.5194/amt-14-2013-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/2013/2021/>, 2021.
- Tans, P. : System and method for providing vertical profile measurements of atmospheric gases, US7597014, Tech. rep., United States Patent, URL <https://patentimages.storage.googleapis.com/fa/86/f6/9d1b34b5245b02/US7597014.pdf>, 2009.
- Tennyson, J., Bernath, P. F., Campargue, A., Császár, A. G., Daumont, L., Gamache, R. R., Hodges, J. T., Lisak, D., Naumenko, O. V., Rothman, L. S., Tran, H., Zobov, N. F.,

- Buldyreva, J., Boone, C. D., Vizia, M. D. D., Gianfrani, L., Hartmann, J.-M., McPheat, R., Weidmann, D., Murray, J., Ngo, N. H., and Polyansky, O. L. : Recommended isolated-line profile for representing high-resolution spectroscopic transitions (IUPAC Technical Report), *Pure and Applied Chemistry*, 86, 1931–1943, doi :doi:10.1515/pac-2014-0208, URL <https://doi.org/10.1515/pac-2014-0208>, 2014.
- Thompson, D. R., Leifer, I., Bovensmann, H., Eastwood, M., Fladeland, M., Frankenberg, C., Gerilowski, K., Green, R. O., Kratwurst, S., Krings, T., Luna, B., and Thorpe, A. K. : Real-time remote detection and measurement for airborne imaging spectroscopy : a case study with methane, *Atmospheric Measurement Techniques*, 8, 4383–4397, doi :10.5194/amt-8-4383-2015, URL <https://amt.copernicus.org/articles/8/4383/2015/>, 2015.
- Thorpe, A. K., Roberts, D. A., Bradley, E. S., Funk, C. C., Dennison, P. E., and Leifer, I. : High resolution mapping of methane emissions from marine and terrestrial sources using a Cluster-Tuned Matched Filter technique and imaging spectrometry, *Remote Sensing of Environment*, 134, 305–318, doi :<https://doi.org/10.1016/j.rse.2013.03.018>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0034425713000977>, 2013.
- Thorpe, A. K., Frankenberg, C., and Roberts, D. A. : Retrieval techniques for airborne imaging of methane concentrations using high spatial and moderate spectral resolution : application to AVIRIS, *Atmospheric Measurement Techniques*, 7, 491–506, doi :10.5194/amt-7-491-2014, URL <https://amt.copernicus.org/articles/7/491/2014/>, 2014.
- Toon, G. C. : Atmospheric Line List for the 2014 TCCON Data Release, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.ATM.R0/1221656, URL <https://data.caltech.edu/records/248>, 2015a.
- Toon, G. C. : Solar Line List for the TCCON 2014 Data Release, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.SOLAR.R0/1221658, URL <https://data.caltech.edu/records/251>, 2015b.
- Toon, G. C. and Wunch, D. : A stand-alone a priori profile generation tool for GGG2014 release, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.PRIORS.R0/1221661, URL <https://data.caltech.edu/records/250>, 2015.
- Tran, H. and Hartmann, J.-M. : An improved O₂ A band absorption model and its consequences for retrievals of photon paths and surface pressures, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 113, doi :10.1029/2008JD010011, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2008JD010011>, 2008.
- Tsujihara, H. and Team : The mission overview using TANSO-3 on GOSAT-GW, in : IWGGMS-17, URL https://cce-datasharing.gsfc.nasa.gov/files/conference_presentations/Poster_Tsujihara_0_26_25.pdf, 2021.
- Turnbull, J. C., Karion, A., Davis, K. J., Lauvaux, T., Miles, N. L., Richardson, S. J., Sweeney, C., McKain, K., Lehman, S. J., Gurney, K. R., Patarasuk, R., Liang, J., Shepson,

- P. B., Heimburger, A., Harvey, R., and Whetstone, J. : Synthesis of Urban CO₂ Emission Estimates from Multiple Methods from the Indianapolis Flux Project (INFLUX), *Environmental Science & Technology*, 53, 287–295, doi :10.1021/acs.est.8b05552, URL <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b05552>, 2019.
- Té, Y., Jeseck, P., and Janssen, C. : TCCON data from Paris (FR), Release GGG2014.R0, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.PARIS01.R0/1149279, URL <https://data.caltech.edu/records/284>, 2014.
- UNFCCC : CONVENTION-CADRE DES NATIONS UNIES SUR LES CHANGEMENTS CLIMATIQUES, URL https://unfccc.int/files/cooperation_and_support/cooperation_with_international_organizations/application/pdf/convfr.pdf, 1992.
- UNFCCC : ACCORD DE PARIS, URL https://unfccc.int/sites/default/files/french_paris_agreement.pdf, 2015.
- van Amerongen, A., Rietjens, J., Campo, J., Dogan, E., Dingjan, J., Nalla, R., Caron, J., and Hasekamp, O. : SPEXone : a compact multi-angle polarimeter, in : *International Conference on Space Optics — ICSO 2018*, edited by Sodnik, Z., Karafolas, N., and Cugny, B., vol. 11180, pp. 223 – 236, International Society for Optics and Photonics, SPIE, URL <https://doi.org/10.1117/12.2535940>, 2019.
- Varon, D. J., Jacob, D. J., McKeever, J., Jervis, D., Durak, B. O. A., Xia, Y., and Huang, Y. : Quantifying methane point sources from fine-scale satellite observations of atmospheric methane plumes, *Atmospheric Measurement Techniques*, 11, 5673–5686, doi :10.5194/amt-11-5673-2018, URL <https://amt.copernicus.org/articles/11/5673/2018/>, 2018.
- Vogel, F. R., Frey, M., Staufer, J., Hase, F., Broquet, G., Xueref-Remy, I., Chevalier, F., Ciais, P., Sha, M. K., Chelin, P., Jeseck, P., Janssen, C., Té, Y., Groß, J., Blumenstock, T., Tu, Q., and Orphal, J. : XCO₂ in an emission hot-spot region : the COCCON Paris campaign 2015, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19, 3271–3285, doi :10.5194/acp-19-3271-2019, URL <https://acp.copernicus.org/articles/19/3271/2019/>, 2019.
- Wang, Y., Ciais, P., Broquet, G., Bréon, F.-M., Oda, T., Lespinas, F., Meijer, Y., Loesch, A., Janssens-Maenhout, G., Zheng, B., Xu, H., Tao, S., Gurney, K. R., Roest, G., Santaren, D., and Su, Y. : A global map of emission clumps for future monitoring of fossil fuel CO₂ emissions from space, *Earth System Science Data*, 11, 687–703, doi :10.5194/essd-11-687-2019, URL <https://essd.copernicus.org/articles/11/687/2019/>, 2019.
- Warneke, T., Messerschmidt, J., Notholt, J., Weinzierl, C., Deutscher, N. M., Petri, C., and Grupe, P. : TCCON data from Orléans (FR), Release GGG2014.R1, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.ORLEANS01.R1, URL <https://data.caltech.edu/records/1301>, 2019.

- Wennberg, P. O., Wunch, D., Roehl, C. M., Blavier, J.-F., Toon, G. C., and Allen, N. T. : TCCON data from Caltech (US), Release GGG2014.R1, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.PASADENA01.R1/1182415, URL <https://data.caltech.edu/records/285>, 2015.
- Wennberg, P. O., Wunch, D., Roehl, C. M., Blavier, J.-F., Toon, G. C., and Allen, N. T. : TCCON data from Lamont (US), Release GGG2014.R1, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.LAMONT01.R1/1255070, URL <https://data.caltech.edu/records/279>, 2016.
- Wennberg, P. O., Roehl, C. M., Wunch, D., Toon, G. C., Blavier, J.-F., Washenfelder, R., Keppel-Aleks, G., Allen, N. T., and Ayers, J. : TCCON data from Park Falls (US), Release GGG2014.R1, doi :10.14291/TCCON.GGG2014.PARKFALLS01.R1, URL <https://data.caltech.edu/records/295>, 2017.
- Wilzewski, J. S. : Towards CO₂ Emission Monitoring with Passive Air- and Space-Borne Sensors, Ph.D. thesis, LMU München, URL <https://edoc.ub.uni-muenchen.de/28277/>, 2021.
- Wilzewski, J. S., Roiger, A., Strandgren, J., Landgraf, J., Feist, D. G., Velazco, V. A., Deutscher, N. M., Morino, I., Ohyama, H., Té, Y., Kivi, R., Warneke, T., Notholt, J., Dubey, M., Sussmann, R., Rettinger, M., Hase, F., Shiomi, K., and Butz, A. : Spectral sizing of a coarse-spectral-resolution satellite sensor for XCO₂, *Atmospheric Measurement Techniques*, 13, 731–745, doi :10.5194/amt-13-731-2020, URL <https://amt.copernicus.org/articles/13/731/2020/>, 2020.
- WMO : Greenhouse Gas Bulletin No. 16 : The State of Greenhouse Gases in the Atmosphere Based on Global Observations through 2019, Tech. rep., World Meteorological Organization (WMO), URL https://library.wmo.int/doc_num.php?explnum_id=10437, 2020.
- WMO : State of the Global Climate 2020 - WMO-No. 1264, Tech. rep., World Meteorological Organization (WMO), URL https://library.wmo.int/doc_num.php?explnum_id=10618, 2021.
- Wu, L., Hasekamp, O., Hu, H., Landgraf, J., Butz, A., aan de Brugh, J., Aben, I., Pollard, D. F., Griffith, D. W. T., Feist, D. G., Koshelev, D., Hase, F., Toon, G. C., Ohyama, H., Morino, I., Notholt, J., Shiomi, K., Iraci, L., Schneider, M., de Mazière, M., Sussmann, R., Kivi, R., Warneke, T., Goo, T.-Y., and Té, Y. : Carbon dioxide retrieval from OCO-2 satellite observations using the RemoTeC algorithm and validation with TCCON measurements, *Atmospheric Measurement Techniques*, 11, 3111–3130, doi : 10.5194/amt-11-3111-2018, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/11/3111/2018/>, 2018.
- Wu, L., aan de Brugh, J., Meijer, Y., Sierk, B., Hasekamp, O., Butz, A., and Landgraf, J. : XCO₂ observations using satellite measurements with moderate spectral resolution : investigation using GOSAT and OCO-2 measurements, *Atmospheric Measurement Techniques*, 13, 713–729, doi :10.5194/amt-13-713-2020, URL <https://amt.copernicus.org/articles/13/713/2020/>, 2020.

- Wunch, D., Toon, G. C., Blavier, J.-F. L., Washenfelder, R. A., Notholt, J., Connor, B. J., Griffith, D. W. T., Sherlock, V., and Wennberg, P. O. : The Total Carbon Column Observing Network, *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 369, 2087–2112, doi :10.1098/rsta.2010.0240, URL <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.2010.0240>, 2011a.
- Wunch, D., Wennberg, P. O., Toon, G. C., Connor, B. J., Fisher, B., Osterman, G. B., Frankenberg, C., Mandrake, L., O'Dell, C., Ahonen, P., Biraud, S. C., Castano, R., Cressie, N., Crisp, D., Deutscher, N. M., Eldering, A., Fisher, M. L., Griffith, D. W. T., Gunson, M., Heikkinen, P., Keppel-Aleks, G., Kyrö, E., Lindenmaier, R., Macatangay, R., Mendonca, J., Messerschmidt, J., Miller, C. E., Morino, I., Notholt, J., Oyafuso, F. A., Rettinger, M., Robinson, J., Roehl, C. M., Salawitch, R. J., Sherlock, V., Strong, K., Sussmann, R., Tanaka, T., Thompson, D. R., Uchino, O., Warneke, T., and Wofsy, S. C. : A method for evaluating bias in global measurements of CO₂ total columns from space, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 11, 12317–12337, doi :10.5194/acp-11-12317-2011, URL <https://www.atmos-chem-phys.net/11/12317/2011/>, 2011b.
- Wunch, D., Toon, G., Sherlock, V., Deutscher, N. M., Liu, C., Feist, D. G., and Wennberg, P. O. : The Total Carbon Column Observing Network's GGG2014 Data Version, Tech. rep., California Institute of Technology, Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA, doi :<https://doi.org/10.14291/TCCON.GGG2014.DOCUMENTATION.R0/1221662>, 2015.
- Wunch, D., Wennberg, P. O., Osterman, G., Fisher, B., Naylor, B., Roehl, C. M., O'Dell, C., Mandrake, L., Viatte, C., Kiel, M., Griffith, D. W. T., Deutscher, N. M., Velazco, V. A., Notholt, J., Warneke, T., Petri, C., De Maziere, M., Sha, M. K., Sussmann, R., Rettinger, M., Pollard, D., Robinson, J., Morino, I., Uchino, O., Hase, F., Blumenstock, T., Feist, D. G., Arnold, S. G., Strong, K., Mendonca, J., Kivi, R., Heikkinen, P., Iraci, L., Podolske, J., Hillyard, P. W., Kawakami, S., Dubey, M. K., Parker, H. A., Sepulveda, E., García, O. E., Te, Y., Jeseck, P., Gunson, M. R., Crisp, D., and Eldering, A. : Comparisons of the Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) X_{CO₂} measurements with TCCON, *Atmospheric Measurement Techniques*, 10, 2209–2238, doi :10.5194/amt-10-2209-2017, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/10/2209/2017/>, 2017.
- Yang, D. and Team : Tan₂Sat : the next generation of Chinese greenhouse gas monitoring satellite mission, in : IWGGMS-17, URL https://cce-datasharing.gsfc.nasa.gov/files/conference_presentations/Talk_Yang_119_25.pdf, 2021.
- Yang, D., Liu, Y., Cai, Z., Chen, X., Yao, L., and Lu, D. : First Global Carbon Dioxide Maps Produced from TanSat Measurements, *Advances in Atmospheric Sciences*, 35, 621–623, doi :10.1007/s00376-018-7312-6, URL <https://doi.org/10.1007/s00376-018-7312-6>, 2018.
- Yang, D., Boesch, H., Liu, Y., Somkuti, P., Cai, Z., Chen, X., Di Noia, A., Lin, C., Lu, N., Lyu, D., Parker, R. J., Tian, L., Wang, M., Webb, A., Yao, L., Yin, Z., Zheng,

- Y., Deutscher, N. M., Griffith, D. W. T., Hase, F., Kivi, R., Morino, I., Notholt, J., Ohyama, H., Pollard, D. F., Shiomi, K., Sussmann, R., Té, Y., Velasco, V. A., Warneke, T., and Wunch, D. : Toward High Precision XCO₂ Retrievals From TanSat Observations : Retrieval Improvement and Validation Against TCCON Measurements, *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 125, e2020JD032794, doi :<https://doi.org/10.1029/2020JD032794>, URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2020JD032794>, e2020JD032794 2020JD032794, 2020.
- Yokota, T., Yoshida, Y., Eguchi, N., Ota, Y., Tanaka, T., Watanabe, H., and Maksyutov, S. : Global Concentrations of CO₂ and CH₄ Retrieved from GOSAT : First Preliminary Results, *SOLA*, 5, 160–163, doi :10.2151/sola.2009-041, 2009.
- Yoshida, Y., Ota, Y., Eguchi, N., Kikuchi, N., Nobuta, K., Tran, H., Morino, I., and Yokota, T. : Retrieval algorithm for CO₂ and CH₄ column abundances from short-wavelength infrared spectral observations by the Greenhouse gases observing satellite, *Atmospheric Measurement Techniques*, 4, 717–734, doi :10.5194/amt-4-717-2011, URL <https://www.atmos-meas-tech.net/4/717/2011/>, 2011.
- Yoshida, Y., Kikuchi, N., Morino, I., Uchino, O., Oshchepkov, S., Bril, A., Saeki, T., Schutgens, N., Toon, G. C., Wunch, D., Roehl, C. M., Wennberg, P. O., Griffith, D. W. T., Deutscher, N. M., Warneke, T., Notholt, J., Robinson, J., Sherlock, V., Connor, B., Rettinger, M., Sussmann, R., Ahonen, P., Heikkinen, P., Kyrö, E., Mendonca, J., Strong, K., Hase, F., Dohe, S., and Yokota, T. : Improvement of the retrieval algorithm for GOSAT SWIR XCO₂ and XCH₄ and their validation using TCCON data, *Atmospheric Measurement Techniques*, 6, 1533–1547, doi :10.5194/amt-6-1533-2013, URL <https://amt.copernicus.org/articles/6/1533/2013/>, 2013.
- Yu, S., Rosenberg, R., Bruegge, C., Chapsky, L., Fu, D., Lee, R., Taylor, T., Cronk, H., O'Dell, C., Angal, A., Xiong, X., Crisp, D., and Eldering, A. : Stability Assessment of OCO-2 Radiometric Calibration Using Aqua MODIS as a Reference, *Remote Sensing*, 12, doi :10.3390/rs12081269, URL <https://www.mdpi.com/2072-4292/12/8/1269>, 2020.
- Zheng, B., Chevallier, F., Ciais, P., Broquet, G., Wang, Y., Lian, J., and Zhao, Y. : Observing carbon dioxide emissions over China's cities and industrial areas with the Orbiting Carbon Observatory-2, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 20, 8501–8510, doi :10.5194/acp-20-8501-2020, URL <https://acp.copernicus.org/articles/20/8501/2020/>, 2020.

Titre : Suivi de la concentration atmosphérique de CO₂ par satellite : performances et sensibilités des prochains concepts d'observation dans le proche infrarouge

Mots clés : Télédétection, Satellite, CO₂, Proche infrarouge

Résumé : Le suivi des émissions anthropiques de CO₂ est crucial pour évaluer les progrès réalisés vers les objectifs de l'Accord de Paris signé en 2015, et les estimations de la concentration atmosphérique de CO₂, réalisées à partir de mesures satellites du rayonnement proche infrarouge, peuvent y contribuer. Ainsi, de nombreux concepts d'observation satellite dédiés au suivi du CO₂ ou à d'autres gaz à effet de serre sont planifiés ou en cours de développement pour la décennie qui s'ouvre. La nature même des mesures qu'ils feront, leurs résolutions spectrale, radiométrique et spatiale varient grandement selon qu'ils visent le suivi des flux naturels et/ou anthropiques de CO₂. Ce travail de thèse propose d'étudier comment les caractéristiques de ces prochains concepts modifient les performances de l'estimation de la concentration atmosphérique de CO₂ à partir de leurs mesures. Pour le mener à bien, le modèle de transfert radiatif inverse 5AI, reposant sur l'algorithme d'estimation optimale et la modélisation directe de 4A/OP est d'abord présenté, puis testé sur les mesures de la mission américaine Orbiting Carbon Observatory-2 actuellement en vol. Les sensibilités des résultats obtenus à prise en compte de l'effet parasite des aérosols ainsi qu'à la connaissance des coefficients d'absorption des gaz, apportée par la spectroscopie moléculaire,

sont en particulier étudiées. Ce modèle inverse est ensuite utilisé pour évaluer les performances du concept Space CARBON Observatory (SCARBO) qui propose d'estimer la concentration atmosphérique de CO₂ à partir d'interférogrammes tronqués, et non pas de spectres comme la majorité des concepts d'observation à l'étude. Ces interférogrammes tronqués seraient mesurés par l'instrument imageur miniaturisé NanoCarb qui serait embarqué sur de petits satellites volant en constellation, permettant d'augmenter la fréquence de survol des principales sources d'émissions anthropiques de CO₂ par rapport aux missions spatiales à plateforme unique. L'approche de mesure originale proposée par SCARBO autorise par ailleurs une résolution spatiale des mesures suffisante pour distinguer les panaches d'émissions anthropiques de CO₂. Les concepts reposant sur des mesures de spectres réalisent quant à eux un compromis entre résolutions spectrale et spatiale pour pouvoir observer les panaches. On étudie donc finalement l'impact de l'évolution de la résolution spectrale, du bruit radiométrique mais aussi de la méconnaissance de la spectroscopie et des aérosols sur les performances et sensibilités des différents concepts proposés pour le suivi de la concentration atmosphérique de CO₂.

Title : Monitoring CO₂ atmospheric concentration from space : performance and sensitivities of the upcoming satellite observation concepts in the shortwave infrared

Keywords : Remote Sensing, Satellite, CO₂, Shortwave infrared

Abstract : The monitoring of anthropogenic CO₂ emissions is crucial to assess the progress made towards the 2015 Paris Agreement objectives, and estimations of CO₂ atmospheric concentration from satellite observations in the near and shortwave infrared can help to reach this goal. Thus, many concepts of greenhouse gas observing satellites are planned or are currently being developed for this opening decade. The very nature of their measurements, their spectral, radiometric and spatial resolutions greatly vary depending on whether they are targeting natural and/or anthropogenic CO₂ fluxes. This work aims to study how the characteristics of these upcoming concepts impact the performance and sensitivities of the CO₂ atmospheric concentration estimations made from their measurements. For this purpose, we first present the 5AI inverse radiative transfer model that relies on the Optimal Estimation algorithm and the 4A/OP forward radiative transfer model, and it is applied on real measurements performed by the currently flying American Orbiting Carbon Observatory-2 mission. The sensitivities of the retrievals results to the accounting of the detrimental scattering effects by aerosols and to the knowledge of atmospheric gaseous absorption brought by molecular spectroscopy are especially studied. The

5AI inverse model is then applied to assess the performance of the concept proposed by the Space CARBON Observatory (SCARBO) which consists in estimating CO₂ atmospheric concentration from truncated interferograms, instead of radiance spectra like most the CO₂ observing concepts currently flying or being developed. These truncated interferograms would be measured by the NanoCarb instrument, a miniaturized imaging interferometer which could be carried on a constellation of small satellites, that would have an increased revisit frequency of anthropogenic CO₂ emission hotspots compared to single-platform satellite missions. The original measurement approach proposed but the SCARBO concept allows for an increased spatial resolution that enables to distinguish anthropogenic CO₂ emission plumes in atmospheric CO₂ retrieval results. On the other hand, a trade-off between spatial and spectral resolutions is performed in order to enable the observing concepts that rely on spectra measurements to observe CO₂ emission plumes. Thus, we finally study how spectral resolution, radiometric noise and misknowledge of scattering particles and other interfering geophysical variables, and of spectroscopic parameters impact the performance and/or sensitivities of these CO₂ observing concepts.