

Chapitre 3

La télédétection spatiale

Sommaire

3.1	Le transfert radiatif	54
3.1.1	Les sources de rayonnement	54
3.1.2	L'absorption moléculaire	55
3.1.3	L'émission spontanée	57
3.1.4	La diffusion	58
3.1.5	L'équation du transfert radiatif	59
	L'extinction pure	61
	L'ultraviolet et le visible	61
	L'infrarouge thermique et millimétrique	62
3.2	Les méthodes d'inversion	65
3.2.1	Méthodes reposant sur la connaissance du transfert radiatif	66
	Le noyau de lissage ou <i>averaging kernel</i>	67
	Le bilan d'erreur	68
3.2.2	Les réseaux neuronaux	69
3.3	Les techniques de mesure et leur complémentarité	71
3.3.1	Les réseaux au sol	71
3.3.2	Les mesures satellitales	74
	Les mesures UV-visible au nadir	74
	Les mesures en infrarouge thermique et micro-onde au nadir	76
	Les mesures en occultation au limbe	77
	Les mesures en émission thermique au limbe	79
	Les mesures en diffusion UV-visible au limbe	80
3.3.3	De l'exploitation intégrée des mesures acquises par les systèmes opérationnels	80

3.1 Le transfert radiatif

La mesure *in situ* de la composition atmosphérique n'est possible, par définition, que de manière locale et sur une gamme d'altitude réduite. La plupart des instruments permettant de mesurer la composition atmosphérique utilisent des techniques de mesure à distance, dites de télédétection. Les signatures spectrales associées au transfert du rayonnement électromagnétique à travers l'atmosphère sont la principale source d'information sur sa composition. Elles sont caractéristiques des différents gaz présents dans l'atmosphère et permettent de déterminer leur concentration. Les instruments de télédétection sont donc généralement des spectromètres ou des radiomètres. Dans cette section, nous allons décrire les interactions du rayonnement électromagnétique avec les constituants de l'atmosphère. Nous établissons ensuite l'équation générale du transfert radiatif. Cette équation établit le bilan des processus radiatifs affectant le rayonnement en un point de l'atmosphère et permet de simuler les spectres mesurés par les instruments de télédétection.

3.1.1 Les sources de rayonnement

En fonction de l'origine du rayonnement mesuré, on distingue deux types d'instruments de télédétection spatiale : la télédétection passive et active. La télédétection passive utilise des sources de rayonnement naturelles comme le soleil, l'émission thermique de la terre et de l'atmosphère, ou encore la lune ou les étoiles. Au contraire, la télédétection active utilise un rayonnement artificiel produit par l'instrument lui-même, tel qu'un faisceau laser ou un front millimétrique. La télédétection passive demande une puissance moindre que la télédétection active et est la technique généralement utilisée à bord des satellites pour la mesure de la composition de l'atmosphère. Les quelques satellites utilisant des lidars ou des radars ne font pas l'objet de nos travaux.

Le soleil et la surface terrestre émettent chacun un rayonnement électromagnétique comparable en premier ordre à celui d'un corps noir. Pour rappel, un corps noir est un corps qui absorbe tout le rayonnement qu'il reçoit et émet en retour un rayonnement thermique de manière à équilibrer le bilan radiatif. La distribution spectrale de son émission dépend alors uniquement de sa température et obéit à la loi de Planck :

$$B(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} - 1} \quad (3.1)$$

où h est la constante de Planck, k la constante de Boltzmann, c la vitesse de la lumière, ν la fréquence du rayonnement et T la température.

La distribution du rayonnement solaire correspond approximativement à celle d'un corps noir à une température de 5800K à laquelle s'ajoute une série de raies d'absorption et d'émission dues aux éléments chimiques présents dans l'atmosphère solaire. L'émission solaire a essentiellement lieu de l'ultraviolet au proche infrarouge et est maximale dans le visible. L'émission terrestre s'apparente à celle d'un corps noir à température de 288K et est maximale dans l'infrarouge thermique. La figure 3.1 montre la distribution spectrale approximative du rayonnement solaire et terrestre. Les domaines de longueur d'onde des

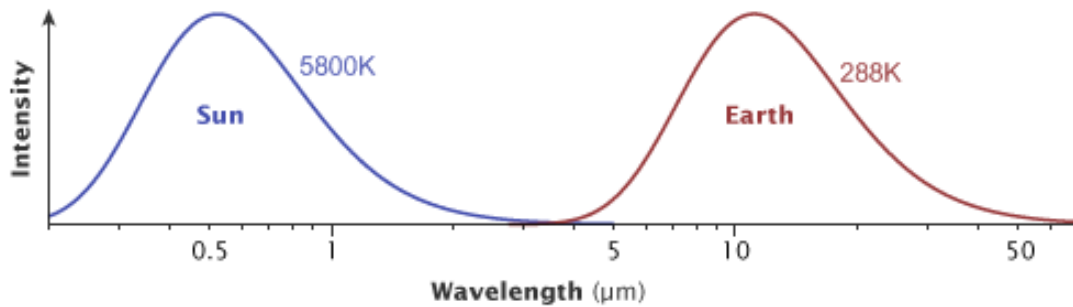


FIG. 3.1 – Distribution spectrale de l'émission de corps noirs à la température du soleil (bleu) et de la surface terrestre (rouge). Chaque courbe est normalisée. ©NASA Earth Observatory, <http://earthobservatory.nasa.gov>, 21/01/2009

émissions sont presque totalement distincts ce qui permet de différencier aisément chaque source.

3.1.2 L'absorption moléculaire

Le rayonnement électromagnétique transporte une énergie capable de provoquer des processus d'excitation, de dissociation et d'ionisation des molécules. Au cours de ces processus, les photons sont absorbés.

En fonction de leur énergie, les photons incidents peuvent provoquer différents types de transition au sein de la molécule. Dans le domaine micro-onde, l'énergie des photons incidents est faible. Elle peut néanmoins être suffisante pour faire tourner les molécules et exciter différents modes, dits de rotation pure. A plus haute énergie, dans le domaine infrarouge, l'énergie incidente devient suffisante pour exciter les modes de vibration, plus énergétiques que ceux de rotation. Enfin, dans le domaine ultraviolet et visible du spectre, l'énergie des photons est suffisante pour provoquer des transitions entre deux états électroniques d'une molécule. Comme nous l'enseigne la mécanique quantique [voir par exemple *Cohen-Tannoudji*, 2007], les transitions entre deux états liés de la molécule sont quantifiées. Le spectre de transmission présente donc des raies d'absorption caractéristiques de la molécule. Pour chaque niveau vibrationnel, la molécule peut se trouver dans différents états rotationnels. De même pour chaque niveau électronique, la molécule peut se trouver dans différents états vibrationnels et rotationnels. Ainsi, chaque transition électronique et/ou vibrationnelle possède une structure fine liée aux sous niveaux vibrationnels et/ou rotationnels de l'état excité. Plus la géométrie d'une molécule est complexe, plus elle possède de degrés de liberté de rotation et plus son spectre d'absorption est complexe. Notons que les transitions vibrationnelles ne sont possibles que si le moment dipolaire de la molécule est modifié par la vibration. Ainsi, les composés symétriques comme l'oxygène et l'azote moléculaire, qui sont les principaux gaz de notre atmosphère, n'absorbent pas dans l'infrarouge et ne participent donc pas à l'effet de serre.

La largeur des raies peut être décomposée en trois contributions : la largeur naturelle,

l'élargissement Doppler et l'élargissement de pression. La largeur naturelle est déterminée par la durée de vie du niveau excité. L'élargissement Doppler est lié à la vitesse des molécules et donc à la température. L'élargissement Doppler est environ 100 fois plus important que l'élargissement naturel. Il en résulte un profil gaussien des raies. Enfin, l'élargissement de pression est lié aux collisions entre molécules qui modifient légèrement leurs niveaux énergétiques. Cet effet est d'autant plus important que la pression augmente et on observe un élargissement significatif des raies dans les basses couches atmosphériques. De manière générale, le profil de raie est un profil de Voigt (le produit de convolution d'une fonction gaussienne et d'une fonction lorentzienne) tendant vers la gaussienne à haute altitude et vers la lorentzienne à basse altitude.

Lorsque les photons ultraviolets et visibles ont une énergie supérieure à l'énergie de liaison de la molécule, ils peuvent induire sa photodissociation. De même, des photons très énergétiques atteignant la haute atmosphère peuvent y provoquer des processus d'ionisation. Les énergies menant à ces états non liés ne sont pas quantifiées : le spectre d'absorption présente alors un continuum de photodissociation ou d'ionisation. Dans certains cas, les continua de photodissociation se superposent aux bandes d'absorption électronique. L'énergie d'ionisation est plus importante que celle de photodissociation et l'ionisation n'est possible que dans la haute atmosphère, au delà de 100 km, dans les couches accessibles aux photons solaires énergétiques.

A titre d'exemple, la figure 3.2 montre les courbes de l'énergie potentielle en fonction de la distance internucléaire pour l'état fondamental et un état électronique excité d'une molécule simple. Pour chaque état électronique, différents états vibrationnels sont représentés. Les sous niveaux rotationnels sont montrés pour un des états vibrationnels. L'axe vertical indique l'énergie nécessaire pour les transitions entre différents niveaux. L'asymptote horizontale des courbes d'énergie potentielle, pour une distance internucléaire qui tend vers l'infini, correspond à l'énergie de photodissociation.

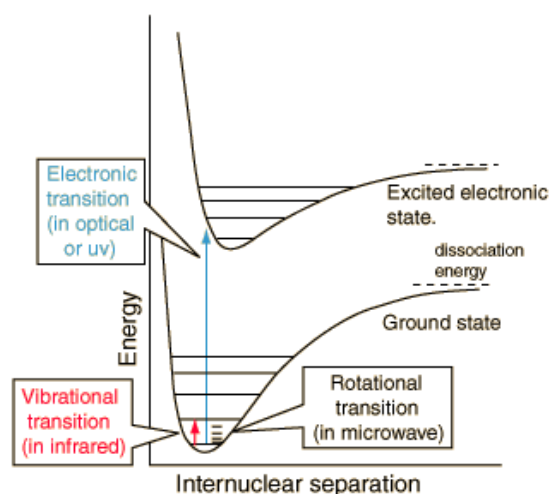


FIG. 3.2 – Schéma des courbes d'énergie potentielle pour une molécule diatomique simple.
 ©<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/hframe.html>, 25/02/2009

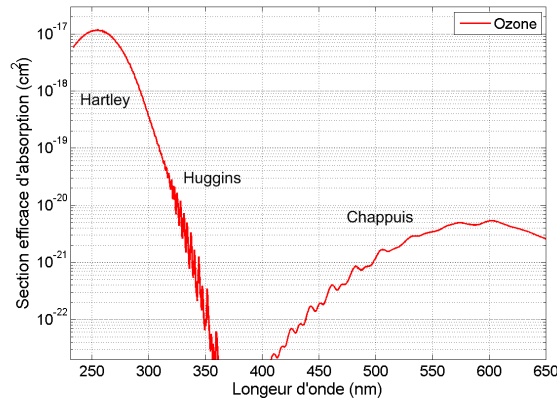


FIG. 3.3 – Section efficace d’absorption de l’ozone. Le continuum de Hartley, les bandes d’absorption de Huggins et de Chappuis sont identifiés.

De manière générale, la probabilité d’absorption du rayonnement électromagnétique d’une longueur d’onde donnée par une molécule est décrite par sa section efficace d’absorption (σ_a). La figure 3.3 montre, comme exemple, la section efficace d’absorption de l’ozone dans le domaine ultraviolet et visible. Comme déjà nous l’avons déjà dit précédemment, l’ozone absorbe fortement le rayonnement ultraviolet entre 200 et 300 nm dans le continuum de Hartley et protège la biosphère de ses effets néfastes. Sa section efficace d’absorption varie ensuite de plusieurs ordre de grandeur entre 300 et 350 nm dans les bandes d’absorption de Huggins. Les bandes d’absorption de Chappuis apparaissent dans le visible de 450 à 650 nm.

3.1.3 L’émission spontanée

Le nombre de molécules se trouvant naturellement dans un état excité dépend de la température (distribution de Boltzmann). Aux températures rencontrées dans l’atmosphère, toutes les molécules se trouvent naturellement dans l’état électronique fondamental.

Certaines molécules peuvent cependant se trouver dans un état électronique excité suite à l’absorption de photons solaires énergétiques. Elles peuvent retourner vers l’état électronique fondamental de différentes manières. La plus courante est la désexcitation par transfert d’énergie cinétique lors d’un choc avec une autre molécule. La molécule peut aussi émettre spontanément un ou plusieurs photons dont l’énergie totale correspond à l’énergie de la transition. Ces phénomènes de fluorescence et de phosphorescence sont cependant rares et ne se produisent que dans la haute atmosphère là où la densité est faible, les chocs entre molécules plus rares et la désexcitation par transfert d’énergie cinétique inefficace. Ils donnent notamment lieu aux aurores boréales et à la luminescence du ciel nocturne (*airglow*).

A température ambiante, les différents états de rotation-vibration des molécules sont, par contre, naturellement peuplés. En passant d’un niveau excité vers un niveau inférieur,

ces molécules émettent spontanément un rayonnement infrarouge dont la longueur d'onde correspond à l'énergie de la transition. Comme le corps noir, les molécules de l'atmosphère terrestre émettent, donc, un rayonnement infrarouge pour équilibrer l'énergie absorbée. L'émission n'a cependant lieu que dans les bandes d'absorption. En effet, selon la loi de Kirchoff, à l'équilibre thermodynamique local (en anglais, *Local Thermodynamic Equilibrium*, *LTE*) les coefficients d'émission et d'absorption sont égaux. (L'équilibre thermodynamique local est atteint pratiquement partout dans la troposphère et la stratosphère. Seules quelques molécules sont pas LTE dans la haute stratosphère et la mésosphère). L'atmosphère émet donc un spectre de raies infrarouges thermiques. C'est cette émission dans la troposphère qui est à l'origine de l'effet de serre.

3.1.4 La diffusion

La lumière traversant l'atmosphère terrestre est diffusée par les molécules d'air et par les particules qui s'y trouvent en suspension. La diffusion est dite élastique si, lors de l'interaction avec le diffuseur, la direction de l'onde est modifiée mais pas sa longueur d'onde. La diffusion est inélastique si elle est accompagnée d'un échange d'énergie entre l'onde et le diffuseur. La capacité des particules à diffuser le rayonnement électromagnétique est caractérisée par une section efficace de diffusion et une fonction de phase donnant la distribution angulaire du rayonnement diffusé. Pour des particules diffusantes de taille et de forme quelconque, les sections efficaces et les fonctions de phase sont très complexes. Une modélisation existe cependant pour deux cas limites de diffusion élastique : la diffusion Rayleigh et la diffusion de Mie.

La diffusion Rayleigh a lieu lorsque la taille des diffuseurs est très inférieure à la longueur d'onde. C'est donc le cas pour la diffusion du rayonnement solaire ultraviolet et visible par les molécules d'air. La section efficace de diffusion Rayleigh varie inversement à la quatrième puissance de la longueur d'onde ($\propto \frac{1}{\lambda^4}$). Le rayonnement bleu est donc plus diffusé que le rouge, ce qui explique la couleur du ciel. La fonction de phase de la diffusion Rayleigh s'écrit :

$$p(\Theta) = \frac{3}{4}(1 + \cos^2\Theta) \quad (3.2)$$

où Θ est l'angle de diffusion (angle entre la direction incidente et la direction après diffusion). La figure 3.4a montre la distribution angulaire du rayonnement diffusé Rayleigh.

La théorie de Mie est valable pour la diffusion par des particules sphériques dont le rayon est comparable à la longueur d'onde [*van de Hulst*, 1981]. Elle est représentative de la diffusion par les gouttelettes d'eau dans les nuages et par les aérosols. La section efficace de la diffusion de Mie varie inversement à la longueur d'onde ($\propto \frac{1}{\lambda}$). Sa fonction de phase dépend du rapport entre la taille des particules et la longueur d'onde. La variation de la section efficace de diffusion avec la longueur d'onde est beaucoup plus faible que pour la diffusion Rayleigh et on peut considérer que, dans le visible, elle est non-sélective. C'est pourquoi les nuages peu absorbants sont blancs. La diffusion de Mie est, par contre, directionnelle. La figure 3.4b montre la distribution angulaire du rayonnement diffusé par une particule de grande taille, telle une gouttelette d'eau. La direction préférentielle est

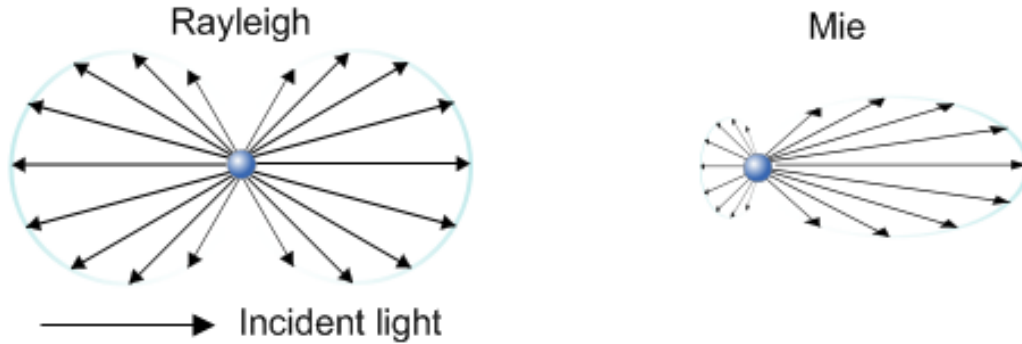


FIG. 3.4 – Distribution angulaire de la diffusion Rayleigh (à gauche) et de la diffusion Mie pour une gouttelette d'eau (à droite). L'onde incidente arrive par la gauche. ©D'après : <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/atmos/blusky.html>, 22/01/2009

vers l'avant. Un observateur voit donc certaines zones des nuages en blanc prononcé et d'autres dans un dégradé de gris. Notons, que la diffusion par des macros particules, telles que les cristaux de glaces, peut être modélisée par des modèles de "ray tracing" sur base des lois de l'optique géométrique.

Une faible partie du rayonnement, lors de sa diffusion, provoque en même temps une transition rotationnelle vers un niveau supérieur (absorption) ou inférieur (émission). La diffusion est alors inélastique et la longueur d'onde du rayonnement diffusé diffère légèrement de celle du rayonnement incident. La différence d'énergie correspond à l'énergie de transition entre les deux niveaux rotationnels. Ce phénomène de diffusion inélastique, appelé diffusion Raman, se produit essentiellement dans les basses couches de l'atmosphère. La diffusion Raman produit des interférences dans les spectres d'absorption moléculaire dans l'atmosphère. Ce phénomène est connu sous le nom d'effet Ring [*Grainger and Ring*, 1962; *Chance and Spurr*, 1997; *Vountas et al.*, 1998].

3.1.5 L'équation du transfert radiatif

L'équation du transfert radiatif rend compte de tous les processus pouvant affecter le rayonnement lors de sa traversée de l'atmosphère. Elle permet de calculer l'intensité spectrale du rayonnement ou plus précisément la luminance spectrale (I , en anglais : *spectral radiance*, dont l'unité est le W/m^3sr) en un point de l'atmosphère. Toutes les équations développées ci-après s'entendent pour une longueur d'onde donnée. Par soucis de clarté nous omettons l'indice λ .

Considérons un élément de chemin optique ds dans l'atmosphère. Le bilan des processus affectant les photons d'une longueur d'onde donnée traversant un élément de volume dans la direction \vec{s} s'écrit :

$$\frac{dI}{ds} = -\kappa_a I - \kappa_d I + \kappa_a B + \kappa_d J \quad (3.3)$$

Les coefficients d'absorption κ_a et de diffusion κ_d sont donnés par les sections efficaces d'absorption σ_a et de diffusion σ_d (incluant la diffusion Rayleigh, Mie et Raman) à la longueur d'onde donnée multipliées par la concentration en absorbeur et diffuseur, respectivement. Les premiers termes du membre de droite de cette équation correspondent aux pertes de rayonnement par diffusion et absorption, le troisième terme correspond à l'émission thermique au sein de l'élément ds (B est la fonction de Planck), et le dernier terme correspond à l'apport de la diffusion de rayonnement provenant d'autres directions (J) dans la direction \vec{s} . Cet inventaire des pertes et sources de rayonnement est schématisé à la figure 3.5.

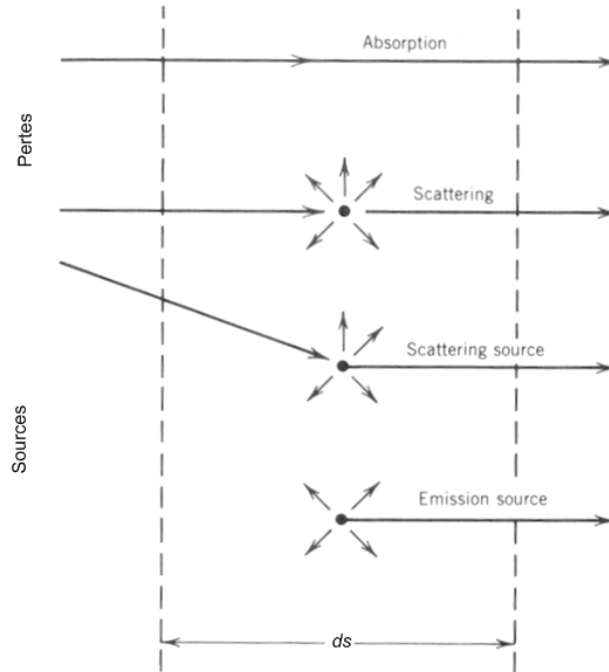


FIG. 3.5 – Inventaire des différents processus pouvant affecter le rayonnement électromagnétique dans l'élément ds . ©C. Barbier, Physique et méthode de la télédétection, DEA en Sciences, ULg, 2005-2006.

On définit l'épaisseur optique τ telle que :

$$d\tau = -(\kappa_a + \kappa_d)ds \quad (3.4)$$

et l'albédo de diffusion :

$$\omega = \frac{\kappa_d}{\kappa_a + \kappa_d} \quad (3.5)$$

L'équation de transfert radiatif s'écrit alors sous sa forme canonique :

$$\frac{dI}{d\tau} = I - S \quad (3.6)$$

avec S la fonction source qui vaut $(1 - \omega)B + \omega J$

La résolution de cette équation dépend fortement de la forme de la fonction source S . Dans le cas de l'atmosphère terrestre, la résolution diffère selon le domaine spectral envisagé.

L'extinction pure

Considérons tout d'abord le cas simple d'un milieu purement absorbant. La résolution de l'équation de transfert radiatif est alors directe. L'intensité transmise à travers un échantillon de longueur s est donnée par la loi de Beer-Lambert :

$$I(s) = I_0 e^{-\tau} = I_0 e^{-\int_s^0 \sigma_a n ds'} \quad (3.7)$$

Le rayonnement s'atténue exponentiellement en fonction de la distance parcourue le long du chemin optique. Cette loi exponentielle négative se retrouve dans la majorité des équations régissant le transfert radiatif dans l'atmosphère.

L'ultraviolet et le visible

Dans le domaine ultraviolet et visible, la source de rayonnement la plus usitée est le soleil. De rares instruments, comme GOMOS, utilisent aussi le rayonnement des étoiles. Le flux solaire est directionnel et sa direction incidente est caractérisée par l'angle solaire zénithal et l'angle solaire azimutal. Ces derniers varient en fonction de l'heure de mesure, de la latitude et de la saison. Les émissions de la surface terrestre et au sein de l'atmosphère sont elles négligeables. Le terme source de l'équation du transfert radiatif s'écrit comme la somme du rayonnement solaire direct F_{soleil} (atténué selon la loi de Beer-Lambert) diffusé dans la direction s (angle Θ) (diffusion simple ; en anglais, *single scattering*) et du rayonnement diffus provenant de toutes les directions du ciel et diffusé dans la direction s (angles Θ') (diffusion multiple ; en anglais, *multiple scattering*) :

$$\frac{dI}{d\tau} = I - \frac{\omega}{4\pi} \int_{4\pi} I p(\Theta') d\Omega - \frac{\omega}{4\pi} p(\Theta) e^{-\tau} F_{soleil} \quad (3.8)$$

Dans le cas d'un satellite observant l'atmosphère terrestre au nadir, il faut encore ajouter un terme lié à la réflectivité, ou albédo, de la surface et/ou des nuages. L'albédo varie fortement selon la nature de la surface. Dans l'UV-visible, on estime l'albédo à, par exemple, 0,05 pour les océans, 0,15 pour la végétation, 0,75 pour la neige sale et 0,95 pour la neige fraîche.

L'équation du transfert radiatif dans l'UV-visible est une équation intégro-différentielle, dont la résolution est complexe et nécessite l'utilisation de modèles numériques. Les modèles existants utilisent différentes techniques mathématiques de résolution. Généralement, ces techniques se basent sur une division de l'atmosphère en couches plan-parallèles homogènes et incluent une correction additionnelle pour tenir compte de sa sphéricité. Citons, par exemple, la méthode aux ordonnées discrètes DISORT (Discret Ordinates Radiative

Transfert) [*Stamnes et al.*, 1988]; le modèle linéarisé LIDORT (Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer) [*Spurr et al.*, 2001] qui permet d'obtenir une expression analytique des jacobiens du modèle; ou encore la méthode de "Doubling-Adding" [*De Haan et al.*, 1987; *Stamnes*, 2001] qui a l'avantage de proposer une approche plus physique du problème.

La Figure 3.6 schématise, en exemple, quelques possibilités de chemins optiques parcourus par les photons reçus par un satellite regardant vers le sol (nadir) et pour l'approximation plan-parallèle. Le rayonnement solaire pénètre dans l'atmosphère selon l'angle solaire zénithal. Il traverse des couches de gaz absorbant et est ensuite diffusé une ou plusieurs fois et/ou réfléchi par le sol et/ou les nuages vers le satellite. Il traverse une deuxième fois les couches absorbantes supérieures avant de sortir de l'atmosphère pour atteindre le satellite. Tous les photons n'atteignent par contre pas les couches absorbantes les plus basses. Le rayonnement mesuré par l'instrument satellitaire porte la signature spectrale des différents gaz absorbants présents le long de son parcours dans l'atmosphère. Les algorithmes de transfert radiatif permettent de calculer la longueur du chemin optique parcouru à travers chaque couche de l'atmosphère et de déterminer les signatures d'absorption présentes dans le spectre mesuré. Pour ce faire, les modèles numériques utilisent les propriétés de l'atmosphère (densité, pression, température, concentration des gaz absorbant, ...), les propriétés de la surface (albédo de surface, altitude), les sections efficaces mesurées en laboratoire, et la géométrie du problème (angle solaire zénithal, angle de visée de l'observateur). Les propriétés des nuages et celles des aérosols doivent également être prises en compte dans le calcul du transfert radiatif. L'angle solaire zénithal est un paramètre très important. Plus il est élevé, c'est-à-dire plus le soleil est bas sur l'horizon, plus le chemin optique dans la stratosphère sera long. Dans certaines conditions, l'amplification du chemin optique stratosphérique et par conséquent de l'absorption (par l'ozone) le long de celui-ci est telle que ces couches deviennent optiquement épaisses et masquent la troposphère. Lorsque le SZA est élevé il devient également nécessaire de tenir compte de la sphéricité de l'atmosphère et de la réfraction.

Dans l'ultraviolet, suite à la forte variation de la section efficace d'absorption de l'ozone, le rayonnement pénètre plus ou moins profondément dans l'atmosphère en fonction de sa longueur d'onde. La mesure du spectre d'absorption en fonction de la longueur d'onde permet alors d'obtenir une information sur la distribution verticale de l'ozone à une résolution verticale limitée.

Des instruments de télédétection UV-visible à visée tangentielle (limbe) à l'atmosphère existent également. Pour cette configuration, les principes du transfert radiatif restent les mêmes à la différence de géométrie près. Notons que la modélisation de la sphéricité et de la réfraction de l'atmosphère est, dans ce cas, très importante.

L'infrarouge thermique et millimétrique

Dans le domaine infrarouge thermique et micro-onde, le phénomène de diffusion Rayleigh est négligeable. L'émission thermique de l'atmosphère et celle de la surface terrestre (lorsque celle-ci se trouve dans le champ de vue de l'observateur) sont les principales

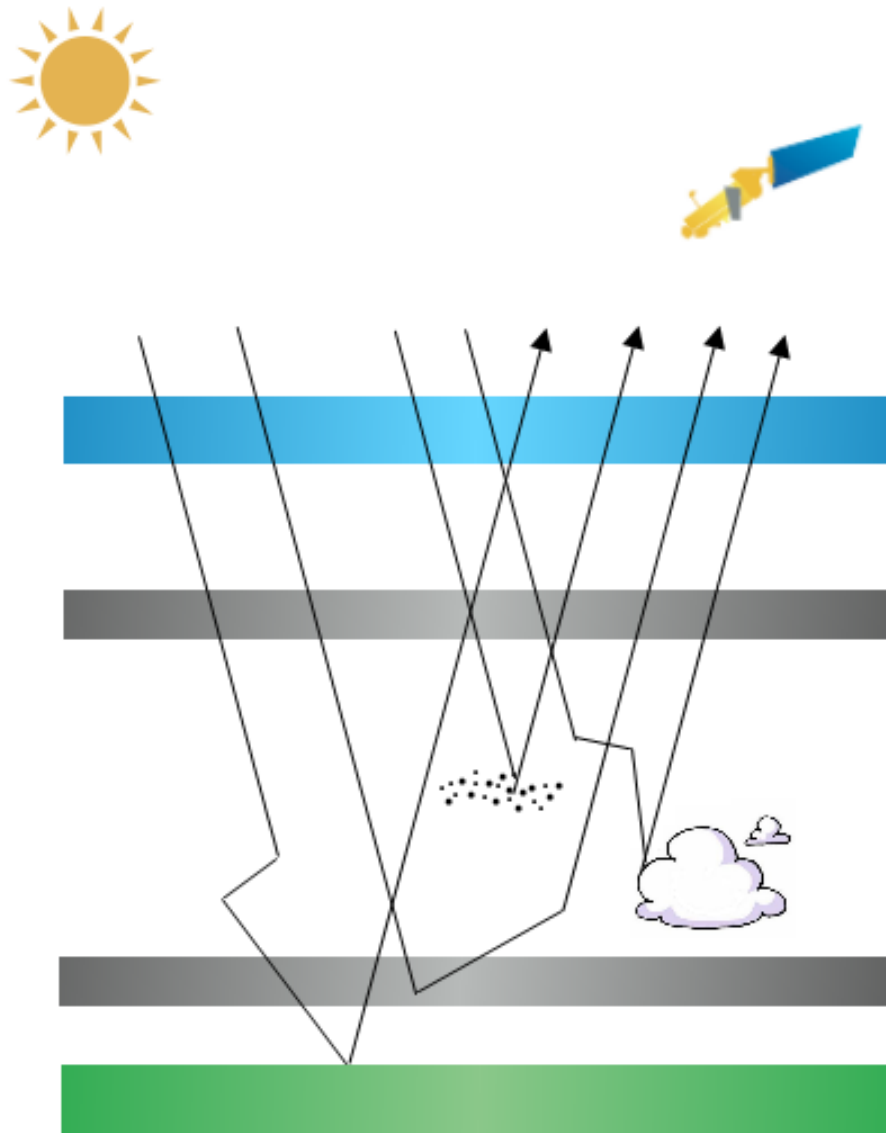


FIG. 3.6 – Schéma montrant différents chemins optiques possibles du rayonnement ultraviolet et visible diffusé par l'atmosphère et vu par un satellite à visée nadir. Ce schéma est réalisé pour l'approximation plan-parallèle. Les couches grisées schématisent la présence de gaz absorbants dans l'UV-visible.

sources de rayonnement. Notons que, contrairement au domaine ultraviolet et visible où on considère le rayonnement solaire incident, les observations dans le domaine infrarouge et micro-onde sont possibles jour et nuit. A l'équilibre thermodynamique local, la fonction source est égale à la fonction de Planck $B(T)$ (eq. 3.1) et la solution de l'équation du transfert radiatif est donnée par :

$$I_s = I_0 e^{-\tau} + \int_s^{-\infty} n\sigma_a B(T(s)) e^{-\int_s^{s'} n\sigma_a ds'} ds \quad (3.9)$$

Le premier terme du membre de droite de cette équation correspond à l'émission de la surface terrestre. Ce terme est nul si ni la surface, ni le soleil, ne se trouve dans le champ de vue de l'observateur, par exemple pour un instrument placé au sol et visant au zénith, ou un satellite visant au limbe. Le second terme correspond à l'émission thermique, le long du chemin optique, atténuée selon la loi de Beer-Lambert. L'atmosphère émet comme un corps noir mais uniquement aux fréquences des raies d'absorption.

La figure 3.7 schématise le transfert radiatif en émission infrarouge pour un instrument à visée au limbe. Tout le long du chemin optique tangent à l'atmosphère les molécules émettent un rayonnement thermique. Le rayonnement émis en un point est ensuite en partie réabsorbé par les gaz actifs dans l'infrarouge présents le long de son trajet vers le satellite. Le rayonnement émis loin du satellite traverse l'atmosphère et les couches absorbantes sur une plus grande longueur que celui émis en avant du point tangent. Il sera, en conséquence, plus absorbé. Pour certaines altitudes tangentées, le rayonnement émis le long de la portion du chemin optique la plus éloignée du satellite traverse deux fois les couches stratosphériques absorbantes telles que la couche d'ozone. Notons que pour les instruments à visée au limbe, les algorithmes de transfert radiatif doivent également tenir compte de la réfraction dans l'atmosphère. Le chemin optique réel n'est pas rectiligne mais légèrement courbé.

Le principe du transfert radiatif pour les instruments thermiques à visée nadir est similaire. Ils observent l'émission thermique de la surface à laquelle se superposent les émissions et absorptions au sein de l'atmosphère.

L'équation du transfert radiatif infrarouge est plus simple que dans l'UV-visible. Le rayonnement reçu par l'instrument est la somme des émissions en chaque point du chemin optique, atténuées par l'absorption entre ce point et le satellite. La difficulté réside, ici, dans le calcul des intensités, des profils et de l'élargissement des raies ro-vibrationnelles. Ceux-ci sont calculés à partir des paramètres de raies provenant de banques de données spectroscopiques. Ces paramètres sont obtenus en laboratoire et sont entachés d'une incertitude qui peut être importante pour certaines molécules moins étudiées. Dans le chapitre 5, nous étudions en détail ces processus d'émission et d'absorption concourants le long du chemin optique afin de déterminer la résolution horizontale des mesures de l'instrument infrarouge à visée au limbe MIPAS. Nous utilisons la banque de données spectroscopiques HITRAN 2004 [Rothman *et al.*, 2005] pour développer d'un modèle de transfert radiatif bidimensionnel infrarouge pour MIPAS.

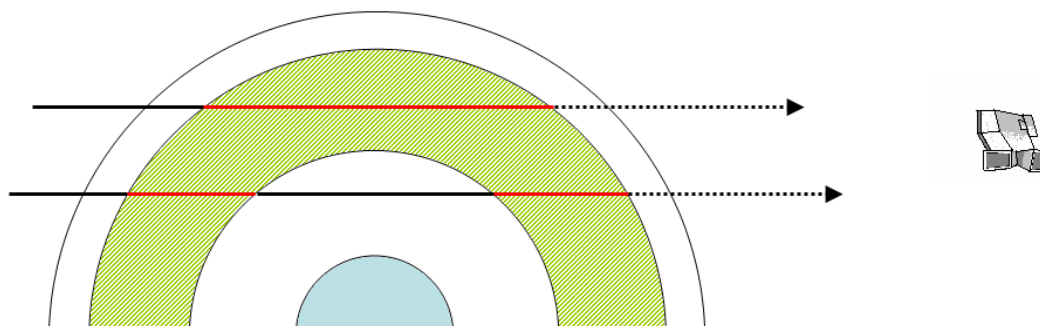


FIG. 3.7 – Chemin optique du rayonnement thermique infrarouge vu par un instrument à visée au limbe. La couche verte schématise la présence de gaz actifs dans l'infrarouge. Les portions rouges du chemin optique indiquent les portions où ont lieu une émission et une absorption concourantes.

3.2 Les méthodes d'inversion

Mis à part le sondage direct de l'atmosphère à partir de ballons sondes, la mesure de la composition atmosphérique utilise généralement des techniques de télédétection. Les instruments de télédétection, généralement des spectromètres ou des radiomètres mesurent, dans une certaine gamme de longueur d'onde, l'intensité d'un rayonnement électromagnétique (luminance) ayant traversé l'atmosphère. Il ne s'agit donc pas d'une mesure directe de la concentration des gaz dans l'atmosphère, mais bien de son action sur un rayonnement électromagnétique. Comme nous l'avons expliqué dans la section précédente, la modélisation du transfert radiatif entre la source de rayonnement et l'instrument permet de calculer la luminance spectrale observée lorsqu'on connaît les caractéristiques de l'instrument et l'état de l'atmosphère. C'est en réalité le problème inverse que l'on cherche à résoudre, soit déduire la distribution verticale d'un gaz atmosphérique à partir des mesures spectroscopiques.

De par sa nature, la mesure de télédétection, quelle que soit sa géométrie de visée, contient une information limitée sur la distribution du gaz en traces étudié. Cette limite est due en partie aux aspects techniques de la mesure et au bruit dont elle est entachée mais également au fait que certaines composantes du champ atmosphérique sondé ne contribuent pas au spectre mesuré. On ne peut donc pas inverser des mesures de télédétection un profil atmosphérique avec une résolution verticale ou horizontale infinie mais uniquement un nombre limité de pièces d'information indépendantes. En termes mathématiques, on dira que le problème de l'inversion est mal-posé et sous-contraint. Il y a plus d'inconnues que d'équations et une solution unique n'existe pas. Pour converger, les algorithmes d'inversion doivent donc contenir des contraintes additionnelles. Celles-ci peuvent, par exemple, prendre la forme d'une contrainte sur la résolution verticale du profil inversé. L'inversion peut être restreinte à la colonne totale du constituant pour les mesures au nadir ou à un nombre limité de colonnes partielles. Une autre forme de contrainte a priori est l'utilisation

de données statistique sur l'état de l'atmosphère sous la forme d'une climatologie du profil recherché et de sa variabilité. Les profils obtenus ne sont plus alors de simples mesures du véritable état atmosphérique, mais plutôt la meilleure estimation de celui-ci connaissant la mesure et l'état a priori de l'atmosphère. La contribution des contraintes a priori peut être importante là où la mesure contient peu ou pas d'information sur le profil atmosphérique, par exemple concernant sa structure fine ou sous des nuages troposphériques optiquement épais.

3.2.1 Méthodes reposant sur la connaissance du transfert radiatif

Parmi les méthodes d'inversion nécessitant la compréhension détaillée des phénomènes physiques à l'origine du transfert radiatif, la plus couramment utilisée est la méthode d'estimation optimale (Optimal Estimation) basée sur le théorème de Bayes. Ces méthodes furent d'abord appliquées en géophysique interne pour l'étude de la structure interne de la Terre à partir de mesures sismiques [*Backus and Gilbert*, 1968, 1970] et furent, ensuite, transposées à l'inversion du profil de température et de constituants atmosphériques à partir des mesures de télédétection atmosphérique [*Mateer*, 1965; *Twomey*, 1970; *Conrath*, 1972; *Rodgers*, 1976, 1990, 2000]. En particulier, le formalisme matriciel développé par Rodgers pour l'estimation optimale est remarquable car il permet une caractérisation complète du contenu d'information du profil inversé et un calcul détaillé du bilan d'erreur. On peut montrer que ce formalisme s'applique également à d'autres méthodes d'inversion basées sur une compréhension des phénomènes physiques à la base du transfert radiatif, comme la régularisation de Philips-Tikonov [*Phillips*, 1962; *Tikhonov*, 1963a]. Nous reprenons ci-après les bases théoriques de la caractérisation des profils atmosphériques inversés en suivant le formalisme de Rodgers. Elles seront utilisées à plusieurs reprises dans différents chapitres de cette thèse.

Soit x le vecteur d'état atmosphérique de dimension $n \times 1$ que l'on cherche à déterminer par l'inversion. Les n éléments de x sont, par exemple, les concentrations d'ozone à différents niveaux d'altitude ou de pression. Le vecteur y de dimension $m \times 1$ représente la mesure. Les éléments de y sont par exemple, les intensités mesurées à différentes longueurs d'ondes dans une gamme où le constituant étudié possède des signatures spectrales. La physique qui relie les quantités y et x n'est pas parfaitement connue de l'observateur, mais elle peut être estimée à l'aide d'un modèle de transfert radiatif. Ce modèle direct (*forward model*) $F(x)$ relie la quantité mesurée y au vecteur d'état x :

$$y = F(x, b) + \epsilon_y \quad (3.10)$$

Le modèle direct fait appel à un certain nombre de paramètres b qui ne sont pas non plus parfaitement connus de l'utilisateur. Il s'agit par exemple des sections efficaces d'absorption provenant des banques de données spectroscopique, des paramètres de calibration de l'instrument, ... Le vecteur ϵ_y correspond, quant à lui, à l'erreur de mesure à proprement parler.

Le modèle direct peut être linéarisé du autour de l'état de référence x_a, \hat{b} :

$$y - F(x_a, \hat{b}) = K_x(x - x_a) + K_b(b - \hat{b}) + \epsilon_y \quad (3.11)$$

Les matrices K de dimension $m \times n$ sont les jacobiens du modèle direct ou fonctions de poids (*weighting functions*). Elles expriment la sensibilité du modèle direct, c'est à dire de la quantité mesurée :

- $K_x \equiv \frac{\partial F}{\partial x}$ est la sensibilité de la mesure à l'état atmosphérique réel. Chaque élément du vecteur $y - F(x_a, \hat{b})$ est une moyenne pondérée des éléments du vecteur $x - x_a$ dont les poids sont donnés par les lignes correspondantes de la matrice K_x .
- $K_b \equiv \frac{\partial F}{\partial b}$ est la sensibilité de la mesure aux paramètres du modèle.

Le modèle inverse (*inverse model*) I décrit comment le profil inversé \hat{x} est obtenu à partir de la mesure :

$$\hat{x} = I(y, b, c) \quad (3.12)$$

Le vecteur c représente les paramètres qui sont utilisés dans le modèle inverse mais qui ne l'étaient pas dans le modèle direct. On peut également linéariser le modèle inverse autour de l'état y_0, \hat{b}, \hat{c} :

$$\hat{x} - I(y_0, \hat{b}, \hat{c}) = G_y(y - y_0) + G_b(b - \hat{b}) + G_c(c - \hat{c}) \quad (3.13)$$

Les matrices G de dimension $n \times m$ sont les matrices de gain ou fonctions de contributions. Elles expriment la sensibilité de l'inversion, c'est-à-dire du profil inversé :

- $G_y \equiv \frac{\partial I}{\partial y}$ est la sensibilité de l'inversion à la mesure de radiance. Chaque colonne de G_y est la contribution au profil inversé due à un changement unitaire dans l'élément correspondant du vecteur de mesure y .
- $G_b \equiv \frac{\partial I}{\partial b}$ est la sensibilité de l'inversion aux paramètres du modèle direct.
- $G_c \equiv \frac{\partial I}{\partial c}$ est la sensibilité de l'inversion aux paramètres d'inversion.

Finalement, à l'aide du modèle direct et du modèle inverse, le profil inversé peut-être exprimé comme une fonction de l'état réel de l'atmosphère :

$$\hat{x} = I(F(x, b) + \epsilon_y, \hat{b}, \hat{c}) \quad (3.14)$$

Ici, le modèle inverse utilise la meilleur estimation connue des paramètres \hat{b} et \hat{c} .

Si nous linéarisons cette fonction autour de l'état $F(x_a, \hat{b}), \hat{b}, \hat{c}$, introduisons le modèle direct linéarisé et utilisons les définitions précédentes des matrices de poids et de gain, nous obtenons :

$$\hat{x} = I(F(x_a, \hat{b}), \hat{b}, \hat{c}) + G_y K_x (x - x_a) + G_y K_b (b - \hat{b}) + G_y \epsilon_y \quad (3.15)$$

Le modèle d'inversion est généralement construit de façon à ne pas introduire de biais, soit tel que :

$$I(F(x_a, \hat{b}), \hat{b}, \hat{c}) = x_a \quad (3.16)$$

Le noyau de lissage ou *averaging kernel*

On défini le noyau de lissage (*averaging kernel*) A :

$$A \equiv G_y K_x = \frac{\partial \hat{x}}{\partial x} \quad (3.17)$$

pour obtenir l'équation connue sous le nom d'équation de caractérisation de Rodgers :

$$\boxed{\hat{x} = x_a + A(x - x_a) + \epsilon} \quad (3.18)$$

où ϵ contient les erreurs d'inversion et de mesure : $\epsilon = G_y(K_b(b - \hat{b})) + G_y\epsilon_y$

L'équation de caractérisation de Rodgers décrit la relation entre le profil réel (x), le profil a priori (x_a) et le profil inversé (\hat{x}). Chaque ligne de l'*averaging kernel* (A) montre comment, à une altitude donnée, le système lisse ou amplifie les différences entre l'état réel de l'atmosphère et le profil a priori. La valeur inversée à une altitude donnée contient donc une contribution de chaque altitude du profil réel pondérée par la ligne correspondante de la matrice d'*averaging kernel*. Les colonnes peuvent, elles, être vues comme la réponse du système à une perturbation unitaire de l'état réel de l'atmosphère. Il est important de remarquer que l'information contenue dans l'*averaging kernel* provient aussi bien du modèle direct de transfert radiatif (K) que du modèle d'inversion (G). Une série de paramètres de diagnostic peut être obtenue mathématiquement à partir de cette matrice (comme par exemple, le nombre de degrés de liberté du signal, les vecteurs propres et les valeurs propres, la sensibilité à la mesure,...) Ces paramètres de diagnostic permettent une analyse complète du contenu d'information des profils inversés [Rodgers, 2000]. La caractérisation des profils d'ozone inversés à partir des mesures en diffusion UV-visible au nadir de l'instrument GOME, présentée au chapitre 4 de cette thèse, détaille ces différents paramètres et montre comment les combiner utilement aux études de validation par observations corrélatives.

Le bilan d'erreur

L'équation de Rodgers permet d'établir le bilan d'erreur total du profil inversé.

$$\hat{x} - x = (A - I)(x - x_a) + G_y(K_b(b - \hat{b})) + G_y\epsilon_y \quad (3.19)$$

On distingue trois contributions à l'erreur sur le profil inversé.

Le premier terme est l'erreur de lissage vertical. C'est l'erreur due au fait que le système de mesure n'a pas accès à toutes les composantes du profil et que l'inversion doit être contrainte. Le profil inversé est donc une version lissée de l'état réel qui contient une part plus ou moins importante des contraintes a priori. La covariance de l'erreur de lissage verticale est donnée par $S_s = (A - I)S_a(A - I)^T$ et ne peut être estimée que si l'on peut estimer la variabilité de l'atmosphère réelle autour de l'état a priori.

Le second terme correspond à l'erreur sur les paramètres du modèle dont on ne connaît qu'une meilleure estimation. Ils interviennent et dans le modèle direct et lors de l'inversion. La covariance de l'erreur sur les paramètres du modèle est donnée par $S_p = A_b S_b A_b^T$.

Le troisième terme est la contribution de l'erreur de mesure à proprement parler au profil inversé. Sa covariance est donnée par $S_m = G_y \epsilon_y G_y^T$.

Notons que ce formalisme ne considère que la dimension verticale des profils inversés. Tout au long de cette thèse, et en particulier dans les chapitres 5 et 6 qui traitent des mesures en émission infrarouge au limbe, nous cherchons à étendre notre analyse à une

atmosphère bidimensionnelle et à caractériser l'erreur due au lissage de champs atmosphériques non-homogènes dans le plan horizontal, ainsi que l'erreur de comparaison entre deux systèmes aux lissages horizontaux différents.

3.2.2 Les réseaux neuronaux

Les réseaux neuronaux artificiels (*neural networks*) proposent une approche résolument différente pour traiter le problème de l'inversion.

Ces modèles statistiques sont inspirés de l'observation des vrais neurones biologiques et sont basés sur le principe de l'apprentissage par l'expérience [Rosenblatt, 1958]. Le réseau neuronal est constitué d'un ensemble d'éléments de calcul simple, les neurones, connectés aux autres par une valeur poids (synapse). Durant une phase d'apprentissage, le réseau neuronal apprend la relation statistique entre des jeux de donnée *input* et *output* et détermine les poids à attribuer à chaque liaison entre les neurones pour approximer correctement cette relation. Contrairement aux méthodes traditionnelles, le réseau neuronal ne nécessite pas la compréhension en détail de la physique du problème, ni la conception étape par étape d'un modèle rendant compte de ces phénomènes physiques.

Ces systèmes furent initialement développés pour résoudre des problèmes de classification et de régression. Les premiers modèles de réseaux neuronaux comportaient de nombreuses limitations mathématiques et leur gamme d'application était restreinte [Minsky and Papert, 1969]. Ce n'est qu'avec l'apparition d'algorithmes plus complexes et en particulier du "perceptron multicouche" (*multi-layer perceptron*) que leur application a pu se généraliser. Ce type de réseau neuronal permet en théorie d'approximer n'importe quelle fonction [Hornik et al., 1989]. En particulier, les "perceptrons multicouches" permettent la résolution de problèmes hautement non-linéaires tels que ceux rencontrés dans le domaine des sciences atmosphériques. Ils ont notamment été appliqués au problème de l'inversion du profil d'un constituant atmosphérique à partir des mesures de télédétection [Aires et al., 2001; Del Frate et al., 2002; Müller et al., 2003].

Le principe de fonctionnement des perceptrons multicouche est schématisé à la figure 3.8. Ces systèmes sont composés de minimum trois couches de neurones. Chaque neurone d'une couche est connecté à tous les neurones de la couche précédente et de la couche suivante. Il n'existe, par contre, pas de liaison au sein d'une même couche.

Soit o_i l'*output* du neurone i . Le neurone j est connecté aux L neurones de la couche précédente et reçoit leur *output* via les liaisons pondérée par les poids w_{ji} . Le neurone j reçoit donc le signal d'activation a_j :

$$a_j = \sum_{i=1}^L w_{ji} o_i + w_{j0} \quad (3.20)$$

ou w_{j0} est le terme de biais du neurone j . Ce terme peut être vu comme la contribution d'un neurone 0 connecté à tous les autres et dont l'*output* vaut 1 ($o_0 = 1$).

Le neurone j réagit à son activation a_j en effectuant la fonction de transfert simple f_j

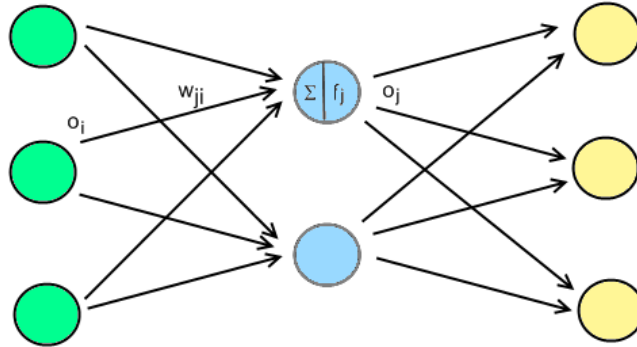


FIG. 3.8 – Schéma d'un réseau neuronal de type perceptron multicouche.

et envoie son *output* o_j aux neurones de la couche suivante :

$$o_j = f_j(a_j) \quad (3.21)$$

Pour que le réseau neuronal puisse résoudre des problèmes non-linéaires, la fonction de transfert f_j doit elle-même être non-linéaire. On utilise généralement une fonction sigmoïde comme la tangente hyperbolique.

Dans le cas de l'inversion de profils atmosphériques à partir de mesures de télédétection, les neurones de la première couche reçoivent en entrée les luminances spectrales mesurées à différentes longueurs d'onde, ainsi que d'autres paramètres nécessaires à l'inversion comme la date, la latitude et l'angle solaire zénithal. Les neurones de la dernière couche donnent en sortie la concentration du constituant atmosphérique à différentes altitudes. L'algorithme d'entraînement effectue une optimisation non-linéaire des poids attribués aux liaisons synaptiques pour un jeu de spectres de l'instrument et un jeu de profils atmosphériques coïncidents provenant de mesures indépendantes.

Le principal avantage des réseaux neuronaux est qu'ils ne nécessitent pas la simulation détaillée du transfert radiatif menant aux spectres mesurés. Seule une compréhension générale de la technique de mesure est nécessaire afin de déterminer les paramètres d'*input* les plus appropriés et qui, statistiquement, permettront de couvrir le plus grand nombre possible de cas. Une fois entraînés, ces algorithmes possèdent également une rapidité d'exécution beaucoup plus grande que les méthodes physiques qui nécessitent des calculs fastidieux pour chaque inversion. Il est, par contre, difficile de caractériser le contenu d'information des profils obtenus, car la méthode ne fournit aucun paramètre similaire aux *averaging kernels* des méthodes physiques. Il est évident que la qualité des profils inversés va dépendre fortement de la procédure d'entraînement et donc du jeu de profils d'entraînement choisi. Remarquons que ces données d'entraînement sont souvent obtenues à partir d'autres systèmes de télédétection qui nécessitent eux-mêmes un algorithme d'inversion ou de simulation numérique dont la validité est parfois difficile à estimer. Dans le chapitre 8 de ce travail, nous étudions les capacités d'un réseau neuronal pour l'inversion de profils d'ozone à partir des spectres UV-visible mesurés au nadir par l'instrument GOME et comparons les résultats à ceux obtenus par un algorithme classique d'estimation optimale.

3.3 Les techniques de mesure et leur complémentarité

Différents types d'instruments destinés à la mesure de la composition de l'atmosphère ont été développés depuis le début du 20^{ème} siècle. L'exploration de l'atmosphère a débuté grâce aux mesures depuis le sol et surtout aux mesures en ballon. L'année géophysique internationale 1957-1958 a donné un nouvel essor à l'aéronomie avec le lancement du premier satellite artificiel, Spoutnik, par la Russie et le départ des premiers réseaux d'instruments de mesure basés au sol. Le premier instrument de mesure de la colonne totale d'ozone est un spectro-photomètre UV conçu par *Dobson and Harrison* [1926]. La colonne totale d'ozone est déduite de l'absorption différentielle mesurée à différentes paires de longueurs d'onde discrètes dans les bandes de Huggins. Les premiers sondages de la distribution verticale d'ozone à bord de ballons stratosphériques datent à peu près de la même époque. Plus de 150 spectromètres Dobson et d'une version améliorée, les spectromètres Brewer, sont actuellement déployés dans le monde. Avec plus de 60 stations lâchant régulièrement des ozonosondes, ils forment le réseau primaire de veille de l'ozone de l'organisation météorologique mondiale (OMM; *en anglais, World Meteorological Organisation, WMO*).

Une variété de techniques de mesure de la composition atmosphérique existe actuellement, chacune avec ses avantages et ses inconvénients. Les molécules détectables, la gamme d'altitude accessible, par exemple, varient en fonction des caractéristiques techniques de l'instrument. Les différents instruments offrent ainsi une vue limitée mais complémentaire de l'atmosphère terrestre. Dans ce travail, nous nous intéressons spécifiquement aux instruments permettant de mesurer la distribution verticale de l'ozone et de quelques autres gaz en traces. Ci-après, nous donnons un aperçu des techniques de sondage vertical ainsi qu'une description spécifique des instruments étudiés et dont les mesures sont utilisées dans la suite de ce travail.

3.3.1 Les réseaux au sol

Les principaux instruments basés au sol sont regroupés en réseaux généralement opérés sous les auspices de l'OMM. Ces réseaux regroupent un ensemble de stations réparties géographiquement dans une région spécifique ou dans le monde entier. En particulier, un réseau est dédié aux changements de composition de l'atmosphère : le NDACC (*Network for Detection of Atmospheric Composition Change*). D'abord baptisé NDSC (*Network for Detection of Stratospheric Change, Kurylo and Zander* [2001]), il fut créé en 1991 sous le patronage de l'UNEP et du programme de veille de l'Atmosphère Globale de l'OMM (GAW, *Global Atmospheric Watch*). Une diversité d'instruments sont opérés à partir des stations au sol, permettant la mesure de diverses molécules comme l'ozone, la vapeur d'eau, le dioxyde d'azote, les composés halogénés, les gaz à effet de serre, ... Ils donnent accès à la colonne totale de ces gaz ou à leur distribution verticale du sol généralement jusqu'à la moyenne stratosphère. La facilité d'accès et de maintenance des instruments permet de maintenir une stabilité de la qualité des mesures dans le temps. La figure 3.9 montre la localisation géographique des stations du NDACC. Bien que des stations soient réparties de l'Arctique à l'Antarctique, les réseaux n'offrent, cependant, qu'une couverture pseudo-

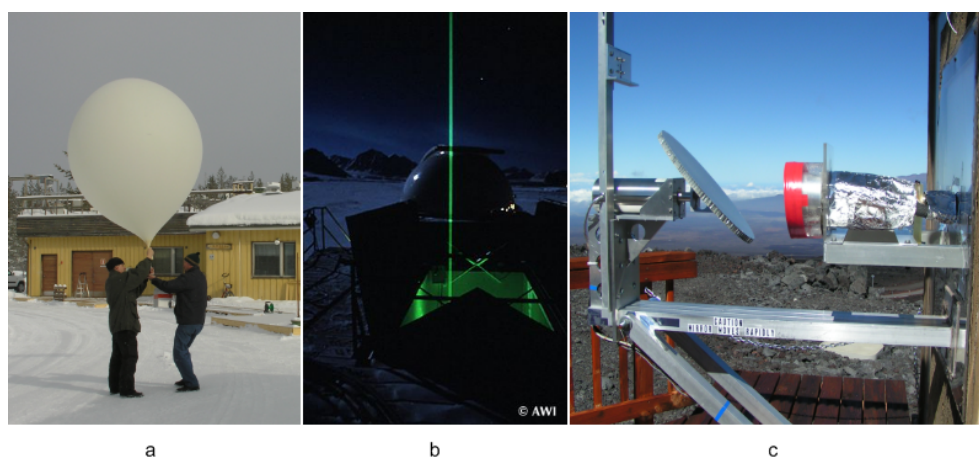


FIG. 3.10 – Photos d'un ballon ozonsonde à Sodankylä (Finlande), du lidar de Ny-Alesund (Spiztberg) et du radiomètre micro-onde de Mauna Loa (Hawaii) ©J.-C. Lambert et AWI.

let, l'une dans les bandes d'absorption de l'ozone et l'autre peu ou pas absorbée. Le profil de la concentration d'ozone est déduit de l'absorption différentielle aux deux fréquences. La photo présentée à la figure 3.10b montre le faisceau laser émit par un système DIAL ozone. La mesure est effectuée de nuit par ciel clair et fournit la concentration d'ozone de 8-15 km à 45-50 km en fonction des conditions de mesure et du système lidar. La résolution verticale varie de 300 m à 3 km avec l'altitude. Le temps d'intégration de la mesure dépend des conditions météorologiques et de la puissance du laser et est en moyenne de 4 heures. Pendant ce temps les masses d'air se déplacent au-dessus de la station. Au final, la masse d'air analysée durant la mesure peut s'étendre sur plusieurs centaines de kilomètres. Après une éruption volcanique majeure, la mesure lidar dans la basse stratosphère est fortement corrompue par la présence d'aérosols. Dans ces conditions, des techniques basées sur la diffusion Raman peuvent être utilisées pour améliorer la qualité des profils dans la basse stratosphère [McGee *et al.*, 1993]. D'autres types de lidar sont également utilisés pour la télédétection atmosphérique. Notamment, le lidar Rayleigh utilisant un seul faisceau dans le visible ou l'ultraviolet est utilisé pour la mesure du profil de température. Des systèmes lidar existent également pour la mesure des aérosols, de la vapeur d'eau, des nuages, ...

Le radiomètre à ondes millimétriques est composé d'une antenne enregistrant l'émission spontanée due aux transitions rotationnelles des molécules composant l'atmosphère à une série de fréquences discrètes. La Figure 3.10c montre une photo de ce type d'instrument. Le domaine spectral micro-onde donne accès à d'autres molécules et a surtout l'avantage d'être insensible à la présence de nuages. En effet le rayonnement de grande longueur d'onde n'est pas affecté par la présence de gouttelettes ou d'aérosols dont la taille est inférieure à la longueur d'onde. Les mesures micro-onde permettent d'obtenir le profil d'ozone dans la haute et moyenne stratosphère de 20-25 km à 70 km mais avec une faible résolution verticale de l'ordre de 8 à 12 km. Le temps d'intégration des mesures varie de 15 min à 2 heures. [par exemple Kämpfer, 1995; Tsou *et al.*, 2000].

3.3.2 Les mesures satellitales

Les mesures satellitales permettent un échantillonnage régulier de l'atmosphère avec une gamme de latitude et/ou une heure locale déterminées par le type d'orbite. Les mesures en géométrie nadir offrent une couverture globale de la Terre en quelques jours. Via la géométrie au limbe les mesures par satellite donne accès aux altitudes de la haute stratosphère et de la mésosphère peu ou pas accessibles depuis le sol. La sensibilité des mesures dans les basses couches de l'atmosphère est par contre limitée. Les instruments satellitaires souffrent, en outre, d'une dégradation instrumentale inévitable dans un environnement spatial agressif qui peu affecter la qualité des mesures. Le temps de vie nominal des instruments est seulement de quelques années.

Ci-après, nous donnons un aperçu des techniques de télédétection spatiale passive actuelles permettant la mesure du profil de l'ozone et donnons quelques exemples d'instruments. Nous différencions les types d'instruments en fonction de leur géométrie de visée, du type de rayonnement observé et de la gamme spectrale.

Les mesures UV-visible au nadir

Les spectromètres UV-visible à géométrie nadir enregistrent le spectre de la lumière solaire réfléchié par la surface ou les nuages et rétrodiffusée par diffusion Rayleigh et Mie vers le satellite. La géométrie de ce type de mesure est illustrée à la figure 3.11. Les spectromètres nadir UV-VIS sont le plus souvent placés sur une orbite polaire héliosynchrone. Ainsi, le satellite passe toujours à une latitude donnée à la même heure locale. Pour un moment dans l'année donné les mesures à une même latitude sont donc effectuée dans les mêmes conditions d'ensoleillement, l'angle solaire zénithal variant avec la saison. Ce type d'instrument, initialement dédié à la mesure de la colonne totale de l'ozone, permet également la mesure de la colonne d'une série d'autres gaz possédant des signatures dans le domaine UV-visible : le dioxyde d'azote (NO_2), l'monoxyde de brome (BrO), le formaldéhyde ($HCHO$), le dioxyde de soufre (SO_2), ... La mesure au nadir offre une haute résolution horizontale, déterminée au premier ordre par le champ de vue de l'instrument (de quelques dizaines à quelques centaines de kilomètres), et permettent une couverture globale de la terre en quelques jours. La mesure est cependant limitée à la mesure de colonnes verticales et de profils à faible résolution verticale. La mesure est évidemment restreinte à la partie éclairée de la planète, et est donc impossible en Arctique et Antarctique durant la nuit polaire.

Les mesures de la composition atmosphérique par des spectromètre UV-visible à géométrie nadir ont débuté dans les années septante avec la mission BUV de la NASA. Elles ont été poursuivies par le programme américain de monitoring de l'ozone couplant la série des spectromètres TOMS de la NASA et SBUV et SBUV/2 de la NOAA et bientôt de leur successeur NPOESS/OMPS. Le premier instrument européen, GOME (*Global Ozone Monitoring Experiment*, Burrows et al. [1999]), a été mis en orbite par l'ESA en 1995 à bord de la plateforme ERS-2 et est toujours en opération. La plateforme occupe une orbite polaire héliosynchrone dont le noeud descendant coupe l'équateur à 10h30 locale. L'instru-

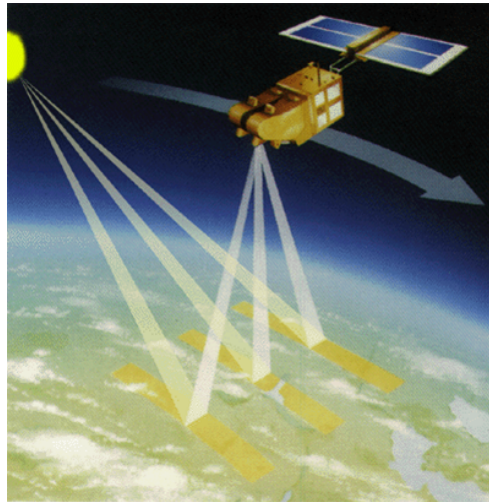


FIG. 3.11 – Illustration de la géométrie de visée au nadir des mesures du spectre UV-visible rétrodiffusé. ©ESA.

ment GOME est un ensemble de quatre spectromètres à réseau permettant la mesure du spectre solaire rétrodiffusé par l'atmosphère de 240 à 793 nm avec une résolution variant de 0.2 à 0.4 nm. Il comporte également trois systèmes de mesure de la polarisation de la lumière (PMD, *Polarization Measurement Device*) et des lampes de calibration interne. Un miroir balaye l'atmosphère perpendiculairement à la trajectoire de l'orbite et permet d'enregistrer trois spectres intégrés sur des pixels consécutifs d'ouest en est. L'empreinte au sol de ces pixels a une surface d'environ 320 km perpendiculairement à l'orbite fois 40 km parallèlement à celle-ci. Un dernier spectre est enregistré à la résolution de $960 \times 40 \text{ km}^2$ lors du mouvement de retour du miroir. Ce mode de balayage est illustré à la figure 3.12. Il permet une couverture globale de la Terre en trois jours à l'équateur. Les mesures GOME ont permis d'inverser des colonnes totales d'ozone de haute qualité [par exemple *Van Roozendaal et al.*, 2006] formant une série temporelle de plus de 13 ans. Suite à la forte variation de la section efficace d'absorption de l'ozone dans l'UV, les spectres GOME contiennent également une information sur le profil vertical de l'ozone. La caractérisation et l'étude du contenu d'information de ces profils à faible résolution verticale est l'objet des chapitres 4 et 8 de cette thèse.

GOME est le premier instrument d'une série de spectromètres UV-visible européens. L'instrument SCIAMACHY a été lancé à bord du satellite Envisat en 2002, suivi d'OMI embarqué sur la plateforme américaine EOS-Aura et de GOME-2 dont le premier exemplaire a été mis en orbite sur le satellite MetOp-A conjointement par l'ESA et l'EUMETSAT en 2006. Une des principales améliorations apportées par ces nouveaux instruments est une résolution horizontale accrue et une plus grande largeur de balayage atteignant, par exemple $40 \times 80 \text{ km}^2$ pour GOME-2 avec une couverture globale en un jour et demi à l'équateur. Notons que la Chine a également débuté une série d'instruments du même type et baptisé FY-3 SBUS/TOU.

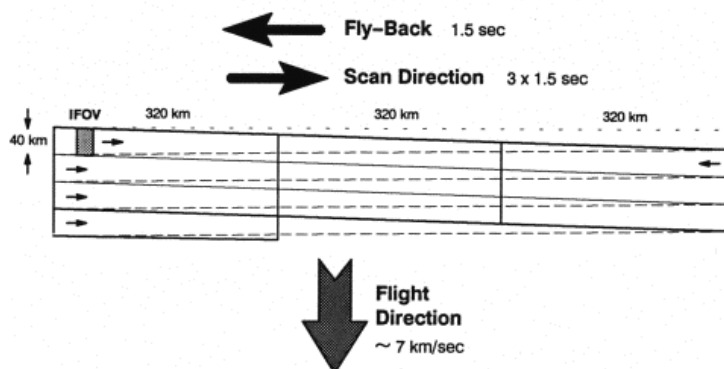


FIG. 3.12 – Empreinte au sol des pixels GOME. ©ESA.

Les mesures en infrarouge thermique et micro-onde au nadir

Des spectromètres à géométrie nadir existent également dans le domaine spectral infrarouge et micro-onde. Ils enregistrent les émissions thermiques provenant de la surface terrestre et de l'atmosphère. Les mesures dans les gammes spectrales infrarouge et micro-onde donnent accès à diverses molécules, et en particulier aux gaz à effet de serre qui par définition possèdent d'importantes signatures dans l'infrarouge (pour rappel, l'ozone est également un gaz à effet de serre). Contrairement aux instruments UV-visible qui mesurent principalement des continua électroniques, les instruments infrarouges enregistrent un spectre de raies ro-vibrationnelles. La variation du profil de raie avec la pression permet d'obtenir un profil vertical à résolution limitée du rapport de mélange du gaz étudié. Comme le rayonnement thermique observé au nadir est émis par la surface et dans les basses couches de l'atmosphère (l'émission diminuant avec la densité atmosphérique), les instruments infrarouges nadirs sont principalement destinés à l'étude de la troposphère et de la basse stratosphère. En outre les mesures dans l'infrarouge et les micro-ondes sont possibles jour et nuit puisque la source de rayonnement est indépendante du soleil.

Les mesures en infrarouge nécessitent une résolution spectrale élevée pour résoudre au mieux les différentes raies et pouvoir analyser leur profil. Pour atteindre cette haute résolution spectrale, on utilise notamment des spectromètres à transformée de Fourier (FTS, *Fourier Transform Spectrometer*) basés sur le principe de l'interféromètre de Michelson. L'instrument enregistre l'interférogramme du spectre en fonction de la différence de marche entre deux miroirs. Le spectre peut ensuite être reconstitué par une transformée de Fourier de l'interférogramme. On peut, par exemple, citer l'instrument IASI ("Interféromètre Atmosphérique de Sondage Infrarouge"), développé par le CNES et l'EUMETSAT et orbitant à bord de la plateforme MetOp-A depuis 2006. IASI enregistre le spectre d'émission infrarouge nadir entre 3.7 - 15.5 μm à haute résolution spectrale. Un autre instrument de ce type, TES (Tropospheric Emission Spectrometer) a été mis en orbite par la NASA à bord du satellite EOS-Aura en 2004. La colonne totale et le profil à basse résolution d'ozone, de monoxyde de carbone (CO), de vapeur d'eau et de méthane, par exemple, sont inversés

avec succès de ces mesures.

Les mesures en occultation au limbe

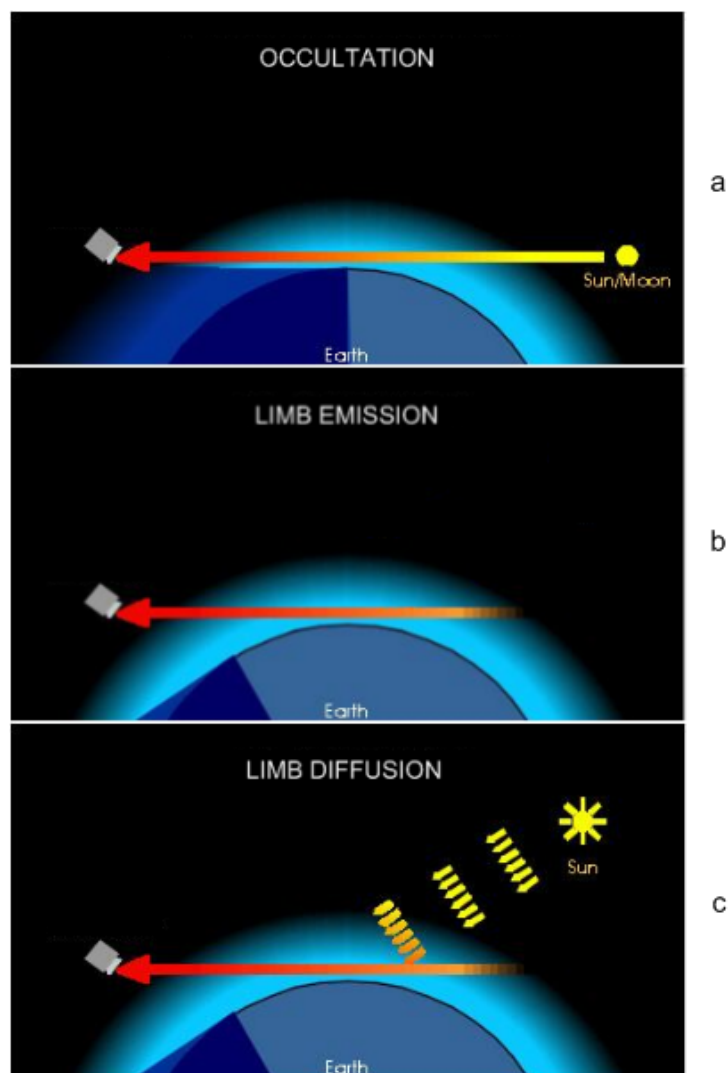


FIG. 3.13 – Illustration des différentes techniques d'observation à géométrie de visée au limbe. ©D'après IUP Bremen, <http://www.iup.uni-bremen.de/sciamachy/instrument/modes/index.html>, 27/04/2009.

La géométrie de visée au limbe, c'est-à-dire tangentielle à l'atmosphère, permet d'obtenir beaucoup plus aisément le profil vertical de la concentration des gaz en traces. Cette méthode utilise différentes sources de rayonnement et différentes gammes spectrales. La première technique consiste à observer le lever ou le coucher d'un astre, le soleil, la lune, ou éventuellement une étoile à travers le limbe de l'atmosphère terrestre, comme illustré à la Figure 3.13a. Les mesures en occultation solaire sont effectuées tant dans la gamme

UV-visible que dans le proche infrarouge, en fonction des molécules que l'on veut étudier. L'enregistrement successif des spectres d'absorption à différentes altitudes tangentes permet d'inverser un profil stratosphérique du constituant avec une résolution verticale de l'ordre de 1 à 3 km. L'accès à la troposphère et en particulier aux couches les plus basses est, cependant, limité par la présence de nuages et de couches d'aérosols dans le champ de vision. Les mesures en occultation solaire ont l'avantage d'une source de rayonnement puissante. La longueur du chemin optique tangent permet d'étudier certaines molécules dont la concentration est très faible, mais limite la résolution horizontale des mesures. La couverture géographique et l'échantillonnage sont, également, limités par le nombre de levers/couchers de soleil observables, soit environ 14 occultations par jour pour les instruments en orbite circulaire basse. Les occultations lunaires et surtout stellaires permettent d'augmenter quelque peu le nombre de mesures par orbite. L'occultation stellaire demande cependant la conception d'un instrument complexe comportant de nombreuses parties mobiles, ce qui peut nuire à sa longévité dans l'environnement spatial.

Au cours des vingt dernières années, de nombreux instruments basés sur la technique d'occultation ont été mis en orbite. Parmi ces instruments, deux missions d'occultation solaire de la NASA, SAGE II (*Stratospheric Aerosols and Gas Experiment II*, Mauldin et al. [1985]) et HALOE (*Halogen Occultation Experiment*, Russell III et al. [1993]) ont contribué de manière significative à la surveillance de la distribution verticale de l'ozone dans la stratosphère terrestre. SAGE II est un spectromètre UV-visible qui a fonctionné à bord du satellite ERBS (*Earth Radiation Budget Satellite*) entre 1984 et 2005. L'orbite héliosynchrone inclinée à 57° permet d'observer 14 occultations par jour et offre un échantillonnage géographique de 80°N à 80°S en un an. Les mesures de SAGE II ont permis d'inverser avec succès une série temporelle longue de plus de vingt ans de la distribution de l'ozone, des aérosols atmosphériques, du dioxyde d'azote et de la vapeur d'eau. SAGE II a été suivi d'une version améliorée SAGE III à bord de la plateforme METOR 3M de décembre 2001 à mars 2006. HALOE est, quand-à-lui, un instrument proche infrarouge donnant accès à la distribution de l'ozone mais également d'autres gaz en traces : HCl , HF , CH_4 , H_2O , NO , NO_2 , température, aérosols, ... Il a fonctionné à bord du satellite UARS (*Upper Atmosphere Research Satellite*) entre 1991 et 2005 sur une orbite inclinée à 57° offrant un échantillonnage géographique similaire à celui de SAGE II.

Basés sur la même technique d'occultation, les instruments POAM II et III (*Polar Ozone and Aerosol Measurement*, Glaccum et al. [1996]; Lucke et al. [1999]), développés par le *Naval Research Laboratory* (NRL), à bord des plateformes françaises SPOT-3/4 (*Satellite pour l'Observation de la Terre*), ont permis un échantillonnage géographique complémentaire des zones polaires de 63° à 88°S et de 55° à 71°N . POAM II a fonctionné de 1993 à 1996 et POAM III de 1998 à 2005.

Plus récemment en 2004, l'instrument canadien ACE-FTS (*Atmospheric Chemistry Experiment Fourier Transform Spectrometer*, Bernath et al. [2005]), utilisant également la technique d'occultation solaire, a été mis en orbite à bord de la plateforme SCISAT-1. ACE-FTS est un spectromètre à transformée de Fourier opérant dans le domaine infrarouge. Les profils d'ozone stratosphérique à haute résolution inversés à partir de ces mesures continuent les séries temporelles en occultation solaire.

A bord de la plateforme européenne Envisat depuis 2002, l'instrument GOMOS (*Ozone Monitoring by Occultation of Stars*, Kyrölä et al. [2006]) est basé sur la technique d'occultation stellaire dans le domaine UV-visible. Jusqu'à présent seules les mesures nocturnes ont permis d'inverser des profils d'ozone. L'orbite quasi-polaire d'Envisat offre une couverture globale de Pôle à Pôle et la technique d'occultation stellaire permet d'obtenir un nombre plus élevé de profils par orbite que l'occultation solaire.

Les mesures de ces six instruments sont utilisées à plusieurs reprises dans les différents chapitres de cette thèse comme mesures de référence. Le chapitre 7 discute la consistance entre ces différentes missions et leur possibilité d'utilisation intégrée. Il y a encore d'autres satellites utilisant l'occultation, mais que nous n'utilisons pas dans la suite de ce travail.

Les mesures en émission thermique au limbe

Une autre technique de télédétection au limbe est l'observation de l'émission thermique infrarouge et micro-onde de l'atmosphère. Cette technique permet d'augmenter considérablement le nombre de mesure par orbite, vu qu'elle ne dépend plus d'un événement de coucher ou de lever particulier. Les mesures peuvent être effectuées jour et nuit et successivement. Comme pour l'occultation solaire, l'instrument enregistre plusieurs spectres en visant différentes altitudes tangentiellement à l'atmosphère (Figure 3.13b). L'émission a lieu le long de tout le chemin optique tangent, traversant l'atmosphère sur plusieurs centaines de kilomètres. Ainsi, comme pour l'occultation, on obtient un profil à haute résolution verticale mais à résolution horizontale limitée. La mesure de l'émission thermique nécessite le refroidissement des détecteurs à une température inférieure à celle de l'atmosphère (pour éviter une émission thermique au sein même des détecteurs). L'embarquement d'un cryostat ou d'un système de refroidissement mécanique peut limiter fortement la longévité de la mission.

L'étude de la résolution horizontale de ce type de mesure fait l'objet du chapitre 5 de cette thèse. Nous nous intéressons en particulier à l'instrument MIPAS (*Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding*, Fischer et al. [2008]). MIPAS vole à bord d'Envisat depuis 2002 sur une orbite quasi-polaire héliosynchrone à une altitude de 800 km. MIPAS est un spectromètre à transformée de Fourier enregistrant l'émission thermique dans l'infrarouge de 650 cm^{-1} à 2400 cm^{-1} . Les détecteurs sont refroidis par un système Peltier mécanique. Dans son mode d'opération nominal, MIPAS enregistre le spectre d'émission au limbe en visant en arrière le long de l'orbite d'Envisat. Une séquence complète balaie verticalement l'atmosphère aux altitudes tangentes de 68 à 6 km par intervalle de 3 km. En mars 2004, l'instrument a été victime d'une panne technique. Les opérations ont pu reprendre en janvier 2005 mais avec une résolution spectrale réduite.

D'autres instruments utilisent également la technique d'émission infrarouge au limbe, on peut citer par exemple l'instrument TES qui possède en plus du mode de visé au nadir un mode de visée au limbe et l'instrument cryogénique CLAES (*Cryogenic Limb Array Etalon Spectrometer*) qui a fonctionné durant un an et demi à bord d'UARS en 1991.

L'instrument MLS (*Microwave Limb Sounder*, Barath et al. [1993]) de la NASA dont un premier exemplaire a fonctionné sur la plateforme UARS de 1991 à 2001 et un suivant

est en activité à bord de EOS-Aura depuis 2004, enregistre l'émission thermique du limbe dans le domaine des micro-ondes. L'instrument n'est plus un spectromètre à transformée de Fourier, mais une antenne micro-onde. Les mesures micro-onde permettent d'inverser le profil de la température, de la pression et de la composition atmosphérique dont l'ozone mais également d'autres gaz inaccessibles dans les autres domaines spectraux.

Les mesures en diffusion UV-visible au limbe

La dernière technique de visée au limbe consiste à mesurer, comme au nadir, le rayonnement UV-visible diffusé par l'atmosphère (Figure 3.13c). Cette technique est plus complexe, et l'inversion des mesures nécessite un modèle de transfert radiatif avancé. Elle permet comme les autres techniques de visée au limbe d'obtenir des profils à haute résolution verticale mais avec une résolution horizontale limitée. Comme l'instrument observe la lumière diffusée et pas directement le soleil, la mesure peut être réalisée de manière quasi continue pendant le jour et offre un meilleur échantillonnage géographique que l'occultation. Un des problèmes récurrents est la détermination précise du pointage en altitude. En effet, l'instrument ne regardant aucune source fixe, l'altitude est déduite des paramètres de l'orbite et des angles de visée de l'instrument qui souffrent d'une certaine incertitude. Notons que dans le cas des instruments en émission infrarouge et micro-onde, ce problème est contourné par l'inversion du profil de pression qui fournit un référentiel vertical.

L'instrument SCIAMACHY (*SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CartograpHY*, Bovensmann et al. [1999]) à bord de la plateforme Envisat comporte un mode de visée au limbe en plus de son mode de visée nadir et d'un mode d'occultation solaire et lunaire. La combinaison des modes nadir (permettant d'inverser la colonne totale d'ozone) et du mode limbe (permettant d'inverser des profils stratosphériques d'ozone) donne accès à la colonne d'ozone troposphérique.

3.3.3 De l'exploitation intégrée des mesures acquises par les systèmes opérationnels

Comme nous venons de le voir, l'information géophysique accessible à chaque instrument dépend fortement de ses caractéristiques techniques et des paramètres de mesure qui peuvent varier, en outre, avec la latitude et la saison. La source de rayonnement (le soleil, l'émission atmosphérique, les étoiles, la lune) et sa géométrie d'observation, le domaine spectral, le champ de vue de l'instrument et l'inclinaison de l'orbite sont quelques uns des paramètres qui déterminent la gamme de sensibilité verticale, l'échantillonnage temporel et géographique et la résolution verticale et horizontale des données atmosphériques. Les différents types de mesure offrent une vue complémentaire de l'état de l'atmosphère. L'exploitation de cette complémentarité est importante pour une meilleure compréhension et réaction aux enjeux environnementaux posés par les changements de la composition de l'atmosphère et du climat. Le Tableau 3.1 résume les propriétés des signaux géophysiques mesurés par les différents systèmes opérationnels d'observation en fonction de leurs caractéristiques techniques.

Comme nous l'avons vu au chapitre 2 l'atmosphère terrestre est variable et structurée. La distribution des gaz en traces varie dans les trois dimensions spatiales et dans le temps. Selon le domaine d'application, on s'intéressera à la distribution globale, zonale ou régionale ; intégrée verticalement ou résolue en fonction de l'altitude ; et à différentes échelles de temps. Le tableau des caractéristiques des signaux tels que capturés par les différents systèmes d'observation existants montre l'intérêt de les combiner de façon à obtenir un signal hybride qui remplisse les exigences du domaine d'application. Paradoxalement ce tableau met en lumière les difficultés auxquelles se confronte l'exploitation intégrée des données de systèmes différents. En effet, l'intégration des différents jeux de données n'est pas simple. Le couplage de séries temporelles pour l'étude des tendances soulève des problèmes comme la différence de résolution et de sensibilité verticale, un possible biais, ou toute différence de contenu d'information entre les jeux de données. De même, la comparaison de données de satellite avec celles au sol en vue de leur validation, ou leur ingestion dans des modèles de prévision chimique nécessitent une étude approfondie et une caractérisation détaillée des jeux de données individuels. Dans ce travail nous proposons une caractérisation multidimensionnelle du contenu d'information du profil d'ozone inversé à partir de différents instruments satellitaires et nous générons, notamment, des outils qui devraient faciliter une utilisation intégrée de ces données atmosphériques.

Le dénominateur commun à toute tentative d'intégration est la présence d'erreur propre aux opérations d'intégration ou de combinaison de jeux de données. Le bilan d'erreur complet d'une comparaison est étudié en détail au chapitre 6. Nous en retiendrons, outre les erreurs de mesure, les termes propres à la méthode d'intégration elle-même, incluant l'erreur liée aux différences d'échantillonnage et de lissage des structures atmosphériques entre les systèmes d'observation. L'approche originale de cette thèse est d'estimer systématiquement l'impact de ces différences dans les quatre dimensions de l'atmosphère : latitude, longitude, altitude et temps. Dans le chapitre 4, nous étudions les propriétés de lissage vertical des mesures en diffusion UV-visible à géométrie nadir. Dans le chapitre 5, nous analysons les propriétés de lissage horizontal des mesures en émission infrarouge au limbe de l'atmosphère. Dans le chapitre 6, nous comparons l'erreur de lissage horizontal aux autres termes du bilan d'erreur pour un cas réel de comparaison entre les profils d'ozone MIPAS et les données corrélatives provenant des réseaux au sol. Dans le chapitre 7, nous étudions les structures méridiennes et temporelles de jeux de données couvrant des régions géographiques et des périodes de temps très différentes. Finalement, dans le chapitre 8, nous étudions comment, lorsque combinées par un réseau neuronal, les propriétés de systèmes différents se retrouvent dans le produit hybride qui en résulte.

	Nadir		Limbe			Réseaux au sol
	Diffusion UV-VIS	Emission IR-MW	Diffusion UV-VIS	Emission IR-MW	Occult. stellaire	
Spatial	10-300 km		250-800 km			ponctuel-200 km
Résolution horizontale						
Gamme géographique	globe éclairé	globe	globe éclairé	globe	globe	pseudo-global
Echantil. géographique	global en 1 à 6 jours		global en quelques jours	quelques jours	varié	10 à 150 stations
Vertical	4-15 km		1-4 km			150 m à 8 km
Résolution verticale						
Gamme d'altitude	sommet des nuages à 45 km	0 à 40 km	10 à 100 km (dépend du constituant)			0 à 60 km
Temporel	1h fixe du jour	1h fixe du jour et de la nuit	1h fixe du jour	1h fixe du jour et de la nuit	varié, la nuit	varié
Echantil. Temporel						

TAB. 3.1 – Propriétés des signaux géophysiques mesurés par différents systèmes opérationnels en fonctions de leur caractéristiques techniques. Les valeurs indiquées sont qualitatives.