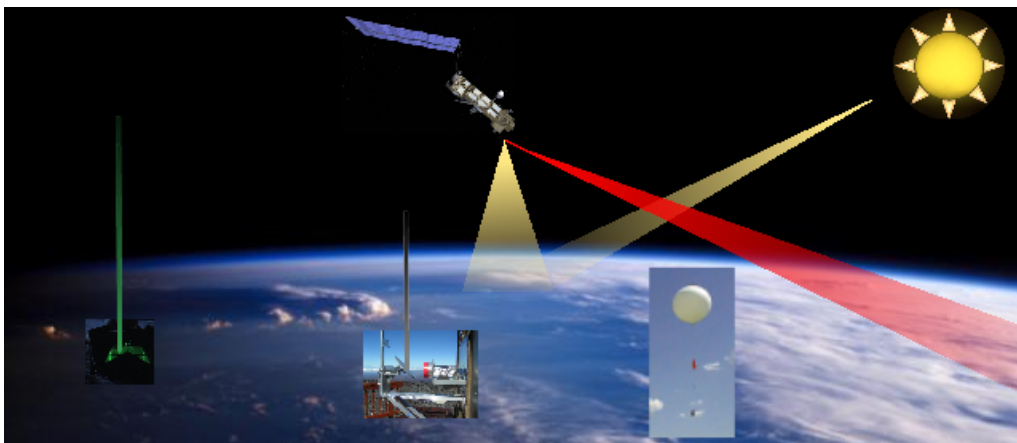


FACULTE DES SCIENCES
Institut d'Astrophysique et de Géophysique
INSTITUT D'AERONOMIE SPATIALE DE BELGIQUE
Synergistic Exploitation of Atmospheric Data

Implémentation du système global pour la
mesure de la composition atmosphérique :
concepts et méthodes pour une analyse intégrée
des données satellitales



Dissertation présentée par
Coralie DE CLERCQ
en vue de l'obtention du grade de
Docteur en Sciences

Année académique 2008-2009

©Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique

Synergistic Exploitation of Atmospheric Data

Avenue Circulaire 3, 1180 Bruxelles

<http://www.aeronomie.be>

©Université de Liège

Faculté des Sciences, Institut d'Astrophysique et de Géophysique

Place du XX Août 9, 4000 Liège

<http://www.ulg.ac.be>

Couverture :

Sondage de l'atmosphère par différents instruments du système global pour la mesure de la composition atmosphérique. (Photomontage à partir d'une photo de la Terre prise par la NASA à bord de la Station Spatiale Internationale.)

Remerciements

Le travail présenté dans ce manuscrit de thèse a été réalisé à l'Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique à Bruxelles, en collaboration avec l'Institut d'Astrophysique et de Géophysique de l'Université de Liège.

Je tiens en particulier à remercier le promoteur de cette thèse, Jean-Christopher Lambert, pour m'avoir permis de travailler au sein de son groupe à l'IASB et m'avoir proposé des sujets de recherche passionnants et porteurs. Son soutien tout au long des étapes de réalisation de cette thèse et ses remarques pertinentes et constructives m'ont permis de mener à bien ce travail. Il n'a jamais compté les heures qu'il me consacrait et était toujours prêt à me faire profiter de sa compétence, de son expérience scientifique, ainsi que de sa culture générale. Je remercie également Jean-Claude Gérard pour avoir accepté d'être le co-promoteur de cette thèse à l'Université de Liège. Il a toujours marqué son intérêt et son enthousiasme pour mon travail. Tout au long de ces quatre années de recherches, il a été disponible et prêt à me donner ses conseils avisés. Je le remercie particulièrement pour sa relecture attentive de mon manuscrit. Un grand merci également à Emmanuel Mahieu et Sophie Godin-Beekmann pour avoir accepté de faire partie de mon comité d'accompagnement de thèse. Je tiens aussi à saluer Dominique Fonteyn et Yasmine Calisesi qui ont initialement fait partie de ce comité d'accompagnement.

J'adresse également mes remerciements à Pierre Magain, Martine De Mazière, Sophie Godin-Beekmann, Emmanuel Mahieu, Jean-Claude Gérard et Jean-Christopher Lambert pour avoir accepté d'être les membres de mon jury.

Un grand merci à mes collègues José Granville et Pierre Gerard pour leur support technique dans la gestion de la quantité importante de données informatiques et le traitement des graphiques. Je les remercie également pour leur bonne humeur quotidienne et pour la bonne ambiance qui règne dans l'équipe. Je remercie également ma nouvelle collègue Sophie Vandebussche qui s'est plongée dans la lecture de mon manuscrit dès son arrivée dans l'équipe. Ses questions et ses conseils m'ont permis de mieux appréhender la rédaction de cette thèse. Merci également à Ariane, Isabelle, Gaia, Christophe, Nicolas, Marielle et Anne, ainsi qu'à tous mes collègues de l'IASB dont la porte reste toujours ouverte pour un petit conseil ou une grande discussion.

Je tiens également à remercier toutes les personnes de mon entourage qui, de près ou de loin, se sont intéressées à mon travail et m'ont soutenue au quotidien. Je voudrais donc adresser un clin d'oeil particulier à Maxime, à mes parents et à mes amis qui ont toujours été là pour moi.

Ces recherches ont été financées par le Service Public fédéral Programmation (SPP) Politique scientifique (BELSPO) et l'Agence Spatiale Européenne (ESA) via les projets ProDEX/CINAMON, ProDEX/SECPEA et les projets CHEOPS-GOME, TASTE et Multi-TASTE. Une partie de mon travail a également été subsidiée par le projet GEOMON du 6ème Programme cadre de la Commission Européenne.

Résumé

L'impact des activités anthropiques sur la composition atmosphérique est devenu évident depuis la découverte, dans les années quatre-vingt, de la formation d'un trou dans la couche d'ozone au-dessus de l'Antarctique. Depuis lors d'autres menaces environnementales liées aux changements de la composition atmosphérique ont été mises en évidence. Parmi celles-ci, le réchauffement climatique global et la pollution de l'air sont au coeur de l'actualité.

Depuis les débuts de l'aéronomie, de nombreux instruments de mesure de la composition atmosphérique ont été développés et déployés au sol, sur ballon, sur avion et sur satellite. Chacun de ces instruments possède ses avantages et ses inconvénients et donne accès à différents aspects d'une atmosphère quadridimensionnelle variable et structurée. Les propriétés telles que la résolution, l'échantillonnage et la gamme accessible des signaux géophysiques mesurés par les systèmes opérationnels varient en fonction de paramètres techniques comme la source de rayonnement, la gamme spectrale, la géométrie de visée, le type d'orbite,... et en fonction des conditions de mesure. Les observations provenant de différents systèmes sont complémentaires. La stratégie internationale actuelle d'observation de notre environnement global vise justement à exploiter cette complémentarité via l'implémentation d'un système coordonné de systèmes d'observation globale de la Terre : le GEOSS. Ce système de systèmes réunira et combinera les données provenant de différents systèmes d'observation de la Terre dans différents domaines (surface, océans, atmosphère, cryosphère,...) pour fournir une information intégrée utile à la société.

Concernant la composition de l'atmosphère, la stratégie internationale IGACO a identifié différents moyens pour l'intégration des données. Ils incluent, entre autres, l'amélioration des algorithmes d'inversion, la caractérisation du contenu d'information réel des mesures, le développement de techniques facilitant la comparaison des mesures, la validation continue des données satellitaires, le développement d'outils pour faciliter et améliorer le couplage des séries temporelles et l'ingestion des observations dans les modèles numériques de chimie et de transport. Quoique nécessaire, l'intégration des données provenant de systèmes différents n'est pourtant pas évidente. En effet, l'utilisation intégrée des données se confronte à la présence d'erreur générées par les différences d'échantillonnage et de lissage existant entre les signaux géophysiques capturés par des instruments différents.

Le travail présenté dans ce manuscrit s'axe autour de cette stratégie d'intégration. Nous développons différents concepts et méthodes utiles à une analyse intégrée des données satellitaires. Nous tentons également d'estimer de manière systématique l'impact des différences de lissage et d'échantillonnage dans les quatre dimensions de l'atmosphère : latitude, lon-

gitude, altitude et temps. Dans un premier temps, nous étudions de manière séparée deux des principaux éléments du système d'observation globale de la composition atmosphérique : les instruments mesurant le rayonnement rétrodiffusé par l'atmosphère au nadir et les instruments mesurant l'émission infrarouge au limbe. Les mesures UV-visible au nadir ont débuté dans les années septante avec les instruments de type BUV et continuent actuellement avec les séries européennes GOME-2 et chinoise SBUS/TOU. La technique BUV permet de mesurer le profil de l'ozone avec une bonne résolution horizontale mais une faible résolution verticale et une sensibilité variant avec l'altitude. C'est pourquoi nous analysons en détail le contenu d'information et la résolution verticale du profil d'ozone tel que mesuré par GOME, le premier instrument européen de type BUV. La technique d'observation à visée au limbe offre quant à elle une meilleure résolution verticale que la technique BUV, de l'ordre de 1 à 3 km, mais une faible résolution horizontale. C'est pourquoi nous étudions ensuite la résolution et les propriétés de lissage horizontal des mesures de l'instrument européen MIPAS. La validation géophysique des données satellitaires est une des étapes essentielles à leur intégration dans un système d'observation globale. Dans la suite de ce travail, nous mettons en pratique les outils développés dans un exercice de validation géophysique des profils d'ozone MIPAS. En tenant en compte l'erreur de lissage horizontal, nous éclairons d'un jour nouveau le bilan d'erreur d'une comparaison. Dans les deux chapitres suivants nous nous intéressons non plus de manière séparée aux éléments du système d'observation global de l'atmosphère mais à leurs possibilités de couplage. Nous étudions d'abord la consistance entre sept jeux de profils d'ozone obtenus à partir d'instruments à géométrie de visée au limbe. Nous étudions les structures méridiennes et temporelles de jeux de données couvrant des régions géographiques et des périodes de temps très différentes en utilisant les réseaux au sol comme référence. Enfin, nous étudions comment les propriétés respectives des systèmes étudiés dans les chapitres précédents se retrouvent dans un produit hybride généré par un réseau neuronal.

Summary

The impact of anthropic activities on the atmospheric composition makes no doubt since the discovery, in the 1980s, of the formation of the Antarctic ozone hole every springtime. Over the last decades, other serious concerns linked to atmospheric composition changes have risen, among them global warming and air pollution have public awareness.

Since the pioneering era of aeronomy, a variety of instruments have been developed and deployed to measure the atmospheric abundance of trace gases on and from the ground, balloons and aircrafts, and from satellites. Each instrumental technique has advantages as well as disadvantages and gives access to different aspects of our four-dimensional, variable and structured atmosphere. Properties associated with a given measurement system - like the resolution, the sampling, and the range of measurable geophysical signals - vary with technical parameters such as the light source, the spectral range, the viewing geometry, the orbital configuration ... and with the measurement conditions. As a consequence, observations acquired by different measurement systems may offer interesting complementariness. Current international strategies for the monitoring and understanding of our changing environment build upon this rationale. And so does the implementation of the Global Earth Observation System of Systems (GEOSS). Aiming at providing observational information relevant to nine major societal benefit areas, this future system of systems will gather and combine data from coordinated, complementary measurement systems in different thematic domains (land, oceans, atmosphere, cryosphere ...)

Regarding the atmosphere thematic domain, the international strategy IGACO identifies different needs for data integration. They include, among others, the characterisation of the real information content of the measurements, the improvement and harmonisation of the retrieval algorithms, the development of techniques to facilitate the comparison of measurements, the continuous validation of satellite data, the development of tools to facilitate and improve the coupling of time series and the ingestion of observations in chemistry and transport numerical models. Although essential, the integration of data from different systems is not straightforward. Indeed, data integration is hampered by the presence of errors originating from the differences in sampling and smoothing of the geophysical signals captured by different instruments.

The work presented in this manuscript has been undertaken as a response to some of the integration needs identified by international strategies and by IGACO in particular. We develop different concepts and methods useful to an integrated analysis of remote sensing observations of atmospheric composition. As underlying principle, our studies consider the

impact of sampling and smoothing differences of atmospheric variability in the following four dimensions: latitude, longitude, altitude and time. In the first part, we study separately two of the principal generic components of the global atmosphere observing system: satellites measuring backscattered sunlight at their nadir, and satellites measuring limb infrared emission. Nadir UV-visible measurements of ozone were initiated in the 1970s with the BUUV instrument and they carry on with the European GOME-2 and Chinese SBUS/TOU series. The BUUV technique offers ozone profiling at good horizontal resolution but at poor vertical resolution and with altitude-dependent sensitivity. Therefore we study in details the vertical information content and the vertical smoothing properties of ozone profile data acquired by Global Ozone Monitoring Experiment (GOME), the first European instrument of the BUUV family, operating since 1995. With the limb scanning geometry, the vertical profile of atmospheric species can be retrieved with a better vertical resolution, of the order of 1 to 3 km, but now the horizontal resolution is poor. Therefore we analyse the horizontal smoothing properties of measurements by the European Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS), launched in 2002. The geophysical validation of satellite data is an essential step to their integration in a system of systems. In the following chapter, we put into practice our concepts and tools with the geophysical validation of MIPAS ozone profile data. By considering and assessing the horizontal smoothing error, we find in this validation exercise the opportunity to put a new light on the error budget of a comparison. In the two following chapters, we address issues raised by the coupling of complementary components of the global atmosphere observation system. First, we study the multi-mission consistency between seven ozone profile data records acquired by limb viewing instruments. Using ground-based networks as a reference transfer, we study the meridian and temporal connectivity of data sets covering different geographical regions and different time periods. Second, we investigate how the respective properties of the systems studied in the previous chapters show out in the hybrid product generated by a neural network.

Table des matières

1	Introduction	13
1.1	Préambule : les changements de la composition atmosphérique	14
1.2	Le système de systèmes GEOSS	15
1.3	Objectifs et plan de cette thèse	18
2	L’atmosphère terrestre	21
2.1	La structure thermique de l’atmosphère	22
2.2	L’ozone stratosphérique	23
2.2.1	Chimie de l’ozone en phase gazeuse	24
2.2.2	Diminution globale et trou d’ozone Antarctique	26
2.2.3	Le Protocole de Montréal	29
2.3	L’ozone troposphérique	31
2.4	Le réchauffement global et le changement climatique	32
2.5	Quelques autres gaz en traces dans l’atmosphère	35
2.5.1	La vapeur d’eau H_2O	35
2.5.2	Le dioxyde de carbone CO_2	37
2.5.3	Le méthane CH_4	37
2.5.4	L’hémioxyde d’azote N_2O	39
2.5.5	Le dioxyde d’azote NO_2	39
2.5.6	L’acide nitrique HNO_3	40
2.6	Le rôle de la dynamique	41
2.6.1	La pseudo-force de Coriolis	41
2.6.2	La dynamique troposphérique	41
2.6.3	La dynamique stratosphérique	45
3	La télédétection spatiale	53
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
3.2	Les méthodes d’inversion	65

3.2.1	Méthodes reposant sur la connaissance du transfert radiatif	66
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
3.3.3	De l'exploitation intégrée des mesures acquises par les systèmes opérationnels	80
4	On the geophysical information captured by GOME nadir-scattered ultraviolet ozone profiler	83
	Abstract	86
4.1	Introduction	86
4.1.1	Ozone and associated environmental stakes	86
4.1.2	ERS-2 GOME	87
4.1.3	Objectives	88
4.2	Ozone profile data sets	89
4.2.1	GOME OPERA R2	89
4.2.2	Ground-based reference data sets	90
4.3	Characterisation of retrieved information content	90
4.3.1	Averaging kernels	90
4.3.2	Degrees of freedom of the signal	91
4.3.3	Eigenvalues and eigenvectors	93
4.3.4	Vertical sensitivity to the measurement	96
4.3.5	Vertical smoothing error of GOME OPERA R2	99
4.4	Ground-based comparaisons	101
4.4.1	Tropospheric ozone column	101
4.4.2	Ozone vertical distribution	105
4.5	Discussion and conclusion	107
4.5.1	General discussion	107
4.5.2	Long-term stratospheric ozone depletion and polar ozone loss	110
4.5.3	Tropospheric chemistry and air quality	111
4.5.4	Tropospheric ozone as a dynamical tracer	112
5	On the geophysical information captured by MIPAS limb infrared emission profiler	113
	Analysis of MIPAS Limb radiance	117
5.1	Introduction	117
5.2	The MIPAS instrument	118
5.3	Limb-scanning sequence and orbital progression	119
5.4	Simplified radiative transfer model	121
5.4.1	Radiative transfer basics	121
5.4.2	Calculation of the absorption cross section	121
5.4.3	Ray tracing model	122

5.5	Two-dimensional modelling of MIPAS radiance	123
5.5.1	Synthetic spectra	123
5.5.2	Line-of-sight contribution to radiance	126
5.5.3	Angular contribution to radiance	126
5.6	Shape of contribution to radiance	128
5.6.1	Spatial extent of the full limb sequence	128
5.6.2	Competing emissions and absorptions along the line-of-sight	130
5.6.3	Satellite motion	131
5.7	Conclusion	133
	The horizontal resolution of MIPAS	135
	Abstract	135
5.8	Introduction	136
5.9	MIPAS measurements and retrievals	136
5.10	Horizontal averaging kernels: theory	137
5.11	Application to MIPAS	138
5.11.1	Information displacement	138
5.11.2	Information spread	143
5.11.3	Impact of horizontal smoothing on profile information	143
5.11.4	Averaging kernels evaluated for horizontally non-homogeneous atmo- spheres	144
5.12	Conclusions	144
	General conclusion and recommendations	147
6	Geophysical validation of MIPAS ozone profile data and a new perspec- tive on its error budget	149
6.1	Introduction	151
6.2	Ozone profile data sets	152
6.2.1	MIPAS	152
6.2.2	Ground-based ozonesondes and lidars	153
6.3	Error budget of comparisons	154
6.3.1	Vertical smoothing	156
6.3.2	Horizontal smoothing	158
6.3.3	Spatial distance	159
6.4	Comparison results	159
6.4.1	Partial columns	159
6.4.2	Vertical and meridian structure	160
6.5	Conclusion	168
7	Multi-mission consistency of seven limb ozone profilers	169
7.1	Introduction	171
7.2	Ozone profiles data records	172
7.2.1	Satellites	172
7.2.2	Ground-based networks	175

7.2.3	Coincidence criteria	175
7.3	Comparison results	176
7.3.1	Comparison error budget	176
7.3.2	Temporal features	178
7.3.3	Meridian structure	179
7.3.4	Lowermost altitude	185
7.4	Conclusion	186
8	A eight-year multi-mission ozone profile data record assembled by the NNORSY neural network system	191
8.1	Introduction	194
8.2	Data sets	196
8.2.1	NNORSY GOME data	196
8.2.2	Ground-based measurements	196
8.2.3	Solar occultation satellite measurements	197
8.3	NNORSY ozone profile properties	198
8.3.1	Vertical resolution	198
8.3.2	Horizontal resolution	199
8.3.3	Altitude pointing	200
8.4	Agreement with ozone profile measurements	202
8.4.1	Time series	202
8.4.2	Vertical structure	208
8.5	Discussion and conclusion	215
8.5.1	General agreement with correlative data	215
8.5.2	Source of the profile information retrieved by NNORSY	215
8.5.3	Instrumental degradation and long-term stability	216
9	Conclusion	219
9.1	Conclusions et perspectives par chapitre	220
9.2	Conclusions et perspectives générales	225
	Table des abréviations et acronymes	229
	Bibliographie	234