

THESE de DOCTORAT

présentée par

**Juan Ramón PARDO-CARRIÓN**

pour obtenir le

Doctorat Européen (Université PARIS VI - Universidad  
COMPLUTENSE de Madrid)

Spécialité: Astrophysique et Techniques Spatiales

**ÉTUDES DE L'ATMOSPHÈRE TERRESTRE  
AU MOYEN D'OBSERVATIONS DANS LES  
LONGUEURS D'ONDE MILLIMÉTRIQUES ET  
SUBMILLIMÉTRIQUES**

Soutenue le 20 Décembre 1996 devant la Commission d'examen :

Mr. Gérard Mégie	Président
Mr. Klaus Künzi	Rapporteur
Mr. Manuel Rego	Rapporteur
Mr. Daniel Bréton	Examineur
Mme. Maryvonne Gérin	Examineur
Mr. Jesús Gómez-González	Examineur
Mr. José Cernicharo et Mr. Pierre Encrenaz	Co-directeurs de thèse

*A mis padres y a mi hermana*

(À mes parents et à ma soeur)

# Remerciements

Cette période de réalisation de ma thèse a été vécue d'une manière particulièrement intense. Il m'a été possible de travailler, de connaître et de devenir ami d'un grand nombre de personnes dans des endroits très différents. J'ai aussi, malgré la distance, maintenu le contact avec des amis plus anciens rencontrés à l'université où même au lycée, qui m'ont toujours encouragé dans mon travail aux moments importants, et qui n'ont jamais hésité à m'aider quand j'ai eu besoin d'eux. Toutes ces personnes sont présentes dans ma mémoire au moment où je termine ce travail, ainsi que ma famille qui a dû accepter de ne me retrouver que quelques fois dans l'année.

Je voudrais d'abord remercier les membres du *Centro Astronómico de Yebes* où mon travail de recherche a débuté. Je suis très spécialement reconnaissant à José Cernicharo dont l'apport a été fondamental dans ce travail tant par ses idées, ses suggestions, son aide dans le travail théorique et expérimental, mais aussi par l'encouragement constant qu'il m'a prodigué. Je tiens aussi à souligner l'aide de Jesús Gómez González (Directeur de l'OAN) et de Jesús Martín-Pintado (Directeur du CAY) pour l'impulsion donnée à mon travail. Je voudrais également remercier Valentín Bujarrabal pour m'avoir initié à la recherche. J'ai aussi une pensée pour tous les autres collègues de Yebes, et spécialement Eduardo González-Alfonso et J. Eusebio Garrido, ce dernier très malheureusement disparu, avec qui j'ai partagé une maison à Guadalajara au début de ma thèse, et dont les qualités humaines m'ont spécialement touché.

À Paris j'ai aussi eu la chance de trouver un laboratoire très accueillant où j'ai pu mener mon travail en trouvant toujours l'aide nécessaire. Je suis spécialement reconnaissant à Catherine Prigent, Maryvonne Gerin et Laurent Pagani qui ont collaboré directement dans mes travaux et ont été une grande aide dans leur développement. Je veux remercier d'une façon spéciale Pierre Encrenaz, qui a toujours su guider mon travail vers des collaborations avec des laboratoires nationaux ou étrangers; ainsi que Yves Viala, actuel directeur du DEMIRM, et Gérard Beaudin qui n'ont jamais hésité à mettre à ma disposition tout ce dont j'ai eu besoin (je tiens à signaler leur appui dans mes besoins spécifiques à cause de mon travail dans un sujet qui est certainement minoritaire au laboratoire). D'autre part, je suis également reconnaissant à Norma Sanchez pour m'avoir invité plusieurs fois aux écoles et colloques organisés par elle à Erice et à Paris, ce qui m'a permis de suivre les

derniers progrès en cosmologie théorique et observationnelle, sujet qui m'intéresse bien qu'il soit en dehors de ma ligne de recherche. Je voudrais aussi avoir un mot pour d'autres amis trouvés au sein du labo et qui ont fait de mon séjour quelque chose d'extraordinaire: Roberto Maoli, María Jesús Sempere, Catherine Guillou, François Viallefond, Corinne Boutez, Alain Maestrini, Priscilla Maréchal, Fabienne Casoli, Mireille et Bernard Fort, Cirille Viguerie, Alessandro Bosselli, Alessandra Contursi, Claudine Laurent, Maurice Gheudin, Pascal Febvre, et d'autres. Des mots très spéciaux pour Geneviève et James Lequeux qui ont fait tant pour moi dès mon arrivée à Paris.

Dans mon travail en France j'ai toujours été stimulé par des personnes d'autres laboratoires tels que Emmanuel Lellouch, Guy Rochard, Pascal Brunel, Daniel Breton, Jérôme de la Nöe, Philippe Ricaud, Alain Hauchecorne, et d'autres.

En ce qui concerne les observations présentées dans ce travail, elles n'auraient pas été possibles sans l'aide du personnel de l'IRAM à Pico Veleta et de l'Observatoire de Grenoble au Plateau de Bure. Je remercie Laurent Pagani, Gilles Duvert et Bernard Foullieux pour les observations à POM-2, ainsi que José Cernicharo et Gabriel Pauvert pour les observations à Pico Veleta.

À la fin de ma thèse j'ai réalisé un séjour au *California Institute of Technology* (CalTech), où j'ai trouvé toutes sortes de facilités pour mon travail grâce à Thomas Phillips et Eugene Serabyn, et une aide inestimable de Jean Bruston. Pour mon séjour au télescope JCMT je remercie Richard Hills.

Je tiens à signaler aussi l'aide reçue toujours des gens du Département d'Astrophysique de l'Université *Complutense* de Madrid, et spécialement de son directeur Manuel Rego.

Finalement, il y a tous mes amis en Espagne qui ont été toujours prêts à m'aider lors de mes séjours là-bas. Je suis surtout reconnaissant à Gonzalo Rueda, José Ángel Fernández-Cano, Silvia García, Carmen Vázquez, Eusebio Sánchez, Antonio Rúa, Juan José Ródenas et Ventura Martínez.

Ce travail est, je le répète, quelque chose d'inoubliable pour avoir été possible grâce à chacune des personnes que je viens de citer. La suite se prépare déjà à New York l'année prochaine. Ce sera au GISS sous l'encadrement de William Rossow et Catherine Prigent que je remercie de cette occasion d'enrichir ma formation.

# Objectifs et description générale de ce travail

Mon intention en rédigeant ce travail a été, en partant de mon expérience pendant ces années de recherche, de donner une vision des possibilités offertes par les techniques d'observation dans les domaines millimétrique et submillimétrique du spectre électromagnétique pour l'étude de l'atmosphère terrestre ainsi que de traiter en profondeur certains aspects autour desquels mon travail de recherche est centré.

Pour aborder un travail de physique expérimentale il est très important de construire des modèles permettant de façon rapide de reproduire approximativement le système physique à étudier. La relation modèle-experimentation peut être de deux types: d'une part le modèle peut être utilisé pour prédire et interpréter les résultats d'une expérience ou, au contraire, le modèle peut contenir une série de paramètres libres que les mesures doivent déterminer. Ces deux types de rapport modèle-expériences sont présents dans ce travail.

En tenant compte du sujet de ma thèse et des remarques précédentes, on comprend que la première partie de ce travail fut l'élaboration d'un modèle prédisant la transmission des ondes électromagnétiques dans l'atmosphère aux longueurs d'onde millimétriques et submillimétriques; ce modèle sera un outil de travail fondamental par la suite. C'est pourquoi une partie relativement importante du manuscrit est dédiée à sa description, et aux travaux individuels utilisant ce modèle. On verra /également au chapitre 3 comment j'ai ajouté une contribution originale en intégrant l'effet du champ magnétique terrestre sur le rayonnement des molécules atmosphériques.

Les observations dans le domaine millimétrique et submillimétrique du spectre électromagnétique sont utilisées pour l'étude des abondances des différentes espèces moléculaires minoritaires présentes dans l'atmosphère possédant des transitions rotationnelles ( $O_3$ ,  $N_2O$ ,  $SO_2$ , etc...). Il est possible aussi au moyen d'observations de raies de l'oxygène moléculaire d'étudier les profils verticaux de température et de pression; de plus les mesures du continuum dans certaines régions du spectre prises depuis le sol permettent de connaître le contenu intégré de la vapeur d'eau. Le profil vertical de ce gaz peut être mesuré grâce aux fortes résonances rotationnelles qu'il présente dans l'atmosphère. La plupart des études menées jusqu'à présent ont utilisé

des instruments basés sur terre. Une partie des travaux présentés dans cette thèse est de ce type. Ils ont été menés avec les radiotélescopes IRAM-30m placé dans la Sierra Nevada (Grenade, Espagne) et POM-2 au Plateau de Bure (Hautes Alpes). Les raies mesurées appartiennent à  $\text{H}_2\text{O}$  (afin d'étudier le rapport de mélange de cette molécule dans la stratosphère et la mésosphère),  $\text{O}_3$  (pour étudier sa distribution verticale aux latitudes tempérées,  $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$  pour valider un modèle sur l'effet Zeeman présenté par la molécule d'oxygène dans l'atmosphère terrestre, et  $\text{CO}$  dans le but de montrer son importance dans mésosphère. Pour ces travaux on s'est servi d'un algorithme d'inversion d'observations spectroscopiques développé sur la base du modèle direct de transfert de rayonnement dans l'atmosphère terrestre cité plus haut. Dans cette thématique, et dans le cadre de la collaboration entre le Laboratoire de Radioastronomie Millimétrique de l'Observatoire de Paris (DEMIRM) et l'*Observatorio Astronómico Nacional* (OAN) d'Espagne on présente ici une contribution à la préparation de la partie scientifique du projet européen EMCOR (radiomètre millimétrique pour mesurer  $\text{ClO}$ , un gaz très important pour la destruction de l'ozone stratosphérique, et détecter éventuellement d'autres gaz minoritaires atmosphériques depuis la surface terrestre).

Les observations depuis la surface terrestre ont deux limitations principales. D'une part, le caractère local des données obtenues, et d'autre part la pauvre résolution spatiale (verticale) associée. L'usage de données de différentes expériences pour mener des études globales est presque impossible à cause des différences techniques, surtout d'étalonnage, entre les différents instruments. Tous ces problèmes sont éliminés quand on fait ce type d'études avec un seul instrument sur un satellite. En effet on obtient des mesures sur de grandes zones de notre planète qui sont étalonnées et analysées de la même façon et peuvent donc être utilisées pour des études globales. De plus, l'observation depuis un satellite permet de recevoir directement l'émission des couches les plus hautes sans passer systématiquement par les plus basses, qui sont plus denses et qui absorbent en général une grande partie de l'information. On a analysé dans ce travail des données satellitaires dans le but de tester le transfert de rayonnement direct dans les bandes ainsi couvertes. Le développement d'algorithmes d'inversion pour traiter les données de futurs instruments a besoin de ce type d'études. La résolution verticale est bien meilleure pour les instruments effectuant des sondages au limbe atmosphérique. Dans ce contexte général on présente ici un état d'avancement des travaux orientés vers le traitement de données de deux

instruments: PRONAOS<sup>1</sup> (télescope submillimétrique sur ballon stratosphérique) du Centre d'Etudes Spatiales de France (CNES), et ODIN (satellite à vocation astrophysique et atmosphérique), majoritairement suédois mais aussi avec une participation de la France, du Canada et de la Finlande.

Ceci constitue la ligne directrice de mon activité de recherche jusqu'à présent. L'idée générale dans ce travail fut de combiner l'exploitation de données dans le domaine où il est valable avec une contribution à un développement théorique de certains aspects. On a voulu aussi s'orienter pour la suite vers une participation à la phase de préparation de nouveaux projets. Dans ce contexte on collabore déjà régulièrement avec divers instituts dont on peut trouver la liste à la fin de ce travail. Grâce à l'appui du Ministère d'e l'Education Espagnol et du CNRS français, la suite des recherches présentées ici est assurée jusqu'à la fin 1998.

Pasadena, le 16 Octobre 1996

Juan Ramón Pardo Carrión

---

1. Deux mois avant la fin de cette thèse on a appris que l'expérience de spectroscopie submillimétrique de cet instrument a été remise en question. Nous avons préféré laisser la partie du chapitre 5 et de l'Annexe C, où sont décrites les nouvelles procédures du logiciel de traitement d'observations spectroscopiques CLASS (IRAM-Grenoble) pour corriger les observations astrophysiques de l'absorption atmosphérique, car ces procédures sont également valables pour d'autres projets comme PIROG, qui est un télescope submillimétrique sur ballon stratosphérique auquel la France participe également.

## TABLEAU DES ACRONYMES

(Les noms sont donnés dans la langue d'origine)

<b>AMSU</b>	Advanced Microwave Sounding Unit, NOAA
<b>ATM</b>	Atmospheric Transmission at Millimetric and submillimetric wavelengths.
<b>CALTECH</b>	California Institute of Technology.
<b>CAY</b>	Centro Astronómico de Yebes, España.
<b>CEPT</b>	Conférence Européenne des Postes et Télécommunications.
<b>CMS</b>	Centre de Météorologie Spatiale (Lannion, France).
<b>CNES</b>	Centre National d'Etudes Spatiales, France.
<b>CSO</b>	CALTECH Submillimetric Observatory.
<b>DEMIRM</b>	DEpartement du Milieu interstellaire en Infra-Rouge et en Millimétrie, France.
<b>DMSP</b>	Defense Meteorological Satellite Program , U.S. Army.
<b>ESA</b>	European Space Agency.
<b>FASCOD</b>	Fast Atmospheric Signature CODE.
<b>IRAM</b>	Institute de Radioastronomie Millimétrique.
<b>JPL</b>	Jet Propulsion Laboratory, USA.
<b>MAS</b>	Millimetric Atmospheric Sounder.
<b>MASTER</b>	Millimeter-wave Acquisitions for Stratosphere/Troposphere Exchanges Research, ESA.
<b>MTZA</b>	Microwave Temperature Sounding of the Atmosphere, Russia.
<b>MLS</b>	Microwave Limb Sounder.
<b>MPM</b>	Microwave Propagation Model.
<b>MSU</b>	Microwave Sounding Unit.
<b>NOAA</b>	National Oceanic and Atmospheric Administration, USA.
<b>NWP</b>	Numerical Weather Prediction.
<b>OAN</b>	Observatorio Astronómico Nacional, España
<b>POM-2</b>	Petite Operation Millimétrique 2.
<b>SOPRANO</b>	Submillimetric Observation of Processes in the Atmosphere Noteworthy for Ozone.
<b>SSM/I</b>	Special Sensor Microwave/Imager.
<b>SSM/T1</b>	Special Sensor Microwave/Temperature sounder.
<b>SSM/T2</b>	Special Sensor Microwave/humidity sounder.
<b>TIROS</b>	Television and Infra-Red Observation Satellite.
<b>TOVS</b>	TIROS Operational Vertical Sounder.
<b>WRC</b>	World Radiocommunication Conference.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction à la structure physique et chimique de l'atmosphère</b>	<b>1</b>
1.1	Description de la structure physique de l'atmosphère . . . . .	4
1.2	Profils verticaux des gaz atmosphériques . . . . .	9
1.3	Introduction à la chimie atmosphérique . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Transfert de rayonnement atmosphérique aux domaines mm et sub-mm</b>	<b>23</b>
2.1	Introduction . . . . .	23
2.2	Paramètres moléculaires. Coeff. d'absorption . . . . .	28
2.2.1	Calcul des fréquences de transition . . . . .	29
2.2.2	Calcul de la fonction de partition . . . . .	31
2.2.3	Calcul des forces d'oscillateur . . . . .	33
2.2.4	Profil des raies atmosphériques dans le domaine 1-1000 GHz .	34
2.2.5	Quelques cas particuliers . . . . .	38
2.3	Logiciel de transfert de rayonnement ATM (1-1000 GHz) . . . . .	40
2.3.1	Exemples de calculs avec ATM . . . . .	42
2.4	Algorithme d'inversion de spectres . . . . .	49
2.4.1	Choix des couches. Fonctions de sondage . . . . .	50
2.4.2	Travailler avec le logiciel d'inversion . . . . .	53
<b>3</b>	<b>Sondages atmosphériques depuis le sol dans le domaine mm.</b>	<b>55</b>
3.1	Modélisation de l'effet Zeeman sur les raies d'O <sub>2</sub> . Observations de 16O18O . . . . .	55

3.1.1	Chercher une raie pour les mesures depuis la Terre . . . . .	65
3.1.2	Instruments et observations . . . . .	68
3.1.3	Simulations comparées aux observations . . . . .	69
3.1.4	Possible utilisation d'autres raies pour la validation . . . . .	75
3.1.5	Applications . . . . .	76
3.2	Première détection depuis le sol de l'émission à 183 GHz de H <sub>2</sub> O strato-mésosphérique . . . . .	77
3.2.1	Caractère nouveau de ces observations . . . . .	77
3.2.2	Instruments et conditions d'observation . . . . .	79
3.2.3	Analyse des données . . . . .	81
3.2.4	Comparaison avec d'autres mesures et modèles. Conclusions .	85
3.3	Analyse des observations de raies rotationnelles de l'ozone . . . . .	87
3.3.1	Introduction au sondage du profil vertical des gaz atmosphériques minoritaires en général . . . . .	87
3.3.2	Introduction aux observations de raies de l'ozone et objectifs .	88
3.3.3	Description des observations . . . . .	89
3.3.4	Analyse des observations . . . . .	93
3.3.5	Discussion. Quelques résultats particuliers. . . . .	95
3.3.6	Ozone dans la basse stratosphère au-dessus du Pico Veleta . .	100
3.4	Le projet EMCOR . . . . .	102
3.4.1	Objectifs . . . . .	102
3.4.2	Caractéristiques . . . . .	106
<b>4</b>	<b>Sondages millimétriques satellitaires vers la surface terrestre</b>	<b>109</b>
4.1	Sondages autour de 60 et 119 GHz . . . . .	110
4.1.1	Introduction . . . . .	110
4.1.2	Discussions sur l'application de cette technique à l'étude du profil de température . . . . .	111
4.1.3	fonctions de poids . . . . .	115

4.1.4	Concurrence entre services actifs et passifs pour l'usage de fréquences autour des raies de l'oxygène . . . . .	117
4.1.5	Systèmes de sondage actuels à 60 GHz. Travaux de validation	118
4.1.6	Systèmes futurs à 60 GHz: AMSU-A, SSM/IS, MTZA. . . . .	124
4.1.7	Exploration de la température au-delà de ~50 km. . . . .	126
4.1.8	Etude et sélection des fréquences pour un projet "Push-Broom" à 57 GHz du CNES . . . . .	131
4.2	Sondage de la vapeur d'eau troposphérique depuis des satellites . . . . .	141
<b>5</b>	<b>Techniques d'observation pour éviter l'absorption troposphérique.</b>	
	<b>Sondage au limbe</b>	<b>147</b>
5.1	Introduction . . . . .	147
5.2	Sondages avec des instruments transportés à la stratosphère . . . . .	148
5.2.1	Adaptation de l'algorithme d'inversion à l'analyse d'observations astrophysiques. . . . .	149
5.3	Sondages au limbe atmosphérique . . . . .	151
5.3.1	Considérations techniques . . . . .	154
5.3.2	L'observation des composants atmosphériques minoritaires au moyen du sondage au limbe . . . . .	155
5.3.3	L'étude du profil de température au moyen de cette technique. Le projet ODIN . . . . .	156
5.3.4	Systèmes de sondage actuels et futurs . . . . .	164
<b>6</b>	<b>Conclusions et perspectives</b>	<b>171</b>
<b>A</b>	<b>Description des commandes ATM</b>	<b>175</b>
<b>B</b>	<b>Utilisation du logiciel d'inversion</b>	<b>189</b>
<b>C</b>	<b>Procédures Atmosphériques pour CLASS</b>	<b>193</b>



# Chapitre 1

## Introduction à la structure physique et chimique de l'atmosphère

L'enveloppe gazeuse de notre planète, l'atmosphère, a une structure physique et chimique qui dépend d'un grand nombre de paramètres. Quelques uns ont une origine naturelle (le rayonnement solaire reçu par exemple), et d'autres sont de nature artificielle et locale (activités humaines). L'atmosphère n'est donc pas un système isolé, et sa structure est variable tant dans le temps que dans l'espace. Néanmoins, certains paramètres dont dépendent la structure et la composition chimique ont des fluctuations lentes. Ceci permet de définir des atmosphères standards où les distributions verticales de pression, température, rapport de mélange d'O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, Ar, etc..., sont bien définies. En revanche, il y a des paramètres qui varient de façon rapide d'un point de vue spatial et temporel (rapports de mélange de la vapeur d'eau, des composants sulfurés, de l'ozone, etc...). Leur étude doit alors se faire sur une base statistique. La propagation d'ondes millimétriques et submillimétriques au sein de l'atmosphère terrestre est directement liée à la composition chimique, car les molécules présentes dans l'atmosphère déterminent une série de fréquences où les mécanismes d'absorption et d'émission sont importants. Par ailleurs, les conditions physiques jouent aussi un rôle à cause de la dépendance des coefficients d'absorption des différentes molécules en fonction de la pression et de la température. En guise d'introduction, nous décrirons brièvement la structure physique et chimique de l'atmosphère terrestre, avant d'exposer les travaux qui constituent le corps de cette

étude.

L'atmosphère est un mélange gazeux où les proportions relatives des composants varient localement et temporellement. Ses principaux constituants présentent, en moyenne, les rapports de mélange suivants en volume<sup>1</sup> au niveau de la mer (air sec): 0.78083 d'azote, 0.20947 d'oxygène, 0.00934 d'Argon et 0.00033 de gaz carbonique. Avec un rapport de mélange bien plus faible, la vapeur d'eau est un composant très important de l'atmosphère: sa concentration présente des variations très importantes temporellement et spatialement dans les couches proches de la surface. Il existe en outre une très grande quantité de composants mineurs avec des rapports de mélange beaucoup plus faibles. Quelques uns n'ont pas d'intérêt dans la chimie et la spectroscopie atmosphérique comme les gaz nobles atomiques Néon, Hélium, Krypton et Xénon, et d'autres n'ont pas de moment dipolaire électrique permanent ( $H_2$  et  $CH_4$ ). En effet les raies atmosphériques (1-1000 GHz) sont le plus souvent dues à des transitions dipolaires électriques. Une exception est  $O_2$  qui présente des transitions dipolaires magnétiques (M1), beaucoup plus faibles que les dipolaires électriques. La très grande abondance atmosphérique de ce gaz fait que le rôle de ses transitions M1 est aussi important dans les domaines de longueurs d'onde millimétriques et submillimétriques que les transitions dipolaires électriques d'autres molécules atmosphériques. Une partie très importante des composants mineurs qui

---

1. Nous tenons à rappeler ici les différentes manières d'exprimer les concentrations des gaz:

- Rapport de mélange en masse ( $r_{mi}$ ) est le rapport de masse de la espèce  $i$  ( $M_i$ ) sur le total  $M_a$  d'air dans un volume fixe.
- Rapport de mélange en volume ( $r_{vi}$ ) est le même concept que le dernier mais appliqué aux volumes. Ils sont liés:

$$r_{mi} = \frac{\mu_i}{\mu_a} r_{vi}$$

où  $\mu_i$  est la masse molaire de la espèce  $i$  et  $\mu_a=28.9645$  g/mol est considérée comme la masse molaire moyenne de l'air.

- Pression partielle ( $P_{mi}$ ) est obtenue à partir du rapport de mélange en volume et la pression totale  $P$ :

$$P_{mi} = P \cdot r_{vi}$$

- Densité partielle est obtenue à partir du rapport de mélange en masse et la densité de l'air  $\rho$ :

$$\rho_{mi} = \rho \cdot r_{mi}$$

- Concentration molaire:  $M_i \mu_a / M_a \mu_i$ .
- Densité numérique de l'espèce  $i$  [ $cm^{-3}$ ]:  $n_i = \frac{\rho_i \cdot N_A}{\mu_i}$ , où  $N_A$  est le nombre d'Avogadro.

possèdent des transitions rotationnelles sera étudiée d'un point de vue spectroscopique, au chapitre 2.

Les abondances relatives à  $O_2$  de la plupart des gaz minoritaires varient avec l'altitude mais elles se maintiennent dans les mêmes ordres de grandeur au moins en dessous de  $\sim 80$  km (au delà de cette altitude l'atmosphère devient raréfiée à cause des processus de photodissociation et d'ionisation). La distribution en altitude de la vapeur d'eau est très variable temporellement et localement comme on l'a déjà dit. S'il n'y a pas de nuages, un profil vertical standard pourrait être décrit, jusqu'à  $\sim 15$  km, par une décroissance exponentielle de l'abondance avec une échelle de hauteur  $H_0$ :

$$\rho_{H_2O}(z) = \rho_{0,H_2O} \cdot e^{-z/H_0} \quad (1.1)$$

où  $H_0$  vaut environ 2 km. On sait que l'atmosphère est très sèche au dessus de  $\sim 15$  km (rapports de mélange inférieurs à 10 ppmv, voir paragraphe 3.2). La distribution de la température en fonction de l'altitude est également pertinente pour cette étude car elle sert de base pour établir une division de l'atmosphère basse et moyenne (jusqu'à 80-90 km):

1) La **troposphère** où la température décroît avec l'altitude à raison de  $\sim 6$  K/km typiquement, et dont l'extension verticale est variable en fonction de la latitude. L'altitude à partir de laquelle la température cesse de décroître (**tropopause**) est plus élevée dans les zones équatoriales que dans les régions polaires.

2) La **stratosphère** où la température augmente avec l'altitude à un rythme de quelques  $\sim 2$  K/km à cause du processus d'absorption du rayonnement solaire dans les bandes UV de l'oxygène et principalement de l'ozone. La zone où la température se stabilise est connue sous le nom de **stratopause** et est normalement située entre 47 et 55 km environ.

3) La **mésosphère**, au dessus de  $\sim 55$  km, est caractérisée par une décroissance de la température jusqu'à  $\sim 80-90$  km. La température se stabilise à cette altitude (**mésopause**) où il y a très peu d'absorption de radiation solaire. Au-delà, il y a la thermosphère, où la température cinétique monte jusqu'à  $\sim 2000$  K à  $\sim 500$  km d'altitude à cause d'une importante absorption d'ultraviolet solaire, principalement par oxygène moléculaire et atomique.

La pression atmosphérique décroît avec l'altitude à la manière presque d'une exponentielle négative. Nous pouvons décrire son profil, en première approximation, en utilisant seulement deux paramètres: une échelle de hauteur et la pression pour

un niveau de référence.

Tout ce que nous venons de dire donne une idée générale de la composition et la structure de l'atmosphère. Les phénomènes météorologiques de caractère local ainsi que les contaminants introduits par l'activité humaine, leurs conséquences chimiques couplées aux mécanismes de transport, font que les profils atmosphériques peuvent s'écarter d'une façon très importante du profil standard.

## 1.1 Description de la structure physique de l'atmosphère

La masse de l'atmosphère située au-delà de 30 km d'altitude représente 1% seulement de la masse totale (0.001% du total au dessus de 90 km). Un modèle simple d'atmosphère planétaire peut se construire en supposant que l'atmosphère est complètement transparente au rayonnement, qu'elle ne contient pas de particules liquides et que la température de sa frontière inférieure est celle de la surface de la planète, dont la valeur peut être déterminée d'une façon simple en utilisant la loi de Stefan-Boltzmann:

$$4\pi a^2 \sigma T_e^4 = \pi a^2 (1 - A) F / R^2 \quad (1.2)$$

où  $\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzmann,  $a$  est le rayon de la planète,  $R$  sa distance au Soleil (pour la Terre:  $\sim 1.5 \cdot 10^{11}$  m),  $F$  est le flux du rayonnement solaire à la position de la planète (Terre:  $\sim 1370$  Wm<sup>-2</sup>),  $T_e$  la température effective de sa surface et  $A$  son albedo. En considérant le mouvement vertical d'une cellule de gaz de volume spécifique  $V$  ( $=1/\rho$ ,  $\rho$  est la densité), soumis à une pression  $P$  et à une température  $T$ , et en supposant l'existence d'un équilibre hydrostatique, on arrive à l'équation suivante pour le mouvement vertical:

$$dp = -g\rho dz \quad (1.3)$$

où  $g$  est l'accélération locale de la gravité. L'application de l'équation d'état des gaz parfaits ( $\rho = P_m \cdot p / RT$ , où  $P_m$  est le poids moléculaire moyen du mélange atmosphérique,  $R$  la constante des gaz parfaits) permet d'écrire cette équation du mouvement de la façon suivante:

$$dp/p = -dz/H \quad (1.4)$$



dont la solution est:

$$p = p_0 \exp\left(-\int_0^z dz/H\right) \quad (1.5)$$

où  $H=RT/P_m g$  est une échelle de hauteur.

L'approximation où  $p$  décroît exactement de manière exponentielle avec la coordonnée verticale est bonne seulement si  $H$  est réellement constante, ce qui n'est pas vrai dans l'atmosphère terrestre car la température et l'accélération de la gravité varient avec l'altitude. En appliquant, sur l'élément de volume déjà cité, la première loi de la thermodynamique, on écrit:

$$dq = c_v dT + p dV \quad (1.6)$$

Dans le cas de mouvement adiabatique ( $dq = 0$ ), et en utilisant l'équation d'état sous la forme différentielle, on arrive à:

$$p dV + V dp = R dT / P_m \quad (1.7)$$

mais  $c_p - c_v = R / P_m$  pour un gaz parfait ce qui permet d'écrire:  $c_p dT - V dp = 0$  et d'arriver à:

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{c_p} = -\Gamma \quad (1.8)$$

où  $\Gamma$  représente le gradient vertical de température pour le cas idéal d'atmosphère chauffée seulement par contact direct avec la surface de la Terre. Ce comportement est proche de celui de la vraie troposphère (décroissance presque linéaire de la température avec l'altitude). Le changement radical de ce comportement dans la stratosphère est dû à l'énergie absorbée principalement par l'ozone. Le gradient  $\Gamma$  a une valeur typique de  $\sim 6.5$  K/km dans la troposphère, mais avec des écarts parfois importants. En fait, on observe parfois des couches troposphériques proches de la surface pour lesquelles la température croît avec l'altitude. Un autre comportement intéressant est la plus forte épaisseur de la troposphère à l'équateur (mentionnée plus haut) qui est peut être due aux hautes températures à la surface et à la grande efficacité des mécanismes de mélange thermique. C'est pourquoi la baisse de la température se poursuit jusqu'à une altitude plus élevée. Un fait beaucoup plus surprenant est la valeur de la température à la tropopause: celle-ci est plus faible dans les zones équatoriales qu'aux pôles, même en hiver local au pôle quand il n'y a pas de rayonnement solaire direct. Evidemment, ce fait ne peut s'expliquer que par de considérations dynamiques et son existence montre que les mouvements atmosphériques à grande échelle participent au transport de chaleur. L'étude des

phénomènes troposphériques est l'objet fondamental de la météorologie. C'est dans cette couche que se déroulent la plupart des phénomènes physiques déterminant les conditions auxquelles la vie sur notre planète est soumise.

Jusqu'au début de ce siècle, on ne disposait que de mesures réalisées jusqu'à 10 km d'altitude environ, et on croyait que la température décroissait d'une façon continue jusqu'à la température de l'espace interplanétaire selon le modèle de chauffage direct par contact avec la surface terrestre. En 1902 L.P. Teisserenc de Bort, après l'étude des résultats de près de 200 expériences sur ballon, s'était aperçu que la température ne décroissait plus à partir d'une certaine altitude, et même qu'elle augmentait au-delà. Cette découverte, contestée à ses débuts, fut rapidement confirmée par de nouvelles expériences.

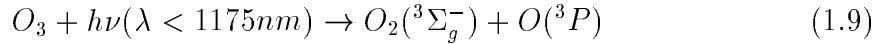
Toute l'atmosphère de la Terre n'est pas, bien sûr, en équilibre thermodynamique. Par contre, jusqu'à 130 km, les conditions d'**équilibre thermodynamique local** (ETL) sont une très bonne approximation. Ce principe peut être exprimé comme un état où les grandeurs thermodynamiques varient de manière assez lente pour permettre d'établir une division de l'atmosphère en couches homogènes où les équations de base de l'équilibre thermodynamique sont vérifiées: équation de Boltzmann pour décrire la population des niveaux d'énergie des différentes molécules suivant la température de la couche, loi de Maxwell pour la distribution statistique des vitesses, et loi de Saha pour le rapport d'abundances des différents états d'ionisation d'un élément (cette dernière n'est pas nécessaire pour les températures habituelles à la hauteur de la mésopause).

Au-delà de la troposphère, se situe la stratosphère dont les caractéristiques ne sont pas déterminées, comme dans la troposphère, par les effets de mélanges et les turbulences à grande échelle. Dans les 5 à 10 premiers kilomètres de la stratosphère, la température est presque constante. La cause de la montée qui se déroule au-delà et jusqu'à  $\sim 50$  km est l'absorption du rayonnement UV solaire par l'ozone et, d'une manière moins importante, par l'oxygène. Nous allons voir un peu plus en détails ce phénomène de chauffage stratosphérique.

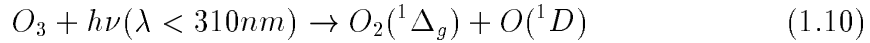
### Spectres d'absorption UV d' $O_3$ et $O_2$

L'ozone a une énergie de dissociation relativement petite ( $24.3 \pm 0.1$  kcal, soit  $8510 \pm 30$   $cm^{-1}$ ). Cela a comme conséquence l'existence de bandes d'absorption liées à la photodissociation. La première se présente dans le domaine visible (bande

de Chapuis) entre 410 et 750 nm, où on atteint une section efficace de l'ordre de  $5 \cdot 10^{-21} \text{ cm}^2$  aux environs de 600 nm. Le processus physique responsable de cette bande est:

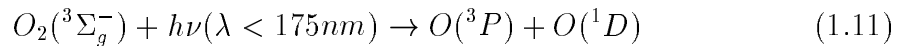


Un autre processus de photodissociation, permis si les photons sont assez énergétiques, conduit à des états excités de l'oxygène atomique:



qui donne une absorption dans une région connue sous le nom de **bande de Hartley** avec un maximum à environ 250 nm. Le fait que ce processus produise des molécules d'oxygène dans l'état excité  $^1\Delta_g$  a une certaine importance dans le spectre IR du ciel car la désexcitation de ces molécules a pour conséquence une émission centrée à  $1.27 \mu\text{m}$  et qui est connue sous le nom de "airglow". L'oxygène atomique dans un état électronique excité ( $^1D$ ) obtenu par le processus 1.9 est très réactif et participe à des réactions chimiques importantes dans l'atmosphère, en particulier avec  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$  et  $\text{N}_2\text{O}$ . La bande de Hartley est responsable de la très efficace absorption du rayonnement UV solaire par l'ozone. C'est la raison de la grande importance de ce gaz pour la vie sur notre planète.

En plus de l'ozone, l'oxygène moléculaire a aussi une certaine action qui aide à limiter l'arrivée du rayonnement ultraviolet solaire jusqu'à la surface de la Terre. Un mécanisme assez important dans les hautes couches de l'atmosphère est celui qui donne lieu au **continuum de Schumann-Runge** et qui produit l'absorption de rayonnement UV solaire à des longueurs d'onde inférieures à 175 nm. Le mécanisme physique est:



Un autre processus de photodissociation qui produit deux atomes d'oxygène non excités  $O(^3P)$ , a lieu à  $\lambda; 242 \text{ nm}$ . C'est ce que l'on appelle **continu de Herzberg**. La section efficace associée à ce processus est bien moindre que celle qui correspond au cas précédent. Ce processus apparaît donc dans des couches plus basses où la densité est plus forte. L'absorption dans la bande de Hartley de l'ozone a une région commune avec la bande de Herzberg de l'oxygène. Cela a une influence sur la valeur du coefficient d'absorption de l'oxygène moléculaire dans la stratosphère. Le taux

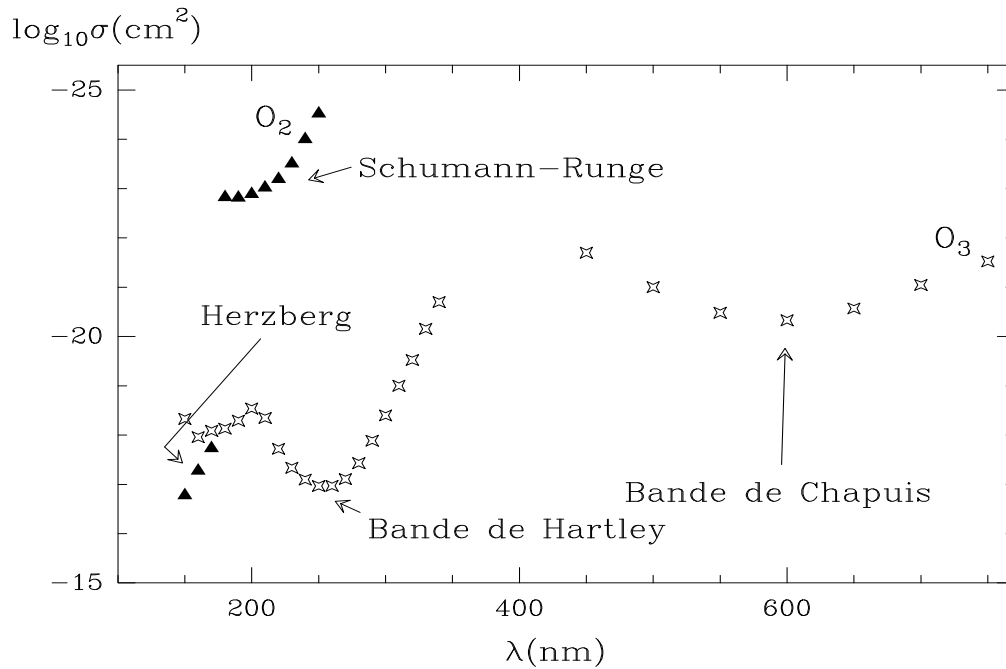


FIG. 1.1 - Sections efficaces d'absorption par molécule (exprimées en  $\text{cm}^2$ ) d' $\text{O}_3$  (étoiles) et  $\text{O}_2$  (triangles) dans les domaines visible et ultraviolet, d'après *Houghton et al.*, (1986) [41].

de photodissociation  $j_\infty$  du continu de Herzberg à  $\sim 242$  nm est de  $\sim 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ , tandis que dans le domaine de Hartley à la même longueur d'onde nous avons  $\sim 2.3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  ce qui explique que, malgré sa moindre abondance, l'ozone est plus important que l'oxygène moléculaire dans l'absorption du rayonnement UV solaire dans la stratosphère. La figure 1.1 montre la section efficace de photodissociation de l'oxygène et l'ozone dans le visible et le proche ultraviolet.

### Flux de rayonnement solaire sur l'atmosphère terrestre

Les processus de photodissociation jouent un rôle très important dans la chimie de l'atmosphère et ont un effet sur le profil de température. Le flux d'énergie total qui atteint le sommet de l'atmosphère est déterminé par l'émission solaire et par la distance Soleil-Terre. La distribution spectrale dépend essentiellement de la température à la surface du Soleil. Le flux total par seconde est connu comme **constante solaire**. Ce flux n'est pas vraiment constant: il varie surtout à cause des changements de distance Soleil-Terre au cours de l'année et à cause du cycle de variabilité solaire d'environ 11 années. La valeur moyenne est:

$$S = 1.96 \pm 0.02 \text{ cal} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{min}^{-1} = 137 \pm 1 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2} \quad (1.12)$$

qui correspond à une valeur de  $(T_{eff})_{\odot} = 5785 \pm 15K$  (la température effective est définie comme celle du corps noir dont l'émission intégrée à toutes les fréquences serait égale à toute l'énergie réellement émise). La Terre reçoit une fraction  $\beta_s$  de l'énergie solaire:

$$\beta_s = \frac{R_{\odot}^2}{4 \cdot r^2} \quad (1.13)$$

où  $R_{\odot}$  est le rayon du Soleil et  $r$  la distance Soleil-Terre. Ce paramètre oscille au cours de l'année entre  $5.23$  et  $5.59 \cdot 10^{-6}$  ce qui fait passer la constante solaire de  $1.88$  à  $2.01 \text{ cal} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$ . Pour les calculs associés aux réactions de photodissociation dans l'atmosphère terrestre on utilise les sections efficaces d'absorption. Il est donc souhaitable d'exprimer la constante solaire en  $N_{phot.} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{sec}^{-1}$ . Ceci est obtenu très facilement selon l'expression suivante:

$$q(\nu) = \frac{c\beta_s\rho_s(\nu)}{h\nu} = \frac{8\pi\beta_s\nu^2}{c^2}(e^{h\nu/KT_s} - 1)^{-1} \quad (1.14)$$

En intégrant entre deux fréquences, on obtient le nombre de photons qui entrent dans l'atmosphère par seconde et par  $\text{cm}^2$  dans la bande considérée.

## 1.2 Profils verticaux des gaz atmosphériques

Cette section est dédiée aux gaz qui possèdent des raies d'émission dans le domaine millimétrique et submillimétrique du spectre électromagnétique puisque ce sont ceux qu'il sera possible d'étudier à l'aide des techniques qui font l'objet de ce travail.

- $\text{O}_2$ : Son rapport de mélange est presque constant (rapport d'abondance avec  $\text{N}_2$ :  $\sim 20/79$ ) jusqu'à  $\sim 80 \text{ km}$  où les processus de photodissociation de cette molécule commencent à être importants.

- La vapeur d'eau est très concentrée dans les premiers kilomètres de l'atmosphère où elle peut présenter des profils verticaux très variables à cause de l'existence de trois états dans les conditions physiques de la basse atmosphère. Au delà de  $15\text{-}20 \text{ km}$ , la vapeur d'eau devient un gaz très rare avec des rapports de mélange inférieurs à  $10 \text{ ppmv}$ .

- $\text{O}_3$  montre un profil qui, exprimé en rapport de mélange, présente un maximum dans la basse stratosphère. La position de ce maximum change selon la latitude. Dans

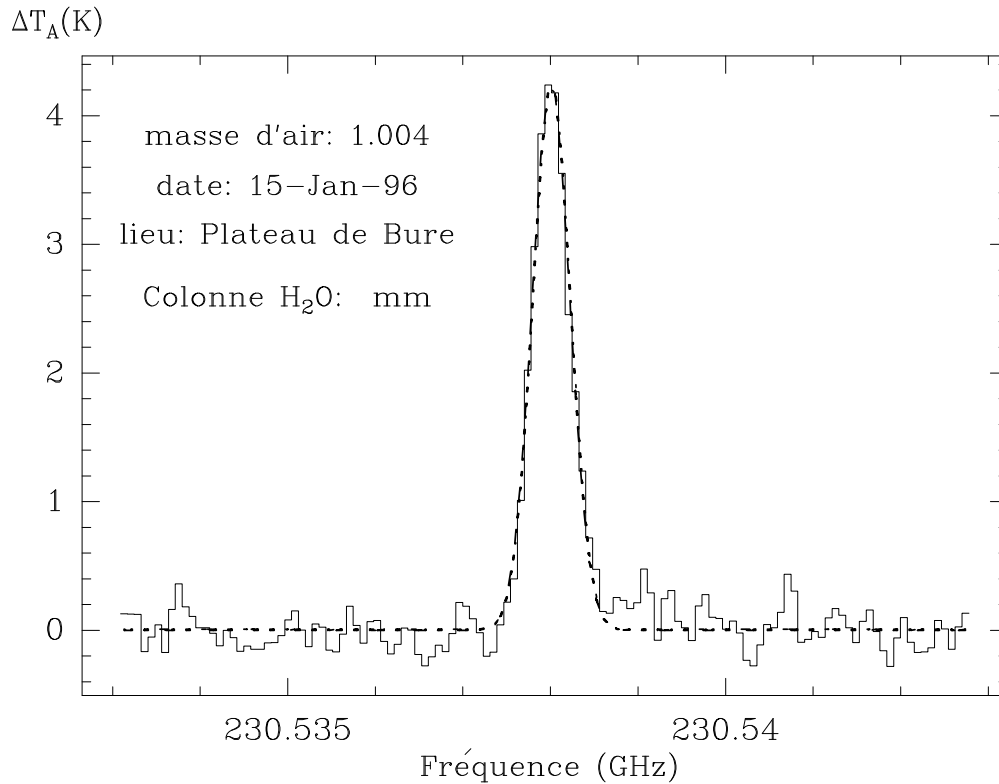


FIG. 1.2 - Observation de la raie de CO atmosphérique à 230.5 GHz avec le radiotélescope POM-2. On a ajusté un profil gaussien d'où on calcule une largeur thermique de 0.5 MHz indiquant que le rapport de mélange de CO devient important (2 ppmv et plus) au dessus de  $\sim 65$  km

les zones de latitude intermédiaire, on observe des valeurs d'environ 7 ppmv à 35-40 km, pour descendre à 1 ppmv ou moins à environ 60 km et au delà.

- CO: Dans les basses couches, jusqu'à  $\sim 5$  km, sa concentration augmente légèrement avec l'altitude à cause des processus photochimiques et surtout à cause des sources biologiques, avec des rapports de mélange entre 0.125 et 0.140 ppmv. Plus haut, la concentration décroît beaucoup jusqu'à  $\sim 0.020$  ppmv vers 25 km. Au delà, la concentration semble se maintenir constante. Une augmentation importante doit se produire vers la mésosphère à juger par le profil gaussien et étroit de ses raies d'émission millimétriques mesurées depuis le sol (voir figure 1.2).

- N<sub>2</sub>O: Il semble clair que sa concentration est assez indépendante de l'altitude jusqu'à un niveau de  $\sim 14$  km aux pôles et de  $\sim 17$  km dans les régions tropicales, avec une valeur moyenne de 0.292 ppmv. Au delà, une baisse de la concentration se produit puisque N<sub>2</sub>O est la source principale de NO formé dans la réaction:



dont l'importance croît avec la présence de l'atome excité d'oxygène qui est formé à partir de la photodissociation de l'ozone. La concentration diminue d'un facteur 100 vers 50 km.

- $NO_2$  et  $NO$  sont deux gaz très importants par leur participation dans certains cycles de destruction d' $O_3$ . Très intéressante est l'existence d'une augmentation considérable des concentrations de ces deux gaz avec l'altitude après un minimum à  $\sim 2$  km pour  $NO$  et à  $\sim 9$  km pour  $NO_2$ . Vers 30-40 km se produit un maximum de concentration de  $NO_2$ , tandis que le rapport de mélange de  $NO$  croît jusqu'à la mésosphère. La raison en est l'oxydation du  $N_2O$ , déjà décrite, et la transformation facile de  $NO_2$  en  $NO$ . Les activités humaines permettent la croissance de l'abondance de ces composants près du sol.

- $SO_2$  et  $H_2S$  sont des molécules dont les abondances naturelles sont très affectées par les activités humaines et, dans le cas de  $SO_2$ , par l'activité volcanique (voir mesures de raies rotationnelles de cette molécule après l'éruption du Mt. Pinatubo en *Read et al.*, 1993, [70]). Il est donc difficile de pouvoir parler d'un comportement général. Des mesures au niveau du sol de l'abondance de ces gaz se font couramment, mais il y a très peu de données sur leur distribution verticale.

Quelques notes à propos d'autres molécules qui n'absorbent pas et n'émettent pas de rayonnement dans la bande de fréquences qui nous occupe. Leur importance est due à leur rôle dans certains processus chimiques associés aux autres molécules:

- $CO_2$ : Sa concentration est assez forte dans les basses couches, typiquement entre 325 et 330 ppmv. Il semble qu'à 25-30 km il existe un maximum peu prononcé (340-350 ppmv dans un modèle standard). Ce maximum peut être lié à une intense production de ce gaz dans le processus:



ce qui peut se confirmer d'une façon indirecte par l'observation d'un minimum de concentration de  $CO$  à peu près à cette altitude.

- $CH_4$ : La caractéristique principale de sa distribution verticale typique est l'indépendance avec l'altitude jusqu'à  $\sim 12$  km. Pour les latitudes intermédiaires sa concentration se situe entre 1.50 et 1.55 ppmv. Au-delà, la concentration diminue

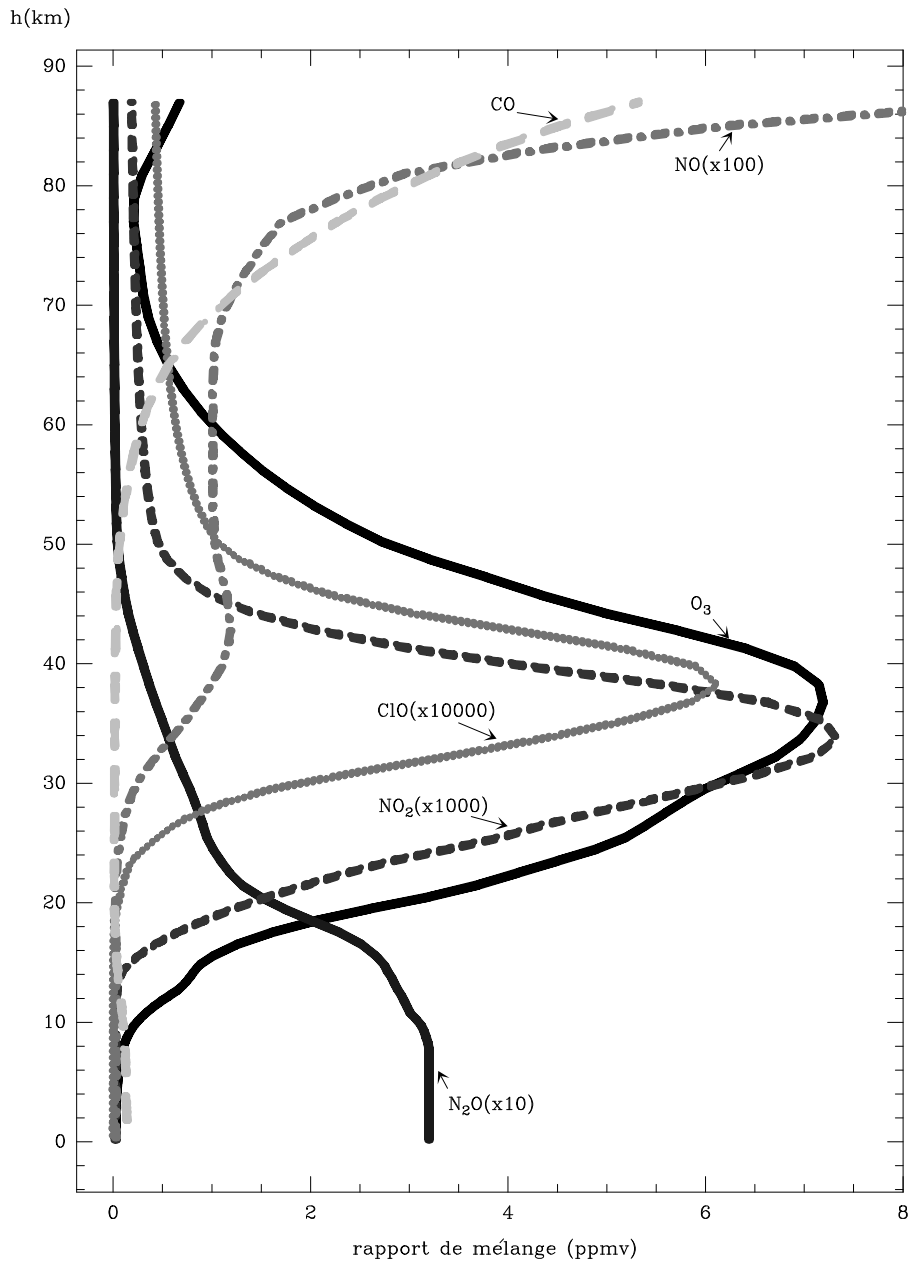


FIG. 1.3 - Profils standards d'abondance des différents gaz mineurs atmosphériques obtenus de l'atmosphère standard U.S. Std. 1976 des latitudes tempérées en hiver.

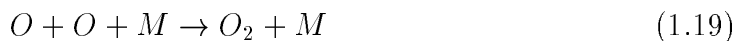
et atteint quelques 0.30 ppmv à 50 km. Cette baisse peut être liée à l'augmentation de la concentration du radical OH, du Chlore et de l'atome d'oxygène dans l'état <sup>1</sup>D, qui détruisent les molécules de méthane par réactions photochimiques.



## 1.3 Introduction à la chimie atmosphérique

La chimie atmosphérique est complexe avec la participation d'un très grand nombre de molécules. Les activités humaines ont introduit de nouveaux composants chimiques et donc une certaine altération de ce système. On peut distinguer deux grands groupes de réactions: celles qui se produisent entre les différentes molécules atmosphériques, et les processus de photodissociation par le rayonnement solaire incident. Ce deuxième groupe introduit un cycle diurne très marqué dans les abondances de certaines espèces. Jusqu'à présent on a développé un certain nombre de modèles permettant de calculer les concentrations des espèces chimiques en fonction de l'altitude et d'éventuelles autres variables telles que la latitude, la longitude, le temps... Ces modèles essaient de reproduire les phénomènes naturels et parfois les impacts de l'activité humaine. Pour citer quelques exemples, il y a le modèle MOGUNTIA (*Crutzen et Zimermenn*, 1991 [23]) et aussi REPROBUS (*Lefèvre*, 1995 [47]). Dans le cadre de ce travail on va s'intéresser à l'étude de la chimie associée aux espèces O, O<sub>2</sub> et O<sub>3</sub>. L'effet de l'introduction d'autres gaz sur les abondances relatives de ces trois espèces est un thème très actuel de recherche. L'importance de l'ozone dans la détermination de la structure physique de la stratosphère et de la mésosphère, ainsi que son rôle dans la protection de la surface terrestre contre le rayonnement ultraviolet ont déjà été évoqués.

La première théorie simple sur la chimie des espèces oxygénées pures dans l'atmosphère terrestre fût introduite par Chapman (1930) [62]. Dans cette théorie l'auteur avait introduit cinq réactions, dont deux de photodissociation des molécules O<sub>2</sub> et O<sub>3</sub>. Ces réactions sont:



où M est un troisième corps qui intervient pour la conservation d'énergie et de moment cinétique. Les deux premières réactions sont gouvernées par des constantes de photodissociation  $J_1$  et  $J_2$ , tandis que les trois autres possèdent des constantes de réaction  $k_1$ ,  $k_2$  et  $k_3$  respectivement comme il l'a été dit dans la section 1.1. La photodissociation de l'oxygène (reaction 1.17) est due à des photons de longueur d'onde  $\lambda > 242$  nm et la photodissociation de l'ozone (reaction 1.18) est produite par des photons de longueur d'onde inférieure à 1175 nm avec un maximum d'efficacité pour des photons plus énergétiques de longueur d'onde  $< 310$  nm. Dans son premier travail, Chapman avait introduit une sixième réaction:



qui serait la dissociation thermique de l' $O_3$ . Elle fût négligée par la suite car elle est extrêmement lente dans les conditions atmosphériques. La réaction d'absorption de rayonnement UV par  $O_3$  (1.18) suivie des recombinaisons selon (1.19) et (1.20) explique comment l'énergie du rayonnement solaire est transformé en énergie cinétique, phénomène qui gouverne le profil de température de la stratosphère (qui fera l'objet d'une attention spécifique dans ce travail aux chapitres 4 et 5). Les constantes de photodissociation et de réaction s'expriment de telle façon que le nombre de molécules formées ou détruites par seconde sera, selon le cas:  $J_2 n_{O_2}$ ,  $J_3 n_{O_3}$ ,  $k_1 n_O^2 n_M$ ,  $k_2 n_O n_{O_2} n_M$ ,  $k_3 n_O n_{O_3}$ .

L'équation d'équilibre photochimique de la concentration d'ozone (dans une atmosphère d'O,  $O_2$  et  $O_3$ ) est:

$$n_3 = n_2 \left( \frac{J_2 k_2 n_M}{J_3 k_3} \right)^{1/2} \quad (1.23)$$

Les coefficients de réaction  $J_2$  et  $J_3$  dépendent des conditions physiques du milieu et donc varient avec l'altitude, ce qui n'est pas le cas de  $k_1$ ,  $k_2$  et  $k_3$ . Selon le comportement des coefficients de photodissociation de l'oxygène et de l'ozone en fonction de l'altitude, on peut prédire un profil d' $O_3$ . L'accord entre profils observés et calculés par cette théorie simple n'est pas très bon car on ne tient pas compte d'autres réactions où interviennent d'autres composants atmosphériques minoritaires (NO,  $NO_2$ , ClO, radicaux comme H, OH,  $HO_2$ , etc...). Il faut aussi considérer la longue durée de vie des molécules d'ozone en dessous de 30 km, qui permet une redistribution d' $O_3$  par les mouvements atmosphériques. Les équations pour exprimer les variations d'O,  $O_3$  et  $O_2$  en fonction des densités et des constantes des

réactions de la théorie de Chapman sont:

$$\frac{dn(O)}{dt} + n(O)[2k_1n(M)n(O) + k_2n(M)n(O_2) + k_3n(O_3)] = 2n(O_2)J_2 + n(O_3)J_3 \quad (1.24)$$

$$\frac{dn(O_3)}{dt} + n(O_3)[J_3 + k_3n(O)] = k_2n(M)n(O_2)n(O) \quad (1.25)$$

$$\frac{dn(O_2)}{dt} + n(O_2)[J_2 + k_2n(M)n(O)] = n(O_3)J_3 + k_1n(M)n^2(O) + 2k_3n(O)n(O_3) \quad (1.26)$$

où  $n(x)$  est la densité numérique de  $x$ . En partant des deux premières équations nous pouvons en écrire une autre pour l'évolution des abondances d' $O_3$  et  $O$ :

$$\frac{dn(O_3)}{dt} + \frac{dn(O)}{dt} + 2k_1n(M)n^2(O) + 2k_3n(O_3)n(O) = 2n(O_2)J_2 \quad (1.27)$$

Le terme associé à  $k_1$  peut être négligé car cette est réaction assez lente dans les conditions atmosphériques. Maintenant il est possible d'ajouter l'action d'autres molécules. Il faut tenir compte aussi des processus de transport. L'équation générale qui exprime les variations locales des concentrations d' $O_3$  et  $O$  doit être modifiée en tenant compte de ces phénomènes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(O_3)}{\partial t} + \frac{\partial n(O)}{\partial t} + \text{div}[n(O_3)w(O_3)] + \text{div}[n(O)w(O)] \\ + 2k_3n(O)n(O_3) = 2n(O_2)J_2 \end{aligned} \quad (1.28)$$

où  $w(O_3)$  et  $w(O)$  sont des champs de vitesse pour exprimer le transport.

### Gaz minoritaires et contaminants. Action sur l'ozone

On sait que certains gaz atmosphériques minoritaires peuvent jouer un rôle très important dans la chimie des espèces oxygénées. En particulier, on citera les mécanismes de destruction très efficaces des espèces  $O$  et  $O_3$ , catalysés par l'espèce  $X$  qui s'oxyde en  $XO$  par réaction avec  $O_3$ , puis  $XO$  est détruit par réaction avec  $O$ :





Le bilan du cycle est une destruction nette d' $O_3$ . Le problème se trouve dans la récupération de l'espèce initiale  $X$  qui déclenche le cycle à nouveau. Les réactions se terminent quand  $X$  ou  $XO$  entrent en réaction avec des espèces autres que l'oxygène moléculaire et l'ozone. Il est en dehors des objectifs de ce travail de donner une vision complète et détaillée de cette chimie. Nous nous contenterons de signaler que les couples principaux d'agents ( $X, XO$ ) dans la destruction de l'ozone sont: ( $OH, HO_2$ ), ( $NO, NO_2$ ), ( $Cl, ClO$ ), ( $Br, BrO$ ). Parmi eux, les couples halogénés représentent le plus grand danger d'altération des profils d'ozone car leur présence dans l'atmosphère est fortement liée aux activités humaines, pas très bien contrôlées jusqu'à présent. Le cycle lié au chlore est:

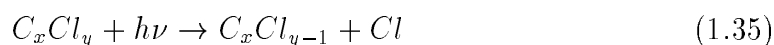
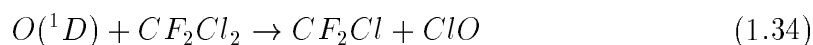


Jusqu'au début des années 70 on ne savait pas grande chose des sources importantes de chlore et on considérait que le cycle (1.31, 1.32) ne jouait pas un rôle important dans la stratosphère. Mais l'introduction des chloro-fluoro-carbones (CFCs) a eu pour conséquence la montée significative et même dangereuse de l'abondance des radicaux  $Cl$  et  $ClO$  dans la stratosphère. On sait que certains produits comme le trichlorofluorométhane ( $CFCl_3$ ) et le dichlorofluorométhane ( $CF_2Cl_2$ ) persistent un temps suffisamment long dans la troposphère pour pouvoir arriver à la stratosphère où ils sont photodissociés. D'autres espèces importantes sont le tétrachlorure de carbone ( $CCl_4$ ) et le chlorure de méthyle ( $CH_3Cl$ ), mais la liste des CFCs de moindre importance est longue. Néanmoins, il existe des réactions qui ralentissent la destruction de l'ozone en détournant le chlore actif ( $Cl, ClO$ ) des réactions. Par exemple:



D'autres processus semblables font intervenir des composants comme le radical  $HO_2$  (sur  $ClO$ ), et  $CH_4$ ,  $H_2CO$ ,  $H_2O_2$ ,  $HO_2$  et  $H_2$  (sur  $Cl$  pour passer en  $ClH$ ). D'autre part, le radical  $OH$  réagit avec  $ClH$  en convertissant une partie de celui-ci à nouveau en  $Cl$ .

Les CFCs participent également à un certain nombre de réactions qui libèrent les espèces Cl et ClO des espèces réservoirs. Par exemple les photodissociations avec libération de Cl, la réaction avec l'atome d'oxygène O(<sup>1</sup>D) qui libère ClO, et la réaction avec OH qui produit des radicaux susceptibles de se photodissocier. Quelques exemples:



Une possible réduction de l'ozone stratosphérique à cause de la paire (Cl,ClO) liée à l'activité humaine a été suggérée au début des années 80. Il semble clair que l'impact de l'homme sur la couche d'ozone est lié aux composants qu'on vient de décrire (CFCs), utilisés principalement dans les aérosols et dans la production de certains matériaux plastiques, produits de nettoyage, systèmes d'air conditionné, réfrigération... Les CFCs dans la basse atmosphère (en dessous de 20 km) sont à peine photodissociés par le rayonnement UV solaire, à cause de l'ozone qui se trouve au dessus. Une partie d'entre eux arrive peu à peu à la basse stratosphère où la photodissociation a lieu et le cycle de destruction catalytique devient efficace. Il a été constaté que ce problème était très important dans les régions polaires (surtout en Antarctique) au début du printemps local. Cela est dû à une activation spéciale du chlore.

Le chlore dans l'atmosphère peut donc se trouver dans deux catégories d'espèces: les espèces actives dans la destruction de l'ozone (Cl,ClO) et les espèces inertes ou "réservoirs" (HCl, ClONO<sub>2</sub>, HOCl, etc...). La solubilité dans l'eau de ces espèces est différente. Dans la basse stratosphère le chlore est essentiellement sous les formes inertes. Dans les zones polaires, des nuages de glace peuvent se former à cette altitude quand la température descend en dessous de 195 K. Une chimie hétérogène a lieu à la surface des particules formant ces nuages (aérosols) qui modifient le bilan de chlore. Lorsque le rayonnement solaire atteint ces régions au début du printemps local les espèces actives du chlore sont majoritaires dans ce vortex polaire. Ce type de nuages est connu sous le nom anglais de "Polar Stratospheric Clouds". Le mécanisme est tel que parfois la quantité intégrée d'ozone peut diminuer de moitié sur un site (*Solomon et al.*, 1986 [83] et *Connor et al.*, 1987 [22])

## Influence de la dynamique atmosphérique

Les mouvements atmosphériques à grande échelle ont une grande importance dans la redistribution des espèces atmosphériques.

Quand le vortex polaire s'affaiblit à la fin du printemps, l'air pauvre en ozone est moins confiné et peut se mélanger librement avec l'air d'autres latitudes où la concentration est plus élevée. La rotation terrestre et les mouvements de l'air stratosphérique favorisent ce mélange qui peut produire de faibles diminutions des concentrations locales d'ozone. Dans l'étude de la formation et de l'évolution du vortex polaire riche en Cl et ClO à une hauteur de  $\sim 20$  km, les observations spectroscopiques des raies de ClO dans le domaine des longueurs d'onde millimétriques et submillimétriques peuvent être d'une grande aide. Des mesures menées par des instruments situés sur le Plateau de Bure (Hautes Alpes, France), montrent que le vortex affaibli pourrait atteindre des latitudes aussi basses que  $45^\circ$  (*Ricaud et al.*, 1996 [73]). Ce fait justifie le projet européen EMCOR pour la construction d'un radiomètre dédié à l'observation des abondances de ClO et d'autres composants mineurs dans la stratosphère.

## Dangers liés à l'altération du profil d'abondance d'ozone

Les sections efficaces d'absorption du rayonnement ultraviolet par l'ozone présentées dans la figure 1.1 sont assez importantes pour assurer que l'absorption atmosphérique est efficace dans la bande 220-290 nm (UV-C, l'ultraviolet solaire le plus dur) à tel point qu'une réduction de 50% de l'ozone stratosphérique n'aurait pas des conséquences importantes sur la surface terrestre. La baisse des concentrations dans la haute stratosphère a des conséquences sur le profil de température: celle-ci diminue dans la zone située entre 40 et 50 km (stratopause). Cette altération produit une redistribution de l'ozone dans la basse stratosphère à des altitudes moindres. Cette redistribution de l'ozone a des conséquences sur l'abondance de ce gaz au niveau de la surface terrestre. C'est un autre problème lié à l'ozone: une forte concentration d'ozone au niveau de la surface, dans l'air qu'on respire, peut provoquer des problèmes respiratoires pour les personnes sensibles.

Dans l'intervalle 290-320 nm (UV-B) la section efficace d'absorption est plus petite que dans le domaine des UV-C de telle sorte que la quantité normale d'ozone peut seulement partiellement absorber le rayonnement dans cette bande (les bandes de Chappuis et Hartley sont plus faibles dans cette zone du spectre). Une baisse de

la quantité stratosphérique d'ozone pourrait provoquer une transmission importante dans cette bande.

Il y a finalement le domaine des UV-A (320-400 nm) où la transmission atmosphérique est grande. Dans cette bande (à 332.4 nm) on place la longueur d'onde de référence de l'instrument Dobson pour mesurer la quantité intégrée d'ozone. La mesure se base sur la comparaison du flux reçu à 311.45 nm (dans la région UV-B, atmosphère partiellement transparente) avec celui à 332.4 nm.

Le problème est aujourd'hui centré sur les zones polaires où la dynamique générale de l'atmosphère crée, comme on l'avait signalé, des vortex au début du printemps local où des espèces chimiques complexes, considérées comme des réservoirs de Cl ou ClO, s'accumulent. Ce sont les processus ayant lieu dans les PSC qui activent Cl et ClO dans la basse stratosphère, avec pour conséquence une importante destruction d'ozone. La figure 1.4 montre une simulation d'un vortex polaire où il y a de l'air riche en ClO entre 20 et 22 km. La situation qui se dérive pour l'ozone à ce même niveau est montrée dans la figure 1.5.

ClO

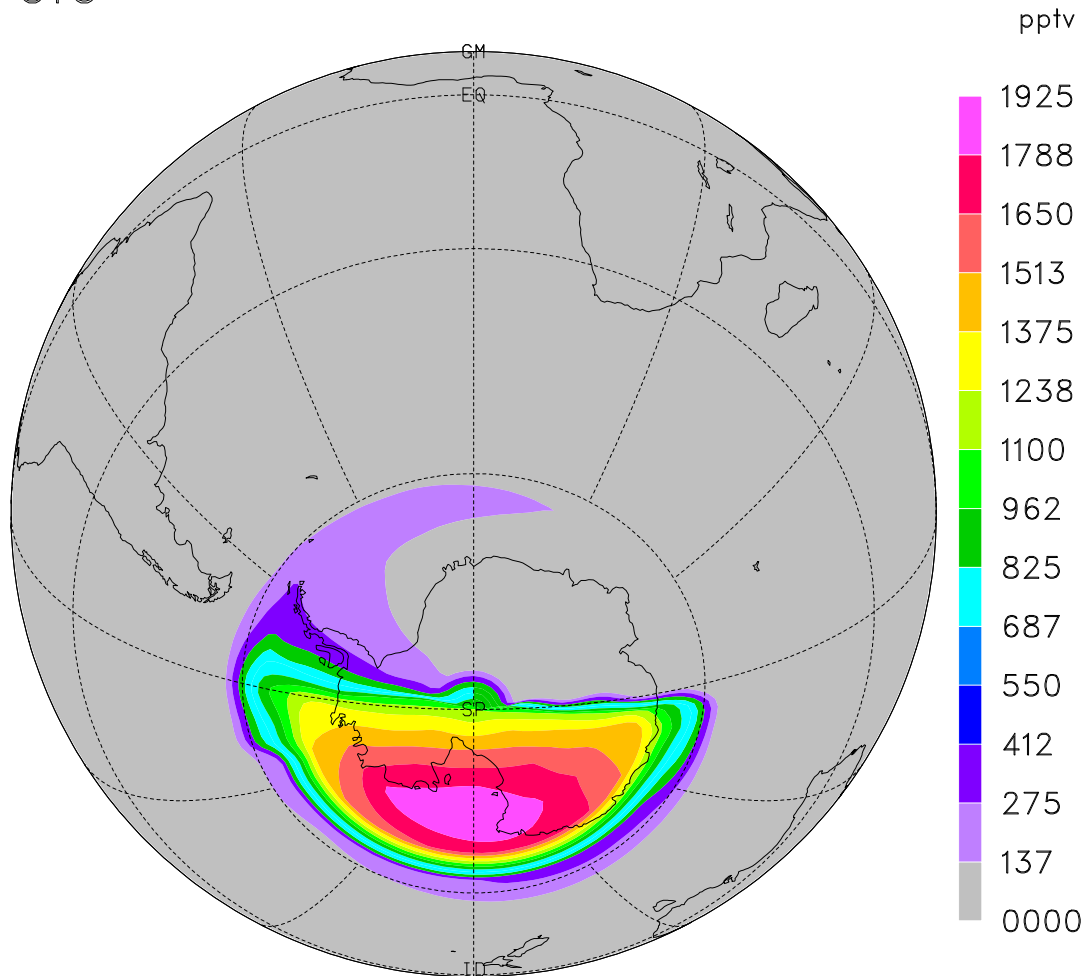


FIG. 1.4 - Vortex polaire d'air riche en ClO dans la basse stratosphère (niveau 42.4 mb) au début du printemps local dans l'hémisphère Sud, selon le modèle 4-D de chimie stratosphérique REPROBUS (F. Lefèvre, Météo-France Toulouse [47]). Ce phénomène semble associé à des processus chimiques qui ont lieu dans les "Polar Stratospheric Clouds", où des molécules "réservoirs" de ClO sont détruites ayant comme conséquence une forte libération du radical ClO dans le vortex.



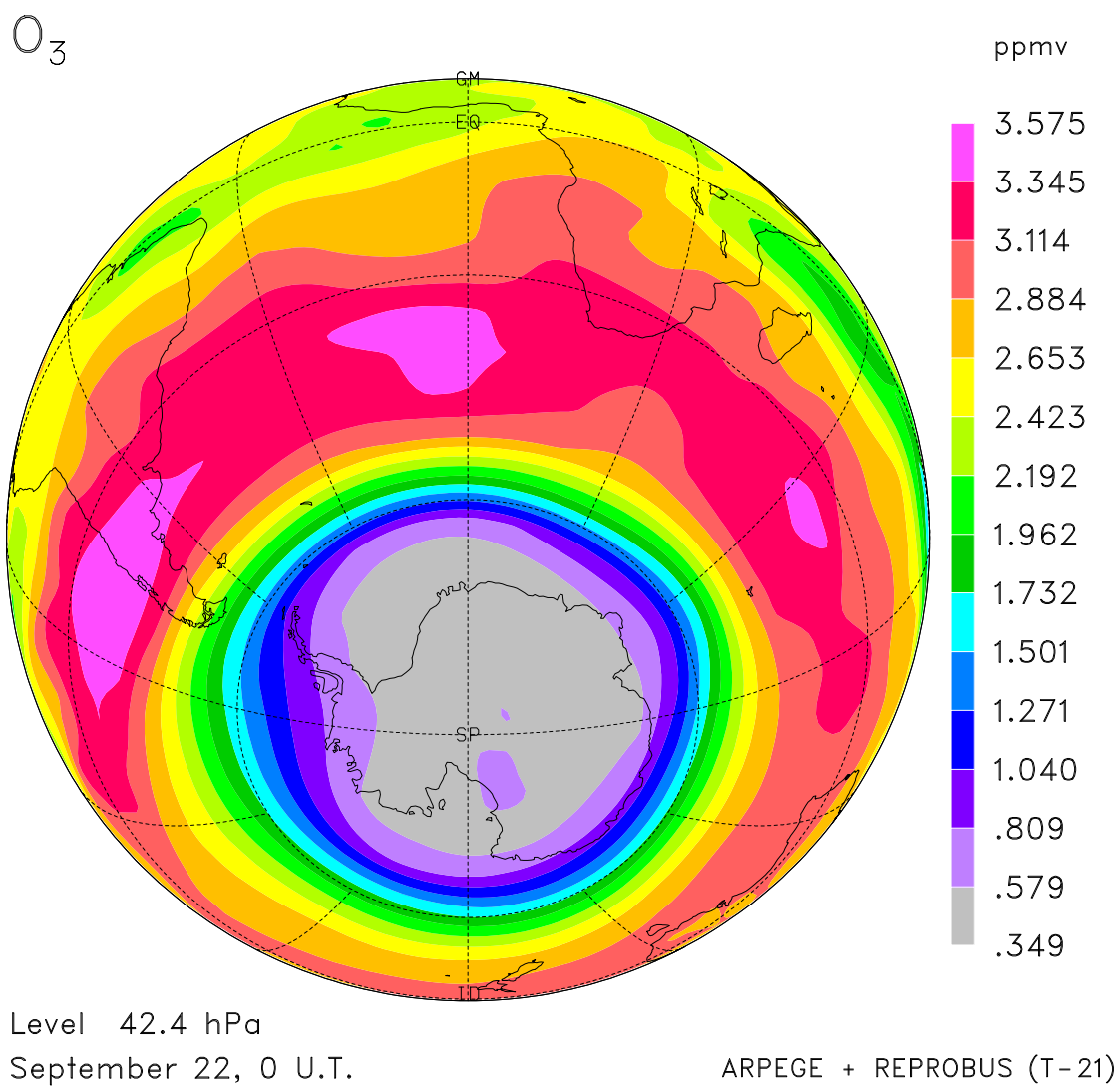


FIG. 1.5 - Quantité d' $O_3$  au niveau 42.4 mb selon le modèle REPROBUS dans le même cas que la figure dernière figure. La diminution d' $O_3$  à 20-22 km d'altitude sur la région du "vortex" polaire où les PSC sont confinées est connue sous le nom de "trou d'ozone".



## Chapitre 2

# Transfert de rayonnement atmosphérique aux longueurs d'onde millimétriques et submillimétriques

### 2.1 Introduction

Le but du modèle de transfert de rayonnement décrit dans ce chapitre est de reproduire l'émission atmosphérique dans le domaine des fréquences de 1 à 1000 GHz. Il a été développé pour servir d'outil d'interprétation dans le travail expérimental décrit dans les prochains chapitres, sur la base d'un logiciel écrit par *J. Cernicharo* [18] (1988). La théorie générale du transfert de rayonnement a été utilisée avec les simplifications acceptables pour une application à l'atmosphère terrestre dans le domaine de longueurs d'onde concerné. Ces simplifications consistent essentiellement en la possibilité d'utiliser l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local (ETL) et en l'application de l'approximation de Rayleigh-Jeans à la loi de Planck pour les températures typiques de l'atmosphère dans les premiers 100-120 km (avec des corrections à partir de  $\sim 250$  GHz). La validité de l'équilibre thermodynamique local permet d'utiliser la loi de Boltzmann pour le calcul des populations des niveaux d'énergie moléculaires et la loi de Maxwell pour la distribution des vitesses. Les principaux agents d'absorption et d'émission de l'atmosphère dans cette région du spectre électromagnétique se trouvent dans le tableau 2.1. Dans la plupart des cas,

ces molécules émettent et absorbent d'une façon importante dans l'atmosphère dans leurs transitions rotationnelles dans l'état électronique et vibrationnel fondamental. Dans le but de mieux comprendre la physique des phénomènes qui font l'objet de ce travail, il est nécessaire de présenter brièvement la spectroscopie rotationnelle des principales molécules atmosphériques.

Pour bien comprendre la physique de base du transfert de rayonnement, celui-ci doit être étudié d'un point de vue microscopique. Nous allons nous limiter à rappeler l'équation de base du transfert radiatif en l'absence de processus de diffusion. Ceux-ci ne sont pas importants dans le domaine de fréquences étudié par ciel clair, i.e. en l'absence de nuages et d'hydrométéores (pluie, neige, etc...). Considérons un cylindre de section  $d\sigma$  et longueur  $ds$  dans l'atmosphère; et calculons la différence d'énergie radiative au cours de la traversée de ce cylindre. Le calcul considère un petit angle solide  $dw$  et l'intervalle de fréquences  $[\nu, \nu + d\nu]$ . On suppose que le rayonnement rentre à travers la section dont le vecteur normal est  $\vec{n}$  avec une intensité  $I(\vec{r}, \vec{n}, \nu)$  dans la direction définie par  $\vec{r}$ , et en sort avec une intensité  $I(\vec{r} + \vec{n}ds, \vec{n}, \nu)$ . On définit alors les coefficients  $\epsilon_\nu$  et  $\kappa_\nu$  d'émission et absorption de façon que l'énergie émise à l'intérieur du cylindre élémentaire qu'on vient de décrire sera:

$$\epsilon_\nu dwd\nu ds d\sigma \quad (2.1)$$

et l'énergie absorbée:

$$\kappa_\nu I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) dwd\nu ds d\sigma \quad (2.2)$$

Dans les expressions (2.1) et (2.2), les coefficients  $\kappa_\nu$  et  $\epsilon_\nu$  tiennent compte déjà de la densité de particules qui peuvent absorber et émettre. La différence entre l'énergie émise et l'énergie absorbée doit vérifier la relation:

$$I(\vec{r} + \vec{n}ds, \vec{n}, \nu) - I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) = \epsilon_\nu dwd\nu ds d\sigma - \kappa_\nu I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) dwd\nu ds \quad (2.3)$$

$$I(\vec{r} + \vec{n}ds, \vec{n}, \nu) - I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) = d\sigma dwd\nu ds \frac{dI(\vec{r}, \vec{n}, \nu)}{ds} \quad (2.4)$$

donc:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{n}, \nu)}{ds} = \epsilon_\nu - \kappa_\nu I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) \quad (2.5)$$

Molécule	$\mu$ (Debyes)	Rapport de mélange max. dans la stratosphère	$\log_{10}$ $r_{Max}\mu^2/Q_{rot}$
O <sub>2</sub>	0.0186	$\sim 2.1 \cdot 10^{-1}$	$\sim -6.4$
H <sub>2</sub> O	1.855	$\sim 5.0 \cdot 10^{-6}$	$\sim -6.8$
<sup>18</sup> OO	0.0186	$\sim 8.6 \cdot 10^{-4}$	$\sim -9.1$
O <sub>3</sub>	0.5337	$\sim 7.0 \cdot 10^{-6}$	$\sim -9.1$
H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O	1.85	$\sim 1.0 \cdot 10^{-8}$	$\sim -9.5$
HF	1.826	$\sim 4.0 \cdot 10^{-10}$	$\sim -9.9$
<sup>17</sup> OO	0.0186	$\sim 1.5 \cdot 10^{-4}$	$\sim -10.1$
H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O	1.85	$\sim 1.9 \cdot 10^{-9}$	$\sim -10.2$
HDO	1.732	$\sim 1.5 \cdot 10^{-9}$	$\sim -10.3$
OH	1.667	$\sim 1.0 \cdot 10^{-9}$	$\sim -10.3$
H <sup>35</sup> Cl	1.109	$\sim 1.5 \cdot 10^{-9}$	$\sim -10.5$
O <sub>2</sub> ( $\nu = 1$ )	0.0186	$\sim 1.0 \cdot 10^{-5}$	$\sim -10.7$
CO	0.1098	$\sim 1.0 \cdot 10^{-7}$	$\sim -10.8$
N <sub>2</sub> O	0.1608	$\sim 2.0 \cdot 10^{-7}$	$\sim -10.9$
O <sub>3</sub> ( $\nu_2 = 1$ )	0.5261	$\sim 7.9 \cdot 10^{-8}$	$\sim -11.0$
H <sup>37</sup> Cl	1.109	$\sim 0.5 \cdot 10^{-9}$	$\sim -11.0$
O <sub>2</sub> ( <sup>1</sup> $\Delta$ )	0.0186	$\sim 3.0 \cdot 10^{-6}$	$\sim -11.0$
HCN	2.984	$\sim 1.0 \cdot 10^{-10}$	$\sim -11.1$
<sup>16</sup> O	0.0186	$\sim 1.0 \cdot 10^{-7}$	$\sim -11.3$
H <sub>2</sub> O ( $\nu_2 = 1$ )	1.855	$\sim 1.9 \cdot 10^{-10}$	$\sim -11.3$
<sup>35</sup> ClO	1.298	$\sim 3.0 \cdot 10^{-10}$	$\sim -11.7$
<sup>18</sup> OOO	0.532	$\sim 2.9 \cdot 10^{-8}$	$\sim -11.8$
O <sup>18</sup> OO	0.532	$\sim 1.4 \cdot 10^{-8}$	$\sim -11.8$
O <sub>3</sub> ( $\nu_3 = 1$ )	0.532	$\sim 9.0 \cdot 10^{-9}$	$\sim -12.0$
HNO <sub>3</sub>	1.99	$\sim 5.0 \cdot 10^{-9}$	$\sim -12.0$
<sup>37</sup> ClO	1.239	$\sim 1.0 \cdot 10^{-10}$	$\sim -12.1$
O <sub>3</sub> ( $\nu_1 = 1$ )	0.532	$\sim 9.0 \cdot 10^{-9}$	$\sim -12.2$
NO	0.1587	$\sim 1.0 \cdot 10^{-8}$	$\sim -12.5$

TAB. 2.1 - Principales molécules déterminant le spectre millimétrique et submillimétrique de l'atmosphère terrestre (si le numéro isotopique n'est pas indiqué on considère qu'il s'agit de l'espèce principale). Les estimations de la troisième et quatrième colonnes proviennent de *Waters*, (1993) [95].

ou bien:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{n}, \nu)}{ds} = -\kappa_\nu [I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) + \frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu}] \quad (2.6)$$

Le rapport entre les coefficients d'absorption et d'émission ( $\epsilon_\nu/\kappa_\nu$ ) est connu sous le nom de **fonction source (S)**. Celle-ci, dans l'hypothèse d'ETL, est égale à la fonction de Planck à la température physique locale.

### Intégration de l'équation de transfert du rayonnement dans les domaines millimétrique et submillimétrique

Le modèle que nous avons construit a pour but de simuler le transfert de rayonnement au sein de l'atmosphère terrestre. Il doit permettre de simuler des spectres attendus au sol ou sur la position d'un satellite. On considère donc une géométrie sphérique générale dans laquelle on peut introduire des corrections pour tenir compte du vrai sphéroïde terrestre. On divise alors l'atmosphère en couches à l'intérieur desquelles les grandeurs physiques (température et pression) et les abondances moléculaires sont considérées comme constantes. Pour chacune de ces couches dont l'épaisseur verticale est  $ds$ , on définit l'épaisseur optique différentielle (sans dimension) de la manière suivante:

$$d\tau_\nu = \kappa_\nu ds \quad (2.7)$$

(le coefficient d'absorption tel qu'on l'a défini ici porte les dimensions [ $L^{-1}$ ]) ce qui permet d'écrire:

$$\frac{dI_\nu(s')}{d\tau_\nu} = -I_\nu(s') + S_\nu(T) \quad (2.8)$$

où  $s'$  est la position dans la trajectoire de propagation. Dans l'hypothèse d'ETL (nombre de processus photo-collisionaux beaucoup plus grand que le nombre de processus diffusifs), on peut remplacer la fonction source  $S$  par la fonction de Planck  $B_\nu(T)$  à la température physique  $T$  de la couche:

$$\frac{dI_\nu(s')}{d\tau_\nu} = -I_\nu(s') + B_\nu(T) \quad (2.9)$$

La solution de cette équation est obtenue en multipliant par  $e^{-\tau_\nu}$  les deux membres de l'équation:

$$\frac{d}{d\tau_\nu}(I_\nu e^{-\tau_\nu}) = B_\nu e^{-\tau_\nu} \quad (2.10)$$

et en intégrant ensuite. L'intensité à la sortie d'une de ces couches (s) peut s'exprimer en fonction de l'intensité à l'entrée [ $I_\nu(0)$ ] de la façon suivante:

$$I_\nu(s) = I_\nu(0)e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s B_\nu(T)e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.11)$$

où  $\kappa_\nu(s')$  est le coefficient d'absorption macroscopique à la fréquence  $\nu$  à la position  $s'$  et  $\tau_\nu(s',s)$  est l'opacité entre les points  $s'$  et  $s$ . A basse fréquence, dans la limite  $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$  on peut utiliser l'approximation de Rayleigh-Jeans et écrire la fonction de Planck comme cela:

$$B_\nu(T) \simeq \frac{2kT\nu^2}{c^3} \quad (2.12)$$

( $k$  est la constante de Boltzmann et  $c$  la vitesse de la lumière). Notons que  $\frac{h\nu}{k} = 4.8$  K à 100 GHz, bien plus petit que les températures de l'atmosphère. Dans le domaine des longueurs d'onde millimétriques et pour l'atmosphère terrestre, il est habituel de remplacer l'intensité  $I_\nu(s)$  par une température de brillance  $T_B$  car pour un corps noir dans la limite R-J la brillance est proportionnelle à la température. On écrit alors pour le rayonnement:  $T_B(s) = (c^3/2k\nu^2)I_\nu(s)$ . On peut donc exprimer l'équation (2.11) de la façon suivante:

$$T_B(s) = T_B(0)e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.13)$$

Dans le domaine des températures atmosphériques cette approximation pose des problèmes au-delà de  $\sim 250$  GHz. Par exemple, pour une température de 250 K et une fréquence de 300 GHz,  $\frac{h\nu}{kT} = 0.06$ . Mais on peut toujours exprimer les résultats avec une température de brillance équivalente, calculée à partir des vraies intensités comme ceci:

$$\frac{2kT_B(s)\nu^2}{c^3} = I_\nu(0)e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s B_\nu(T)e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.14)$$

ou bien:

$$kT_B(s) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/KT_0} - 1} e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s \frac{h\nu}{e^{h\nu/KT} - 1} e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.15)$$

D'un point de vue pratique, la grandeur observable est la température d'antenne. La distribution spatiale des températures de brillance est convoluée avec le diagramme

de rayonnement de l'antenne, qui exprime la sensibilité de l'antenne en fonction de la direction. D'autres caractéristiques techniques interviennent aussi, telles que les largeurs en fréquence des bandes du récepteur, leurs gains relatifs, etc...

Pour le calcul de  $\tau_\nu$  dans une direction quelconque, on doit calculer le coefficient d'absorption  $\kappa_\nu$  en chaque point du parcours. Pour cela on doit tenir compte de toutes les espèces moléculaires absorbantes, la distribution de leur abondance tout au long de ce chemin ainsi que celle de la pression et de la température.  $\tau_\nu$  est alors donné par:

$$\tau_\nu = \sum_{i(\text{couches})} \left( \sum_{j(\text{molec.})} \kappa_{\nu_j} \right)_i \cdot s_i \quad (2.16)$$

où  $s_i$  est le chemin parcouru dans la couche  $i$  d'épaisseur  $s_i$ , tandis que l'indice  $j$  fait référence aux espèces moléculaires. Dans cette dernière expression on suppose une superposition sans termes de couplage entre les différentes raies, ainsi que l'absence de processus de diffusion du rayonnement. À partir de l'opacité totale tout au long d'un chemin de propagation ( $\tau_\nu$ ), on définit la **transmission** que présente celui-ci comme:  $e^{-\tau_\nu}$ .

La solution de l'équation de transfert de rayonnement dans une couche homogène, exprimée sous la forme (2.13) est utilisée comme entrée pour la couche suivante. Si le système d'observation pointe vers le ciel (en excluant toute source externe qui émette à la même fréquence) le signal d'arrière plan [ $T_B(0)$ ] sera le fond cosmique de rayonnement qui est essentiellement un corps noir à la température de 2.73 K. Sa contribution ne doit pas être calculée en utilisant l'approximation de Rayleigh-Jeans car celle-ci n'est plus justifiée dans le domaine millimétrique pour les températures aussi basses. Par exemple, à  $\nu=100$  GHz et  $T=2.7$  K, on obtient  $\frac{h\nu}{kT}=1.8$ .

Si le télescope est sur un satellite et pointe au nadir,  $T_B(0)$  sera beaucoup plus complexe (équation 4.1) température de surface de la terre.

## 2.2 Paramètres moléculaires. Coeff. d'absorption

Etudions ici les calculs à effectuer pour déterminer le coefficient d'absorption [ $\kappa_\nu(z)$ ] à une fréquence  $\nu$  et à une altitude  $z$  pour un certain profil atmosphérique. Il y a d'abord une "contribution résonnante" due aux raies rotationnelles des différentes molécules atmosphériques. L'expression générale du coefficient d'absorption pour



une transition entre deux niveaux d'énergie qu'on appellera 0 (inférieur) et 1 (supérieur) est:

$$(\kappa_\nu)_{01} = \frac{8\pi^3 N\nu}{3hcQ} [e^{-E_0/KT} - e^{-E_1/KT}] g_0 \langle \vec{\mu}_{01} \rangle^2 f(\nu, \nu_{01}) \quad (2.17)$$

où: N est la densité numérique des molécules de l'espèce considérée,  $g_0$  est le poids statistique ou dégénérescence du niveau inférieur,  $\vec{\mu}_{01} = \langle 0 | \vec{\mu} | 1 \rangle$  est l'élément de matrice du moment dipolaire de la transition,  $f(\nu, \nu_{01})$  est une fonction qui décrit le profil de la raie en fonction de la fréquence,  $\nu_{01}$  est la fréquence centrale de la raie ( $\nu_{01} = (E_1 - E_0)/h$ ), et Q est la fonction de partition (rotationnelle dans ce cas).

D'un point de vue spectroscopique, les deux types morphologiques de molécules importants pour ce travail sont: les molécules diatomiques sans centre de symétrie (sauf  $^{16}\text{O}_2$ ) et les rotateurs asymétriques. Résumons brièvement le calcul des paramètres intervenant dans l'équation (2.17), pour ces deux types de molécules.

### 2.2.1 Calcul des fréquences de transition

Il se réduit au calcul des niveaux d'énergie de rotation avec les règles de sélection qui entrent en jeu. Les molécules atmosphériques les plus intéressantes dans le domaine des microondes sont données dans le tableau 2.1. Les molécules diatomiques et linéaires sont assez faciles à aborder, tandis que les triatomiques présentent une certaine complexité.

Les niveaux d'énergie se calculent en partant des valeurs propres du hamiltonien rotationnel. Ainsi, pour les molécules diatomiques ou linéaires, le moment d'inertie par rapport à la rotation autour de l'axe de la molécule ( $I_z$ ) est nul, tandis que les deux autres ne le sont pas ( $I_x=I_y=I$ , ils sont égaux). De cette façon, si la rotation était rigide on aurait l'hamiltonien suivant ( $J_x$  et  $J_y$  sont les moments angulaires autour des axes x et y):

$$H_r = \frac{1}{2I}(J_x^2 + J_y^2) = \frac{J^2}{2I} \quad (2.18)$$

dont les niveaux d'énergie sont:

$$E_J = hBJ(J+1)$$

où  $\mathbf{B}$  ( $= \frac{h}{8\pi^2 I}$ ) est la **constante rotationnelle**, dont les dimensions sont celles d'une fréquence [ $\text{T}^{-1}$ ]. Les règles de sélection générales des transitions dipolaires

électriques ( $\Delta J = \pm 1$ ; avec  $J = 0, 1, 2, \dots$ ), nous montrent que le spectre rotationnel est formé par une série de raies à des fréquences  $\nu = 2B, 4B, 6B, \dots$

Par contre, à cause de la vibration des noyaux par rapport à la position d'équilibre, les fréquences de ces molécules ne peuvent pas être calculées par l'approximation du rotateur rigide si on veut obtenir un certain niveau de précision dans la prédiction des fréquences. De plus, la rotation ajoute un terme centrifuge à l'hamiltonien. Finalement, il faut tenir compte de l'état du nuage électronique. Les molécules dans l'état  $^1\Sigma$  (pas de moment angulaire électronique) sont simplement étudiées en introduisant un potentiel effectif d'interaction qui prend en compte l'effet centrifuge et l'interaction vibration-rotation (consulter *Gordy et Cook*, 1984 [34]). Dans ce cas, le calcul perturbatif des fréquences des transitions rotationnelles peut s'exprimer ainsi:

$$\nu = 2B_v(J+1) - 4D_v(J+1)^3 + H_v(J+1)^3[(J+2)^2 - J^3] + \dots \quad (2.19)$$

où  $B_v$  est une nouvelle constante rotationnelle qui tient compte des corrections citées ("v" signale un certain état vibrationnel).  $D_v$  et  $H_v$  représentent les effets centrifuges au premier et deuxième ordres, corrigés de l'interaction de rotation-vibration. Le terme  $H_v$  est assez petit et il est parfois négligé. Toutes ces constantes, comme  $B$ , sont exprimées en unités fréquence. Dans le cas de molécules dont le nuage électronique possède un spin on aura un nouveau couplage à ajouter à celui de vibration-rotation. Il y a donc trois moments angulaires: orbital du nuage électronique ( $\vec{L}$ ), rotationnel pur ( $\vec{O}$ ) et spin du nuage électronique ( $\vec{S}$ ). La somme des trois moments en mécanique quantique conduit à un nouveau hamiltonien et donc à des niveaux d'énergie. L'importance de la contribution de chaque moment angulaire à l'énergie totale diffère généralement pour chaque molécule. Ceci permet de traiter le couplage des moments angulaires d'une façon perturbative, ce qu'on connaît sous le nom de couplage de Hund.  $O_2$  par exemple répond au cas (b) de Hund, tandis que ClO est presque un cas (a).

Pour les molécules du type rotateur asymétrique (trois moments d'inertie différents) le hamiltonien rotationnel pour le cas rigide est:

$$H_r = AJ_a^2 + BJ_b^2 + CJ_c^2 \quad (2.20)$$

où  $A = h^2/(8\pi^2 I_a)$ ,  $B = h^2/(8\pi^2 I_b)$ ,  $C = h^2/(8\pi^2 I_c)$  sont les **constantes rotationnelles** et  $a$ ,  $b$   $c$  signalent les axes principaux d'inertie. Le rotateur réel est ici plus difficile à décrire que les molécules linéaires. Dans la littérature on trouve différentes manières de décrire les effets qui interviennent. Nous allons utiliser ici la formulation de Watson [97]:

$$\begin{aligned}
H_{vv} = & E_v + [A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v)]J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v)J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v)J_{xy}^2 \\
& - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z J^2 - \Delta_J^v (J^2)^2 - \delta_K^v (J_z^2 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^2) - 2\delta_J^v J_{xy}^2 J^2 \\
& + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 (J^2)^2 + H_J^v (J^2)^3 + h_k^v (J_z^4 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^4) \\
& + h_{JK}^v (J_z^2 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^2) J^2 + 2h_J^v J_{xy}^2 (J^2)^2 + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 \\
& + L_{JK}^v J_z^4 (J^2)^2 + L_{JJK}^v J_z^2 (J^2)^3 + l_K^v (J_z^6 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^6) + l_{JK}^v (J_z^2 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^2) (J^2)^2 \\
& + P_K^v J_z^{10} + P_{KKJ}^v J_z^8 J^2 + p_K^v (J_z^8 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^8) + Q_K^v J_z^{12} + R_K^v J_z^{14} \quad (2.21)
\end{aligned}$$

où  $E_v$  représente l'énergie de l'état vibrationnel  $v$ ;  $A^v$ ,  $B^v$  et  $C^v$  sont les constantes rotationnelles pour cet état vibrationnel. Toutes les autres constantes expriment distorsions de la rotation d'ordres différents et sont normalement exprimées en unités de fréquence; les tableaux 2.5, 2.12 et 2.14 donnent leurs valeurs pour les principales molécules de ce type qu'on a considérées dans le modèle.

### 2.2.2 Calcul de la fonction de partition

La fonction de partition rotationnelle est la somme sur les niveaux rotationnels du produit des poids statistiques de chaque état rotationnel ( $2J+1$  dans le cas de spin  $S=0$  du nuage électronique) par le facteur de Boltzmann associé ( $e^{-E_i/KT}$ ). Pour les molécules linéaires ou diatomiques par exemple, les niveaux d'énergie rotationnels sont  $\sim hBJ(J+1)$  avec des termes perturbatifs qui sont décrits par  $-hD[J(J+1)]^2$  et d'autres de moindre importance (voir équation 2.19). Le pire des cas parmi les molécules de ce type présentes dans notre modèle est CO, où  $D$  est cinq ordres de grandeur moindre que  $B$  (pour toutes les autres, le rapport est plus favorable à  $B$ ). On peut donc faire l'approximation suivante, dans le cas où il n'y a pas de spin nucléaire, pas de spin du nuage électronique et en considérant une molécule hétéronucléaire:

$$Q_r \simeq \sum_J (2J+1) \exp\left[\frac{-hBJ(J+1)}{KT}\right] \quad (2.22)$$

Molécule	vibr.	$Q_{rot}$	Molécule	vibr.	$Q_{rot}$
N <sub>2</sub> O	v=0	1.65873971T	<sup>16</sup> O <sub>2</sub>	v=0	0.72516037T
<sup>17</sup> O <sup>16</sup> O	v=0	0.99623158T	<sup>18</sup> O <sup>16</sup> O	v=0	1.02371944T
<sup>16</sup> O <sub>2</sub>	v=1	0.73322460T	CO	v=0	0.3615187262T

TAB. 2.2 - Fonction de partition des molécules diatomiques ou linéaires considérées dans le modèle de transfert de rayonnement.

Pour des températures très basses (milieu interstellaire) il y a seulement quelques termes qui jouent. Pour le domaine des températures dans l'atmosphère (jusqu'à ~120 km) il est plus facile d'utiliser le développement asymptotique suivant [*Herzberg* [39] (1950)]:

$$Q_r = \frac{kT}{hB} + \frac{1}{3} + \frac{1}{15} \frac{hB}{kT} + \frac{4}{315} (hB/KT)^2 + \dots \quad (2.23)$$

Le nombre de termes à considérer dans cette équation dépend du rapport  $kT/hB$ . Par exemple, pour CO et une température de 250 K:  $\frac{kT}{hB}=90.42$ . Ce rapport est encore plus grand dans le cas de N<sub>2</sub>O. Le premier terme de cette série correspond d'ailleurs au résultat "classique" de la fonction de partition lorsque dans l'équation 2.22 on remplace la somme par une intégrale.

L'approximation qu'on vient de décrire peut être appliquée à la fonction de partition rotationnelle dans chaque niveau vibrationnel. L'expression suppose, comme on l'avait signalé, que la molécule n'a pas de centre de symétrie. Ce n'est pas le cas de la molécule <sup>16</sup>O<sub>2</sub> pour laquelle la moitié des niveaux d'énergie disparaissent par rapport au cas hétéronucléaire (à cause de la symétrie de la fonction d'onde en coordonnées nucléaires). En outre, le nuage électronique <sup>3</sup>Σ de cette molécule introduit une dégénérescence supplémentaire de  $2S+1=3$  sur les niveaux d'énergie due à l'existence d'un spin électronique  $S=1$ . La fonction de partition pour <sup>16</sup>O<sub>2</sub> est donc  $Q_r \simeq 3kT/2hB$ ; pour <sup>16</sup>O<sup>18</sup>O, qui est une molécule hétéronucléaire, on a  $Q_r \simeq 3kT/hB$ . Le tableau 2.2 donne les fonctions de partition rotationnelles pour certaines molécules diatomiques ou linéaires importantes dans l'atmosphère.

Pour les rotateurs non symétriques il est possible d'obtenir une approximation semblable dans le domaine des températures atmosphériques en fonction des constantes rotationnelles principales A, B et C. L'ordre du groupe de symétrie auquel

Molécule	vibr.	$(ABC)^{3/2}$ (MHz <sup>1/2</sup> )	$\sigma$	$Q_{rot}$
<sup>16</sup> O <sub>3</sub>	(0,0,0)	4102510.115	2	0.649728455T <sup>3/2</sup>
<sup>16</sup> O <sup>16</sup> O <sup>17</sup> O	(0,0,0)	3965200.559	1	1.344455353 T <sup>3/2</sup>
<sup>16</sup> O <sup>17</sup> O <sup>16</sup> O	(0,0,0)	4012440.914	2	0.664313224 T <sup>3/2</sup>
<sup>16</sup> O <sup>16</sup> O <sup>18</sup> O	(0,0,0)	3842383.972	1	1.387429043 T <sup>3/2</sup>
<sup>16</sup> O <sup>18</sup> O <sup>16</sup> O	(0,0,0)	3931045.320	2	0.678068387 T <sup>3/2</sup>
<sup>16</sup> O <sub>3</sub>	(0,1,0)	4115266.165	2	0.6477144985T <sup>3/2</sup>
<sup>16</sup> O <sub>3</sub>	(1,0,0)	4081168.336	2	0.6531261T <sup>3/2</sup>
<sup>16</sup> O <sub>3</sub>	(0,0,1)	4034147.908	1	1.321477358T <sup>3/2</sup>
<sup>32</sup> S <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	(0,0,0)	2349137.558	2	1.134679215T <sup>3/2</sup>
H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O	(0,0,0)	318134909.6	2	8.37857613·10 <sup>-3</sup> T <sup>3/2</sup>
H <sub>2</sub> <sup>17</sup> O	(0,0,0)	316714374.3	2	8.41615593·10 <sup>-3</sup> T <sup>3/2</sup>
H <sub>2</sub> <sup>18</sup> O	(0,0,0)	315452842.3	2	8.4498131·10 <sup>-3</sup> T <sup>3/2</sup>
HDO	(0,0,0)	191810441.7	1	2.779324771·10 <sup>-2</sup> T <sup>3/2</sup>
NO <sub>2</sub>	(0,0,0)	6195385.4184	2	0.430965924T <sup>3/2</sup>
SH <sub>2</sub>	(0,0,0)	109117079.2437	2	0.2446913003T <sup>3/2</sup>

TAB. 2.3 - Fonction de partition pour les molécules du type rotateur asymétrique considérées dans ATM.

appartient la molécule ( $\sigma$ ) intervient aussi:

$$Q_r = \left( \frac{5.34 \cdot 10^{-6}}{\sigma} \right) \left( \frac{T^3}{ABC} \right)^{1/2} \quad (2.24)$$

où A, B, C sont exprimés en MHz et T en Kelvin. Le tableau 2.3 regroupe les calculs de la fonction de partition rotationnelle des différentes molécules de ce type qui ont une certaine importance dans l'atmosphère.

### 2.2.3 Calcul des forces d'oscillateur

En spectroscopie moléculaire on utilise assez souvent la force de raie ou d'oscillateur ( $\lambda_g$ ) au lieu de l'élément de matrice du moment dipolaire de la transition. Ces deux grandeurs sont reliées de la façon suivante:

$$|\langle J, \tau | \mu | J', \tau' \rangle|^2 = \frac{\mu_g^2 \lambda_g(J, \tau, J', \tau')}{(2J+1)} \quad (2.25)$$

où  $g$  représente la direction spatiale du moment dipolaire et  $\tau$  représente d'autres nombres quantiques en plus de  $J$ , associés ou non associés à la rotation. D'une façon générale on devrait placer le poids statistique du niveau au lieu de  $2J+1$ , car ce poids statistique peut dépendre de plusieurs nombres quantiques à la fois. De cette façon il est possible de remplacer  $g_0 \cdot |\langle 0 | \mu | 1 \rangle|^2$  par  $\mu_g^2 \lambda_g(J, \tau, J', \tau')$  dans l'équation 2.17 ( $\lambda_g$  n'a pas de dimensions).

## 2.2.4 Profil des raies atmosphériques dans le domaine 1-1000 GHz

Une caractéristique très importante des raies d'émission rotationnelles des molécules atmosphériques est que leur profil dans la troposphère et la stratosphère est dominé par l'effet des collisions entre molécules. Pour étudier l'élargissement des raies spectrales par collisions on utilise parfois **l'approximation de l'impact** qui suppose que la durée totale de la collision peut être négligée face à la période associée au rayonnement émis. Ceci permet d'ignorer l'évolution temporelle des particules qui émettent. La durée des collisions peut s'estimer comme la racine carrée de la section efficace de collision divisée par la vitesse moléculaire moyenne. Pour la plupart des molécules à des températures atmosphériques, ce temps est de l'ordre de  $10^{-12}$  s, et donc l'approximation d'impact a une validité restreinte à quelques centaines de GHz. Ainsi, Rosenkranz (1975) [76] signale le besoin d'aborder l'étude de l'élargissement par pression sur les raies rotationnelles atmosphériques en combinant l'approximation de l'impact avec l'approximation quasistatique. Le besoin de dépasser l'approximation de l'impact est fondamental pour comprendre l'émission dans les ailes lointaines des raies de  $H_2O$  d'après plusieurs travaux théoriques (compilés par *Gamache et al.*, 1994 [31], consulter aussi la référence du même auteur en 1985 [30]), et selon les résultats expérimentaux (Bauer et al., 1987, 1989 et 1993 [6] [7] [8], Godon et al., 1990 [33]). Le profil le plus utilisé pour décrire l'élargissement par l'effet des collisions est le profil de Van Vleck-Weisskopf avec les modifications proposées par Rosenkranz. Sa forme générale, pour les raies isolées est:

$$f(\nu, \nu_{lu}) = \frac{\nu \Delta \nu}{\pi \nu_{lu}} \left[ \frac{1}{(\Delta \nu)^2 + (\nu - \nu_{lu})^2} + \frac{1}{(\Delta \nu)^2 + (\nu + \nu_{lu})^2} \right] \quad (2.26)$$

exprimée en unités de fréquence<sup>-1</sup> pour être compatible avec l'équation 2.17. Rosenkranz (1988) [77] donne une forme corrigée de ce profil qui tient compte des effets

de couplage entre raies proches de la même espèce. Ceci s'applique à l'ensemble des raies de l'oxygène autour de 60 GHz (voir tableau 2.9). D'une façon simple on peut imaginer ce phénomène d'élargissement par les changements de la position des niveaux d'énergie de la molécules quand son hamiltonien est perturbé lorsqu'une autre s'approche. Le profil Van Vleck-Weisskopf explique d'une façon acceptable les observations de beaucoup de raies atmosphériques (voir, par exemple *Ulaby, Moore and Fung*, 1986 [90] ou *Waters*, 1970 [94]) originées dans de régions où la pression est suffisamment élevée, mais pose des problèmes dans ce mêmes conditions quand il est appliqué aux ailes de raies très fortes. Les largeurs collisionnelles des espèces minoritaires atmosphériques vérifient une loi d'addition pour les différentes molécules intervenant dans les collisions. (voir Connor *et al.*, 1986 [21], Gamache *et al.*, 1985 [31], Bouazza *et al.*, 1993 [14]). Cela permet d'écrire l'élargissement collisionnel d'une résonance  $u \rightarrow l$  de l'espèce moléculaire  $X$  comme ceci:

$$\Delta\nu_{lu}(X - air\ sec, T, P) = 0.79\Delta\nu_{lu}(X - N_2, T, P) + 0.21\Delta\nu_{lu}(X - O_2, T, P) \quad (2.27)$$

Ces coefficients varient avec la température et la pression car ces deux variables déterminent une certaine probabilité statistique d'approche entre molécules dans un système, qui sert à établir une distribution statistique des perturbations sur les niveaux d'énergie d'une spèce. La dépendance en pression est presque linéaire car le nombre de collisions est directement proportionnel à la pression. Mais d'autre part la durée de la collision dépend de la vitesse donc de la température. La dépendance de la section efficace de collision dans la température est caractérisée par le type de potentiel intermoléculaire. Ainsi, si la force est de la forme  $r^{-n}$ , on peut montrer que:

$$\Delta\nu \propto T^{-\frac{n+1}{2(n-1)}} \quad (2.28)$$

Pour les forces intermoléculaires  $n$  est typiquement entre 3 et 6. L'élargissement en fonction de T et P est le plus souvent exprimé de la manière suivante:

$$\Delta\nu = \Delta\nu(P_0, T_0) \frac{P}{P_0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^x \quad (2.29)$$

Comme nous le savons, la pression atmosphérique diminue de façon à peu près exponentielle avec l'altitude, donc une raie rotationnelle atmosphérique apporte des informations sur l'abondance du gaz à des altitudes différentes. Mais, quand

on veut déconvoluer une raie pour obtenir un profil d'abondance, il ne faut pas oublier aussi l'effet du profil de température. Plusieurs travaux sur la détermination des coefficients d'élargissement par collision des différents gaz atmosphériques par collisions avec N<sub>2</sub> et O<sub>2</sub> (pour H<sub>2</sub>O, les collisions H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O ne sont pas à négliger, voir tableau 2.6) ont été consultés dans le but de créer la base de données utilisée par ATM. Par exemple, pour l'ozone on utilise des coefficients tirés des références: Bouazza *et al.*, (1993) [14], Rosenkranz (1993) [77] et HITRAN *data base* (1992) [40].

À des pressions suffisamment basses l'élargissement Doppler (dû à l'agitation thermique des molécules, qui produit une dispersion en fréquences du signal détecté par effet Doppler) est compétitif ou même dominant par rapport à l'élargissement collisionnel. Si on calcule la distribution de fréquences reçue d'un échantillon de particules où on néglige l'effet des collisions et dont les vitesses suivent à une loi de distribution maxwellienne, le profil de la raie sera gaussien:

$$f(\nu, \nu_{lu}) = \frac{1}{\Delta\nu_D} \left(\frac{\ln 2}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left[-\ln 2 \left(\frac{\nu - \nu_{lu}}{\Delta\nu_D}\right)^2\right] \quad (2.30)$$

avec

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_{lu}}{c} \left(\frac{2KT}{m} \ln 2\right)^{1/2} = 3.58 \cdot 10^{-7} \nu_{lu} \left(\frac{T}{M}\right)^{1/2} \quad (2.31)$$

où M est le poids moléculaire en g/mol. À une température T=273 K l'élargissement Doppler de la raie à 22 GHz de la vapeur d'eau est de 0.03 MHz, de 0.06 MHz pour les raies d'O<sub>2</sub> autour de 60 GHz et de 0.09 MHz pour une raie d'ozone à environ 100 GHz. Ce mécanisme d'élargissement devient donc dominant dans l'atmosphère au-delà d'environ 70 km d'altitude. Dans la zone de transition (~55-70 km), le profil est une convolution des deux types que l'on vient de décrire.

La présentation générale du modèle de transfert de rayonnement dans l'atmosphère terrestre pour des fréquences entre 1-1000 GHz est maintenant achevée. Nous reviendrons sur quelques développements théoriques spécifiques à certaines situations expérimentales dans les chapitres 4 et 5. Les tableaux 2.2, 2.3, 2.5, 2.6, 2.8, 2.9, 2.11, 2.12, 2.13 et 2.14 donnent la plupart des paramètres spectroscopiques des différents gaz atmosphériques. Un traitement plus approfondi de la spectroscopie de certaines molécules spécialement importantes fait l'objet des sections suivantes.



ESPECE	ETAT VIBR.	ABONDANCE RELATIVE
$H_2^{16}O$	(0,0,0)	1
$H_2^{17}O$	(0,0,0)	$3.749 \cdot 10^{-4}$
$H_2^{18}O$	(0,0,0)	$2.044 \cdot 10^{-3}$
$HDO$	(0,0,0)	$1.492 \cdot 10^{-4}$
$H_2^{16}O$	(0,1,0)	$4.9 \cdot 10^{-5}$ (a 300 K)

TAB. 2.4 - Abondances relatives des différentes variétés de vapeur d'eau dans l'atmosphère terrestre.

Groupe de symétrie: $C_{2v}$ ( $\sigma=2$ ) sauf HDO (*)					
Premiers modes normaux de vibration: (1,0,0) à 3693.8 $cm^{-1}$ , (0,1,0) à 1614.5 $cm^{-1}$ , (0,0,1) à 3801.7 $cm^{-1}$ ,					
Isospin des composants atomiques: $I(H) \rightarrow 1/2$ , $I(^{16}O) \rightarrow 0$ , $I(^{18}O) \rightarrow 0$ , $I(D) \rightarrow 0$ , $I(^{17}O) \rightarrow 1/2$					
$I(\text{total})=1$ ( $g=3$ ) est $^{16,18}H_2O$ ortho; $I(\text{total})=0$ ( $g=1$ ) est $^{16,18}H_2O$ para					
HDO et $H_2^{17}O$ ont une structure hyperfine					
$\mu=1.88$ Debye					
Constantes Rotationnelles en MHz (Ham. de Watson)					
Cte.	$H_2^{16}O$	$H_2^{17}O$	$H_2^{18}O$	$H_2^{16}O$ (0,1,0)	HDO*
A	835839.876	830282.838	825366.08	933204.456	701931.502
B	435346.811	435341.662	435331	440322.2413	272912.599
C	278140.481	277510.396	276950.46	273684.4922	192055.245
$\Delta_J$	37.58280	37.44401	37.2938	41.83214021	10.83749
$\Delta_{JK}$	-173.361	-171.5584	-170.204	-228.001581	34.20729
$\Delta_K$	974.2470	965.7665	959.6441	1725.497463	377.07828
$\delta_J$	15.21950	15.22675	15.2431	17.32500615	3.647126
$\delta_K$	39.6461	36.2566	31.463	112.9078355	63.08750
$H_J$	$1.6284 \cdot 10^{-2}$	$1.48878 \cdot 10^{-2}$	$1.412 \cdot 10^{-2}$	$1.8347298 \cdot 10^{-2}$	$1.1275 \cdot 10^{-3}$
$H_{JK}$	$-5.2534 \cdot 10^{-2}$	$-2.10405 \cdot 10^{-2}$		$8.6400186 \cdot 10^{-2}$	$7.3435 \cdot 10^{-2}$
$H_{KJ}$	-0.542802	-0.481054	-0.45260	-1.34768016	-0.2740667
$H_K$	3.84436	4.409069	5.08511	10.59700385	1.465159
$h_J$	$8.1611 \cdot 10^{-3}$	$7.844745 \cdot 10^{-3}$	$7.8937 \cdot 10^{-3}$	$8.729057 \cdot 10^{-3}$	$6.5461 \cdot 10^{-4}$
$h_{JK}$	$-2.5607 \cdot 10^{-2}$	$-2.11625 \cdot 10^{-2}$	$-1.716 \cdot 10^{-2}$		$3.0963 \cdot 10^{-2}$
$h_K$	0.94784	$5.4855 \cdot 10^{-1}$		2.526141189	0.554951
$L_J$	$-9.270 \cdot 10^{-6}$				$2.1939 \cdot 10^{-6}$
$L_{KKJ}$	$8.5898 \cdot 10^{-3}$	$5.1476 \cdot 10^{-3}$		$2.425021193 \cdot 10^{-3}$	$2.86575 \cdot 10^{-3}$
$L_K$	$-2.50931 \cdot 10^{-2}$	$-5.966754 \cdot 10^{-2}$	$-9.59337 \cdot 10^{-2}$	$-6.571150887 \cdot 10^{-2}$	$-7.557072 \cdot 10^{-3}$
$L_{JK}$	$-2.0367 \cdot 10^{-3}$	$1.53235 \cdot 10^{-3}$			$-7.45685 \cdot 10^{-3}$
$L_{JJK}$	$5.087 \cdot 10^{-5}$				
$l_K$	$-1.0791 \cdot 10^{-2}$	$4.982 \cdot 10^{-3}$	$2.351 \cdot 10^{-2}$	$-1.291206117 \cdot 10^{-2}$	$-5.69461 \cdot 10^{-3}$
$P_K$	$1.2065 \cdot 10^{-4}$	$7.50542 \cdot 10^{-4}$	$1.449 \cdot 10^{-3}$	$0.31760013 \cdot 10^{-3}$	$1.90459 \cdot 10^{-5}$
$p_K$	$5.5019 \cdot 10^{-5}$	$1.88015 \cdot 10^{-5}$		$2.67234997 \cdot 10^{-5}$	$1.4074 \cdot 10^{-5}$

TAB. 2.5 - Paramètres spectroscopiques des différentes espèces de la molécule d'eau (les constantes rotationnelles correspondent à l'hamiltonien de Watson, équation 2.21).

## 2.2.5 Quelques cas particuliers

### L'oxygène moléculaire

Le spectre rotationnel de la molécule d'oxygène répond à un couplage des moments cinétiques angulaires selon un cas (b) de Hund:

$$\vec{J} = \vec{N} + \vec{S} \quad (2.32)$$

où  $\vec{S}$  est l'opérateur spin du nuage électronique et  $\vec{N}$  est la somme de  $\vec{L}$  (opérateur projection sur l'axe de la molécule du moment angulaire orbital du nuage électronique  $\vec{L}$ ) et  $\vec{O}$  (moment angulaire de rotation de la molécule).  $\vec{J}$  est donc le moment angulaire total. La molécule  $^{16}\text{O}_2$  n'a pas de moment dipolaire électrique car elle est symétrique. Son état fondamental électronique  $^3\Sigma_g^-$  possède deux électrons non couplés qui donnent à la molécule un moment magnétique dipolaire. De cette façon, les transitions dipolaires magnétiques (M1) sont possibles et donnent des raies spectrales dans le domaine des microondes. Le spin du nuage électronique est  $S=1$ , donc selon les règles quantiques pour sommer les moments angulaires, le nombre quantique  $J$  (moment angulaire total) peut prendre les trois valeurs suivantes pour un  $N$  donné:

$$J = N - 1, N, N + 1 \quad (2.33)$$

Les règles de sélection des transitions dipolaires magnétiques (M1) sont:

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad \Delta N = 0, \pm 2 \quad (2.34)$$

La molécule d'oxygène a un spin nucléaire total  $I=0$ , ce qui signifie que la fonction d'onde doit être symétrique en coordonnées nucléaires. La fonction d'onde électronique  $^3\Sigma_g^-$  est antisymétrique dans ces mêmes coordonnées. Il est donc nécessaire que la fonction d'onde liée à  $\vec{N}$  soit antisymétrique et ceci impose au nombre quantique  $N$  d'être impair:

$$N = 1, 3, 5, \dots \quad (2.35)$$

Ces exigences ne sont pas nécessaires pour les espèces isotopiques  $^{17}\text{O}^{16}\text{O}$  et  $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$  car les deux noyaux ne sont pas identiques. Les changements relatifs dans l'orientation du spin électronique par rapport à la rotation moléculaire donnent une

bande de raies spectrales spin-rotation autour de 60 GHz et une raie isolée à 118.75 GHz ( $\Delta J = \pm 1, \Delta N = 0$ ). Les transitions où  $\Delta N = \pm 2$  donnent des raies spectrales à la fréquence de 368 GHz et au-delà. Pour toutes ces raies d'O<sub>2</sub> il y a une levée de dégénérescences en présence d'un champ magnétique. Il apparaît alors une structure Zeeman liée à l'interaction du moment magnétique dipolaire de la molécule avec ce champ.

## Monoxyde de chlore

ClO est un radical qui a un intérêt particulier dans l'atmosphère à cause de son rôle dans la destruction de l'ozone stratosphérique (voir chapitre 1). Cela justifie une étude plus approfondie de sa spectroscopie rotationnelle. Son état fondamental électronique ( $^2\Pi$ ) a un moment angulaire orbital ( $\vec{L}$ ) et un spin électronique total ( $\vec{S}$ ) non nuls auxquels s'ajoute le moment de rotation de la molécule ( $\vec{O}$ ). Pour ClO, les opérateurs quantiques ( $\vec{L}$ ), ( $\vec{O}$ ) et ( $\vec{S}$ ) s'additionnent selon un cas (a) de Hund pour donner un moment angulaire total ( $\vec{J}$ ). Les deux espèces isotopiques  $^{35}\text{ClO}$  et  $^{37}\text{ClO}$  ont un spin nucléaire 3/2 qui est responsable d'une structure hyperfine qui divise les niveaux J en 4 sous-niveaux décrits par un nombre quantique F:  $F=J-3/2, F=J-1/2, J+1/2, J+3/2$ . Les règles de sélection dipolaires électriques ( $\Delta F=0, \pm 1$ ) expliquent l'existence de 9 transitions entre deux niveaux J voisins. Sur ces transitions il existe, en plus, un dédoublement  $\Lambda$ . Le moment angulaire orbital électronique dans l'état  $^2\Pi$  interagit aussi avec un champ magnétique externe et produit un effet Zeeman. Pour ClO au sein du champ magnétique terrestre cet effet est de l'ordre de 1 MHz pour les transitions  $J=5/2 \rightarrow 3/2$ , avec une décroissance avec J.

## La vapeur d'eau

Le calcul de l'absorption due à la molécule d'eau sous forme de gaz dans les domaines millimétrique et submillimétrique présente certaines particularités que nous résumons rapidement ici. Un bon nombre d'expériences montrent que les valeurs expérimentales de l'absorption à des fréquences éloignées des résonances sont plus proches des profils de raie calculés dans l'approximation quasistatique (voir, par exemple, Bauer et al., 1993 [8]). Mais, les opacités calculées dans ce cas sont malgré tout plus petites que celles qui sont observées, et la dépendance avec la température n'est pas bien expliquée. Les différents modèles du coefficient d'absorption de la vapeur d'eau proposent différentes formulations pour approcher

au mieux les données expérimentales. Ainsi dans le modèle le plus récent de Liebe *et al.* (1993) [53], on propose une raie fictive de la vapeur d'eau centrée à 1780 GHz et on ajuste son intensité et sa largeur pour reproduire le mieux possible les opacités mesurées jusqu'à 1000 GHz. La différence entre absorption obtenue par calcul (somme sur les raies spectrales et continuum théorique) et les résultats expérimentaux présente les caractéristiques suivantes:

- Elle décroît quand la température augmente.
- La différence est plus importante dans le cas de vapeur d'eau pure que quand celle-ci est mélangée avec d'autres gaz dans l'atmosphère.
- L'écart entre la théorie et les mesures est beaucoup plus fort dans les régions spectrales les plus transparentes (c'est-à-dire, les plus éloignées des résonances).

Quelques mécanismes physiques sont proposés pour expliquer ces différences:

- Contribution des ailes de raies lointaines très fortes de vapeur d'eau, dont la fréquence de résonance est supérieure à 1 THz.
- Existence de dimères (association de deux molécules de  $H_2O$  au moyen de liaisons faibles) et de polymères dans un état stable et qui émettent dans le continu. Ceci pourrait expliquer le comportement de ce continuum avec la température puisqu'en effet la probabilité de ce type d'associations augmente avec la concentration et diminue avec la température. En revanche, la loi de variation de l'absorption avec la température est incompatible quantitativement avec la loi de formation de dimères à partir de l'énergie de liaison du pont hydrogène.

## 2.3 Logiciel de transfert de rayonnement ATM (1-1000 GHz)

ATM est le logiciel, écrit en langage FORTRAN que nous avons développé dans le but simuler l'effet de l'atmosphère sur la transmission d'ondes électromagnétiques jusqu'à 1000 et servir d'aide pour les différents travaux abordés dans la réalisation de cette thèse et prévus pour le futur. Ce logiciel a son origine dans les travaux de *J. Cernicharo*, 1985 [17] dans le but d'estimer l'opacité atmosphérique pour corriger les observations aux longueurs d'onde millimétriques dans différents télescopes européens.

Le principe du logiciel est de calculer l'opacité à chaque fréquence pour les différentes couches d'après les valeurs de la température, pression et abondances des

$J_{K_+} K_-$	$J_{K_+} K_-$	$\nu_c$ (GHz)	$g_l$	$\langle \text{sup}   \vec{\mu}   \text{inf} \rangle^2$	$E_{inf}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\Delta\nu_{T_0, P_0}$ (GHz) ( $O_2 + N_2$ )	$\Delta\nu(H_2O)$ (GHz)	x
6 <sub>1</sub> 6	5 <sub>2</sub> 3	22.2351	3	0.057	446.56	2.85	13.68	0.626
3 <sub>1</sub> 3	2 <sub>2</sub> 0	183.3101	1	0.102	136.16	2.68	14.49	0.649
10 <sub>2</sub> 9	9 <sub>3</sub> 6	321.2256	3	0.089	1283.02	2.30	12.04	0.420
5 <sub>1</sub> 5	4 <sub>2</sub> 2	325.1529	1	0.091	315.78	3.03	15.21	0.619
4 <sub>1</sub> 4	3 <sub>2</sub> 1	380.1974	3	0.123	212.16	3.19	15.84	0.360
10 <sub>3</sub> 7	11 <sub>2</sub> 10	390.1400	1	0.068	1525.31	2.11	11.42	0.330
7 <sub>5</sub> 3	6 <sub>6</sub> 0	437.3467	1	0.088	1045.03	1.50	7.94	0.290
6 <sub>4</sub> 3	5 <sub>5</sub> 0	439.1508	3	0.010	742.11	1.94	10.44	0.360
7 <sub>5</sub> 2	6 <sub>6</sub> 1	443.0183	3	0.088	1045.11	1.51	8.13	0.332
4 <sub>2</sub> 3	3 <sub>3</sub> 0	448.0011	3	0.132	285.42	2.47	14.24	0.510
6 <sub>4</sub> 2	5 <sub>5</sub> 1	470.8889	1	0.102	742.07	1.89	10.56	0.380
5 <sub>3</sub> 3	4 <sub>4</sub> 0	474.6891	1	0.118	488.14	2.07	11.95	0.380
6 <sub>2</sub> 4	7 <sub>1</sub> 7	488.4911	1	0.036	586.48	2.58	14.77	0.570
1 <sub>1</sub> 0	1 <sub>0</sub> 1	556.9360	3	1.500	23.79	3.33	14.66	0.645
5 <sub>3</sub> 2	4 <sub>4</sub> 1	620.7008	3	0.122	488.11	2.28	12.78	0.600
2 <sub>1</sub> 1	2 <sub>0</sub> 2	752.0332	1	2.073	70.09	3.13	13.93	0.690
4 <sub>2</sub> 2	3 <sub>3</sub> 1	916.6200	1	0.161	285.22	2.59	14.06	0.676
5 <sub>2</sub> 4	4 <sub>3</sub> 1	970.3100	1	0.262	383.84	2.48	14.16	0.560
2 <sub>0</sub> 2	1 <sub>1</sub> 1	987.9400	1	0.756	37.14	3.09	15.20	0.660

TAB. 2.6 - Paramètres spectroscopiques complémentaires des raies de l'espèce isotopique principale de la vapeur d'eau ( $H_2^{16}O$ ) entre 1 et 1000 GHz. La dépendance de la largeur de raie collisionnelle avec la température (puissance x) fait référence aux collisions des molécules de vapeur d'eau avec  $O_2$  et  $N_2$ . La dépendance en température de l'élargissement collisionnel à cause de collisions  $H_2O-H_2O$  est linéaire.

ESPÈCE	ETAT VIBR.	ABONDANCE RELATIVE
$^{16}O_2$	$V = 0$	1
$^{16}O^{17}O$	$V = 0$	$7.498 \cdot 10^{-4}$
$^{16}O^{18}O$	$V = 0$	$4.088 \cdot 10^{-3}$
$^{16}O_2$	$V = 1$	$5.124 \cdot 10^{-4}$ (à 300 K)

TAB. 2.7 - Abondance relative des différentes espèces isotopiques d'oxygène moléculaire présentes dans l'atmosphère.

<b>Hamiltonien:</b> $H = B \cdot N^2 + \gamma N \cdot S + \frac{2}{3}\lambda(3S_z^2 - S^2)$				
S: opérateur spin				
N: moment angulaire (orbital + rotation)				
Dist. centrifuge: $B = B_v + D_v N^2$ , $\gamma = \gamma_v + \gamma_{D_v} N^2$ , $\lambda = \lambda_v + \lambda_{D_v} N^2$				
Règles de sélection (M1): $\Delta N = 0$ , $\Delta J = \pm 1$ ; et $\Delta N = \pm 2$ , $\Delta J = 0, \pm 1$ .				
sous-structure Zeeman; $I(^{16}O^{17}O)=1/2 \implies$ structure hyperfine				
$\mu_B = 2\mu_{B\ddot{o}hr} = 1.854 \cdot 10^{-2}$ Debyes				
Constantes Rotationnelles (MHz)				
constante	$^{16}O_2$ v=0	$^{16}O^{17}O$ v=0	$^{16}O^{18}O$ v=0	$^{16}O_2$ v=1
$B_v$	43100.430	41830.6	40707.403(20)	42626.398
$D_v$	0.1436	0.137	-0.13036(147)	0.1489
$\lambda_v$	59501.3489	59500.09	59499.076(41)	59646.079
$\lambda_{D_v}$	0.058305	0.0575	0.05334(82)	0.063257
$\gamma_v$	-252.5875	-245.114	-238.491(8)	-253.193
$\gamma_{D_v}$	$-2.4522 \cdot 10^{-4}$	$-2.4 \cdot 10^{-4}$	$-5.52(142) \cdot 10^{-4}$	$-2.5241 \cdot 10^{-4}$

TAB. 2.8 - Constants rotationnelles des espèces isotopiques d'oxygène moléculaire dans l'état électronique  $^3\Sigma$ . Voir les paramètres individuels de chaque raie dans la table 2.9.

molécules. Le logiciel a différents catalogues d'atmosphères standard (voir tableau 2.15). Il est possible d'introduire d'autres profils atmosphériques sous un certain format. De plus, on peut utiliser de profils en provenance de quelques campagnes d'observations qui ont été utilisées dans quelques travaux de cette thèse (voir chapitre 4 et aussi le tableau 2.15).

D'autres paramètres, nécessaires pour mener le transfert de rayonnement, peuvent être introduits de manière interactive.

### 2.3.1 Exemples de calculs avec ATM

Une fois développé ce modèle, une série de travaux ont été sur l'étude de l'atmosphère dans les domaines millimétrique et submillimétrique du spectre électromagnétique. Pour ces travaux le logiciel ATM a été un outil de travail fondamental. Les prochains chapitres seront dédiés à ces travaux (collaborations techniques sur des projets de satellites pour l'étude passive de l'atmosphère, travaux pratiques sur les données de satellites aujourd'hui opérationnels, observations de raies rotationnelles

$N_J$	$N'_{J'}$	$\nu_c$ (GHz)	$F_{osc}$	$E_{inf}$ (K)	$N_J$	$N'_{J'}$	$\nu_c$ (GHz)	$F_{osc}$	$E_{inf}$ (K)
1 <sub>1</sub>	1 <sub>2</sub>	56.26477	0.245E+01	4.0	1 <sub>1</sub>	1 <sub>0</sub>	118.75033	0.200E+01	1.0
3 <sub>3</sub>	3 <sub>4</sub>	58.44658	0.671E+01	24.6	3 <sub>3</sub>	3 <sub>2</sub>	62.48626	0.654E+01	24.4
5 <sub>5</sub>	5 <sub>6</sub>	59.59098	0.108E+02	61.8	5 <sub>5</sub>	5 <sub>4</sub>	60.30606	0.107E+02	61.8
7 <sub>7</sub>	7 <sub>8</sub>	60.43478	0.149E+02	115.6	7 <sub>7</sub>	7 <sub>6</sub>	59.16421	0.148E+02	115.7
9 <sub>9</sub>	9 <sub>10</sub>	61.15056	0.189E+02	185.9	9 <sub>9</sub>	9 <sub>8</sub>	58.32388	0.189E+02	186.0
11 <sub>11</sub>	11 <sub>12</sub>	61.80016	0.229E+02	272.7	11 <sub>11</sub>	11 <sub>10</sub>	57.61249	0.229E+02	272.9
13 <sub>13</sub>	13 <sub>14</sub>	62.41123	0.269E+02	376.1	13 <sub>13</sub>	13 <sub>12</sub>	56.96822	0.269E+02	376.4
15 <sub>15</sub>	15 <sub>16</sub>	62.99799	0.309E+02	496.0	15 <sub>15</sub>	15 <sub>14</sub>	56.36340	0.309E+02	496.3
17 <sub>17</sub>	17 <sub>18</sub>	63.56854	0.349E+02	632.3	17 <sub>17</sub>	17 <sub>16</sub>	55.78381	0.349E+02	632.7
19 <sub>19</sub>	19 <sub>20</sub>	64.12778	0.389E+02	785.2	19 <sub>19</sub>	19 <sub>18</sub>	55.22137	0.389E+02	785.6
21 <sub>21</sub>	21 <sub>22</sub>	64.67892	0.429E+02	954.4	21 <sub>21</sub>	21 <sub>20</sub>	54.67115	0.429E+02	954.9
23 <sub>23</sub>	23 <sub>24</sub>	65.22407	0.469E+02	1140.1	23 <sub>23</sub>	23 <sub>22</sub>	54.12997	0.469E+02	1140.6
25 <sub>25</sub>	25 <sub>26</sub>	65.76476	0.510E+02	1342.1	25 <sub>25</sub>	25 <sub>24</sub>	53.59569	0.510E+02	1342.7
27 <sub>27</sub>	27 <sub>28</sub>	66.30205	0.550E+02	1560.5	27 <sub>27</sub>	27 <sub>26</sub>	53.06681	0.550E+02	1561.2
29 <sub>29</sub>	29 <sub>30</sub>	66.83675	0.590E+02	1795.2	29 <sub>29</sub>	29 <sub>28</sub>	52.54225	0.590E+02	1795.9
31 <sub>31</sub>	31 <sub>32</sub>	67.36947	0.630E+02	2046.2	31 <sub>31</sub>	31 <sub>30</sub>	52.02120	0.630E+02	2046.9
33 <sub>33</sub>	33 <sub>34</sub>	67.90068	0.670E+02	2313.3	33 <sub>33</sub>	33 <sub>32</sub>	51.50306	0.670E+02	2314.1
3 <sub>2</sub>	1 <sub>2</sub>	424.76321	0.392E+00	4.0	3 <sub>3</sub>	1 <sub>2</sub>	487.24947	0.128E+00	4.0
3 <sub>2</sub>	1 <sub>1</sub>	368.49844	0.480E-01	6.7	5 <sub>4</sub>	3 <sub>4</sub>	773.83990	0.213E+00	24.7
5 <sub>5</sub>	3 <sub>4</sub>	834.14596	0.630E-01	24.7	5 <sub>4</sub>	3 <sub>3</sub>	715.39332	0.400E-01	27.5

TAB. 2.9 - Raies rotationelles de la molécule  $^{16}\text{O}_2$ . Les raies  $\Delta N=0$  se placent autour de 60 GHz (à l'exception de la transition "fondamentale" à 118.75 GHz que nous appelons ainsi car le niveau d'énergie d'arrivée est le plus bas possible, car pour des raisons de symétrie le niveau  $N_J=0_1$  n'existe pas).

ESPÈCE	ÉTAT VIBR.	ABONDANCE RELATIVE
$^{16}\text{O}_3$	(0,0,0)	1
$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	(0,0,0)	$7.498 \cdot 10^{-4}$
$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	(0,0,0)	$4.088 \cdot 10^{-3}$
$^{16}\text{O}^{17}\text{O}^{16}\text{O}$	(0,0,0)	$3.749 \cdot 10^{-4}$
$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$	(0,0,0)	$2.044 \cdot 10^{-3}$
$^{16}\text{O}_3$	(0,1,0) deg=1	$1.8 \cdot 10^{-2}$ (a 250 K)
$^{16}\text{O}_3$	(1,0,0) deg=1	$1.74 \cdot 10^{-3}$ (a 250 K)
$^{16}\text{O}_3$	(0,0,1) deg=1	$2.48 \cdot 10^{-3}$ (a 250 K)

TAB. 2.10 - Abondance relative des différentes espèces isotopiques d'ozone dans l'atmosphère terrestre.

Groupe de symétrie: $C_{2v}$ ( $\sigma=2$ )				
Premier mode normal de vibration: (0,1,0) à 701 $\text{cm}^{-1}$ , (0,0,1) à 1042 $\text{cm}^{-1}$				
Isospin des composants atomiques: $^{16,18}\text{O} \rightarrow 0 \Rightarrow$ absence d'états type ortho et para $^{17}\text{O} \rightarrow 1/2 \Rightarrow$ structure hyperfine assez difficile à résoudre $\mu=0.53\text{Debyes}$				
Constantes Rotationnelles en MHz (Ham. de Watson)				
CNSTE.	$^{16}\text{O}_3$	$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$	$^{16}\text{O}^{17}\text{O}^{16}\text{O}$	$^{16}\text{O}_3(0, 1, 0)$
A	106536.236	98646.687	102351.3064	108137.9111
B	13349.2548	13352.7323	13351.0788	13311.43708
C	11834.3613	11731.7677	11781.6889	11765.02730
$\Delta_J$	1.3618E-02	1.3424E-02	1.3090E-02	1.3701E-02
$\Delta_{JK}$	-5.534E-02	-3.955E-02	-5.7453E-02	-5.3676E- 02
$\Delta_K$	6.3454	5.4242	5.8726	6.9769
$\delta_J$	2.0924E-03	2.1856E-03	1.99395E-03	2.07638E- 03
$\delta_K$	9.692E-02	9.337E-02	11.2146E-02	11.65777E- 02
$H_J$	1.1E-08	0.98E-08		0.880E-08
$H_{JK}$	-0.18E-06	-0.09e-06		7.3123E-08
$H_{KJ}$	-55.1E-06	-47.5E-06	-76.862E-06	-63.013E-06
$H_K$	1.178E-03	0.939E-03	1.1675E-03	1.4463E-03
$h_J$	5.3E-09	5.6E-09		5.579E-09
$h_K$	67E-06	65E-06	95.691E-06	95.382E-06
$h_{JK}$	-0.18E-06	-0.29E-06		-0.344E-06

TAB. 2.11 - Constantes rotationnelles des espèces symétriques d'ozone considérées dans ce travail, à partir de *Depannemaecker et al. (1977)*, *Rinsland et al. (1991)* et *Monnanteuil et al. (1978)*.



Espèces asymétriques: ( $\sigma=1$ )				
Premiers modes asymétriques de vibration: (1,0,0) à 1103 $\text{cm}^{-1}$ , (0,0,1) à 1042 $\text{cm}^{-1}$				
Constantes Rotationnelles en MHz (Ham. de Watson)				
CNSTE	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	$^{16}\text{O}_3$ (1,0,0)	$^{16}\text{O}_3$ (0,0,1)
A	105491.0155	104573.161	106626.9961	104943.939
B	12951.33587	12591.5331	13272.9054	13229.72232
C	11508.01126	11212.5057	11768.89921	11721.83339
$\Delta_J$	1.2888E-02	1.2198E-02	1.3835E-02	1.3691E-02
$\Delta_{JK}$	-5.7082E-02	-5.702E-02	-6.4663E-02	-5.0896E-02
$\Delta_K$	6.2176	6.1129	6.5203	6.2379
$\delta_J$	1.8894E-03	1.8175E-03	1.97496E-03	2.27696E-03
$\delta_K$	11.6952E-02	8.752E-02	10.6636E-02	8.8766E-02
$H_K$		0.71E-08	1.27E-08	0.5109E-08
$H_{JK}$		-0.09E-06	-0.936E-06	4.7787E-08
$H_{KJ}$	-46.571E-06	-51.3E-06	-61.186E-06	-54.032E-06
$H_K$	1.0468E-03	1.103E-03	1.2560E-03	1.1703E-06
$h_J$		4.8E-09		7.060E-09
$h_K$	138.47E-06	69E-06		74.420E-06
$h_{JK}$		-0.34E-06		-0.342E-06

TAB. 2.12 - Constantes rotationnelles des espèces asymétriques d'ozone les plus importantes dans l'atmosphère terrestre, obtenues à partir des mêmes références que le tableau précédent. Les états  $^{16}\text{O}_3$  (1,0,0) et (0,0,1) (vibrationnellement excités) sont liés par une interaction de Coriolis qui doit être prise en compte au moment de calculer les fréquences de résonance (Flaud et al., 1987 [27]).

Molécule	B (MHz)	D (MHz)	H (MHz)	$\mu$ (Debyes)
$\text{N}_2\text{O}$	12561.634821	5.280861E-03	0.000857E-06	0.161
$\text{CO}$	57635.970	0.18358		0.112

TAB. 2.13 - Constantes rotationnelles des molécules atmosphériques linéaires dont l'état fondamental électronique possède un moment angulaire nul (voir l'hamiltonien dans l'équation 2.19). Les constantes sont obtenues d'Andreev et al. (1976) [2] pour  $\text{N}_2\text{O}$  et de Gordy and Cook (1984) [34] pour  $\text{CO}$ .

CONSTANTE	$SO_2$	$SH_2$	$NO_2$
A	60778.5522	310180.2460	239905.4163
B	10318.0722	270884.0551	13002.262123
C	8799.7023	141705.8851	12304.88866
$\Delta_J$	$6.610013 \cdot 10^{-3}$	49.85131	$9.03390 \cdot 10^{-3}$
$\Delta_{JK}$	$-116.9588 \cdot 10^{-3}$	-159.69567	-0.590390
$\Delta_K$	2.5904328	111.85057	80.9439
$\delta_J$	$1.701045 \cdot 10^{-3}$	-6.01909	$9.303288 \cdot 10^{-4}$
$\delta_K$	$25.3531 \cdot 10^{-3}$	262.1654	0.125
$H_J$	$1.0645(63) \cdot 10^{-8}$	$2.81317 \cdot 10^{-2}$	$1.618 \cdot 10^{-8}$
$H_{JK}$	$2.522(260) \cdot 10^{-8}$	$-2.28282 \cdot 10^{-1}$	
$H_{KJ}$	$-19.3691 \cdot 10^{-6}$	$4.594148 \cdot 10^{-1}$	$-7.26165 \cdot 10^{-4}$
$H_K$	$3.71799 \cdot 10^{-4}$	$-2.76462 \cdot 10^{-1}$	0.0977138
$h_J$	$5.4326 \cdot 10^{-9}$	$-5.8411 \cdot 10^{-3}$	
$h_{JK}$	$-1.09 \cdot 10^{-8}$	$2.42811 \cdot 10^{-1}$	
$h_K$	$16.673 \cdot 10^{-6}$	2.870195	
$L_{KKJ}$	$4.1512 \cdot 10^{-9}$	$2.19929 \cdot 10^{-3}$	
$L_K$	$-8.1384 \cdot 10^{-8}$	$-2.34287 \cdot 10^{-3}$	$1.712 \cdot 10^{-4}$
$l_{KJ}$		$-5.32671 \cdot 10^{-3}$	
$l_K$		$-4.1164750 \cdot 10^{-2}$	
$P_{KJ}$		$-3.040037 \cdot 10^{-4}$	
$P_{KKJ}$		$8.034210 \cdot 10^{-4}$	
$P_K$	$1.704 \cdot 10^{-11}$	$-5.152582 \cdot 10^{-4}$	
$p_{JK}$		$-1.2260 \cdot 10^{-5}$	
$p_{KKJ}$		$1.29628 \cdot 10^{-4}$	
$\mu_b$	1.634 Debyes	0.9745 Debyes	0.3161 Debyes

TAB. 2.14 - Constantes rotationnelles en MHz d'autres molécules de type rotateur asymétrique qui ont aussi un intérêt atmosphérique (Helminger et al.(1985) [37] pour  $SO_2$ , Monnanteuil et al. (1989) [61] pour  $NO_2$  et Lane et al. (1985) [45] pour  $SH_2$ ). La molécule de  $NO_2$  présente une structure hyperfine. Les constantes sont exprimées en MHz.

Atmosphères standard sur ATM			
Nom	Caractéristiques	Provenance	Utilisation
U.S. Stnd. 62	* 45°N été et hiver * seulement profils P et T * 0 à 90 km	Référence Num. [91]	Transfert radiatif en général
U.S. Stnd. 76	* 6 types: TROPICALE a SUBARTIQUE hiver * Profils P, T, H <sub>2</sub> O et 27 gaz mineurs. * 0 à 120 km	Référence Num. [92]	Transfert radiatif en général
REPROBUS	* grille 16(long.)x12(lat.)x x12 mois * T, P et 40 gaz * 0 à ~65 km	Référence Num. [47]	Calculs liés au projet EMCOR
Campagnes d'observations qui peut traiter ATM			
Nom	Caractéristiques	Provenance	Utilisation
EVA	T pour 40 niveaux TOVS (zone européenne)	CMS (Lannion)	Comparaisons avec des mesures MSU
ITRA	T-P mesurés par ballon	CMS (Lannion)	Comp. avec des mes. au sol
RAOB	T pour 40 niveaux TOVS H <sub>2</sub> O jusqu'à 300 mb couverture mondiale	NOAA (USA)	Comparaisons avec des mesures SSM/T1 et SSM/T2

TAB. 2.15 - Catalogues atmosphériques et atmosphères expérimentales sur ATM.

de différentes molécules au moyen de radiotélescopes au sol). Dans cette section nous allons présenter quelques résultats très généraux d'ATM.

Par exemple, des calculs sur le spectre atmosphérique global dans la bande couverte par ATM. Ceci donne une idée des capacités du programme (voir figure 2.1). D'autres calculs qui concernent des bandes plus spécifiques sont montrés sur les figures 3.22, 3.23, 4.1, 5.3 et 5.4.

D'autres possibilités d'ATM, liées spécifiquement aux travaux des prochains chapitres seront présentés là.

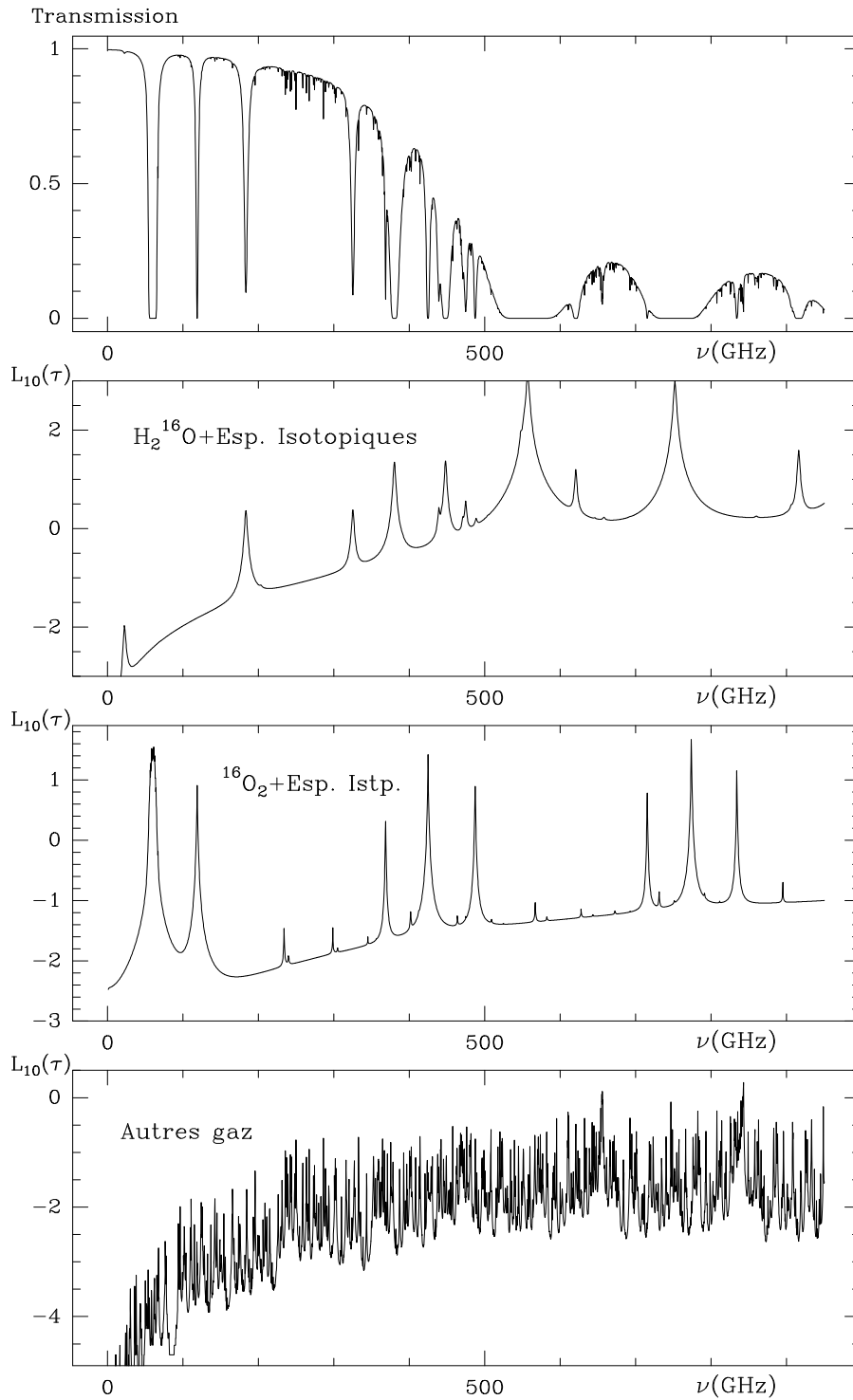


FIG. 2.1 - Calcul de la transmission atmosphérique mené par ATM sur une atmosphère de type standard hiver et un lieu d'observation placé à une altitude de 4 km (en haut). On a séparé les contributions à l'opacité totale (neper) de la vapeur d'eau, de l'oxygène, et des composants atmosphériques mineurs pour cette même situation.

## 2.4 Algorithme d'inversion de spectres

À partir d'un profil physique et chimique de l'atmosphère, un modèle de transfert de rayonnement direct, comme ATM, nous donne les valeurs espérées de la température de brillance atmosphérique pour chaque fréquence à la position d'observation. Pour pouvoir comparer les calculs à une observation réelle nous avons besoin d'introduire dans l'analyse toute une série de paramètres instrumentaux.

Si pour les observations on utilise des antennes de grande taille, le lobe principal du diagramme de rayonnement est très étroit (de l'ordre de quelques minutes ou même secondes d'arc pour  $\lambda$  entre 1 et 3 mm et des antennes de quelques mètres de diamètre). Dans ce cas, on considère la température de brillance dans l'axe du lobe principal et un coefficient de couplage de l'antenne ( $\eta_f$ ) avec le ciel pour calculer la contribution du signal du ciel à la température d'antenne mesurée. Une autre fraction de la température de brillance vient de l'atmosphère immédiatement autour de l'antenne à température  $T_{env}$  [cette contribution de "non-couplage au ciel" est  $T_{env}(1-\eta_f)$ ]. Pour des antennes à bord de satellites, dont la taille est bien sûr beaucoup plus petite, le lobe principal du diagramme de rayonnement a une taille supérieure à 1 degré et les lobes secondaires doivent aussi être pris en compte. Il est nécessaire, dans le but de simuler les observations, de mener une convolution du diagramme de rayonnement avec le résultat du transfert radiatif dans les différentes directions. D'autre part, les récepteurs millimétriques et submillimétriques travaillent en double bande et, parfois, la bande image n'est pas complètement rejetée. Si on appelle  $T_{B1}$  et  $T_{B2}$  les températures de brillance du ciel dans la direction d'observation pour deux fréquences arrivant dans le même canal mais l'une à travers la bande signal et l'autre à travers la bande image, on exprime la température d'antenne mesurée dans ce canal au moyen de la équation (cas de lobe d'antenne très étroit):

$$T_{ciel,mes.} = T_{env} \cdot (1 - \eta_f) + \eta_f [G_S T_{B1} + G_I T_{B2}] \quad (2.36)$$

où  $\eta_f$  est le coefficient de couplage de l'antenne avec les sources externes (grandeur liée aux caractéristiques du diagramme de rayonnement),  $G_S$  et  $G_I$  sont les gains relatifs des deux bandes ("S" pour la bande signal, celle à la fréquence de la raie à observer, et "I" pour la bande image). Ces paramètres vérifient:  $\eta_f \leq 1$ ,  $G_S + G_I = 1$ .

Notre procédure d'inversion de spectres est un ajustement non linéaire généralisé par moindres carrés. Nous partons d'un profil standard de température, pression et distribution verticale des différents gaz atmosphériques. Ce profil sera choisi au départ dans une base de données (*U.S. Std. 62, U.S. Std. 76, REPROBUS,...*) en fonction de la position géographique et de la saison de l'année. Pour la vapeur d'eau, dont le profil troposphérique est très variable et intervient sur le niveau du continu d'absorption pour les observations depuis le sol, nous adoptons un modèle en décroissance exponentielle (voir équations A.1 et A.2). La quantité totale en colonne de la vapeur d'eau au zénith dans la troposphère au site d'observation (pour les observations depuis la surface terrestre) est utilisée comme paramètre libre dans le but d'ajuster ce niveau de continuum dans le processus d'inversion. L'algorithme de transfert radiatif direct calcule les températures de brillance dans les fréquences des deux bandes du récepteur et donne ainsi un spectre synthétique d'après l'expression 2.4. Après avoir calculé les fonctions de sondage (à définir dans le paragraphe 2.4.1) pour le gaz auquel appartient la raie observée, on peut définir les couches atmosphériques où l'abondance de ce gaz peut être utilisée comme paramètre libre pour l'algorithme d'ajustement des observations. Cette méthode utilise une certaine information *a priori* (comme d'autres algorithmes) mais elle a l'avantage de ne pas nécessiter une relation linéaire entre les rapports de mélange et les températures d'antenne. Les paramètres libres sont contrôlés par une sous-procédure qui calcule les dérivées partielles des températures d'antenne calculées par rapport à chacun d'eux et les fait varier dans le sens adéquat pour rapprocher le spectre calculé du spectre observé. Une fois qu'on a atteint un degré de convergence demandé les calculs s'arrêtent.

On voit qu'un bon choix des couches dans lesquelles on peut extraire de l'information d'une façon optimale est fondamental dans le processus d'inversion des observations. Ceci nous mène à parler du concept de fonctions de sondage.

### 2.4.1 Choix des couches. Fonctions de sondage

Le choix approprié de la position et de l'extension verticale des couches atmosphériques d'où il sera possible d'extraire de l'information à partir d'une observation spectroscopique a une très grande importance dans l'analyse de cette observation.

En partant de la solution de l'équation de transfert de rayonnement dans le domaine millimétrique (ec. 2.13), nous pouvons considérer qu'à proximité d'une

résonance d'un gaz mineur atmosphérique (x) les expressions suivantes sont valables:

$$\tau_\nu = \tau_\nu(O_2) + \tau_\nu(H_2O) + \tau_\nu(x) \quad \kappa_\nu = \kappa_\nu(O_2) + \kappa_\nu(H_2O) + \kappa_\nu(x) \quad (2.37)$$

De cette façon, l'équation 2.13 peut s'écrire comme la somme de trois intégrales. Pour la plupart des gaz atmosphériques, on n'attend pas de variations relatives d'abondance par rapport à un profil standard dépassant un ordre de grandeur. Ceci permet de faire une approximation qui consiste à remplacer la distribution verticale du gaz [ $\rho_{gas}(z)$ ] par un profil standard pour le calcul de  $\tau$  dans les exponentielles (en utilisant aussi une information *a priori* de P,T, et  $\rho_{H_2O}$ ). C'est une façon de rendre linéaire l'équation (2.13) par rapport à  $\rho_x(z)$ . On peut donc réécrire (2.13) comme ceci:

$$\begin{aligned} T_{B\nu}(s) = & T_{B\nu}(\infty)e^{-\tau_\nu(\infty,s)\Gamma} + \int_\Gamma T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(O_2, s')ds' + \\ & \int_\Gamma T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(H_2O, s')ds' + \int_\Gamma T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(x, s')ds' \end{aligned} \quad (2.38)$$

qui peut être exprimée de la manière suivante:

$$T_B(\nu) = T_{atm}(\nu) + \int_\Gamma W_{gas}(\nu, s)\rho_{gas}(s)ds \implies T_B^*(\nu) = \int_\Gamma W_{gas}(\nu, s)\rho_{gas}(s)ds \quad (2.39)$$

où  $\Gamma$  est le chemin parcouru par le rayonnement à travers l'atmosphère jusqu'au détecteur,  $T_{atm}(\nu)$  prend en compte la contribution de fond (rayonnement cosmique dans le cas d'observations depuis le sol) et l'émission de l' $O_2$  et  $H_2O$ , qui peut être évaluée à partir de l'information *a priori* [ $P(z)$ ,  $T(z)$  et  $\rho_{H_2O}(z)$ ].  $T_B^*(\nu)$  est égale à  $T_B(\nu)$  mais en enlevant ces contributions pré-évaluées. De la même façon qu'on définit les **fonctions de poids en température** dans la section 4.1.2 pour le sondage du profil de température atmosphérique depuis des satellites, nous appelons ici  $W_x(\nu, s)$  **fonction poids monochromatique pour le sondage du gaz x**. Cette fonction peut, en principe, être évaluée à partir d'un profil standard du gaz x, car si on compare les équations (2.39) et (2.13) pour obtenir la définition de  $W_x(\nu, s)$ , le profil standard du gaz x intervient dans:  $e^{-[\tau_{\nu, O_2} + \tau_{\nu, H_2O} + \tau_{\nu, gas}](s', s)}$ . À partir d'un ensemble d'observations à différentes fréquences (spectroscopie sur une raie d'émission, par exemple), nous aurons un ensemble de fonctions de poids qui indiquent la région atmosphérique à laquelle chaque fréquence est sensible (voir, par exemple, les figures 3.14 et 3.17). Mais, on peut voir que deux fréquences

suffisamment proches sont sensibles à des zones semblables. Cette corrélation entre les informations obtenues par différentes fréquences d'une observation spectroscopique fait que le nombre effectif d'informations indépendantes à obtenir est beaucoup plus petit que le nombre de canaux d'observation. Par exemple, à partir d'un spectre pris depuis le sol avec  $\sim 500$  MHz de largeur de bande et  $\sim 1$  MHz de résolution spectrale, on peut seulement obtenir l'abondance moyenne de la molécule à laquelle appartient la raie observée dans deux ou trois couches d'une extension verticale entre 10 et 15 km (voir sections 3.2 et 3.3).

Pour définir les couches atmosphériques sur lesquelles une observation spectroscopique va nous renseigner on utilise le concept de **fonction de sondage**. L'idée est de trouver l'abondance du gaz dans une couche centrée à  $z_j$  et avec une extension verticale  $\Delta z_j$  selon l'expression suivante:

$$\langle \rho_x(z_j) \rangle = \int_{\Gamma} A(z, z_j) \rho_x(z) dz \quad (2.40)$$

où  $A(z, z_j)$  est la fonction de sondage pour cette couche. Cette fonction peut être déterminée à partir des fonctions de poids monocromatiques du spectre d'après la méthode de Backus-Gilbert (consulter les références *Bevilacqua et al.*, 1988 [10], *Brillet*, 1989 [15] et *Backus-Gilbert*, 1970 [4]).

Il est souhaitable que les fonctions de sondage soient fixées, d'une part, en optimisant la résolution verticale, et d'autre part en minimisant l'erreur associé.

Le problème d'inversion linéaire consiste aussi à trouver des fonctions  $R_i(z_j)$  telles que:

$$\rho_x(z_j) = \sum_i R_i(z_j) T(\nu_i) \quad (2.41)$$

( $i$ =canaux du spectre,  $T(\nu_i)$ : mesures ou quelque chose d'équivalent comme  $T_B^*$  dans l'équation 2.39). Pour connaître la résolution verticale, on remplace (2.39) dans l'équation (2.41):

$$\rho_x(z_j) = \sum_i R_i(z_j) \int_{\infty}^0 W(\nu_i, z) \rho_x(z) dz \quad (2.42)$$



ce qui permet d'écrire:

$$\rho_x(z_j) = \int_{\infty}^0 A_j(z) \rho_x(z) dz \quad (2.43)$$

et donc:  $A_j(z) = \sum_i R_i(z_j) W(\nu_i, z)$ . La **fonction de sondage** pour la couche centrée sur  $z_j$  est ainsi associée à l'ensemble des fonctions de poids monochromatiques  $W(\nu_i, z)$ .

Dans le calcul de  $R_i(z_j)$ , un multiplicateur de Lagrange ( $\gamma$ ) est utilisé pour pondérer l'erreur sur  $\rho_x(z_j)$  associée au bruit (r.m.s.) des spectres [ $(\partial\rho_x(z_j) = -\sum_i R_i(z_j) \partial T(\nu_i)$ , où  $\partial T(\nu_i)$  est ce bruit] et la largeur spatiale de  $A_j(z)$ , qui donne la résolution verticale (des détails dans *Bevilacqua et al.*, 1988 [10]).

Sur ATM, il existe la possibilité de calculer des fonctions de poids monochromatiques  $W(\nu_i, z)$  et des fonctions de sondage  $A_j(z)$  pour une observation spectroscopique donnée d'un gaz mineur. On suppose que le spectromètre utilisé est centré sur une résonance d'un certain gaz atmosphérique (bande:  $\nu_c - \Delta\nu$  à  $\nu_c + \Delta\nu$ ). La résolution spectrale est  $\delta\nu$ . Les commandes pour faire cela sont décrits dans l'appendice A.

Il faut remarquer que cette analyse préliminaire sert à choisir les couches appropriées pour l'inversion. Par contre, la procédure d'inversion elle-même n'est pas basée sur la méthode de Backus-Gilbert.

## 2.4.2 Travailler avec le logiciel d'inversion

Ce logiciel a été dérivé du programme ATM de transfert radiatif direct dans les longueurs d'onde millimétriques et submillimétriques, en tenant compte des différents modes d'observation possibles. Les paramètres spectroscopiques nécessaires pour l'inversion sont lus dans la base de données interne d'ATM une fois que l'on connaît le domaine de fréquences du spectre à traiter. Le logiciel reconnaît automatiquement les gaz atmosphériques qui sont importants dans la bande de fréquences considérée. Il n'en suit que le nombre de commandes est moindre que dans **ATM**. Pour un calcul d'inversion il faut introduire les paramètres nécessaires pour le transfert radiatif qui ne peuvent pas être déduits du fichier contenant le spectre (fréquences et températures d'antenne). Par exemple, on doit introduire la valeur de la masse d'air (commande **AIRM**), le type de profil de température et

pression, etc... Le logiciel d'inversion comporte donc des commandes d'ATM et des commandes spécifiques que nous présentons dans l'appendice B.

Au chapitre 3 sont décrites des applications du logiciel d'inversion sur l'analyse d'observations de raies de  $O_3$  et  $H_2O$  menées avec des radiotélescopes placés en haute montagne. Quelques exemples d'analyse préliminaire pour le choix des couches pour l'inversion sont donnés au cours des sections 3.2 et 3.3. De plus, au chapitre 5 sont présentées une série d'analyses de spectres synthétiques qui simulent des observations au limbe atmosphérique.

## Chapitre 3

# Sondages atmosphériques depuis le sol dans le domaine millimétrique

Ce chapitre décrit une série d'observations qui forment la base expérimentale de ce travail. Une grande partie de ces travaux résulte d'une collaboration entre l'*Observatorio Astronómico Nacional* (Espagne) et le Laboratoire de Radioastronomie Millimétrique de l'Observatoire de Paris (France). On présente ici des observations effectuées depuis la surface terrestre de raies de l'ozone et de la vapeur d'eau, exploitées à l'aide de l'algorithme d'inversion décrit dans le chapitre précédent, ainsi que des observations de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  pour valider un modèle de l'effet Zeeman dans les raies de l'oxygène. Les observations de  $\text{H}_2\text{O}$  à 183 GHz, de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  à 234 GHz et d' $\text{O}_3$  au-dessus de 350 GHz sont nouvelles et ont permis d'obtenir des résultats intéressants sur la vapeur d'eau et le champ magnétique dans la stratosphère et la mésosphère, ainsi que des profils verticaux d'ozone à partir de raies non observées auparavant [66].

### 3.1 Modélisation de l'effet Zeeman sur les raies d' $\text{O}_2$ . Observations de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$

À des fréquences proches d'une résonance d' $\text{O}_2$ , la propagation d'une onde électromagnétique dans l'atmosphère terrestre dépend de sa direction et de son état de polarisation, à cause de l'interaction entre le moment magnétique permanent de cette molécule (dû à une paire d'électrons ayant des spins parallèles dans l'état

fondamental  $^3\Sigma$ ) et le champ magnétique terrestre. Dans ces conditions l'équation de transfert de rayonnement atmosphérique dans le domaine millimétrique n'est plus un problème scalaire mais anisotrope qui dépend de l'état de polarisation.

Dans les travaux présentés ci-dessous et inspirés des articles de *Lenoir* (1967,1968) [48], [49] on définit une matrice de cohérence pour exprimer la température de brillance et on établit une équation de transfert radiatif généralisée pour la calculer. Le travail de modélisation que nous avons réalisé, qui fait partie actuellement du logiciel **ATM**, a comme point de départ un modèle simplifié de H.J. Liebe (NTIA, Boulder, Colorado). Ce modèle ([51], [53]) étudiait la propagation d'une onde électromagnétique avec un certain état de polarisation initial tout au long d'un certain chemin dans l'atmosphère terrestre pour des fréquences proches des résonances  $\Delta N=0$  de la molécule  $^{16}\text{O}_2$ . On calcule l'atténuation que subit l'onde sur ce trajet, ainsi que les changements de polarisation. Nous avons besoin de calculer les températures de brillance associées aux différentes polarisations à cause de l'émission naturelle de l'atmosphère. Pour ceci, il est nécessaire de faire une moyenne temporelle du vecteur de Poynting et en tenant compte de l'émission naturelle des différentes couches atmosphériques qui, à des fréquences très proches des centres des raies de l'oxygène, est polarisée. Pour les valeurs typiques de l'intensité du champ magnétique terrestre (quelques dizaines de  $\mu\text{T}$  au maximum), on peut estimer que l'opacité calculée avec les modèles qui ne tiennent pas compte du champ magnétique est fautive seulement dans un intervalle de fréquences situé entre +5 et -5 MHz autour des fréquences de résonance des raies.

Résumons ici la théorie utilisée pour construire notre propre modèle (*Pardo et al.*, 1995 [64]). Pour une onde électromagnétique qui se propage dans un milieu anisotrope, l'évolution du champ électrique associé à celle-ci peut s'exprimer ainsi:

$$E(z) = \exp[ikz(I + N)]E(0) \quad (3.1)$$

où  $N$  est un tenseur  $3 \times 3$  appelé **tenseur de réfractivité**. *Lenoir* (1967) [48] choisit la solution des équations de Maxwell exprimée en fonction du champ magnétique:

$$H = \exp[-Gz]H(0) \quad (3.2)$$

où  $G$  est le **tenseur de propagation**, et est relié directement au tenseur de réfractivité (voir l'équation 3.20). Les propriétés électromagnétiques du milieu peuvent s'exprimer au moyen d'une permittivité électrique  $\epsilon_0$  (celle du vide très approximative-

ment) et un tenseur de perméabilité magnétique légèrement anisotrope:

$$\mu = \mu_0[I + \chi(w)] \quad (3.3)$$

avec  $\chi_{ij}(w) \rightarrow 0$ ,  $w = 2\pi\nu$ .  $G(w)$  s'exprime directement à partir de ces propriétés physiques:

$$G(w) = ik_0[I + \frac{1}{2}\chi(w)] \quad (3.4)$$

$$k_0^2 = w^2\epsilon_0\mu_0 \quad (3.5)$$

Nous nous intéressons à la propagation selon une direction  $z$  d'une onde plane définie par des champs électrique et magnétique bidimensionaux  $[E_x(z), E_y(z)]$  et  $[H_x(z), H_y(z)]$ . Donc, le tenseur de propagation (ainsi que le tenseur de réfractivité), sera restreint au plan de phase (x,y). Pour déduire une expression générale de l'équation de transfert de rayonnement on a besoin de définir un pseudo-vecteur associé au champ électrique:  $E_p(z, w)$  ( $E_{px} = -E_y$ ,  $E_{py} = E_x$ ) qui est aussi déduit du champ magnétique:

$$E_p(z, w) = \frac{G(w)}{iw\epsilon_0}H(z, w) \quad (3.6)$$

En partant des équations de Maxwell et en utilisant les dernières définitions on obtient (au premier ordre en  $\chi$ ):

$$\frac{\partial}{\partial z}E_p(z, w) = -iw\mu_0[I + \chi(w)]H(z, w) \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}H(z, w) = -iw\epsilon_0E_p(z, w) \quad (3.8)$$

Si on multiplie (3.7) par  $H^{*T}(z, w)$  et si on ajoute le résultat à la conjuguée transposée de l'équation (3.8) multipliée par  $E_p(z, w)$ , on arrive à:

$$\frac{\partial}{\partial z}(E_pH^{*T}) = -iw\mu_0[I + \chi(w)]HH^{*T} + iw\epsilon_0E_pE_p^{*T} \quad (3.9)$$

et cela, en tenant compte du rapport entre  $E_p$  et  $H$  (eq. 3.6), va nous conduire à:

$$\frac{\partial}{\partial z}E_pH^{*T} + G(w)E_pH^{*T} + E_pH^{*T}G^{*T}(w) = 0 \quad (3.10)$$

Finalement, si on prend la moyenne temporelle de cette dernière équation, on arrive à l'équation différentielle suivante:

$$\frac{\partial}{\partial z} S(z, w) + G(w)S(z, w) + S(z, w)G^{*T}(w) = 0 \quad (3.11)$$

où  $S_{ij}(w) = \langle E_{pi}(w) H_j^*(w) \rangle$ .

L'équation 3.11 peut être décomposée en deux parties, une partie hermitique et une autre antihermitique. La partie hermitique de  $S(z, w)$ ,  $P(w)$ , est très intéressante puisque sa trace est égale à la puissance moyenne qui se propage selon  $+z$ . Les éléments diagonaux principaux ( $P_{xx}$  et  $P_{yy}$ ) sont réels et non négatifs. Ils représentent le spectre de puissance pour les polarisations linéaires selon  $x$  et  $y$ , si on a choisi cette base de polarisation dans le plan de phase. Les éléments non diagonaux sont une façon de mesurer la corrélation croisée entre ces polarisations. On peut décrire aussi les résultats dans une base formée par les polarisations circulaires droite et gauche, ou bien n'importe quelle autre. Il est seulement nécessaire de faire le changement de base approprié. Dans le domaine des longueurs d'onde millimétriques, et pour les conditions atmosphériques, il y a une relation entre l'intensité et la température de brillance qui peut être approximée par la formule de Rayleigh-Jeans. C'est ainsi qu'on peut définir une matrice de température de brillance  $T_B(w)$  à partir de la partie hermitique de  $S$ :

$$dP_0(\theta, \phi) = \frac{kT_B(\theta, \phi)}{\lambda^2} d\Omega \quad (3.12)$$

qui va vérifier:

$$\frac{\partial}{\partial z} T_B(z, w) + G(w)T_B + T_B G^{*T}(w) = 0 \quad (3.13)$$

La dernière équation indique comment la température de brillance évolue quand le rayonnement traverse une couche homogène dans une certaine direction. Mais elle ne tient pas compte de l'émission qui peut se produire dans la couche. Pour l'introduire il faut rajouter au membre de droite le terme matriciel d'émission. Une simplification très importante se produit quand le milieu est en équilibre thermodynamique car:  $\frac{\partial}{\partial z} T_B(z, w) = 0$  dans une couche homogène et donc l'émission est  $G(w)T_e + T_e G^{*T}(w)$  où  $T_e$  est la matrice de température d'émission de la couche. Pour le cas de l'atmosphère de la Terre, cette matrice est diagonale avec des éléments diagonaux égaux à  $T(z)$ . L'équation générale de transfert de rayonnement sera, si on appelle  $T_e$  la matrice  $T(z) \cdot I$  ( $T$ : température physique de la couche,  $I$ : matrice identité):

$$\frac{\partial}{\partial z} T_B(z, w) + G(w)T_B + T_B G^{*T}(w) = G(w)T_e + T_e G^{*T}(w) = T \cdot [G(w) + G^{*T}(w)] \quad (3.14)$$

et sa solution pour une couche située entre  $z_i$  et  $z_f$ , où arrive un champ de rayonnement décrit par une matrice de température de brillance  $T_B(z_i, w)$  est:

$$T_B(z_f, w) = e^{-G(w)\Delta z} T_B(z_i, w) e^{-G^{*T}(w)\Delta z} + T[I - e^{-2A(w)\Delta z}] \quad (3.15)$$

où  $A(w)=[G(w)+G^{*T}(w)]/2$  est la partie hermitique de  $G(w)$ , et  $B(w)=[G(w)-G^{*T}(w)]/2$  la partie antihermitique. Dans le cas où  $A$  et  $B$  commutent, ce qui n'est rigoureusement vrai que pour les directions de propagation qui font un angle de  $0^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ , ou  $270^\circ$  avec la direction du champ magnétique, l'équation 3.15 peut s'écrire ainsi:

$$T_B(z_f, w) = e^{-A(w)\Delta z} T_B(z_i, w) e^{-A^{*T}(w)\Delta z} + T[I - e^{-2A(w)\Delta z}] \quad (3.16)$$

ce qui simplifie le calcul de la matrice de température de brillance. La partie antihermitique  $B(w)$  produit une rotation Faraday dans l'ellipse de polarisation. L'influence de  $B(w)$  sur les éléments de la diagonale de  $T_B$  pour différents angles entre le champ magnétique et la direction de propagation a été étudiée par *Rosenkranz et Stealin* (1988) [79] pour la raie de l'oxygène centrée à 60.43478 GHz ( $N_J=7_7 \rightarrow 7_8$ ). Cette étude a conduit à des différences négligeables si on ne tient pas compte de cette partie antihermitique  $B(w)$ .

La matrice de température de brillance à la sortie de la dernière couche peut s'exprimer d'une manière qui met en évidence la contribution de chaque couche au moyen de matrices de **fonctions de poids généralisées en température**  $\mathbf{W}(i, \nu)$ :

$$T_B(w) = \sum_{i=1}^{n_{couches}} W(i, \nu) T(z_i + \frac{\Delta z_i}{2}) \quad (3.17)$$

$$W(i, \nu) = P_i(w) [I - e^{-2A(z_i + \frac{\Delta z_i}{2}, w)\Delta z}] P_i^{*T}(w) \quad (3.18)$$

où:

$$P_i(w) = e^{-A(n_{couches}, w)} e^{-A(n_{couches}-1, w)} \cdot \dots \cdot e^{-A(i+1, w)} \quad (3.19)$$

On peut partir de la matrice de réfractivité  $N_z$  pour calculer les matrices  $T_B$  ou  $W$  car on peut montrer, à partir de la relation entre  $H$  et  $E_p$  et les équations (3.1) et (3.2) que:

$$\exp[-G(w)z] = C \cdot \exp[ikz(I + N_z)] \cdot C^T \quad (3.20)$$

où  $C$  est la matrice:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Pour établir la solution, il nous reste à connaître la matrice  $T_B$  initiale. Il faut considérer deux cas: a) sondage depuis un satellite avec intersection du lobe de l'antenne et de la surface terrestre, et b) sondage au limbe depuis un satellite ou sondage depuis le sol. Dans le premier cas et à cause de l'énorme opacité atmosphérique totale aux fréquences dont on s'occupe ici, on ne voit pas la surface (cela pourrait ne pas être vrai pour certaines raies très faibles de  $^{16}\text{O}_2$  ou pour des raies des espèces isotopiques, mais celles-ci ne s'utilisent pas pour ce type de sondage). Il n'est donc pas nécessaire d'utiliser une matrice  $T_B$  initiale réaliste (elle n'interviendra pas sur le résultat). Par contre dans le cas b), la température du fond cosmique peut ne pas être négligeable. Comme cette émission n'est pas polarisée à l'origine, la matrice initiale de température de brillance est diagonale avec ses deux éléments non nuls égaux à la contribution du fond cosmique (décrit par un corps noir à 2.73 K). Il faut rappeler que cette contribution dépend de la fréquence car l'approximation de Rayleigh-Jeans n'est pas correcte dans le domaine millimétrique à cause de la basse température de ce corps noir (voir section 2.1).

La partie essentielle du problème que nous venons de décrire est la détermination du tenseur de propagation  $G$  ou de réfractivité  $N$  (équations 3.17, 3.18 et 3.19). Pour cela il est nécessaire de connaître trois choses: a) la position des sous-raies Zeeman, b) leurs intensités relatives et c) la polarisation associée. La spectroscopie Zeeman sur les raies de la bande spin-rotation de l'oxygène est décrite par *Liebe et al.* (1993) [53] et *Lenoir* (1968) [49]. Quant aux raies de l'oxygène situées dans le domaine submillimétrique, d'une nature spectroscopique différente (transitions entre niveaux  $(N,J)$  avec  $\Delta J = \pm 1$  et  $\Delta N = \pm 2$  au lieu de 0 dans les raies de spin-rotation), nous avons effectué les calculs des intensités relatives des sous-raies Zeeman à partir des expressions générales tirées des travaux de *Tinkham and Strandberg* (1955) [86], [87]. Les niveaux d'énergie  $(N,J)$  de l'oxygène perdent leur dégénérescence en présence d'un champ magnétique externe, en donnant  $2J+1$  sous-niveaux d'énergie qui ont un nombre quantique magnétique associé  $M$ . La position de ces sous-niveaux par rapport au niveau d'énergie de l'état dégénéré  $(N_J)$ , en absence de champ magnétique),



qui permet de connaître les fréquences centrales des sous-raies Zeeman, est donnée par:

$$\Delta E = -1.0001\mu_0 MH \cdot \frac{J(J+1) + S(S+1) - N(N+1)}{J(J+1)} \quad (3.22)$$

où S=1 pour O<sub>2</sub> dans son état électronique fondamental,  $\mu_0$  est le magnéton de Böhr et H est l'intensité du champ magnétique externe.

Les règles de sélection pour M sont:  $\Delta M=0, \pm 1$ . Les transitions avec  $\Delta M=0$  s'appellent composantes  $\pi$ , et les  $\Delta M=\pm 1$  sont connues comme  $\sigma\pm$ . L'émission dans ces raies est polarisée car le dipole magnétique s'oriente par rapport au champ externe d'une certaine façon dans chaque état magnétique. Ce phénomène physique peut s'exprimer dans le tenseur de réfractivité du milieu. Dans le cas d'une propagation isotrope et non polarisée, le tenseur de réfractivité (3x3) sera proportionnel à la matrice identité. Les éléments de la diagonale seront de la forme:  $n+in'$ . La partie réelle produira un changement dans la vitesse de propagation (effet de réfraction) et sera responsable d'une certaine dispersion de phase ou délai temporel. Cette partie est composée d'un terme indépendant de la fréquence et d'une contribution chromatique. Comme cet effet peut être négligé pour les phénomènes physiques observables qui nous intéressent,  $n$  sera négligé (on obtient des délais temporels de l'ordre de 4 ps/km à certaines fréquences autour de 60 GHz, *Liebe et al.*, 1993 [53]). D'autre part,  $n'$  est responsable d'une atténuation du flux d'énergie dans la direction de propagation et le coefficient d'absorption macroscopique défini dans l'équation 2.2 sera proportionnel à ce terme  $n'$  à une fréquence donnée. Ce formalisme nous permet de calculer le tenseur de réfractivité N à des fréquences proches d'une résonance d'O<sub>2</sub>. D'une part nous avons une contribution isotrope due au continuum et aux ailes d'autres résonances. D'autre part, existe une contribution anisotrope qui peut s'exprimer ainsi:

$$S_{N_J-N'_J} \sum_M \zeta_M f(\nu, \nu_M) \sigma_M \quad (3.23)$$

où  $S_{N_J}$  est la force d'oscillateur de la raie  $N_J \rightarrow N'_J$ ,  $\zeta_M$  est l'intensité relative de chaque composante Zeeman (valeurs dans la table 3.1),  $f(\nu, \nu_M)$  est la forme de raie adoptée (centrée à la fréquence de la sous-raie), et  $\sigma_M$  est une matrice unitaire de cohérence (*Born and Wolf*, 1964 [13]) qui exprime la polarisation de chaque composante. Pour ces matrices nous prenons un système de référence où l'axe z est parallèle à la direction du champ magnétique. Le rayonnement Zeeman

de type  $\pi$  (pas de changement du nombre magnétique  $M$ ) est polarisé linéairement dans la direction parallèle au champ magnétique tandis que les composantes  $\sigma+$  et  $\sigma-$  sont polarisées circulairement, à droite où à gauche respectivement, dans le plan perpendiculaire au champ magnétique. On peut donc décrire ces états de polarisation comme ceci:

$$\pi \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{\pm} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & \pm(-i) & 0 \\ \pm i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

dans la base formée par les polarisations linéaires dans les directions  $x$  et  $y$  (champ magnétique externe dans la direction  $z$ ).

Nous nous sommes intéressés à la propagation d'une onde plane dans une région où un champ magnétique existe. Le chemin de propagation est divisé en une série de zones où on suppose un champ magnétique constant formant un angle  $\theta$  avec la direction de propagation. Le champ électrique bidimensionnel  $\vec{E}(z)$  est affecté par la matrice de réfractivité dans le plan de phase (perpendiculaire à la direction de propagation  $z$ ). Sur celui-ci, on définit la direction de la polarisation horizontale ( $\vec{H}$ ) comme  $\vec{z} \times B_{geo}^{\vec{}}$ , et la verticale ( $\vec{V}$ ) comme  $\vec{z} \times \vec{H}$ . En utilisant la base  $(\frac{\vec{H}}{|\vec{H}|}, \frac{\vec{V}}{|\vec{V}|})$  on peut écrire le tenseur de réfractivité à une fréquence proche d'une résonance rotationnelle d' $O_2$  comme ceci:

$$\begin{pmatrix} n^*(\nu) & 0 \\ 0 & n^*(\nu) \end{pmatrix} + S_{N_J - N'_{J'}} \sum_{\pi} \zeta_M f_M(\nu) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \text{sen}^2 \theta \end{pmatrix} + S_{N_J - N'_{J'}} \sum_{\sigma+, \sigma-} \zeta_M f_M(\nu) \begin{pmatrix} 1 & -i\delta_{\pm} \cos \theta \\ i\delta_{\pm} \cos \theta & \cos^2 \theta \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

où  $n^*$  représente la contribution isotrope correspondant au continuum et aux ailes d'autres raies,  $S_{N_J - N'_{J'}}$  est la force d'oscillateur (rotationnelle) et les  $\zeta_M$  sont les intensités relatives des composantes Zeeman,  $f(\nu, \nu_M)$  sont des profils de raie individuels pour chaque composante.  $\delta_{\pm}$  est égale à  $+1$  pour des raies  $\sigma+$  et  $-1$  pour  $\sigma-$ . Les relations permettant de calculer les intensités relatives et les fréquences centrales de chaque composante Zeeman sont données dans le tableau 3.1.

On voit que l'émission associée aux composantes  $\pi$  apparaîtra linéairement polarisée selon  $\vec{V}'$  tandis que l'émission  $\sigma_{\pm}$  aura en général une polarisation elliptique dont le grand axe est orienté selon la direction  $\vec{H}'$ . Quand on somme les matrices de cohérence individuelles des composantes Zeeman (comme dans l'équation 3.25) on suppose une incohérence mutuelle. Ainsi, le résultat est hermitique et en plus  $\text{Re}(A_{ij})$  vaut 0 si  $i \neq j$ . Ceci signifie que la matrice  $T_B$  va aussi vérifier  $\text{Im}(T_{Bii})=0$

$\Delta N=0, \Delta J=+1$		
$\pi (M=M_s)$	$\frac{2M(N-1)}{N(N+1)}$	$\frac{3((N+1)^2 - M^2)}{(N+1)(2N+1)(2N+3)}$
$\sigma+ (M=M_s+1)$	$\frac{2[M(N-1)-1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N-M)(N-M+1)}{4(N+1)(2N+1)(2N+3)}$
$\sigma- (M=M_s-1)$	$\frac{2[M(N-1)+1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N+M)(N+M+1)}{4(N+1)(2N+1)(2N+3)}$
$\Delta N=0, \Delta J=-1$		
$\pi (M=M_s)$	$\frac{2M(N+2)}{N(N+1)}$	$\frac{3(N^2 - M^2)}{N(2N+1)(2N-1)}$
$\sigma+ (M=M_s+1)$	$\frac{2[M(N+2)+N+1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N-M)(N-M-1)}{4N(2N+1)(2N-1)}$
$\sigma- (M=M_s-1)$	$\frac{2[M(N+2)-N-1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N+M)(N+M-1)}{4N(2N+1)(2N-1)}$
$\Delta N=-2, \Delta J=-1$		
$\pi (M=M_s)$	$M \left[ \frac{2-(N-2)(N-1)}{J(J+1)} - \frac{2-N(N+1)}{J(J+1)} \right]$	$\frac{3(J^2 - M^2)}{J(2J-1)(2J+1)}$
$\sigma+ (M=M_s+1)$	$1 + \frac{(M+1)[2-(N-2)(N-1)]}{J(J+1)} - \frac{M[2-N(N+1)]}{J(J+1)}$	$\frac{3(J-M-1)(J-M)}{4J(2J-1)(2J+1)}$
$\sigma- (M=M_s-1)$	$-1 + \frac{(M-1)[2-(N-2)(N-1)]}{J(J+1)} - \frac{M[2-N(N+1)]}{J(J+1)}$	$\frac{3(J+M-1)(J-M)}{4J(2J-1)(2J+1)}$
$\Delta N=-2, \Delta J=0$		
$\pi (M=M_s)$	$\frac{2M(2N+1)}{J(J+1)}$	$\frac{3M^2}{J(J+1)(2J+1)}$
$\sigma+ (M=M_s+1)$	$1 + \frac{2M(2N+1)+2-(N-2)(N-1)}{J(J+1)}$	$\frac{3[J(J+1)-M(M-1)]}{4J(J+1)(2J+1)}$
$\sigma- (M=M_s-1)$	$-1 + \frac{2M(2N+1)-2+(N-2)(N-1)}{J(J+1)}$	$\frac{3[J(J+1)-M(M+1)]}{4J(J+1)(2J+1)}$

TAB. 3.1 - Intensités relatives et écart des fréquences centrales des composantes Zeeman par rapport à la fréquence rotationnelle non perturbée; pour obtenir la valeur réelle en MHz il faut multiplier cette valeur par 0.014015H( $\mu$ T). Les expressions sont données en fonction des nombres quantiques du niveau supérieur de la transition.

et  $\text{Re}(T_{Bij})=0$  quand  $i \neq j$ .

Le logiciel **ATM** permet de simuler l'effet Zeeman pour les raies de l'oxygène (voir section A). Pour cette modélisation il a fallu préciser une géométrie en introduisant certains paramètres complémentaires par rapport à ce qui est décrit au chapitre 2. Il faut tenir compte de la latitude, de la longitude et de l'altitude pour obtenir le vecteur du champ magnétique à partir d'un modèle. Il est nécessaire aussi de connaître l'orientation de la direction de propagation par rapport au champ magnétique.

La figure 3.1 montre une simulation de température de brillance pour des raies dans la bande spin-rotation de l'oxygène moléculaire autour de 60 GHz. Quand on travaille dans une base de polarisations linéaires (LV, LH) on obtient un résultat

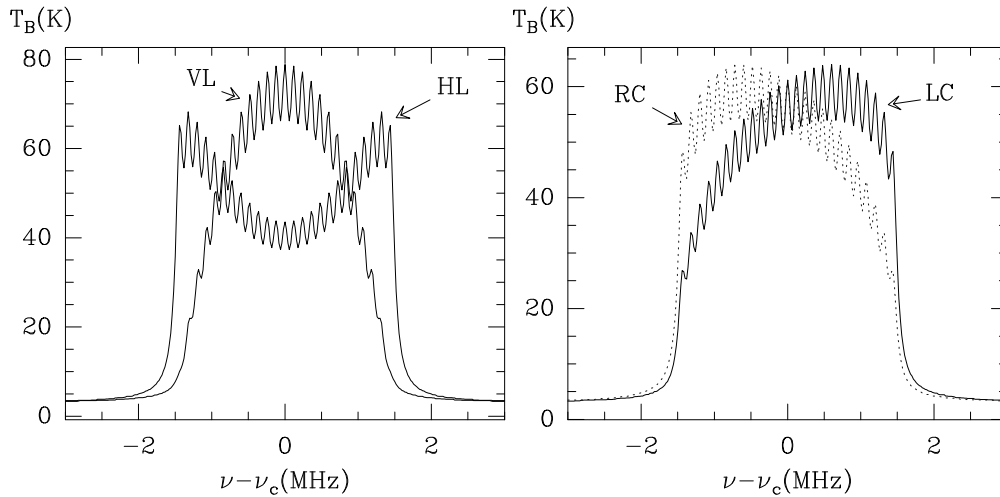


FIG. 3.1 - Exemple de la température de brillance prédite dans le cas d'un sondage au limbe avec un point de tangence très haut (97.5 km sur le point géographique 64.9°N,75°E). La direction de propagation est S-N sur le méridien 75°E. A de telles altitudes les calculs doivent tenir compte la diminution du rapport de mélange de l'oxygène à cause de la dissociation produite par l'UV solaire.

symétrique pour  $T_B$  par rapport au centre de la résonance rotationnelle. Dans le cas de la base de polarisations circulaires (CG, CD), on perd effectivement cette symétrie (les résultats sont tels que  $T_{B11}(\nu)$  pour  $\nu - \nu_c = \Delta\nu$  est le même que l'élément  $T_{B22}(\nu')$  à  $\nu' - \nu_c = -\Delta\nu$ ).

L'intérêt d'étendre le modèle aux raies  $\Delta N=2$  de l'oxygène et ses dérivés isotopiques est dû au fait que de futurs satellites, bientôt opérationnels, ainsi que des télescopes transportés par ballon à des altitudes entre 35 et 40 km, vont être équipés de récepteurs submillimétriques et pourront observer des raies de l'oxygène à des fréquences au-delà de 368 GHz. La plupart de ces systèmes ont des objectifs purement astrophysiques, car ils ont été conçus pour mener des observations impossibles depuis la surface terrestre à cause de l'atmosphère. On peut citer par exemple **PRONAOS** (CNES, France), **ODIN** (Suède, France, Canada) et **MLS** (NASA, USA).

Le satellite ODIN a une vocation partagée entre l'astrophysique et l'aéronomie. Pour le phénomène physique qui fait l'objet de cette section, ce satellite a un grand intérêt car il doit permettre l'observation de raies de  $^{16}\text{O}_2$  à 118.75 et 487.25 GHz (la première est de type  $\Delta N=0$  et la deuxième  $\Delta N=2$ ), en réalisant des sondages au limbe. Les spectromètres qu'on pourra utiliser sont deux autocorrélateurs (1.2 GHz de bande totale et résolutions spectrales entre 300 kHz et  $\sim 1.2$  MHz) et un

spectromètre acousto-optique de 1 GHz de bande totale.

Jusqu'à présent, *Hartmann et al.*, 1996 [36] ont été les seuls à essayer de mesurer l'effet Zeeman par sondage au limbe en utilisant un radiomètre connecté à un spectromètre de 200 kHz de résolution, appelé MAS, embarqué sur une navette de la série "Shuttle" de la NASA en Mars 1992. La fréquence centrale de la raie observée est 61.1506 GHz ( $N_J=9_9 \rightarrow 9_{10}$ ). La figure 3.2 nous montre une comparaison entre un spectre obtenu et les simulations réalisées. La géométrie de l'observation est: point de tangence à 90 km sur les coordonnées géographiques  $65^\circ\text{N}$  et  $88^\circ\text{O}$  où le champ magnétique terrestre a une valeur de  $58.4 \mu\text{T}$  d'après le modèle de *Barraclough et al.* (1985) [5]. Le récepteur était sensible à la polarisation linéaire horizontale. Les calculs théoriques ont une résolution de 10 kHz. Les résultats de ces observations montrent un bruit compatible avec l'effet Zeeman calculé, mais la résolution spectrale n'est pas suffisante pour voir très clairement cette sous-structure.

Nous nous sommes donnés pour objectif de tester la validité du modèle que nous avons développé avant de l'appliquer d'une façon généralisée. Il est évident qu'on ne pouvait pas disposer de mesures satellitaires. Il fallait donc étudier les possibilités de réaliser la validation avec des mesures depuis la surface terrestre.

### 3.1.1 Chercher une raie pour les mesures depuis la Terre

La grande abondance de  $^{16}\text{O}_2$  dans l'atmosphère a comme conséquence que ses raies rotationnelles observées depuis le sol sont saturées et empêchent les observations astrophysiques. Dans la région centrale de la raie (dizaines de MHz autour de la résonance) les basses couches absorbent aussi complètement le signal qui vient de la stratosphère et de la mésosphère (figure 3.3). Par contre, on peut tenter d'observer depuis la terre l'espèce isotopique  $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ , qui possède un rapport d'abondance avec l'espèce principale de  $4 \cdot 10^{-3}$  (voir le tableau 2.7). L'opacité de la raie est beaucoup plus petite et cela peut permettre de voir dans la partie centrale l'émission qui vient d'au-dessus de la troposphère. La figure 3.3 nous montre les éléments de la diagonale de la fonction de poids généralisée en température (définie dans l'équation 3.18) simulées pour certaines résonances de cette espèce isotopique de la molécule d'oxygène depuis la surface terrestre. On a comparé avec les mêmes éléments pour une autre raie de l'espèce  $^{16}\text{O}_2$ . La figure montre très clairement l'impossibilité d'utiliser les raies de  $^{16}\text{O}_2$  pour nos objectifs. En conséquence, nous avons essayé d'observer l'effet Zeeman depuis la Terre et de valider le modèle théorique que nous

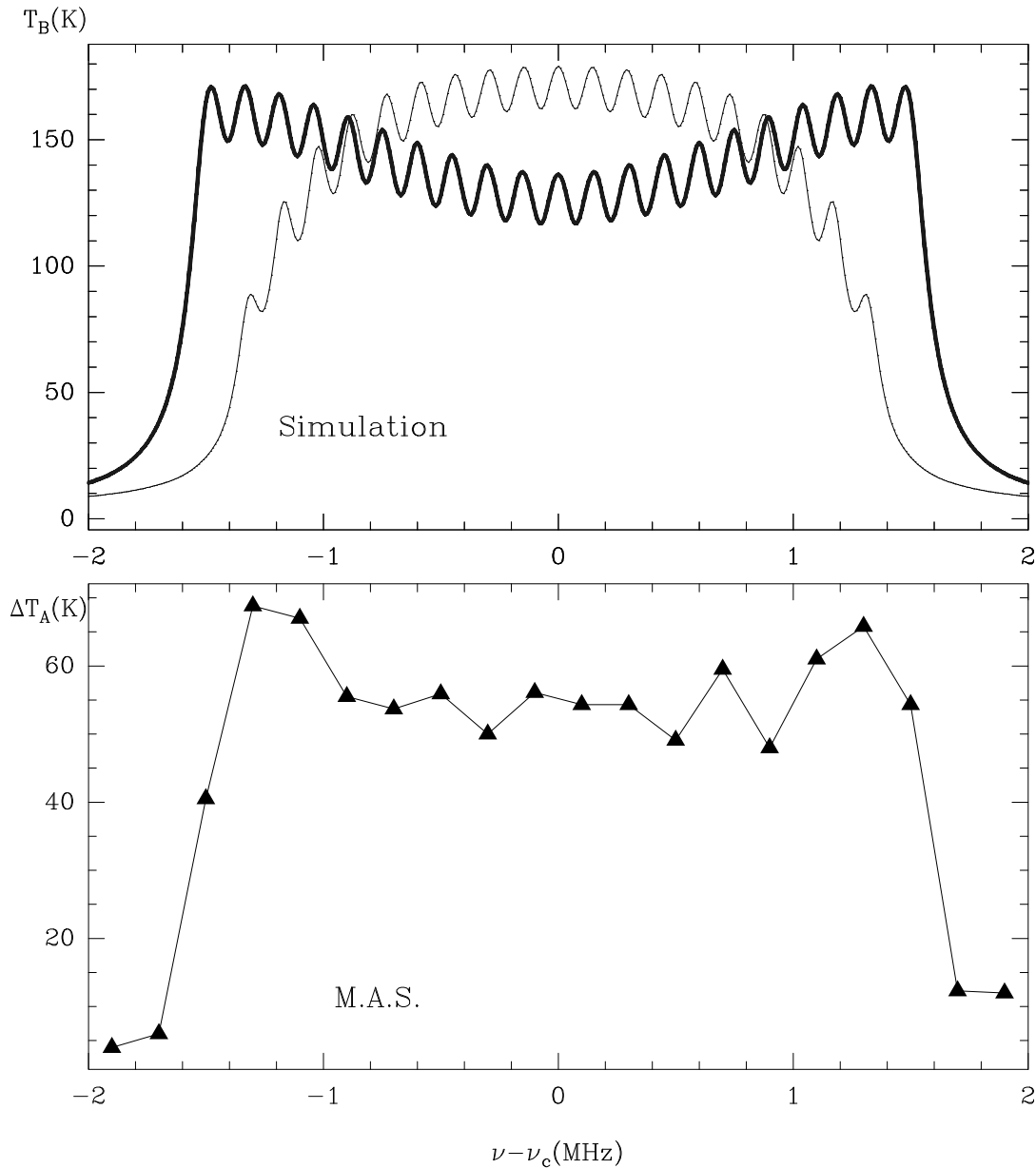


FIG. 3.2 - Comparaison entre une observation réalisée avec le système MAS et les prédictions de  $T_B$  en polarisation linéaire horizontale (émission plus large) et verticale.

venons de présenter en utilisant une raie de  $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$  à une fréquence accessible avec les techniques actuelles. La transition choisie est la  $2_1 \rightarrow 0_1$  dont la fréquence centrale est 233.94611 GHz. Cette raie a une longueur d'onde de l'ordre du millimètre. Il y a plusieurs télescopes millimétriques équipés de récepteurs dans ce domaine. L'observation est techniquement réalisable.

En tenant compte des règles de sélection ( $\Delta M=0, \pm 1$ , avec  $0 \rightarrow 0$  interdite), on attend six composantes Zeeman (voir fig. 3.4). Les composantes  $\Delta M=\pm 1$  sont  $\sigma\pm$ ,

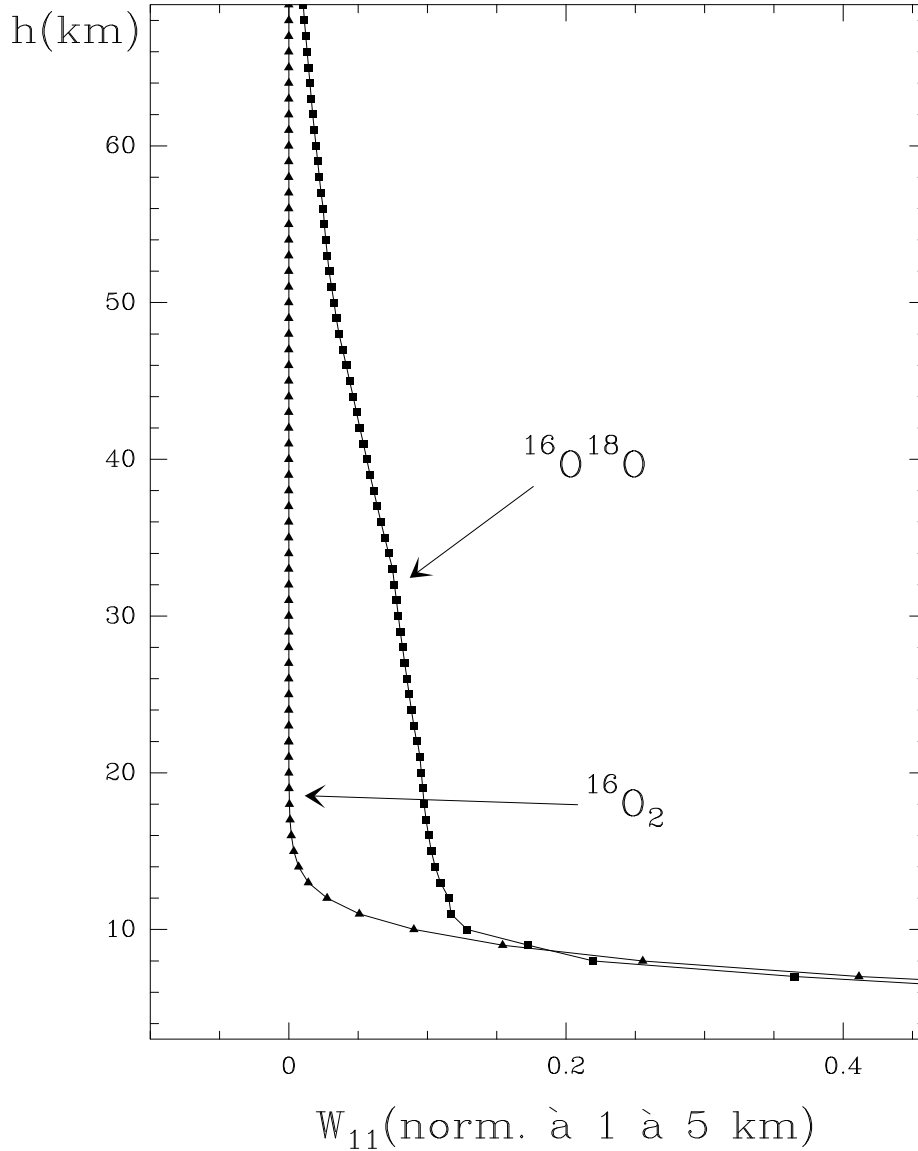


FIG. 3.3 - Élément HL-HL de la matrice de la fonction poids en température à des fréquences écartées de 0.6 MHz du centre des résonances à 233.94671 GHz de <sup>16</sup>O<sup>18</sup>O (carrés) et à 118.75033 GHz de <sup>16</sup>O<sub>2</sub> (triangles) pour une observation depuis le sol en direction parallèle au champ magnétique local sur le Plateau de Bure. Les courbes sont normalisées à la valeur de  $W$  à 3 km dans la raie de <sup>16</sup>O<sup>18</sup>O.

et celles où  $\Delta M=0$  sont  $\pi$ . Comme on l'avait dit, les composantes  $\pi$  apparaissent par interaction des molécules avec le rayonnement linéairement polarisé dans la direction du champ géomagnétique, tandis que les  $\sigma_{\pm}$  sont excitées par un vecteur magnétique circulairement polarisé associé à l'onde (à droite ou à gauche dans le plan perpendiculaire au champ magnétique externe. Donc, on espère observer que, selon l'orientation de la polarisation du récepteur et la direction d'observation, le profil de la raie sera différent.

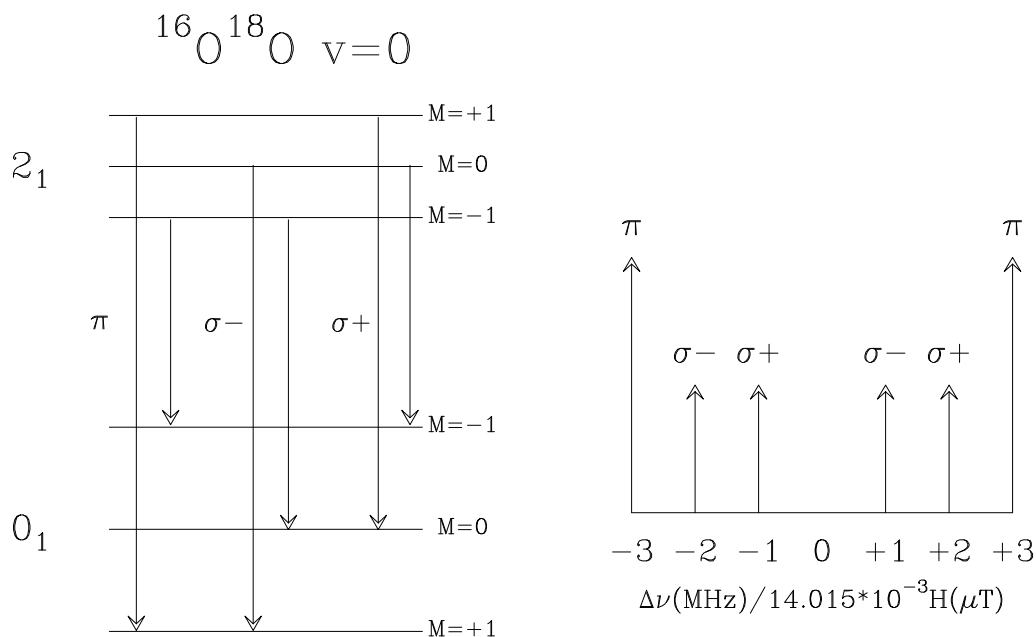


FIG. 3.4 - Sous-raies Zeeman de la transition rotationnelle  $2_1 \rightarrow 0_1$  de la molécule  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ .

### 3.1.2 Instruments et observations

Les observations ont été réalisées entre le 14 et le 19 Janvier 1995 avec le télescope millimétrique POM-2 (*Castets et al.*, 1988 [16]) placé sur le Plateau de Bure (Hautes Alpes) à 2550 m au-dessus de la mer (position géographique 44:38:02.00 N, 5:54:28.50 E). Ce télescope est équipé d'un récepteur SIS d'une température de bruit (double bande) de  $65 \pm 10$  K. Au moment des observations, un problème ponctuel a dégradé cette température jusqu'à 120 K. Le coefficient de couplage avec le ciel ( $\eta_f$ , défini dans l'équation 2.4) vaut 0.82. Avec les conditions météorologiques pendant les observations, la température de bruit totale du système était dans l'intervalle 600 à 800 K, avec une transmission du ciel entre 0.78 et 0.88 au zénith. Comme il s'agit d'un instrument dédié à des observations astrophysiques, les mesures sont automatiquement corrigées comme si le signal observé venait de l'extérieur de l'atmosphère. La correction faite pour l'opacité du ciel a été éliminée pour récupérer la vraie température d'antenne de la raie observée. La quantité intégrée de vapeur d'eau précipitable vers le zénith a été estimée entre 1.3 et 2.8 mm pendant la période de travail. Ces observations ont été réalisées en mode différentiel, après soustraction d'un spectre de référence au signal. Dans ce but on déplaçait la fréquence centrale de réception dans, ou même en dehors de la bande du spectromètre. Celui-ci est un autocorrélateur qui peut être utilisé avec des résolutions différentes: 39, 78 et 156 kHz pour des bandes totales de 4.53, 9.06 et 36.25 MHz respectivement. Le niveau de



bruit dans les spectres obtenus oscillait entre  $\sim 70$  mK et  $\sim 150$  mK selon la résolution et le temps d'intégration. Comme la largeur de la raie observée est plus grande que les déplacements en fréquence dans la procédure différentielle d'observation, le niveau zéro du spectre ne peut pas être donné avec une très grande précision puisque l'influence des ailes de raie dans la référence n'est pas bien connue. Ceci n'est pas un problème important dans notre projet car nous voulons comparer la forme de la raie observée avec celle qu'on a calculée. La comparaison quantitative du modèle et des observations n'est pas possible.

### 3.1.3 Simulations comparées aux observations

Les fréquences centrales de chaque composante Zeeman se calculent d'après les positions des sous-niveaux d'énergie déduits de l'équation 3.22. Dans le cas de la raie que nous avons observé, le facteur:

$$[J(J+1) + S(S+1) + N(N+1)]/J(J+1)$$

vaut -1 pour le niveau supérieur ( $2_1$ ) et 2 pour l'inférieur ( $0_1$ ). Ceci veut dire que les fréquences des transitions Zeeman se calculent dans notre cas par cette équation:

$$\Delta\nu(GHz) = 14.015 \cdot 10^{-6} H(\mu T)(M_u + 2M_l) \quad (3.26)$$

Le diagramme de niveaux d'énergie, l'identification des différentes composantes Zeeman et une représentation de leurs intensités relatives se trouvent sur la figure 3.4. Nous savons que le champ géomagnétique a une intensité dans la région entre 0 et 100 km au-dessus de la mer, qui varie entre  $\sim 22$  et  $65 \mu T$  selon la latitude. En appliquant l'équation (3.26), nous obtenons une sous-structure Zeeman qui apparaît dans une région de quelques MHz autour de la fréquence centrale rotationnelle. Les observations auront besoin donc de résolutions spectrales très grandes (de 40 à 20 kHz) pour distinguer clairement la structure que nous cherchons.

En choisissant une direction d'observation parallèle au champ magnétique, la matrice de réfractivité dans la base de polarisations linéaires ( $\vec{H}, \vec{V}$ ) se simplifie de telle façon que seules les 4 transitions  $\sigma_{\pm}$  doivent apparaître (voir l'équation 3.25). La figure 3.5 montre les simulations pour la raie de  $^{16}O^{18}O$  qui nous concerne dans la direction d'observation presque parallèle au champ géomagnétique local sur le Plateau de Bure. Il y a deux pics intérieurs visibles et deux structures externes

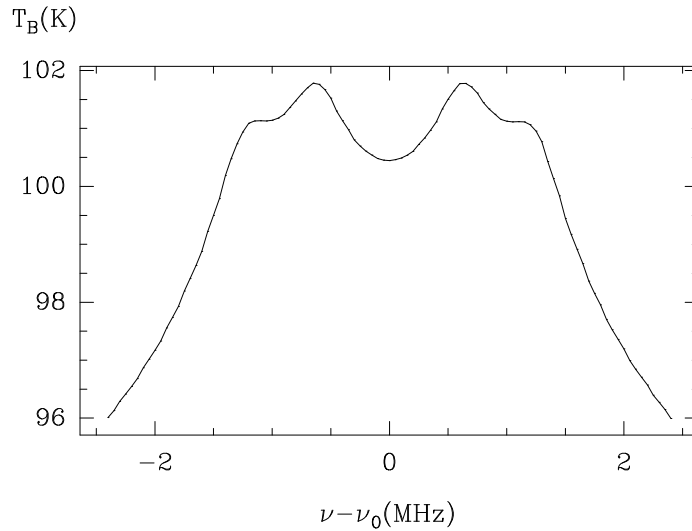


FIG. 3.5 - Simulation du profil de la raie  $2_1 \rightarrow 0_1$  du  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  pour une direction d'observation presque parallèle au champ géomagnétique sur le Plateau de Bure. Dans ce cas on ne voit clairement que deux composantes ( $\sigma$ ) Zeeman. Deux autres sont aussi présentes mais moins évidentes.

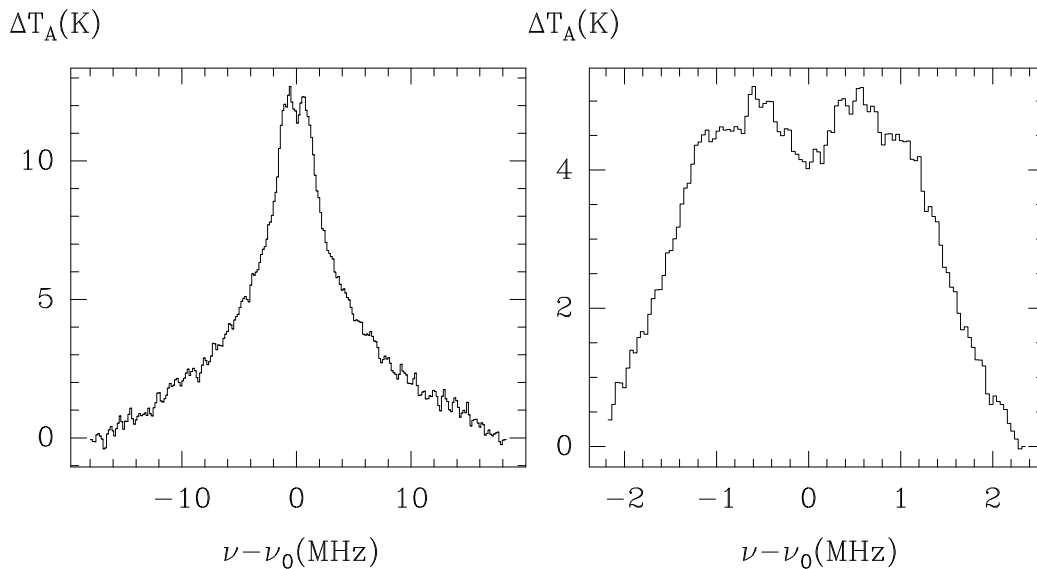


FIG. 3.6 - Deux observations menées avec le radiotélescope millimétrique POM-2 dans une direction:  $\text{AZM} = -2^\circ$  ( $0 = \text{Sud}$ ,  $90 = \text{Est}$ ) et  $\text{ELV} = 59^\circ$ , en utilisant différentes largeurs de bande et différentes résolutions spectrales.

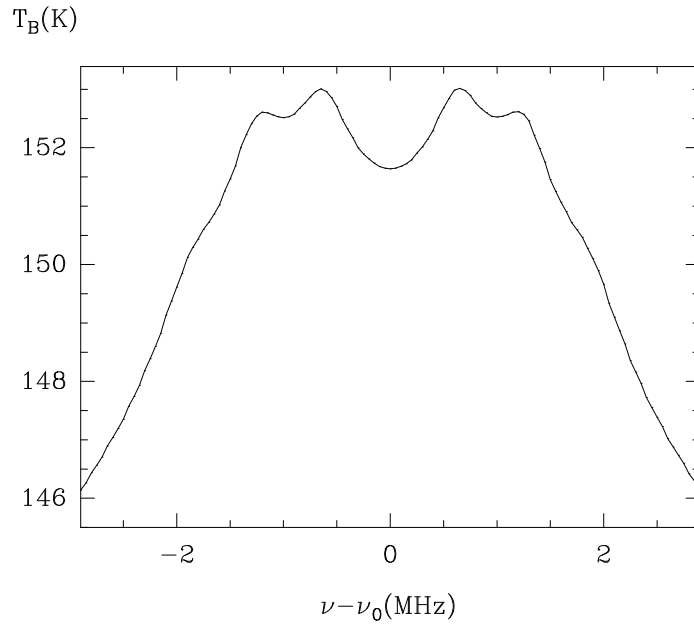


FIG. 3.7 - Simulation du profil de la raie qui fait l'objet de cette section dans le cas où le télescope observe presque perpendiculairement au champ géomagnétique au-dessus du Plateau de Bure. On peut bien identifier les quatre composantes  $\sigma$ . Une légère structure dans les ailes de la raie provient des composantes  $\pi$ .

associées à d'autres composantes  $\sigma$ . Malgré des forces d'oscillateur égales pour les quatre composantes  $\sigma$ , les deux les plus externes apparaissent à un niveau d'émission totale plus faible à cause de la forme générale de la raie pour les couches les plus basses. Nous avons mené deux observations dans cette direction en utilisant l'autocorrélateur de POM-2 avec des largeurs de bande et des résolutions spectrales différentes. Ces observations sont présentées figure 3.6. La première (moindre résolution) nous montre l'existence de deux pics, ce qui donne déjà une évidence de la sous-structure Zeeman. Par contre, cette résolution spectrale ne permet pas de distinguer la structure associée aux deux sous-raies  $\sigma$  plus externes. Le deuxième spectre, avec une meilleure résolution présente un très bon accord avec les simulations.

Pour détecter les composantes  $\pi$  on dirige le télescope dans la direction perpendiculaire au champ géomagnétique. L'équation (3.25) nous montre que dans ce cas les composantes  $\pi$  apparaissent dans la polarisation  $\vec{V}$ . Mais le récepteur de POM-2 est sensible à la polarisation parallèle au sol (horizontale), après le passage par la partie quasi-optique du système. Cela a pour effet de faire tourner la polarisation projetée sur le ciel. On passe de HL à  $0^\circ$  à VL pour l'élévation= $90^\circ$ . Il est donc nécessaire d'appliquer une matrice de rotation de  $27^\circ$  à la matrice de réfractivité pour obtenir

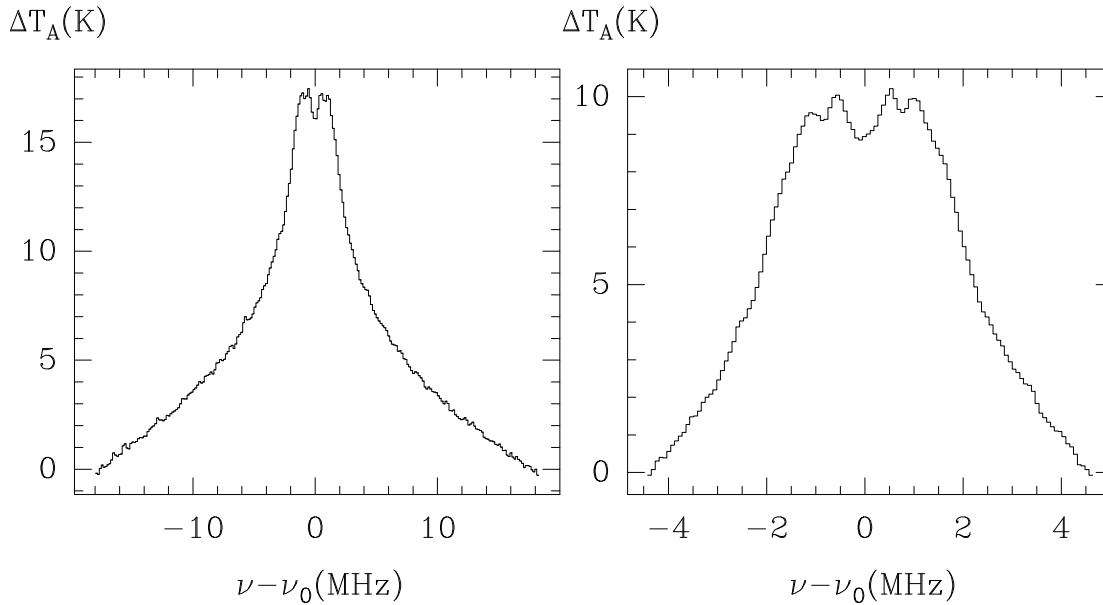


FIG. 3.8 - Les observations correspondant au cas présenté dans la figure précédente sont en très bon accord avec le modèle.

le profil espéré de la raie pour cette observation (on avait fait la même correction pour les calculs présentés figure 3.5, mais l'effet est négligeable car la matrice de réfractivité dans la base  $[\vec{H}, \vec{V}]$  ne change pas quand il n'y a que de l'émission  $\sigma$ ).

L'élévation de  $27^\circ$  est faible. Alors, le récepteur voit principalement la polarisation horizontale dans le ciel et donc les composantes  $\pi$  n'apparaissent pas clairement. On voit de très légères structures dans les ailes de la raie sans doute associées aux composantes  $\pi$ . À nouveau, les quatre sous-raies  $\sigma$  apparaissent car sa matrice de température de brillance a une très importante projection dans la polarisation  $\vec{H}$  pour cette observation.

Pour détecter l'émission  $\pi$ , on dirige le télescope vers le même azimut mais à une élévation de  $70^\circ$  pour avoir une plus grande sensibilité à la polarisation verticale sur le ciel. La détection d'émission  $\pi$  doit être plus facile car, malgré une direction d'observation non perpendiculaire au champ magnétique, l'orientation de la polarisation est beaucoup plus favorable à la détection cette émission.

Les simulations (fig. 3.9) montrent les six sous-raies mais avec peu de contraste. Avec le même temps d'intégration que précédemment, il sera assez difficile de distinguer les pics au-dessus du niveau de bruit. Par contre, le profil de la raie apparaîtra plus large que dans les derniers cas à cause de la contribution des composantes  $\pi$  externes. En faisant une comparaison des observations à  $27^\circ$  et  $70^\circ$  d'élévation (il

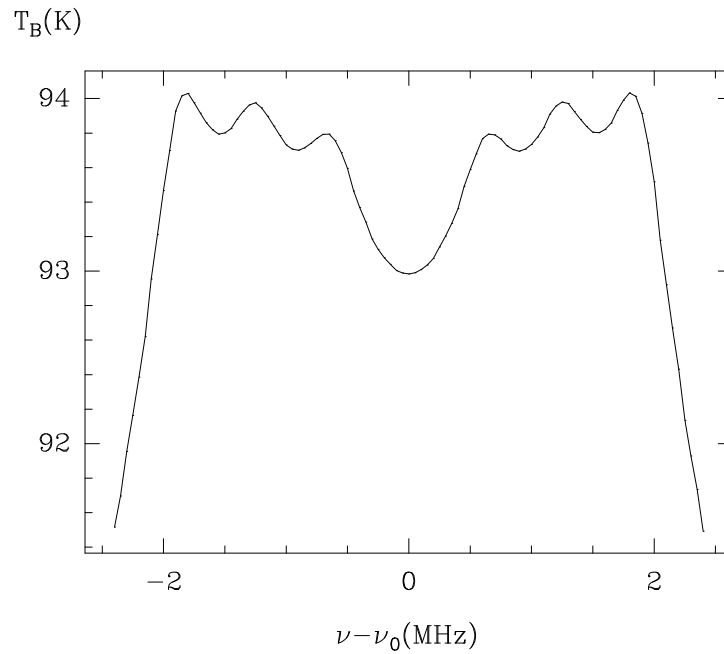


FIG. 3.9 - Si on tient compte de la polarisation projetée sur le ciel à laquelle est sensible le récepteur du radiotélescope POM-2, la direction  $AZM=178^\circ$ ,  $ELV=70^\circ$  est adéquate pour détecter clairement les composantes  $\pi$  de la raie de <sup>16</sup>O<sup>18</sup>O à 234 GHz, comme on peut le voir dans ce calcul.

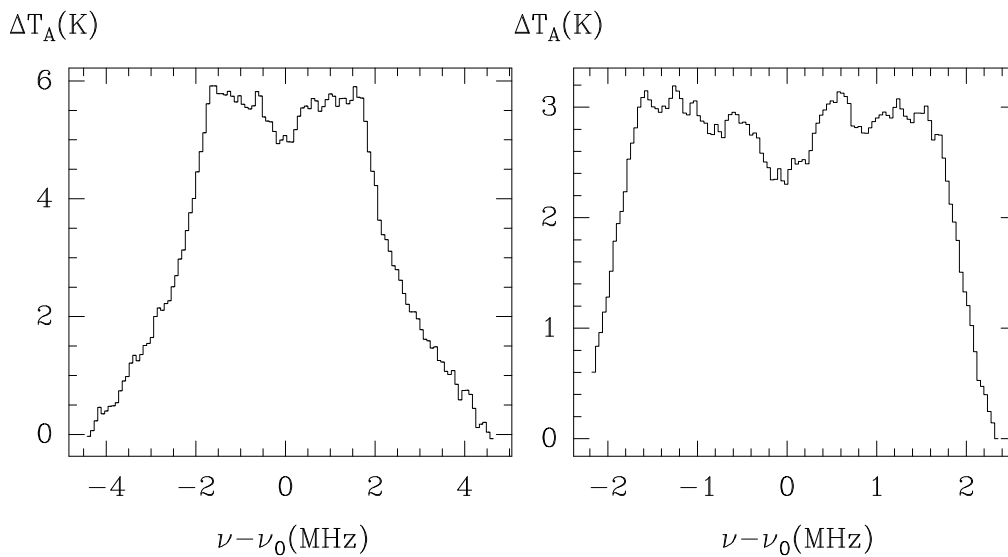


FIG. 3.10 - Ces observations montrent un profil de raie plus large que dans les derniers cas, sans doute à cause de la détection de composantes externes  $\pi$  (voir la figure suivante).

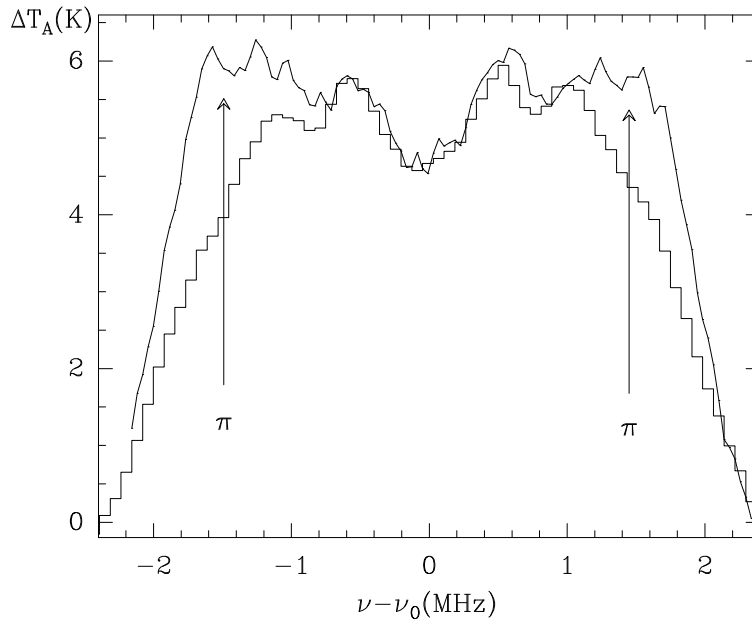


FIG. 3.11 - La comparaison, en corrigeant de l'effet de la masse d'air, entre deux observations vers l'azimut du pôle nord magnétique mais à des élévations de  $27^\circ$  (histogramme) et  $70^\circ$  (trait fin) montrent que les composantes  $\pi$  sont associées à la polarisation verticale au ciel.

faut corriger de l'effet des masses d'air différentes), on voit une très claire différence (fig. 3.11).

Pour les trois observations présentées dans ce travail il est évident que l'angle entre la direction de propagation et le champ géomagnétique varie, mais pour la région atmosphérique d'où provient le rayonnement détecté, ces variations sont faibles: pour le cas  $\vec{z} \perp \vec{H}$  cet angle change de  $87.8^\circ$  à 130 km à  $91.6^\circ$  à 2.5 km si on prend le modèle du champ géomagnétique de Barraclough (1985) [5]. Pour le cas "parallèle", cet angle varie entre  $1.3^\circ$  et  $-0.1^\circ$ . La variation est entre  $48.9^\circ$  et  $49.5^\circ$  pour l'observation à  $ELV=70^\circ$ .

Quand on compare chaque observation au modèle on voit une légère différence systématique entre la position calculée des pics de l'émission et celle qu'on observe. Pour le spectre de grande qualité pris dans le cas "perpendiculaire" avec une résolution de 84 kHz (figure 3.7) nous avons estimé, à l'aide de l'équation (3.26), que la valeur moyenne de  $|\vec{H}|$  sur le Plateau de Bure est de  $\sim 40 \mu T$ , ce qui représente une différence de presque 10% par rapport au modèle standard utilisé ( $\sim 44 \mu T$ ). Cette différence est raisonnable si on considère les déviations possibles par rapport à ce modèle: effets ionosphériques, changements du champ magnétique de la Terre (de l'ordre de 50 nT/an) depuis 1980 (moment des mesures sur lesquelles le modèle

est basé) et déviations locales de ce modèle qui décrit le champ magnétique avec une résolution spatiale de  $\sim 1000$  km. Si on tient compte de ces erreurs dans notre détermination de  $\vec{H}$ , les résultats sont cohérents.

*Bergman* (1992) [9] a obtenu des spectres de la même raie atmosphérique à l'aide du radiotélescope millimétrique SEST placé à l'observatoire de La Silla (Chili) à 29:15:24 S, 70:43:48 O, et 2347 m d'altitude. Dans ce travail il n'y a pas de comparaisons avec un modèle. La résolution en fréquence de ces observations est de 100 kHz. Le récepteur du SEST se déplace d'une façon solidaire avec le paraboloïde de façon que la polarisation détectée est toujours linéaire  $\vec{V}$ . Ainsi, à partir des calculs de notre modèle, le cas d'une observation en direction perpendiculaire au champ géomagnétique doit montrer très clairement les composantes  $\pi$ . Ceci est confirmé par l'observation (voir la référence [9]). Les composantes  $\sigma$  ne sont pas détectées car elles sont polarisées dans le plan perpendiculaire à la polarisation d'observation. Ces composantes  $\sigma$  se voient quand on observe parallèlement au champ magnétique mais *Bergman* n'arrive pas à les séparer par manque de résolution. Ceci ajouté au bruit observationnel rend difficile la détermination de la position centrale des sous-raies Zeeman et il n'est donc pas possible de calculer avec une grande exactitude l'intensité moyenne du champ géomagnétique à La Silla. Par contre, les mesures sont compatibles avec  $\sim 25 \mu T$  et une erreur estimée de 10%, ce qui est en accord avec la valeur donnée par le modèle utilisé pour le champ géomagnétique.

### 3.1.4 Possibilités d'utilisation d'autres raies dans le travail de validation

La validation du modèle présenté dans la section 3.1 peut être complétée avec des mesures depuis le sol par d'autres télescopes placés à différents endroits, ceci dans le but d'observer la même raie ou d'autres appartenant toujours à l'oxygène moléculaire isotopique. Par exemple, on a fait un essai avec POM-2 pour observer la composante la plus intense de la structure hyperfine (à cause du spin nucléaire 1/2 du noyau de <sup>17</sup>O) de la transition  $2_1 \rightarrow 0_1$  de <sup>17</sup>O<sup>16</sup>O, placée à 239.9756 GHz (intensité relative par rapport à la somme des intensités de composantes hyperfines: 0.1592). Cette raie est environ 36 fois plus faible que la raie de <sup>18</sup>O<sup>16</sup>O à 234 GHz à cause aussi du rapport d'abondances <sup>17</sup>O/<sup>18</sup>O. Pour arriver donc au même rapport signal sur bruit on aura besoin d'un temps d'intégration de l'ordre de 1000 fois plus longs. Dans ces conditions il est assez difficile d'obtenir un spectre de bonne qualité

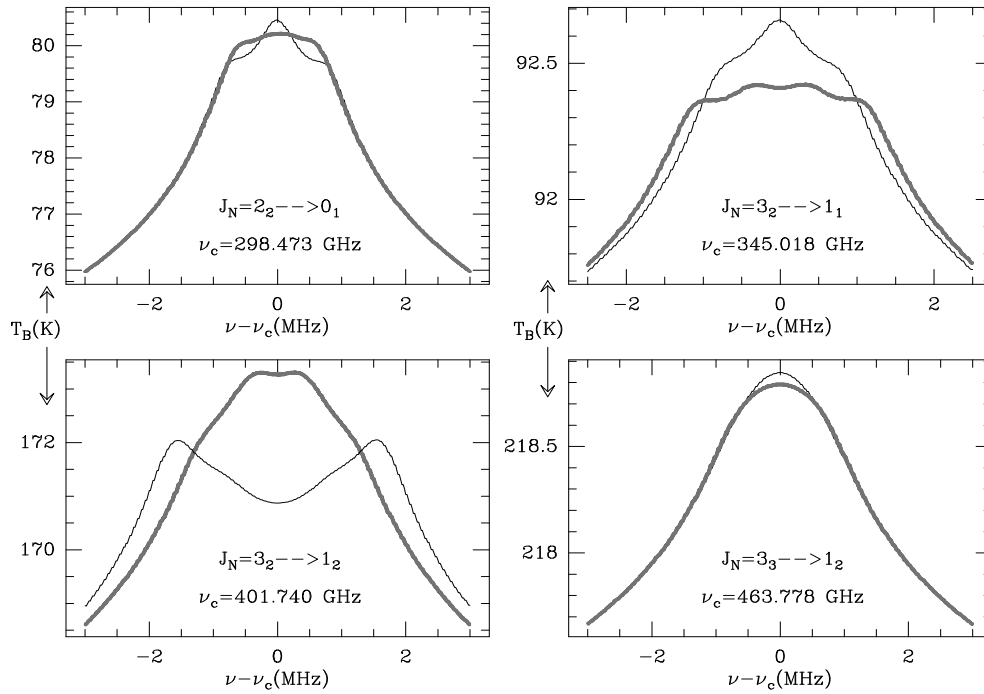


FIG. 3.12 - Simulations du profil de l'émission de quatre raies de  $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ , placées entre 298 et 464 GHz telle qu'elle pourrait être observée à l'aide du télescope submillimétrique CSO. Ces simulations correspondent à une direction d'observation perpendiculaire au champ magnétique local. On donne pour chaque cas les températures de brillance en polarisation linéaire horizontale ( $\perp \vec{B}$ ) et linéaire verticale ( $\parallel \vec{B}$ ).

à POM-2 pour détecter la structure Zeeman en utilisant cette raie. Il vaut mieux utiliser donc des raies de l'isotope  $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ . Aux fréquences au-delà de celle de la raie observée dans ce travail, il y a la possibilité d'observer les résonances à 298.4731, 345.0177, 401.7397 et 463.7781 GHz, ce qui est en principe possible avec le télescope submillimétrique CSO placé au sommet du volcan éteint Mauna Kea (Hawaii). Dans la figure 3.12 nous présentons les prédictions du profil de ces quatre raies dans le cas d'une observation perpendiculaire au champ magnétique local à Mauna Kea.

### 3.1.5 Applications

Le travail présenté dans cette section a combiné le développement d'un modèle de prédiction de profils d'émission de raies rotationnelles de  $^{16}\text{O}_2$  et  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  avec la comparaison de ces prédictions avec des mesures spectroscopiques réelles. De cette façon, ce travail a permis de tester pour le modèle qui sera utilisé pour le traitement des données des futurs systèmes d'étude de la température et de la pression dans



l'atmosphère au moyen d'observations dans plusieurs raies d'O<sub>2</sub>, à partir de 60 GHz et jusqu'au submillimétrique. Un premier type d'instruments doit effectuer des mesures radiométriques dans typiquement, une quinzaine de canaux situés dans les résonances de <sup>16</sup>O<sub>2</sub> autour de 60 GHz. Il s'agit d'instruments embarqués sur des satellites qui font des balayages avec des angles relativement petits par rapport au nadir, de telle sorte que la ligne de visée atteint la surface terrestre. Quelques canaux devront être placés à des fréquences assez proches de la résonance (moins de 2 MHz de distance) pour pouvoir étudier la température et la pression au-delà de 50 km, donc ces mesures seront affectées par l'effet Zeeman. Ce type de système sera étudié au chapitre 4.

D'autre part nous avons les satellites qui vont travailler dans le mode du sondage au limbe atmosphérique pour mesurer des raies rotationnelles de différents gaz atmosphériques. Il est prévu de mesurer dans ce contexte des raies millimétriques et submillimétriques de l'oxygène moléculaire afin d'étudier aussi le profil vertical de pression et de température. Quand le point de tangence se situe au-dessus de environ 50 km l'effet Zeeman doit être pris en compte dans les calculs. Ce cas sera étudié au chapitre 5.

## 3.2 Première détection depuis le sol de l'émission à 183 GHz de H<sub>2</sub>O strato-mésosphérique

### 3.2.1 Caractère nouveau de ces observations

La molécule d'eau a une grande importance dans la stratosphère et la mésosphère car elle est une source de radicaux ainsi qu'un traceur de la dynamique stratosphérique (à cause de son temps de vie photochimique relativement long, de l'ordre de plusieurs mois dans ces régions). Dans la haute stratosphère et la basse mésosphère, la vapeur d'eau est produite principalement à partir de l'oxydation du méthane et est détruite par une lente réaction avec O(<sup>1</sup>D) qui produit OH. L'oxydation de H<sub>2</sub> est négligeable. Ceci explique le long temps de vie et pourquoi les mécanismes de transport jouent un rôle aussi important dans la distribution finale (*Russell*, 1987 [80]; *Le Texier et al.*, 1988 [85]).

Jusqu'à présent, dans le domaine millimétrique et depuis le sol, on a effectué des mesures de la vapeur d'eau stratosphérique et mésosphérique en utilisant une raie

assez faible à 22.2351 GHz ( $6_{1,6} \rightarrow 5_{2,3}$ ) (*Tsou et al.*, 1988 [88]; *Olivero et al.*, 1986 [63]; et *Bevilacqua et al.*, 1990 [11]). Ce choix est justifié par le fait que cette raie est bien transmise par la troposphère, ce qui permet d'étudier les couches plus hautes de l'atmosphère. La faiblesse de cette raie (voir ses paramètres spectroscopiques dans le tableau 2.6) a comme conséquence la nécessité de temps d'intégration assez longs (plusieurs heures) pour atteindre un rapport signal sur bruit adéquat pour le calcul des profils de H<sub>2</sub>O. Par contre, la raie  $3_{1,3} \rightarrow 2_{2,0}$  à 183 GHz a une intensité de l'ordre de 200 fois plus forte que celle à 22 GHz. Avec une abondance normale de vapeur d'eau troposphérique, la transmission est nulle dans une région de quelques centaines de MHz autour de la fréquence de résonance. Jusqu'à présent les seules mesures de l'émission stratosphérique et mésosphérique dans cette transition de la vapeur d'eau ont été menées avec un instrument aéroporté à une altitude de 10 km (*Peter et Künzi*, 1988 [68]). Par contre, en partant des calculs menés avec la première version d'ATM, *Cernicharo et al.* (1990) [19] avaient affirmé que la partie centrale de cette raie pourrait présenter une transmission troposphérique assez importante dans les conditions atmosphériques qu'on atteint parfois pendant l'hiver dans des sites comme la Sierra Nevada dans le sud de l'Espagne. En effet, la base de données météorologiques de l'Observatoire de l'IRAM, placé en contrebas de Pico Veleta (3398 m), montre que se produisent pendant l'hiver des conditions où le contenu intégré en vapeur d'eau est plus faible que 0.5 mm au-dessus du site. Ceci va permettre le type d'étude qui fait l'objet de cette section, ainsi que d'autres observations astrophysiques qu'on savait très difficiles (consulter la référence de *Cernicharo et al* cité ci-dessus). La statistique de cette station météorologique donne pour la période 1984-1990 des colonnes de vapeur d'eau inférieures à 2 mm pendant 18% du temps l'hiver. Le tableau 3.2, basé sur des calculs d'ATM, présente la transmission troposphérique pour des conditions d'extrême sécheresse troposphérique. Les conséquences de ces calculs sont claires: on peut mener une étude autour de 183.31 GHz du profil vertical de la vapeur d'eau au-dessus de  $\sim 20$  km et, en plus, on gagne beaucoup de temps par rapport à des mesures à 22 GHz car l'émission qui provient de la stratosphère et de la mésosphère est beaucoup plus intense (on atteint des rapports signal sur bruit acceptables pour l'analyse avec des temps d'intégration de quelques secondes).

Dans ce travail nous présentons les premières mesures depuis le sol de l'émission stratosphérique et mésosphérique de la vapeur d'eau à 183 GHz. Dans les ailes de cette raie à des fréquences plus éloignées de la résonance, on avait déjà proposé faire des mesures depuis le sol pour estimer la distribution d'eau troposphérique *Schaerer*

quantité intégrée de H <sub>2</sub> O (mm) 2.9km-∞	Transm. atmosphérique			
	au zénith ( $\nu_c = 183.310$ GHz)			
	$\nu_c - 0$ MHz	$\nu_c - 50$ MHz	$\nu_c - 100$ MHz	$\nu_c - 150$ MHz
2	0.013	0.014	0.015	0.015
1	0.103	0.117	0.120	0.123
0.5	0.416	0.465	0.472	0.479
0.3	0.557	0.623	0.631	0.637
0.1	0.744	0.830	0.840	0.846
4km-∞	$\nu_c - 0$ MHz	$\nu_c - 50$ MHz	$\nu_c - 100$ MHz	$\nu_c - 150$ MHz
1.154	0.047	0.053	0.055	0.057
0.577	0.201	0.226	0.230	0.236
0.289	0.416	0.465	0.472	0.479
0.173	0.557	0.623	0.631	0.637
0.058	0.744	0.830	0.840	0.846

TAB. 3.2 - Transmission atmosphérique au zénith pour la raie  $3_{1,3} \rightarrow 2_{2,0}$  de H<sub>2</sub>O calculée à 2.9 et 4 km d'altitude pour plusieurs quantités intégrées de vapeur d'eau au-dessus de 2.9 km (distribuée en décroissance exponentielle avec une échelle de hauteur de 2 km (profil atmosphérique: U. S. Standard Atm. 1962, 45°, hiver; coefficient d'absorption de Liebe (1993).))

et Wilheit (1979) [81] ce qui fut mené par (Askne et Göran Skoog, (1983) [3]).

### 3.2.2 Instruments et conditions d'observation

Les observations présentées ici ont été réalisées en Janvier 1991 et Janvier 1994 avec le radiotélescope IRAM-30m, placé sur la Sierra Nevada (Grenade, Espagne) à 2870 mètres au-dessus de la mer. Le travail a été effectué en profitant des étalonnages atmosphériques nécessaires pour des observations astrophysiques qui visent à détecter l'émission maser à 183 GHz dans des sources interstellaires et circumstellaires (Cernicharo et al., 1990 [19]). Ces observations astrophysiques ne peuvent être réussies que quand la troposphère présente une importante transmission à ces fréquences. L'émission totale peut être mesurée à l'aide de deux absorbants (corps noirs à des températures différentes: température ambiante et azote liquide). On a utilisé un

récepteur de technologie SIS et deux spectromètres: 512x1MHz et 256x100kHz. À cause du couplage imparfait de l'antenne avec le ciel, il y a une contribution au signal total mesuré qui provient de l'environnement proche ("spill-over"). Les températures de brillance aux fréquences des deux bandes du récepteur contribuent à la température d'antenne mesurée (voir équation 2.4).

En janvier 1991, les observations furent menées en plaçant la fréquence centrale de la raie atmosphérique de la vapeur d'eau dans la bande inférieure du récepteur, avec un couplage de l'antenne au ciel ( $\eta_f$ ) de 0.9 et un rapport des gains des bandes signal et image ( $g_S/g_I$ ) de 4. Avant d'effectuer l'inversion à l'aide de l'algorithme présenté en 2.4, les spectres de janvier 1991 ont été symétrisés (en ajoutant le signal à deux fréquences à la même distance de la résonance, avec un poids de 1/2) dans le but d'améliorer le rapport signal sur bruit et d'éliminer des chromatismes linéaires dans la ligne de base. La bande de fréquences après cette opération est réduite car le spectromètre n'était pas complètement centré sur la fréquence au repos de la raie de la vapeur d'eau mais sur la fréquence centrale de la source astrophysique observée simultanément (la différence de fréquences est liée à l'effet Doppler à cause de la vitesse relative de la source par rapport à la Terre).

En janvier 1994, les observations ont été menées avec la raie de la vapeur d'eau dans la bande supérieure du récepteur. Le couplage au ciel était de 0.9 et le rapport de gains ( $\frac{G_S}{G_I}$ ) égal à 1.3. La fréquence intermédiaire du système est de 3.92 GHz, ce qui inclut dans la bande image une raie de l'ozone à 175.446 GHz ( $18_{4,14} \rightarrow 19_{3,17}$ ). Ceci doit être pris en compte pour l'analyse. On prend dans ce but un profil standard d'ozone (U.S. Stnd. Atm. (1976) [92], hiver, LAT=45°). Pour réduire au maximum les erreurs que le signal parasite d'ozone peut introduire dans la détermination du profil de la vapeur d'eau, on a seulement utilisé pour l'inversion l'aile hautes fréquences de la raie de la vapeur d'eau (presque pas affectée par ce signal). De plus, les données brutes de janvier 1994 présentent les signatures d'ondes stationnaires formées entre les différents miroirs de la partie quasi-optique du système. La période est de ~20 MHz et l'amplitude de ~1 K. Une analyse par transformée de Fourier sur les données a permis d'éliminer ces ondes stationnaires. Sur la figure 3.13 on peut voir des exemples de spectres obtenus après traitement des données. Les ajustements réalisés par le programme d'inversion des spectres sont superposés.

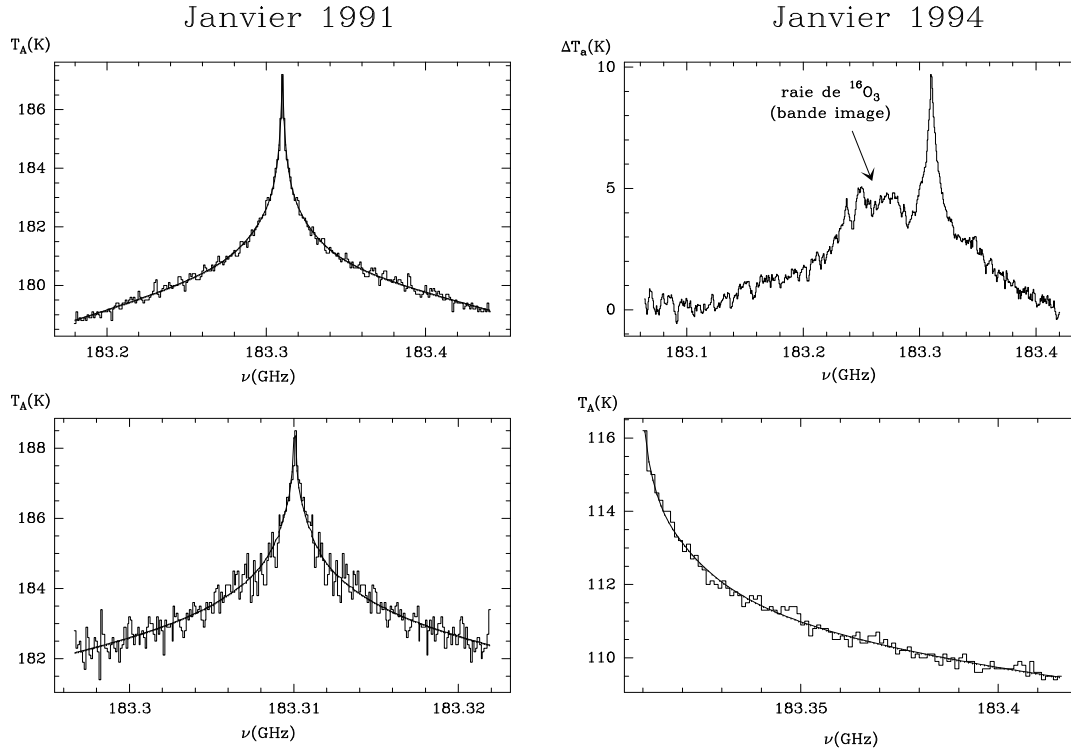


FIG. 3.13 - Gauche: deux spectres de la vapeur d'eau stratosphérique et mésosphérique correspondant aux observations de janvier 1991 et ajustements obtenus par l'algorithme d'inversion. Droite, en haut: un spectre obtenu en janvier 1994. Il montre une raie de l'ozone atmosphérique qui est détectée par la bande image du récepteur. Droite, en bas: somme de plusieurs spectres pris à la même élévation et ajustement obtenu (seulement dans l'aile bleue).

### 3.2.3 Analyse des données

L'analyse des observations spectroscopiques et le calcul des abondances de la vapeur d'eau dans certaines couches (dont l'altitude et l'épaisseur sont déterminées par la résolution en fréquence et la bande totale du spectre) est menée comme expliqué dans la section 2.4, c'est-à-dire au moyen d'un ajustement non linéaire des observations par moindres carrés. Les couches optimales où extraire l'information se choisissent après une analyse préliminaire décrite en 2.4.1. La première étape de cette analyse est de calculer l'ensemble des fonctions de poids monochromatiques (équation 2.39) pour H<sub>2</sub>O à la fréquence individuelle de chaque canal d'observation. La figure 3.14 montre ces fonctions normalisées à l'unité pour les observations de 1991 de la figure 3.13. Dans ce calcul on avait adopté le profil atmosphérique *U. S. Standard Atm.* (1976) [92] avec une distribution verticale de vapeur d'eau qui décroît exponentiellement dans la stratosphère avec une échelle de hauteur de 2 km (équation A.2) et 0.3 mm de vapeur d'eau intégrée au zénith au dessus du point

d'observation, ce qui décrit très approximativement les conditions atmosphériques pendant les observations. Les fonctions de sondage optimales sont obtenues dans la région centrale (50-60%) du domaine d'altitude couvert par les fonctions de poids monochromatiques (*Bevilacqua and Olivero, 1988 [10]*). L'utilisation des deux spectromètres disponibles lors des observations de 1991 permet d'obtenir des fonctions de sondage qui sont présentées figure 3.14. Pour l'établissement de ces fonctions de sondage, on utilise d'un point de vue mathématique un multiplicateur de Lagrange ( $\gamma$ , dont le rôle avait été vu en 2.4.1), qui tend à diminuer l'erreur sur les rapports de mélange de la vapeur d'eau calculés au prix d'une certaine dégradation de la résolution verticale (voir table 3.3).

Les corrélations entre ces fonctions de sondage sélectionnées pour l'analyse des observations de 1991, calculées d'après l'expression 2.40, sont de 0.292 pour  $A_{59.5km} - A_{46.5km}$ , 0.066 pour  $A_{59.5km} - A_{36km}$  et 0.191 pour  $A_{46.5km} - A_{36km}$ . Ces fonctions nous permettent de fixer trois couches dans lesquelles le rapport de mélange de la vapeur d'eau sera utilisé comme paramètre libre pour l'inversion: 31-41 km, 41-52 km et 52-67 km. Une analyse préliminaire semblable a été réalisée pour les observations de Janvier 1994. Pour la figure 3.13, on a fixé deux couches pour l'inversion: 33-44 km et 44-56 km, avec une corrélation entre les fonctions de sondage ( $A_{38.5km} - A_{50km}$ ) de 0.236. La différence entre le nombre et l'extension verticale des couches sélectionnées pour l'inversion des données de 1991 et de 1994 est due à deux raisons: a) en 1994, on a seulement utilisé un spectromètre (512x1MHz), et b) la bande spectrale totale effective retenue varie pour les différentes observations, principalement à cause des différences de cadrage de la raie atmosphérique dans le spectromètre. Le tableau 3.3 rassemble les informations concernant l'analyse préliminaire.

Une fois que cette analyse préliminaire a été menée, les rapports de mélange de la vapeur d'eau dans les couches choisies se calculent d'après la méthode de 2.4. La quantité troposphérique intégrée de la vapeur d'eau est un paramètre libre dans ce processus pour ajuster le niveau de la température d'antenne dans les canaux extrêmes du spectromètre 512x1MHz (ceci permet aussi de connaître l'atténuation subie par le signal strato-mésosphérique). Au départ, on considère au-delà de la troposphère un rapport de mélange constant de 2 ppmv. Celui-ci est recalculé pendant le processus d'inversion dans les couches où la sensibilité est optimale afin de bien ajuster l'observation.

Le profil de raie du modèle de *Liebe et al., 1993 [53]* est modifié au-delà de 60 km afin de prendre en compte le profil Doppler qui domine dans ces régions (*Rosenkranz,*

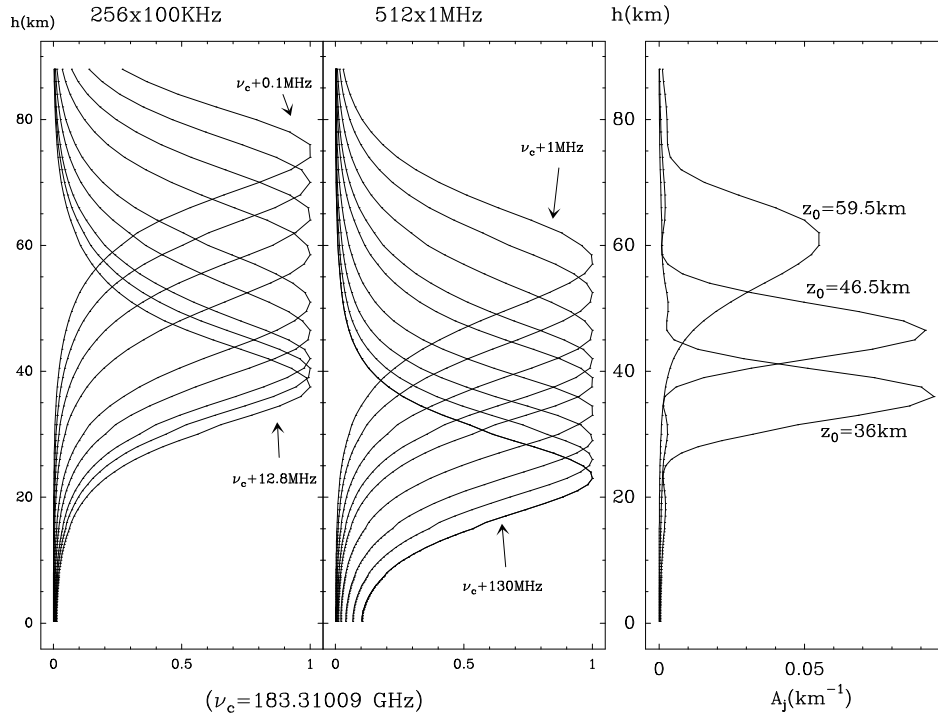


FIG. 3.14 - Fonctions de poids monochromatiques de H<sub>2</sub>O (normalisées à l'unité) qui correspondent aux spectromètres utilisés dans les observations de janvier 1991 et fonctions de sondage calculées à partir de celles-ci. Cette analyse permet de définir les couches où l'information sur la vapeur d'eau peut être déduite de façon optimale à partir des observations.

jan. 1991: 230x1MHz + 256x100kHz				
$z_0$	couche (km)	mult. Lagr. $\gamma$ ( $K^2 cm^7$ ) *	$ R_i(couche) $ * ( $K^{-1} cm^{-3}$ )	$\rho_{H_2O}(couche)$ ( $cm^{-3}$ ) (pour 2 ppmv)
36	31-41	$10^{-16}$	$7.75 \cdot 10^9$	$3.92 \cdot 10^{11}$
46.5	41-52	$5 \cdot 10^{-16}$	$2.88 \cdot 10^9$	$8.14 \cdot 10^{10}$
59.5	52-67	$5 \cdot 10^{-12}$	$5.58 \cdot 10^7$	$1.73 \cdot 10^{10}$
jan. 1994: 106x1MHz				
$z_0$	couche (km)	$\gamma$ ( $K^2 cm^7$ ) **	$ R_i(couche) $ * ( $K^{-1} cm^{-3}$ )	$\rho_{H_2O}(couche)$ ( $cm^{-3}$ ) (pour 2 ppmv)
38.5	33-44	$10^{-15}$	$2.92 \cdot 10^9$	$2.77 \cdot 10^{11}$
50	44-56	$5 \cdot 10^{-16}$	$1.33 \cdot 10^9$	$5.18 \cdot 10^{10}$

TAB. 3.3 - Description des couches sélectionnées pour utiliser la quantité de H<sub>2</sub>O comme paramètre libre dans l'algorithme d'inversion pour l'analyse des observations de la figure 3.13.

1992 [76]).

La figure 3.13 montre des observations, de janvier 1991 et janvier 1994, après traitement des données. Les ajustements obtenus par la procédure d'inversion ont été superposés. Les profils de  $H_2O$  provenant de ces ajustements sont montrés sur la figure 3.15. D'autre part, la figure 3.16 présente d'autres mesures menées en 1994 (d'une qualité moindre à cause d'un temps d'intégration plus court).

Dans cette détermination des rapports de mélange de la vapeur d'eau les principales sources d'erreurs sont le bruit introduit par le système, l'information a priori sur l'atmosphère et les imprécisions dans les valeurs de certains paramètres instrumentaux tels que le coefficient de couplage de l'antenne avec le ciel et les gains relatifs des bandes du récepteur. L'influence de tout ceci sur nos estimations fait l'objet des discussions qui suivent:

### **Erreurs attribuées à l'information a priori**

En utilisant les différents profils atmosphériques de température et de pression comme information a priori pour l'algorithme d'inversion, on estime que l'incertitude qui en résulte dans la détermination de la quantité de vapeur d'eau dans les couches étudiées se situe autour de 10% (en rapport de mélange) pour les données de 1991 comme pour celles de 1994. La forme en décroissance exponentielle avec l'altitude du profil de la vapeur d'eau troposphérique est une source d'erreur beaucoup moins importante car la contribution troposphérique au profil de raie observé sur une largeur de bande de 200 MHz est assez uniforme à cause des pressions relativement fortes en-dessous de 15 km d'altitude. Ce qui est vraiment important pour le niveau de signal mesuré dans les canaux les plus externes est la quantité troposphérique intégrée, mais cette quantité est utilisée comme paramètre libre dans l'algorithme d'inversion.

### **Erreurs liées au niveau de bruit des spectres**

En supposant non corrélé le bruit entre les canaux du spectromètre, nous avons estimé cette erreur. Ceci ce fait à partir des valeurs de  $|R_i|$  (fonction définie dans la section 2.4) qui correspondent aux fonctions de sondage sélectionnées (voir table 3.3). La méthode d'estimation des erreurs a été expliquée dans la section 2.4. Le niveau typique de bruit dans les spectres qu'on montre dans ce travail est de l'ordre



de 0.1-0.2 K ce qui produit des erreurs relatives d'au plus 3% sur le rapport de mélange de H<sub>2</sub>O. Si on prend en compte l'existence d'une certaine corrélation entre les fonctions de sondage des couches considérées (figure 3.14) nous pouvons estimer jusqu'à 10% d'erreur dans les rapports de mélange de H<sub>2</sub>O calculés pendant les deux périodes d'observation. Si on veut que l'algorithme d'inversion améliore par exemple la résolution verticale de 10 à 8 km pour la couche centrée à  $z_0=36$  km pour le spectre basse résolution de 1991 (figure 3.13), cette source d'erreur augmente d'un facteur 15 (exemples: *Bevilacqua and Olivero* (1988) [10]). Ceci est une preuve de l'importance d'un choix correct de la position et de la largeur verticale des couches pour mener l'inversion de chaque mesure spectroscopique.

### Erreurs liées aux incertitudes dans la connaissance des paramètres instrumentaux

La source d'erreurs la plus importante est la calibration des spectres. Si on suppose une stabilité acceptable en température pour les deux corps noirs de référence utilisés pour la calibration, l'erreur est due principalement à l'incertitude dans le coefficient de couplage au ciel de l'antenne, et aux gains relatifs des deux bandes du récepteur. Ces paramètres étaient connus avec une incertitude de  $\sim 6\%$  pour le système utilisé pour ces observations. Pour estimer l'impact de ceci sur la détermination du profil de H<sub>2</sub>O, nous avons mené des calculs en utilisant des valeurs différentes de  $\eta$  et  $G_S$  dans le domaine  $\pm 3\%$  autour de  $\eta=0.9$  et  $G_S=0.8$ . Pour les spectres de 1991 (figure 3.13), les quantités de H<sub>2</sub>O retrouvées montrent à cause de cela ont une incertitude de  $\pm 25\%$ , et presque le même pour les observations de 1994 malgré quelques changements techniques.

En prenant l'erreur totale comme la racine carrée de la somme des carrés des erreurs individuelles, nous obtenons les barres d'erreur de la figure 3.15.

### 3.2.4 Comparaison avec d'autres mesures et modèles. Conclusions

Les abondances de la vapeur d'eau entre 30 et 65 km obtenues d'après nos mesures sont de l'ordre de quelques ppmv, en accord avec les résultats généraux de mesures spectroscopiques depuis le sol menées jusqu'à présent à 22 GHz (*Tsou et al.* (1988) [88] et *Bevilacqua et al.* (1990) [11]). Les modèles photochimiques dont

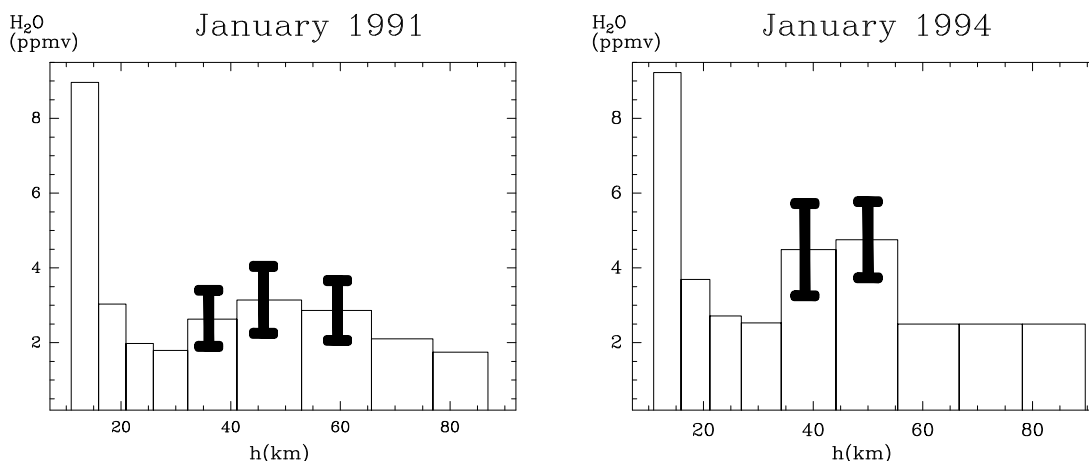


FIG. 3.15 - Profils de vapeur d'eau calculés à partir des observations présentées dans la figure 3.13. Les couches où il y a des barres d'erreur correspondent à celles où les mesures donnent une meilleure information sur les rapports de mélange de la vapeur d'eau d'après les fonctions de poids. Les quantités intégrées de vapeur d'eau troposphérique sont proches de 0.25 mm.

on dispose aujourd'hui donnent des rapports de mélange du même ordre (voir, par exemple, *Le Texier et al.* (1988) [85]). Un accord très bon a été trouvé entre nos résultats de 1994 et les mesures de *Peter et Künzi* (1988) [68] à 183 GHz. Ces mesures avaient été effectuées avec un système sur avion à un niveau de vol de 10 km et couvrent des latitudes au nord de 45°N. Pour 45° N les auteurs qu'on vient de citer donnent des valeurs du rapport de mélange de H<sub>2</sub>O dans l'intervalle 4-5 ppmv entre 25 et 60 km d'altitude tandis que nous obtenons, en prenant compte des nos barres d'erreur, entre 3.5 et 6 ppmv pour la région 33-56 km à la latitude 37° N.

Ce travail expérimental nous permet de proposer ce type d'observations pendant une partie significative de l'hiver en haute montagne dans des zones sèches. Ces mesures ont un avantage très important sur celles menées depuis le sol à 22 GHz: un temps d'intégration bien moindre pour arriver au même rapport signal-sur-bruit. Par rapport à des mesures à 183 GHz depuis des avions on a un coût moindre car on profite de la logistique des observatoires déjà existants. Les données avion sont à présent très rares ce qui prouve les difficultés de mise en oeuvre. Par contre, les mesures depuis le sol sont limitées à seulement quelques sites géographiques.

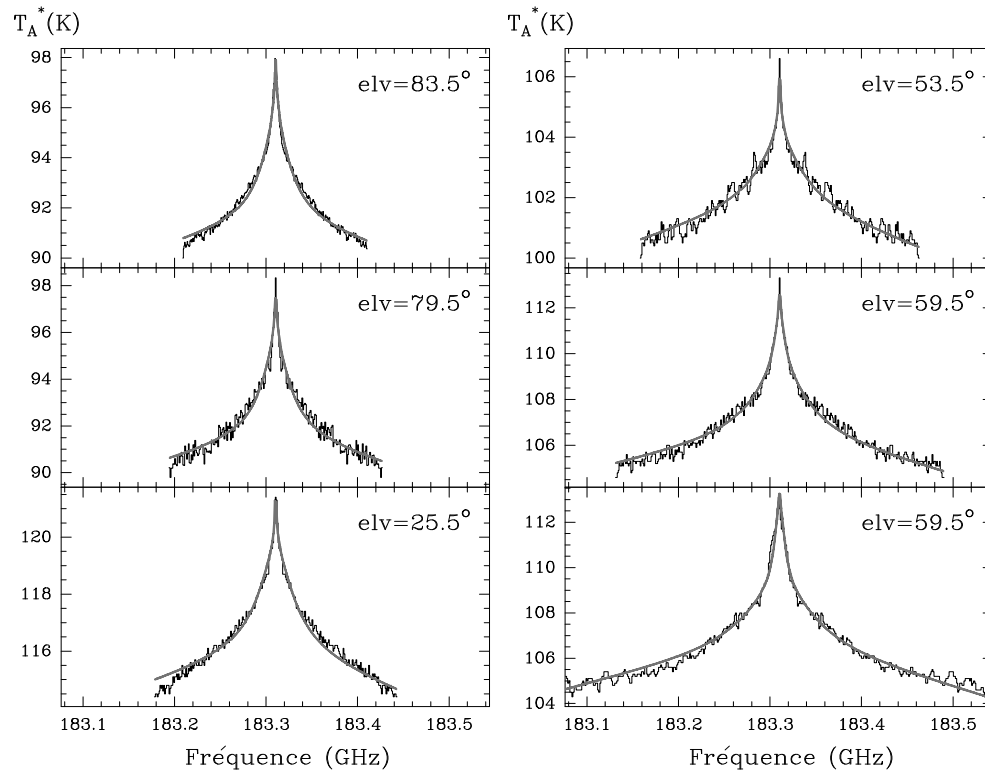


FIG. 3.16 - D'autres observations de  $\text{H}_2\text{O}$  à 183 GHz menées en janvier 1994 et ajustements obtenus par l'algorithme d'inversion. Les temps d'intégration vont de 3 à 15 secondes. La vapeur d'eau troposphérique intégrée est estimée entre 0.18 et 0.3 mm.

### 3.3 Analyse des observations de raies rotationnelles de l'ozone

#### 3.3.1 Introduction au sondage du profil vertical des gaz atmosphériques minoritaires en général

Au contraire de la plupart des raies de  $^{16}\text{O}_2$  et  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  qui, lorsqu'elles sont observées depuis le sol, n'apportent pas d'information au-delà de la troposphère à cause de l'absorption de celle-ci, il est possible en principe d'étudier les profils verticaux d'abondance de la plupart des gaz minoritaires depuis le sol. Les limitations sont les suivantes:

- A) Le gaz minoritaire considéré doit posséder des raies rotationnelles dans la région millimétrique, dont la contribution à la température de brillance au-dessus du continuum déterminé par  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{O}_2$  soit suffisante pour le niveau de sensibilité de l'instrument.
- B) La raie choisie pour l'observation doit être suffisamment éloignée des

résonances de  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{O}_2$  et n'être pas critiqueusement contaminé par l'émission d'autres molécules à fréquences très proches (voir par exemple pourquoi la raie à 241 GHz de  $^{35}\text{ClO}$  n'est pas bonne pour ce type d'études dans la figure 3.22).

Un des objectifs présents en commençant ce travail était l'observation de raies millimétriques de l'ozone et leur usage pour l'étude du profil de distribution verticale de ce gaz dans l'atmosphère. On participe maintenant au projet européen EMCOR ("European Minor Constituents Radiometer") tant de la part de l'*Observatorio Astronómico Nacional* (Espagne) que du Laboratoire de Radioastronomie Millimétrique de l'Observatoire de Paris-Meudon (France). Ce projet réunit en plus cinq autres laboratoires européens. Son but est la construction d'un radiomètre très sensible pour la détection de raies rotationnelles faibles de gaz atmosphériques minoritaires, plus spécialement  $\text{ClO}$ , dont le rôle important dans la destruction de l'ozone stratosphérique a été évoqué au premier chapitre. Les observations qu'on présente ci-dessous ont été les premiers pas dans notre groupe dans le but d'avoir l'expérience dans ce type d'études pour aborder les travaux futurs.

### 3.3.2 Introduction aux observations de raies de l'ozone et objectifs

L'importance de l'ozone pour l'absorption de l'ultraviolet solaire et pour le profil vertical de température dans la stratosphère a été vue dans le chapitre 1. Pour avancer dans la connaissance de la chimie et de la dynamique stratosphérique et mésosphérique il est très important d'effectuer des mesures de l'abondance de l'ozone et d'autres gaz minoritaires le plus globalement possible. Une première étape consiste à étudier les profils verticaux locaux à partir de mesures depuis le sol.

On a vu au chapitre 2 que l'ozone possède un spectre rotationnel très riche à cause de sa géométrie non linéaire. Dans le domaine de fréquences 10-1000 GHz, l'ozone est la molécule atmosphérique la plus importante par sa contribution au spectre électromagnétique atmosphérique, juste après  $\text{O}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  (à l'exception de très peu nombreuses raies de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ ). Depuis la surface terrestre, les raies de l'ozone peuvent atteindre des niveaux d'émission de quelques dizaines de K (en température de brillance) au-dessus du niveau du continuum.

La section 2.4 décrit la manière d'estimer la distribution verticale d'un gaz à partir de la spectroscopie d'une de ses raies rotationnelles dans le domaine millimétri-

que. Une application à l'observation de  $\text{H}_2\text{O}$  fait l'objet de la section 3.2. Nous éviterons ici de répéter des concepts déjà vus.

Les deux télescopes utilisés pour les travaux décrits précédemment (3.1 et 3.2) ont été utilisés pour l'observation de raies rotationnelles atmosphériques de  $^{16}\text{O}_3$  à différentes fréquences en utilisant plusieurs spectromètres.

L'observation depuis le sol de raies millimétriques de l'ozone est effectuée par de nombreux groupes d'une manière régulière depuis au moins une dizaine d'années. Donc, pour apporter quelque chose de nouveau, nous avons entrepris des mesures originales, à plusieurs points de vue. D'abord, nous avons voulu mesurer un grand nombre de raies différentes (huit en tout) en utilisant deux télescopes qui ont d'importantes différences techniques. Toutes les données ont été analysées à l'aide d'un seul logiciel (présenté dans la section 2.4) pour mettre en valeur ses capacités. Certaines raies de l'ozone que nous avons observées et utilisées pour retrouver des profils verticaux ne l'avaient pas été auparavant (c'est le cas de deux transitions placées au delà de 358 GHz). Enfin, nous avons utilisé dans quelques cas des résolutions spectrales très fines (39 kHz) ou des couvertures en fréquence très larges (500 MHz), ce qui nous a permis de retrouver des profils verticaux d'ozone dans un domaine d'altitudes très rarement atteint. L'utilisation d'un spectromètre (512x1MHz) a permis de calculer des rapports de mélange d'ozone à partir de  $\sim 24$  km d'altitude. Ceci est très important car c'est dans la basse stratosphère qu'on trouve les plus fortes densités numériques d'ozone et que ce gaz joue un rôle décisif pour la protection contre le rayonnement UV solaire (le profil de rapport de mélange d'ozone atteint son maximum généralement vers  $\sim 40$  km, mais la densité numérique de ce même gaz le fait vers 23-25 km, ce que l'on peut comprendre en convoluant le profil vertical de rapport de mélange avec celui de la densité atmosphérique). D'autre part on a pu effectuer des mesures très précises de la variation diurne de l'abondance de l'ozone mésosphérique entre 56.5 et 72.5 km pour des latitudes tempérées grâce à des mesures d'une grande qualité à une résolution spectrale de 39 kHz.

### 3.3.3 Description des observations

Les résonances rotationnelles de l'ozone que nous avons observées se trouvent dans l'intervalle de fréquences entre 142.175 et 358.853 GHz, localisées au milieu de fenêtres atmosphériques entre des fortes raies de  $\text{H}_2\text{O}$  (centrées à 183, 325, et 380 GHz) et  $\text{O}_2$  (119 et 368.5 GHz). Le tableau 3.4 rassemble les paramètres

spectroscopiques des raies d'O<sub>3</sub> les plus importantes dans ces fenêtres atmosphériques. Ce sont ces mêmes paramètres qu'on a utilisé après pour les analyses.

Pour la plupart des campagnes d'observation d'O<sub>3</sub> dans le domaine des ondes millimétriques depuis le sol, des raies de l'ozone au-dessous de 150 GHz ont été jusqu'à présent sélectionnées. Par exemple *Tsou et al.* (1995) [89] et *Ricaud et al.* (1991) [71], ont mené des mesures de la transition  $6_{1,5} \rightarrow 6_{0,6}$  centrée à 110.836 GHz, tandis que *Lobsiger and Künzi* (1987) [54] et *Zommerfelds et al.* (1989) [99] ont observé la raie  $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$  à 142.175 GHz. La croissance avec la fréquence de l'absorption due à la vapeur d'eau troposphérique a guidé ces choix. Mais, il faudrait prendre en compte le fait que l'intensité des raies de l'ozone augmente d'une façon générale avec la fréquence et, donc, l'utilisation de plus hautes fréquences peut être avantageuse dans des endroits de haute montagne.

Les observations que nous présentons ici ont été réalisées entre 1991 et 1995 en utilisant les deux radiotélescopes déjà mentionnés dans les sections précédentes. Les principales caractéristiques de ceux-ci pour ces observations sont présentées dans le tableau 3.5.

Pour l'étalonnage des observations au télescope de 30 mètres de l'IRAM, on a utilisé, comme pour les observations de H<sub>2</sub>O, deux absorbants de référence, le premier à température ambiante et l'autre à celle de l'azote liquide. La plupart des observations ont été menées à des élévations proches du zénith, mais parfois le télescope pointait plus bas. En tenant compte des valeurs typiques des paramètres d'élargissement des raies de l'ozone par collisions avec O<sub>2</sub> et N<sub>2</sub> (2 à 3 MHz/mb, voir tableau 3.4) et du profil atmosphérique de pression, le spectromètre 512x1MHz utilisé pour quelques observations avec le télescope de 30 m de l'IRAM (tableau 3.5) permet l'étude de l'émission de l'ozone dans des couches atmosphériques à partir d'une altitude de 24 km environ.

La fréquence intermédiaire du récepteur de POM-2 peut varier entre 1.4 et 1.8 GHz comme précisé dans la section 3.1.2. Elle fut sélectionnée pour chaque observation de manière à éviter la présence de raies atmosphériques d'émission forte dans la bande image (rappelons que le rapport des gains signal/image est estimé à 1.3 pour POM-2). Les observations avec POM-2 ont toujours été menées à une élévation de 85° (masse d'air=1.004). Un étalonnage absolu n'est pas possible avec cet instrument. Il est nécessaire de travailler en mode différentiel par déplacement en fréquence. Ceci complique l'analyse des données, mais il est néanmoins possible d'ajouter au signal différentiel sans correction d'opacité atmosphérique (car il s'agit

$J_{K_a} K_b$	$J'_{K'_a} K'_b$	$\nu_c(\text{GHz})$	F. osc.	$E_{inf}(K)$	$\gamma_c \frac{\text{MHz}}{\text{mb}}$	x
• $10_1 9$	$10_0 10$	142.17510	8.27	66.1	2.50	0.70
$12_1 11$	$12_0 12$	165.78451	8.85	93.4	2.36	0.76
• $5_1 5$	$4_0 4$	208.64242	3.07	12.1	2.41	0.76
• $16_1 15$	$16_0 16$	231.28151	9.02	161.9	2.30	0.76
$16_2 14$	$16_1 15$	235.70982	13.0	173.0	2.29	0.76
• $14_2 12$	$14_1 13$	237.14613	10.9	134.8	2.30	0.76
• $18_2 16$	$18_1 17$	239.09326	14.9	216.1	2.28	0.76
• $12_2 10$	$12_1 11$	242.31869	8.77	101.4	2.31	0.76
$12_0 12$	$11_1 11$	243.45378	7.35	81.7	2.31	0.76
$20_2 18$	$20_1 19$	248.18340	16.5	263.9	2.27	0.76
$7_1 7$	$6_0 6$	249.78857	4.24	25.3	2.39	0.76
$10_2 8$	$10_1 9$	249.96196	6.79	72.9	2.31	0.76
$8_2 6$	$8_1 7$	258.71612	5.03	49.3	2.32	0.76
$22_2 20$	$22_1 21$	263.69263	17.6	316.4	2.25	0.76
$6_2 4$	$6_1 5$	267.26655	3.50	30.7	2.33	0.76
$18_1 17$	$18_0 18$	273.05091	8.82	203.0	2.27	0.76
$18_1 17$	$17_2 16$	286.08769	5.77	202.4	2.25	0.76
$24_2 22$	$24_1 23$	286.15656	18.3	373.7	2.23	0.76
$9_1 9$	$8_0 8$	288.95915	5.55	43.3	2.36	0.76
$5_2 4$	$5_1 5$	293.17135	2.51	22.1	2.32	0.76
$14_0 14$	$13_1 13$	301.81299	9.22	110.9	2.28	0.76
$13_2 12$	$13_1 13$	352.32404	5.64	110.9	-	-
$28_2 26$	$28_1 27$	352.81524	18.3	501.7	-	-
$20_1 19$	$19_2 18$	357.62983	7.08	246.7	-	-
• $30_3 27$	$30_2 28$	358.19981	24.0	591.5	2.30	0.76
• $16_0 16$	$15_1 15$	358.85334	11.2	144.7	2.25	0.76
$28_3 25$	$28_2 26$	359.64962	21.8	518.6	-	-

TAB. 3.4 - Principales raies d'O<sub>3</sub> dans les fenêtres atmosphériques jusqu'à 368 GHz. Nous avons signalé avec un point à gauche les transitions que nous avons observées depuis le sol et analysées dans le cadre de ce travail (les paramètres suivent la notation de l'équation 2.29).

INFORMATIONS	INSTRUMENT	
	IRAM-30m	POM-2
Latitude	37:04:05.60 N	44:38:02.00 N
Longitude	3:23:58.10 W	5:54:28.50 E
Altitude	2850 m	2550 m
Diamètre	30 mètres	2.5 mètres
Fréquences d'opération	82-116 GHz (réc. 3 mm) 129-190 GHz (réc. 2 mm) 204-280 GHz (réc. 1.3 mm) 345-365 GHz (réc. expérimental)	195-250 GHz
lobe à 230 GHz	~12"	~2'
couplage au ciel ( $\eta$ )	0.9	0.82
rapport des gains ( $G_S/G_I$ )	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 4 pour les récep. de 2 mm et 1.3 mm</li> <li>• 1 à 1.5 pour le 355 GHz</li> </ul>	1.3
Incertitudes sur $\eta, G_S$	$\pm 3\%$	$\pm 5\%$
configurations des spectromètres pendant les observ.	512x1MHz 256x100kHz 1024x39kHz	232x156kHz 232x39kHz

TAB. 3.5 - Informations générales à propos des instruments utilisés dans le travail d'observation de raies atmosphériques de l'ozone.

d'un signal interne à l'atmosphère) un continuum calculé à partir de l'estimation de l'opacité atmosphérique à une fréquence de référence.

Les figures 3.18 et 3.19 montrent des exemples d'observations menées avec les deux radiotélescopes. Dans tous les cas on montre en bas le résidu entre l'observation et l'ajustement mené par l'algorithme d'inversion. L'estimation des erreurs pour chaque observation apparaît dans le tableau 3.7). Enfin, la comparaison entre les rapports de mélange obtenus par l'algorithme d'inversion appliqué aux différentes raies observées est montrée dans la figure 3.20. Sur cette figure il ne faut pas chercher à comparer les résultats individuels à chaque fréquence car les dates d'observation sont très différentes. Il faut plutôt regarder la cohérence de l'ensemble de points calculés et pour cela on donne comme comparaison un profil vertical standard du rapport de mélange d'ozone pour des latitudes tempérées.



### 3.3.4 Analyse des observations

La sélection des couches où on peut retrouver le rapport de mélange de l'ozone pour une certaine largeur de bande et résolution spectrale d'observation est faite après une analyse similaire à celle menée pour les observations de la vapeur d'eau. L'analyse préliminaire présentée dans la section 3.2.3 doit aussi être faite, mais appliquée aux raies rotationnelles de l'ozone. Les calculs sont menés selon la procédure exposée dans 2.4.1. Après ces calculs et pour chaque configuration utilisée, nous utilisons le rapport de mélange de l'ozone comme paramètre libre dans notre algorithme d'inversion pour les couches décrites dans le tableau 3.6.

L'inversion démarre avec un profil atmosphérique standard de température, pression et rapport de mélange d'ozone choisi d'après des critères de saison et de position géographique, ainsi qu'un profil de la distribution verticale de  $H_2O$  dans la troposphère déjà décrit auparavant. Le couplage avec le ciel et le rapport des gains signal/image de l'instrument sont pris en compte. Les paramètres libres sont la quantité troposphérique intégrée de la vapeur d'eau et les rapports de mélange de l'ozone dans les couches choisies. Le niveau du continuum change légèrement dans la bande spectrale d'une observation. La différence maximale qui en résulte entre canaux n'est sensible que pour des observations à large bande (512x1MHz). Dans notre analyse, on prend en compte cet effet pour améliorer l'inversion de certaines observations. En ce qui concerne la spectroscopie de l'ozone on a adopté les paramètres déjà présentées tableau 3.4.

Les incertitudes sur les quantités d'ozone calculées sont dues aux mêmes causes que celles présentées dans l'étude menée sur les observations de la vapeur d'eau à 183 GHz: le bruit observationnel (ceci tient compte aussi de la qualité de la ligne de base), l'information atmosphérique *a priori* et les incertitudes sur la valeur de certains paramètres instrumentaux. La section 3.2.3 décrit la façon d'évaluer chaque type d'erreur. Le détail des erreurs estimées pour les observations présentées ici et les barres d'erreur totales sont données dans le tableau 3.7.

Comme pour l'analyse des observations de la vapeur d'eau, on a fixé la résolution verticale pour l'inversion des spectres de façon à avoir des erreurs relatives pas trop importantes sur les rapports de mélange de l'ozone liées au bruit typique des spectres (0.1-0.3 K dans notre cas) et en tenant compte de la contribution des défauts de la ligne de base. La façon comme ces erreurs deviennent importantes en essayant d'améliorer la résolution verticale des résultats à été déjà mise en valeur dans la

$\nu_c$ (GHz) (date/tel.)	Spectromètre	couverture effective	couches (km)	mase d'air	inct. ( $\pm\%$ ) sur le rap. mél. <sup>1</sup>
142.17510 (Jul. 91/IRAM-30m)	512x1MHz	350x1MHz	23.9-33.9 33.9-46.2	1.000	10.2 11.3
142.17510 (Jul. 91/IRAM-30m)	1024x39kHz	944x39kHz	31.6-43.0 43.0-54.8 54.8-70.0	1.000	5.8 10.7 11.5
208.64242 (Jul. 93/IRAM-30m)	512x1MHz	252x1MHz	25.8-36.3 36.3-48.6	1.050	10.1 7.9
231.28151+ 239.09326 (Jul. 91/IRAM-30m)	512x1MHz	350x1MHz	23.3-33.6 33.6-46.3	1.000	5.6 3.7
231.28151 (Jan. 95/POM-2)	256x156kHz	116x312kHz	37.0-48.0 48.0-60.7	1.004	4.0 3.7
231.28151 (Jul. 91/IRAM-30m)	256x100kHz	256x100kHz	39.2-50.2 50.2-62.7	1.000	9.7 10.6
231.28151 (Jan. 95/POM-2)	256x39kHz	232x39kHz	46.9-57.9 57.9-69.5	1.004	14.5 12.4
237.14613 (Jul. 96/IRAM-30m)	512x1MHz	256x2MHz	23.9-33.9 33.9-44.2	1.773	4.1 4.9
239.09326 (Jan. 95/POM-2)	256x156kHz	116x312kHz	30.5-41.2 41.2-53.5	1.004	3.2 3.1
242.31870 (Jan. 95/POM-2)	256x156kHz	116x312kHz	38.3-48.4 48.4-59.5	1.004	4.7 4.2
358.19981 (Jan. 93/IRAM-30m)	512x1MHz	251x1MHz	28.0-38.0 38.0-48.5	1.238	5.6 5.0
358.85334 (Jan. 93/IRAM-30m)	512x1MHz	256x2MHz	25.7-33.5 33.5-42.9	1.495	6.2 5.0

TAB. 3.6 - Analyse préliminaire basée sur la méthode de Backus-Gilbert, pour fixer les couches où le rapport de mélange d'O<sub>3</sub> va être considéré comme le paramètre libre de l'algorithme d'inversion. Dans cette analyse, la bande de fréquences totale et résolution spectrale des données à traiter est déterminante. (1) Les estimations des incertitudes sur les rapports de mélange dans les couches proposées sont données pour des bruits gaussiens de 0.1 K (dans la configuration de la troisième colonne). Un multiplicateur de lagrange est utilisée dans cette analyse pour pondérer cette erreur avec la résolution verticale (col. 4).

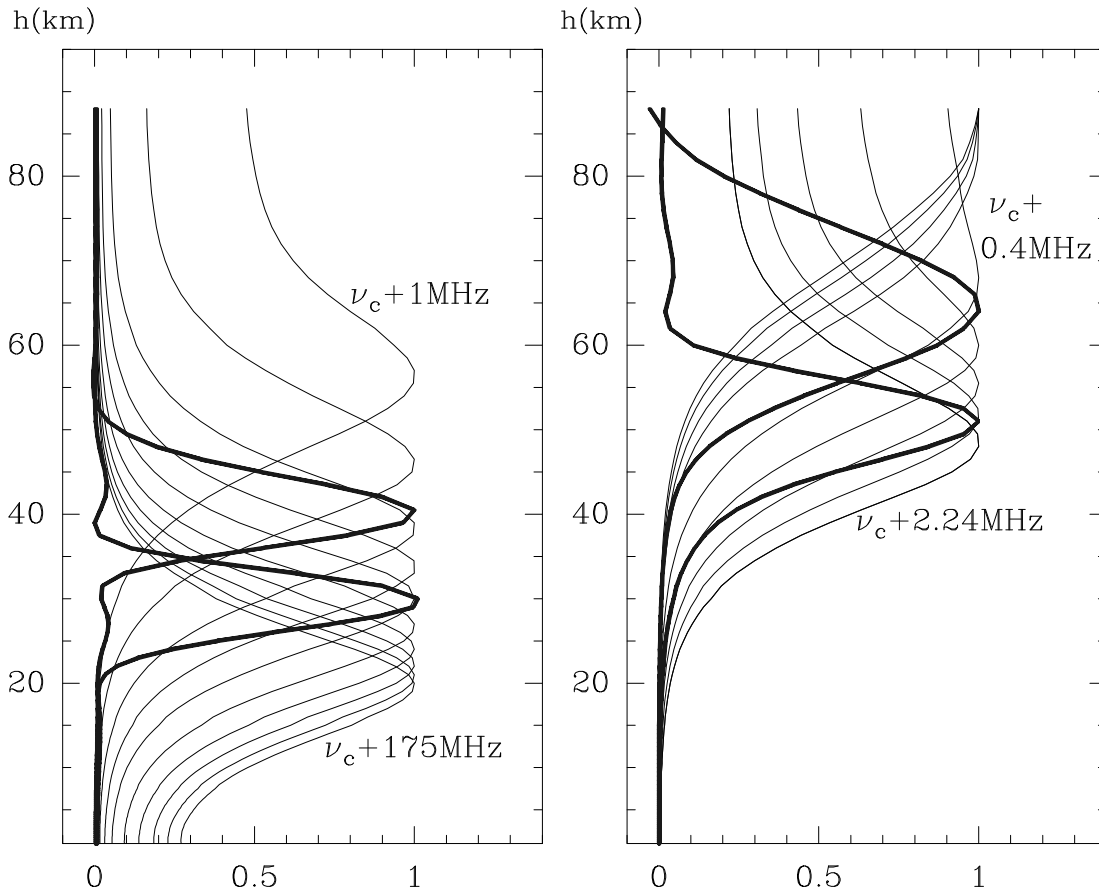


FIG. 3.17 - Fonctions de poids monochromatiques (traits fins) et fonctions de sondage (traits gras) normalisées à l'unité, tirées de l'étude préliminaire correspondant à l'usage des spectromètres 512x1MHz (gauche) et 232x39kHz (droite) pour observer la raie atmosphérique de l'ozone centrée à 231.28 GHz. Pour ces calculs, on a utilisé l'atmosphère U.S. Std. 1976, 45° de latitude. Les fonctions de sondage aident à fixer les couches pour une déconvolution correcte des spectres observés (voir tableau 3.6).

section 3.2.

### 3.3.5 Discussion. Quelques résultats particuliers.

Les observations présentées sur les figures 3.18 et 3.19 apportent des informations sur l'abondance de l'ozone dans un domaine d'altitude très important (~25 à 72.5 km comme valeurs extrêmes), qui correspondent aux observations à la plus grande largeur de bande d'une part (ceci fixe la limite inférieure en altitude) et à la meilleure résolution spectrale d'autre part (limite supérieure).

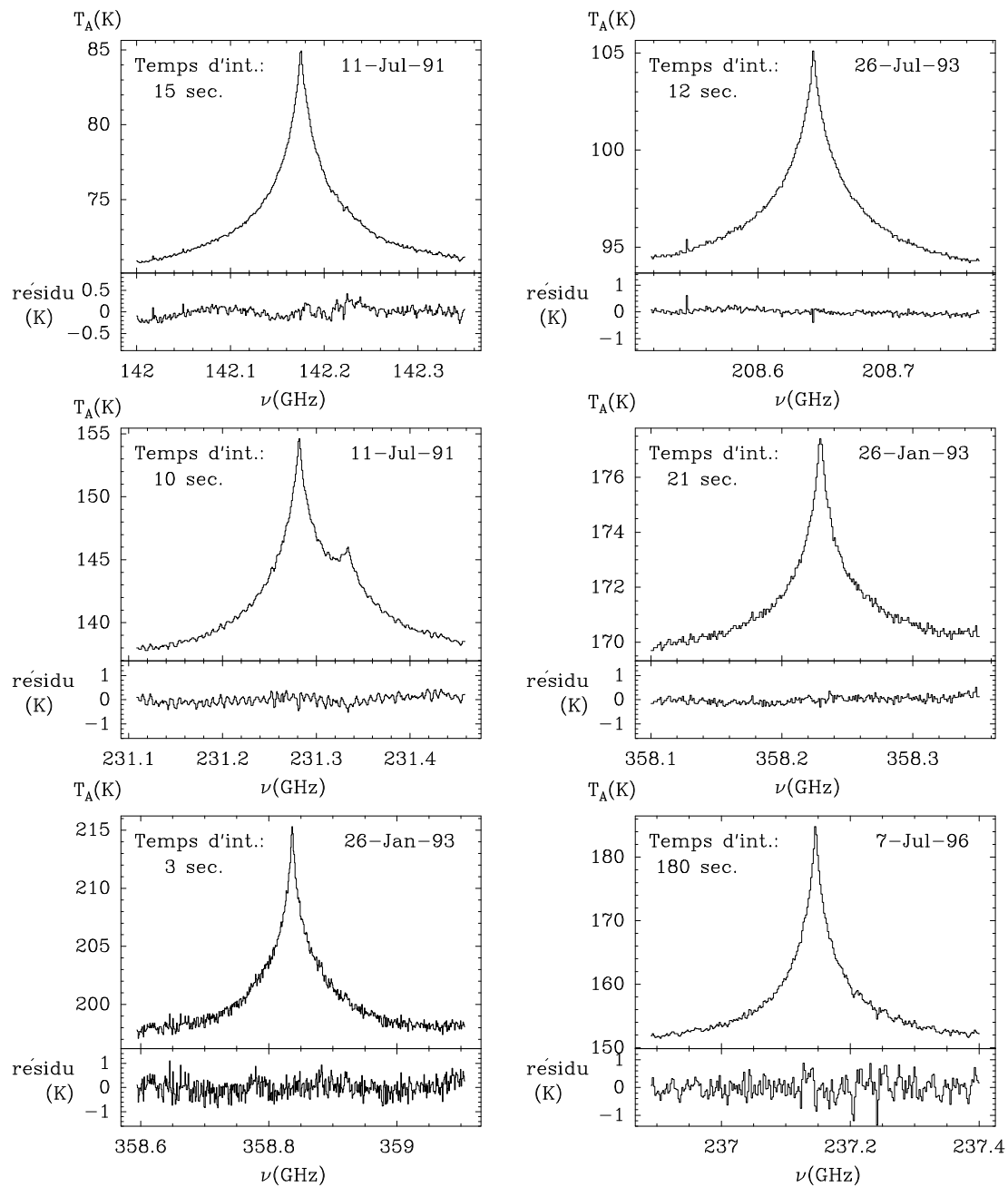


FIG. 3.18 - Exemples d'observations de raies rotationnelles de l'ozone menées avec le radiotélescope de 30 mètres de l'IRAM. Dans chaque cas on montre le résidu entre les données et l'ajustement effectué par le logiciel d'inversion présenté dans ce travail. L'information sur la distribution verticale de l'ozone déduite de l'ensemble des observations effectuées se trouve sur la figure 3.20.

Observation		Err. rel. ( $\pm\%$ ) dues à:					
$\nu_c$ (GHz)	Spectromètre (couverture eff.)	couches (km)	profil atm. a priori	bruit <sup>2</sup> obs.	Param. Ins.		TOTAL
					$\eta$	$G_S$	
142.17510	512x1MHz (350x1MHz)	23.9-33.9	6	11	1	3.5	13
		33.9-46.2	15	13	1	3.5	20
142.17510	1024x39kHz (944x39kHz)	31.6-43.0	12	9	1	4	16
		43.0-54.8	15	17	1	3	27
		54.8-70.0	12	18	1	4	22
208.64242	512x1MHz (252x1MHz)	25.8-36.3	8	11	0.5	5	14
		36.3-48.6	12	8	0.5	3	15
231.28151 + 239.09326	512x1MHz (350x1MHz)	23.3-33.6	6	11	1	2	13
		33.6-46.6	12	7	1	6	15
231.28151	256x156kHz (116x312kHz)	32.5-42.5	10	17	24		32
		42.5-56.5	13	15	21		31
231.28151	256x100kHz (256x100kHz)	39.5-51	15	15	1	6	27
		51-64.5	12	25	1	2	30
231.28151	256x39kHz (232x39kHz)	42.5-56.5	19	7	16		31
		56.5-72.5	9	7	11		18
237.14613	512x1MHz (256x2MHz)	23.9-33.9	14	11	1	3.5	18
		33.9-44.2	17	12	1	3.5	21
239.09326	256x156kHz (116x312kHz)	32.5-42.5	8	13	25		30
		42.5-56.5	13	22	12		31
242.31870	256x156kHz (116x312kHz)	32.5-42.5	12	14	23		31
		42.5-56.5	12	16	12		26
358.19981	512x1MHz (251x1MHz)	25-35	6	8	2	5	11
		35-46.5	2	7	2	4	9
358.85334	512x1MHz (256x2MHz)	23.7-33.5	7	16	4	6	20
		33.5-42.9	4	13	3	5	15

TAB. 3.7 - Erreurs relatives (en pourcentage) sur les rapports de mélange calculées à partir de quelques observations d'ozone présentées dans ce travail. (1) Les valeurs dans cette colonne sont calculées à partir du bruit des spectres et des valeurs estimées lors de l'analyse présenté dans le tableau 3.6.

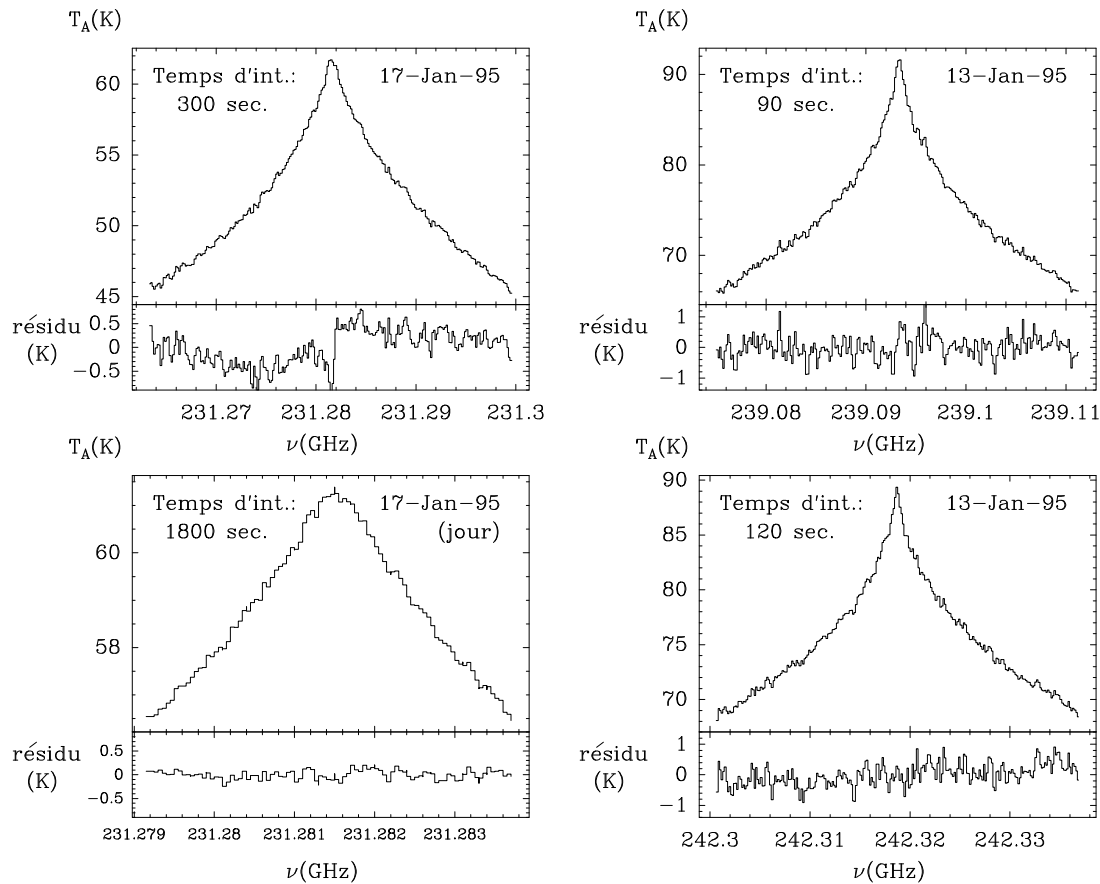


FIG. 3.19 - Exemples d'observations de l'ozone à POM-2 et résidu après leur ajustement.

La plupart de nos observations ont été menées à des fréquences au-delà de 200 GHz, tandis que presque tous les radiomètres au sol pour l'étude du profil vertical de l'ozone travaillent à des fréquences en-dessous de 150 GHz. Les instruments utilisés, pour être situés dans des régions de haute montagne, permettent de travailler avec des opacités troposphériques assez faibles entre 200-300 GHz et avec des raies intrinsèquement plus intenses que celles situées en-dessous de 150 GHz.

Nous voulons aussi signaler la possibilité de mener des observations simultanées de plusieurs raies de l'ozone avec les différents récepteurs du radiotélescope de 30 m de l'IRAM. Ceci pourrait permettre une inversion simultanée, possible avec notre logiciel, avec sans doute une amélioration dans la fiabilité des résultats car il serait alors possible de diminuer les erreurs liées à certains facteurs expérimentaux ou à la méconnaissance de paramètres spectroscopiques.

### Variabilité diurne de la quantité d'ozone au-delà de $\sim 55$ km

Les mesures présentées dans cette section ne font pas partie d'une campagne systématique d'observation de la quantité d'ozone à certains niveaux. Il s'agit plutôt

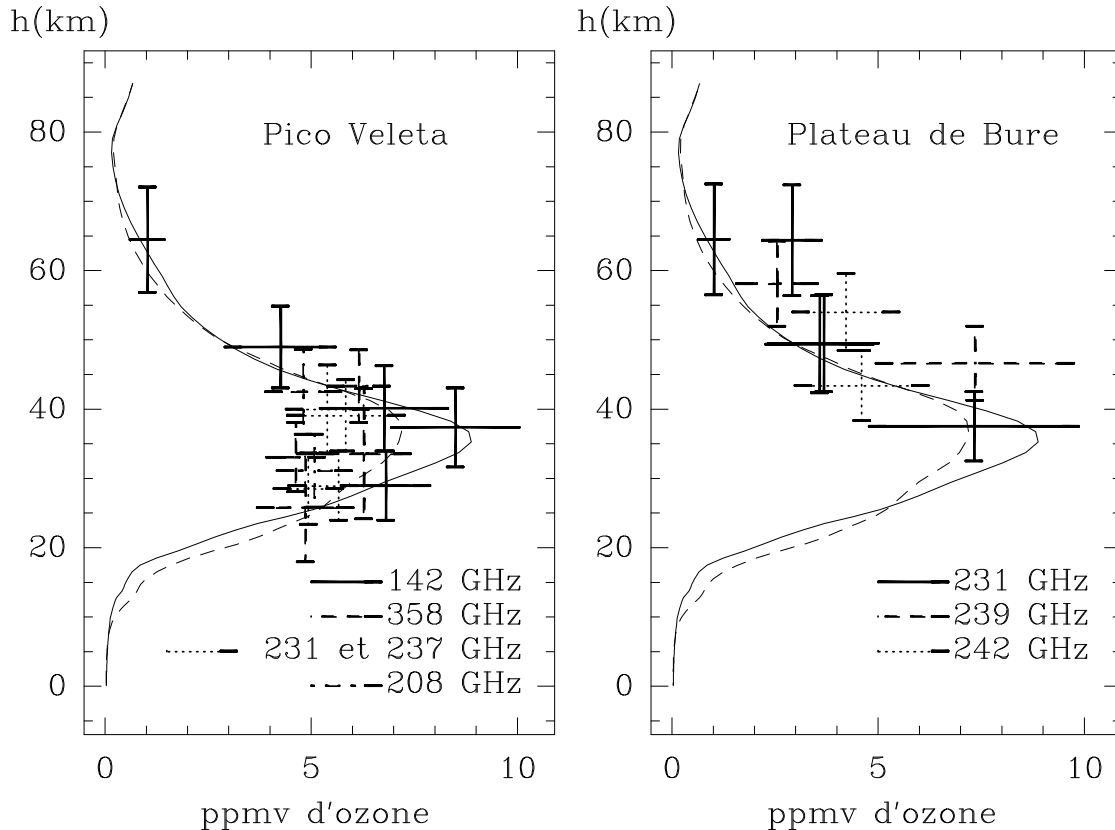


FIG. 3.20 - Rapports de mélange de l'ozone tirés des observations à plusieurs fréquences qu'on présenté dans cette section. On donne séparément les résultats pour les deux instruments utilisés (IRAM-30m et POM-2). Les différents tracés sont associées aux raies utilisées. Il faut comparer chaque résultat individuel au profil standard d'ozone des latitudes tempérées qui se trouve dans la même figure, mais dans la plupart des cas les résultats ne peuvent pas être intercomparés car les dates d'observation sont différentes.

d'une étude des possibilités offertes par différents choix de fréquences, résolutions spectrales et largeurs de bande pour ce type d'études. Néanmoins, nous avons fait pendant deux semaines en janvier 1995, une série de mesures de la région centrale de la raie de l'ozone centrée à 231.281 GHz. Les observations avaient une très grande résolution spectrale: 39 kHz.

On s'attend à des différences assez importantes entre le jour et la nuit dans le rapport de mélange de l'ozone pour des altitudes au-delà de 50 km d'après des modèles (*Vaughan et al.*, 1984 [93], *Prather et al.* 1981 [69], etc...) et d'anciennes mesures comme par exemple *Lean et al.* (1982) [46] et surtout *Lobsiger et Künzi*, 1986, et *Zommerfelds et al.*, 1989). Ces chercheurs avaient utilisé 31 canaux avec une résolution spectrale variable (30 MHz dans les ailes jusqu'à 0.2 MHz au centre) pour observer la résonance à 142.175 GHz. D'autre part *Ricaud et al.* (1991 et 1994) [71]

[72] ont mesuré la raie de l'ozone à 110.836 GHz avec un spectromètre 256x100kHz. *Kawabata et al.* (1995) [44] ont utilisé un spectromètre accousto-optique de 35 kHz de résolution, tandis que *Tsou et al.* (1995) [89] ont mené des mesures avec une résolution de 50 kHz autour de la résonance à 110.836 GHz. Dans notre travail nous apportons des mesures faites au Plateau de Bure à très haute résolution (39 kHz) et avec un rapport  $\nu/\Delta\nu$  beaucoup plus grand que dans tous les cas cités.

La figure 3.21 montre une comparaison entre deux observations de la raie de l'ozone centrée à 231.281 GHz menées à la même élévation mais avec 12 heures de différence. L'augmentation du rapport de mélange mésosphérique de l'ozone pendant la nuit est évidente. Le rapport jour/nuit est présenté sur la même figure. Les résultats obtenus montrent un rapport de mélange  $\sim 2.5$  fois plus grand pendant la nuit que pendant le jour pour la couche 56.5-72.5 km. Ces résultats sont en accord avec les mesures de *Kawabata et al.* (1995) et avec les modèles déjà cités. En-dessous de 56.5 km il n'y a pas de différences dépassant la barre d'erreur, ce qui était prévisible d'après les modèles photochimiques.

### 3.3.6 Ozone dans la basse stratosphère au-dessus du Pico Veleta

Dans quelques observations menées avec le télescope IRAM-30m on a utilisé un spectromètre 512x1MHz (0.512 GHz de couverture en fréquence) et obtenus des spectres de grande qualité de plusieurs raies de l'ozone (figure 3.18. Le tableau 3.5 montre qu'une couverture spectrale aussi grande permet d'obtenir une information sur le rapport de mélange de l'ozone à partir d'une altitude de  $\sim 25$  km, ce qui rend possible l'étude depuis le sol de ce gaz dans les couches où la densité numérique de ce gaz est la plus grande et, donc, les sections efficaces d'absorption UV dans la bande de Hartley ont la plus grande importance. Très peu de mesures depuis le sol ont apporté ce type d'information en-dessous de 30 km d'altitude (*Tsou et al.*, 1995 [89]), car la plupart des expériences depuis le sol ne fournissent de rapports de mélange de l'ozone qu'au delà de  $\sim 40$  km.

Le tableau 3.8 rassemble les densités numériques d'ozone (nous préférons ici donner cela au lieu du rapport de mélange de l'ozone car c'est la densité numérique qui permet de calculer directement l'absorption du rayonnement UV) mesurés dans la basse stratosphère au dessus de la région du Pico Veleta à différentes dates. L'extension verticale de ces couches dépend de la couverture spectrale effective



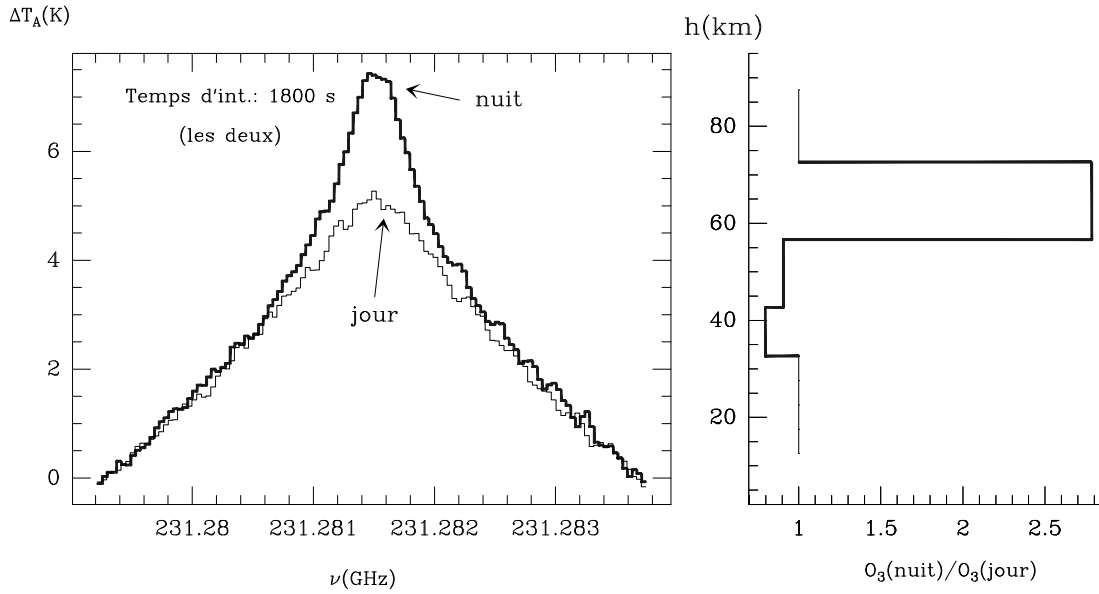


FIG. 3.21 - Comparaison de deux observations de la raie de l'ozone à 231.282 GHz menées à la même élévation par POM-2 au milieu de la nuit (trait fin) et du jour (trait gras). On montre aussi le rapport d'abondances de l'ozone entre jour et nuit à partir de l'ensemble complet d'observations de janvier 1995 au Plateau de Bure. Le profil Doppler de l'émission est évident dans la partie centrale de la raie car le signal dans cette zone vient essentiellement de couches où l'élargissement Doppler est compétitif ou même dominant par rapport à l'élargissement collisionnel. Les quantités d'ozone dans la couche 32.5-42.5 km ont été obtenues à partir de données où l'autocorrélateur de POM-2 est utilisé en mode 232x156kHz.

retenue pour l'inversion des spectres. Les mesures à 142 et 231 GHz menées à la même date montrent une bonne compatibilité étant données les barres d'erreur. De ces observations, on ne conclut pas à une réduction importante de l'ozone sur ce site à ces altitudes, c'est qui est pour l'instant le cas dans les latitudes tempérées.

L'idée principale de cette série d'observations des raies de l'ozone était de vérifier le fonctionnement et la souplesse de l'algorithme d'inversion d'observations spectroscopiques dans le domaine des longueurs d'onde millimétriques présenté dans ce travail. Les fréquences des différentes raies ont été choisies dans un intervalle très grand (142 à 358 GHz) pour être observées en tenant compte de ce qui nous était techniquement possible. L'algorithme a fonctionné correctement avec des résultats cohérents (étant données les barres d'erreur) pour différentes raies de l'ozone observées le même jour avec le même instrument, et pour les différentes dates d'observation si on compare avec un profil standard de ce gaz pour des latitudes tempérées.

$\nu_c$ (GHz)	date	couche	$\overline{\rho_{O_3}(cou.)}$ (cm <sup>-3</sup> ) (barre d'erreur)	$\overline{\rho_{O_3}(cou.)}_{std.}$ (cm <sup>-3</sup> )
142.17510	11-Jul-91	23.9-33.9 km	3.8 à 5.0 · 10 <sup>12</sup>	3.07 · 10 <sup>12</sup>
231.28151	11-Jul-91	23.3-33.6 km	3.0 à 3.9 · 10 <sup>12</sup>	3.10 · 10 <sup>12</sup>
358.19981	27-Jan-93	28.0-38.0 km	1.2 à 1.6 · 10 <sup>12</sup>	1.82 · 10 <sup>12</sup>
358.85334	27-Jan-93	25.7-33.5 km	3.0 à 6.0 · 10 <sup>12</sup>	2.67 · 10 <sup>12</sup>
208.64242	26-Jul-93	25.8-36.3 km	1.9 à 2.8 · 10 <sup>12</sup>	2.77 · 10 <sup>12</sup>
237.14613	7-Jul-93	23.9-33.9	2.8 à 3.9 · 10 <sup>12</sup>	2.97 · 10 <sup>12</sup>

TAB. 3.8 - Abondances d'ozone dans la basse stratosphère au Sud de l'Espagne calculées à partir des observations effectuées avec le télescope IRAM-30m en utilisant un spectromètre 512x1MHz.

## 3.4 Le projet EMCOR

Ce projet, qui est mené par sept instituts européens (France, Espagne, Suisse, Royaume Uni, Allemagne et Finlande) dont font partie l'Observatoire de Paris-Meudon (France) et l'*Observatorio Astronómico Nacional* (Espagne), a pour but de construire un radiomètre qui effectuera des observations spectroscopiques de l'émission rotationnelle de différents gaz atmosphériques minoritaires dans le domaine de fréquences entre 198 et 211 GHz (d'après la décision adoptée lors de la réunion du groupe au siège de l'OAN dans le campus universitaire d'Alcalá de Henares, le 29-Fev-1996).

### 3.4.1 Objectifs

L'objectif fondamental de ce projet est de pouvoir mesurer et suivre l'abondance de la molécule de ClO dans la stratosphère à cause de son rôle décisif dans la chimie, en particulier pour la destruction de l'ozone stratosphérique. L'intensité des raies de ClO (très faibles en général) augmente avec la fréquence au moins jusqu'à 300 GHz. Depuis le sol, la seule possibilité envisageable est de travailler dans la fenêtre atmosphérique entre 200 et 300 GHz. Il y a dans cette région trois transitions rotationnelles qui peuvent être utilisées en principe à 204.35, 241.45 et 278.60 GHz. Le travail du groupe de spectroscopie de ce projet a été de modéliser de manière

J=11/2→9/2					J=15/2→13/2				
F→F'	Λ	$\nu_c$ (GHz)	Force osc.	$E_{low}$ (K)	F→F'	Λ	$\nu_c$ (GHz)	Force osc.	$E_{low}$ (K)
5→6	e	204.26963	0.0004	18.736	7→8	e	278.56413	0.0003	28.543
5→6	o	204.27061	0.0004	18.736	7→8	o	278.56581	0.0003	28.543
6→6	e	204.29385	0.0265	18.736	8→8	e	278.58236	0.0230	28.543
6→6	o	204.29502	0.0265	18.736	8→8	o	278.58400	0.0230	28.543
4→5	o	204.32125	0.0005	18.733	7→7	e	278.61195	0.0003	28.541
4→5	e	204.32148	0.0005	18.733	6→7	e	278.61285	0.0003	28.541
5→5	e	204.32738	0.0349	18.733	6→7	o	278.61287	0.0304	28.541
5→5	o	204.32783	0.0349	18.733	7→7	o	278.61289	0.0304	28.541
7→6	o	204.34600	0.6720	18.736	9→8	e	278.62712	0.7890	28.543
7→6	e	204.34600	0.6720	18.736	9→8	o	278.62814	0.7890	28.543
4→4	o	204.35090	0.0264	18.732	8→7	e	278.63010	0.6730	28.541
4→4	e	204.35094	0.0264	18.732	8→7	o	278.63122	0.6730	28.541
6→5	e	204.35163	0.5560	18.733	7→6	e	278.63265	0.0229	28.540
6→5	o	204.35222	0.5560	18.733	6→6	e	278.63353	0.0229	28.540
5→4	e	204.35688	0.4570	18.732	6→6	o	278.63374	0.5720	28.540
5→4	o	204.35748	0.4570	18.732	7→6	o	278.63378	0.5720	28.540
4→3	o	204.36256	0.3760	18.731	6→5	e	278.63557	0.4870	28.539
4→3	e	204.36256	0.3760	18.731	6→5	o	278.63658	0.4870	28.539

TAB. 3.9 - Composantes hyperfines des transitions rotationnelles J=11/2→9/2 et J=15/2→13/2 de  $^{35}\text{ClO}$ .

précise l'émission de ces raies dans différentes situations afin de choisir la meilleure fréquence de travail. La spectroscopie de ClO a déjà été étudiée dans la section (2.2). Cette molécule possède un isospin nucléaire qui produit une structure hyperfine dans son spectre rotationnel. Dans les spectres simulés de la figure 3.22 on identifie très clairement les principales composantes hyperfines. Les fréquences, forces d'oscilateur et autres paramètres spectroscopiques se trouvent dans le tableau 3.9.

Une fois choisie la résonance à 204.35 GHz du ClO comme la plus appropriée pour ce projet (celle à 241.45 a été rejetée à cause d'une superposition avec une raie de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ , et celle à 278.60 GHz n'a pas été retenue à cause de la plus forte opacité atmosphérique à cette fréquence) d'autres molécules sont entrées dans les objectifs de EMCOR. Il s'agit, par exemple, de  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{NO}_2$  et d'autres.

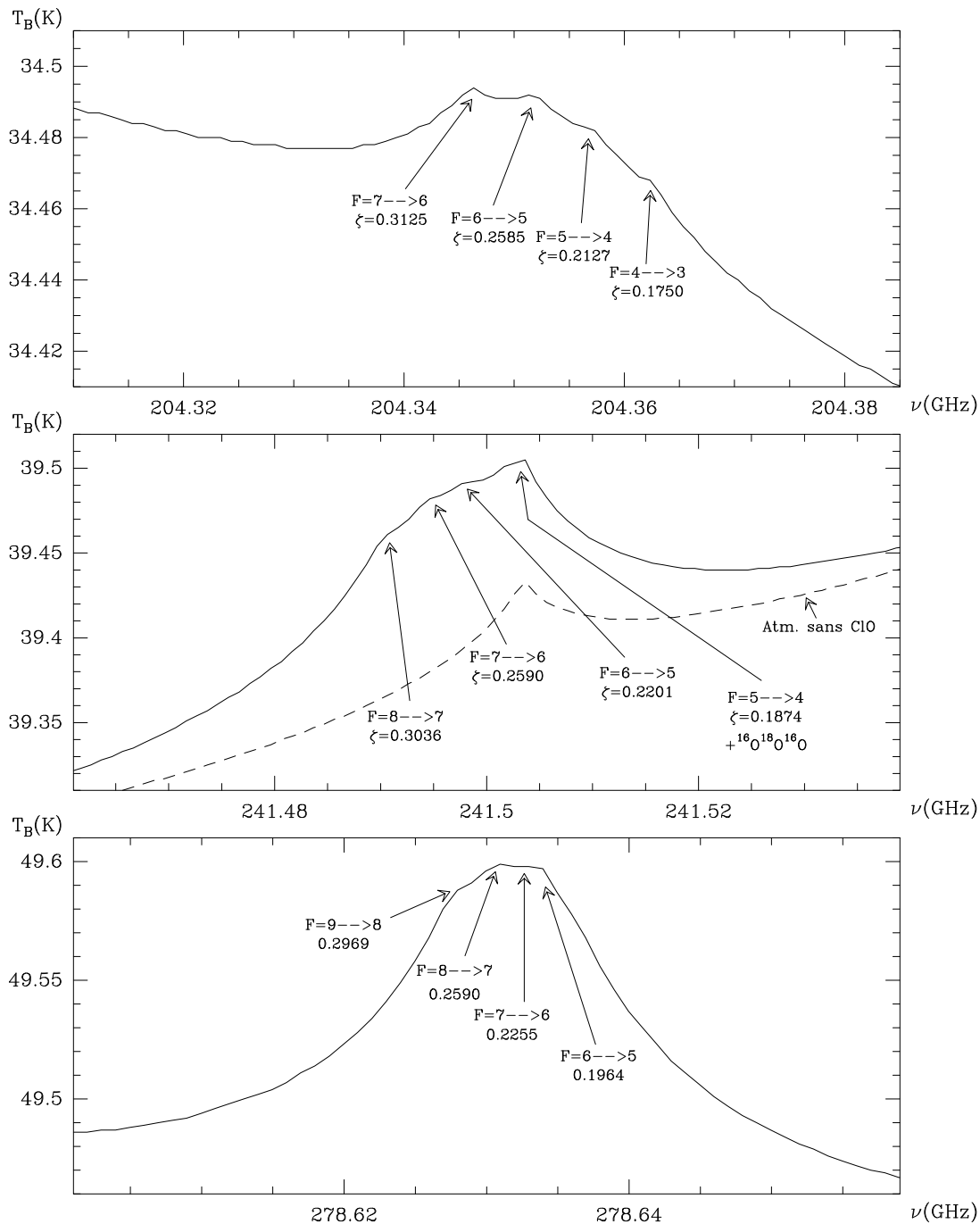


FIG. 3.22 - Simulation des raies rotationnelles de ClO dans la bande 200-300 GHz, et identification des composantes hyperfines les plus importantes. Ces calculs correspondent à une atmosphère non activée en ClO dans la base stratosphère, une masse d'air égale à 2 et un site d'observation placé 3.5 km au-dessus de la mer. Il est intéressant de remarquer que la raie à 241 GHz ne peut pas être utilisée pour les besoins de EMCOR car elle est contaminée par une raie de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$  mise en évidence quand on enlève ClO des calculs (traits discontinus).

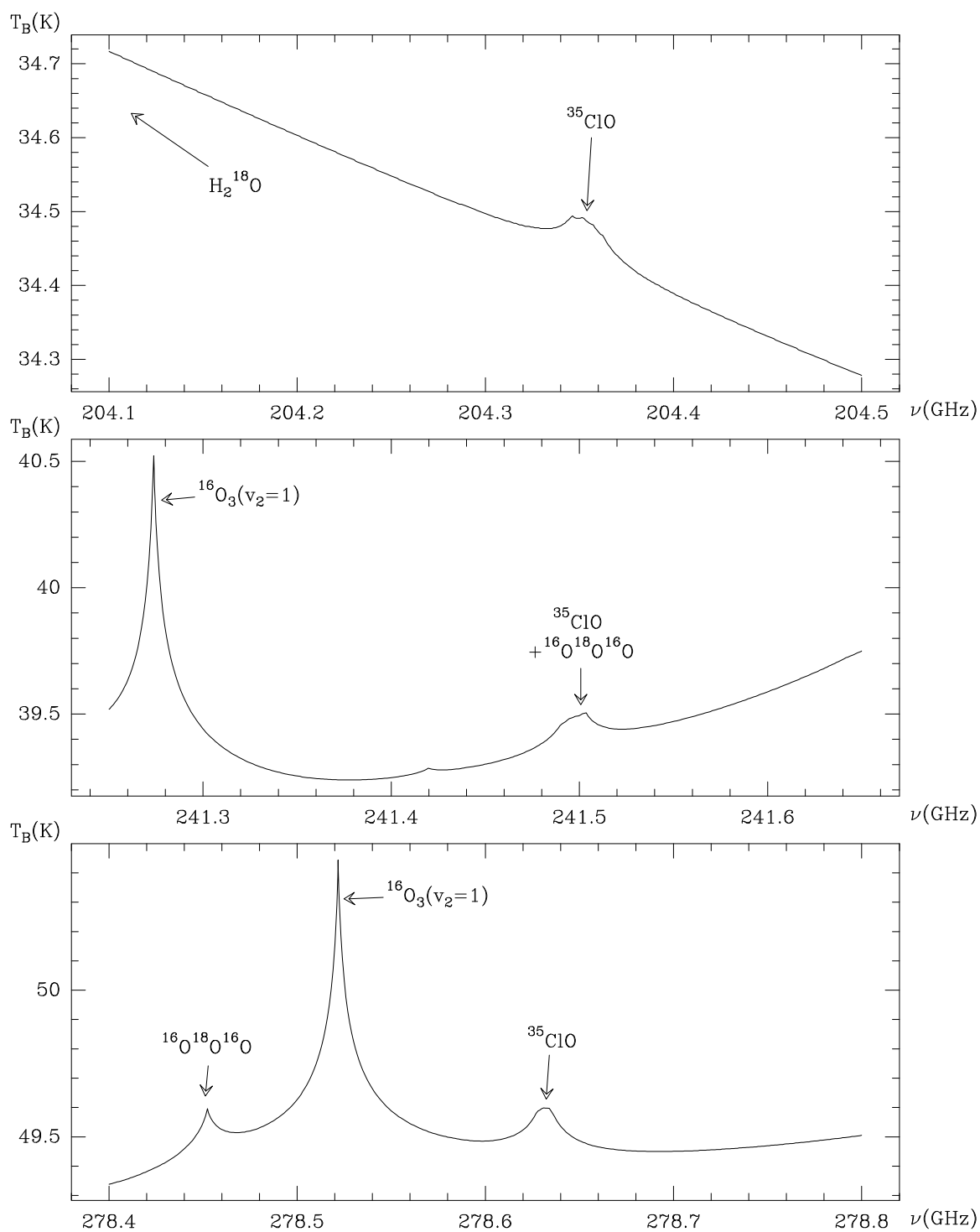


FIG. 3.23 - Spectre atmosphérique au voisinage des raies rotationnelles de ClO dans le domaine 200-300 GHz. Le profil atmosphérique utilisé est le même que dans la figure précédente.

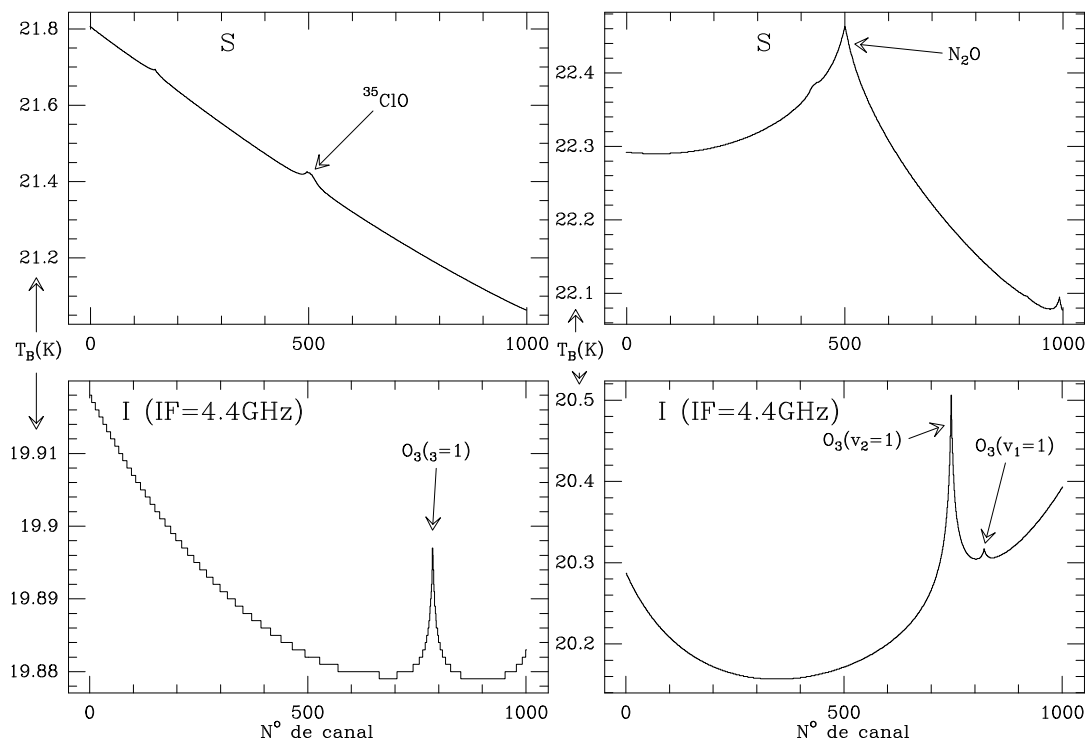


FIG. 3.24 - Calculs menés pour choisir la fréquence intermédiaire de EMCOR. En haut on montre le spectre atmosphérique attendu dans la bande signal si on observe ClO ou  $N_2O$ , et en bas on voit le spectre qui correspondrait à la bande image si on choisit une fréquence intermédiaire de 4.4 GHz. Pour ces calculs on a adopté U.S. Std. 76, 3.5 km d'altitude et une observation au zénith. Le choix  $IF = 4.4$  GHz est le meilleur car il minimise les risques de signaux parasites dans la bande image pour l'ensemble des raies qu'on envisage d'observer avec EMCOR. Ceci a été donc adopté en accord avec les autres membres du groupe spectroscopique du projet.

### 3.4.2 Caractéristiques

Le radiomètre EMCOR sera installé très probablement sur le site du Jungfraujoch, station géophysique de l'Université de Berne dans les Alpes Suisses (à 3500 mètres d'altitude). Une grande partie des caractéristiques techniques de l'instrument ne sont pas complètement décidées aujourd'hui et feront l'objet des prochaines réunions du groupe de travail. La fréquence retenue dans un premier temps devra être observée par un récepteur SIS travaillant à une fréquence intermédiaire située entre 3 et 5 GHz. Le spectromètre utilisé devra couvrir  $\sim 1$  GHz de bande totale avec une résolution de  $\sim 1$  MHz, mais l'usage d'autres spectromètres de meilleure résolution spectrale n'est pas exclu pour mener des études de la haute stratosphère et de la

mésosphère. En ce qui concerne ClO, et avec les résolutions spectrales envisagées, l'effet Zeeman sur les raies choisies peut être négligé.

Le choix actuel se porte sur la réjection totale de la bande image mais ceci n'est bien sûr qu'une situation idéale. Le groupe de spectroscopie a dû donc mener une étude pour le choix d'une fréquence intermédiaire pour minimiser la contamination du signal par une raie atmosphérique forte venant de la bande image. En prenant les transitions plus intéressantes à observer par EMCOR, les calculs d'ATM (quelques-uns sont montrés sur la figure 3.24) suggèrent que la meilleure valeur de la fréquence intermédiaire se situe à 4.4 GHz.





## Chapitre 4

# Sondages millimétriques depuis des satellites vers la surface terrestre

On a vu au chapitre 2 la solution générale de l'équation de transfert de rayonnement dans le domaine des fréquences millimétriques (équation 2.13). Nous allons traiter dans ce chapitre le cas d'observations depuis un satellite à des angles suffisamment proches du nadir pour que la ligne de visée intercepte la surface terrestre.

La température de brillance mesurée par le satellite est composée de deux termes: i) une contribution du signal réfléchi par la surface terrestre ainsi que l'émission de la surface à la température physique  $T_S$ , toutes les deux affectées par l'opacité sur le chemin montant, ii) le signal émis par l'atmosphère elle-même dans la direction du satellite. Si on appelle  $e_S(\nu, \theta, \phi)$  l'émissivité directionnelle de la surface à la fréquence  $\nu$  (valeur entre 0 et 1), le coefficient de réflexion sera  $1 - e_S(\nu, \theta, \phi)$ . Il est possible d'exprimer ainsi la température de brillance arrivant à la position d'un satellite qui observe selon un angle  $\theta$  par rapport au nadir dans l'approximation plan-parallèle:

$$T_{B\nu\theta} = [T_S e_S(\nu, \theta) + (1 - e_S(\nu, \theta)) T_{\downarrow}(\nu, \theta)] e^{-\tau_{\nu}(surf., \infty) \sec\theta} + \int_{surf.}^{\infty} T(z) e^{-\tau_{\nu}(z, \infty) \sec\theta} \kappa_{\nu}(z) \sec\theta dz \quad (4.1)$$

où  $T_{\downarrow}(\nu, \theta)$  est exactement la température de brillance arrivant à la surface d'après l'équation 2.13). L'émissivité  $e_s$  dépend de façon générale de la polarisation. La

température de brillance du fond est donc un peu plus complexe que dans le cas d'observation depuis la surface terrestre. D'autre part, le facteur qui atténue l'émission thermique à une altitude donnée est dû à toute l'atmosphère située entre celle-ci et le satellite. Dans les raies rotationnelles de l'oxygène moléculaire ou de la vapeur d'eau il y a en général une très forte opacité et les couches supérieures de l'atmosphère sont difficilement observables depuis le sol aux longueurs d'onde millimétriques (voir sections 3.1 et 3.2). L'idée d'effectuer des observations depuis un satellite a son origine, donc, dans le besoin d'étudier l'émission de l'O<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O dans la troposphère et la stratosphère. La différence entre l'émission que présente la bande de l'oxygène entre 50 et 70 GHz, vue depuis la surface terrestre vers le zénith et depuis un satellite pointant au nadir dans la même verticale, est montrée sur la figure 4.1.

## 4.1 Sondages autour de 60 et 119 GHz

La spectroscopie des raies de l'oxygène en millimétrique et submillimétrique est utilisée pour étudier le profil vertical de température et de pression de l'atmosphère car le rapport de mélange de ce gaz est très bien connu (mieux que celui de n'importe quel autre gaz atmosphérique). Grâce à cette propriété, son émission à une certaine altitude dépend presque exclusivement de la pression et de la température locales. Ce chapitre est consacré à des instruments embarqués sur satellite en orbite relativement basse ( $\sim 800$ - $1000$  km) qui réalisent des sondages atmosphériques dans le domaine millimétrique avec des angles par rapport au zénith jusqu'à  $50^\circ$ . Ce type d'observation est dirigé vers la surface terrestre. Le sondage de l'atmosphère au limbe sera examiné en détail au chapitre 5.

### 4.1.1 Introduction

Dans le type d'études qu'on va présenter ici on travaille assez souvent à des fréquences où la complexité de la solution de l'équation de transfert de rayonnement est moindre. Ceci se produit quand on travaille à des fréquences où la transmission atmosphérique totale ( $e^{-\tau_\nu(sup,\infty)sec\theta}$ ) est presque nulle. L'expression 4.1 se réduit donc à

$$T_{B\nu\theta} = \int_{surface}^{\infty} T(z) e^{-\tau_{\nu}(z,\infty) \sec\theta} \kappa_{\nu}(z) \sec\theta dz \quad (4.2)$$

Dans le domaine millimétrique, les fréquences dans la partie centrale de la bande 50-70 GHz ou autour de 118.75 GHz (spectre spin-rotation de l'O<sub>2</sub>) ou bien autour à 183.31 GHz (voir des observations depuis la terre de cette raie de la vapeur d'eau dans la section 3.2) vérifient cette simplification. Il faut, en plus, s'assurer que les fréquences de travail soient adéquates pour l'étude du profil de température. Pour ceci il faut des fréquences où les changements de l'émission soient dus essentiellement à des variations de température et que l'abondance et la distribution verticale du gaz principalement responsable de l'émission varient très peu (car la densité est présente dans le coefficient d'absorption  $\kappa_{\nu}$ ). La conclusion logique, comme nous l'avions avancée au début de ce chapitre, est qu'il faut travailler autour des résonances de l'oxygène, car l'abondance de cette molécule dans l'atmosphère subit des changements beaucoup moins importants et mieux connus que n'importe quelle autre molécule. Enfin, parmi les deux possibilités (50-70 ou 119 GHz), il paraît plus convenable de choisir des fréquences autour de 60 GHz car l'ensemble des résonances de l'O<sub>2</sub> dans cette région est affecté d'un moindre continuum d'absorption (principalement causé par la vapeur d'eau). En plus, cette bande est composée de 30 résonances importantes, ce qui offre plus de choix de canaux d'observation que pour la raie unique à 119 GHz. Celle-ci pourrait présenter, par contre, quelques avantages. Cette raie isolée est suffisamment loin d'autres résonances d'O<sub>2</sub> pour négliger les termes de couplage dans le profil de raie. En plus, l'effet Zeeman sur cette raie donne seulement trois raies (car les nombres quantiques sont  $N_{J=1_1} \rightarrow 1_0$ ). Un autre avantage très important est qu'en travaillant à la limite de diffraction, la résolution spatiale à 119 GHz est deux fois meilleure qu'à 60 GHz pour la même taille d'antenne. Pour une discussion plus détaillée, se référer à la fin de ce chapitre.

#### 4.1.2 Discussions sur l'application de cette technique à l'étude du profil de température

Si on suppose qu'on travaille effectivement à une fréquence où la transmission atmosphérique est presque nulle, l'expression de la température de brillance au point d'observation sera donnée par l'équation (4.2). En partant de cela nous pouvons introduire d'une façon simple le concept de **fonction de poids en température** pour une observation satellitaire (définie d'une façon générale dans l'équation 3.17):

$W_{\nu,\theta}(z) = e^{-\tau_\nu(z,\infty)\sec\theta} \kappa_\nu(z)$  qui a la dimension de l'inverse d'une longueur et qui donne une idée de l'importance relative de la contribution des différentes couches atmosphériques à la température de brillance mesurée à la position du satellite. En utilisant un profil atmosphérique et un modèle du coefficient d'absorption  $\kappa_\nu$ , on peut calculer la fonction de poids à la fréquence  $\nu$ . Les fonctions de poids "monochromatiques" calculées ainsi sont valables seulement si l'atmosphère est complètement opaque pour le trajet depuis le sol jusqu'au satellite, ce qui est vrai entre  $\sim 55.5$  et  $64$  GHz. Dans ce domaine, ces fonctions présentent seulement un pic, à une altitude différente selon la fréquence, et avec une largeur typique à mi-hauteur de plusieurs kilomètres, ce qui signifie que les mesures satellitaires qui font l'objet de ce chapitre vont avoir une résolution verticale de l'ordre de  $10-15$  km en pression et en température (voir figure 4.2). L'opacité atmosphérique totale a un comportement général de croissance jusqu'à  $60-61$  GHz, et une décroissance après, avec des pics locaux de l'opacité à proximité des fréquences de résonance (figure 4.1). C'est à proximité de ces fréquences à forte opacité totale relative que l'on peut obtenir des fonctions de poids sondant les altitudes les plus élevées.

La transmission atmosphérique entre  $z$  et  $\infty$ ,  $\Gamma_{\nu\theta}(z, \infty) = e^{-\tau_\nu(z,\infty)\sec\theta}$ , a une relation simple avec la fonction de poids en température:

$$W_{\nu\theta}(z) = \frac{\partial \Gamma_{\nu\theta}(z, \infty)}{\partial z} \quad (4.3)$$

Une fois qu'on a introduit les bases théoriques, nous allons montrer comment les appliquer au choix de fréquences pour effectuer un sondage le plus optimal possible du profil vertical de la température atmosphérique. Le but est d'utiliser les résultats de ces mesures dans les modèles de prédiction météorologique.

Le calcul des fonctions de poids est la base pour une sélection des fréquences des récepteurs à bord de satellites. Dans le cadre de la collaboration entre le Département de Radioastronomie Millimétrique de l'Observatoire de Paris et l'*Observatorio Astronómico Nacional* (Espagne), on a mené des calculs de fonctions de poids et d'opacité atmosphérique totale dans la région de fréquences autour de  $60$  GHz pour un projet de satellite du CNES pour le sondage en température de l'atmosphère (section 4.4). Un canal réel a une certaine largeur en fréquences. Il peut même être sensible à plusieurs bandes (on avait vu l'exemple de récepteurs double bande utilisés dans les travaux observationnels du chapitre 2). Il est donc nécessaire de calculer les fonctions de poids réelles en faisant une convolution en fréquence des fonctions de poids monochromatiques en tenant compte de la réponse spectrale de chaque canal.

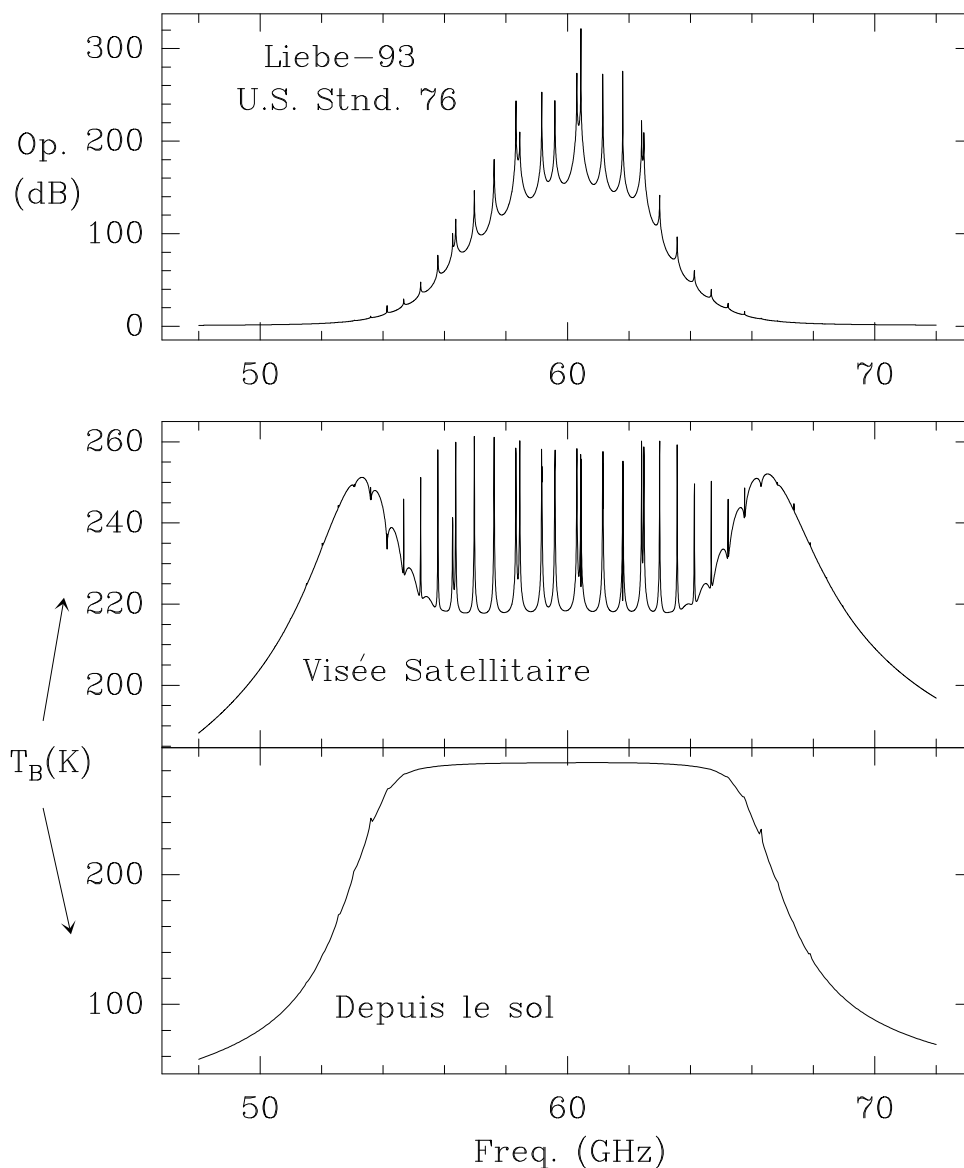


FIG. 4.1 - Simulation de l'opacité totale atmosphérique dans la bande spin-rotation de l'oxygène en utilisant le modèle d'absorption Liebe-93 et l'atmosphère U.S. Std. Atm. 1976 (surface à 0 km). Voir aussi l'aspect différent montré par la température de brillance attendue dans cette bande dans le cas d'observation depuis le sol ou depuis un satellite (dans les deux cas on a considéré une masse d'air égale à 1).

Une certaine largeur spectrale a comme conséquence un élargissement de la fonction de poids, par rapport au cas monochromatique, ce qui entraîne une limitation de la résolution verticale en température ou pression. Par contre, la largeur  $\Delta\nu$  d'un canal ne peut être inférieure à certaines limites car on doit conserver une bonne sensibilité pour des temps d'intégration donnés. Cette question, et d'autres comme la sélection de l'orbite du satellite, le système de balayage spatial des antennes (pour une couverture géographique la plus grande possible) seront traitées dans la section

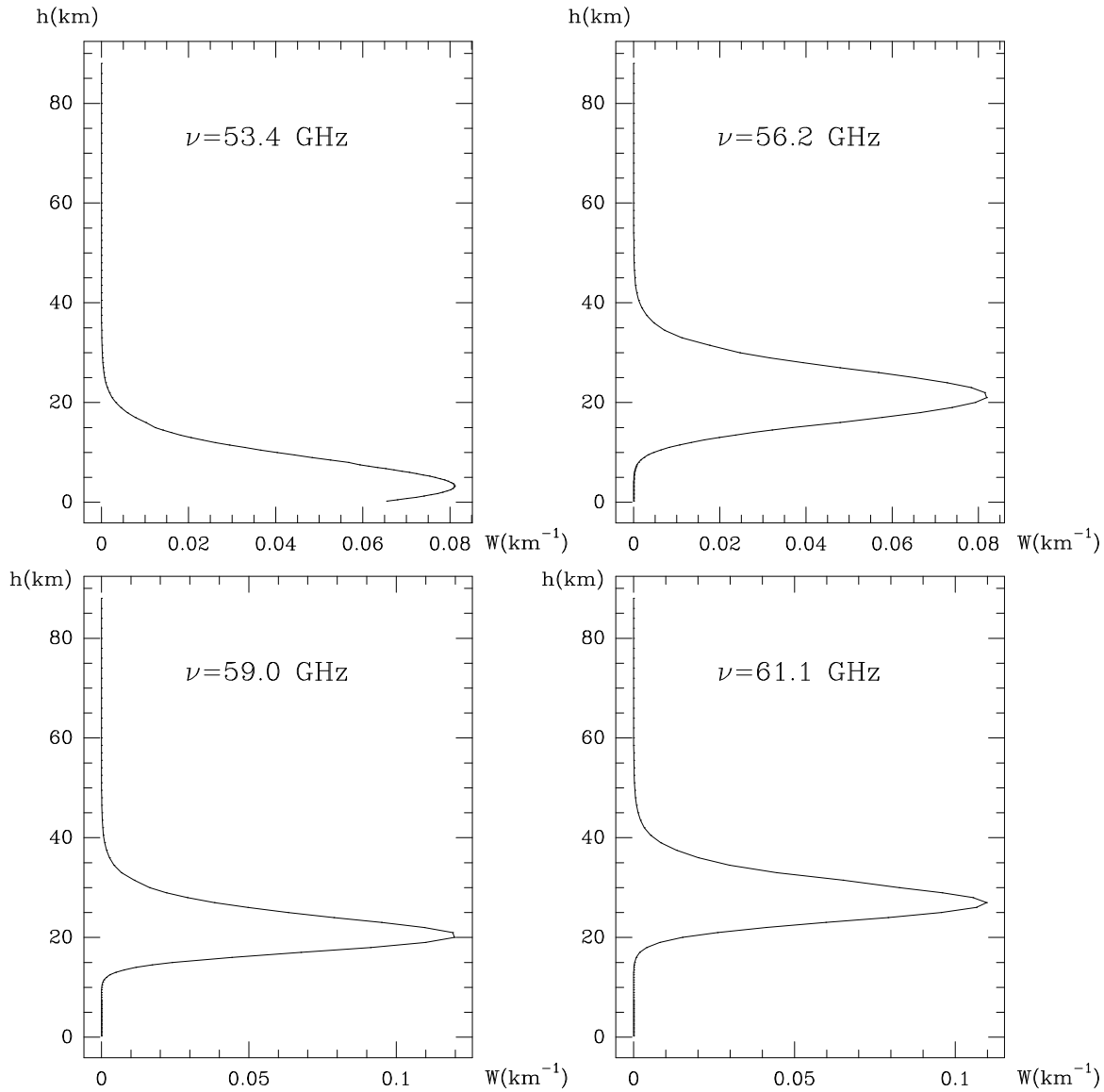


FIG. 4.2 - Exemples de fonctions de poids monochromatiques à différentes fréquences dans la bande spin-rotation d' $O_2$ , calculées d'après les modèles cités dans la figure précédente. Pour le calcul de la fonction de poids à 53.4 GHz il a été nécessaire de généraliser l'équation 4.3 pour tenir compte du rayonnement atmosphérique réfléchi par la surface.

#### 4.4.

Dans ce type de sondage on travaille d'une part à des fréquences où la propagation des ondes électromagnétiques dans l'atmosphère ne dépend ni de la direction ni de l'état de polarisation (en général, pour des fréquences éloignées de plus de 5 MHz des centres des raies d' $O_2$ , section 3.1). La propagation est alors isotrope et le transfert de rayonnement est décrit par une équation scalaire. D'autre part, il y a les canaux aux fréquences très proches des résonances (moins de 5 MHz) où la propagation est

anisotrope et dépend de l'état de polarisation, et un traitement des données à l'aide de la théorie présentée dans la section 3.1 est nécessaire. Pour fixer les canaux de sondage il y a donc une série de règles à suivre:

A) Chaque canal doit être sensible à un domaine d'altitudes différent dans l'atmosphère. On va voir qu'il y a une limitation supérieure.

B) Le niveau de sensibilité doit être optimisé.

C) On ne doit pas placer des canaux à des fréquences très dispersées car ceci complique beaucoup le système d'un point de vue technique.

D) Les fréquences choisies ne doivent pas être contaminées par des émetteurs non naturels (communications entre satellites, réseaux de communications sur terre, etc...).

Nous allons approfondir séparément chacune de ces contraintes.

### 4.1.3 fonctions de poids

Le logiciel **ATM** a été adapté pour permettre de calculer de façon précise les fonctions de poids. Nous nous référons à l'annexe A pour les informations générales sur l'utilisation d'ATM dans ce but.

#### Niveau de sensibilité

La sensibilité d'un récepteur dans le domaine des ondes millimétriques est donnée par le minimum de signal qu'il est capable de détecter au-dessus du bruit associé au système. Ce seuil dépend de facteurs de type technique ainsi que des conditions d'observation. Pour nous faire une idée, l'équation suivante est valable d'une façon générale:

$$\Delta T_S = \frac{3\alpha T_S}{(\Delta\nu t)^{1/2}} \quad (4.4)$$

où  $\Delta T_S$  est seuil de détectabilité (à  $3\sigma$ ),  $\alpha$  est une constante qui prend des valeurs entre 0.5 et 1 et qui tient compte des caractéristiques du système récepteur,  $T_S$  est la température de bruit du système (somme des contributions du récepteur lui-même, du système d'amplification et de transmission d'énergie, ainsi que du bruit de l'atmosphère),  $\Delta\nu$  est la largeur du canal, et  $t$  est le temps d'intégration. L'avancement de la technique des récepteurs d'ondes millimétriques optimise peu à

peu le paramètre ( $\alpha T_S$ ). On peut donc améliorer le niveau de sensibilité en faisant croître  $\Delta\nu$  et  $t$ . Dans la réalité, ces deux paramètres ont quelques limitations:

A) On ne peut pas faire  $\Delta\nu$  excessivement grand sans élargir la fonction de poids associée au canal (ce qui signifie une dégradation de la résolution verticale).

B) Le temps d'intégration de chaque observation est limité par le besoin de faire des balayages avec l'antenne pour avoir une couverture géographique la plus grande possible. Dans la section 4.4 on décrira les types possibles de balayage avec une discussion de leurs avantages et de leurs inconvénients.

### Limite supérieure de l'altitude d'exploration

D'après leur définition et d'une façon qualitative, les fonctions de poids sont déterminées par l'absorption à différentes altitudes dans l'atmosphère. D'une façon générale, on peut dire que pour les fréquences où l'absorption est globalement plus importante, les couches les plus proches du satellite absorberont le rayonnement des niveaux situés en-dessous plus facilement et émettront plus de puissance qu'à d'autres fréquences. Quantitativement ceci se manifeste par un maximum de la fonction poids à des altitudes plus grandes pour les fréquences où l'opacité est plus grande. C'est donc en plaçant des canaux très proches des fréquences de résonance de l'oxygène qu'on peut faire des sondages à grande altitude. Mais ceci est limité car l'opacité ne croît pas à l'infini. Une analyse à la fréquence 61.15056 GHz (résonance très intense d'O<sub>2</sub>) sans tenir compte du champ magnétique terrestre nous donne un pic de la fonction de poids vers 85 km. Par contre, il n'est pas vrai qu'il soit possible d'étudier le profil de température jusqu'à cette altitude. Ceci est dû à l'altération subie par le coefficient d'absorption à cause du champ magnétique terrestre à des fréquences très proches de la résonance. Les calculs de fonctions de poids monochromatiques à des fréquences éloignées de plus de 5 MHz de la résonance, où cet effet est négligeable, montrent qu'on peut monter jusqu'à ~45 km au maximum. Ceci est la limite pour un système d'observation avec des canaux hors de la zone de fréquences où la propagation devient anisotrope. À moins de 5 MHz de la résonance, on doit calculer des matrices de fonctions de poids généralisées comme on les a définies dans l'équation 3.18. On verra cela dans la section 4.3.



#### 4.1.4 Concurrence entre services actifs et passifs pour l'usage de fréquences autour des raies de l'oxygène

Les observations passives de l'atmosphère terrestre depuis des satellites pour déduire des paramètres physiques (profils de température, pression ou humidité) doivent être effectuées dans certaines bandes de fréquences très spécifiques du spectre électromagnétique (discussion de la section 4.1.1). On pourrait dire que ces bandes sont une ressource naturelle à protéger devant le risque d'un développement des services actifs des télécommunication aux mêmes fréquences. En général, on appelle "actif" tout système émetteur de rayonnement (et aussi éventuellement récepteur), tandis qu'un système "passif" est celui qui reçoit seulement. Un radar est, par exemple, un système actif.

Les fréquences entre 50 et 70 GHz commencent à être exploitées pour les communications entre satellites afin d'éviter les interférences avec les communications terrestres. Une éventuelle coïncidence du lobe principal du diagramme de rayonnement de l'antenne d'un satellite émetteur avec un lobe secondaire d'un système passif, peut contaminer suffisamment une mesure pour la rendre inutilisable. Le problème est plus grave si on remarque que parfois il est impossible de déterminer si une mesure a été contaminée ou pas. D'autres projets de systèmes actifs sur terre commencent à se développer, toujours dans l'idée de satisfaire des besoins de communications locales sans interférence avec d'autres zones. Il est nécessaire d'étudier en détail quelle puissance maximale est tolérable pour ces émissions depuis le sol pour éviter qu'un signal parasite arrive, par diffusion, aux systèmes passifs sur des satellites.

Les mesures réalisées par des systèmes d'observation passifs depuis un satellite de l'émission naturelle atmosphérique de raies millimétriques d'O<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O, servent à calculer des paramètres d'entrée pour les modèles numériques de prédiction météorologique. L'importance de ces prédictions est très grande dans différents domaines comme l'agriculture, les transports, la production d'énergie, etc... L'utilisation de mesures contaminées par des émissions artificielles peut provoquer différents effets sur la prédiction numérique:

\* Une mesure contaminée non détectée donne lieu à une donnée erronée d'entrée dans le modèle de prédiction. Cette erreur se propage en s'amplifiant et peut devenir inacceptable.

\* Même s'il est possible de reconnaître les mesures contaminées et de les éliminer il y aura des problèmes. En effet, le risque de contamination sera

concentré sur des zones bien localisées du globe (zones urbaines) ce qui aura comme conséquence un manque d'information qui rendra impossible de reconnaître et de suivre le développement de phénomènes météorologiques à moyenne échelle.

\* Pour les études du changement climatique global, des interférences systématiques avec des signaux artificiels pourraient être mal interprétées comme un réchauffement progressif de l'atmosphère.

\* Pour l'étalonnage des mesures il est nécessaire de comparer avec des données de radiosondages en coïncidence spatiale et temporelle (voir section 4.1.3). Normalement les radiosondages sont lancés depuis des stations proches de zones urbaines, où les mesures satellitaires ont plus de risques d'être contaminées.

Aujourd'hui le partage légal des fréquences dans les bandes d'intérêt pour l'étude passive de l'atmosphère provient de la Conférence Mondiale de Radiotélécommunications (WRC, 1979) et a besoin d'être révisé (prévue pour la WRC 1997) pour tenir compte non seulement de la situation actuelle mais aussi du développement prévu des télécommunications en ondes millimétriques. Les tableaux 4.1 et 4.2 contiennent l'état actuel et le réaligement proposé par la Conférence Européenne des Postes et Télécommunications (CEPT). Dans ce contexte notre contribution a été la modélisation du spectre atmosphérique dans les bandes d'intérêt ainsi que l'analyse des possibilités de chaque fréquence pour le sondage des différents paramètres physiques atmosphériques, avec contributions aux rapports français (travail en collaboration avec le CNES-Toulouse et le CMS-Lannion).

#### **4.1.5 Systèmes de sondage actuels à 60 GHz. Travaux de validation**

On va décrire ici les systèmes de sondage atmosphérique à 60 GHz qui sont aujourd'hui opérationnels, ainsi que l'exploitation de certains jeux de données de ces instruments, couplée à des mesures du profil atmosphérique en coïncidence spatiale et temporelle, pour effectuer un travail de validation des modèles de transfert de rayonnement dans la bande 50-70 GHz.

##### **Historique. Premières propositions**

Les premières suggestions pour effectuer des sondages de la température atmosphérique en utilisant une raie moléculaire ont vu le jour dans les années 50. Kaplan

<i>État légal actuel du partage de la bande 50-65 GHz</i>		
Fréquence	Attrib. actuelle	prop. WRC 1997
50.2-50.4 GHz	Partagée act./passiv.	Exclusivement passiv.
50.4-51.4 GHz	Exclusivement act.	Exclusivement act.
51.4-52.6 GHz	Exclusivement passiv.	Exclusivement act.
52.6-54.25 GHz	Exclusivement passiv.	Exclusivement passiv.
54.25-55.78 GHz	Partagée act./passiv.	Exclusivement passiv.
55.78-58.2 GHz	Partagée act./passiv.	Partagée act./passiv.
58.2-59.0 GHz	Exclusivement passiv.	Partagée act./passiv.
59.0-60.3 GHz	Exclusivement act.	Exclusivement act. (à l'exception de communic. entre satellites NGSO <sup>1</sup> )
60.3-61.3 GHz	Exclusivement act.	Partagée act./passiv (sans droit à com. entre satellites NGSO)
61.3-64 GHz	Exclusivement act.	Exclusivement act. (à l'exception de communic. entre satellites NGSO)
64.0-65.0 GHz	Exclusivement passiv.	Exclusive passiv.
65.0-66.0 GHz	Partagée act./passiv.	Partagée act./passiv.
66.0-71.0 GHz	Exclusivement act.	Exclusive act.

TAB. 4.1 - On peut voir que dans la situation actuelle, les services d'observation de l'atmosphère (passifs) n'ont l'exclusivité que d'un intervalle très petit dans la zone centrale de la bande 50-70 GHz. C'est dans cette zone qu'on peut placer des canaux d'observation des couches les plus hautes dans l'atmosphère. C'est à cause de cela que les représentants des services d'observation passive de l'atmosphère veulent une amélioration de cette situation dans la WRC de 1997 pour défendre leurs intérêts.

---

Orbites non-géostationnaires

État légal du partage de la bande de 112-126 GHz		
Fréquence	Attrib. actuelle	Prop. WRC 1997
112.0-116.0 GHz	Exclusivement passiv.	Exclusivement passiv.
116.0-119.98 GHz	Partagée act./passiv.	Exclusivement passiv.
119.98-120.02 GHz	Partagée act./passiv.	à négocier
120.02-126.0 GHz	Partagée act./passiv.	Partagé act./passiv.
État légal actuel du partage de la bande de fréquences 168-200 GHz		
Fréquence	Attrib. actuelle	Prop. WRC 1997
168.0-174.5 GHz	Exclusivement act.	À discuter
174.5-176.5 GHz	Partagée act./passiv	“
176.5-182.0 GHz	Exclusivement act.	“
182.0-185.0 GHz	Exclusivement passiv.	“
185.0-200.0 GHz	Exclusivement act.	“

TAB. 4.2 - D'autres bandes intéressantes pour les services passifs météorologiques (autour de la résonance millimétrique d'O<sub>2</sub> à 118.75 GHz et celle de H<sub>2</sub>O à 183.31 GHz). Jusqu'à présent, aucune décision sur leur attribution définitive n'a jamais été prise.

[42] a proposé en 1959 les raies fortes de CO<sub>2</sub> autour de 15  $\mu$ m. Peu après, plusieurs chercheurs ont souligné la possibilité d'observer aux longueurs d'onde millimétriques dans la forte bande d'O<sub>2</sub> près de 5 mm (60 GHz). Presque au même moment, Gautier et Robert ([32]) tenaient compte de l'effet Zeeman produit par le champ magnétique de la Terre sur les raies dans cette bande et ont signalé l'importance de cet effet à certaines fréquences près des résonances.

### Systèmes opérationnels: MSU et SSM/T1

Les premiers satellites emportant des systèmes de détection dans le domaine des fréquences millimétriques furent ceux des séries TIROS-N de la NOAA ("*National Oceanographic and Aerospace Administration*", USA) à partir de 1978. Ces satellites ont un poids total de 1421 kg avec 194 kg d'expériences scientifiques. L'objectif est de mesurer le flux atmosphérique dans des régions spectrales depuis le visible jusqu'aux ondes millimétriques. Pour une information complète sur l'ensemble des

instruments on peut consulter *Werbowetzki* (1981) [98] et *Schnapf* (1985) [82]. Dans le contexte de ce travail, nous nous intéressons au système de sondage en température jusqu'à  $\sim 35$  km d'altitude, appelé MSU et qui est composé de quatre canaux radiométriques simple bande dont les fréquences sont: 50.2-50.4 GHz (canal 1), 53.86-54.06 GHz (2), 54.86-55.06 GHz (3) et 57.85-58.05 GHz (4). Cet instrument balaie perpendiculairement à la direction du satellite en 11 pas entre  $\pm 47.35^\circ$  par rapport au nadir avec une résolution angulaire à mi-hauteur de  $7.5^\circ$  ce qui correspond à 110 km au sol pour une observation au nadir depuis la position du satellite. Les fonctions de poids de ces canaux sont présentées figure 4.3.

Les mesures MSU sont très utiles pour tester les modèles de transfert de rayonnement dans l'atmosphère, pour la mise au point d'une nouvelle génération de systèmes avec un plus grand nombre de canaux et des améliorations de sensibilité.

Pour le travail de validation des modèles de transfert de rayonnement on dispose des données MSU des années 1990 à 1995 en coïncidence spatiale et temporelle avec des radiosondages du profil atmosphérique. Cette base de données, appelée EVA, est fournie par le Centre de Météorologie Spatiale de Lannion et a une couverture géographique limitée à  $40^\circ\text{W}$ - $40^\circ\text{E}$  et  $33^\circ\text{N}$ - $66^\circ\text{N}$  (21 stations). Les profils atmosphériques des radiosondages dans EVA donnent la température et la densité de la vapeur d'eau pour les 40 niveaux standard de pression TOVS (définis, par exemple, dans *Werbowetzki*, 1981 [98]) de pression entre 0.05 mb et 1013.0 mb. Normalement, les radiosondages n'arrivent pas au niveau 0.05 mb, et sont extrapolés vers le haut en partant de modèles atmosphériques globaux 4D (latitude, longitude, altitude et temps) ce qui peut poser des problèmes pour certains types d'études. Les données du satellite MSU sont fournies sous forme de températures de brillance pour chaque canal, corrigées des effets de la surface et de l'angle d'observation C'est pour cela que, dans notre analyse, nous ne prendrons pas en compte les canaux très sensibles à la surface (canal 1 de MSU). En sélectionnant les situations atmosphériques de ciel clair, nous avons mené des calculs de transfert de rayonnement direct aux fréquences des canaux 2, 3 et 4 de MSU pour les comparer aux mesures (corrigées) du satellite.

Un système du même type, depuis plusieurs années en activité, est **SSM/T1** ("*Special Sensor Microwave/Temperature Sounder*"). Il possède sept canaux simple bande dont les fréquences sont 50.3-50.7 GHz (polarisation linéaire horizontale, canal 1), 53.0-53.4 GHz (horizontale, 2), 54.15-54.55 GHz (horizontale, 3), 54.7-55.1 GHz (horizontale, 4), 58.3425-58.4575 GHz (verticale, 5), 58.625-59.025 GHz (verticale, 6) et 59.275-59.525 GHz (verticale, 7). Les fonctions de poids, calculées également par

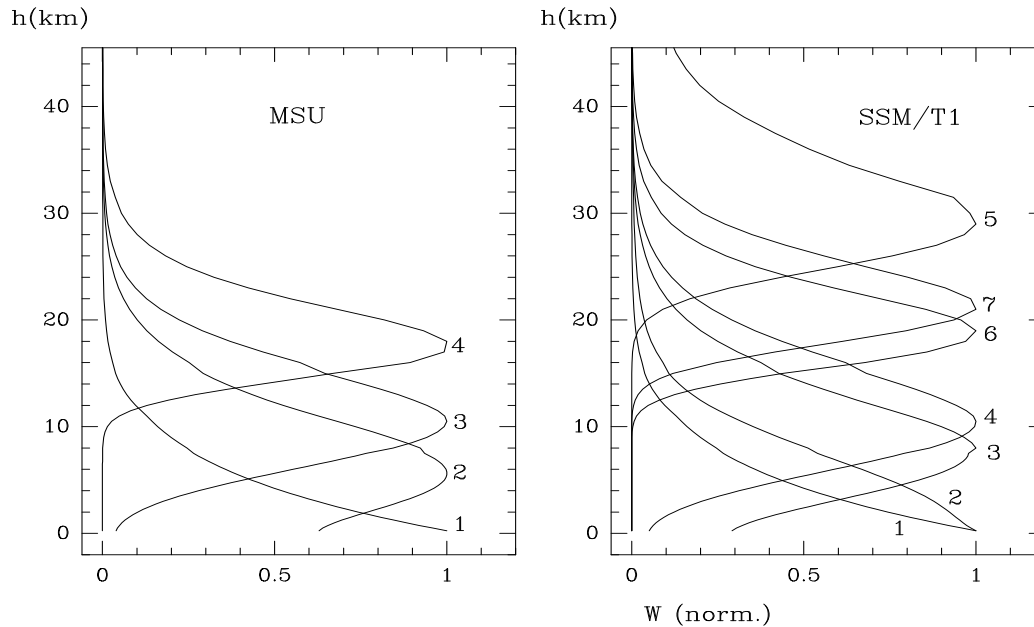


FIG. 4.3 - Gauche: Fonctions de poids des 4 canaux MSU pour l'atmosphère U.S. Std. Atm. (1976) et le modèle Liebe (1993). Les canaux 1 et 2 détectent également le rayonnement émis et réfléchi par la surface terrestre. Cela exige de prendre en compte l'émissivité de la surface dans le calcul de la fonction de poids. On a pris alors un modèle scalaire d'émissivité de surface (on ne tient pas compte des effets possibles de polarisation) avec  $e_S=0.5$ . Droite: Idem pour les sept canaux de SSM/T1.

ATM, apparaissent sur la figure 4.3. Ce système a été développé par *AEROJET* et se trouve à bord des satellites DMSP ("*Defense Meteorological Satellite Program*", USA). Le système de balayage est aussi perpendiculaire au mouvement du satellite et la résolution angulaire à mi-hauteur correspond à 175 km au sol pour une visée vers le nadir.

Le système SSM/T1 est plus complet que MSU pour l'étude du profil de température. Nous avons plusieurs jeux de données SSM/T1 fournis par la NOAA qui, comme les données MSU présentées plus haut, sont complétées par des profils atmosphériques obtenus de radiosondages en coïncidence spatiale et temporelle. Les mesures de SSM/T1 ont été aussi comparées aux résultats du transfert radiatif, en utilisant les profils mesurés par les radiosondages. Comme pour la base de données EVA, on a l'inconvénient que les profils atmosphériques fournis par les radiosondages n'arrivent qu'à un niveau de pression de 10 mb (ce qui, pour une atmosphère standard, se situe à environ 30 km). Parfois, les données s'arrêtent plus bas (entre 100 et 10 mb). Selon le domaine vertical de sensibilité du canal, le profil mesuré sera utilisable ou non pour notre comparaison. Dans le jeu de données SSM/T1 il n'y a

pas d'extrapolations pour compléter le profil du radiosondage aux 40 niveaux TOVS jusqu'à 0.1 mb. Dans ce but on a incorporé à ATM une procédure d'extrapolation due à *Kartcher* (1990) [43]. Ainsi, si on dispose d'informations jusqu'à 10 mb le programme peut extrapoler jusqu'à 0.1 mb en tenant compte des coordonnées géographiques et de la saison (modèles 4D). Ce type d'extrapolation ne donne pas des résultats tout à fait satisfaisants car on obtient une dispersion assez grande dans les simulations pour le canal 4 de SSM/T1 (celui dont la fonction de poids indique une sensibilité au domaine d'altitude où les ballons effectuant les radiosondages n'arrivent presque jamais et, où donc, on génère P et T avec l'algorithme d'extrapolation). Pour notre analyse nous avons donc refusé tous les profils mesurés n'arrivant pas au niveau 50 mb et nous avons aussi limité les comparaisons aux mesures satellitaires et radiosondages distants de moins de 50 km et effectués à moins de 3 heures de différence, ce qui limite beaucoup l'impact des extrapolations des profils sur les résultats. Les modèles d'absorption de l'oxygène atmosphérique comparés ont été MPM-93,89,93 [53], [51], [50], tous les trois inclus dans ATM; et FASCOD3, *Clough et al.*, (1989) [20].

Les détails concernant cette étude sont exposés dans un article, *Comparison of direct radiative transfer models in the 60 GHz O<sub>2</sub> band with SSM/T-1 and MSU observations* par *Pardo et al.*, (1995) [67] présenté à la Conférence TOVS de 1995 en Nouvelle Zélande (consulter aussi comme référence complémentaire *Fleming et al.*, 1991 [28]).

La principale conclusion de ce travail est que les modèles surestiment les observations pour les deux satellites. Certaines différences sont indépendantes des paramètres atmosphériques ou observationnels (température, humidité, angle, latitude...) et peuvent être attribuées à la calibration des instruments. Pour les fréquences analysées ici, les trois modèles MPM ont un comportement similaire par rapport aux mesures. Dans les cas de SSM/T1, le modèle FASCOD3 présente un biais plus grand que les autres pour les canaux troposphériques, mais donne un accord légèrement meilleur pour les deux canaux les plus hauts. On trouve une dépendance en latitude de la différence modèle/mesure pour les canaux 3 et 4 de SSM/T1 qui est plus forte pour FASCOD3 que pour les modèles MPM. Dans une phase future du travail, nous sommes intéressés à faire des comparaisons directes avec les données brutes en terme de température d'antenne afin d'éliminer les effets systématiques qui peuvent être introduits par les algorithmes de correction des données satellitaires.

D'après ce travail, et pour le traitement des données des futurs instruments que

nous allons décrire dans la section suivante, nous avons suggéré l'utilisation d'un modèle d'absorption du type MPM pour mener le transfert de rayonnement direct dans la bande de  $O_2$  car ces modèles sont beaucoup plus faciles à utiliser et montrent de meilleures performances que FASCOD3 dans le domaine de fréquences qui nous intéresse. On a installé une version adaptée d'ATM au Centre de Météorologie Spatiale de Lannion (France). Dans cette étude, les trois versions testées de MPM présentent des résultats similaires dans la région de fréquences concernée, mais les résultats sont assez différents à d'autres fréquences, spécialement dans les fenêtres atmosphériques (*English et al.*, 1995 [25]). Les biais réels entre simulations et observations peuvent être corrigés facilement dans le processus d'inversion des données satellitaires.

#### 4.1.6 Systèmes futurs à 60 GHz: AMSU-A, SSM/IS, MTZA.

La NOAA, après son expérience MSU sur les satellites Tiros-N, a préparé un nouveau projet appelé AMSU-A (Advanced Microwave Sounding Unit A, voir référence [1]) pour l'étude de la température atmosphérique. Ce système n'est pas encore opérationnel mais il doit remplacer MSU sur la nouvelle série de satellites de la NOAA dès 1997. Il est possible que ce système soit aussi à bord des satellites européens METOP à partir de l'an 2000. Les fréquences des canaux de AMSU-A sont dans le tableau 4.4. Les fonctions de poids qui correspondent aux canaux 3 à 14 (1, 2 et 15 sont placés dans des "fenêtres" atmosphériques et sont orientés vers l'étude des propriétés de la surface) sont présentées sur la figure 4.4. Nous voyons que ce choix de fréquences donne une bonne répartition verticale des fonctions de poids.

Dans le but d'étendre la capacité du système à des altitudes plus élevées, six canaux additionnels ont été proposés pour une version future de cet instrument. Il s'agirait de canaux double bande: bande inférieure centrée aux environs de la résonance 7+ de l'oxygène à 60.43478 GHz et bande supérieure autour de la 9+ à 61.15056 GHz. Pour ces canaux, il est nécessaire de prendre en compte le champ magnétique terrestre, car les fréquences sont placées à une distance inférieure à 5 MHz de la résonance. La figure 4.4 montre les calculs des fonctions de poids (matrices) associées à ces canaux en supposant qu'on travaille en polarisation circulaire (une polarisation linéaire n'aurait pas de sens car la symétrie des valeurs de l'opacité par rapport à  $\nu_c$  dans cette polarisation rendrait redondants certains



<b>SSM/T1 (début 1994)</b>									
Ca.	Ty. d'at.	<b>MPM85</b>		<b>MPM89</b>		<b>MPM93</b>		<b>FASCOD3</b>	
		$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$	$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$	$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$	$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$
3	tropic.	1.36	0.37	1.69	0.37	1.37	0.36	3.56	0.56
	interm.	1.49	0.53	1.72	0.54	1.56	0.54	2.89	0.65
	polaire	0.97	0.76	1.16	0.80	1.13	0.68	2.21	1.08
4	tropic.	2.04	0.42	2.18	0.42	1.94	0.42	3.79	0.43
	interm.	1.31	0.62	1.41	0.62	1.31	0.63	2.14	0.71
	polaire	1.19	0.72	1.27	0.73	1.22	0.71	1.96	0.89
5	tropic.	0.41	1.45	0.41	1.45	0.62	1.46	-0.13	1.49
	interm.	1.92	2.51	1.92	2.51	2.08	2.51	1.47	2.44
	polaire	1.87	4.01	1.87	4.01	2.03	3.98	1.51	3.97
6	tropic.	1.76	0.45	1.81	0.45	1.99	0.44	1.67	0.48
	interm.	0.81	0.98	0.82	0.98	0.84	0.99	0.98	1.02
	polaire	0.66	0.69	0.66	0.69	0.65	0.70	0.90	0.63
7	tropic.	1.50	0.70	1.28	0.70	1.60	0.71	0.80	0.70
	interm.	1.07	0.98	1.03	0.98	1.10	0.98	1.08	1.02
	polaire	0.98	0.83	0.97	0.82	1.00	0.84	1.08	0.73
<b>MSU (EVA-92 et MPM93)</b>									
Canal		$\Delta T (K)$				Dev. Std. (K)			
2		1.16				0.70			
3		2.42				0.52			
4		2.12				0.90			

TAB. 4.3 - Haut: Différences (simulations-mesures SSM/T1) pour 120 collocations plus proches que 50 km et que 3 heures correspondant aux trois premiers mois de 1994. 30 collocations correspondent à des atmosphères de type tropical, 59 à des latitudes intermédiaires et 31 à des atmosphères polaires. Bas: Résultats d'une analyse similaire réalisée sur des données MSU et radiosondages en coïncidence sur la zone européenne pendant l'année 1992 (EVA-1992). Dans ce cas on n'a comparé qu'avec les résultats de MPM93.

canaux d'après ce qu'on voit figure 4.6). Enfin, nous devons signaler que dans les spécifications techniques de AMSU-A on prévoit une importante amélioration de la résolution géographique par rapport aux systèmes actuels. Celle-ci sera de 49 km sur la surface terrestre pour une observation vers le nadir, ce qui correspond à une largeur du diagramme d'antenne de 3.3 degrés à mi-hauteur pour une orbite située à 850 km de la surface terrestre. Il est prévu qu'un balayage complet prenne 6.5 s pour un total de 30 pixels, soit un temps d'intégration par pixel de  $t = \frac{6.5}{30} = 216$  ms. En prenant l'équation 4.4, mais à  $1 \sigma$ , une température de système ( $T_{Sys}$ ) de 2300 K et une largeur de bande typique de 250 MHz donnent une sensibilité  $\Delta T = 0.3$  K en moyenne.

D'autre part AEROJET, la société qui a mis au point SSM/T1 pour le DMSP (Armée Américaine), envisage un projet plus complet appelé **SSM/IS** ("*Special Sensor Microwave Imager Sounder*") avec 13 canaux dédiés à l'étude de la température sur un total de 24 [12]. Ce système doit voler sur les satellites de la série 5D-3. Dans le tableau 4.4 on trouve les fréquences centrales des canaux température de SSM/IS et leur polarisation. Les canaux 1 à 7 et le 24 sont utilisés pour étudier la basse atmosphère (jusqu'à  $\sim 30$  km), tandis que les canaux 19 à 23, très proches d'une résonance de l'oxygène, doivent être utilisés pour étudier des couches plus hautes (entre 10 mb et 0.03 mb, c'est-à-dire, jusqu'à  $\sim 70$  km). Dans ces derniers canaux, l'inversion des données doit prendre en compte l'effet Zeeman sur les raies de l'oxygène. Ces canaux haute atmosphère sont prévus pour travailler en polarisation linéaire. On peut voir qu'à une déviation de  $\sim 1$  MHz par rapport à la fréquence de résonance, la fonction de poids en polarisation linéaire est dégradée car elle présente deux pics. Il reste alors une zone à couvrir et pour cela on voit que la seule solution est de placer un canal double bande sur les fréquences centrales des résonances 15+ et 17+ (canal 19, voir la figure 4.5 et la référence *Rosenkranz et Staelin*, 1988 [79]).

Enfin, il y a un autre projet appelé MTZA qui devrait être embarqué sur les satellites météorologiques russes METEOR-3M. Celui-ci aurait 10 canaux et un balayage spatial de type conique. Nous ne disposons pas à présent d'autres détails sur cet instrument.

#### 4.1.7 Exploration de la température au-delà de $\sim 50$ km.

Nous avons vu dans le paragraphe 4.1.4 que les deux systèmes en développement pour le futur (SSM/IS et AMSU-A) ont prévu des canaux à des fréquences très

AMSU-A			
Canal	$\nu_c(GHz)$	$\Delta\nu(MHz)$	Sensib. $\delta T(K)$
3	50.3	$\pm 90$	0.4
4	52.8	$\pm 200$	0.25
5	53.596 $\pm$ 0.115	$\pm 85$	0.25
6	54.4	$\pm 200$	0.25
7	54.94	$\pm 200$	0.25
8	55.5	$\pm 165$	0.25
9	57.290344	$\pm 165$	0.25
10	57.290344 $\pm$ 0.217	$\pm 39$	0.4
11	57.290344 $\pm$ 0.3222 $\pm$ 0.048	$\pm 18$	0.4
12	57.290344 $\pm$ 0.3222 $\pm$ 0.022	$\pm 8$	0.6
13	57.290344 $\pm$ 0.3222 $\pm$ 0.010	$\pm 4$	0.8
14	57.290344 $\pm$ 0.3222 $\pm$ 0.0045	$\pm 1.5$	1.2
16	60.79267 $\pm$ 0.3539	$\pm 1.5$	1.5
17	60.79267 $\pm$ 0.3558	$\pm 0.4$	2.8
18	60.79267 $\pm$ 0.3569	$\pm 0.25$	3.5
19	60.79267 $\pm$ 0.3579	$\pm 0.5$	2.5
20	60.79267 $\pm$ 0.3589	$\pm 0.25$	3.5
21	60.79267 $\pm$ 0.3600	$\pm 0.4$	2.8
SSM/IS			
Canal	$\nu_c(GHz)$	polariz.	Sensib. $\delta T(K)$
1	50.300	H	0.4
2	52.800	H	0.4
3	53.956	H	0.4
4	54.400	H	0.4
5	55.500	H	0.4
6	57.290	H	0.4
7	59.400	H	0.5
19	63.2832 $\pm$ 0.2853	H+V	1.9
20	60.7927 $\pm$ 0.3579	H+V	1.9
21	60.7927 $\pm$ 0.3579 $\pm$ 0.002	H+V	1.4
22	60.7927 $\pm$ 0.3579 $\pm$ 0.0055	H+V	1.0
23	60.7927 $\pm$ 0.3579 $\pm$ 0.016	H+V	0.6
24	60.7927 $\pm$ 0.3579 $\pm$ 0.050	H+V	0.7/0.35

TAB. 4.4 - Caractéristiques des canaux O<sub>2</sub> des futurs systèmes AMSU-A et SSM/IS. Il faut noter qu'une grande partie des canaux sont placés dans une zone de fréquences partagée avec les services actifs (voir tableau 4.1). Il faut donc analyser les risques de contamination. Les six derniers canaux de AMSU-A ne feront pas, dans une première phase, partie de l'équipement opérationnel sur les satellites TIROS.

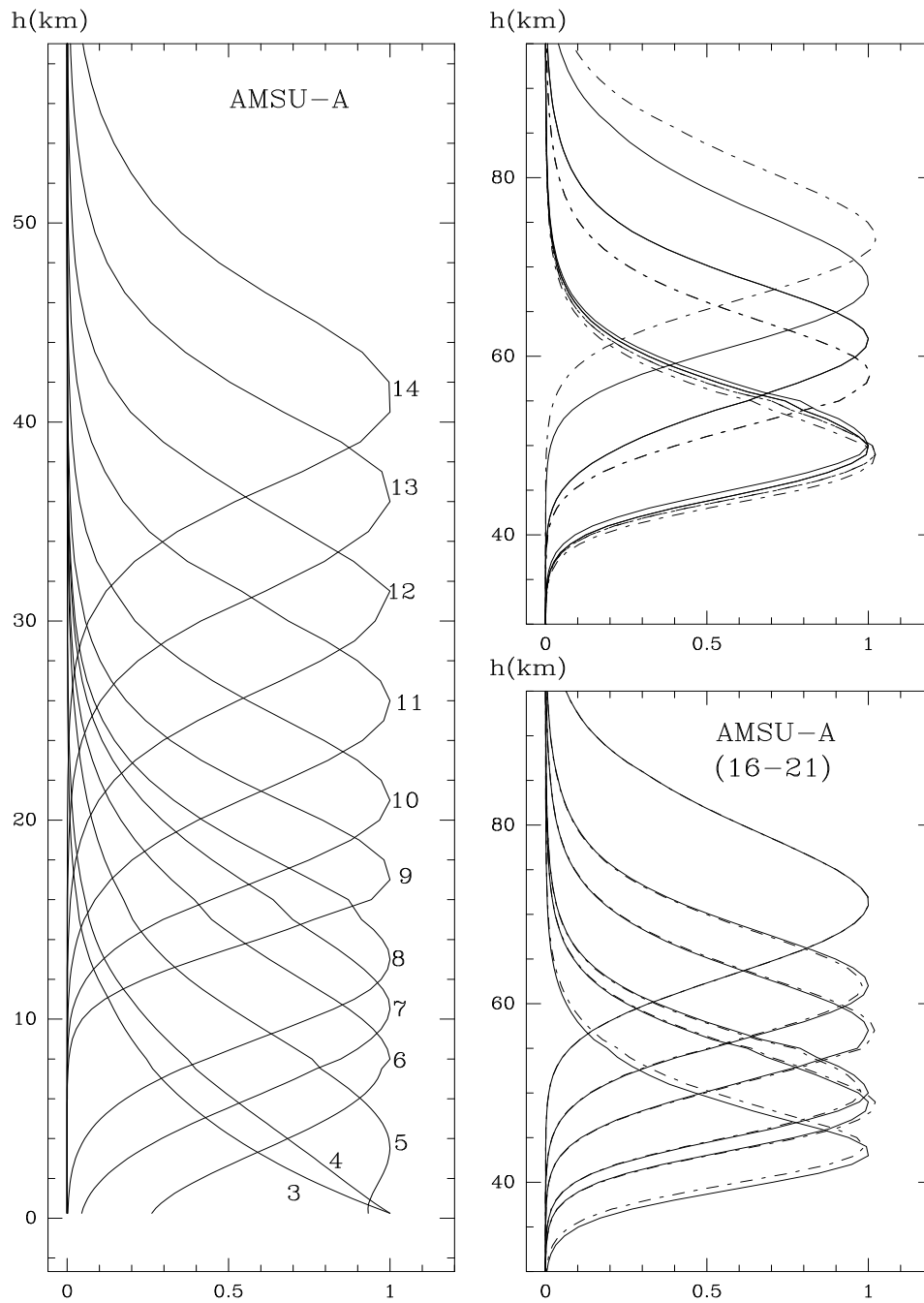


FIG. 4.4 - Gauche: Fonctions de poids normalisées des canaux 3 à 14 d'AMSU-A calculées par ATM. Droite: Fonctions de poids pour les fréquences centrales dans la bande supérieure des canaux 16 à 21 d'AMSU-A pour les polarisations linéaires (en haut) ou circulaires (en bas), ici calculées pour une visée au nadir sur le point [Lat.=40°N,Long=0°]. Si on suppose une polarisation circulaire des récepteurs nous obtiendrons une bonne répartition des zones de sensibilité des canaux, en évitant les problèmes de redondance qui se posent dans le cas de polarisation linéaire.

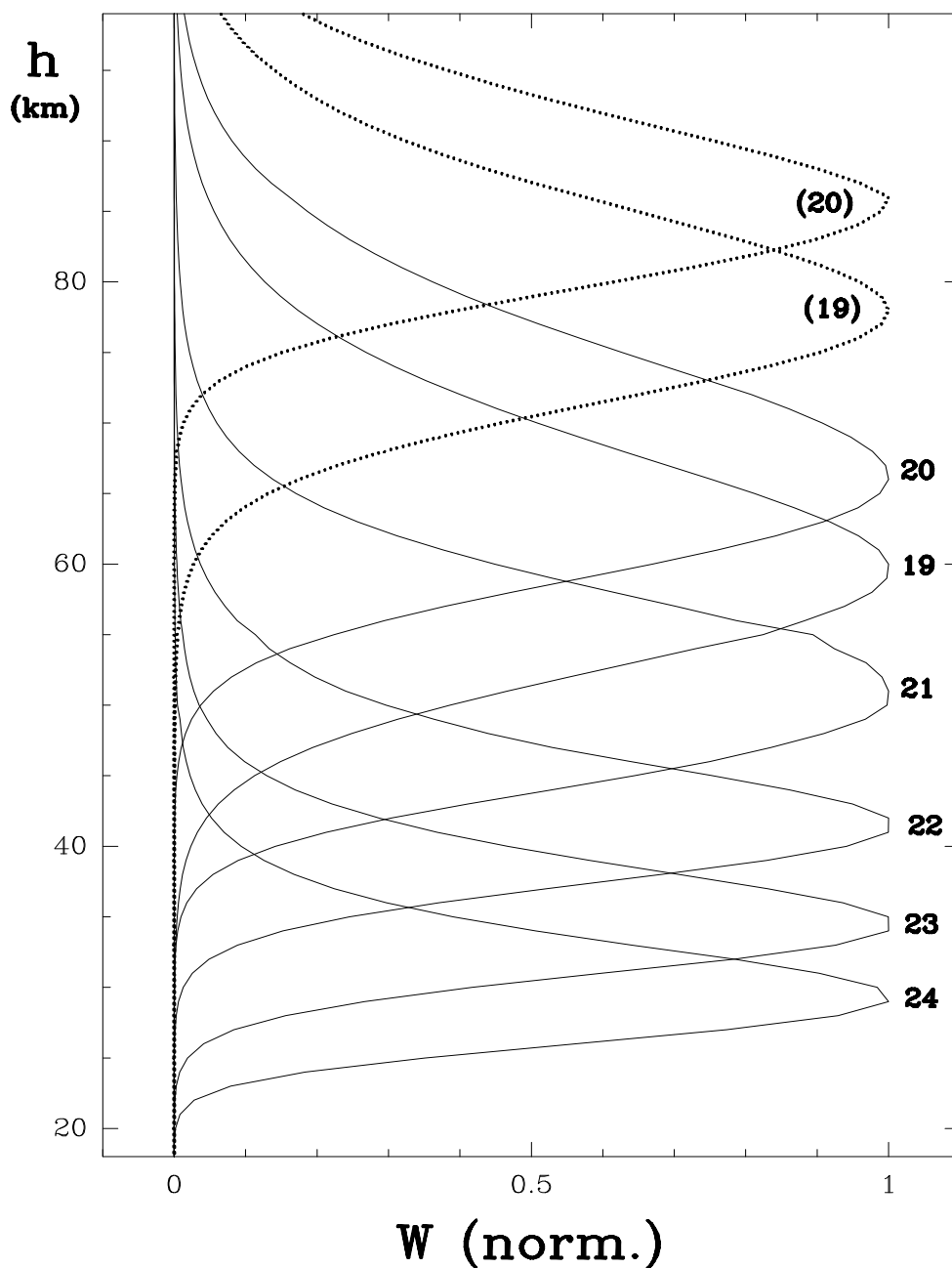


FIG. 4.5 - Fonctions de poids des fréquences centrales dans la bande supérieure des canaux 19 à 24 de SSM/IS (traits continus). Ce système travaille en polarisation linéaire. Ici nous voyons les éléments de la matrice de fonction de poids associés à une polarisation linéaire pour visée au nadir sur le point [Lat.=40°N,Long=0°]. Comme comparaison, on a mis sur la même figure en traits discontinus les mêmes calculs pour les canaux 19 et 20 mais en négligeant le champ magnétique terrestre. Le domaine d'altitudes des fonctions poids change dans ce cas (pointillé).

proches des résonances de l'oxygène placées à 60.434776 GHz dans le but de prolonger l'étude des profils de température au-delà de 50 km. Nous allons discuter ici le problème du traitement des observations de ces canaux à l'aide de la théorie incluant l'effet Zeeman présentée dans la section 3.1.

La figure 4.6 montre la température de brillance calculée d'après notre modèle aux environs de la raie 9+ de l'oxygène moléculaire ( $\nu_c=61.15056$  GHz) avec et sans le champ géomagnétique pour une observation satellitaire dirigée vers la surface terrestre. Cette figure met en évidence que les données fournies par les canaux de "haute atmosphère" (très proches des résonances) sont affectées par le champ magnétique. On a seulement représenté les éléments de la diagonale principale de la matrice  $T_B$ , qui correspondent aux températures de brillance prédites en polarisation linéaire H ( $T_{B11}$ ) ou V ( $T_{B22}$ ). On a représenté aussi les éléments diagonaux de  $T_B$  mais dans la base des polarisations circulaires (droite et gauche). Les éléments non diagonaux, sont au moins un ordre de grandeur plus faibles. Nous avons aussi fait des calculs de la matrice de fonctions de poids en température (définie dans l'équation 3.17) pour les canaux 16 à 21 d'AMSU-A. La position centrale de la bande supérieure de ces canaux est montrée sur la figure 4.6. Si on considère que le récepteur pour ces canaux est sensible à une polarisation linéaire on peut très facilement se rendre compte que les canaux 17 et 21 ainsi que les 18 et 20 sont redondants, c'est-à-dire que leurs fonctions de poids sont centrées presque à la même altitude et ont une largeur à mi-hauteur à peu près équivalente (de l'ordre de  $\sim 20$  km typiquement). Par contre si on considère que les canaux 16 à 21 d'AMSU-A travaillent en polarisation circulaire il n'y a plus de redondance et, en plus, leurs fonctions de poids sont très régulièrement disposées en altitude. Ceci est plus clair sur la figure 4.4. D'une façon générale l'effet Zeeman a comme effet de faire descendre l'altitude d'exploration que l'on peut atteindre avec les dispositifs décrits ici. Dans la figure 4.7 nous pouvons voir une comparaison entre la fonction de poids dans le centre de la raie 7+ de l'oxygène avec et sans l'effet du champ géomagnétique. À cette fréquence, on passe d'une fonction de poids arrivant à 85 km à une matrice de fonctions de poids dont les éléments  $W_{\nu 11}(z)$  et  $W_{\nu 22}(z)$  sont centrés à  $\sim 65$  km au maximum (dans la base LH, LV). L'effet Zeeman fait descendre l'altitude de sondage que l'on peut atteindre dans le centre de la résonance car l'opacité à cette fréquence n'est pas aussi élevée que dans le cas sans champ magnétique (figures 4.6 et 4.7).

L'effet Zeeman fait aussi se déplacer le maximum d'opacité totale à une fréquence légèrement à côté de la résonance rotationnelle pour des polarisations circulaires (là

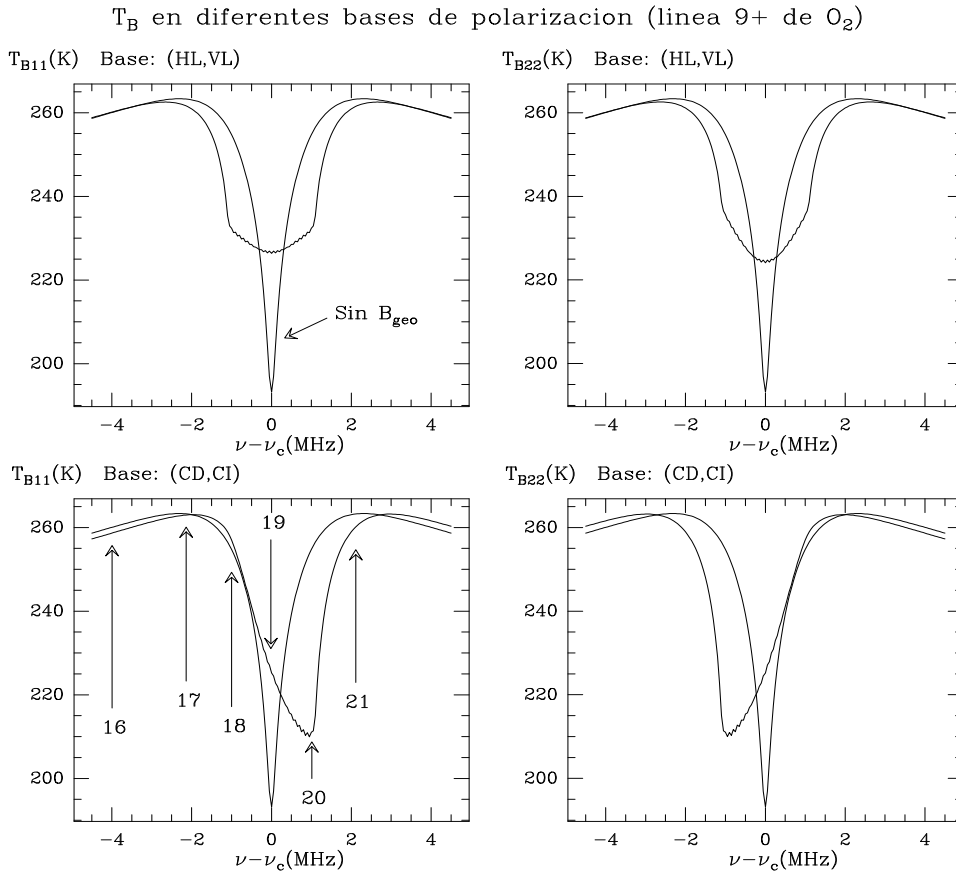


FIG. 4.6 - Température de brillance autour de la résonance rotationnelle 9+ de l’oxygène moléculaire ( $\nu_c=61.15056$  GHz) avec et sans champ géomagnétique d’après ATM pour une visée satellitaire vers le nadir. La bande supérieure des canaux 16 à 21 d’AMSU-A est située dans cette région. Nous avons indiqué la position des fréquences centrales de ces bandes pour mieux voir les différences qui peuvent exister dans le cas sans champ magnétique. L’absorption centrale est due à la décroissance de la température en passant dans la mésosphère, sur le le chemin montant vers le satellite.

où les composantes  $\sigma$  sont les plus intenses, la valeur exacte dépendant de l’intensité du champ magnétique).

#### 4.1.8 Etude et sélection des fréquences pour un projet “Push-Broom” à 57 GHz du CNES

Un des travaux menés dans le cadre de cette thèse a été l’évaluation scientifique d’un projet du Centre National d’Etudes Spatiales: un système de sondage de température par des observations satellitaires dans la bande de spin-rotation de l’oxygène, dont le but est d’obtenir des données pour alimenter les modèles de

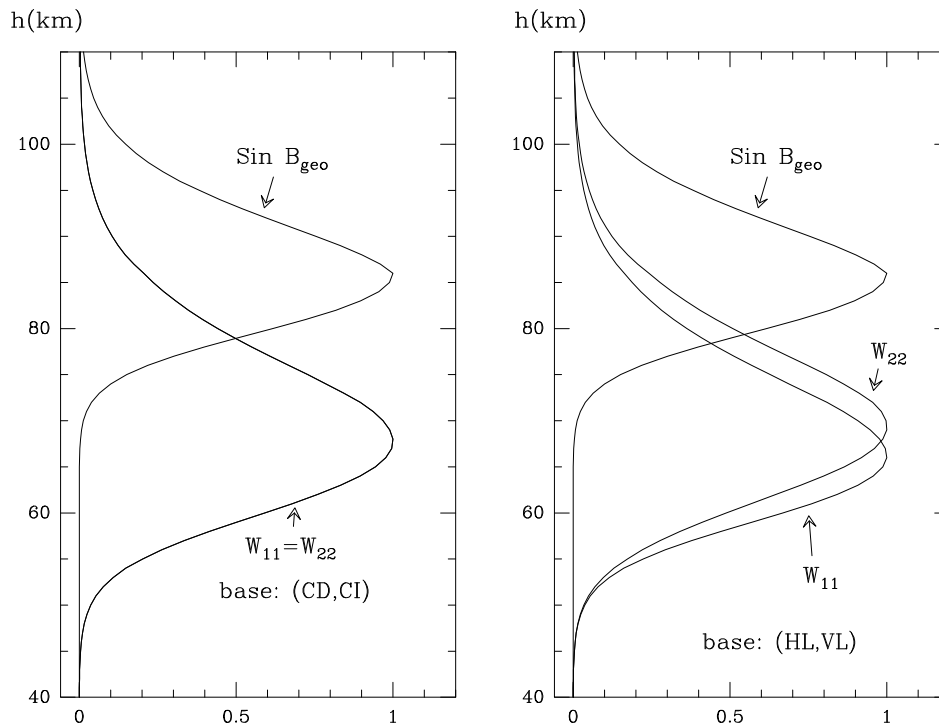


FIG. 4.7 - Comparaison entre la fonction de poids dans le centre de la raie 7+ de l'oxygène avec et sans l'effet du champ géomagnétique. La base de polarisations est LH, LV

prévision météorologique. Les résultats de cette étude ont fait l'objet de trois rapports techniques au CNES: 961/93/CNES/1012/00-I, 961/93/CNES/1012/00-F et 961/CNES/94/1271/00.

Les deux aspects analysés pour cet instrument ont été la géométrie d'observation et le choix des canaux de sondage. L'idée était de définir un instrument ayant des capacités au moins équivalentes à celles du radiomètre AMSU-A, déjà décrit. Dans cette étude, la priorité est donnée aux solutions optimales d'un point de vue technique.

### Géométrie de visée vers le sol

Les radiomètres profilers actuellement en service (MSU à bord des TIROS-NOAA, SSM/T1 et SSM/T2 à bord des DMSP, ce dernier sera examiné dans la section 4.2) ou qui vont l'être très bientôt (AMSU-A et AMSU-B) sont à balayage mécanique, rectiligne, perpendiculairement à la trace sous satellite. Résumons ici les caractéristiques de balayage du radiomètre AMSU-A qui est à la base de cette réflexion. Pour toutes les fréquences, la largeur de faisceau à 3dB est de 3.3°, et



l'efficacité des faisceaux est supérieure à 95%. Les traces au sol des trente pixels échantillonnés sont contigues à 3dB. Le balayage va de + à - 50°, de part et d'autre de la trace sous satellite, pour assurer une fauchée totale de 2343km au sol, pour une altitude d'orbite nominale de 870km. La polarisation reçue quoique toujours linéaire, est une combinaison variable et connue des polarisations H et V, fonction de l'angle de balayage.

Par contre, les imageurs micro-ondes de type SSM/I (aussi à bord des satellites DMSP, voir *Holliger*, 1987 [38]) sont à balayage conique, avec un angle de visée constant au sol (de l'ordre de 50°) qui produit des traces au sol égales. A cet angle de visée proche de 50°, la sensibilité au vent à la surface de la mer est maximale (si on dispose de mesures dans deux polarisations orthogonales du signal, dans une fenêtre atmosphérique) et la vitesse du vent de surface peut être restituée à partir de ces observations. A titre d'exemple, avec un angle de balayage constant au sol de 53°, SSM/I échantillonne 64 pixels par balayage à 19, 22, 37GHz (128 pixels à 85GHz), avec un petit recouvrement des pixels à 3dB, ce recouvrement étant fonction de la position des pixels dans le balayage. La couverture au sol est de 1400km, pour une orbite à 833km d'altitude. L'efficacité de faisceau est comprise entre 91% et 96% et le taux de polarisation croisée est inférieur à 2%. Le balayage envisagé sur SSM/IS est de type conique, avec un angle de visée constant au sol de 53.1° et une fauchée de 1707 km.

Le concept "push-broom", envisagé par le CNES conserve les avantages du balayage conique avec un angle de sondage constant par rapport au nadir et ajoute une couverture simultanée de tous les pixels. Ceci se fait en remplaçant le balayage mécanique par un système de réception de plusieurs cornets en parallèle de façon à ce que chacun reçoive le rayonnement en provenance d'une trace au sol différente. Cela fait que, par rapport aux balayages présentés auparavant, le temps d'intégration sur chaque ligne de visée est multiplié par le nombre total de cornets. La sensibilité radiométrique ( $\Delta T$ ) est divisée par la racine carrée de ce nombre (voir équation 4.4). Ce système est utilisé couramment aux longueurs d'onde du visible pour des applications satellitaires. Son application au domaine des ondes millimétriques a un précédent dans un système à 34 GHz réalisé pour MATRA en collaboration avec l'Observatoire de Paris-Meudon (voir *Tabart*, 1991 [84]). Ce système a été utilisé pour effectuer des observations de la surface terrestre au moyen d'un système aéroporté. Dans un système de détection de ce type, l'antenne n'est pas un paraboloïde mais un tore parabolique engendré par la rotation d'un arc de parabole autour d'un axe

qui n'est pas le sien. Le lieu géométrique des foyers est un arc de circonférence perpendiculaire à l'axe de rotation ayant son centre sur cet axe. C'est sur cet arc de circonférence qu'on doit placer les cornets de façon à recevoir le rayonnement dans les différentes lignes de visée désirées. Le diagramme de rayonnement de chaque cornet doit avoir une ouverture en accord avec le champ total à couvrir et le nombre de cornets utilisés.

On peut évaluer ce que l'utilisation d'un système "Push-Broom" peut améliorer pour un instrument comme AMSU-A. Ce système fait un balayage complet en 6.5 s (temps d'intégration par pixel =  $\frac{6.5}{30} = 216$  ms). Les nouvelles technologies de préamplificateurs de faible bruit doivent permettre d'obtenir des valeurs de la température de système ( $T_S$ ) aux environs de 550 K. Si on considère une largeur de bande de 20 MHz, la sensibilité obtenue pour 6.5 s de temps d'intégration est  $\Delta T = 0.05$  K. On pourrait profiter de ces avantages pour améliorer la résolution géographique jusqu'à environ 10 km (traces au sol) avec un temps d'intégration réduit à 1.5 s. De cette façon on serait à un niveau de sensibilité de  $\sim 0.1$  K.

Un système comme celui que nous venons de décrire a comme inconvénient principal la complexité du système de réception comparé aux systèmes classiques de balayage.

#### *Impact de l'angle de visée sur les fonctions de poids de l'instrument*

Dans le cas de l'utilisation d'un balayage de type perpendiculaire, on a pensé tout d'abord à analyser l'impact de l'angle de visée sur les fonctions de poids des canaux de sondage. Supposons un canal de sondage insensible à la surface (fréquence typique entre 57 et 63 GHz). La solution générale de l'équation de transfert radiatif pour une observation satellitaire (2.13) permet d'exprimer la fonction de poids pour l'observation au nadir comme ceci:

$$W_0(\nu, z) = e^{-\tau_\nu(z, \infty)} \kappa_\nu(z) \quad (4.5)$$

où  $\theta$  est l'angle par rapport au nadir,  $\tau_\nu$  est l'opacité,  $\kappa_\nu$  le coefficient d'absorption et  $z$  la coordonnée verticale. Pour l'observation selon un angle  $\theta$  par rapport au nadir on a comme fonction de poids:

$$W_\theta(\nu, z) = W_0(\nu, z) \sec\theta e^{-\tau_\nu(z, \infty)(\sec\theta - 1)} \quad (4.6)$$

L'effet de l'angle de visée sur la fonction de poids par rapport à  $W_0(\nu, z)$ , est

donné par le terme  $\sec(\theta)e^{-\tau_\nu(z,\infty)(\sec\theta-1)}$ . Cette fonction est croissante avec l'altitude. Au sol elle prend la valeur  $\sec\theta e^{-\tau_\nu(0,\infty)(\sec\theta-1)}$  et au sommet de l'atmosphère elle est égale à  $\sec\theta$  puisque l'opacité vaut 0. Multiplier la fonction de poids au nadir par cette fonction croissante avec l'altitude conduit à faire monter la position du maximum, avec très peu d'influence sur la largeur totale de la fonction de poids. Des calculs ont été effectués aux fréquences AMSU-A, avec les angles de visée suivants: 0, 20, 40, 60 degrés. L'atmosphère U.S Standard 1976 est utilisée, ainsi que le modèle d'absorption de *Liebe et al* (1993) [53]. Pour 50° d'angle de visée, les changements de hauteur du pic de la fonction de poids sont de l'ordre de 2.5- 3km, pour des largeurs à mi-hauteur typiques de 12-15km. Ceci n'aurait pas d'influence significative sur les objectifs scientifiques à atteindre, d'autant plus que, si l'on s'impose ce type de visée, on pourrait très légèrement modifier la fréquence centrale des canaux de sondage, pour compenser ce phénomène.

#### *Influence de l'angle de visée sur la sensibilité aux paramètres de la surface*

Lorsque l'on cherche, à partir de mesures radiométriques, à déterminer le profil de température dans l'atmosphère, la contribution de la surface est à considérer comme un bruit dont il faut s'affranchir. Cette contribution est d'autant plus gênante lorsqu'on sonde des régions de la basse troposphère. Mais si la contribution atmosphérique se modifie de façon relativement simple en fonction de l'angle de visée  $\theta$  (loi en  $\sec(\theta)$  globalement), il n'en est pas de même de la contribution de la surface, dont le comportement en fonction de l'angle de visée dépend de différents facteurs, pour lesquelles le vent à la surface de la mer joue un rôle essentiel. Dans ce contexte, il peut donc être intéressant de n'avoir à traiter qu'un même angle de visée, pour éviter d'introduire dans la restitution du profil en température une erreur dépendante de l'angle.

Pour le projet push-broom, les fonctions de poids des canaux de sondage sont toutes assez hautes et peu (ou pas) contaminées par l'émission de la surface. L'influence de l'angle de visée sur la sensibilité aux paramètres de la surface n'est donc pas déterminante. On choisira de préférence une réception en polarisation linéaire, pour des raisons de commodité technique. Pour une polarisation V, autour de 53° d'incidence, l'émissivité de la mer est forte mais quasiment indépendante du vent. L'émissivité en H est plus faible (la mer apparaît comme un fond froid, ce qui facilite le traitement des données atmosphériques) mais montre une forte dépendance en vent. Sur terre, quelque soit la polarisation, l'émissivité des sols est plutôt très élevée.

On recommande donc, quelque soit le type de balayage (conique ou rectiligne) de recevoir une polarisation linéaire du signal, H, V ou une combinaison des deux.

#### *Influence du type de visée sur les taches au sol*

Dans le cas du balayage conique, la déformation des pixels, d'un pixel à l'autre, est bien moindre que dans le balayage perpendiculaire. Par contre, sauf configuration particulière de l'antenne, les pixels sont tous elliptiques dans le cas d'une visée conique. D'autre part, avec ce type de visée, la représentation des pixels sous forme d'image a plus de sens et est souvent bien utile pour une approche immédiate de certains phénomènes atmosphériques. Dans le cas d'angles de visée non constants, non seulement les pixels en bord de balayage sont très déformés, mais en plus, les informations des différents pixels ne sont pas immédiatement comparables, puisque obtenues à différents angles de visée.

#### *Lobes secondaires*

Pour un radiomètre micro-onde à bord d'un satellite, quelques soient les conditions de surface et d'atmosphère, la terre apparaît comme un corps chaud par rapport au fond du ciel (2.7K). Avec un angle de visée de l'ordre de  $50^\circ$  au sol, la contribution de lobes secondaires potentiels visant vers le fond du ciel peut être gênante. Cette contamination des lobes secondaires par la température du fond du ciel est bien moins importante lorsque la visée se fait au nadir.

En résumé, les caractéristiques prévues pour le système sont:

- 30 pixels adjacents de largeur à mi-hauteur de  $3.3^\circ$  (3 dB), c'est-à-dire de 50km de diamètre au nadir<sup>2</sup>.
- Une efficacité de faisceau d'au moins 95%.
- Une fauchée de 2300km. Pour un sondage en température dans le but d'introduire les données dans des modèles de prédiction météorologique, l'élément décisif pour choisir entre un balayage conique ou perpendiculaire est la couverture géographique.

---

<sup>2</sup>  $3.3^\circ$  d'ouverture à 3 dB, pour un satellite à 870 km, correspond à une tache au sol (à 3 dB) de 50km de diamètre. Si on est amené à envisager une altitude de satellite un peu différente, il faudra s'efforcer d'obtenir le même diamètre de tache au sol.

- Polarisation linéaire, H, V ou combinaison des deux, mais connue avec précision (5% ou mieux).

Les inconvénients du balayage conique sont la difficulté, voir même l'impossibilité, d'atteindre une couverture au sol de 2300 km, et la possibilité de détecter dans les lobes secondaires le rayonnement du fond cosmique (2.7K). Mais ce balayage a des avantages importants, comme une certaine simplicité de la prise en compte des effets de surface à cause de l'égalité du traitement géométrique des pixels.

### Définition des canaux de sondage

Les canaux 3 à 14 d'AMSU-A ont été soigneusement sélectionnés pour permettre un sondage en température de l'atmosphère, depuis le bas de la troposphère jusqu'à environ 40 km (voir figure 4.4). L'instrument push-broom du CNES à 60GHz a pour vocation de remplacer les canaux de 9 à 14 de l'AMSU-A et doit donc présenter une capacité de sondage au moins équivalente à celle de cet instrument. De plus, il est demandé que l'instrument push-broom comprenne aussi des canaux de sondage haute altitude tels les canaux 16 à 21 prévus pour une future génération de AMSU-A.

Nous avons délibérément choisi de situer les canaux de sondage du push-broom dans la moitié inférieure de la bande d'absorption de l'oxygène, c'est-à-dire en dessous de 60 GHz, et ceci pour deux raisons principales:

1) Les risques de brouillage par des émetteurs actifs semblent plus préoccupants au dessus de 60 GHz qu'en dessous. En effet, la bande 59-64 GHz est pour le moment allouée exclusivement aux services actifs, et il semblerait que des liaisons intersatellites pourraient être établies à ces fréquences. Par rapport aux risques provenant d'émetteurs actifs au sol, dans les bandes d'absorption atmosphérique, ce type de brouillage serait de loin le plus préjudiciable.

2) Plus on monte en fréquence, plus la sensibilité à l'eau sous forme vapeur (continuum en vapeur d'eau) et sous forme de nuage (liquide et glace) est forte. Dans le cadre d'un sondage en température, il n'y a aucun avantage à augmenter la sensibilité à ces paramètres.

Le choix des canaux pour l'instrument push-broom a été guidé par le souci de limiter la largeur totale de bande de réception en entrée des récepteurs. En effet avant tout multiplexage, juste entre l'antenne et les récepteurs, le signal sera amplifié par un préamplificateur de faible bruit : plus la bande de fréquences à traiter sera étroite,

meilleures seront les performances de cet amplificateur.

#### *Pour le sondage de la troposphère et de la basse stratosphère*

Pour les canaux de sondage de la basse atmosphère (canaux de 9 à 14 pour AMSU-A) il ne nous semble pas utile de changer les fréquences de sondage, dans la mesure où elles donnent une bonne répartition des fonctions de poids en altitude. Les largeurs nominales des canaux pourront être diminuées, si cela est nécessaire pour des raisons techniques: l'incidence sur les fonctions de poids de l'instrument est mineure. Si des impossibilités techniques se présentaient, liées aux choix des fréquences de sondage, il est sans doute possible de proposer d'autres fréquences de sondages: la bande d'absorption de l'oxygène autour de 60GHz est riche de nombreuses raies qui permettent d'envisager différentes combinaisons de canaux.

#### *Pour le sondage de la haute atmosphère*

À des fréquences proches des centres des raies de l'oxygène, le calcul exact de l'absorption suppose la prise en compte de l'effet Zeeman. Les développements relatifs à ce phénomène dans le cadre du projet "push-broom" ont fait l'objet d'un rapport pour le CNES en 1994. Observer à ces fréquences est en effet indispensable pour le sondage de la haute stratosphère.

La définition des canaux de sondage haute altitude pour AMSU-A' n'est pas complète et telle que nous l'avions d'abord interprétée (c'est-à-dire en considérant une réception en polarisation linéaire, horizontale ou verticale), elle n'était pas cohérente. Les fonctions de poids obtenues ne se répartissaient pas harmonieusement en altitude et étaient redondantes (figure 4.4). Nous avons alors repris les calculs en supposant que la réception se faisait en polarisation circulaire. Avec les mêmes fréquences de sondage, les fonctions de poids sont alors bien réparties en altitude. A titre de comparaison, ont aussi été recalculées les fonctions de poids prévues pour le futur instrument SSM/IS à bord des satellites DMSP (figure 4.5). Cet instrument travaille en polarisation linéaire. Pour l'instrument push-broom, nous avons donc recherché à obtenir des fonctions de poids similaires à celles de ces deux instruments, pour le sondage de la haute atmosphère.

Dans le but de limiter la bande passante en entrée du préamplificateur, nous avons essayé de placer les fréquences de sondage en-dessous de 60GHz, proches des canaux de sondage de la basse atmosphère. Trois solutions (double-bande) ont été

retenues:

1) En polarisation linéaire (H ou V), des canaux centrés autour des raies 7- (59.164207 GHz) et 9- (58.323877 GHz) et un canal centré sur les raies 3+ (58.446590 GHz) et 11- (57.612484 GHz) au centre des raies.

2) Toujours en polarisation linéaire H ou V, des canaux centrés autour des raies 7- (59.164207 GHz) et 9- (58.323877 GHz) mais le dernier canal centré sur les raies 13- (56.968206 GHz) et 15- (56.363389 GHz) au milieu des raies. L'idée était d'abord d'obtenir une fonction de poids centrée à environ 60km, avec un canal placé à 1 MHz des centres de raies 7- et 9-. Ceci n'est pas possible car la fonction de poids obtenue est dégradée: elle présente deux pics. Donc, on a dû prendre un canal centré sur deux autres raies d'opacité totale plus faible. SSM/IS a eu le même problème pour son canal 19.

Nous montrons figure 4.8 les fonctions de poids pour ces deux premières possibilités.

3) En polarisation circulaire, tous les canaux placés autour des raies 7- (59.164207 GHz) et 9- (58.323877 GHz). Les fonctions de poids obtenues dans ce cas sont les mêmes que celles montrées figure 4.4 en bas à droite.

Par rapport à la solution 2, la solution 1 demande moins de largeur de bande en entrée du préamplificateur. Par contre, la répartition des fonctions de poids n'est pas aussi bonne et il ne nous a pas été possible de l'améliorer en utilisant ces raies (figure 4.8).

La solution 3 a le mérite d'être la plus compacte, et combinée aux canaux basse atmosphère, de tenir dans 2 GHz de bande. Par contre, la réception en polarisation circulaire peut présenter des inconvénients tant du point de vue des récepteurs que du point de vue de l'antenne, et est dans un premier temps écartée. En effet, il faut dans ce cas une polarisation circulaire droite pour la bande supérieure et une circulaire gauche pour la bande inférieure, ceci à cause de la symétrie de l'opacité par rapport au centre de la raie en polarisation circulaire. (voir figure 4.6).

Nous conseillons donc la solution 2, qui présente des fonctions de poids tout à fait satisfaisantes et semble techniquement viable. Par rapport aux canaux AMSU-A 16 à 21, nous proposons un canal de moins pour le sondage de la haute atmosphère, dans la mesure où le canal correspondant au sondage à l'altitude la plus basse possible pour 16 à 21 est redondant avec le canal correspondant au sondage à l'altitude la

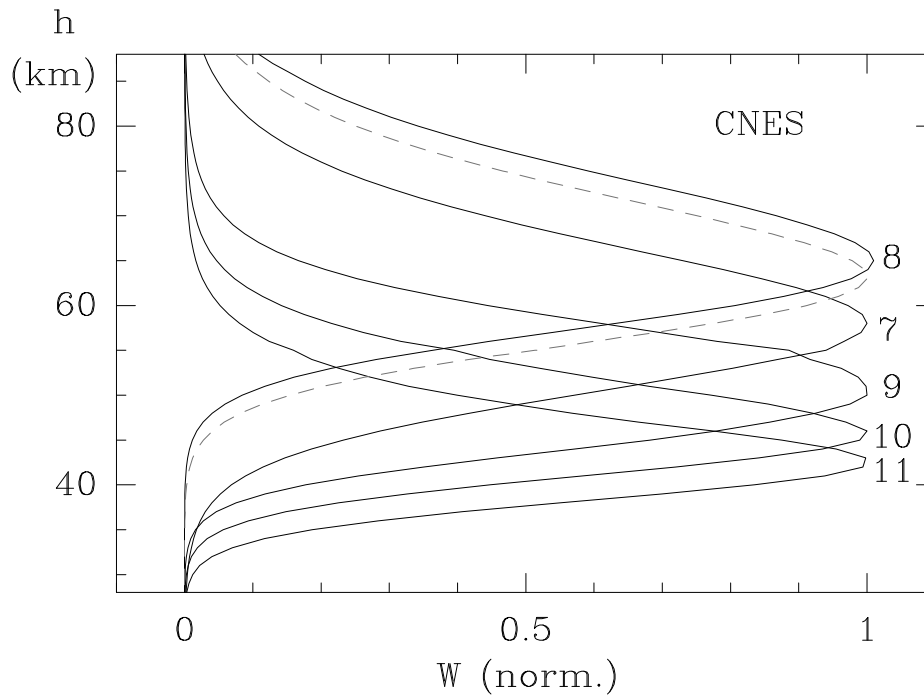


FIG. 4.8 - Fonctions de poids (normalisées) calculées pour les canaux haute atmosphère proposés au CNES pour son projet “*Push-Broom*” (canaux 7 à 11 dans le tableau 4.5, correspondants à la deuxième des trois alternatives analysées ici). On a considéré, comme dans d’autres calculs similaires dans ce chapitre, une polarisation linéaire horizontale et visée au nadir sur le point [Lat.=40°N,Long=0°]. En trait discontinu on voit la fonction de poids du canal 7 correspondant à la première alternative décrite dans le texte.

plus haute de AMSU-A.

En conclusion, pour l’instrument push broom, les caractéristiques des canaux de sondage proposés dans cette étude sont résumées dans le tableau 4.5<sup>3</sup>:

<sup>3</sup>. comme il a déjà été précisé, d’autres choix de canaux peuvent être envisagés (fréquences centrales, modifications des largeurs de bandes), si des problèmes techniques de conception de l’instrument venaient à se poser, liés à cette sélection des canaux.



Canal	Freq. (GHz)	1 <sup>ere</sup> FI (GHz)	2 <sup>eme</sup> FI (GHz)	largeur de bande (MHz)
1	57.290344	-	-	±165
2	57.290344	0.217	-	±39
3	57.290344	0.322	0.048	±18
4	57.290344	0.322	0.022	±8
5	57.290344	0.322	0.010	±4
6	57.290344	0.322	0.0045	±1.5
7	56.665797	0.30241	-	±0.4
8	58.744042	0.42020	-	±0.4
9	58.744042	0.41820	-	±0.4
10	58.744042	0.41720	-	±0.4
11	58.744042	0.41570	-	±0.4

TAB. 4.5 - Caractéristiques des canaux de sondage envisagés pour l'instrument "Push-Broom" du CNES.

## 4.2 Sondage de la vapeur d'eau troposphérique depuis des satellites

La technique d'observation satellitaire qui fait l'objet de ce chapitre s'applique également, dans le domaine millimétrique, à la mesure des profils troposphériques du rapport de mélange de la vapeur d'eau à l'aide de canaux d'observation autour de la résonance de H<sub>2</sub>O à 183.31 GHz. À bord des mêmes satellites de la DSMP où se trouve SSM/T1, il y a actuellement le système SSM/T2 avec cinq canaux. Trois d'entre eux se placent dans les ailes de résonance de la vapeur d'eau à 183.31 GHz à moins de ±8 MHz du centre. Ces trois canaux sont double bande, ont une fréquence d'oscillateur local située à exactement 183.31 GHz, avec les fréquences intermédiaires et largeurs de bande suivantes: IF=3 GHz,  $\Delta\nu=\pm 250$  MHz (canal 1); IF=1 GHz,  $\Delta\nu=\pm 125$  MHz (canal 2) et IF=7 GHz,  $\Delta\nu=\pm 375$  MHz (canal 3). Le balayage se fait de manière perpendiculaire au mouvement du satellite avec 28 pas dans l'intervalle  $\pm 40.5^\circ$ . À la fréquence de 183 GHz, la résolution au sol pour une visée au nadir est de 48 km.

Les satellites futurs DMSP et TIROS feront ce type de sondages avec des canaux ayant presque les mêmes caractéristiques (il s'agit d'une partie de SSM/IS et de

AMSU-B respectivement). Toujours dans l'idée de valider les modèles de transfert de rayonnement aux fréquences concernées, nous avons comparé des mesures de SSM/T2 à des simulations en utilisant des profils de radiosondages en coïncidence spatiale et temporelle fournis par NOAA/NESDIS de la même manière que pour SSM/T1. Dans ces données, l'information sur le rapport de mélange de la vapeur d'eau n'est disponible que jusqu'à 300 mb. D'après les calculs des fonctions de poids (définies à partir de l'équation générale 4.1, et qui donnent une idée des contributions relatives des différentes couches atmosphériques au signal détecté par chaque dépendant dans ce cas du contenu de vapeur d'eau), cette limitation n'est pas un problème pour faire des comparaisons avec les canaux 1 et 3, mais une partie du rayonnement détecté par le canal 2 ( $183.31 \pm 1$  GHz) doit sans doute provenir d'au-delà du niveau 300 mb d'après la même figure. Cette contribution est plus ou moins intense selon la quantité d'eau présente et doit avoir des effets clairs dans la comparaison. Pour minimiser cet effet on a fait une très simple extrapolation qui consiste à ajouter un profil en décroissance exponentielle au delà de 300 mb ( $A_0 e^{-z/z_0}$ ) dont les paramètres  $A_0$  et  $z_0$  se calculent à partir des deux derniers niveaux où existe de l'information sur la vapeur d'eau. D'autre part, la contribution de la surface dans les canaux 1 et 3 augmente quand les atmosphères sont sèches. Dans notre analyse il faut considérer une émissivité de surface de 0.67 pour les océans et de 0.95 pour les terres (selon l'«étiquette» correspondante, disponible avec les données). Nous avons limité notre analyse à des conditions de ciel clair.

Les données utilisées dans la comparaison qu'on présente ici correspondent à l'année 1995 et à une couverture géographique globale comme les données SSM/T1 présentées plus haut. Jusqu'à présent, on a comparé les mesures SSM/T2 aux simulations en utilisant le modèle d'absorption MPM-93 et les profils atmosphériques des radiosondages en coïncidence spatiale et temporelle de la même manière que dans la section précédente.

Les principales conclusions que l'on peut tirer de ces calculs sont les suivantes:

a) En général la dispersion dans les résultats est beaucoup plus importante qu'à 60 GHz. D'abord on peut penser que c'est à cause de la variation spatiale et temporelle de la distribution verticale de vapeur d'eau, mais celle des champs de température (qui affecte aux résultats à 60 GHz) peut être aussi importante. Il faut donc trouver d'autres raisons. Il semble plus raisonnable que ce fait est lié à l'incertitude sur les radiosondages en vapeur d'eau qui est plus forte qu'en température. De plus, les fréquences aux environs de 183 GHz sont plus sensibles à

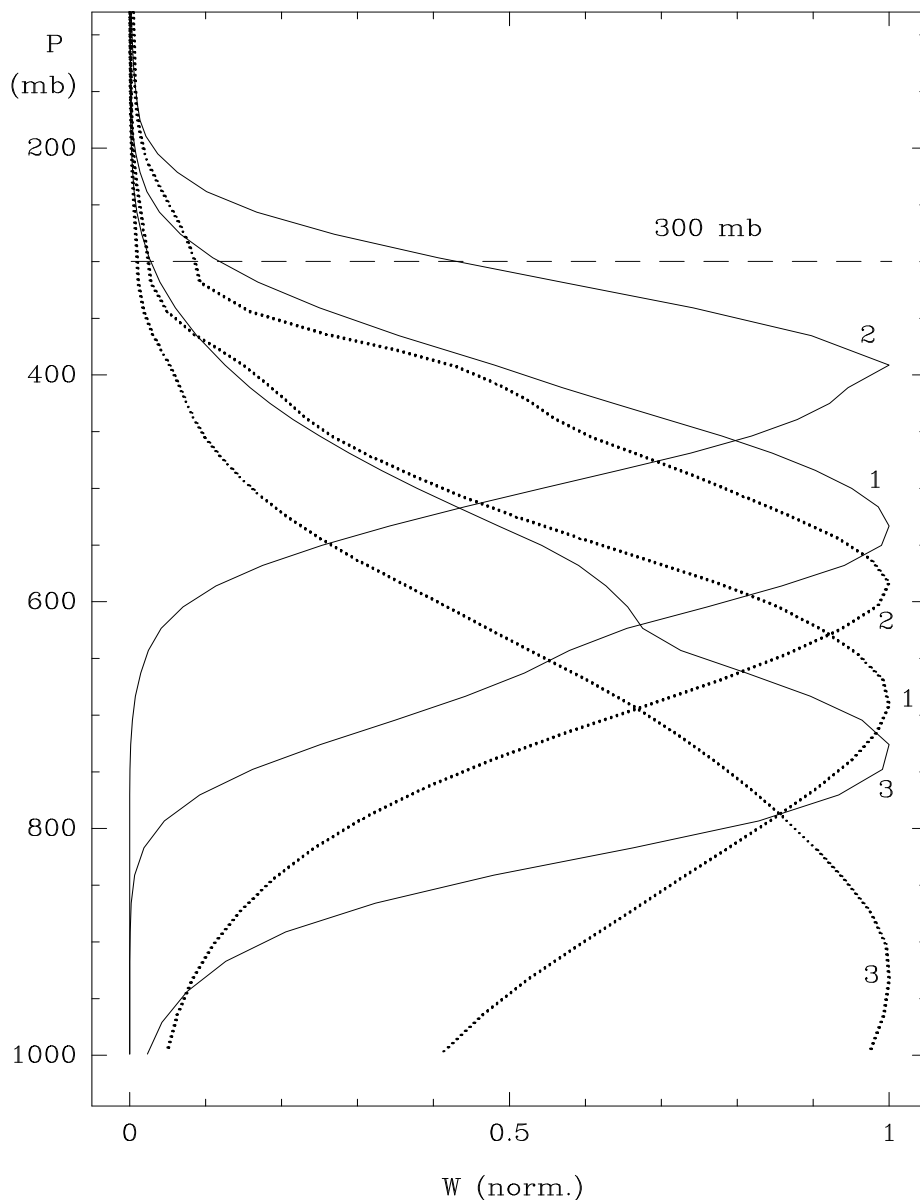


FIG. 4.9 - Fonctions de poids (en température) pour les trois canaux de SSM/T2 autour de 183.31 GHz correspondant à une atmosphère tropicale (trait continu) et subpolaire hiver (trait discontinu).

la contamination par des nuages fins qui n'auraient pas été et signalés dans le jeu de données. qui est beaucoup plus forte que dans le cas de l'oxygène. À cause de cela, les résultats (en général) ne présentent pas un coefficient de corrélation proche de 1 comme dans les comparaisons à 60 GHz (ce qui permettait dans ce cas, d'estimer une valeur assez précise du biais entre les mesures et les simulations).

b) Dans le canal 3 (le plus éloigné de la résonance) le coefficient de corrélation entre mesures et simulations est très bon (supérieur à 0.99), tandis que pour les

deux autres il est seulement de 0.79 (canal 2) et 0.81 (canal 1). Sur ce même canal 3 il résulte qu'en éliminant les points qui correspondent à la tranche de latitudes  $30^\circ$ - $60^\circ$  la corrélation est bien plus mauvaise. Pour les atmosphères dans la tranche de latitude  $60^\circ$ - $90^\circ$ , cela peut être au moins en partie attribué au fait que ces atmosphères sont sèches et que la contribution de la surface (mal connue) à  $\pm 7$  GHz de la résonance est beaucoup plus importante que pour des latitudes tropicales où tempérées (mais pour les atmosphères tropicales cet explication n'est pas valable ce qui laisse penser que le modèle d'absorption lui-même présente des défauts).

c) Pour le canal 2 on constate la plus importante dispersion. D'après les calculs théoriques et les caractéristiques techniques, ce canal doit mesurer des températures de brillance situées dans un intervalle moins large que les deux autres canaux (voir figure 4.10, en bas). Il est donc prévisible que sur ce plus petit domaine de températures les erreurs aléatoires dues aux mesures (SSM/T2 mais aussi celles des radiosondages qui servent à faire les simulations) introduisent une dispersion plus grande, surtout compte tenu que les erreurs aléatoires sur les mesures des canaux, à égalité de temps d'intégration, sont plus grands pour le canal 2 que pour les autres à cause de sa plus petite largeur de bande (rappelons que ces erreurs suivent une dépendance du type  $B^{-\frac{1}{2}}$ , où B est la largeur de bande). De plus, ce canal est le seul où le manque d'information sur la distribution de la vapeur d'eau au dessus de 300 mb intervient. La dispersion pour le canal 1 est pire que celle pour le canal 3 mais un peu meilleure que pour le canal 2, ce qui est en accord avec l'interprétation qu'on vient de donner.

Dans le but de compléter cette étude, on se propose de participer à l'analyse des mesures d'un radiomètre à deux canaux (presque équivalents à SSM/T2 1 et 2) installé sur le radiotélescope JCMT à Mauna Kea (Hawaii). Les premiers contacts ont été noués en Octobre 1996.

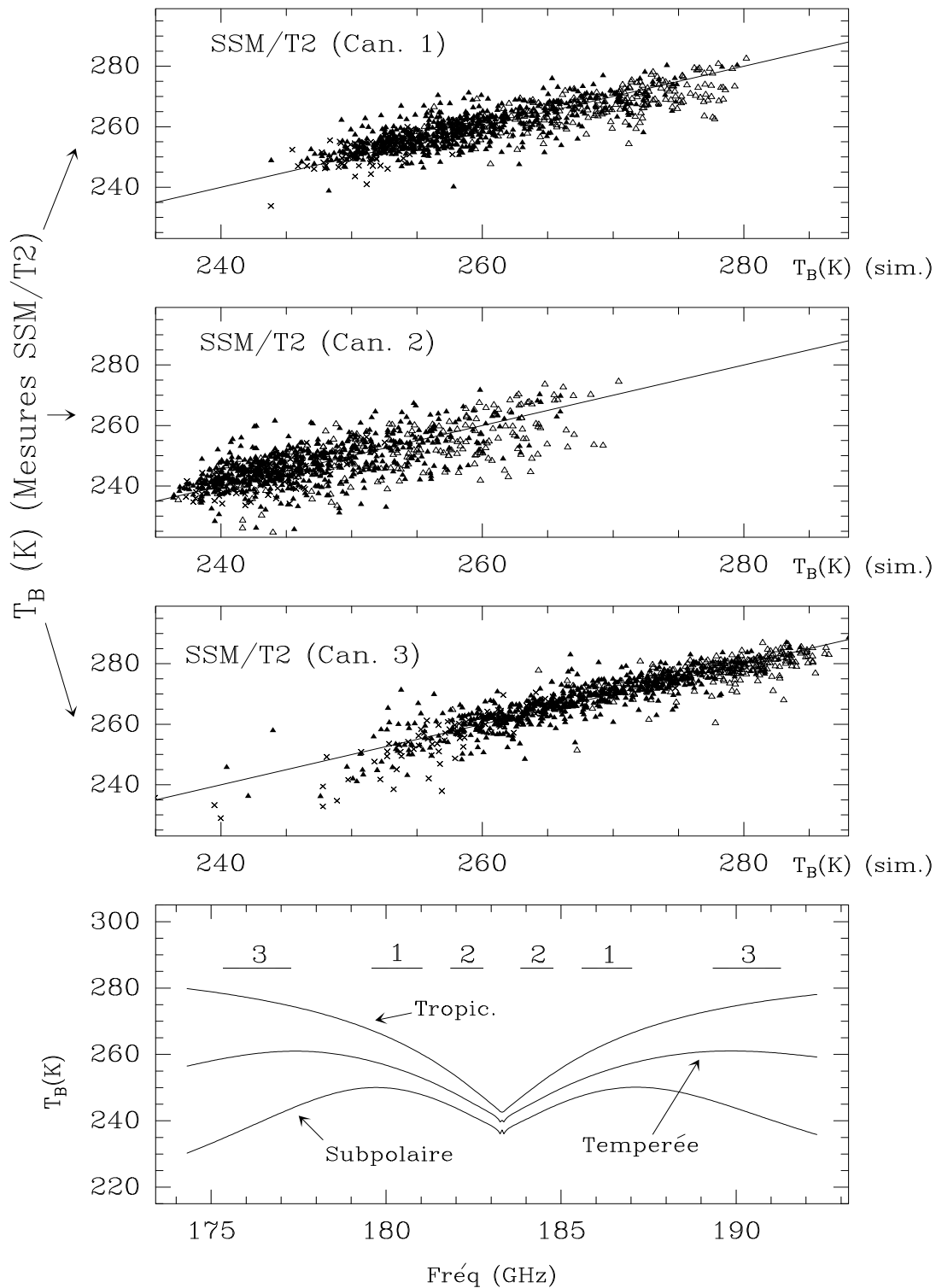


FIG. 4.10 - Comparaison entre les mesures des canaux 1 à 3 de SSM/T2 et le transfert radiatif à ces fréquences en utilisant les profils atmosphériques obtenus de radiosondages en coïncidence spatiale et temporelle. Le modèle d'absorption utilisé est MPM-93.



# Chapitre 5

## Techniques d'observation pour éviter l'absorption troposphérique. Sondage au limbe

### 5.1 Introduction

Quand on veut étudier la distribution verticale de différents gaz minoritaires au moyen de radiomètres placés à la surface terrestre nous rencontrons deux problèmes : dans la plupart des cas, l'émission est extrêmement faible à cause de cette géométrie d'observation et du faible rapport de mélange des gaz minoritaires, de plus, le signal qui arrive au détecteur depuis la stratosphère ou la mésosphère est affecté par une importante absorption troposphérique due à  $O_2$  et  $H_2O$ . Pour éviter ces problèmes et améliorer considérablement la qualité des observations il faut emporter les systèmes d'observation hors de la troposphère. Certaines expériences de coût modéré, utilisent un ballon stratosphérique qui transporte les systèmes d'observation hors de la troposphère. Ce principe est utilisé également avec des objectifs astrophysiques, par exemple l'observation de raies de  $H_2O$  et  $O_2$  dans des nuages moléculaires de notre Galaxie. Un satellite est système plus coûteux, mais il a de nombreux avantages, parmi lesquels la possibilité de travailler dans une géométrie d'observation bien plus intéressante : le sondage au limbe.

L'observation au limbe atmosphérique permet d'éliminer un des problèmes fondamentaux des observations satellitaires vers la surface terrestre. En effet, le rayonnement de fond pour une observation au limbe est le fond cosmique qui pose moins de

problèmes qu'une éventuelle contribution de la surface terrestre, toujours difficile à estimer. De plus, si on compare la longueur du chemin parcouru par le rayonnement dans différentes couches (de mêmes altitude et épaisseur) on constate la prépondérance de la couche du point de tangence. Ce rôle dominant de la couche du point de tangence dans le rayonnement observé permet d'obtenir, dans ce mode de sondage, une grande résolution verticale juste autour du point de tangence, qui peut être estimée à l'aide du calcul des fonctions de poids (ou de sondage) adaptées à ce type d'observations.

## 5.2 Sondages avec des instruments transportés à la stratosphère

La vapeur d'eau atmosphérique se trouve principalement dans la troposphère. Son abondance est extrêmement faible au-delà de 12-15 km comme on l'a constaté dans la section 3.2. Par contre, à cause du grand moment dipolaire de la vapeur d'eau, l'intensité de ses raies rotationnelles est si importante dans les domaines millimétrique et submillimétrique tellement que les observations à vocation astrophysique dans ces raies sont impossibles depuis le sol; il en est de même pour les raies de l'oxygène moléculaire. Ainsi cette dernière molécule n'a pas été détectée dans les nuages moléculaires Galactiques. La raie de la vapeur d'eau à 183.31 GHz a été vue très récemment par *Cernicharo* (voir section 3.2) dans des enveloppes d'étoiles évoluées (raies maser) et des régions de formation d'étoiles. D'autres raies maser de H<sub>2</sub>O ont été vues dans le submillimétrique, par exemple à 437, 439 et 471 GHz (*Melnick et al.*, 1993 [56]), et à plus hautes fréquences comme 658 GHz (*Menten et Young*, 1995 [57]).

Ces derniers temps, toute une série de moyens d'observation est soit en voie de développement, soit même déjà opérationnels; ces systèmes doivent emporter des instruments à 35-40 km d'altitude à l'aide d'un ballon stratosphérique. Par exemple, PRONAOS et PIROG sont deux expériences dans le submillimétrique avec des antennes de 2 et 0.6 m de diamètre respectivement. Ces systèmes sont destinés à mener des observations pendant des vols de courte durée (quelques heures). L'observation de la raie astrophysique est possible si elle est placée suffisamment loin dans les ailes de la raie atmosphérique (déplacement de la fréquence centrale de la source à cause de son mouvement par rapport à la Terre) pour que l'opacité soit



raisonnablement faible. Pour le domaine de vitesses radiales des sources Galactiques (typiquement  $\pm 60$  km/s d'écart maximum) ceci est possible dans un bon nombre de cas pour une altitude d'observation entre 35 et 40 km car la pression qui gouverne l'élargissement collisionnel de la raie atmosphérique est seulement de l'ordre de 4 mb (voir figure 5.3). Par exemple, dans les conditions des calculs qu'on présente dans cette figure, l'atmosphère présente à la fréquence centrale de la raie atmosphérique de la vapeur d'eau à 380.197 GHz une transmission de 19 %. Pour une source de vitesse +60 km/s, la fréquence centrale de la même raie est 76 MHz inférieure où la transmission atmosphérique est supérieure à 99 %. Dans les mêmes hypothèses mais pour la raie fondamentale de la vapeur d'eau à 556.936 GHz résulte que la transmission atmosphérique à la fréquence centrale est zéro et elle est de 74 % à 556.825 GHz, qui correspondrait à une source avec une vitesse radiale de +60 km/s.

### 5.2.1 Adaptation de l'algorithme d'inversion à l'analyse d'observations astrophysiques.

Dans le but de calculer l'absorption atmosphérique affectant les observations astrophysiques de raies de l'oxygène ou de la vapeur d'eau dans les ailes d'une raie atmosphérique, nous avons introduit dans le programme d'analyse de spectres CLASS (IRAM Grenoble) une section permettant de soustraire à l'observation une ligne de base "atmosphérique". L'opacité atmosphérique à chaque fréquence est estimée, puis corrigée sur le résidu qui reste après soustraction. Pour ces calculs on utilise une atmosphère standard qui dépend de la latitude et de la saison, et l'on ajuste la pression et la température (s'il s'agit de l'oxygène) ou le rapport de mélange de la vapeur d'eau (s'il s'agit d'une raie de H<sub>2</sub>O) dans une couche épaisse de 3 à 5 km située juste au dessus du point d'observation (il se situe nominalemt à 37 km pour PRONAOS), avec le même principe que le code général d'inversion décrit dans la section 2.4. Ceci a été développé pour être utilisé dans l'analyse des données de l'expérience SMH (raies submillimétriques de O<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O) sur PRONAOS, mais cet outil peut être utilisé pour d'autres instruments. La description de l'utilisation de ces commandes dans le contexte du logiciel CLASS se trouve dans l'annexe C.

La figure 5.2 présente un spectre synthétique atmosphérique qui correspond à la raie de <sup>16</sup>O<sub>2</sub> centrée à 424.76321 GHz, analysé directement dans CLASS.

L'expérience PIROG a déjà produit quelques données de la raie rotationnelle

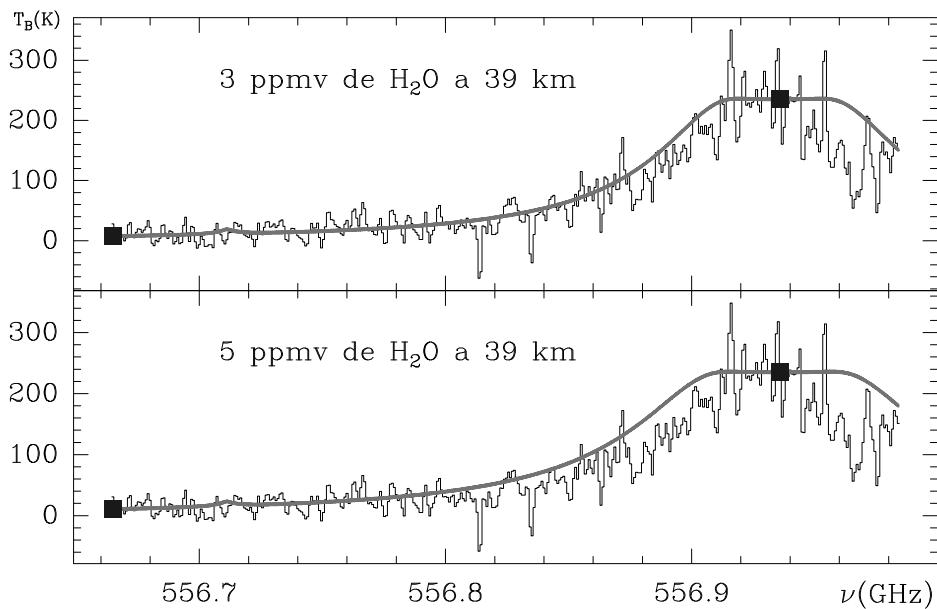


FIG. 5.1 - Observation (non étalonnée) de la raie atmosphérique de ortho- $\text{H}_2\text{O}$  à 556.936 (transition rotationnelle fondamentale) obtenue avec l'instrument PIROG et comparaison avec des simulations d'ATM. Pour cette comparaison on a redéfini l'échelle verticale du spectre de façon à faire coïncider la simulation et l'observation en deux points, signalés par les carrés noirs.

fondamentale de *ortho*- $\text{H}_2\text{O}$  (557 GHz) dans l'atmosphère. Ces observations ont été effectuées lors d'un vol expérimental et ne sont pas étalonnées. On connaît seulement les conditions d'observation suivantes:

Élévation:  $38.26^\circ$  (masse d'air=1.6192)

Spectromètre:  $400 \times 0.8$  MHz

Altitude du ballon: 39 km

Fréquence centrale du canal 400: 556984.0 MHz (raie fondamentale de  $\text{H}_2\text{O}$  à 556936 MHz = canal 339).

Couplage au ciel = 0.8?

$$\left(1 + \frac{G_L}{G_S}\right) \simeq 1$$

Nous avons comparé les données brutes à des simulations d'ATM dans le but de chercher un accord qualitatif sur la forme de la raie. Pour ces simulations on a adopté un coefficient d'absorption tiré de *Liebe et al* (1993) [53] et l'atmosphère U.S. Std Atm. 76, qui a 3.3 mb, 247.5 K et 5 ppmv de  $\text{H}_2\text{O}$  à 39 km. Pour la comparaison nous avons redéfini l'échelle verticale du spectre de façon à faire

coïncider ceci avec la simulation en deux points: le premier canal, dont la fréquence centrale est 556664.8 MHz, et le canal 339 (centré à 556936.0 MHz). Une deuxième simulation avec les mêmes paramètres d'entrée mais en diminuant de 40% la quantité de vapeur d'eau, pour obtenir 3 ppmv à 39 km, a été aussi effectuée. Les résultats de ces deux comparaisons sont montrés figure 5.1. Dans la grande incertitude liée à ces données, on trouve une compatibilité avec les rapports de mélange de la vapeur d'eau à ces altitudes trouvées dans l'analyse des données présentées dans la section 3.2.

### 5.3 Sondages au limbe atmosphérique

Les avantages principaux de ce type d'observations par rapport à d'autres techniques déjà vues dans ce travail sont la grande résolution verticale et le gain important en sensibilité. Ces deux effets sont des conséquences de la géométrie d'observation. Sur la figure 5.4 on peut voir comment les raies des composants mineurs apparaissent bien contrastées avec cette technique. La résolution verticale que l'on peut atteindre est de l'ordre de quelques kilomètres. On peut trouver des discussions détaillées sur ce point dans la référence *Waters* (1993) [95].

Quand il s'agit d'analyser des mesures spectroscopiques pour en déduire la distribution verticale d'un gaz on se rend compte que l'émission au limbe dépend d'une façon beaucoup plus importante de la quantité de gaz que de la température à proximité du point de tangence. Il n'est donc pas nécessaire de mesurer simultanément la température d'une façon précise. De plus, les données spectroscopiques contiennent elles-mêmes l'information sur la pression (d'après la largeur de la raie) si le point de tangence est placé en dessous de  $\sim 60$  km.

Les mesures au limbe sont dépourvues des effets des nuages ou des aérosols stratosphériques dès que l'on dépasse des altitudes de  $\sim 25$  km.

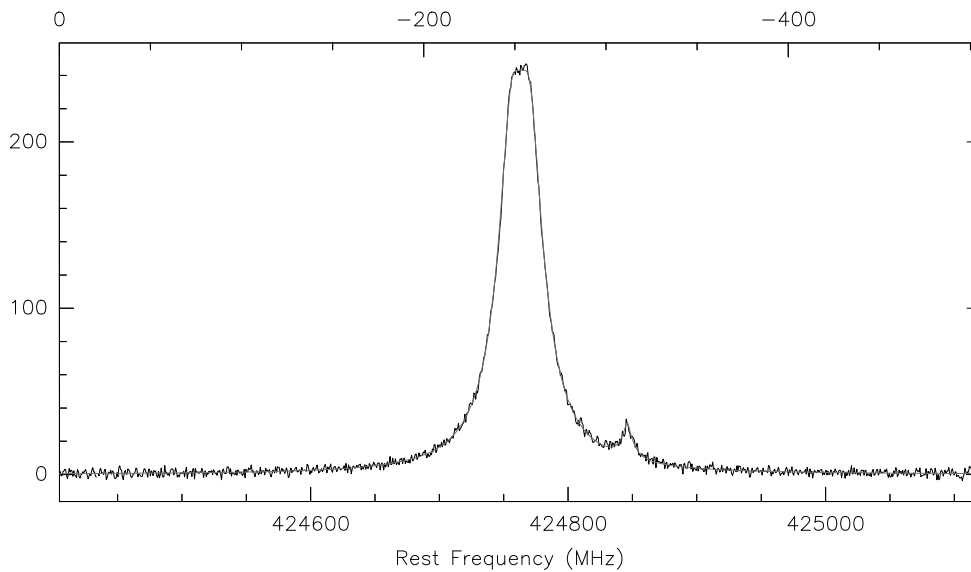
Pour ce type de géométrie, la solution de l'équation de transfert de rayonnement atmosphérique dans le millimétrique s'écrit:

$$T_B(\nu, \gamma(h_T)) = T_{B,RFC}(\nu)e^{-\tau_\nu[\gamma(h_T)]} + \int_{\gamma(h_T)} T(s)e^{-\tau_\nu(s,\infty)} \kappa_\nu(s) ds \quad (5.1)$$

où  $T_{B,RFC}(\nu)$  représente le rayonnement du fond cosmique,  $s$  est une coordonnée curviligne le long du chemin suivi par le rayonnement et  $h_T$  est l'altitude du point de tangence de l'observation. On considère que le satellite se situe à l'infini. Cette

```

2; 3 GreG Data                                O: 27-AUG-2024 R: 17-OCT-199
I: 0.000000E+00 b: 0.000000E+00              Offs: 0.0      0.0
Unknown Tau: 0.0000E+00 Tsys: 1.000         Time: 0.0000E+00 El: 90.00
N: 1024 IO: 1.000          VO: 0.0000E+00 Dv: -.4945   Unkn
      F0: 424404.800      Df: .7000          Fi: 440000.000
                                   Velocity (km/s)
    
```



```

2; 3 GreG Data                                O: 27-AUG-2024 R: 17-OCT-199
I: 0.000000E+00 b: 0.000000E+00              Offs: 0.0      0.0
Unknown Tau: 0.0000E+00 Tsys: 1.000         Time: 0.0000E+00 El: 90.00
N: 1024 IO: 1.000          VO: 0.0000E+00 Dv: -.4945   Unkn
      F0: 424404.800      Df: .7000          Fi: 440000.000
                                   Velocity (km/s)
    
```

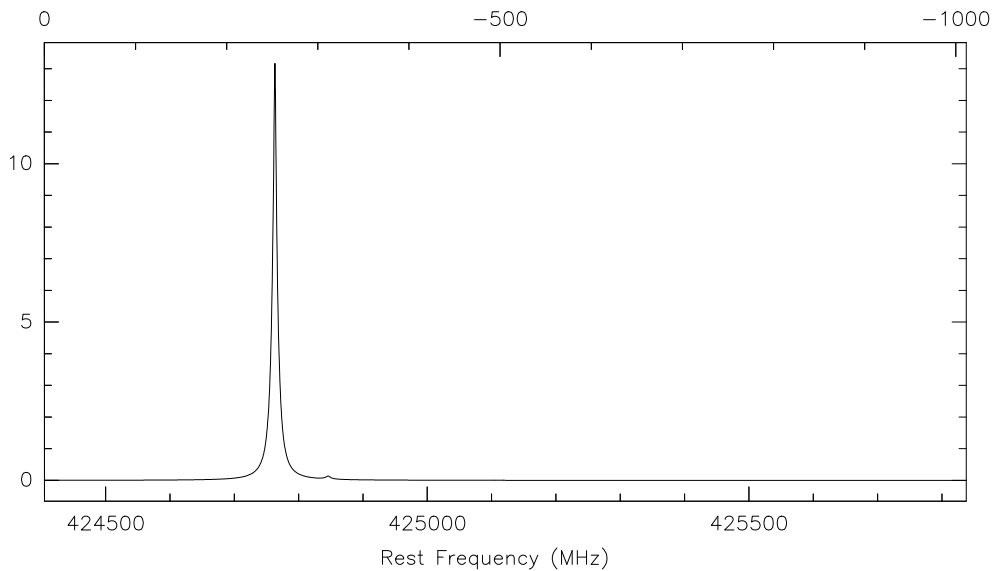


FIG. 5.2 - Exemple d'usage des nouvelles commandes atmosphériques de CLASS pour le traitement des observations de PRONAOS. En haut spectre synthétique ajusté; en bas : opacité atmosphérique tirée de cet ajustement, qui servira à corriger les signaux externes dans le cas d'une détection de la raie astrophysique.

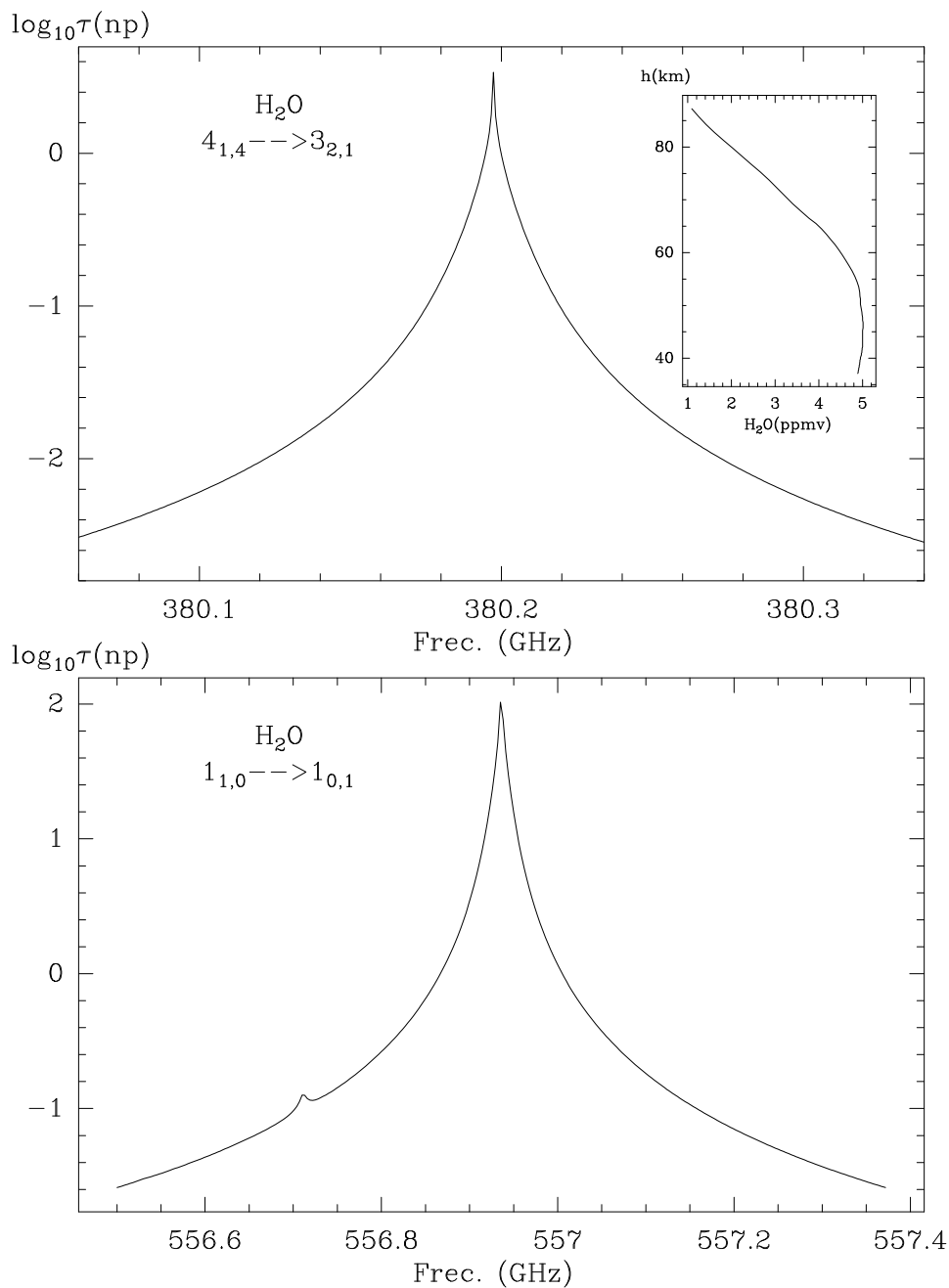


FIG. 5.3 - Simulation de l'opacité atmosphérique dans les environs de deux raies submillimétriques de  $\text{H}_2\text{O}$  pour une position d'observation à 37 km d'altitude et une masse d'air de 1.3 (ce sont des conditions d'observation typiques d'instruments transportés par ballon dans la stratosphère). On a utilisé l'atmosphère *U.S. Std Atm. 1976* dont le profil de  $\text{H}_2\text{O}$  est reporté en haut à droite.

équation est écrite pour un seul rayon et on ne tient pas compte du diagramme d'antenne.

### 5.3.1 Considérations techniques

Pour une fréquence proche d'une résonance d'un gaz atmosphérique, le coefficient d'absorption  $\kappa_\nu(z)$  est dominé par cette espèce à des altitudes supérieures au point de tangence. La température de brillance détectée servira à déterminer le profil d'abondance de ce gaz. Il est donc très important en réalisant des sondages au limbe d'utiliser des antennes les plus directives possible pour réduire les contributions en provenance de la surface terrestre ou de la troposphère. Ceci peut ne pas être très facile parfois car il s'agit de télescopes qui doivent être placés dans l'espace. Pour atteindre un champ de 3 km de diamètre autour du point de tangence, la taille de l'antenne doit être:

$$D_{3km}(m) = 4.0 \cdot 10^{-4} \lambda_{mm} \sqrt{(2R_\oplus + h_0)(h_0 - h_T)} \quad (5.2)$$

où  $\lambda_{mm}$  est la longueur d'onde en millimètres, et  $R_\oplus$ ,  $h_0$  et  $h_t$  sont respectivement le rayon de la Terre (supposée sphérique), l'altitude du satellite par rapport à la surface terrestre et l'altitude du point de tangence, exprimés en km. Nous voyons que le diamètre d'antenne requis pour un champ constant de 3 km varie légèrement avec l'altitude du point de tangence et que surtout la position du satellite joue un rôle important pour définir la taille de l'antenne.

Les fréquences des raies à observer se déplacent par effet Doppler, dû au mouvement du satellite, à la rotation de la Terre et au vent. L'effet du vent mésosphérique est le moins important et les autres effets peuvent être modélisés sans difficulté une fois connus l'orbite du satellite et le mode d'observation.

Un autre point important est le besoin d'obtenir des couvertures spatiales sur notre planète les plus grandes possibles. Pour ceci on peut penser à un satellite d'orbite basse (jusqu'à 1000 km d'altitude) faisant des sondages dans le plan vertical seulement. Scanner le plan vertical est suffisant car la période de rotation autour de la Terre d'un satellite de ce type est très inférieure à la rotation de notre planète, ce qui permet de faire plusieurs passages par jour. Il est intéressant de remarquer que le déplacement angulaire de l'antenne peut être ajusté à la vitesse orbitale de façon à assurer que le point de tangence reste sur la même verticale géographique, ce qui permet d'obtenir un ensemble de données plus faciles à interpréter.

Finalement, nous allons parler de la sensibilité. Nous savons qu'en augmentant la taille de l'antenne le lobe principal diminue (en raison inverse de l'“ouverture effective”,  $A_e$ , de l'antenne à une certaine fréquence). Pour un signal qui remplit complètement le lobe, comme l'émission naturelle atmosphérique, la puissance reçue est essentiellement indépendante de  $A_e$ . Elle vaut  $\sim \frac{1}{2}\lambda^2 B_\nu(T)$  (où  $B_\nu(T)$  est la fonction de Planck à la température  $T$  et à la fréquence  $\nu$ ). Pour des températures atmosphériques typiques et jusqu'à une fréquence de 3 THz, cette quantité est de l'ordre de  $\approx 3 \cdot 10^{-15}$  W/MHz (elle décroît très fortement au delà de 10 THz). Pour avoir un ordre de grandeur du seuil de détection, on compare cette valeur de la puissance reçue avec le niveau de bruit typique d'un récepteur hétérodyne ( $kT_{sys}/\sqrt{\Delta\nu\Delta t}$ , où  $k$  est la const. de Boltzmann et  $T_{sys}$  la température de bruit du système). En choisissant  $\Delta\nu \sim 25$  MHz,  $\Delta t$  de quelques secondes, et  $T_{sys}$  entre 1000 et 3000 K, le niveau de bruit est de l'ordre de  $10^{-16}$  W. Ce bruit est bien inférieur à la valeur de  $\frac{1}{2}\lambda^2 B_\nu(T)\Delta\nu$  pour les mêmes hypothèses et par conséquent les raies spectrales atmosphériques en dessous de 3 THz, ayant une opacité supérieure à  $10^{-3}$ , peuvent être détectées au moyen de radiomètres hétérodynes en des temps d'intégration inférieurs à la minute.

### 5.3.2 L'observation des composants atmosphériques minoritaires au moyen du sondage au limbe

Les régions millimétrique et submillimétrique du spectre électromagnétique sont très riches en raies spectrales de gaz atmosphériques minoritaires. La géométrie d'observation au limbe rend possible la détection de raies de gaz atmosphériques ayant un rapport de mélange de l'ordre de quelques ppmv, dans des temps d'intégration de quelques secondes, quelques dizaines de secondes au plus avec la technologie actuelle (voir figure 5.4). Beaucoup des gaz intéressants dans les cycles les plus significatifs de la chimie atmosphérique peuvent donc être étudiés avec cette technique. On peut envisager par exemple d'observer la raie rotationnelle la plus intense de ClO ainsi que la raie fondamentale de HCl, qui ne peuvent pas être observées depuis le sol; l'étude de l'ozone avec un plus large choix de fréquences, de sensibilité, de résolution et de couverture spatiales, etc...; et l'étude d'autres gaz dont  $N_2O$ ,  $CO$ ,  $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $SO_2$ ,  $NO_2$ , etc..., avec les mêmes avantages. Sur la figure 5.4 on peut se faire une idée de l'aspect de l'émission atmosphérique dans le submillimétrique pour des lignes de visée au limbe.

Le satellite ODIN, dont on va parler dans la section suivante, est destiné à mener des observations spectroscopiques au limbe de différents gaz minoritaires dans le submillimétrique. Une adaptation du logiciel d'inversion présenté au cours de ce travail est prévue pour cette tâche. Comme d'autres groupes participent à ce projet, à l'Observatoire de Bordeaux, l'université *CHALMERS* à Göteborg et *MISU* (Stockholm), nous avons préféré concentrer notre effort sur l'inversion de raies de l'oxygène moléculaire, qui seront observées par ODIN, pour déterminer les profils verticaux de température et de pression. Compte tenu de la complexité du transfert radiatif dans le cas de l'oxygène (comparé aux gaz minoritaires sans moment magnétique), il est évident que la procédure que l'on décrira dans la section suivante peut être adaptée sans problèmes aux gaz minoritaires avec des simplifications. Il n'est donc pas nécessaire de rentrer dans les détails ici, sachant surtout que les procédures d'inversion pour ODIN ne seront pas discutées avant six mois, au moins, après la présentation de ce travail ("*ODIN Aeronomy Workshop*" – été 1997) et que le travail est maintenant en plein développement.

La description des commandes ATM permettant d'effectuer des simulations de spectres au limbe atmosphérique se trouvent dans l'annexe A.

### 5.3.3 L'étude du profil de température au moyen de cette technique. Le projet ODIN

Le participation du Laboratoire de Radioastronomie Millimétrique de l'Observatoire de Paris à l'aspect scientifique de la partie Aéronomie du projet ODIN<sup>1</sup> est principalement orientée vers le développement d'un code d'inversion pour retrouver le profil vertical de température et de pression à partir d'observations au limbe de raies de l'oxygène atmosphérique. Ceci est possible grâce à l'expérience acquise pendant le développement et la validation du modèle présenté dans la section 3.1 de ce travail. On avait déjà fait remarquer à cet endroit que l'émission résonante dans le millimétrique et le submillimétrique de ce gaz dans l'atmosphère dépend presque exclusivement du profil vertical de température et de pression (grâce à son rapport de mélange bien connu par rapport à d'autres gaz). Le sondage au limbe

---

1. ODIN est un projet de satellite majoritairement suédois, mais avec participation de la France, du Canada et de la Finlande. Le projet scientifique est partagé entre l'astrophysique et l'aéronomie. Dans le contexte de ce travail, nous nous intéressons à l'instrument SMR qui fera des observations spectroscopiques dans le millimétrique mais surtout dans le submillimétrique.



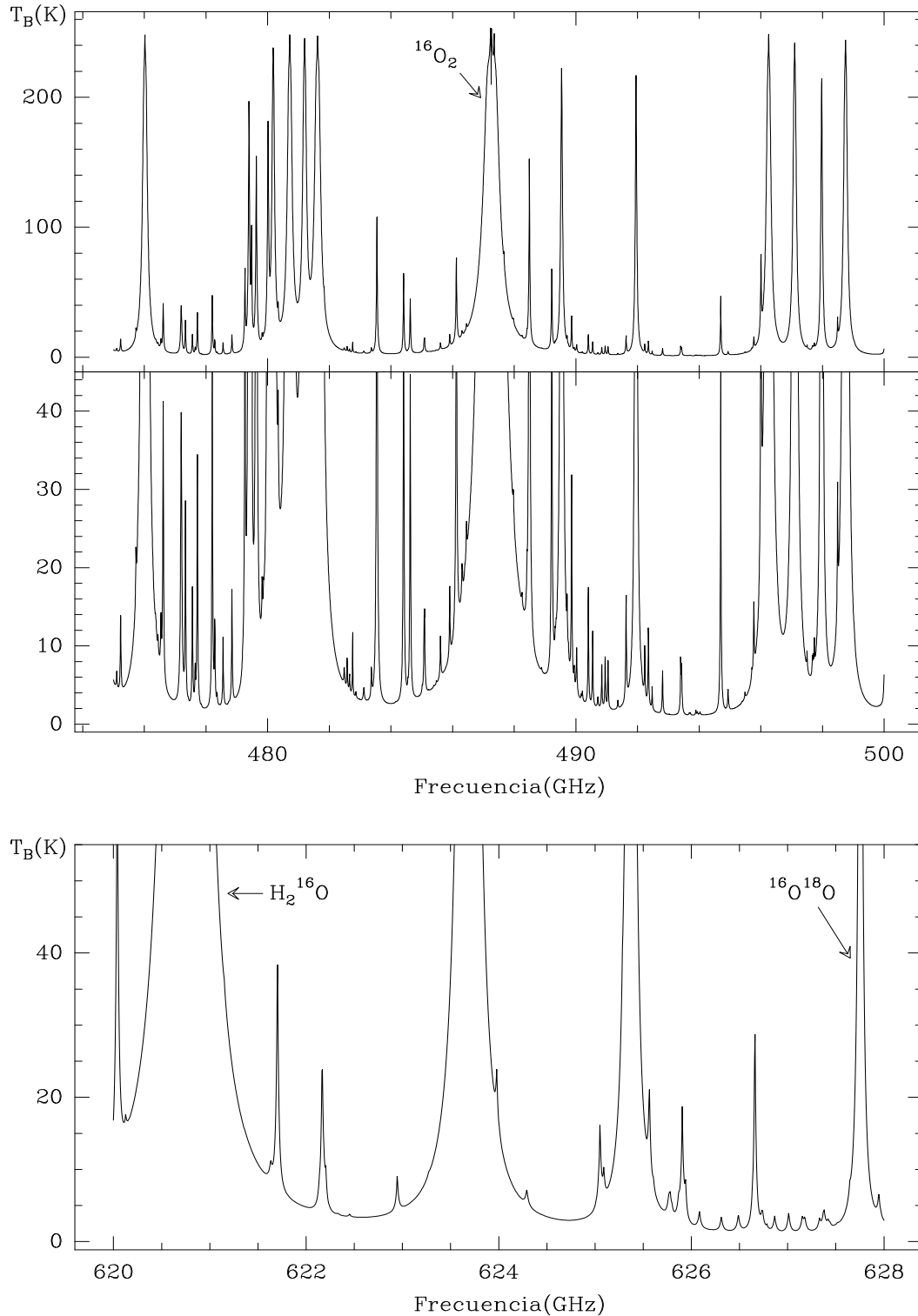


FIG. 5.4 - Spectres synthétiques au limbe atmosphérique (point de tangence à 32 km) dans plusieurs bandes submillimétriques. On voit une grande quantité de raies qui ont des températures de brillance (corrigées selon l'équation 2.14 à cause de la déviation de la loi de Rayleigh-Jeans dans le submillimétrique pour les températures atmosphériques) et qui appartiennent en grande partie à l'ozone (avec aussi la vapeur d'eau, l'oxygène et leurs isotopes).

atmosphérique des raies rotationnelles de l'oxygène est une bonne technique pour mesurer la pression et la température dans une couche étroite autour du point de tangence. Ce type d'observations est un complément nécessaire aux sondages au limbe des autres gaz atmosphériques pour établir (ou valider) une bonne échelle verticale avec la pression. Des observations dans ce but ont été menées par l'instrument MLS à bord du satellite UARS (*Fishbein et al.* (1994) [26], voir le paragraphe suivant).

### **Algorithme proposé pour le calcul de la température et de la pression dans la mésosphère et la basse termosphère**

L'algorithme en cours de développement est donc ciblé sur le calcul du profil de température et de pression au-delà de 50 kilomètres environ à partir d'observations spectroscopiques de raies de l'oxygène moléculaire au limbe atmosphérique. Pour des points de tangence en dessous de la stratopause en général l'effet Zeeman a un rôle très peu important dans le calcul de la température et de la pression (voir figure 5.8). Dans cette zone, donc, un algorithme d'inversion basé sur une équation de transfert de rayonnement scalaire est suffisant. Le but de notre travail est de montrer le type d'erreurs que l'utilisation d'une mauvaise modélisation directe peut introduire sur l'inversion; connaître l'importance des erreurs en fonction de l'altitude; et, finalement, vérifier la convergence de l'algorithme d'inversion, ceci pour plusieurs niveaux de bruit dans les spectres synthétiques et plusieurs profils T-p au départ (plus au moins éloignés du "vrai").

En ce qui concerne la largeur des raies atmosphériques de l'oxygène il faut dire que dans les régions atmosphériques où le mécanisme d'élargissement collisionnel domine sur l'élargissement thermique c'est plutôt la pression le paramètre déterminant, car le coefficient d'élargissement est linéaire en P et sa dépendance en T suit une puissance plus faible que 1. D'autre part, le changement relatif de pression entre 0 et 60 km est beaucoup plus grand que celui de température. Le niveau total d'émission, par contre, dépend presque exclusivement du profil de température car il s'agit d'une émission thermique où la fonction source est une fonction de Planck à la température physique de la couche. L'élargissement thermique (de type gaussien), devient compétitif voire dominant aux altitudes supérieures à 60 km environ (en fonction de l'espèce et de la raie). À ces altitudes il est clair que le profil de raie contiendra une information presque exclusivement sur la température et il sera donc difficile ou impossible de calculer la pression. Les altitudes où cela arrive

coïncident presque avec celles où l'effet Zeeman devient important. Au-delà de  $\sim 60$  km les erreurs relatives dans la détermination de la pression commencent à devenir importantes par rapport à celles sur la température. En fait, l'intensité du champ magnétique devient un paramètre plus facile à déterminer que la pression si les observations ont une résolution spectrale suffisante.

Pour les simulations on considère des spectres synthétiques ayant des points de tangence plus hauts que 30 km. Pour les raies de l'oxygène considérées ici, l'émission pour des points de tangence en dessous de cette altitude est assez large (plus que 500 MHz) et saturée dans une large région de fréquences autour de la résonance, ce qui rend très difficile l'extraction de l'information sur les paramètres physiques.

Jusqu'à présent il n'a pas été nécessaire d'utiliser des algorithmes d'inversion du type de celui qu'on présente ici car le seul instrument ayant effectué des observations de raies de l'oxygène en sondage au limbe a été le radiomètre à 63 GHz du système MLS (à bord du satellite UARS), décrit dans *Fishbein et al.* (1996) [26]. Ses principales caractéristiques sont aussi présentées dans le tableau 5.1. Ce système n'était destiné qu'à l'étude des profils de température entre 22 et 0.46 hPa (entre 25 et 53 km d'altitude environ).

Le satellite ODIN a la possibilité d'utiliser trois raies de l'oxygène pour ce type d'études d'après les bandes de fréquences des récepteurs embarqués. Ces raies sont:  $N_J=1_1 \rightarrow 1_0$  à 118.75 GHz  $N_J=3_3 \rightarrow 1_2$  à 487.25 GHz et ( $N_J=4_3 \rightarrow 2_3$  de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  à 566.90 GHz. Nous avons étudié les possibilités d'utilisation individuelle ou collective de ces trois raies pour mesurer la température et la pression jusqu'au niveau le plus haut possible.

D'une façon générale l'émission au limbe dans une raie de l'oxygène mesurée par des systèmes embarqués sur satellite dépend des paramètres suivants: température, pression, rapport de mélange de l'oxygène, projection de la vitesse du satellite sur la ligne de visée et champ magnétique. En plus, l'observation est affectée par des paramètres instrumentaux tels que le diagramme d'antenne, les gains relatifs des bandes du récepteur, le bruit de système, etc... Une bonne estimation de la température nécessite donc une bonne connaissance des paramètres instrumentaux, de la ligne de visée et de la projection de la vitesse du satellite sur elle, du champ magnétique local et du rapport de mélange de l'oxygène. Celui-ci est bien connu jusqu'à une altitude de 80 km environ où il est essentiellement constant. Au delà, le rapport de mélange décroît à cause de la photodissociation par l'UV solaire, ce qui doit être pris en compte pour la méthode d'inversion.

Calcul du profil de température au moyen de sondages au limbe		
Instrument	MLS (UARS)	SMR (ODIN)
Raies de O <sub>2</sub> utilisées	62.998 GHz 63.569 GHz	118.75 GHz 487.25 GHz? 566.90 GHz?
Récepteur	Superhétérodyne (OL=63.285 GHz)	SIS
Spectromètres	Banque de filtres de 15 canaux · ~500 MHz de couverture · résolution spectrale plus fine vers le canal central	· 3 filtres x 40 MHz · autocorrélateurs de ~300 ou ~130 kHz de résolution
Algorithmes d'inv.	Estimation de Rodgers: · Matricielle · Linéarisation du problème · Pas de traitement de la région $\nu_c \pm 10$ MHz	Ajustement gen.: · Moindres carrés · problème non linéarisé · Prend en compte l'effet Zeeman
Domaine de validité	h entre 25 et 55 km	h entre 30 et 95 km (→ 110 km?)
résolution	~5 km	~3 km

TAB. 5.1 - Ce tableau fait une comparaison des capacités prévues sur ODIN dans le but de mesurer le profil de température dans les domaines millimétrique et submillimétriques comparées à celles de MLS (Fishbein et al., 1996 [26]).

Comme on l'avait fait dans les sections 3.2 et 3.3, la division en couches de l'atmosphère et le choix des niveaux où les variables physiques vont être considérées comme des paramètres libres dans le processus d'inversion des spectres (ajustement itératif par moindres carrés) sont faits dans une étude préliminaire sur la base des critères suivants: raies observées, couverture et résolution spectrale, distance verticale entre les points de tangence qui correspondent aux spectres individuels, etc... Des travaux de référence pour cette étude préliminaire sont *Bevilacqua* (1988) [10] et *Rodgers* (1976) [75].

*Etude préliminaire de l'inversion en température et pression à partir de spectres synthétiques*

Ce travail de préparation de la méthode d'inversion est focalisé sur les raies de l'oxygène à 118.75 GHz et à 487.249370 GHz, les deux accessibles par ODIN, mais aussi sur celle à 424.25 GHz qui est la transition submillimétrique de l'oxygène la plus intense dans la stratosphère.

Le calcul des fonctions de poids en température qui correspondent à des fréquences éloignées de plus de  $\sim 3$  MHz du centre de la résonance rotationnelle à 118.75 GHz montre, dans le cas de sondage au limbe, des largeurs verticales de l'ordre de  $\sim 5$  km. Une vision générale du changement de la fonction de poids en fonction de la fréquence pour cette raie de  $^{16}\text{O}_2$ , pour un sondage au limbe avec point de tangence dans la mésosphère, est montrée dans la figure 5.5. Sur cette figure nous voyons que dans la mésosphère, les altitudes où les observations peuvent extraire de l'information sur la température changent appréciablement avec la polarisation dans une zone de quelques MHz autour de la résonance rotationnelle. Selon l'altitude du point de tangence cette région centrale a une plus ou moins grande importance dans le profil global de la raie. À 80 km, (figure 5.5) les différences sont très importantes selon la polarisation et il est impossible d'établir une fonction de sondage unique. Les fonctions de sondage sont à la base des méthodes d'inversion basées sur une approximation linéaire (Rodgers, Backus-Gilbert, etc...). Le rôle de la polarisation fait que dans le cas de l'oxygène, ces méthodes linéaires ne peuvent pas donner de bons résultats. C'est pourquoi nous proposons un algorithme général d'ajustement non linéaire des spectres par moindres carrés.

Prenons donc, par exemple, un ensemble de spectres synthétiques à 118 GHz avec des points de tangence étagés entre 92 et 50 km avec un pas vertical de 3 km. La situation géographique est  $\text{LAT}=0^\circ$  et  $\text{LONG}=0-20^\circ$ . Quand on ne prend pas en compte l'effet Zeeman, l'émission qui correspond au trajet avec point de tangence à 92 km devrait présenter un pic isolé car le rayonnement se propage entre le point de tangence et le satellite en traversant des couches où la température augmente (la mésopause est placée en dessous de 95 km). Donc, la dépression centrale ne peut pas s'expliquer que par un effet Zeeman qui donne lieu aux deux pics qu'on voit de chaque côté de la fréquence de résonance rotationnelle. Pour des points de tangence en dessous de la mésopause (70 km par exemple), on prédit que la raie a une absorption centrale à cause du gradient négatif de température de la partie de la mésosphère au-dessus du point de tangence. L'effet Zeeman dans ce cas fait

varier la profondeur et la largeur de cette absorption centrale, ce qui est clair quand on compare les profils de raie avec et sans champ magnétique (figure 5.8). Pour des points de tangence situés dans la stratosphère, la largeur des raies est de l'ordre de quelques centaines de MHz. La partie centrale ( $\pm 10$  MHz) peut donc être éliminée des calculs presque sans effets sur la température et la pression calculées.

L'inversion dans les simulations que nous présentons ici a été menée de la façon suivante: en partant du spectre qui correspond au plus haut point de tangence (par exemple 95 km) on calcule T et P dans la couche 95-98 km par ajustement du spectre synthétique (le profil a priori de P et T est assez différent du vrai profil). Ces valeurs de T et P sont incorporées à l'information a priori pour l'inversion du spectre suivant ayant un point de tangence 3 km plus bas, sauf bien sûr si on remarque que les valeurs calculées sont évidemment fausses (à cause d'un mauvais paramètre en entrée, par exemple). Dans ce cas on arrête et on fait un test pour trouver le problème. Sinon, le calcul se poursuit ainsi jusqu'à l'arrivée au point de tangence le plus bas, en calculant à chaque fois T et P entre  $h_{tang.}$  et  $h_{tang.}+3$  km. Bien que simple, cette stratégie n'est pas la meilleure possible. Il y a notamment deux problèmes principaux:

A) Il est évident que cette manière de procéder a l'inconvénient d'accumuler les erreurs en descendant. Ce problème est critique au début des calculs jusqu'à environ une altitude de 70 kilomètres car la partie  $\sim \pm 5$  MHz du spectre (où les fonctions de poids ne sont pas centrées sur le point de tangence mais quelques kilomètres au-dessus, voir figure 5.5) est assez importante dans le profil de raie global. On s'est rendu compte, par exemple, que prendre la température entre 95 et 98 kilomètres comme paramètre libre pour ajuster le spectre au point de tangence 95 km, peut créer une grosse erreur (de l'ordre de 15%) qui a d'importantes conséquences jusqu'à au moins 5 ou 6 couches en dessous et puis disparaît. En fait, à 95 km de point de tangence, la raie est très étroite et les couches jusqu'à environ 110 km contribuent d'une manière importante à l'émission.

B) Jusqu'ici on a dit qu'on tenait compte de l'effet Zeeman pour les calculs mais on supposait le champ magnétique connu, tiré d'un modèle dans nos simulations. En fait, il y a toujours une erreur dans la connaissance de la ligne de visée. Ceci induit des erreurs tant dans l'intensité que dans la direction du champ magnétique, à ajouter aux déviations entre le modèle de champ magnétique et la réalité. Les erreurs dans la direction du champ induisent des incertitudes sur la polarisation de l'émission détectée et auront un effet direct sur la température calculée très

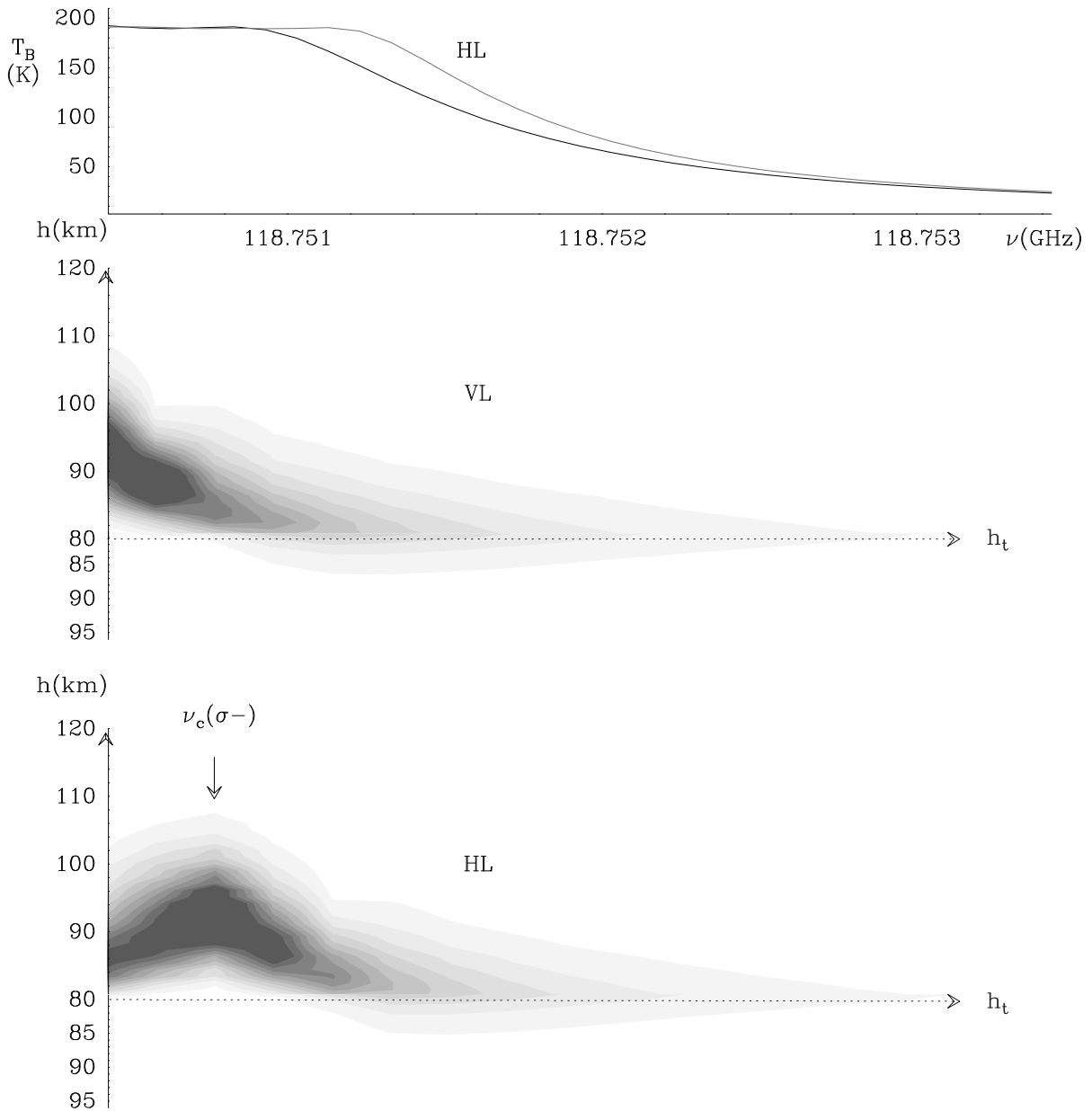


FIG. 5.5 - Variation spectrale de la fonction de poids en température (dans la figure on donne les éléments de matrice  $W_{11}$  et  $W_{B22}$  pour la base [HL,VL] dans le plan de phase) pour la raie de l'oxygène centrée à 118.75 GHz et un chemin de propagation O-E sur l'équateur avec un point de tangence à 80 km. On a normalisé à 1 (tonalité de gris la plus intense) le maximum des éléments de la matrice  $W(h,\nu)$ . Le dernier ton de gris (le plus clair) correspond à 0.1. En profitant du même axe de fréquences on a tracé les éléments  $T_{B11}$  et  $T_{B22}$  de la matrice de température de brillance dans la même base (en haut).

difficile à identifier. Les erreurs dans l'intensité du champ magnétique joueront sur la position des composantes Zeeman et peuvent être corrigées en utilisant l'intensité du champ comme un paramètre libre additionnel dans l'ajustement car il va être très peu (ou pas) couplé à la température (à déterminer simultanément).

Dans le but, donc, d'améliorer l'inversion, on procède comme ceci:

1) **Information a priori:** Sur le profil atmosphérique, elle provient de U.S. Std. 76 pour la saison et zone de latitude qui correspond. Pour le champ magnétique, elle est dérivée du modèle *Barraclough et al.* (1985) [5].

2) **Premier spectre** (95 km de point de tangence dans notre cas): On utilise un paramètre libre variant la courbe de température au delà de 95 km (ou moins 12 km).

3) **Autres spectres** (points de tangence en dessous de 95 km par pas de 3 km): La pression et la température dans une couche de trois kilomètres d'épaisseur au dessus du point de tangence sont des paramètres libres dans l'ajustement de chaque spectre.

4) **Tous les spectres aux points de tangence au dessus de 72 km:** On prend la direction du champ magnétique fournie par le modèle pour la ligne de visée considérée et on considère son intensité comme un paramètre libre à ajuster dans la même couche que la pression et la température.

Sur les figures 5.6, 5.7 nous présentons comment, d'après les simulations, cette stratégie améliore considérablement la qualité de l'inversion.

La figure 5.8 illustre comment l'inversion peut donner des erreurs importantes dans la détermination de la température si on ne suit pas les étapes que nous proposons plus haut.

### 5.3.4 Systèmes de sondage actuels et futurs

#### Les pionniers: MLS et MAS

L'utilisation du sondage au limbe pour l'étude passive de l'atmosphère est très récente. En fait, le premier système opérationnel est **MLS** ("Microwave Limb Sounder"), un des instruments du satellite UARS lancé en 1991 par la NASA). MLS observe à  $90^\circ$  de la direction du mouvement de UARS. Les bandes spectrales de travail de cet instrument ont été choisies pour optimiser l'étude du profil vertical



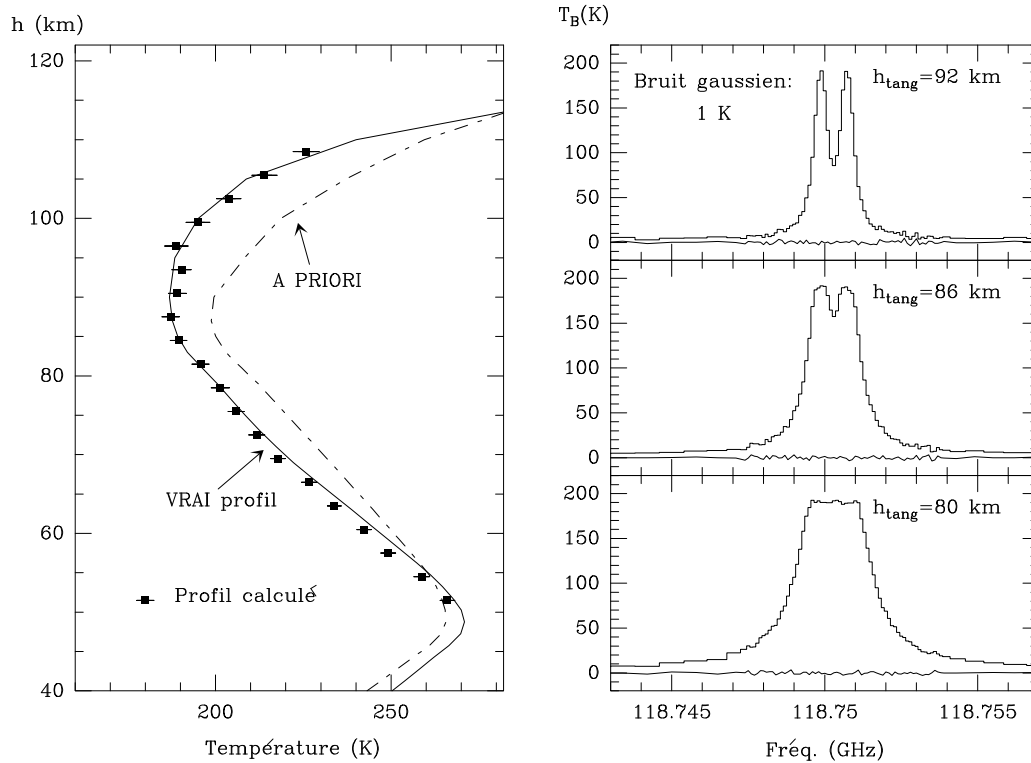


FIG. 5.6 - Exemple de profil de température calculé par la procédure présentée dans cette section à partir des spectres synthétiques à 119 GHz créés en utilisant l'atmosphère standard U.S. Atm. 76, auxquels on a ajouté un bruit gaussien de 1 K. Des détails sur la zone de la planète où on considère ces sondages au limbe sont donnés dans le texte. Dans ce cas on a considéré que le récepteur travaille en polarisation linéaire verticale (perpendiculaire, dans le cas considéré, au champ magnétique local). Donc, les deux pics d'émission clairement visibles dans les spectres synthétiques à 95 et 86 km de point de tangence sont les composants  $\sigma_{\pm}$  de la raie de l'oxygène à 118.75 GHz.

de l'ozone entre 15 et 80 km, de ClO entre 15 et 45 km,  $H_2O$  entre 15 et 85 km et mesurer la température et la pression entre 30 et 60 km, mais d'autres molécules atmosphériques ayant des raies dans ces bandes de fréquence ont été observées. Les fréquences de travail sont, donc, 63, 183 et 205 GHz. L'orbite du satellite permet de mesurer entre  $34^\circ$  de latitude dans un hémisphère et  $80^\circ$  dans l'autre avec alternance d'hémisphères tous les 36 jours. Le système possède une antenne de 1.6 mètres, soit une résolution angulaire de  $4.2'$  à 205 GHz. Un corps noir interne de référence et le rayonnement du fond cosmique sont utilisés pour la calibration. Le rayonnement reçu peut être dirigé vers 3 radiomètres Schottky à température ambiante, travaillant autour des fréquences 63, 205 et 183 GHz. Puis le signal est analysé à l'aide de six

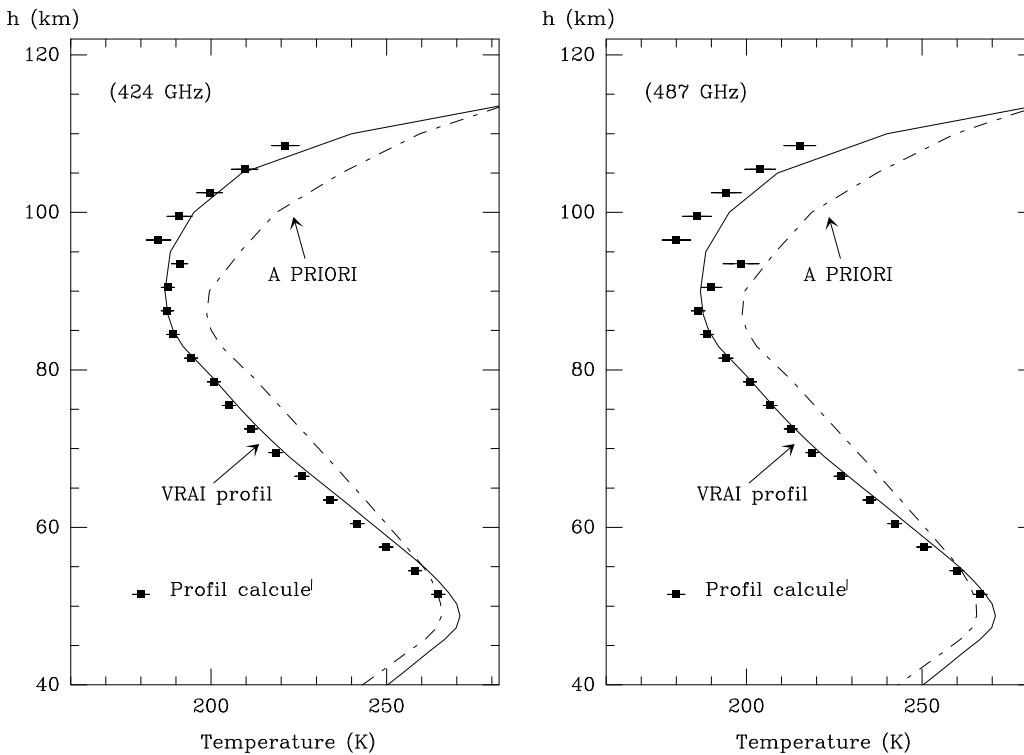


FIG. 5.7 - Exemple de profil de température calculé par la procédure présentée dans cette section à partir des spectres synthétiques à 424 GHz et 487 GHz avec un bruit gaussien de 1 K et la même géométrie que dans les spectres de la dernière figure à 118.75 GHz. On voit qu'au niveau de bruit 1 K dans les spectres, les performances de l'inversion sont plus mauvaises dans ces deux raies qu'à 118.75 GHz au delà de 85 km, sans doute à cause de la plus grande complexité de la structure de ces raies.

bancs de filtres différents pour obtenir les spectres de  $O_2$ ,  $ClO$ ,  $O_3$  (deux fréquences pour cette molécule) et  $H_2O$ . On a besoin de deux résolutions spectrales: environ 1 MHz ou plus pour mesurer les abondances en dessous de 50 km, là où les raies atmosphériques sont plus larges que 2 MHz environ (voir sections 2.3.4 et 4.3.3), et  $\sim 0.1$  MHz ou moins pour les quelques espèces que l'on veut observer au-delà de 50 km, où les largeurs de raie sont plus petites que  $\sim 1$  MHz. Les récepteurs fonctionnent en double bande et les gains sont presque égaux dans les bandes supérieure et inférieure. Le temps d'intégration de chaque spectre au limbe est de 2 s. Un balayage complet entre 5 et 95 kilomètres prend une minute. Les premiers résultats de cette expérience ont déjà été publiés (voir, par exemple, *Froidevaux et al.*, 1996 [29], *Waters et al.*, 1996 [96], *Manney et al.*, 1995 [55], etc...). Il faut souligner surtout les mesures de la distribution géographique de l'ozone et de  $ClO$  à différents niveaux de pression, qui

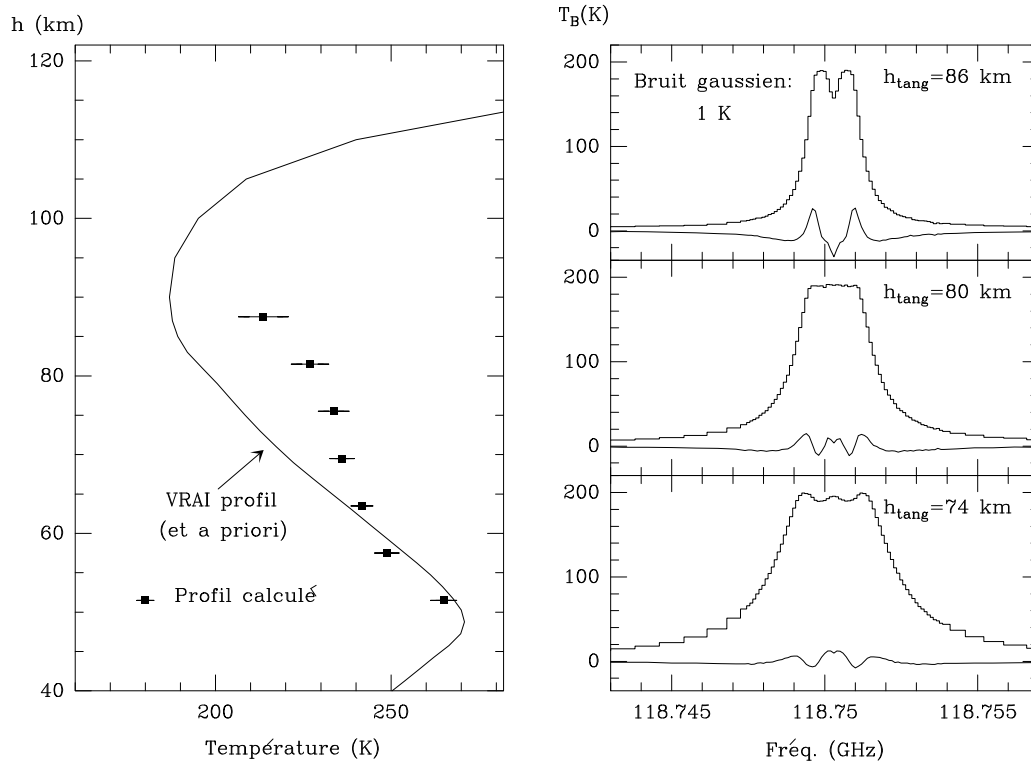


FIG. 5.8 - Ici nous montrons les erreurs dans la détermination de la température à différentes altitudes à partir de raies de l'oxygène mesurées au limbe atmosphérique quand l'algorithme d'inversion néglige l'effet Zeeman. Dans les calculs on a donné au logiciel comme a priori le vrai profil de température au dessus de chaque altitude. On voit dans les résultats et dans les ajustements des spectres synthétiques que les erreurs commencent à être importants au dessus de 60 km environ. En dessous, il n'est pas nécessaire de prendre en compte cet effet à cause de la largeur des raies mais aussi à cause de la dépolarisation qui résulte de l'importance des collisions.

ont permis des études globales du phénomène du trou d'ozone pendant le printemps local autour du pôle Sud et du rôle des fortes concentrations de ClO dans la basse stratosphère et des processus chimiques ayant lieu dans la partie haute des "*Polar Stratospheric Clouds*" sur la formation du trou d'ozone.

On a déjà signalé que MLS a mesuré le profil atmosphérique de la pression et de la température au moyen d'un radiomètre double bande dont la fréquence OL est placée entre deux raies de l'oxygène (62.998 et 63.569 GHz).

### **Autre projet dans le futur proche: le nouveau EOS-MLS**

Pour remplacer MLS, il est prévu de construire un nouvel instrument incorporant, par rapport à l'ancien, les améliorations techniques qui se sont produites dans le domaine de la détection hétérodyne d'ondes électromagnétiques millimétriques et submillimétriques. On prévoit d'abord une montée en fréquences jusqu'au submillimétrique avec des radiomètres travaillant à environ 560 et 637 GHz. Dans le domaine millimétrique on utilisera des récepteurs à 118, 205 et 268 GHz (la vapeur d'eau sera mesurée dans sa résonance rotationnelle fondamentale à 557 GHz, tandis que l'oxygène, toujours pour établir le profil de température et de pression, sera regardé à 118 GHz). D'autres améliorations techniques sont l'utilisation d'amplificateurs à large bande pour la fréquence intermédiaire (IF), la disponibilité de spectromètres acousto-optiques de dimensions beaucoup plus petites et les meilleures performances du système de refroidissement à bord pour les mélangeurs et préamplificateurs.

Le radiomètre centré à 637 GHz permet de couvrir la raie rotationnelle de HCl à 626 GHz et une raie relativement forte de ClO à 649 GHz. D'autre part, le radiomètre à 560 GHz couvre une autre transition de ClO à 575 GHz. De plus, d'autres molécules atmosphériques peuvent être observées dans les 20 GHz de largeur de bande où l'on peut placer la fréquence intermédiaire de chaque radiomètre. Les fréquences centrales de ces observations double bande sont choisies de façon à éviter les superpositions de raies d'une bande sur l'autre. D'autre part, le spectromètre connecté au récepteur à 205 GHz permet de poursuivre le programme d'observation de deux raies voisines de O<sub>3</sub> et ClO, déjà entamé sur l'ancien MLS. Par contre, les mesures de ClO doivent être meilleures avec les radiomètres à 637/560 GHz car il doit être possible d'atteindre une sensibilité à ClO comparable à celle à 205 GHz dans un temps d'intégration 50 fois inférieur. La possibilité technique de monter en fréquence fait envisager la réalisation d'un radiomètre à 2514 GHz, pour mesurer principalement OH, qui a des transitions rotationnelles à 1.8, 2.5 et 3.5 THz et est chimiquement active dans toutes les régions de l'atmosphère terrestre. La fréquence 1230 GHz est potentiellement intéressante pour HF.

Cette future mission doit permettre d'effectuer des mesures d'une partie importante des gaz intervenant dans le cycle de l'ozone, que ce soient des espèces jouant un rôle de réservoirs ou des espèces fournissant des radicaux. Il est prévu également de mesurer la température et la pression depuis la troposphère jusqu'à la haute mésosphère. D'autre part, la mesure de l'émission d'espèces excitées de l'oxygène ( $^1\Delta$  ou  $^3\Sigma v=1$ ) peut donner des informations importantes sur la production d'ozone

<i>Bandes en dessous de 1 THz</i>		
Bande	MASTER	SOPRANO
A	199-207 GHz	498.5-503.5 GHz
B	296-306 GHz	624.5-626.8 GHz
C	318-326 GHz	635.5-637.5 GHz
D	324-348 GHz	951-955.5 GHz
<i>Bandes au delà de 1 THz</i>		
	MASTER	SOPRANO
	0.8-3.5 THz THz	0.1-10 THz (Astrophysique)

TAB. 5.2 - Bandes de fréquence présélectionnées pour les instruments MASTER et SOPRANO.

dans la haute stratosphère et la mésosphère.

### Projets futurs de la ESA: MASTER et SOPRANO

L'Agence spatiale européenne (ESA) a prévu à moyen terme (années 2000) deux instruments dédiés à l'étude de l'atmosphère au moyen de sondages au limbe, qui seront embarqués sur une future génération de satellites. À cause du profil de densité atmosphérique, on a pensé à deux instruments séparés, un pour l'observation de la troposphère et un autre pour la stratosphère et la mésosphère. Cela doit permettre d'adapter les spécificités techniques de chaque instrument de façon à améliorer la qualité de l'information finale, par rapport à un seul instrument.

La base de ces instruments est, comme MLS et ODIN par exemple, les récepteurs hétérodynes sur une plateforme satellitaire et le sondage au limbe en utilisant différents spectromètres. Le tableau 5.2 donne les bandes de fréquence envisagées pour ces instruments.

Le domaine d'altitudes pour le point de tangence qu'on a considéré pour MASTER est 5 à 20 km. L'orbite prévue du satellite est semblable à celle de beaucoup de satellites météorologiques d'orbite synchronisée au Soleil (à 800 km d'altitude environ). Les bandes de fréquence ont été présélectionnées (tableau 5.2) pour les objectifs scientifiques suivants:

Bande A)  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  (203.41 GHz),  $\text{N}_2\text{O}$  (200.97 GHz),  $\text{SO}_2$  (plusieurs raies entre 200 et 206 GHz),  $^{35}\text{ClO}$  (204.35 GHz). Cette bande coïncide en grande partie avec celle du projet EMCOR (section 3.4). Ce projet peut donc aider à la préparation de MASTER.

Bande B)  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  (298.47 GHz) et  $^{16}\text{O}_3$  à 300.68, 301.68 et 303.16 GHz.

Bande C)  $\text{H}_2\text{O}$  à 325.15 GHz.

Bande D)  $\text{CO}$  à 345.77 GHz et  $\text{HNO}_3$  entre 344 et 345 GHz.

Le balayage en élévation est entre 0 et 20 km par pas de 1 km avec une durée par cycle de  $21 \times 0.3$  s. Dans le domaine d'altitude de travail de MASTER, le rayonnement émis par l'atmosphère peut être considéré comme non polarisé.

La mission SOPRANO est consacrée principalement aux molécules liées au Chlore dans le but d'approfondir la connaissance de la chimie de cet élément dans la stratosphère. Sur SOPRANO on ne considère que des canaux submillimétriques. Le domaine d'altitudes sera de 10 à 50 km par pas de 1 km (durée totale  $41 \times 0.3$  s). Les objectifs peuvent être divisés en deux parties. D'un côté, les molécules prioritaires qui doivent être détectables avec les performances nominales de l'instrument:  $\text{ClO}$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}$  et  $\text{O}_2$ . De l'autre il y a une série de molécules dont la détection est présumée difficile:  $\text{BrO}$ ,  $\text{HOCl}$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ,  $\text{HO}_2$  et  $\text{HNO}_3$ . En outre  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{N}_2\text{O}$  sont classées comme non prioritaires car ce sont des molécules mieux étudiées par d'autres expériences dans la stratosphère.

## Chapitre 6

# Conclusions et perspectives

Les objectifs atteints dans ce travail sont présentés ci-dessous, ainsi qu'un aperçu des orientations futures de mon activité de recherche:

### **A) Logiciel de transfert radiatif atmosphérique ATM.**

La version actuelle de ce logiciel a les caractéristiques générales suivantes:

a) Elle fonctionne entre 1 et 1000 GHz et permet de simuler le transfert radiatif atmosphérique en géométrie plan-parallèle (visée depuis le sol ou depuis un satellite) ou sphérique (pour le sondage au limbe).

b) Il y a 5 modélisations différentes de l'absorption par  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{O}_2$  disponibles. Les gaz minoritaires  $\text{O}_3$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ , et d'autres qui présentent des raies bien plus faibles, sont inclus ainsi que les isotopes et les états vibrationnellement excités de  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$  et  $\text{O}_3$  dont l'émission peut être considérée comme importante.

c) Le code a été adapté pour l'analyse des données MSU, SSM/T1 et SSM/T2 en coïncidence spatiale et temporelle avec des radiosondages (chapitre 4).

d) Il permet de simuler le transfert radiatif anisotrope et dépendant de la polarisation aux environs des résonances de l'oxygène moléculaire.

e) Il permet le calcul des fonctions de poids et des fonctions de sondage pour aider à la déconvolution des observations spectroscopiques dans le domaine de fréquences concerné.

f) Il contient un modèle simple de l'émissivité de l'océan.

Ce logiciel a été installé dans divers laboratoires pendant la durée de ce travail pour différents buts. Par exemple :

- *Centre de Météorologie Spatiale, Lannion (France)*. Logiciel de référence dans le but de préparer le logiciel d'inversion rapide pour les systèmes AMSU-A et B. Dans ce cadre, une convention entre le CMS et le DEMIRM est prévue pour l'année 1997.

- *Observatoire de Bordeaux*. Intercomparaisons.

- *Groupe d'astrophysique submillimétrique de CALTECH, Pasadena (USA)*. Exploitation des mesures de la transmission atmosphérique entre 200 et 1000 GHz à Mauna Kea avec le télescope CSO.

- *Télescope Submillimétrique JCMT, Mauna Kea (Hawaii)*. Analyse des données d'un radiomètre à trois canaux autour de 183.31 GHz (voir fin du chapitre 4).

- *DEMIRM/Observatoire de Paris (France) et Observatorio Astronómico Nacional (Espagne)*. Logiciel de transfert radiatif atmosphérique de référence.

- *INPE (Brésil)*. Préparation à la recherche en aéronomie dans le domaine microonde dans cet institut.

### **B) Logiciel d'inversion.**

Ce code a été développé au cours de cette thèse sur la base d'ATM, et a été utilisé pour analyser des mesures depuis le sol de la raie de la vapeur d'eau à 183 GHz et de plusieurs raies de l'ozone entre 142 et 359 GHz. Il a été aussi adapté à l'analyse d'observations au limbe; on a illustré principalement dans ce travail les capacités du logiciel pour calculer le profil de température au delà de 50 km d'altitude à partir de spectres synthétiques de l'oxygène. Il faut continuer ce travail pour adapter le logiciel aux spécificités des instruments EMCOR et ODIN dans le but d'analyser leurs observations.

### **C) Modélisation et validation du transfert radiatif des raies de l'oxygène dans la mésosphère.**

On a complété d'autres modèles de l'effet Zeeman sur les raies  $\Delta N=0$  de l'oxygène et on les a étendus aux raies  $\Delta N=\pm 2$  et aux raies des espèces isotopiques. On a montré que la détection de la sous-structure Zeeman est possible depuis le sol en utilisant des raies des espèces isotopiques. A cet effet, on a effectué des observations d'une raie de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  à 234 GHz, qui ont permis de tester la validité du modèle. Bien que le gros du travail expérimental ait été fait avec le télescope POM-2 sur le Plateau de Bure, on dispose aussi de données du télescope de 30 mètres de l'IRAM



à Pico Veleta. De nouvelles observations d'une autre raie de  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  à 401 GHz ont été proposées et seront effectuées dans quelques mois au télescope submillimétrique CSO à Mauna Kea (Hawaii). Il a été proposé également de mener des observations très détaillées à 234 GHz au télescope JCMT, placé aussi à Mauna Kea, grâce à un système de rotation de la polarisation à l'entrée du récepteur.

Ce travail nous a permis d'acquérir l'expérience nécessaire à la mise au point de l'algorithme d'inversion en température dans la mésosphère cité au paragraphe B; cette expertise a été mise à profit dans l'étude de définition des canaux pour un projet d'instrument "Push-Broom" du CNES (chapitre 4).

#### **D Détection de l'émission de la vapeur d'eau strato-mésosphérique depuis le sol à 183 GHz.**

En profitant d'une troposphère extrêmement sèche (0.2 à 0.3 mm de vapeur d'eau intégrée au-dessus du télescope) on a obtenu des spectres où le signal de cette molécule en provenance de la stratosphère et mésosphère est bien détecté. On a utilisé le logiciel d'inversion pour déconvoluer ces observations et on a ainsi obtenu des valeurs du rapport de mélange entre 30 et 65 km en bon accord avec les mesures plus courantes à 22 GHz. Les mesures à 183 GHz ont un énorme avantage par rapport à 22 GHz, le temps d'intégration est beaucoup plus court (de l'ordre de 100 à 200 fois) pour un même rapport signal sur bruit. Une collaboration pour l'analyse des données de deux radiomètres à trois canaux autour de cette même résonance de la vapeur d'eau, placés sur les télescopes CSO et JCMT à Mauna Kea (Hawaii), a été initiée à la fin de cette thèse.

#### **E) Mesures de raies de l'ozone.**

Au cours de ce travail on a fait des mesures de bonne qualité de différentes raies de l'ozone entre 142 et 359 GHz. On les a analysées avec le logiciel d'inversion, ce qui a permis d'estimer le rapport de mélange de l'ozone à différentes époques dans deux endroits différents (Pico Veleta et Plateau de Bure) entre  $\sim 25$  et 72 km d'altitude avec une résolution verticale entre 10 et 16 km. Certaines raies ont été mesurées pour la première fois dans ce but. Les valeurs du rapport de mélange calculées simultanément avec deux raies différentes de l'ozone sont en bon accord, à l'intérieur des barres d'erreur.

#### **F) Comparaison des données MSU, SSM/T1 et SSM/T2 avec les résultats du transfert radiatif sur des profils atmosphériques obtenus de radiosondages en coïncidence spatiale et temporelle.**

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la préparation des nouveaux systèmes AMSU-A/B de la NOAA. Il s'agit de tester et de préparer le logiciel de transfert radiatif autour de 60 et 183 GHz pour traiter les données que fourniront ces nouveaux systèmes. Ce travail n'est pas terminé mais les premiers résultats amènent à choisir un modèle du type MPM-93 [53], en corrigeant certains biais et des effets de dépendance en latitude qu'il faut encore préciser. Dans ce contexte, on a signalé dans ce mémoire la nécessité de protéger certaines bandes de fréquences pour l'étude passive de l'atmosphère et on a effectué des calculs pour étayer les rapports français sur ce thème (collaboration avec le CNES à Toulouse et le CMS à Lannion, qui devrait se poursuivre en 1997).

# Annexe A

## Description des commandes ATM

Dans les différents chapitres de cette thèse on a présenté les possibilités du logiciel de transfert radiatif atmosphérique ATM et on a vu des applications. Nous présentons ici une description des commandes dans le but d'aider les futurs utilisateurs.

Le logiciel a été écrit en langage FORTRAN 77 standard et il peut fonctionner aussi bien sur des ordinateurs avec un système d'exploitation VMS ou UNIX.

Le logiciel est interactif. Certains paramètres et options sont utilisés par défaut, comme on le verra dans cette section. Le format des commandes d'ATM est un groupe de 4 lettres, toutes majuscules ou toutes minuscules, qui peut être suivi dans certains cas d'une valeur. Les commandes de la version actuelle d'ATM sont décrites ici mais groupées selon la fonction à laquelle elles sont conçues:

### Pour choisir le type d'atmosphère:

Par défaut le programme utilise l'atmosphère U.S. Standard 1962 (hiver). Les commandes suivantes permettent de changer de type d'atmosphère:

- ▷ **WINT** pour choisir U.S. St. 1962 hiver.
- ▷ **SUMM** pour choisir U.S. St. 1962 été.
- ▷ **SPRI** pour choisir U.S. St. 1962 printemps.
- ▷ **FALL** pour choisir U.S. St. 1962 automne.
- ▷ **ST76** pour choisir U.S. St. 1976 (modèle standard).

▷**TYPE** qui permet, une fois choisi U.S. ST. 1976, de changer pour 5 autres atmosphères qui existent dans le même catalogue et qui sont représentatives de différentes latitudes et/ou saisons.

▷**USER** permet de lire quelques fichiers d'atmosphères qui proviennent des campagnes d'observations et qui peuvent être traités par ATM (voir tableau 2.15), ce qui a été fait pendant la réalisation de ce travail<sup>1</sup>.

▷**ST62** permet de retourner à l'atmosphère définie par défaut.

### Pour choisir la modélisation du coefficient d'absorption:

Nous présentons ici les différents modèles qui traitent l'absorption atmosphérique par  $O_2$  et  $H_2O$  qui sont disponibles dans ATM<sup>2</sup>. Par défaut, le modèle utilisé est celui de *Liebe* dans sa version de 1993 [53] (MPM-93). Voici le moyen d'accéder aux différentes possibilités:

▷**LIEB** permet d'annuler le modèle de *Liebe* s'il était en fonction, ou sinon de l'inclure. Un message sur l'écran nous dira quelle a été la fonction accomplie.

▷**YEAR** (valeur) permet de choisir la version des modèles de *Liebe* que l'on va utiliser (MPM-93, 89 ou 85) .

Le logiciel contient aussi d'anciens modèles (antérieurs à 1985, date de création de la version qui a été utilisée au radiotélescope de 30 m de l'IRAM) qui peuvent être utilisés pour faire des comparaisons. On les appelle au moyen des commandes suivantes:

▷**V1** active une version qui utilise un profil de raie Van Vleck-Weisskopf pour la vapeur d'eau avec un continuum empirique et deux modèles différents pour  $O_2$  (*Rosenkranz* par défaut ou *Reber*, voir référence [17]) qui peuvent être choisis respectivement avec les commandes:

▷**ROSE**

▷**REBE**

---

1. Une commande très spécifique a été introduite à cet égard: ▷**RAOB**, qui permet d'ouvrir un nouveau fichier avec des atmosphères en provenance de radiosondages (pour les analyses présentés aux sections 4.1 et 4.2 de cette thèse).

2. Pour les composants mineurs la modélisation dans ATM est basée sur le travail présenté au chapitre 2.

▷**V2** active une version qui est équivalente à *Liebe* (1985) [50] (MPM-85), mais la commande:

▷**REDU** permet de restreindre le nombre des raies à 22, 183 et 325 GHz pour la vapeur d'eau, et à la bande à 60 GHz et à la raie isolée à 119 GHz pour O<sub>2</sub>. On peut utiliser cette possibilité pour des calculs rapides dans la région millimétrique.

### **Pour supprimer ou introduire les composants minoritaires dans les calculs:**

Au début du programme, tous les composants mineurs sont tous inclus. Il est possible de savoir lesquels sont présents en appelant la commande:

▷**READ** qui lit la liste des molécules présentes dans le catalogue, et ordonne les raies selon des fréquences croissantes. Cette commande peut être suivie de:

▷**LINE** qui montre les raies atmosphériques des gaz inclus dans ATM dans un intervalle de fréquences choisi. Ces deux commandes ne sont pas nécessaires pour faire tourner correctement les calculs. Elles sont orientées à permettre à l'utilisateur d'accéder au catalogue de raies.

Les commandes suivantes introduisent ou suppriment le composant mineur considéré selon sa présence ou non dans les calculs. Voici la liste de ces commandes:

▷**WISO** pour les espèces isotopiques de l'eau: H<sub>2</sub><sup>17</sup>O, H<sub>2</sub><sup>18</sup>O et HDO.

▷**O2IS** pour les espèces isotopiques de l'oxygène moléculaire: <sup>16</sup>O<sup>17</sup>O et <sup>16</sup>O<sup>18</sup>O.

▷**O3** pour l'ozone (isotope principal).

▷**O3IS** pour les espèces isotopiques de l'ozone: <sup>16</sup>O<sup>16</sup>O<sup>17</sup>O, <sup>16</sup>O<sup>16</sup>O<sup>18</sup>O, <sup>16</sup>O<sup>17</sup>O<sup>16</sup>O et <sup>16</sup>O<sup>18</sup>O<sup>16</sup>O.

▷**O2VB** pour les raies qui correspondent au premier état vibrationnel excité de l'oxygène moléculaire.

▷**O3VB** pour les raies qui correspondent aux trois premiers états vibrationnels excités de l'ozone (ayant un niveau d'énergie comparable).

▷**MINO** pour tous les autres composants minoritaires.

Les atmosphères du catalogue *U.S. Std. 62* n'ont pas d'information sur la distribution verticale de H<sub>2</sub>O et des gaz minoritaires. Les commandes que l'on vient de décrire utilisent par défaut des profils expérimentaux tirés de *Zuev, V.E. et Komarov, V.S. (1987) [100]* sauf pour H<sub>2</sub>O. En ce qui concerne cette dernière

molécule, le profil formé d'une décroissance exponentielle jusqu'à 15 km (équations A.1 et A.2), caractérisée par une échelle de hauteur ( $H_0$ ) et une certaine quantité intégrée en colonne jusqu'à 15 km ( $W$ , exprimée en mm); et, au-dessus de 15 km, le rapport de mélange en volume est considéré constant ( $r$ , exprimé en ppmv). Ce type de profil permet de relier d'une façon simple différents paramètres: la quantité de vapeur d'eau précipitable (en mm) au-dessus d'un site est obtenue en multipliant la densité de vapeur d'eau en  $gr/m^3$  dans le site par l'échelle de hauteur en kilomètres. Au niveau de la mer:

$$W_0(mm) = \rho_0(gr/m^3) \cdot H_0(km) \quad (A.1)$$

et à une certain hauteur  $H$ :

$$W(mm) = W_0(mm) \cdot exp(-H/H_0) \quad (A.2)$$

Les valeurs considérées par défaut pour  $H_0$ ,  $W$  et  $r$  sont: 2 km, 1 mm et 2 ppm. On peut les changer à l'aide des commandes suivantes:

▷ **WLEN (nouvelle valeur)** (échelle de hauteur en km).

▷ **WH2O (nouvelle valeur)** (quantité intégrée de vapeur d'eau en mm au dessus du site). On peut calculer aussi ce paramètre à l'aide des valeurs de l'humidité relative, de la température et de la pression dans le hypothèses sur le profil citées auparavant. Pour introduire ces paramètres:

▷ **HUMR (valeur en poucentage)**

▷ **TEMP (°C)**

▷ **PRES (mb)**

▷ **PPMW (nouvelle valeur)** (rapport de mélange de la vapeur d'eau au-dessus de 15 km, en ppmv).

Les atmosphères dans le catalogue U.S. Std. 76 contiennent des profils pour  $H_2O$ . Si on fait  $WH2O=0$  on prendra ces informations du catalogue, sinon on utilisera le profil de vapeur que l'on vient de décrire, avec les paramètres en mémoire.

Les atmosphères USER ne contiennent pas en général de profils pour les composants mineurs: ils sont donc tous enlevés automatiquement des calculs quand on tape cette option et un message sur l'écran nous prévient.

## Pour fixer certains paramètres de l'intégration

Cette section décrit la manière de modifier quelques paramètres importants pour les calculs:

▷ **AIRM (valeur  $\geq 1$ )**, masse d'air, facteur géométrique équivalent à  $(1/\cos(z))$ , où  $z$  est l'angle par rapport au zénith qui sert à calculer la bonne opacité à partir de l'opacité au zénith dans l'approximation plan-parallèle (défaut: masse d'air=1).

▷ **FREQ (valeur en GHz)** fréquence dans la bande signal pour les calculs orientés a des utilisateurs de radiotélescopes (défaut 100 GHz). Voir plus bas.

▷ **RVIF (valeur en GHz)**. Les calculs monochromatiques dans ATM se font réellement à deux fréquences: celle entrée au moyen de la commande FREQ, et une deuxième (appelée fréquence image) déterminée en utilisant la comande RVIF. Selon le cas (placement de la bande image par rapport à la bande signal), cette deuxième fréquence sera: FREQ+RVIF ou FREQ-RVIF (voir les deux commandes suivantes). C'est utile par exemple pour avoir une information sur le signal et l'opacité atmosphérique pour un système de réception double bande. Si on n'utilise pas cette commande, le programme prend une fréquence intermédiaire par défaut de 3.932 GHz, c'est-à-dire la fréquence intermédiaire typique du radiotélescope de 30 mètres à l'IRAM.

▷ **LSB** signifie que la fréquence choisie avec FREQ est placée dans la bande inférieure (dans le cas double bande).

▷ **USB** signifie de la même façon que la fréquence FREQ est dans la bande supérieure tandis que le centre de la bande inférieure sera FREQ-RVIF.

▷ **FRE1 (valeur en GHz)** fréquence inférieure pour les calculs du spectre atmosphérique (voir plus bas). Défaut 1 GHz.

▷ **FRE2 (valeur en GHz)** fréquence supérieure de l'intervalle où on veut calculer le spectre atmosphérique (défaut 300 GHz).

▷ **STMA (valeur en GHz)** pas maximum en fréquence pour les calculs du spectre atmosphérique (défaut 1GHz).

▷ **STMI (valeur en GHz)** pas minimum en fréquence pour les calculs du spectre atmosphérique. ATM utilise un pas variable en fréquence entre ces deux valeurs choisi selon le comportement de la dérivée de l'opacité (le pas est plus petit près des résonances) (défaut: 0.001 GHz).

▷**TOFR (valeur en GHz)** est l'écart maximal en fréquence, par rapport à la fréquence de travail, pour prendre en compte les raies des différents composants mineurs à utiliser dans le calcul du coefficient d'absorption à la fréquence de travail (afin de ne pas passer chaque fois par toutes les raies du catalogue) (défaut 10 GHz).

▷**ALTI (valeur en km)** est l'altitude du terrain. Ce paramètre donne une limite inférieure à l'atmosphère afin de mener le transfert radiatif (défaut 2.9 km, position du télescope de 30 mètres de l'IRAM).

▷**HORI** sélectionne un mode où l'opacité est calculée pour un trajet horizontal homogène de 1 km (P, T et les abondances des différents gaz seront celles qui correspondent à l'altitude choisie avec ALTI). Cela permet de calculer l'opacité par unité de longueur à une certaine fréquence pour des valeurs constantes de la pression, de la température et des densités numériques des différentes molécules atmosphériques.

## Pour lancer les calculs

Le logiciel peut faire deux types de calculs: à une fréquence spécifique, ou à plusieurs fréquences (spectre). Les informations en sortie sont la température de brillance, l'opacité (totale et individuelle pour chacun des gaz) et la transmission atmosphérique. Pour visualiser la liste des options choisies pour les calculs, taper:

### ▷DEFA

Les calculs sont lancés au moyen de deux commandes. Dans le premier cas (une seule fréquence):

### ▷COMP

Dans le deuxième cas (spectre):

### ▷SPEC

Les résultats apparaissent à l'écran, mais ils sont aussi écrits sur le fichier, **SKY.SPE**, qui contient en entête les paramètres du calcul<sup>3</sup>

---

3. La comande SPEC a aussi un usage particulier qui permet l'analyse automatique des données de radiosondages pour des comparaisons avec des mesures de systèmes sur satellite comme MSU, SSM/T1 et SSM/T2 (voir sections 4.1 et 4.2). Ceci est une adaptation d'ATM à un usage très spécifique et, donc, nous ne voulons pas l'inclure dans la description générale du logiciel. ATM garde les caractéristiques des canaux MSU, SSM/T1 et SSM/T2 de façon que si ont tape les



## Simulations d'observations satellitaires

Dans tout ce que nous venons de décrire, on suppose que le rayonnement se propage depuis le sommet de l'atmosphère (où il entre avec une température de brillance égale à celle du fond cosmique, si on ne tient pas compte d'autres sources) vers le récepteur au sol. Cependant, on peut aussi faire des calculs de la température de brillance telle qu'elle serait vue d'un satellite. Pour des angles pas trop grands par rapport au nadir l'approximation plan-parallèle est acceptable. Pour travailler en "mode satellitaire", il suffit d'entrer la commande suivante:

▷**SATE**. Le calcul  $T_B$  se fait alors au sommet de l'atmosphère.

Les calculs sous cette option tiennent compte du rayonnement réfléchi par la surface de la Terre et de la contribution de la surface elle-même. Les valeurs de l'émissivité de surface ( $e_s$ ), et par conséquent du coefficient de réflexion ( $1-e_s$ ), changent beaucoup selon le type de surface. Sur les continents, ces paramètres sont très difficiles à connaître. Pour la surface des océans, il y a quelques modèles plus ou moins précis. Comme pour toute surface réfléchissante, ces coefficients sont fonction de l'état de polarisation (nous appelons polarisation linéaire H celle qui est perpendiculaire à la trajectoire et parallèle à la surface, et V celle qui est perpendiculaire à H et à la direction de propagation). Sur ATM, il est possible de choisir un traitement scalaire, pour lequel il suffit d'entrer une émissivité et une température pour la surface à l'aide des commandes:

▷**SFEM** ( $0 \leq \text{valeur} \leq 1$ ), émissivité (scalaire) de la surface de la Terre. Cette valeur est nécessaire pour calculer la partie réfléchie et émise par la surface vers le haut.

▷**TSFC** (valeur en degrés K), température physique de la surface de la Terre, également nécessaire pour déterminer la partie émise.

Il est aussi possible de faire un calcul plus complet en utilisant un modèle

---

options: ▷**MSU**, ▷**SMT1** ou ▷**SMT2** les calculs, à chaque fois qu'on tape ▷ **SPEC**, se feront pour l'intervalle de fréquences (et pour toutes les bandes) de chaque canal (succésivement) de l'instrument choisi. Des fichiers des résultats spéciaux (MSU.DAT, SSMT1.DAT et SSMT2.DAT) sont créés où on écrit la température de brillance moyenne qui correspond à chaque canal pour chaque radiosondage (il faut travailler en mode SATE, voir paragraphe suivant). De plus, si on tape d'abord l'option ▷**FASC**, on crée un fichier avec le radiosondage et les canaux de l'instrument sous le format d'entrée au logiciel FASCOD, qui permettra de faire rapidement des intercomparaisons avec cet autre logiciel. Ceci est la base des analyses présentés au chapitre 4.

développé au département DEMIRM de l'observatoire de Paris (*Guillou et al.*, 1996 [35]). Pour l'activer, il faut taper:

▷**MSEA**

Ce modèle utilise comme paramètres d'entrée la vitesse du vent en surface et la température de la surface marine qui peuvent être saisis à l'aide des commandes:

▷**WIND (valeur en m/s)**

▷**TSEA (valeur en K)**

Les calculs avec le modèle d'émissivité marine du DEMIRM sont seulement possibles en mode COMP et nous donnent les températures de brillance en polarisation H et V attendues au sommet de l'atmosphère.

### Sondage au limbe

On utilise pour l'instant une géométrie sphérique pour des observations satellitaires au limbe. De façon générale, pour choisir cette option, il faut taper:

▷**LIMB** qui peut être suivi ou précédé de:

▷**SATH (valeur en km)** pour fixer l'altitude du satellite.

▷**NADR (valeur en degrés)** pour l'angle de visée par rapport au nadir.

Dans le cas d'un sondage au limbe, le logiciel donne sur l'écran les valeurs du point de tangence (en première approximation la Terre a été supposée sphérique). Si ce point de tangence est placé à une altitude positive les calculs sont effectués, dans le cas contraire il faut changer les paramètres géométriques. Dans cette option ATM travaille avec les atmosphères du catalogue *U.S. Std. Atm. 76*.

### Calculs des fonctions de poids et de sondage

Une observation à une certaine fréquence donne comme résultat une température d'antenne dont on peut extraire certains paramètres physiques de la région où le rayonnement détecté a été formé. Quand la fréquence d'observation est proche d'une résonance de l'oxygène moléculaire, cette information sert à calculer la température et la pression à certains endroits. Quand on observe aux environs d'une raie de H<sub>2</sub>O, O<sub>3</sub> ou d'un autre gaz atmosphérique mineur, la température de brillance mesurée

peut être utilisée pour le calcul du rapport de mélange de ce gaz dans différentes couches. L'information sur le paramètre physique que l'on cherche est cachée dans la température de brillance convoluée avec ce qu'on appelle d'une façon générale une **fonction de poids**. Cette fonction de poids renseigne sur la zone de l'atmosphère où on peut obtenir de l'information pour une fréquence d'observation donnée. Dans le logiciel ATM nous avons rendu possible et aisé le calcul de ces fonctions de poids pour faciliter l'analyse de données réelles. D'une part il faut parler des fonctions de poids en température liées à l'observation de raies de l'oxygène depuis des satellites (voir chapitres 4 et 5); et d'autre part les fonctions de poids sur les rapports de mélange de gaz mineurs (voir au chapitre 3).

#### *Calcul des fonctions de poids en température*

Ici on donne juste l'information qui correspond à l'utilisation du logiciel pour les calculs des fonctions de poids en température. Les calculs à effectuer ici doivent correspondre au mode "satellite". On tape donc la commande  $\triangleright$ **SATE**. Une fois qu'on a fait cela:

$\triangleright$ **WMON**, crée un fichier en sortie (**WEIG\_MON.DAT**) qui va donner une fonction de poids (en fonction de l'altitude géométrique dans l'atmosphère) correspondant à la fréquence qui avait été choisie avec  $\triangleright$ **FREQ**.

$\triangleright$ **WEIG** crée deux fichiers en sortie: (**weight.dat**) qui donne la fonction de poids en température et (**trans\_media.dat**) où est écrite la transmission moyenne pour le canal de sondage dont les caractéristiques sont fixées avec:

$\triangleright$ **FREQ (valeur en GHz)** commande déjà décrite qui, sous l'option WEIG, fixe la fréquence centrale du canal.

$\triangleright$ **RVIF (GHz)** fréquence intermédiaire pour le canal, lequel a deux bandes centrées à  $FREQ + RVIF$  et  $FREQ - RVIF$ .

$\triangleright$ **RVI2 (GHz)** deuxième fréquence intermédiaire pour le canal. Si on choisit cette option, le canal a quatre bandes aux fréquences centrales suivantes:  $FREQ + RVIF + RVI2$ ,  $FREQ + RVIF - RVI2$ ,  $FREQ - RVIF + RVI2$ ,  $FREQ - RVIF - RVI2$ .

$\triangleright$ **WIDT (GHz)** est la largeur de chacune des bandes (1, 2 ou 4 bandes selon le cas).

Les fréquences sélectionnées par **FREQ** pour les calculs des fonctions de poids

en température ne peuvent l'être que dans un intervalle autour de la bande de  $O_2$  à 60 GHz ou de la raie isolée de la même molécule à 119 GHz. Dans le cas contraire, un message apparaît à l'écran.

### *Calculs de fonctions de sondage*

Ceci est très utile pour aider à l'analyse d'observations spectroscopiques de vapeur d'eau ou gaz minoritaires depuis le sol au moyen du logiciel d'inversion. Les détails se trouvent aux sections 2.4.1, 3.2 et 3.3 de cette thèse.

▷ **KERN (valeur entière)** pour mettre en oeuvre le calcul d'une fonction de sondage. La valeur donnée indique le nombre de fréquences individuelles dans la bande du spectromètre à utiliser pour le calcul.

▷ **MOLE (valeur entière)** pour indiquer la molécule à laquelle appartient la raie observée (1:  $H_2O$ , 2:  $O_3$ ,...).

▷ **AVKE (valeur entière)** pour indiquer le nombre de fonctions de sondage que nous voulons calculer. Une fonction de sondage est caractérisée par les fonctions de poids individuelles d'où elle provient, mais aussi par l'altitude où on veut qu'elle soit centrée et un multiplicateur de Lagrange décrit ci-dessous. Les deux commandes suivantes doivent être utilisées autant de fois que l'on a indiqué avec AVKE afin de donner ces informations avant les calculs.

▷ **SCAN (altitude en kilomètres)** pour indiquer l'altitude à laquelle on veut centrer la fonction de sondage.

▷ **TRAD (valeur de l'ordre de l'inverse de la densité numérique typique de la molécule à étudier (en  $m^3$ ) à la hauteur du sondage)** c'est un multiplicateur de Lagrange qui va pondérer la résolution verticale et l'erreur associée au r.m.s. des spectres (voir tables 3.3 et 3.6).

Une fois qu'on a fixé tous ces paramètres, il faut choisir avec **FREQ** des fréquences entre  $\nu_c + \delta\nu$  et  $\nu_c + \Delta\nu$  ( $\delta\nu$ : résolution spectrale,  $\Delta\nu$ : semilargeur du spectromètre si la raie observée est centrée) et faire des calculs avec **COMP**. À chaque itération on calcule la fonction de poids monochromatique qui correspond à la fréquence choisie. Elle est écrite dans un fichier (**WEIG\_MON.DAT**). On fait la même opération pour n fréquences bien distribuées sur la bande totale (n est la valeur entière entrée avec **KERN**). Le logiciel prend alors l'ensemble des fonctions de poids monochromatiques pour calculer la fonction de sondage (voir exemples dans

les figures 3.14 et 3.17). Le résultat est écrit dans un fichier (**avker.dat**) avec une estimation de l'erreur associée au r.m.s. des spectres.

## Simulations de l'effet Zeeman sur l'oxygène

Pour travailler avec cette partie du programme:

▷**MAGN** pour introduire l'effet Zeeman dans les calculs. Si on ne tape pas cette commande, celles qui suivent n'agissent pas.

▷**MAGH (valeur en km)** altitude d'origine du rayon qui se propage jusqu'à sa sortie de l'atmosphère ou jusqu'à son arrivée au sol (dans les deux cas les calculs s'arrêtent).

▷**LATI (valeur en degrés)** latitude de la verticale du point d'origine du rayon décrit précédemment.

▷**LONG (valeur en degrés)** longitude de la verticale du point d'origine du rayon.

▷**AZIM (valeur en degrés)** azimut de la direction de propagation du rayon (0=Nord).

▷**ELEV (valeur en degrés)** élévation de la direction de propagation du rayon à son origine, par rapport à l'horizon ( $90^\circ$ =zénith).

▷**NNUM (valeur)** nombre quantique caractéristique de la raie autour de laquelle sont faits les calculs. Les raies du spectre de spin-rotation sont identifiées par leur moment angulaire total  $N$  qui ne change pas pour les raies de la bande à 60 GHz et la raie isolée à 119 GHz, et par un signe + ou - qui nous indique si le nombre rotationnel  $J$  passe à  $J+1$  ou à  $J-1$  dans la transition (émission) correspondante. Pour sélectionner par exemple la raie 5+ nous devons taper "NNUM 5", et pour 7- on doit faire "NNUM -7".

▷**SNUM (valeur)** est une commande similaire à celle que l'on vient de décrire mais pour les raies submillimétriques et des espèces isotopiques de l'oxygène moléculaire (la liste des possibilités est donnée directement à l'écran si on tape ▷**SNUM 0**).

▷**DEVF (valeur en MHz)** déviation en fréquence par rapport au centre de la raie choisie pour les calculs.

▷ **STEM** (valeur en MHz) pas d'intégration en fréquence pour calculer le spectre.

▷ **REMB** enlève le champ géomagnétique des calculs (ou l'introduit s'il avait été enlevé).

▷ **WRIW** ouverture d'un fichier (**WEIG\_MAG.DAT**) qui donnera en sortie la matrice de fonction de poids monocromatique en fonction de la fréquence (défini dans l'équation 3.18).

▷ **CIRC** change la base des polarisations dans laquelle seront exprimées les matrices de  $T_B$  et les fonctions de poids de (HL=horizontale linéaire, VL=verticale linéaire) à (RC=circulaire droite, LC=circulaire gauche).

▷ **DEFM** nous permet de voir quel est l'état actuel des paramètres pour la simulation de l'effet Zeeman.

▷ **PPG1** lance les calculs monochromatiques à la fréquence centrale de la raie choisie par NNUM plus la déviation en fréquence introduite avec DEVF.

▷ **PPGF** lance les calculs du spectre dans un intervalle (-DEVF,+DEVF) autour du centre de la raie NNUM avec un pas STEM. L'écriture des matrices  $T_B$  se fait dans le fichier **TB\_MAG.dat**.

▷ **BEFO** après les calculs avec PPG1 ou PPGF, permet de récupérer tous les paramètres avec leurs valeurs avant le dernier calcul.

Dans la suite du travail il est prévu de permettre aux calculs avec **SPEC** de simuler directement l'effet Zeeman pour des fréquences où il est important sans que ATM soit obligé de faire cela séparément comme l'on vient de voir. L'idée serait d'écrire dans **SKY.SPE** seulement les éléments (1,1) de  $T_B$  et l'opacité pour la base de polarisations choisie.

### Autres commandes:

▷ **HELP** fait apparaître une aide qui, pour l'instant, donne la liste des commandes.

▷ **ATMO** active un fichier en sortie (**ATMO\_USED.DAT**) où est décrite l'atmosphère telle qu'elle a été utilisée dans les calculs (à chaque fois que l'on lance ▷**COMP**).

▷ **PRTB** va créer un fichier (**PROFIL\_TB.DAT**) où va s'écrire la température de brillance à la sortie de chacune des couches utilisées, comme résultat du transfert de rayonnement, mais aussi l'opacité de chaque couche et l'opacité accumulé jusqu'à

la fin de chaque couche. Fonctionne en mode COMP et SPEC.

▷**NPDB** change les unités de l'opacité en sortie de neper à dB, ou vice versa selon celle précédemment utilisée.

▷**INFO** active à l'écran la sortie des informations pendant le déroulement des calculs.

▷**REIN** Sert à réinitialiser ATM.

▷**EXIT** pour sortir d'ATM.

## Fichiers de commandes

Pour rendre plus commode l'utilisation du logiciel, on peut lancer les calculs à l'aide de fichiers de commandes. Deux possibilités existent:

▷**@** lit et exécute le fichier de commandes par défaut: **input.atm** qui doit exister dans un répertoire spécial (à voir au moment de l'installation d'ATM).

▷**@@** demande d'abord un nom de fichier de commandes à exécuter. Ceci permet d'utiliser rapidement différents fichiers de commandes existants dans un répertoire spécial (à voir au moment de l'installation d'ATM).

## Calculs répétitifs

Parfois on doit mener des calculs où on utilise d'une façon répétitive certaines commandes. Pour rendre plus facile le travail, ATM permet de créer des boucles de commandes de la manière suivante:

▷**LOOP (valeur entière)** pour démarrer la boucle qui sera faite le nombre de fois indiqué.

### commandes ATM

▷**ENDL** pour fermer la boucle.





## Annexe B

# Utilisation du logiciel d'inversion

Les commandes du logiciel d'inversion ont le même format que celles d'ATM.

Les suivantes font référence à des paramètres figurant dans l'équation (2.4):

▷**ETAV** (valeur entre 0 et 1) fixe la valeur de  $\eta_f$ .

▷**TSPI** (valeur en K) fixe  $T_{env}$ .

▷**GSIG** (valeur entre 0 et 1) fixe  $G_S$  et  $G_I=1-G_S$ .

Pour compléter cette information, les commandes ▷**LSB**, ▷**USB** et ▷**RVIF** sont utilisées comme dans ATM.

### Information a priori

Les profils atmosphériques qu'on peut fournir comme a priori pour l'inversion sont ceux du catalogue U.S. Atm. 76 (voir tableau 2.15), sauf la vapeur d'eau dont le profil est introduit au moyen de trois paramètres comme on faisait dans ATM avec les commandes ▷**WH2O**, ▷**WLEN** et ▷**AH2O**. Pour choisir le type d'atmosphère:

▷**ATMO** (nombre entre 1 et 6)

### Géométrie

Concernant le sondage au limbe, on conserve, par rapport a ATM, les commandes ▷**LIMB**, ▷**NADR** et ▷**SATH**. Pour les observations depuis le sol, on a ▷**AIRM** et ▷**ALTI**. Des informations plus détaillées, comme la latitude, longitude et azimuth de l'observation sont introduites aussi comme dans ATM avec: ▷**LATI**, ▷**LONG**

et  $\triangleright$ **AZIM** (l'élévation de l'observation est calculé à partir de la valeur entrée avec  $\triangleright$ **NADR**).

### Commandes très spécifiques

$\triangleright$ **BFRE** indique au logiciel d'inversion que dans le cas de raies d'oxygène à  $\pm 4$  GHz de la résonance, l'intensité du champ magnétique dans l'ensemble de couches choisies sera multiplié par un paramètre libre pour améliorer l'ajustement (voir discussion dans la section 5.3.3).

$\triangleright$ **RFRE (valeur en MHz)** sert à indiquer la résolution spectrale des données. Il est conseillé d'utiliser cette commande car par différents motifs les données ne sont pas toujours uniformément séparées en fréquence (la plupart de fois à cause des formats)

$\triangleright$ **RESU**. Dans le cas d'une inversion celle décrite dans la section 5.3.3, cette commande sert à demander au logiciel de créer un fichier des résultats (voir plus bas) lors de la fin de l'ajustement suivant.

$\triangleright$ **ADD\_** (valeur en km) ajoute une couche de l'épaisseur indiquée pour l'ajustement du spectre suivant (dans la méthode des couches d'ognon).

$\triangleright$ **UNIQ** indique au logiciel qu'on utilisera un seul paramètre multiplicatif pour chaque variable dans toutes les couches libres.

$\triangleright$ **WIND** demande au logiciel de lire un fichier (**WINDOWS.DAT**) où se trouvent des nombres de canal indiquant des fenêtrages à ne pas considérer pour l'ajustement.

$\triangleright$ **CIRC** indique que la base de polarisations est [circulaire droite, circulaire gauche] pour les spectres de l'oxygène s'il faut tenir compte de l'effet Zeeman. Si on n'indique rien, la base est [linéaire horizontale, linéaire verticale].

$\triangleright$ **POLR** (1 ou 2) indique quelle est la polarisation observée (1: linéaire horizontale ou circulaire droite, 2: linéaire verticale ou circulaire gauche)

$\triangleright$ **INVE** pour lancer les calculs. Suite à cette commande le logiciel demande le nom du fichier de données. Ce fichier doit être structuré en colonnes, la première contenant les fréquences (dans la bande signal), et la deuxième les températures d'antenne mesurées. D'autres colonnes peuvent exister mais elles ne seront pas lues.

$\triangleright$ **SHEL** sert à lire la division en couches de l'atmosphère et les couches où les abondances du gaz correspondant seront ajustées. Elles s'introduiront au moyen

d'un fichier appelé **SHELLS.DAT** avec deux colonnes: l'extension de la couche en km et un code pour indiquer si les paramètres (T, P ou abondance d'un gaz) seront libres de varier ou non pendant le processus d'inversion du spectre. Pour placer ces couches on considère que l'altitude initiale est celle fixée par la commande **ALTI** dans le cas d'observations depuis la Terre, d'un avion ou d'un ballon, vers l'espace; ou bien la position calculée du point de tangence s'il s'agit de sondages au limbe depuis un satellite.

Si les calculs convergent (des problèmes peuvent survenir à cause d'un mauvais paramètre d'entrée, d'un mauvais choix de couches , d'un spectre avec trop de bruit, etc...) deux fichiers en sortie sont créés:

- **PERFIL.INV** qui contient les paramètres calculés dans les couches choisies.
- **AJUSTE.INV** qui contient le spectre observé et l'ajustement fait par la procédure d'inversion.



## Annexe C

# Procédures Atmosphériques pour CLASS

Cette partie est facile à utiliser et très utile car généralement les usagers de CLASS ne sont pas forcément familiarisés avec le transfert radiatif atmosphérique. Les commandes de base sont:

```
(langage ANALYSE) TELLURIC [/NOPLOT] [/DETAIL] [/SSB] [/WINDOW]
[/NEW] [/ZEEMAN]
```

TELLURIC identifie les raies atmosphériques qui se trouvent dans la bande de fréquences du spectre et essaie de faire un ajustement de celui-ci. Bien sûr, on ne considère pas dans cet ajustement les intervalles de fréquence indiqués à l'aide de SET MASK ou SET WINDOW (consulter le manuel de CLASS sur ce point). Toutes les options, à l'exception de /NEW, peuvent être modifiées à l'aide de SET TELLURIC.

/NOPLOT: TELLURIC fera un dessin de l'ajustement obtenu sauf si nous utilisons cette option.

/DETAIL: permet d'obtenir des informations sur les calculs intermédiaires menés par ATM pendant l'ajustement.

/SSB: Si le spectre à ajuster a déjà été corrigé pour tenir compte d'une température de système en simple bande, cette option doit être indiquée.

/WINDOW: utilise les zones définies par SET WINDOW au lieu de celles définies par SET MASK au moment d'éliminer une partie du spectre dans l'ajustement.

/NEW: TELLURIC essaie si possible de ne pas recalculer certains paramètres qui ne changent pas d'un ajustement à l'autre. On doit utiliser cette option pour indiquer de tout recalculer après avoir, par exemple, éliminé une raie au moyen de SET MASK ou SET WINDOW, ou avoir fait d'autres changements importants.

/ZEEMAN: Il est prévu de tenir compte de l'effet Zeeman pour l'ajustement des raies atmosphériques de l'oxygène. Cette option n'est pas encore prête.

Une fois l'ajustement réalisé, l'option RESIDUAL/TELLURIC permet de soustraire l'ajustement de la contribution atmosphérique à l'observation. Les opacités atmosphériques calculées sont conservées dans un vecteur qui permet de corriger le signal de la source en utilisant:

(Langage LAS) CALIBRATE/TELLURIC [TAU] [SSB|DSB] [RF|IM] [ITR|RTI]  
CALIBRATE/TELLURIC sans options multiplie le spectre par:

$$e^{\tau_i} \cdot \frac{1}{\eta_i} \cdot \left(1 + \frac{G_I}{G_S}\right) \quad (\text{C.1})$$

L'opacité atmosphérique est celle calculée par ATM à chaque canal (calcul mené précédemment par TELLURIC). On fait une division par  $\eta_i$  pour corriger du couplage au ciel, et on multiplie par  $(1 + \frac{G_I}{G_S})$  dans le but d'exprimer le résultat comme s'il s'agissait d'un système simple bande (le facteur vaut 1 si  $G_I=0$ ).

Options:

SSB|DSB: si on tape SSB (défaut), le facteur  $(1 + \frac{G_I}{G_S})$  est utilisé. Dans le cas contraire il est remplacé par 1.

RF|IM: utilise  $\tau_i$ (bande signal) ou  $\tau_i$ (bande image) pour la calibration.

ITR|RTI: "Image-To-RF and RF-To-Image". Multiplie le spectre par

$$\exp(\tau_i(A) - \tau_i(B)) \quad (\text{C.2})$$

où A et B représentent la bande signal ou l'image. Ceci permet de calibrer les raies présentes dans chaque bande sans avoir à analyser le spectre une deuxième fois. Cette option est donc incompatible avec le reste.

(Langage ANALYSE)TAU GET|PUT

(langage ANALYSE)TAU PLOT|SPEC [RF|IM]

TAU GET|PUT permet d'écrire  $\tau(\nu)$  sous la forme d'un fichier de données

CLASS. Une grande partie des informations de l'entête ne doivent pas être prises en compte. D'autres sont significatives pour la fréquence, la vitesse et les informations sur chaque canal. Les opacités dans la bande signal sont écrites dans la première moitié du vecteur, tandis que celles de la bande image le sont dans la deuxième (voir figure 5.2). Pour transférer ce vecteur d'opacités à la mémoire R, il faut utiliser l'option PUT; pour le récupérer depuis R on fait GET. Ce transfert n'est pas nécessaire pour visualiser  $\tau(\nu)$ : il suffit de TAU PLOT et TAU SPEC avec les options RF ou IM (utiliser les unités de vitesse sur l'axe X).





# Bibliographie

- [1] Aerojet Electrosystems Company "AMSU-A Design Study", Rapport 7049, Julliet 1980.
- [2] Andreev A. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.* 62, 125-148 (1976).
- [3] Askne, J.I.H. et B. Göran Skoog, *IEEE Trans. on Geoscience and Remote Sensing*, GE-21, N. 3, 320-323, (1983).
- [4] Backus, G. et F. Gilbert, *Philos. Trans. R. Soc. London*, 266, 123-192 (1970).
- [5] Barraclough, D.R., "International Geomagnetic Reference Field revision 1985", *Pure and Appl. Geophys.*, 123, 641-645 (1985).
- [6] Bauer, A. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 37, N. 6, pp. 531-539 (1987).
- [7] Bauer, A. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 41, N. 1, pp. 49-54 (1989).
- [8] Bauer, A. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 50, N. 5, pp. 463-475 (1993).
- [9] Bergman, P., *School of electrical and computer engineering, Chalmers Univ. of Tech. (Göteborg, Suède)* Rapport Tec. N. 227, (1992).
- [10] Bevilacqua, R.M. et J.J. Olivero, *J. Geoph. Res.*, 93, N. D8, pp. 9463-9475 (1988).
- [11] Bevilacqua R.M. *et al*, *J. Geophys. Res.*, 95, 883-893, (1990).
- [12] Bommarito, J., *SPIE proc. "Microwave instrumentation for remote sensing of the Earth"*, Vol. 1935, 231-239 (Florida, Avril 1993).

- [13] Born, M., et E. Wolf, "*Principles of Optics*", 2ème édition, Pergamon Press, Londres, (1964).
- [14] Bouazza, S. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.* 157, 271-289 (1993)
- [15] Brillet, J., *J. Geophys. Res. (D)*, 94, 12833-12850 (1989).
- [16] Castets, A. *et al*, *Astron. and Astroph.*, 194, 340 (1988).
- [17] Cernicharo, J., *IRAM Internal Report*, (1985).
- [18] Cernicharo, J., *Thèse de doctorat d'état, Université de Paris VII*, (1988).
- [19] Cernicharo, J. *et al*, *Astron. Astrophys.*, 231, L15-L18, (1990).
- [20] Clough S.A. *et al*, *Atmospheric Research*, 23, 229-241, (1989) .
- [21] Connor, B.J. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.* 117, 15-29, (1986).
- [22] Connor, B.J. *et al*, *J. Geophys. Res.* 92, 13221-13230, (1987).
- [23] Crutzen, P.J. et P.H. Zimmermann, *Tellus*, 43AB, 136-151, (1991).
- [24] Depannemaecker J.C. et J. Bellet, *J. Mol. Spectrosc.*, 66, 106-120, (1977).
- [25] English S.J. *et al*, "Observations of water vapor absorption using airborne microwave radiometers at 23.8, 50.3, 89 and 157 GHz" *IGARSS'95*, (1995)
- [26] Fishbein E.F. *et al*, *J. Geophys. Res. (D)*, 101, D6, 9983-10016, (1996).
- [27] Flaud J.M. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.* 124, 209-217, (1987).
- [28] Fleming H.R. *et al*, *IEEE Transaction on Geoscience and Remote Sensing*, 29, N. 4, 571-583, (1991).
- [29] Froidevaux, L. *et al*, *J. Geophys. Res. (D)*, (1996).
- [30] Gamache, R.R. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.* 128, 283-299 et 360-369 (1985).
- [31] Gamache, R.R. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 52, N. 3/4, 481-499, (1994).
- [32] Gautier, D. et A. Robert, *Ann. Geophys* 20, 480, (1964).
- [33] Godon, M. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 47, 275 (1992).

- [34] Gordy, W. et R.L. Cook, "*Microwave Molecular Spectra*", *Jhon Wiley and Sons (ed.)*, (1984).
- [35] Guillou, C. *et al*, *J. Geophys. Res. (C)*, 101, 3775-3788, (1996).
- [36] Hartmann, G.K. *et al*, "*Zeeman splitting in the 61 GHz (9+) O<sub>2</sub> line in the mesosphere*". *Accepté au J. Geophys. Res.*, (1996).
- [37] Helminger, P.A. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.* 111, 66-72, (1985).
- [38] Hollinger, J.P., "*Special Sensor Microwave/Imager user's guide*", *Naval Research Laboratory, USA*, (1987).
- [39] Herzberg, G., "*Spectra of Diatomic Molecules*", *Van Nostrand Reinhold Company*, (1950).
- [40] 1992 HITRAN Data Base. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, Vol. 48, 469-507 (1992).
- [41] Houghton, J.T. "*The physics of the atmospheres*", *Cambridge University Press*. (1986).
- [42] Kaplan, L.D., *J. Opt. Soc. Am.*, 49, 1004, (1959).
- [43] Kartcher, F., "*Détermination des profils atmosphériques de référence pour la mesure de constituants par spectrométrie d'absorption*". *Note interne du CNRM-Météo-France*. (Janvier 1990).
- [44] Kawabata, K. *et al*, *Rapport Tec. interne de l'Université de Nagoya*. (1995).
- [45] Lane, W.C. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 111, 320-326, (1985).
- [46] Lean, J.L. *et al*, *J. Geophys. Res.*, 87, 4973-4980, (1982).
- [47] Lefèvre, F. *Modèle REPROBUS, Météo-France (Toulouse), communication personnelle*, (1995).
- [48] Lenoir, W.B., *J. App. Phys.*, Vol. 38, N. 13, 5283-5290, (1967).
- [49] Lenoir, W.B., *J. Geophys. Res.*, 73, 361-376, (1968).
- [50] Liebe, H.J., *Radio Sci.*, 20, 1069, (1985).

- [51] Liebe, H.J., *Int. Journal of Infrared and Millimeter waves.*, Vol. 10, 631-650, (1989).
- [52] Liebe, H.J. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 48, N5/6, 629-642, (1992).
- [53] Liebe, H.J. *et al*, *AGARD 52nd Meeting (Palma de Mallorca, Espagne)*, (1993).
- [54] Lobsiger, E. *et al*, *J. Atmos. Terr. Phys.*, 48, 1153-1158, (1986).
- [55] Manney, G.L. *et al*, *J. Geophys. Res (D)*, 100, 2953-2972, (1995).
- [56] Melnick, G.J. *et al*, *Astrophys. Journal*, 416, L37, (1993).
- [57] Menten, K.M. *et al*, *Astrophys. Journal*, 450, L67, (1995).
- [58] Millet, J.C., *Thèse de doctorat, Univ. Paris VII*, (1984).
- [59] Mizushima, M. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 100, 303-315, (1983).
- [60] Monnanteuil, N. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 71, 399-413, (1978).
- [61] Monnanteuil, N. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 134, 176-182, (1989).
- [62] Nicolet, M., "*Etude des réactions chimiques de l'ozone dans la stratosphere*", *COVOS*, (1977).
- [63] Olivero, J.J., *et al*, *Geoph. Res. Lett.*, 13, N. 3, 197-200, (1986).
- [64] Pardo, J.R. *et al*, "Evidence of the Zeeman Splitting in the  $2_1 \rightarrow 0_1$  Rotational Transition of the atmospheric  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  Molecule from Ground-Based Measurements", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 54, N6, 931, (1995).
- [65] Pardo, J.R. *et al*, "Ground-Based Measurements of Middle Atmospheric Water Vapor at 183 GHz", accepté au *Journal of Geophysical Research (D)*, (1996).
- [66] Pardo, J.R. *et al*, "Inversion of Ground-Based Microwave Spectroscopic Observations of Minor Atmospheric Gases: Application to 7 Strong Ozone Rotational Resonances from 142 to 359 GHz", soumis à *Annales Geophysicae*, (1996).
- [67] Pardo, J.R. *et al*, "Comparison of direct radiative transfer models in the 60 GHz  $\text{O}_2$  band with SSM/T-1 and MSU observations ", *Conférence TOVS en Nouvelle Zélande*, (1995).

- [68] Peter, R., et K. Künzi, *Geoph. Res. Lett.*, 15, N. 11, 1173-1176, (1988).
- [69] Prather, M.J., "Journal of Geophysical Research, Vol 86, N. C6, 5325-5338, (1981).
- [70] Read, W. G. *et al*, *Geophys Res. Lett.*, 20, 1299, (1993).
- [71] Ricaud, P. *et al*, *Journal of Geophysical Research*, Vol. 96, N. D10, 18, 617-629, (1991).
- [72] Ricaud, P. *et al*, *Annales Geophysicae*, 12, 664-673, (1994).
- [73] Ricaud, P. *et al*, *Accepté au Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, (1996).
- [74] Rinsland, C.P. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 149, 474-480, (1991).
- [75] Rodgers, C.D., *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 14, N. 4, 609-624, (1976).
- [76] Rosenkranz, P.W., *IEEE Trans. Antenna Propagation*, 23, 498-506, (1975).
- [77] Rosenkranz, P.W., *J. Quant. Spect. Radiat. Transfer*, 39, N. 4, 287-297, (1988).
- [78] Rosenkranz P.W., *Chapitre 2 dans "Atmospheric Remote Sensing By Microwave Radiometry"*, M.A. Janssen, (ed.), *Wiley-Interscience, N.Y.*, (1993).
- [79] P.W. Rosenkranz et D.H. Stealin, *Radio Sci.*, 23, N. 5, 721-729, (1988).
- [80] Russell, J.M., *Adv. Space Res.*, 7, N. 9, 5-18, (1987).
- [81] Schaerer, G., et T. T. Wilheit, *Radio Sci.*, 14, 371, (1979).
- [82] Schnapf, A. (ed.), "The TIROS Meteorological Satellites, twenty five years: 1960-1985, in Monitoring Earth's Ocean, Land and Atmosphere from Space - Sensors, Systems and Applications", *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 97, 51-70, (1985).
- [83] Solomon, S. *et al*, *Nature (London)*, 321, 755-758, (1986).
- [84] Tabart, C., *Thèse de doctorat, Univ. Paris VI*, (1991).
- [85] Le Texier, H. *et al*, *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 114, 281-295, (1988).

- [86] Tinkham, M. et W.P. Strandberg, *Phys. Rev.*, Vol. 97, N. 4, 937-951, (1955).
- [87] Tinkham, M. et W.P. Strandberg, *Phys. Rev.*, Vol 97, N. 4, 951-966, (1955).
- [88] Tsou, J.J. *et al*, *J. Geoph. Res.*, 93, D5, 5255-5266, (1988).
- [89] Tsou, J.J., *et al*, *J. Geophys. Res. (D)*, 100, 3005-1016, (1995).
- [90] Ulaby, F.T., Moore, R.K., et A.K. Fung, "*Microwave Remote Sensing*" Vols. I, III, *Artech House inc.*, (1986).
- [91] "*U.S. Standar Atmosphere*", *U.S. Printing Office, Washington, D.C.*, (1962).
- [92] "*U.S. Committee On Extension to the Stnd. Atm.*", *U.S. Printing Office, Washington, D.C.*, (1976).
- [93] Vaughan, G., *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 110, 239-260, (1984).
- [94] Waters, J.W. *Thèse de doctorat, MIT*, (1970).
- [95] Waters, J.W. "*Limb Sounding*" in "*Atmospheric Remote Sensing By Microwave Radiometry*" (*M.A. Janssen, ed.*), *Wiley-Interscience, N.Y.*, (1993).
- [96] Waters, J.W. *et al*, *J. Geophys. Res. (D)*, 1996.
- [97] Watson, J.K.G., *J. Chem. Phys.*, Vol. 46, N. 5, 1935-1949, (1967).
- [98] Werbowetzki, A. (ed.), "*Atmospheric Sounding User's Guide*", *NOAA, U.S. Dept. of Commerce, Washington D.C.*, (1981).
- [99] Zommerfelds, W.C. *et al*, "*J. Geophys. Res.*", 94, 12819-12832, (1989).
- [100] Zuev, V.E. et V.S Komarov, "*Statistical Models of the Temperature and Gaseous Components of the Atmosphere*", *D. Reidel Publishing Comp.*, (1987).