



TRATTORIA 2015

COMPTE RENDU DE LA TABLE RONDE SPECTROSCOPIE ATMOSPHERIQUE

	Nom	et Affiliation
Rédigé par	Raymond ARMANTE	Laboratoire de Météorologie Dynamique Palaiseau
Et	Jean Michel HARTMANN	Laboratoire Interuniversitaire des systèmes atmosphériques

1. Description de la table ronde

Le but de cette table ronde était de faire le bilan de la spectroscopie dans tout le domaine spectral couvert par cet atelier. L'approche choisie au début de la table ronde n'a pas été de faire une présentation générale, mais plutôt d'aborder directement tous les points en s'appuyant sur une cinquantaine de transparents décrivant chaque problème abordé et certaines questions que l'on pouvait se poser autour.

La discussion a été structurée en parcourant dans l'ordre les 4 axes suivant :

- ✓ Les paramètres spectroscopiques et les bases de données associées que l'on met généralement en entrée des codes de transfert radiatif ;
- ✓ Les profils de raies : comment modélise t'on au mieux la forme spectrale de la raie ;
- ✓ Les effets spectralement étendus : comment modélise t'on au mieux l'absorption lorsque l'on ne peut accéder aux paramètres spectroscopiques directement ;
- ✓ Tous les autres points ...

2. Participants

21 personnes ont assistés à cette table ronde.

Affiliation / Laboratoire/Thèmes d'expertise : il n'y a pas eu de liste précise faite mais les personnes présentes étaient représentatives des différents domaines touchant à la spectroscopie de l'atmosphère : agence comme le CNES ; Météo-France ; industrie ; nombreux laboratoires (mais plus utilisateurs que spectroscopistes).

3. Compte-rendu des discussions et recommandations

1) Les paramètres spectroscopiques

En introduction de cette section, on a vu apparaître ces dernières années une multitude de bases de données spectroscopiques « spécialisées », c'est-à-dire qui ne contiennent pas forcément tous les paramètres nécessaires à la modélisation du transfert radiatif dans sa globalité, mais qui ont une ou deux spécificité(s) (exemple : mesure très précise de la position ou de l'intensité). Ces bases intéressent en général une communauté scientifique assez réduite. Ceci peut paraître en opposition avec des bases comme HITRAN ou GEISA qui cherchent à être les plus complètes possibles, mais qui ont dû faire des choix lors de chaque mise à jour. Il existe même des sites aujourd'hui qui permettent d'accéder à un grand nombre de ses bases.

Même si le choix fait n'est pas toujours le meilleur (le travail pour qualifier chaque jeux de données est très compliqué), il est apparu toujours très intéressant lors des discussions de disposer de ce genre de base qui synthétisent à un instant l'état de la spectroscopie de la molécule considérée.

Ensuite, et avec les instruments de plus en plus résolutifs spectralement, la qualification des erreurs sur les paramètres spectroscopiques redevient une priorité. En effet, leur impact ne se traduit pas simplement par un biais global lorsqu'on se compare à des mesures mais aussi de plus en plus par un écart-type ou/et des biais régionaux (impact important dans les modèles par exemple).

Aux débuts de IASI, une recommandation du groupe de travail ISSWG (IASI Sounding Science Working Group) a été d'associer à chaque paramètre spectroscopique de la base de données GEISA une incertitude. Cela est en général très difficile à faire et le constat aujourd'hui est que ces champs sont depuis de nombreuses années quasiment tous à 0. L'intérêt est cependant toujours d'actualité en particulier avec l'émergence de synergies entre les différents domaines spectraux, en particulier TIR, SWIR et UV-Vis ou des différences de précision trop importantes entre 2 domaines ont déjà montré que cela pouvait conduire à des instabilités lors des inversions.

Recommandation 1 : il est recommandé de continuer à garder ces paramètres d'incertitude dans la base de données GEISA et d'inciter les laboratoires à remplir ces champs pour au moins les paramètres principaux comme intensité, position

Il est des domaines spectraux pour lesquels il y a aujourd'hui peu de discussions autour de la qualité de ces paramètres spectroscopiques. C'est le cas par exemple des microondes. Ces derniers mois, des travaux autour de l'instrument Saphir ont montré des biais qui étaient d'autant plus grands que l'on s'éloignait du centre de la raie à 183 GHz. Ceci pourrait indiquer un problème dans les paramètres spectroscopiques, notamment pour la largeur à mi-hauteur.

Un atelier va se monter en juin pour travailler sur ce sujet, qui sera organisé par H. Brogniez.

Aujourd'hui encore, les codes de transfert radiatif reposent, pour cette région, sur des travaux anciens et sur une modélisation dite « liebe 93 », ou on a en fin de compte peu d'informations.

Il serait souhaitable de profiter de ces travaux autour de la raie à 183 GHz pour faire un état des lieux de la spectroscopie dans les micro-ondes et voir comment les raies et les continus sont modélisés dans ce domaine spectral.

2) Les profils de raie

Une fois les paramètres spectroscopiques de base abordés, la 2^{ème} source d'erreur dans les algorithmes de transfert radiatif peut provenir de la modélisation de la forme de la raie. Pendant longtemps, le profil très majoritairement utilisé a été le profil de Voigt.

Depuis la fin des années 90, les premiers effets importants observés autres que Voigt (même pour des instruments à basse résolution spectrale comme les radiomètres) ont été les phénomènes d'interférence entre raie (dit line mixing). Les premiers travaux ont été faits pour le CO₂ ou le LISA a proposé une méthode pour prendre en compte ces processus. A 15 µm, les écarts entre modélisation et observations se sont considérablement réduits. A 4.3 µm, il reste des écarts (en particulier en fin de bande) qui peuvent être importants.

Recommandation 2 : Avec des instruments futurs comme IASI-NG, l'utilisation de la bande à 4.3 µm pourrait améliorer considérablement les déterminations du profil de température. Il est

donc recommandé que des travaux soient menés pour améliorer la modélisation des effets de line mixing à 4.3 μm par des laboratoires comme le LISA.

Depuis, il a été démontré que les spectres atmosphériques de plusieurs molécules autres que CO_2 pouvaient être affectés par ces interférences. Avec l'essor du SWIR ces dernières années, des travaux ont été menés par le LISA pour O_2 . Comme pour CO_2 , et même si les améliorations déjà apportées sont considérables, il reste des défauts encore importants dans la modélisation du line mixing dans la bande A de l'oxygène.

Recommandation 3 : Avec des instruments comme OCO2 ou Microcarb, et avec les importantes mises à jour des paramètres spectroscopiques notées depuis HITRAN 2012, il est recommandé que le LISA réactualise la modélisation du line mixing de O_2 , et en fonction des résultats, qu'il voit comment encore les améliorer.

D'autres molécules comme CH_4 et HNO_3 ont été abordées, mais, hormis pour MERLIN où des travaux spécifiques ont été prévus, la modélisation actuelle à priori reste suffisante.

Ensuite, les discussions sont revenues sur les profils des raies isolées. En effet, la haute résolution spectrale nécessite de prendre en compte des phénomènes plus complexes que ceux qui se traduisent par un profil de Voigt, en particulier ceux liés à la vitesse des molécules. De nouveaux profils ont été proposés ces dernières années, mais encore beaucoup de travaux doivent être menés avant d'arriver à un consensus.

Le profil de Voigt reste pour l'instant le profil de référence, qui garde le meilleur compromis entre rapidité de calcul et précision (de l'ordre de 1%) et pour lequel des données généralement suffisantes sont disponibles.

3) Les effets larges

On entend par effets larges les absorptions qui ne peuvent être modélisées par des paramètres spectroscopiques et des profils de raie individuels. En général, cela correspond à des molécules « lourdes » ou dont la concentration est très importante, et pour lesquelles du coup les contributions des ailes lointaines des raies et de l'absorption induite par collision sont très importantes.

Dans ce cadre, on distingue les « sections efficaces » et les continus.

Les banques de données de sections efficaces que l'on peut trouver dans les bases HITRAN et GEISA sont très utilisées quel que soit le domaine spectral étudié. On y trouve des mesures de ces sections efficaces pour des couples de température et de pression donnés. Cependant, il est apparu que les jeux de couples mesurés ne sont pas suffisants pour la plupart des molécules pour bien représenter toutes les conditions dans l'atmosphère terrestre, et ceci pour la plupart des molécules étudiées.

Recommandation 5 : Il est recommandé que de nouveaux travaux soient faits pour que les couples Pression/Température soient plus représentatifs des conditions atmosphériques

Les résolutions spectrales (assez faibles, de l'ordre de 0.01 cm^{-1}) utilisées ne sont pas toujours adaptées à toutes les régions spectrales couvertes. On observe en particulier qu'il y a souvent dans les spectres un pic d'absorption très fort (branche Q) et très fin spectralement dont la description requiert une très bonne résolution.

Recommandation 6 : Même si, en général, les variations spectrales des sections efficaces sont lentes, il est recommandé que les résolutions spectrales de ces mesures en laboratoire soient suffisamment élevées pour que toutes les régions du spectre des molécules concernées soient bien représentées.

Pour des molécules comme O_2 et N_2 , dont les concentrations sont très importantes dans l'atmosphère, on préfère modéliser le fond continu (dû à l'absorption induite par collision) par un continuum. Dans ce cas, on a en général des mesures faites à température et à pression ambiante (1013 mb, 296 K) et on modélise la variation en température et en pression par des lois empiriques.

Il est un cas particulier pour H_2O . En effet, sa concentration n'est pas si importante et l'élargissement de ses raies n'empêche pas de remonter aux paramètres spectroscopiques. Cependant, les ailes des raies intenses s'étendent sur de larges domaines spectraux, et le nombre de transitions est tel que la somme de toutes ces ailes de raies crée aussi un fond continu sur le spectre. Le problème pour H_2O est que les contributions des ailes des raies ne peut pas être correctement modélisée à l'aide de profils de Voigt. Cela se traduit par un fond continu qu'il faut rajouter dans la modélisation.

Clough (Atmospheric and Environmental Research) a proposé une modélisation du continuum qui est, depuis de nombreuses années, une référence (CKD). Ce continuum a comme principal défaut qu'il prend en compte aussi les coupures des ailes de raies du code de transfert radiatif qu'il utilise (25 cm^{-1}), rendant ainsi quasi inutilisable ce continuum lorsque le code coupe les ailes plus loin (ou plus près).

Il est à noter qu'il y a des approches comme 4A/OP qui coupent les ailes de raies plus loin (environ 300 cm^{-1} pour H_2O) et qui du coup réajuste le continuum (utilisation de comparaisons « calc-obs »), proposant ainsi une autre version du continuum de Clough.

Même si cela reste assez proche de la forme du CKD, il serait intéressant de mettre à la disposition de la communauté, plus de versions du continuum de H_2O .

Peu d'approches autres que CKD ont été développées mais on peut noter les travaux de Ma et Tipping qui ont proposé une forme de raie alternative.

Il serait intéressant de voir ce que ce type d'approche permet de faire en les réimplantant dans les codes de transfert radiatif et en faisant des comparaisons avec la formulation classique de Clough.

3) Les autres effets

Le but était ici de faire le bilan des autres effets qu'il faudrait (ou faudra, à terme) prendre en compte ou étudier plus précisément.

Deux effets ont été mentionnés (effet Zeeman et Non-ETL).

Le premier, dans les microondes, a déjà été modélisé dans certains codes de transfert radiatif et ne semble pas nécessiter de raffinements.

Le 2^{ème} est le Non-ETL. Dans tout ce qui a précédé, les collisions moléculaires ont été supposées suffisamment efficaces pour imposer l'équilibre de sorte que les populations des niveaux ro-vibrationnels suivent la loi de Boltzman (Equilibre Thermodynamique Local). Sous l'effet du rayonnement (à haute altitude et de jour), les populations des niveaux d'énergie changent, pouvant créer, faute de compensation suffisante des collisions, une situation dite de déséquilibre (ou Non-ETL). Ce phénomène est long et complexe à modéliser, même si il n'a d'effet que dans certaines régions spectrales (par exemple 4.3 μm pour CO_2).

Une approche basée sur des pré-calculs (Look-Up Tables) a été développée. Elle a l'avantage d'être rapide. La deuxième fait le calcul littéralement mais est beaucoup plus longue (re-calcul des populations pour chaque transition vibrationnelle).

Il n'y pas eu de besoin exprimé sur le NETL pendant cette table ronde.

Cependant, avec des instruments comme IASI-NG où le bruit à 4.3 μm sera divisé par 2 ou par 4 (par rapport à IASI), l'utilisation de cette bande d'absorption de jour pourrait améliorer considérablement les inversions, notamment celle de la température pour les hautes couches de l'atmosphère.

Il serait souhaitable d'ici la tenue éventuelle d'un prochain Trattoria qu'un bilan soit fait en comparant par exemple les différentes méthodes développées.

Par manque de temps, la table ronde s'est terminée en mentionnant juste un dernier point que l'on aurait pu discuter : le spectre solaire.

Même si celui-ci est mieux défini maintenant qu'il y a quelques années, il représente toutefois une source d'incertitude non négligeable.

Il serait souhaitable que des travaux de caractérisation (à haute résolution spectrale) du spectre solaire (complémentaires de ceux déjà menés par G. Toon) soient menés dans les prochaines années.

4. Bilan

Les thèmes abordés pendant cette table ronde étaient très techniques. Les personnes présentes n'étant pour la plupart pas des spectroscopistes, les discussions autour de chaque point n'ont pu se faire en général qu'avec un nombre restreint d'intervenants (2/3 max), et donc pas forcément représentatives de toute une communauté.

Cependant, ces discussions ont semblé indiquer que les problèmes en spectroscopie dans le domaine de l'atmosphère soient assez bien cernés. Beaucoup de travaux ont ou vont commencer, et il sera nécessaire de quantifier le gain en précision de tous ces développements et leur nouvelles limitations.

Avec, à l'horizon, des missions spatiales futures comme MERLIN, IASI-NG, OCO-2, ... , on devrait avoir tout le matériel pour faire ce bilan dans les quelques années à venir (2020).

Il a cependant été remonté un dernier point au moment de clore cette table ronde par les utilisateurs. **Ce point est en connexion avec la table ronde parlant des aérosols.**

La spectroscopie des aérosols, en particulier les indices complexes de réfraction, est actuellement très limitée et représente la principale source d'incertitude pour l'inversion des paramètres aérosols par télédétection. Concrètement, il faut comme pour les sections efficaces, plus de données, avec une meilleure résolution spectrale sur un domaine spectral le plus large possible et avec plus de couples Pression/Température.

Recommandation 7 : Même si des travaux s'engagent doucement dans ce sens, il est recommandé que ces travaux de spectroscopie en laboratoire soient intensifiés.