



## THESIS / THÈSE

### MASTER EN SCIENCES PHYSIQUES À FINALITÉ APPROFONDIE

#### Caractérisation de l'atmosphère de Vénus à partir de l'instrument VenSpec-H à bord de la sonde spatiale EnVision et des paramètres spectroscopiques du dioxyde de soufre

FABRIS, Lorenzo

*Award date:*  
2022

*Awarding institution:*  
Universite de Namur

[Link to publication](#)

#### General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

#### Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.



**UNIVERSITÉ  
DE NAMUR**

Mémoire réalisé à la Faculté des Sciences de l'Université de Namur

**Caractérisation de l'atmosphère de Vénus à partir  
de l'instrument VenSpec-H à bord de la sonde  
spatiale EnVision et des paramètres  
spectroscopiques du dioxyde de soufre**

**Promoteurs :**

Prof. Muriel Lepère (UNamur)  
Dr. Séverine Robert (BIRA-IASB)

**Encadrant :**

Dr. Bastien Vispoel (UNamur)

Travail présenté en vue de l'obtention du grade académique  
de Master en Sciences Physiques à Finalité Approfondie

Lorenzo Fabris

Juin 2022

# Remerciements

J'aimerais exprimer toute ma gratitude aux personnes ayant contribué à la réalisation de ce mémoire.

Tout d'abord, je tiens à remercier Prof. Muriel Lepère pour le soutien qu'elle m'a apporté lors de ces deux années de Master. Le temps qu'elle m'a accordé et ses précieux conseils m'ont fait grandir en tant que physicien. Ce travail de fin d'étude n'aurait pas été possible sans son implication.

Je souhaite également adresser mes plus sincères remerciements à Dr. Séverine Robert pour son excellent encadrement. Sa rigueur, son organisation et ses nombreuses remarques m'ont permis de réaliser un travail précis, tout en découvrant les joies de la recherche scientifique. Ce fût un réel plaisir d'avancer et de progresser à ses côtés.

Par ailleurs, je suis extrêmement reconnaissant de l'aide fournie par Dr. Bastien Vispoel lors de ce mémoire. Il m'a transmis une partie de ses connaissances et de sa compréhension de la nature, avec une grande sympathie et beaucoup de patience. Malgré ses propres recherches, Dr. Bastien Vispoel a pris le temps de répondre à chacune de mes interrogations le plus soigneusement possible et avec le sourire tout au long de l'année.

Un énorme merci aussi à toute l'équipe du Laboratoire Lasers et Spectroscopies de la Faculté des Sciences de l'Université de Namur (UNamur) pour m'avoir si généreusement accueilli.

Enfin, je remercie Dr. Ann Carine Vandaele pour m'avoir permis de réaliser ce mémoire dans son équipe à l'Institut royal d'Aéronomie Spatiale de Belgique (BIRA-IASB). Grâce à cette magnifique expérience, j'ai rencontré des scientifiques du monde entier, avec lesquels j'ai pu échanger et apprendre des concepts physiques complexes, me formant ainsi un peu plus aux sciences atmosphériques.

UNIVERSITÉ DE NAMUR  
FACULTÉ DES SCIENCES  
Enseignement du Département de Physique  
Rue de Bruxelles 61 - 5000 Namur  
Téléphone: + 32(0)81.72.44.90 - Téléfax: + 32(0)81.72.44.64  
E-mail: enseignement.physique@unamur.be - <http://www.unamur.be>

## Caractérisation de l'atmosphère de Vénus à partir de l'instrument VenSpec-H à bord de la sonde spatiale EnVision et des paramètres spectroscopiques du dioxyde de soufre

Lorenzo Fabris

### Résumé

Ce mémoire vise à analyser les performances de l'instrument VenSpec-H du satellite EnVision, qui sera envoyé en orbite autour de Vénus en 2031, et à étudier l'impact des paramètres spectroscopiques du dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ) sur la détermination de son abondance au sein de l'atmosphère vénusienne. Pour ce faire, des spectres côté jour et côté nuit ont d'abord été simulés en visée nadir dans l'infrarouge moyen autour de  $4000 \text{ cm}^{-1}$ , pour différentes résolutions spectrales, valeurs du rapport signal sur bruit (SNR) et abondances *a priori* de  $\text{SO}_2$  ainsi que divers ensembles de données spectroscopiques de la molécule. Par la suite, ces spectres atmosphériques ont été inversés en exploitant la méthode de l'estimation optimale de façon à déduire le rapport de mélange volumique (VMR) de  $\text{SO}_2$  en colonne et en profil. Ces calculs numériques ont été réalisés grâce au logiciel ASIMUT-ALVL, développé par l'Institut royal d'Aéronomie Spatiale de Belgique (BIRA-IASB).

Les résultats montrent qu'en l'absence de bruit, la résolution spectrale de VenSpec-H est suffisamment élevée pour retrouver précisément l'abondance atmosphérique de  $\text{SO}_2$ . Toutefois, en diminuant le rapport signal sur bruit, la solution déduite s'écarte de l'*a priori*, témoignant d'une moindre qualité des spectres atmosphériques. En conséquence, la quantité d'information tirée des spectres diminue avec un plus faible SNR. Nous constatons également que les paramètres spectroscopiques du  $\text{SO}_2$  jouent un rôle majeur dans ces inversions spectrales, c'est-à-dire sur la valeur déduite du VMR.

Mots-clés : atmosphère de Vénus, EnVision, VenSpec-H, spectre atmosphérique, inversion spectrale, résolution spectrale, rapport signal sur bruit, dioxyde de soufre, paramètres spectroscopiques, planétologie, spectroscopie moléculaire.

Master en Sciences Physiques  
Finalité Approfondie

Juin 2022

Promoteurs : M. Lepère, S. Robert

Encadrant : B. Vispoel

UNIVERSITÉ DE NAMUR  
FACULTÉ DES SCIENCES  
Enseignement du Département de Physique  
Rue de Bruxelles 61 - 5000 Namur  
Téléphone: + 32(0)81.72.44.90 - Téléfax: + 32(0)81.72.44.64  
E-mail: enseignement.physique@unamur.be - <http://www.unamur.be>

## Characterisation of the Venus atmosphere from the VenSpec-H instrument on board the EnVision spacecraft and the spectroscopic parameters of sulphur dioxide

Lorenzo Fabris

### Abstract

This Master thesis aims at analysing the performance of the VenSpec-H instrument of the EnVision satellite, which will be launched in orbit around Venus in 2031, and at studying the impact of the spectroscopic parameters of sulphur dioxide (SO<sub>2</sub>) on the determination of its abundance in the Venusian atmosphere. To this end, day- and night-side spectra were first simulated at nadir in the mid-infrared near 4000 cm<sup>-1</sup>, for various spectral resolutions, signal-to-noise ratio (SNR) values, *a priori* abundances of SO<sub>2</sub> and spectroscopic data sets of the molecule. Further, these atmospheric spectra were inverted using the optimal estimation method in order to determine the volume mixing ratio (VMR) of SO<sub>2</sub> in column and profile. These numerical calculations were performed with the ASIMUT-ALVL software, developed by the Royal Belgian Institute for Space Aeronomy (BIRA-IASB).

The results show that in the absence of noise, the spectral resolution of VenSpec-H is good enough to accurately retrieve the atmospheric abundance of SO<sub>2</sub>. However, by decreasing the signal-to-noise ratio, the deduced solution deviates from the *a priori* one, indicating a lower quality of the atmospheric spectra. Hence, the amount of information derived from the spectra decreases with a lower SNR. We also find that the spectroscopic parameters of the SO<sub>2</sub> play a major role in these spectral inversions, that is, on the value of the retrieved VMR.

Keywords: Venus atmosphere, EnVision, VenSpec-H, atmospheric spectrum, spectral inversion, spectral resolution, signal-to-noise ratio, sulphur dioxide, spectroscopic parameters, planetology, molecular spectroscopy.

Master in Physical Sciences  
Physics-based research focus

June 2022  
Promoters: M. Lepère, S. Robert  
Supervisor: B. Vispoel

# Table des matières

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introduction</b>  | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Planète Vénus et mission spatiale EnVision</b>                    | <b>2</b>  |
| 2.1      | Description générale de la planète . . . . .                         | 2         |
| 2.2      | Sonde spatiale EnVision . . . . .                                    | 4         |
| 2.3      | Spectromètre VenSpec-H . . . . .                                     | 5         |
| 2.3.1    | Description générale . . . . .                                       | 5         |
| 2.3.2    | Design de l'instrument . . . . .                                     | 6         |
| 2.3.3    | Performances de l'instrument . . . . .                               | 7         |
| <b>3</b> | <b>Spectroscopie moléculaire</b>                                     | <b>8</b>  |
| 3.1      | Définitions générales . . . . .                                      | 8         |
| 3.2      | Energie de vibration . . . . .                                       | 9         |
| 3.3      | Energie de rotation . . . . .  | 10        |
| 3.4      | Energie de ro-vibration . . . . .                                    | 10        |
| 3.5      | Règles de sélection . . . . .  | 11        |
| <b>4</b> | <b>Profils spectraux</b>   | <b>11</b> |
| 4.1      | Principe général . . . . .   | 11        |
| 4.2      | Facteurs d'élargissement . . . . .                                   | 12        |
| 4.2.1    | Largeur naturelle . . . . .  | 12        |
| 4.2.2    | Largeur Doppler . . . . .  | 13        |
| 4.2.3    | Largeur et déplacement collisionnels . . . . .                       | 13        |
| 4.3      | Profil de Voigt . . . . .  | 14        |
| <b>5</b> | <b>Transfert radiatif</b>  | <b>15</b> |
| 5.1      | Équation générale et solution . . . . .                              | 15        |
| 5.2      | Modèle d'atmosphère plan-parallèle . . . . .                         | 17        |
| 5.3      | Simulation de spectres atmosphériques . . . . .                      | 18        |
| 5.4      | Problèmes inverses par la Méthode de l'Estimation Optimale . . . . . | 19        |
| 5.4.1    | Solution maximale a posteriori . . . . .                             | 19        |
| 5.4.2    | Covariance de la solution . . . . .                                  | 21        |
| 5.4.3    | Qualité de la solution . . . . .                                     | 22        |
| <b>6</b> | <b>État de l'art</b>   | <b>22</b> |
| 6.1      | Observations du SO <sub>2</sub> dans l'atmosphère de Vénus . . . . . | 22        |
| 6.1.1    | Mesures au sein et au-dessus des nuages . . . . .                    | 22        |
| 6.1.2    | Mesures sous les nuages . . . . .                                    | 24        |
| 6.2      | Paramètres spectroscopiques du SO <sub>2</sub> . . . . .             | 25        |
| <b>7</b> | <b>Résultats et discussions</b>                                      | <b>27</b> |
| 7.1      | Étude de la résolution spectrale . . . . .                           | 27        |
| 7.2      | Étude du rapport signal sur bruit . . . . .                          | 31        |
| 7.3      | Étude de l' <i>a priori</i> . . . . .                                | 36        |
| 7.4      | Étude des paramètres spectroscopiques du SO <sub>2</sub> . . . . .   | 41        |
| <b>8</b> | <b>Conclusions et perspectives</b>                                   | <b>45</b> |
|          | <b>Références</b>  | <b>46</b> |

# Glossaire

Dans ce manuscrit, divers acronymes sont employés pour décrire les unités et grandeurs physiques, les domaines spectraux ainsi que les instruments effectuant des mesures atmosphériques. Ceux-ci sont listés ci-dessous.

- UV : UltraViolet ;
- IR : InfraRouge ;
- UA : Unité Astronomique ;
- ppm : Part Per Million ( $10^{-6}$ ) ;
- ppb : Part Per Billion ( $10^{-9}$ ) ;
- ppmv : Part Per Million by Volume ;
- SNR : Signal-to-Noise Ratio ;
- VMR : Volume Mixing Ratio ;
- DOF : Degree Of Freedom ;
- OEM : Optimal Estimation Method ;
- VenSAR : Venus Synthetic Aperture Radar ;
- SRS : Subsurface Radar Sounder ;
- VenSpec-M : Venus Spectrometer for Mapping ;
- VenSpec-U : Venus Spectral imager in Ultraviolet ;
- VenSpec-H : Venus Spectrometer with High resolution ;
- IUE : International Ultraviolet Explorer ;
- PVO/UVS : Pioneer Venus Orbiter/UltraViolet Spectrometer ;
- SPICAV : SPectroscopy for Investigation and Characterizations of Atmosphere of Venus ;
- SOIR : Solar Occultation in the InfraRed ;
- VIRTIS-H : Visible and InfraRed Thermal Imaging Spectrometer with High resolution ;
- HST/STIS : Télescope Spatial Hubble/Space Telescope Imaging Spectrograph ;
- TJCM : Télescope Terrestre James Clerk Maxwell ;
- ALMA : Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array ;
- TEXES : Texas Echelon-Cross-Echelle Spectrograph ;
- IRTF : InfraRed Telescope Facility ;
- ISSI : International Space Science Institute.

## Avant-propos

La théorie présentée dans ce mémoire fait référence à quelques constantes physiques fondamentales [1], soit

- la constante de Planck :  $h = 6,626\ 070\ 040(80) \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ ,
- la constante de Boltzmann :  $k_B = 1,380\ 648\ 52(79) \cdot 10^{23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ ,
- la vitesse de la lumière (dans le vide) :  $c = 299\ 792\ 458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ,
- la constante pi :  $\pi = 3,141592 \dots$

Par ailleurs, nous travaillons ici avec le nombre d'onde  $\nu$  [ $\text{cm}^{-1}$ ], grandeur bien connue de la planétologie et de la spectroscopie moléculaire qui est liée à la longueur  $\lambda$  [m], l'énergie  $E$  [J], la pulsation  $\omega$  [ $\text{s}^{-1}$ ] ou la fréquence  $f$  [Hz] par les relations suivantes,

$$f = \frac{v}{\lambda} = \frac{E}{h}, \quad (1)$$

$$\omega = 2\pi f, \quad (2)$$

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = \frac{E}{hc}. \quad (3)$$

Dans le cadre de cette étude, on suppose la vitesse de l'onde électromagnétique  $v$  égale à la vitesse de la lumière dans le vide. À titre d'exemple, une énergie valant 1 eV, c'est-à-dire  $1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ , équivaut à un nombre d'onde de  $\sim 8000 \text{ cm}^{-1}$ .

En outre, les quantités de gaz dans un milieu atmosphérique sont couramment exprimées par le rapport de mélange volumique (volume mixing ratio, en anglais), tel que

$$VMR = \frac{N_i}{N_{tot}}, \quad (4)$$

où  $N_i$  désigne la concentration du gaz  $i$  et  $N_{tot}$  représente la concentration atmosphérique totale [2].

Remarquons également que les grandeurs vectorielles seront notées en caractères gras tout au long de ce manuscrit.

# 1 Introduction

Vénus est une planète tellurique hostile à la vie. Depuis quelques décennies, la communauté scientifique tente d'identifier précisément sa composition afin de mieux comprendre les processus physico-chimiques et la dynamique de son atmosphère. On sait aujourd'hui que le dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ) y joue un rôle clé puisqu'il est un traceur de l'activité volcanique de la planète et intervient dans la formation d'épaisses couches nuageuses d'eau et d'acide sulfurique couvrant totalement son atmosphère sur plusieurs kilomètres d'altitude. Le cycle chimique d'espèces moléculaires, la circulation générale des vents et le bilan radiatif de Vénus sont considérablement affectés par la présence de ces nuages [2].

De nombreuses études et missions spatiales ont apporté des informations sur l'abondance de  $\text{SO}_2$  au sein de l'atmosphère vénusienne. Cependant, la variabilité spatiale et temporelle reste encore peu connue et comprise par les modèles théoriques. Dans ce contexte, la mission spatiale EnVision a récemment été sélectionnée par l'Agence Spatiale Européenne (ESA) et devrait permettre la caractérisation de l'état actuel de Vénus, de son évolution ainsi que de son activité volcanique potentielle. Dans cette optique, la sonde EnVision sera lancée en 2031 avec à son bord divers instruments de mesure comme le spectromètre infrarouge VenSpec-H, qui renseignera sur la concentration de traces atmosphériques telles que le  $\text{SO}_2$  [3].

L'Institut royal d'Aéronomie Spatiale de Belgique (BIRA-IASB) dispose d'une solide expertise, tant expérimentale que théorique, dans l'étude des atmosphères planétaires et de l'espace extra-atmosphérique. Fondé en 1964, cet organisme Fédéral de recherche scientifique est spécialisé dans le développement et l'exploitation d'instruments effectuant des mesures atmosphériques ainsi que dans l'interprétation théorique et numérique de phénomènes physico-chimiques se produisant autour d'une planète ou dans l'espace. D'ici au lancement du satellite EnVision, BIRA-IASB s'occupera notamment de la conception de l'instrument VenSpec-H.

Ce mémoire consiste ainsi en une analyse de sensibilité des spectres atmosphériques et des inversions spectrales aux caractéristiques instrumentales de VenSpec-H ainsi qu'aux paramètres spectroscopiques du dioxyde de soufre. En particulier, l'impact de la résolution spectrale et du rapport signal sur bruit sur la qualité des spectres et la précision de l'abondance de  $\text{SO}_2$  déduite est évalué. En outre, nous avons étudié l'effet de deux ensembles de paramètres spectroscopiques sur l'inversion spectrale, l'un correspondant au mélange gazeux  $\text{SO}_2\text{-CO}_2$  et l'autre associé au système  $\text{SO}_2\text{-Air}$ .

Ce manuscrit se divise en deux parties. La première donne quelques notions théoriques nécessaires à la bonne compréhension des résultats. Plus précisément, la planète Vénus et l'instrument VenSpec-H de la sonde EnVision sont présentés, les concepts de base de la spectroscopie moléculaire et des profils spectraux sont abordés et la théorie du transfert radiatif est expliquée de façon à introduire le modèle direct et la méthode de l'estimation optimale pour l'inversion spectrale dans ASIMUT-ALVL. La seconde partie comprend d'une part, l'état de l'art des observations du  $\text{SO}_2$  dans l'atmosphère de Vénus ainsi que des paramètres spectroscopiques de la molécule et d'autre part, une discussion des résultats obtenus lors de ce travail.

## 2 Planète Vénus et mission spatiale EnVision

Cette section décrit la planète Vénus ainsi que l'instrument VenSpec-H à bord de la sonde spatiale EnVision. En particulier, les informations concernant Vénus sont tirées des thèses de Rossi [4] et de Lefèvre [5], en suivant le cours de sondage et physique de l'atmosphère de Vandaele [2]. La présentation d'EnVision et de VenSpec-H, quant à elle, se base sur les références [6–10].

### 2.1 Description générale de la planète

Vénus est la seconde planète de notre système solaire et la plus proche voisine de la Terre. En comparant les principales caractéristiques de ces planètes telluriques (Tab. 1), on observe des similitudes, comme leur masse ou leur taille. Pour cette raison, Vénus est souvent considérée comme la sœur jumelle de la Terre. Cependant, elles diffèrent en de nombreux points. En effet, Vénus met moins de temps pour tourner autour du soleil que sur elle-même, et cette lente rotation se produit dans le sens rétrograde, c'est-à-dire d'Est en Ouest. De plus, la faible inclinaison de son axe de rotation et l'excentricité presque nulle de son orbite, lui conférant une forme quasi-circulaire, implique l'absence de phénomènes climatiques saisonniers tels que sur Terre.

| Caractéristiques                           | Vénus  | Terre   |
|--|--|---|
| Distance au Soleil [UA]                    | 0,72   | 1   |
| Rayon [km]                                 | 6051   | 6378  |
| Masse [kg]                                 | $4,87 \cdot 10^{24}$   | $5,97 \cdot 10^{24}$  |
| Gravité [ $\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$ ] | 8,87   | 9,81  |
| Excentricité [°]                           | 0,0068   | 0,0167  |
| Obliquité [°]                              | 177,36   | 23,4  |
| Saison(s)                                  | Non  | Oui, 4 saisons  |
| Période de rotation [jour/heure]           | -243,0 j   | 23,9 h  |
| Période de révolution [jour]               | 224,7  | 365,2   |
| Pression en surface [atm]                  | 92   | 1   |
| Température en surface [K]                 | 737  | 288   |
| Composition atmosphérique                  | CO <sub>2</sub> : 96,5%, N <sub>2</sub> : 3,5%<br>SO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, OCS,<br>HF, CO, ... : traces | N <sub>2</sub> : 78,0%, O <sub>2</sub> : 21,0%<br>Ar, CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O,<br>CH <sub>4</sub> , N <sub>2</sub> O, ... : traces |

TAB. 1: Comparaison des principales caractéristiques de Vénus et de la Terre [4,5]. Pour information, 1 UA = 149 597 870 700 m. Le signe « - » pour la période de rotation de Vénus indique que la planète tourne sur elle-même dans le sens rétrograde, inverse à celui de la Terre.

Par ailleurs, en plus des températures et des pressions extrêmes en surface, l'atmosphère vénusienne est hostile à la vie. En effet, des vents violents circulent à des vitesses bien plus élevées que la vitesse de rotation de la planète elle-même, de sorte que Vénus est dite en « super-rotation ».

En outre, d'épaisses couches nuageuses composées principalement de vapeur d'eau et d'acide sulfurique sont présentes sur plusieurs kilomètres d'altitude. Ces nuages influencent la dynamique des vents à basses et hautes altitudes, la chimie du soufre et le bilan radiatif de la planète, impliquant un fort albédo<sup>1</sup> ainsi qu'un effet de serre important.

Dès lors, l'atmosphère de Vénus se décompose en différentes couches selon l'altitude : on distingue la troposphère (0 - 45 km), la région des nuages (45 - 70 km), la mésosphère (70 - 110 km) et la thermosphère (>110 km). L'absence de stratosphère, en comparaison à la Terre, résulte de l'absorption des rayonnements UV par l'eau, le dioxyde de soufre et les aérosols présents au niveau des nuages. La température atmosphérique (Fig. 2.1) décroît ainsi jusqu'à une altitude d'environ 140 km, puis elle devient constante. Toutefois, dans la haute atmosphère de Vénus, de fortes variations temporelles des températures sont observées entre le jour et la nuit en raison des réflexions du rayonnement solaire sur les nuages.

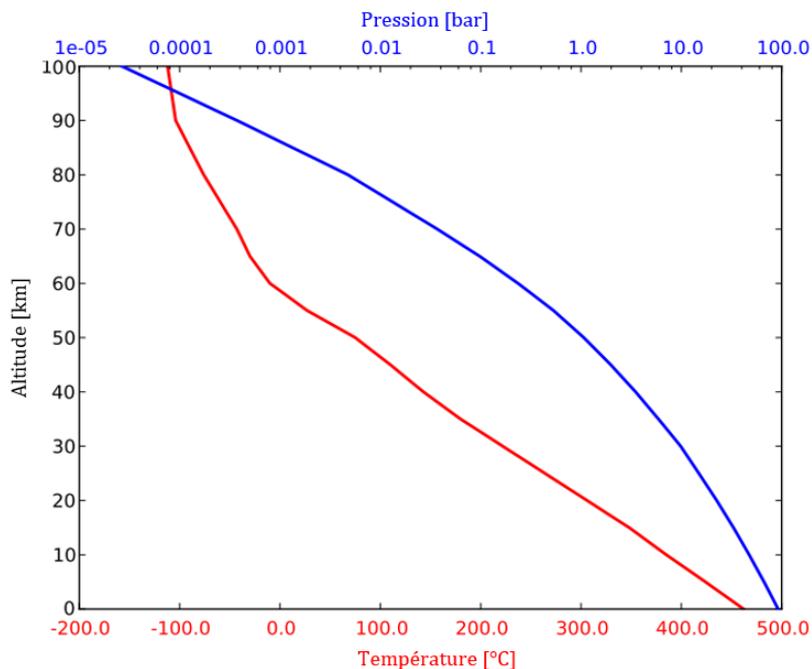


FIG. 2.1: Profils de températures [°C] (en rouge) et de pressions [bar] (en bleu) en fonction de l'altitude [km] dans l'atmosphère de Vénus. Au-delà de 100 km d'altitude, des différences significatives de températures apparaissent entre le jour et la nuit du fait de la réflexion du rayonnement solaire par les nuages. Image extraite de la référence [4].

Le dioxyde de soufre, correspondant à la plus abondante des espèces soufrées de la troposphère vénusienne (130 ppm), est une trace de l'activité volcanique potentielle de la planète et participe à la formation des nuages. En fait, par un processus de photodissociation, le dioxyde de soufre forme du trioxyde de soufre ( $\text{SO}_3$ ) qui peut se combiner avec de la vapeur d'eau ( $\text{H}_2\text{O}$ ) pour produire de l'acide sulfurique ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ). L'étude de cette molécule est donc d'un intérêt considérable pour comprendre davantage le volcanisme, les différents processus physico-chimiques et la dynamique atmosphérique de cette planète.

1. L'albédo est une grandeur sans dimension dont la valeur est comprise entre 0 et 1, qui renseigne sur la quantité de rayonnement incident réfléchi ou diffusé par une planète [2].

À titre de comparaison, la troposphère terrestre (0-15 km) contient moins de 1 ppb de  $\text{SO}_2$  [11]. Les sources naturelles de dioxyde de soufre sont la combustion de la biomasse et les éruptions volcaniques. Néanmoins, la combustion de charbon et de pétrole ainsi que les activités anthropiques constituent la principale source d'émission de  $\text{SO}_2$ , ce gaz étant abondamment utilisé dans l'industrie chimique, biologique et agroalimentaire pour la conservation des aliments.

Un autre moyen pour en apprendre davantage sur l'atmosphère de Vénus consiste à étudier le rapport des concentrations de deutérium (D) et d'hydrogène (H), approximativement 120 fois plus élevé que celui de la Terre. En fait, l'atmosphère de Vénus contient environ 30 ppm d'eau sous forme de vapeur qui interagit avec le rayonnement ultraviolet de sorte que ces molécules se décomposent en atomes d'oxygène, et d'hydrogène ou de deutérium. Or, l'isotope de deutérium est plus lourd et s'échappe donc plus difficilement de l'atmosphère que l'hydrogène. Le rapport isotopique D/H élevé signifie ainsi qu'une grande quantité d'eau s'est échappée vers l'espace, impactant notamment le climat de la planète. La détermination précise de ce ratio renseignerait sur la variabilité atmosphérique et par conséquent, sur la formation des nuages et le volcanisme [2].

Ces curiosités, intriguant les planétologistes depuis des années, donnent alors lieu à de nouvelles études et missions spatiales toujours plus innovantes les unes que les autres, telles que le satellite EnVision discuté ci-après (Section 2.2).

## 2.2 Sonde spatiale EnVision

EnVision est une sonde spatiale qui devrait permettre de caractériser l'état actuel de Vénus, son évolution et son activité volcanique potentielle. L'objectif consiste ainsi à comprendre comment cette planète est devenue si différente de la Terre. En préparation depuis quelques années, la mission a été pré-sélectionnée en 2018 pour un développement de concept (phase A), puis choisie en juin 2021 pour passer à l'étape suivante, visant à modéliser de manière détaillée la sonde spatiale et ses différents instruments (phase B).

Dans ce contexte, le lancement d'EnVision est prévu pour novembre 2031 à bord d'une fusée Ariane 62. Le trajet pour atteindre Vénus devrait prendre 15 mois et sera suivi d'une mise en orbite de 16 mois. Plus précisément, l'engin se positionnera sur une orbite basse, presque polaire, de Vénus qui présente une inclinaison de 87 à 89 degrés. EnVision se déplacera ensuite à une altitude comprise entre 220 km et 540 km, avec une période orbitale d'approximativement 92 minutes et pendant 4 années terrestres.

La sonde spatiale est équipée de divers instruments de mesure, à savoir les radars VenSAR et SRS étudiant les propriétés de la surface, et trois spectromètres VenSpec -M, -H et -U permettant de déterminer la composition surfacique et atmosphérique de Vénus. De plus, des expériences de radioscience seront réalisées pour analyser le champ gravifique de la planète, et déduire le profil de température et de concentration atmosphérique de l'acide sulfurique. Ces instruments, élaborés et caractérisés par un grand nombre de laboratoires dans le monde, permettront ainsi de sonder l'atmosphère vénusienne dans l'ultraviolet-visible, l'infrarouge, les micro-ondes et les hautes fréquences (*i.e.* les ondes radio). En particulier, l'Institut royal d'Aéronomie Spatiale de Belgique se concentrera sur le spectromètre infrarouge VenSpec-H, décrit ci-dessous (Section 2.3).

## 2.3 Spectromètre VenSpec-H

### 2.3.1 Description générale

L'instrument VenSpec-H étudiera l'abondance de traces atmosphériques impliquées notamment dans la formation des nuages vénusiens ou en lien avec une activité volcanique potentielle, comme l'eau et le dioxyde de soufre.

Dans cette optique, des mesures seront effectuées en géométrie nadir côté nuit (nightside, en anglais) et côté jour (dayside, en anglais) de Vénus. En d'autres termes, le spectromètre pointera vers le centre de la planète de façon à mesurer le rayonnement interagissant avec le milieu. En nightside, le signal capté par l'instrument provient de la surface et de l'atmosphère, apportant ainsi une information sur la composition en-dessous des nuages, à basse altitude. Par contre, en dayside, le signal mesuré est principalement composé du rayonnement solaire réfléchi par les nuages et interagissant avec la matière dans la haute atmosphère de Vénus. Dans ce cas, la composition au-dessus des nuages, à haute altitude, peut être déduite.

Une représentation schématique de la visée nadir de VenSpec-H côté nuit et côté jour est montrée à la Figure 2.2.

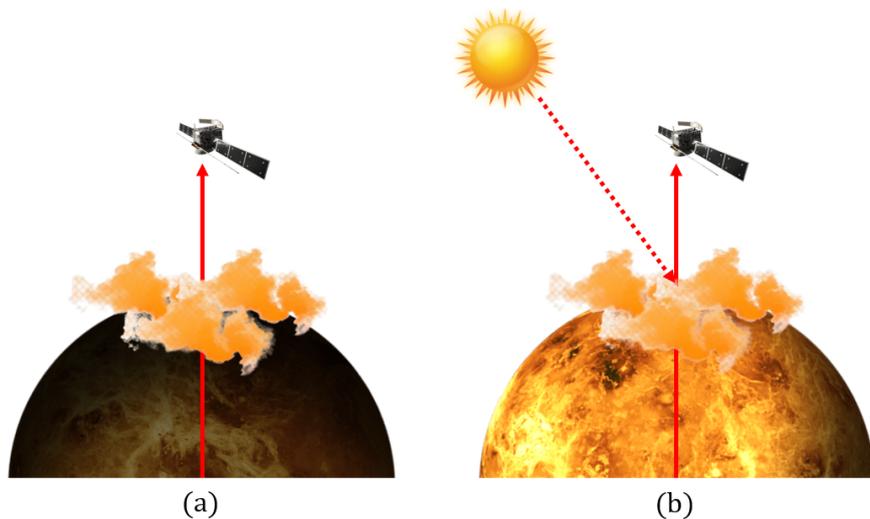


FIG. 2.2: Géométrie d'observation en nadir de l'instrument VenSpec-H à bord de la sonde spatiale EnVision, en orbite autour de Vénus. (a) En nightside, la radiance mesurée (flèche en trait plein) est issue de la surface et de l'atmosphère vénusienne. (b) En dayside, le rayonnement solaire (flèche en pointillés) réfléchi par les nuages vient s'ajouter à ce rayonnement thermique.

Les mesures seront prises dans plusieurs fenêtres de transparence infrarouges du dioxyde de carbone, c'est-à-dire dans des régions spectrales caractérisées par une absorption ou une émission minimale de rayonnement IR par le  $\text{CO}_2$ . Ceci permet une meilleure détection de traces atmosphériques comme le  $\text{SO}_2$ .

Plus précisément, quatre bandes spectrales sont ciblées (Fig. 2.3) :  $1,16 - 1,18 \mu\text{m}$  (B1),  $2,34 - 2,48 \mu\text{m}$  (B2),  $1,72 - 1,75 \mu\text{m}$  (B3) et  $1,37 - 1,39 \mu\text{m}$  (B4). Toutefois, pour des raisons instrumentales, la gamme spectrale B2 est elle-même divisée en deux bandes, la première étant définie entre  $2,34$  et  $2,42 \mu\text{m}$  (2a) tandis que la seconde s'étale de  $2,45$  à  $2,48 \mu\text{m}$

(2b). Par ailleurs, seules les bandes 1, 2a, 2b et 3 seront observées du côté nuit alors que les mesures du côté jour permettront d’analyser les bandes 2a, 2b et 4.

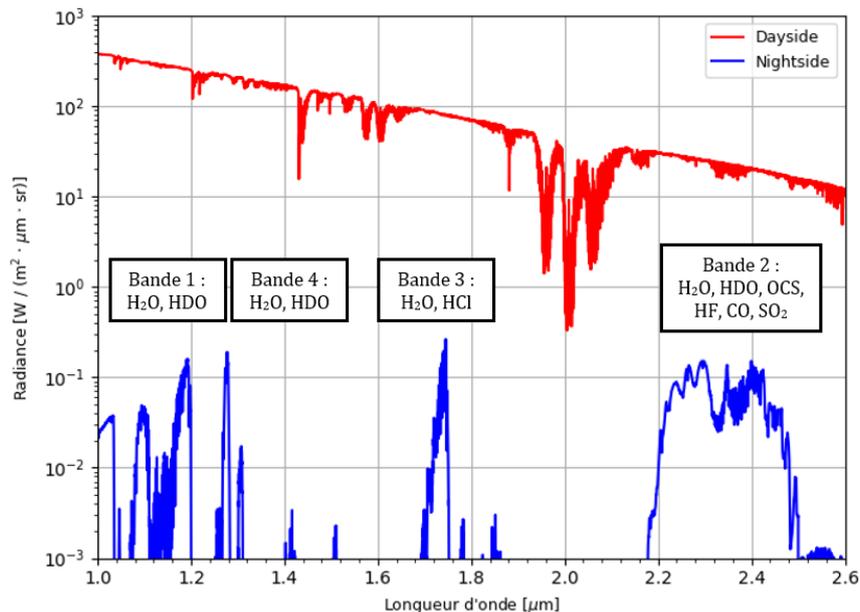


FIG. 2.3: Spectres atmosphériques côté jour (en rouge) et côté nuit (en bleu) de Vénus, montrant les bandes spectrales infrarouges ainsi que les molécules ciblées par le spectromètre VenSpec-H à bord de la sonde EnVision. La radiance  $[W/(m^2 \cdot \mu m \cdot sr)]$ , définie dans la Section 5, y est représentée selon une échelle logarithmique en fonction de la longueur d’onde  $[\mu m]$  du rayonnement.

### 2.3.2 Design de l’instrument

L’instrument VenSpec-H dispose d’un boîtier de commande électronique et d’une section spectrométrique, composée d’un banc optique refroidi et d’une section chaude (Fig. 2.4).

En particulier, le banc optique est constitué d’une fente d’entrée, d’une roue à filtres optiques, d’un réseau échelle et d’un ensemble de miroirs, dont l’un d’eux est parabolique. Cette section froide, se trouvant à une température de  $-45^\circ C$  de façon à minimiser le bruit de fond thermique, est placée à la suite de la section chaude maintenue à une température de  $+20^\circ C$ , qui comprend l’ouverture nadir de l’instrument, un autre ensemble de filtres optiques et le détecteur. Ce dernier est composé de 288 pixels dans la direction spatiale (nombre de lignes) et de 384 pixels dans la direction spectrale (nombre de colonnes). En outre, un mécanisme d’obturation protège l’instrument.

En pratique, les faisceaux lumineux mesurés au nadir par l’instrument traversent les filtres et sont rendus parallèles par réflexion sur le miroir parabolique. Par après, ces rayonnements se dirigent vers le réseau de diffraction et leurs différentes composantes spectrales sont séparées. Les photons infrarouges sont alors focalisés sur le détecteur.

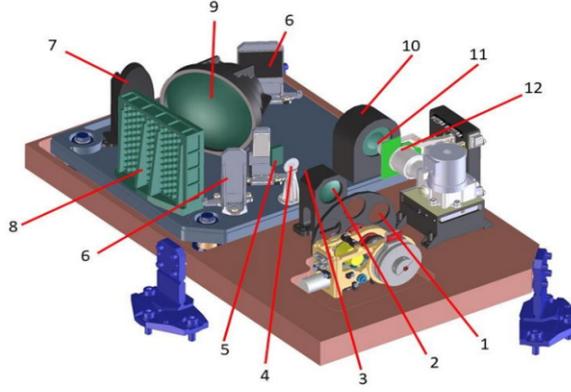


FIG. 2.4: Représentation schématique du spectromètre VenSpec-H à bord de la sonde spatiale EnVision. (1) Roue à filtres optiques. (2) Entrée de la section chaude. (3) Entrée de la section froide. (4) Assemblage de filtres optiques. (5) lame correctrice free-form. (6) Miroirs courbant le faisceau. (7) Miroir parabolique. (8) Réseau échelle. (9) Optique de collimation. (10) Optique du détecteur. (11) Sortie de la section froide. (12) Détecteur plan. Image extraite de la référence [6].

### 2.3.3 Performances de l'instrument

L'instrument VenSpec-H sera caractérisé par un pouvoir de résolution  $R = \frac{\nu}{\Delta\nu}$  d'environ 10 000, ce qui correspond à une résolution spectrale  $\Delta\nu$  d'approximativement  $0,4 \text{ cm}^{-1}$  pour des nombres d'onde  $\nu$  de la gamme B2 autour de  $4000 \text{ cm}^{-1}$ . De telles caractéristiques permettront ainsi de mesurer l'abondance de molécules comme  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HDO}$ ,  $\text{CO}$  et  $\text{SO}_2$ , avec une précision valant respectivement 3%, 5%, 1,5% et 1%. Ces observations devraient donc donner une information sur le rapport isotopique D/H avec une incertitude inférieure à 8% (Section 2.1).

| Observation | Bande spectrale | Gamme spectrale $\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ] | SNR/pixel | Molécules ciblées  |
|-------------|-----------------|---|-----------|--|
| Dayside     | 2a              | 2,34-2,42                                   | 780       | $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HDO}$ , $\text{OCS}$ , $\text{CO}$                 |
|             | 2b              | 2,45-2,48                                   | 1172      | $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HDO}$ , $\text{OCS}$ , $\text{SO}_2$ , $\text{HF}$ |
|             | 4               | 1,37-1,39                                   | 1197      | $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HDO}$  |
| Nightside   | 1               | 1,16-1,18                                   | 131       | $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HDO}$  |
|             | 2a              | 2,34-2,42                                   | 81        | $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HDO}$ , $\text{OCS}$ , $\text{CO}$                 |
|             | 2b              | 2,45-2,48                                   | 18        | $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HDO}$ , $\text{OCS}$ , $\text{SO}_2$ , $\text{HF}$ |
|             | 3               | 1,72-1,75                                   | 493       | $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HCl}$  |

TAB. 2: Résumé des performances attendues pour l'instrument VenSpec-H à bord de la sonde spatiale EnVision. Pour chaque condition d'observation et gamme spectrale, le rapport signal sur bruit est donné par pixel du détecteur, pour une valeur moyenne du signal et en considérant une température de  $-45^\circ\text{C}$ . Les molécules ciblées dans ces régions spectrales sont également listées [6].

Les performances d'un instrument dépendent également du rapport signal sur bruit. Un aperçu du SNR attendu pour chaque condition d'observation et gamme spectrale de VenSpec-H est donné dans la Table 2.

Le rapport signal sur bruit pour un pixel  $i$  du détecteur se calcule comme

$$SNR = \frac{S(i)}{N(i)}, \quad (2.1)$$

où  $S(i)$  correspond au rayonnement incident et  $N(i)$  représente le bruit. Ce dernier provient en fait de l'impact des photons sur le détecteur, du nombre fini de bits utilisés pour coder le signal mesuré, de l'électronique ainsi que de l'émission thermique des composants mécaniques et optiques de l'instrument.

Lors de ce mémoire, on s'est intéressés à l'impact de la résolution spectrale et du SNR sur les observations en dayside et en nightside de VenSpec-H autour de  $4000 \text{ cm}^{-1}$ . Ces analyses sont d'une grande importance pour adapter et optimiser la conception de l'instrument, en tenant compte des objectifs scientifiques de la mission. Pour réaliser cette étude de sensibilité, nous nous sommes focalisés sur la gamme spectrale 2b (Fig. 2.3), comprenant notamment une bande d'absorption du dioxyde de soufre. La Section 3 présente ainsi cette molécule au travers de la spectroscopie moléculaire, ce qui nous permettra par la suite d'introduire la théorie des profils spectraux (Section 4).

### 3 Spectroscopie moléculaire

La spectroscopie moléculaire est la science qui étudie l'interaction des rayonnements électromagnétiques avec la matière, quelque soit son état. Plus précisément, cette discipline vise à analyser l'absorption, l'émission ou la diffusion d'un rayonnement par des molécules en phase solide, liquide ou gazeuse. Ceci permet alors de déduire des informations physico-chimiques, par exemple l'agencement spatial des atomes ou la structure des niveaux d'énergie de ces espèces moléculaires.

Notre intérêt s'est donc porté ici sur le dioxyde de soufre, ou anhydride sulfureux ( $\text{SO}_2$ ). Il s'agit d'une molécule non linéaire et symétrique dans son état fondamental, qui est composée de deux atomes d'oxygène (O) et d'un atome de soufre (S). Ces derniers sont disposés de telle sorte que l'angle O-S-O soit d'environ  $120^\circ$ , pour des longueurs de liaisons S-O valant approximativement  $1,43 \text{ \AA}$ . Cette molécule appartient au groupe de symétrie  $C_{2v}$ , ce qui signifie qu'elle peut tourner d'un angle  $\theta = 180^\circ$  autour d'un axe de rotation d'ordre deux,  $C_2$ , compris dans deux plans de réflexion verticaux et perpendiculaires  $\sigma_v$  [12].

Quelques notions théoriques de la spectroscopie moléculaire en phase gazeuse sont données ci-dessous. Ces informations sont tirées essentiellement des ouvrages de Biéumont [13], Herzberg [14], Bernath [15] et Papousek [16].

#### 3.1 Définitions générales

En toute généralité, une molécule est une entité formée d'un ensemble d'atomes. Les propriétés du système sont déterminées entre autres par la nature, la structure spatiale et l'énergie de liaison des atomes qui le composent, tandis que sa stabilité est assurée par l'équilibre des forces répulsives et attractives impliquant les noyaux atomiques et les

électrons. L'énergie totale résultant de ces forces d'interaction est définie comme

$$E = E_{tr} + E_{el} + E_{vib} + E_{rot}, \quad (3.1)$$

où  $E_{tr}$  décrit le mouvement de translation de la molécule,  $E_{el}$  correspond au mouvement des électrons,  $E_{vib}$  est associé au mouvement oscillatoire de faible amplitude des noyaux atomiques autour de leur position d'équilibre et enfin, la rotation du système est représentée par  $E_{rot}$ .

À l'exception de l'énergie de translation, ces différentes contributions sont quantifiées et donnent lieu à des transitions caractéristiques lorsque de la lumière est absorbée ou émise. Les états électroniques, espacés d'une énergie de quelques électrons-volts (UV-Visible), contiennent divers niveaux vibrationnels distants d'une énergie de plusieurs dixièmes d'électrons-volts (IR) et eux-mêmes divisés en niveaux rotationnels, lesquels sont séparés par une énergie encore plus faible, de quelques millièmes d'électrons-volts (micro-ondes).

Comme mentionné ci-dessus, VenSpec-H ciblera une gamme spectrale autour de  $4000 \text{ cm}^{-1}$  dans l'infrarouge moyen. Dès lors, dans la suite de ce manuscrit, nous nous focaliserons uniquement sur les transitions énergétiques vibrationnelles et ro-vibrationnelles.

## 3.2 Energie de vibration

Une molécule constituée de  $N$  atomes peut se déplacer selon  $3N$  degrés de liberté. Pour une molécule non linéaire, trois degrés de liberté sont liés au mouvement de translation et trois autres permettent de traiter le mouvement de rotation. De ce fait,  $3N-6$  degrés de liberté caractérisent les vibrations de la molécule. En particulier, le dioxyde de soufre possède trois modes fondamentaux de vibration non dégénérés (Fig. 3.1), lesquels sont actifs dans l'infrarouge.

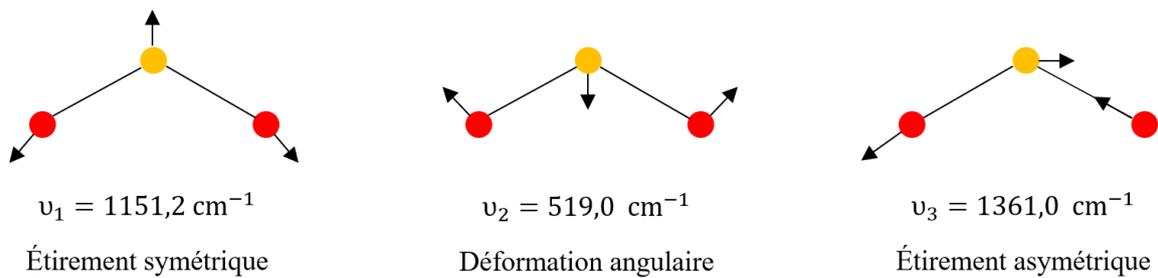


FIG. 3.1: Modes vibrationnels fondamentaux du dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ), associés à un nombre d'onde donné. L'atome de soufre (S) et les deux atomes d'oxygène (O) de la molécule sont représentés par les boules jaunes et rouges, respectivement.

Les bandes vibrationnelles mesurées par VenSpec-H autour de  $4000 \text{ cm}^{-1}$  résultent alors de la combinaison de ces modes propres.

Par ailleurs, l'énergie de vibration [ $\text{cm}^{-1}$ ] du dioxyde de soufre s'exprime comme

$$E_v = \sum_i^3 h c \nu_i \left( v_i + \frac{1}{2} \right) + \sum_i^3 \sum_{k \geq i}^3 x_{ik} \left( v_i + \frac{1}{2} \right) \left( v_k + \frac{1}{2} \right), \quad (3.2)$$

où  $\nu_i$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] désigne le nombre d'onde du mode propre  $i$ , associé au nombre quantique de vibration  $v_i \in \mathbb{N}$ , et  $x_{ik}$  sont des constantes d'anharmonicité du premier ordre.

### 3.3 Energie de rotation

En ce qui concerne la rotation des molécules de type « toupie asymétrique », comme le  $\text{SO}_2$ , un traitement numérique est généralement nécessaire pour établir l'expression de leur énergie. Des solutions ont été trouvées, telles que

$$E(J_\tau) = \frac{1}{2}(A + C)J(J + 1) + \frac{1}{2}(A - C)E_\tau, \quad (3.3)$$

dans laquelle  $A$ ,  $B$ ,  $C$  sont des constantes rotationnelles et  $J \in \mathbb{N}$  représente le nombre quantique principal de rotation. Chaque état rotationnel  $J$  comprend  $2J + 1$  sous-niveaux, indicés par le paramètre  $\tau = -J, \dots, J$ . Le terme numérique  $E_\tau$  désigne alors l'énergie réduite, associées à un niveau  $J$  ainsi qu'au paramètre d'asymétrie  $\kappa$  défini comme suit,

$$\kappa = \frac{2B - A - C}{A - C}. \quad (3.4)$$

À la limite  $\kappa = -1$ , les états d'énergie rotationnels se comportent comme ceux d'une toupie symétrique prolate et si  $\kappa = +1$ , la molécule devient comparable à une toupie symétrique oblate.

La dégénérescence des niveaux de rotation dépend également d'autres nombres quantiques. Cependant, la description complexe de la structure des niveaux d'énergie d'un tel système dépasse le cadre de travail et n'est donc pas reprise dans ce manuscrit. Les références [13–16] expliquent ces concepts plus en détail.

### 3.4 Energie de ro-vibration

Jusqu'à présent, nous avons traité les mouvements de vibration et de rotation indépendamment l'un de l'autre. Toutefois, les rotations d'une molécule sont influencées par la vibration de ses atomes. En fait, les moments d'inertie du système sont modifiés de manière périodique en raison de l'oscillation des noyaux atomiques. Pour tenir compte de ce couplage ro-vibrationnel, des constantes de rotation effectives  $A_v$ ,  $B_v$  et  $C_v$  sont définies à partir des constantes de rotation à l'équilibre  $A$ ,  $B$  et  $C$  précédemment introduites, soit

$$A_v = A - \sum_i \alpha_i(A) \left( v_i + \frac{1}{2} \right), \quad (3.5)$$

$$B_v = B - \sum_i \alpha_i(B) \left( v_i + \frac{1}{2} \right), \quad (3.6)$$

$$C_v = C - \sum_i \alpha_i(C) \left( v_i + \frac{1}{2} \right). \quad (3.7)$$

Dans ces expressions, l'interaction des contributions énergétiques est représentée par le paramètre  $\alpha_i$ . En conséquence, l'énergie ro-vibrationnelle d'une molécule est donnée par la somme des énergies de vibration (éq. 3.2) et de rotation (éq. 3.3), en considérant l'effet de la distorsion centrifuge décrit par les expressions (3.5)-(3.7).

### 3.5 Règles de sélection

Comme nous venons de le voir, l'interaction de photons infrarouges avec une molécule peut conduire à des transitions d'énergies ro-vibrationnelles.

Toutefois, cette interaction doit être associée à une variation du moment dipolaire de la molécule, défini par l'équation

$$\mu = \sum_i e_i \mathbf{d}_i, \quad (3.8)$$

dans laquelle les charges électroniques sont notées  $e_i$  et les vecteurs de position relative sont désignés par  $\mathbf{d}_i$ .

En outre, ces transitions énergétiques sont elles-mêmes soumises à des règles de sélection. En effet, bien que le passage d'un état vibrationnel à un autre soit toujours possible, les transitions rotationnelles doivent respecter des règles de sélection notamment sur le nombre quantique principal  $J$ , c'est-à-dire

$$\Delta J = 0, \pm 1. \quad (3.9)$$

Dès lors, l'ensemble des transitions vibrationnelles entre deux niveaux d'énergie définissent une bande, comprenant les branches P ( $\Delta J = -1$ ), Q ( $\Delta J = 0$ ) et R ( $\Delta J = +1$ ). Notons qu'il existe également d'autres règles de sélection, liées à des nombres quantiques différents ainsi qu'à la symétrie de la molécule, qui sont décrites en détail dans les ouvrages de référence [13–16] pré-cités.

En général, en phase gazeuse, un spectre moléculaire d'absorption ou d'émission possède donc des raies individuelles, regroupées en branches au sein des bandes vibrationnelles. La description de ces raies requiert une introduction aux profils spectraux, donnée dans la Section 4.

## 4 Profils spectraux

La théorie des profils de raies présentée brièvement ci-dessous provient des cours de Lepère [17, 18], du projet de recherche de Fabris [19] et des thèses de Castagnoli [20], Vispoel [21] et Fissiaux [22].

### 4.1 Principe général

Quand une molécule dans un état d'énergie  $E_1$  absorbe ou émet un photon de nombre d'onde  $\nu_0$ , elle entre dans un état d'énergie  $E_2$  tel que

$$\nu_0 = \frac{E_2 - E_1}{hc}. \quad (4.1)$$

Dans un spectre moléculaire, cependant, cette transition n'est pas parfaitement monochromatique. Elle présente une certaine forme, caractérisée par des paramètres spectroscopiques comme la position de son centre  $\nu_0$ , son intensité ou encore sa largeur. Ces paramètres dépendent de l'environnement, de la nature et des propriétés physico-chimiques du gaz.

Le profil spectral (*i.e.* la forme) d'une raie est alors défini comme

$$\beta(\nu - \nu_0) = S\Phi(\nu - \nu_0), \quad (4.2)$$

où  $S$  [ $\text{cm}^{-2}$ ] est son intensité et  $\Phi(\nu - \nu_0)$  représente le profil spectral normalisé, satisfaisant la condition

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\nu - \nu_0) d\nu = 1 \quad (4.3)$$

## 4.2 Facteurs d'élargissement

L'absorption ou l'émission d'un rayonnement électromagnétique par une molécule n'est donc pas parfaitement monochromatique. En plus de la mesure elle-même, divers facteurs physiques affectent la forme de la raie spectrale.

### 4.2.1 Largeur naturelle

La largeur naturelle d'une raie vient du fait que tout état énergétique d'une molécule, à l'exception de l'état fondamental, présente un temps de vie fini. Or, d'après le principe d'incertitude d'Heisenberg

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar, \quad (4.4)$$

où  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  est la constante de Planck réduite, l'incertitude liée au temps de vie  $\Delta t$  entraîne une incertitude sur l'énergie de cet état,  $\Delta E$ . En d'autres termes, un niveau associé à une courte durée de vie présente une incertitude énergétique importante. Ceci implique alors l'apparition d'une incertitude sur la position de la raie, donnée par

$$\Delta\nu = \frac{\Delta E_1 + \Delta E_2}{hc} = \frac{1}{2\pi c} \left( \frac{1}{\Delta t_1} + \frac{1}{\Delta t_2} \right). \quad (4.5)$$

L'élargissement naturel d'une raie est décrit par un profil spectral de type lorentzien, dont la forme normalisée s'exprime comme

$$\Phi_N(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_N}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_N^2}, \quad (4.6)$$

avec  $\nu_0$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] le nombre d'onde repérant le centre de la raie et  $\gamma_N$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] la demi-largeur à mi-hauteur naturelle définie par

$$\gamma_N = \frac{1}{4\pi c} \left[ \frac{1}{\Delta t_1} + \frac{1}{\Delta t_2} \right]. \quad (4.7)$$

À noter que ce paramètre prend généralement des faibles valeurs, de l'ordre de  $10^{-7} \text{ cm}^{-1}$ .

### 4.2.2 Largeur Doppler

Dans un milieu gazeux, les molécules sont constamment en mouvement. Ces dernières présentent une distribution de vitesse maxwellienne de sorte qu'un effet Doppler se produise lorsqu'elles interagissent avec un rayonnement électromagnétique. En fait, le mouvement des molécules selon une direction d'observation entraîne un décalage du nombre d'onde apparent absorbé ou émis plus ou moins important, ce qui se traduit par un étalement symétrique en nombre d'onde de la raie spectrale autour de son centre.

De ce fait, il en résulte un profil spectral normalisé gaussien tel que

$$\Phi_D(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp \left[ -\ln 2 \left( \frac{\nu - \nu_0}{\gamma_D} \right)^2 \right], \quad (4.8)$$

où  $\gamma_D$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] est la demi-largeur à mi-hauteur Doppler donnée par

$$\gamma_D = 3,581 \cdot 10^{-7} \nu_0 \sqrt{\frac{T}{M}}, \quad (4.9)$$

avec  $\nu_0$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] le nombre d'onde du centre de la raie,  $T$  [K] la température du gaz et  $M$  [g] la masse de la molécule. L'élargissement Doppler est donc indépendant de la pression. Pour le dioxyde de soufre, ce paramètre est de l'ordre de  $10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  dans l'infrarouge moyen à température ambiante ( $T = 296 \text{ K}$ ).

### 4.2.3 Largeur et déplacement collisionnels

En phase gazeuse, les molécules sont généralement impliquées dans un grand nombre de collisions élastiques et inélastiques. En conséquence, lorsqu'un photon est émis ou absorbé par une molécule, les états d'énergie de la transition sont déplacés, ce qui se reflète au travers d'un élargissement en nombre d'onde des raies ainsi que d'un déplacement de leur centre. Remarquons que ce déplacement collisionnel est inférieur d'un ou deux ordres de grandeur par rapport à l'élargissement collisionnel.

Ces effets sont associés à un profil spectral normalisé lorentzien défini de la façon suivante,

$$\Phi_L(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_c}{\gamma_c^2 + (\nu - \nu_0 - \delta_c)^2}. \quad (4.10)$$

Dans cette équation,  $\delta_c$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] désigne le déplacement collisionnel et  $\gamma_c$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] est la demi-largeur à mi-hauteur collisionnelle, s'exprimant comme

$$\gamma_c(T) = \left[ \frac{T_{ref}}{T} \right]^{n_{self}} \gamma_0^{self}(T_{ref}) p_0 + \sum_{i=1}^n \left[ \frac{T_{ref}}{T} \right]^{n_i} \gamma_0^i(T_{ref}) p_i, \quad (4.11)$$

où  $T_{ref}$  [K] est une température de référence,  $T$  [K] décrit la température du gaz et le coefficient  $n_{self,i}$  traduit la dépendance en température des paramètres collisionnels de chaque gaz. En outre, le premier terme représente la contribution du gaz actif pur, c'est-à-dire les collisions entre des molécules identiques. Dans ce cas, le facteur  $\gamma_0^{self}$  [ $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$ ] correspond au coefficient d'auto-élargissement du gaz à une pression  $p_0$  [atm]. Le second terme tient compte des collisions avec d'autres gaz environnants associés à des coefficients d'élargissement collisionnel  $\gamma_0^i$  [ $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$ ] et des pressions partielles  $p_i$  [atm]. Une relation similaire à cette équation (4.11) peut être donnée pour le déplacement collisionnel.

### 4.3 Profil de Voigt

Dans un milieu gazeux, la contribution des effets physiques introduits précédemment dépend notamment du régime de pression. En général, sauf dans le cas de températures ou de pressions extrêmement faibles, l'élargissement naturel est négligeable par rapport à la contribution Doppler et collisionnelle. Pour des basses pressions ( $p < 0,5$  mbar), l'élargissement Doppler domine, alors que l'élargissement collisionnel devient plus important dans le cas de pressions élevées ( $p > 100$  mbar). En revanche, pour des pressions intermédiaires, les effets Doppler et collisionnels doivent être considérés simultanément. Le profil théorique de Voigt, défini comme la convolution d'une gaussienne et d'une lorentzienne, est généralement employé pour décrire la forme des raies. Celui-ci s'écrit comme

$$\Phi_V(x,y,A) = A \operatorname{Re} \{W(x,y)\}, \quad (4.12)$$

avec les paramètres  $x$ ,  $y$  et  $A$  donnés par les équations ci-dessous,

$$x = \sqrt{\ln 2} \frac{\nu - \nu_0 - \delta_c}{\gamma_D}, \quad (4.13)$$

$$y = \sqrt{\ln 2} \frac{\gamma_c}{\gamma_D}, \quad (4.14)$$

$$A = \frac{S\sqrt{\ln 2}}{\gamma_D\sqrt{\pi}}. \quad (4.15)$$

On retrouve ici l'intensité  $S$  de la raie centrée en un nombre d'onde  $\nu_0$ , ainsi que les demi-largeurs à mi-hauteur Doppler  $\gamma_D$  et collisionnelle  $\gamma_C$  correspondantes et le déplacement collisionnel  $\delta_c$  du centre. En outre,  $W(x,y)$  est la fonction d'erreur complexe telle que

$$W(x,y) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{x + iy - t} dt. \quad (4.16)$$

Le profil de Voigt est souvent utilisé dans les simulations numériques en raison de sa grande simplicité du point de vue de la physique et de son faible temps de calcul. En effet, ce profil de raie théorique ne tient pas compte de l'effet Dicke, décrivant le fait que les collisions moléculaires influent sur l'effet Doppler. En fait, quand la pression est non nulle, la densité de molécules devient importante et le libre parcours moyen de ces molécules diminue. Par conséquent, leur vitesse moyenne est moindre, ce qui se traduit par une réduction de l'effet Doppler. Ce phénomène est décrit par divers modèles théoriques, comme les profils de Galatry ou de Rautian-Sobel'Man, selon la masse des molécules mises en jeu. Néanmoins, dans le cadre de mesures atmosphériques et de nombreuses études spectroscopiques, le profil de Voigt reste le modèle le plus adéquat.

Dans la suite de ce manuscrit, nous verrons que les profils de raies, et plus particulièrement les paramètres spectroscopiques du  $\text{SO}_2$ , jouent un rôle majeur lors du sondage atmosphérique de Vénus (Section 7). Pour comprendre leur impact, nous donnons ci-dessous (Section 5) quelques notions de base du transfert radiatif.

## 5 Transfert radiatif

La théorie du transfert radiatif décrit les interactions ainsi que la propagation des rayonnements électromagnétiques au sein d'une atmosphère planétaire. La compréhension de ces éléments est essentielle tant pour le développement de sondes spatiales telles qu'EnVision que l'interprétation des mesures et la détermination précise de variables atmosphériques. Un aperçu général de cette théorie est donc donné dans cette section, en s'inspirant principalement des ouvrages de López-Puertas et Taylor [23], Liou [24] et Petty [25].

### 5.1 Équation générale et solution

En traversant l'atmosphère d'une planète, un rayonnement interagit constamment avec la matière. D'une part, il peut être absorbé ou diffusé de sorte que son intensité soit réduite et d'autre part, l'émission de la matière elle-même ainsi que les diffusions multiples de mêmes longueurs d'onde provenant de toutes les directions sont susceptibles de le renforcer.

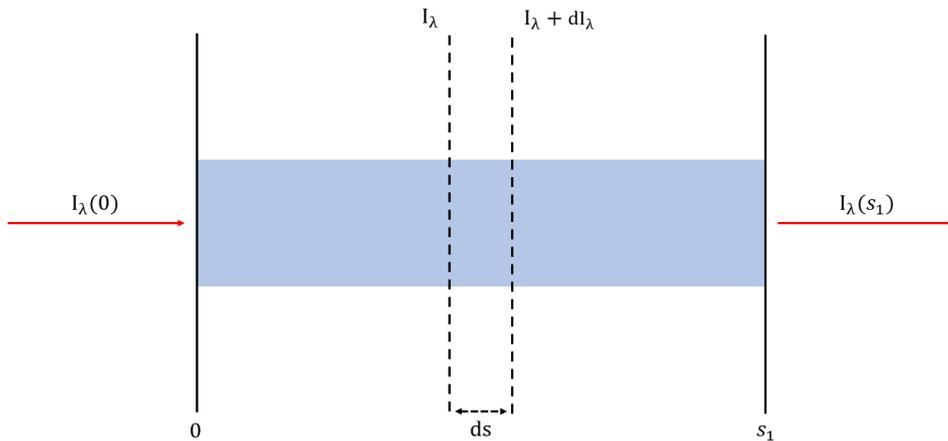


FIG. 5.1: Propagation d'un rayonnement électromagnétique monochromatique de longueur d'onde  $\lambda$  et d'intensité  $I_\lambda$  suivant une direction déterminée au travers d'un milieu atmosphérique sur une distance  $s_1$ . En raison des interactions avec la matière, l'intensité du rayonnement devient  $I_\lambda + dI_\lambda$  après avoir parcouru une distance infinitésimale  $ds$ .

Ainsi, la propagation d'un rayonnement électromagnétique de longueur d'onde  $\lambda$  et d'intensité monochromatique<sup>2</sup>  $I_\lambda$  sur une distance infinitésimale  $ds$  le long d'une direction particulière (Fig. 5.1) est définie par l'équation différentielle générale

$$\frac{dI_\lambda}{k_\lambda \rho ds} = -I_\lambda + J_\lambda, \quad (5.1)$$

dans laquelle  $J_\lambda$  désigne une fonction source,  $\rho$  est la densité et  $k_\lambda$  représente la section efficace d'extinction de masse de sorte que  $\beta_\lambda = k_\lambda \rho$  est le coefficient d'extinction massique, correspondant à la somme des coefficients d'absorption et de diffusion de masse.

---

2. L'intensité monochromatique (radiance, en anglais) s'exprime en unités d'énergie par surface par temps par longueur d'onde par stéradian. Pour éviter toute confusion avec la littérature, le terme radiance sera utilisé dans la suite du travail.

Pour un milieu non diffusant et en équilibre thermodynamique local, cette fonction source est donnée par la fonction de Planck d'un corps noir, soit

$$J_\lambda \equiv B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5(e^{\frac{hc}{k_B\lambda T}} - 1)}, \quad (5.2)$$

avec  $T$  la température. Par ailleurs, en considérant l'épaisseur optique monochromatique (Fig. 5.2a), qui est une grandeur sans dimension toujours supérieure ou égale à 0 donnée par

$$\tau(s_1, s) = \int_s^{s_1} k_\lambda \rho ds', \quad (5.3)$$

ou écrit autrement,

$$d\tau(s_1, s) = -k_\lambda \rho ds, \quad (5.4)$$

la relation fondamentale introduite ci-dessus (éq. 5.1) prend la forme suivante,

$$-\frac{dI_\lambda(s)}{d\tau(s_1, s)} = -I_\lambda(s) + B_\lambda[T(s)]. \quad (5.5)$$

Or, en multipliant ce résultat par un facteur  $e^{-\tau_\lambda(s_1, s)}$ , on peut remarquer que

$$\frac{d[I_\lambda(s)e^{-\tau_\lambda(s_1, s)}]}{d\tau(s_1, s)} = e^{-\tau_\lambda(s_1, s)} \frac{dI_\lambda(s)}{d\tau(s_1, s)} - I_\lambda(s)e^{-\tau_\lambda(s_1, s)}, \quad (5.6)$$

$$= -B_\lambda[T(s)]e^{-\tau_\lambda(s_1, s)}. \quad (5.7)$$

La solution s'obtient alors par intégration entre un point arbitraire  $s = 0$  et le point d'observation  $s_1$ , c'est-à-dire

$$\int_0^{s_1} d[I_\lambda(s)e^{-\tau_\lambda(s_1, s)}] = - \int_0^{s_1} B_\lambda[T(s)]e^{-\tau_\lambda(s_1, s)} d\tau_\lambda(s_1, s), \quad (5.8)$$

de telle manière que,

$$I_\lambda(s_1) = I_\lambda(0)e^{-\tau_\lambda(s_1, 0)} + \int_0^{s_1} B_\lambda[T(s)]e^{-\tau_\lambda(s_1, s)} k_\lambda \rho ds. \quad (5.9)$$

Cette équation de Schwarzschild indique ainsi l'intensité de rayonnement captée par un système de mesure à partir de l'intensité du rayonnement de fond, du profil de températures atmosphériques et des coefficients d'absorption s'exprimant comme la somme des coefficients d'absorption de chaque espèce absorbante (éq. 4.2) et d'un continuum, soit

$$\beta(\nu) = \sum_{i=1}^n \beta_i(\nu) + \beta_{cont}(\nu). \quad (5.10)$$

Ce continuum traduit l'absorption des rayonnements sur de larges gammes spectrales par certains constituants en forte abondance, comme le  $\text{CO}_2$  dans l'atmosphère de Vénus.

Aussi, comme indiqué dans la Section 5.2, le calcul du transfert radiatif peut être considérablement simplifié en définissant le milieu atmosphérique par un modèle plan-parallèle.

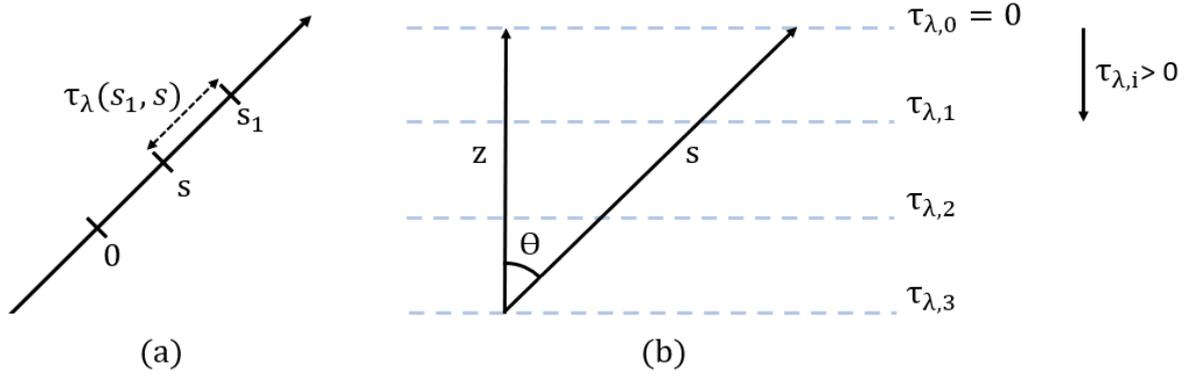


FIG. 5.2: (a) Représentation schématique de l'épaisseur optique monochromatique entre deux points quelconques  $s$  et  $s_1$ . (b) Modèle d'atmosphère plan-parallèle.

## 5.2 Modèle d'atmosphère plan-parallèle

En fait, l'atmosphère d'une planète peut être représentée par un modèle plan-parallèle tel qu'illustré ci-dessus (Fig. 5.2b). Cette approximation vise à décomposer le milieu en un ensemble de couches homogènes, elles-mêmes formées de différents niveaux, de sorte que les rayonnements électromagnétiques et les variables atmosphériques évoluent uniquement selon une direction verticale, en fonction de l'altitude ou de la pression. Mathématiquement, la coordonnée  $z$  que l'on choisit arbitrairement pour mesurer ces distances linéaires normales au plan de stratification, s'exprime dans un système de coordonnées sphériques comme

$$z = s \cdot \cos \theta = s \cdot \mu \rightarrow ds = \frac{dz}{\cos \theta} = \frac{dz}{\mu}, \quad (5.11)$$

où  $\mu = \cos \theta$ , avec  $\theta$  l'angle zénithal. De ce fait, la densité de flux monochromatique (irradiance, en anglais) traversant un niveau atmosphérique vers le haut ( $\uparrow$ ,  $\mu > 0$ ) ou le bas ( $\downarrow$ ,  $\mu < 0$ ) est donnée par l'intégration de la composante normale de la radiance selon l'angle solide infinitésimale  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ , soit

$$F_{\lambda}^{\uparrow, \downarrow}(\tau) = \int_{2\pi} I_{\lambda}^{\uparrow, \downarrow}(\tau, \cos \theta) \cos \theta d\Omega = 2\pi \int_0^1 I_{\lambda}^{\uparrow, \downarrow}(\tau, \mu) \mu d\mu. \quad (5.12)$$

Remarquons que le flux total, également appelé puissance radiante, est obtenu par intégration de la quantité  $F_{\lambda}^{\uparrow, \downarrow}(\tau)$  passant au travers d'une surface.

Développé par l'Institut royal d'Aéronomie Spatiale de Belgique, ASIMUT est un code de transfert radiatif capable de simuler la radiance atmosphérique en l'absence de diffusion. Toutefois, ASIMUT est couplé au logiciel LIDORT (ALVL), lui-même associé aux programmes SPHER et TMATRIX, afin de traiter la diffusion de Mie et celle de Rayleigh au sein d'une atmosphère unidimensionnelle plan-parallèle [26].

### 5.3 Simulation de spectres atmosphériques

Le spectre atmosphérique mesuré par un instrument pour un état particulier d'une atmosphère planétaire peut ainsi être simulé numériquement. Pour ce faire, ASIMUT-ALVL calcule le trajet suivi par le rayonnement au travers de l'atmosphère, en tenant compte de la courbure et de la réfraction de la planète, des propriétés de chaque couche et des conditions d'observation. En particulier, ceci peut être réalisé pour diverses géométries d'observation (*e.g.* nadir, nadir hors axe, limbe, occultation solaire, *etc.*), avec l'instrument présentant ses propres caractéristiques qui est situé au niveau du sol, au sein de l'atmosphère, ou bien dans l'espace. À partir des températures, des pressions et des densités moléculaires le long de ce trajet, les épaisseurs optiques correspondant à chaque couche sont alors calculées et le transfert radiatif est lui-même résolu. Ce processus constitue le modèle direct (forward model, en anglais).

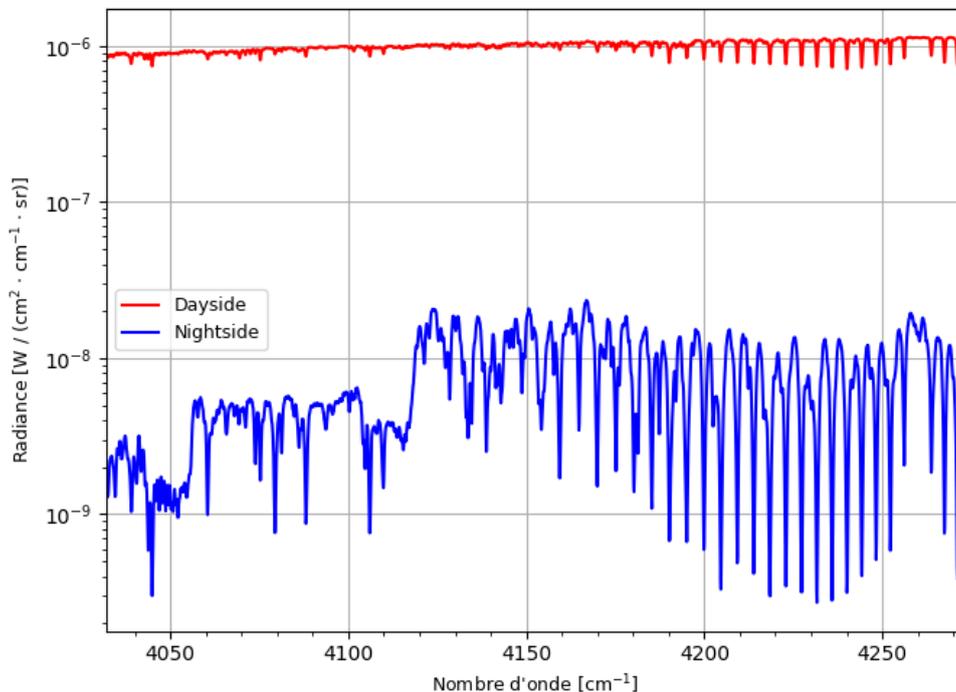


FIG. 5.3: Spectres atmosphériques côté jour (en rouge) et côté nuit (en bleu) de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL dans l'infrarouge moyen. Une résolution spectrale de  $0,4 \text{ cm}^{-1}$  est considérée. Des SNR de 1000 et 100 ont été supposés en dayside et en nightside, respectivement. La radiance [ $\text{W} / (\text{cm}^2 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{sr})$ ] y est représentée selon une échelle logarithmique en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ].

Un exemple typique de spectres côté jour et côté nuit que l'on pourrait obtenir en nadir avec VenSpec-H est montré à la Figure 5.3. La simulation de la radiance est effectuée à l'aide d'ASIMUT-ALVL pour une gamme spectrale de nombres d'onde s'étalant de  $4032 \text{ cm}^{-1}$  à  $4274 \text{ cm}^{-1}$  dans l'infrarouge moyen, en considérant comme composants atmosphériques le dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ), le monoxyde de carbone (CO), le sulfite de carbonyle (OCS), le fluorure d'hydrogène (HF), l'eau ( $\text{H}_2\text{O}$ , HDO) et enfin, le dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ).

Les raies spectrales de ces molécules, à l'exception du  $\text{CO}_2$ <sup>3</sup>, ont été modélisées par le profil de Voigt (Section 4.3). La contribution d'aérosols d'acide sulfurique ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) de différentes tailles est également prise en compte et un continuum de  $\text{CO}_2$  a été ajouté au calcul raie par raie, étant donné la forte abondance de ce gaz dans l'atmosphère de Vénus. Des profils de température, de pression et de concentration de ces différentes espèces ont alors été supposés. En outre, les spectres sont simulés pour une résolution spectrale de  $0,4 \text{ cm}^{-1}$  et ont été bruités de telle sorte que les observations en dayside et nightside présentent un rapport signal sur bruit de 1000 et 100, respectivement.

Ces résultats expriment donc l'absorption, l'émission et la diffusion de rayonnements électromagnétiques au sein de l'atmosphère vénusienne. Rappelons que la radiance du côté nuit provient de l'émission thermique de la surface et de l'atmosphère de Vénus alors que celle du côté jour comporte une contribution solaire supplémentaire importante (Fig. 2.2). Dans notre cas, le Soleil se trouve à un angle zénithal de  $30^\circ$ .

## 5.4 Problèmes inverses par la Méthode de l'Estimation Optimale

En général, le sondage d'une atmosphère planétaire nous informe de manière indirecte sur son état. Le défi consiste alors à extraire la variable atmosphérique ciblée, telle que la concentration d'une espèce, de la quantité mesurée, bien souvent des rayonnements électromagnétiques de différentes longueurs d'onde ayant interagi avec le milieu (Section 5.3). Ce procédé d'inversion spectrale repose évidemment sur une certaine connaissance de la relation entre la variable atmosphérique et l'observation. Par ailleurs, le problème devient vite compliqué quand on dispose d'un modèle direct imparfait et non linéaire, d'hypothèses préalables peu précises et de mesures bruitées admettant plusieurs solutions.

Une approche possible pour l'inversion de spectres atmosphériques est la méthode de l'estimation optimale. Cette dernière détermine l'état de l'atmosphère le plus probable à l'aide des statistiques bayésiennes, en se basant sur le forward model ainsi que sur des mesures, des informations *a priori* et les incertitudes correspondantes. La théorie décrite dans cette section provient de l'ouvrage de Rodgers [27] et s'inspire des références [26, 28–30].

### 5.4.1 Solution maximale a posteriori

Considérons le problème suivant,

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) + \varepsilon, \quad (5.13)$$

dans lequel  $\mathbf{y}$  est un vecteur de mesure,  $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})$  représente le modèle direct, qui dépend d'un vecteur d'état  $\mathbf{x}$  ainsi que de paramètres atmosphériques connus  $\mathbf{b}$ , et  $\varepsilon$  correspond à l'erreur de mesure découlant du bruit et des approximations du forward model entre autres.

---

3. Pour cette molécule, nous avons considéré un profil de raies sub-lorentzien, défini empiriquement comme  $\Phi_\chi(\nu, p, T) = \chi(\nu) \times \Phi_L(\nu, p, T)$ , où  $\chi$  est un facteur de correction symétrique traduisant une déviation par rapport au comportement lorentzien loin du centre des raies.

Le principe revient donc à inverser l'équation (5.13) pour en déduire l'état atmosphérique le plus probable. Cette solution maximale *a posteriori*  $\hat{\mathbf{x}}$  peut être déterminée au moyen du théorème de Bayes, en décrivant les quantités ci-dessus par des distributions de probabilités gaussiennes.

Ainsi, la probabilité d'obtenir la mesure  $\mathbf{y}$  à partir de l'état  $\mathbf{x}$ ,  $P(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ , peut s'exprimer comme

$$-2 \ln P(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})]^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})] + c_1, \quad (5.14)$$

avec  $c_1$  une constante et  $\mathbf{S}_\varepsilon^{-1} = \langle [\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}][\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}]^T \rangle$  la covariance des erreurs de mesure. En supposant une connaissance préalable du système, décrite par un vecteur d'état *a priori*  $\mathbf{x}_a$ , il vient également

$$-2 \ln P(\mathbf{x}) = [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a]^T \mathbf{S}_a^{-1} [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a] + c_2, \quad (5.15)$$

où  $c_2$  est également constante et  $\mathbf{S}_a^{-1} = \langle [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a][\mathbf{x} - \mathbf{x}_a]^T \rangle$  représente la matrice de covariance de cet *a priori*.

Le théorème de Bayes donne alors la probabilité que l'observation  $\mathbf{y}$  admette l'état  $\mathbf{x}$  pour solution, et se définit comme

$$P(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{P(\mathbf{y}|\mathbf{x})P(\mathbf{x})}{P(\mathbf{y})}. \quad (5.16)$$

Si l'on insère à présent les relations (5.14) et (5.15) dans cette expression (5.16), en considérant  $P(\mathbf{y})$  comme une constante de normalisation qui peut être négligée, la fonction de coût  $\mathcal{C}$  est introduite de sorte que

$$\mathcal{C} = -\ln P(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})]^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})] + [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a]^T \mathbf{S}_a^{-1} [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a] + c_3, \quad (5.17)$$

$c_3$  étant une nouvelle constante. Il est intéressant de remarquer que le premier terme correspond à l'écart quadratique moyen de la mesure modélisée par rapport à celle observée, pondéré par l'erreur totale de mesure, tandis que le second terme représente la déviation de l'état par rapport à l'*a priori*, pondéré par son incertitude.

Dès lors, l'état le plus probable  $\hat{\mathbf{x}}$  est celui qui minimise cette fonction de coût. En d'autres termes, il s'agit de la solution satisfaisant

$$0 = \nabla_{\mathbf{x}}(-\ln P(\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{y})), \quad (5.18)$$

$$= -\mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{b})] + \mathbf{S}_a^{-1} [\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_a], \quad (5.19)$$

où  $\mathbf{K} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{b})$  est le Jacobien de dimension  $n \times m$ ,  $n$  étant le nombre de paramètres à déduire, typiquement la distribution de l'abondance d'un gaz en fonction de l'altitude, et  $m$  désignant le nombre de mesures, par exemple la radiance pour différentes longueurs d'onde. La sensibilité du spectre aux variations du profil atmosphérique est décrite par les lignes de cette matrice.

Or, une équation vectorielle telle que  $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = 0$  se résout par l'itération de Newton

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - [\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)]^{-1}\mathbf{g}(\mathbf{x}_i), \quad (5.20)$$

convergeant vers  $\hat{\mathbf{x}}$ . Dans notre cas, les quantités suivantes sont posées,

$$\mathbf{g} = \mathbf{S}_a^{-1}[\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a] - \mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}[\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i, \mathbf{b})], \quad (5.21)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{g} = \mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}\mathbf{K} - [\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{K}^T]\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}[\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i, \mathbf{b})]. \quad (5.22)$$

Sous l'hypothèse que le modèle direct est modérément non linéaire, le dernier terme de l'équation (5.22) est négligé, ce qui donne l'itération de Gauss-Newton,

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_a + (\mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{K}_i^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}\mathbf{K}_i)^{-1}\mathbf{K}_i^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}[\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i, \mathbf{b}) + \mathbf{K}_i(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)]. \quad (5.23)$$

Un état atmosphérique de référence  $\mathbf{x}_0$  est d'abord considéré, en se basant notamment sur des mesures antérieures et des résultats de modèles théoriques. En l'absence de données, l'état *a priori*  $\mathbf{x}_a$  est choisi pour la première itération. Ensuite, le forward model est appliqué, générant alors un spectre  $\mathbf{F}(\mathbf{x}_a, \mathbf{b})$ . La différence entre cette mesure et l'observation  $\mathbf{y}$  permet d'estimer un nouvel état  $\mathbf{x}_1$ , différent de  $\mathbf{x}_a$ . Le procédé se répète jusqu'à la convergence vers une solution stable et optimale, c'est-à-dire quand les deux conditions suivantes sont satisfaites

$$(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i+1})^T\hat{\mathbf{S}}^{-1}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i+1}) \ll n, \quad (5.24)$$

$$[\mathbf{F}(\mathbf{x}_{i+1}, \mathbf{b}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i, \mathbf{b})]^T\mathbf{S}_{\delta\mathbf{y}}^{-1}[\mathbf{F}(\mathbf{x}_{i+1}, \mathbf{b}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i, \mathbf{b})] \ll m. \quad (5.25)$$

La première relation concerne la convergence des états ajustés, tandis que la seconde relation repose sur la convergence de la différence entre les spectres observés et simulés. La signification des paramètres  $n$ ,  $m$  est la même que ci-dessus, et

$$\delta\mathbf{y} = \mathbf{y} - \mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{b}), \quad (5.26)$$

$$\mathbf{S}_{\delta\mathbf{y}}^{-1} = \mathbf{S}_\varepsilon(\mathbf{K}\mathbf{S}_a\mathbf{K}^T)^{-1}\mathbf{S}_\varepsilon. \quad (5.27)$$

La solution finale est alors liée à l'état *a priori* par un facteur multiplicatif  $x$ .

#### 5.4.2 Covariance de la solution

La covariance de la solution maximale *a posteriori* peut être estimée en linéarisant le modèle direct correspondant par le Jacobien, soit  $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{b}) \approx \hat{\mathbf{K}}\hat{\mathbf{x}}$ . De cette manière, la fonction de coût s'exprime comme

$$\mathcal{C} = -\ln P(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = [\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x}]^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}[\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x}] + [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a]^T\mathbf{S}_a^{-1}[\mathbf{x} - \mathbf{x}_a], \quad (5.28)$$

$$\equiv (\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})^T\hat{\mathbf{S}}^{-1}(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}). \quad (5.29)$$

En égalant les termes quadratiques en  $\mathbf{x}$ , on obtient alors

$$\mathbf{x}^T\hat{\mathbf{S}}^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}\mathbf{K}\mathbf{x} + \mathbf{x}^T\mathbf{S}_a^{-1}\mathbf{x}, \quad (5.30)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^{-1} = \mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}\mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1}, \quad (5.31)$$

et en suivant le même raisonnement pour les termes en  $\mathbf{x}^T$ , on retrouve la solution du problème

$$-\mathbf{x}^T\hat{\mathbf{S}}^{-1}\hat{\mathbf{x}} = -\mathbf{x}^T\mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}\mathbf{y} - \mathbf{x}^T\mathbf{S}_a^{-1}\mathbf{x}_a, \quad (5.32)$$

$$\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{S}}[\mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}\mathbf{y} + (\hat{\mathbf{S}}^{-1} - \mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}\mathbf{K})\mathbf{x}_a], \quad (5.33)$$

$$= \mathbf{x}_a + \hat{\mathbf{S}}^{-1}\mathbf{K}^T\mathbf{S}_\varepsilon^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x}_a). \quad (5.34)$$

### 5.4.3 Qualité de la solution

La solution du problème (éq. 5.34) peut s'écrire sous une autre forme en définissant la matrice gain  $\mathbf{G} = \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{y}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1}$ , qui représente ainsi la sensibilité du profil recherché  $\hat{\mathbf{x}}$  par rapport à l'observation  $\mathbf{y}$ , soit

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_a + \mathbf{G}(\mathbf{K}\mathbf{x} + \varepsilon - \mathbf{K}\mathbf{x}_a), \quad (5.35)$$

$$= (I - A)\mathbf{x}_a + \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{G}\varepsilon, \quad (5.36)$$

où  $I$  est la matrice identité et  $\mathbf{A} = \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{G}\mathbf{K}$  désigne la matrice des fonctions de moyennage. Cette dernière apporte une information quant à la façon dont l'état réel de l'atmosphère et l'*a priori* contribuent à la solution. Ainsi, la qualité de la solution peut être évaluée par l'analyse de cette matrice ou, plus simplement, par le degré de liberté du signal  $d_s$  et du bruit  $d_n$  tels que  $d_s + d_n = m$ , avec

$$d_s = \text{tr}(\mathbf{A}), \quad (5.37)$$

$$d_n = \text{tr}(\mathbf{S}_\varepsilon(\mathbf{K}\mathbf{S}_a\mathbf{K}^T + \mathbf{S}_\varepsilon)^{-1}). \quad (5.38)$$

En particulier, un signal présentant un degré de liberté  $d_s < n$  contient peu d'information sur l'état atmosphérique. Dans ce cas, la solution la plus probable provient principalement de l'*a priori*. Ce problème mal conditionné apparaissant régulièrement pour des mesures en visée nadir, des contraintes doivent être posées. Cependant, le résultat devient alors moins fiable puisqu'il repose principalement sur le choix de l'*a priori*.

En ce qui nous concerne, des spectres atmosphériques ont été simulés, puis inversés par la méthode de l'estimation optimale grâce à ASIMUT-ALVL de façon à déterminer le VMR de dioxyde de soufre. Dans ce contexte, l'abondance *a priori* de  $\text{SO}_2$  a été établie sur base d'observations antérieures.

## 6 État de l'art

Un état de l'art des mesures liées au dioxyde de soufre est donné ci-dessous. De nombreux acronymes définis dans le Glossaire (page V) y sont utilisés. Par ailleurs, nous suivons les conventions d'unités associées à chaque domaine spectral. Les relations entre la longueur d'onde, le nombre d'onde et la fréquence sont établies dans l'Avant-propos (page VI).

### 6.1 Observations du $\text{SO}_2$ dans l'atmosphère de Vénus

Ces dernières décennies, de nombreuses études de l'atmosphère vénusienne ont été réalisées à l'aide d'instruments terrestres, spatiaux et *in situ*, révélant notamment la présence de dioxyde de soufre en-dessous, au sein et au-dessus des nuages.

#### 6.1.1 Mesures au sein et au-dessus des nuages

La première observation a été effectuée dans l'ultraviolet entre 3000 et 3300 Å grâce à un spectromètre terrestre, caractérisé par une résolution spectrale de 0,1 à 0,2 Å. En analysant ces mesures en 1979, Barker [31] a déduit un VMR de  $\text{SO}_2$  compris entre 0,02

et 0,5 ppm dans la thermosphère de Vénus.

L'absorption UV du dioxyde de soufre a également été détectée dans la gamme spectrale 2080-2180 Å par le spectromètre à haute résolution spectrale ( $\Delta\lambda = 0,3$  Å) de l'International Ultraviolet Explorer. Conway *et al.* [32] ont alors rapporté une densité de colonne de SO<sub>2</sub> valant approximativement  $4,0 \cdot 10^{16}$  cm<sup>-2</sup>. Parallèlement, Stewart *et al.* [33] se sont intéressés aux mesures atmosphériques réalisées par le spectromètre ultraviolet à bord de la sonde spatiale Pioneer Venus Orbiter, lequel est caractérisé par une plus faible résolution spectrale ( $\Delta\lambda = 13,0$  Å) mais une meilleure résolution verticale, et ont trouvé pour la gamme 2100-2800 Å des abondances de SO<sub>2</sub> qui sont en bon accord avec les quantités publiées précédemment dans la référence [31].

Une dizaine d'années plus tard, en analysant de nouvelles mesures PVO/UVS, Esposito *et al.* [34] ont mis en évidence une diminution de la concentration de SO<sub>2</sub> au sommet des nuages ( $\sim 68$  km), passant de 100 ppb à 10 ppb. Un tel déclin a également été constaté par Na *et al.* [35] grâce à d'autres observations de l'IUE. Les auteurs ont ainsi montré que l'abondance de SO<sub>2</sub>, était passée de  $380 \pm 70$  ppb en 1979 à  $50 \pm 20$  ppb en 1988.

D'autres mesures à haute résolution spectrale ( $\Delta\lambda = 0,2$  nm) ont été faites dans l'ultraviolet (190-230 nm) à partir de fusées. Une première mission en 1988 a permis de mesurer une abondance de  $80 \pm 40$  ppb et une seconde mission en 1991 a donné un VMR de  $120 \pm 60$  ppb (McClintock *et al.* [36], Na *et al.* [37]). En outre, ces études ont montré que le VMR de SO<sub>2</sub> au-dessus des nuages variait selon la latitude, allant de  $60 \pm 30$  ppb à l'équateur jusqu'à  $300 \pm 150$  ppb à 50°S.

Des observations ont aussi été faites au même moment dans l'infrarouge moyen par la sonde Venera 15 avec une résolution spectrale  $\Delta\nu = 4,5$ - $6,5$  cm<sup>-1</sup>, pour les bandes ro-vibrationnelles  $\nu_2$  (520 cm<sup>-1</sup>) et  $\nu_3$  (1350 cm<sup>-1</sup>) du SO<sub>2</sub>. Moroz *et al.* [38] ont déterminé une abondance de 2 ppb à des altitudes de 60 à 62 km, sans variation horizontale apparente.

Néanmoins, en 1993, Zasova *et al.* [39] se sont penchés sur des ensembles de données plus cohérents de cet instrument et les ont comparés aux mesures UV pré-citées, ce qui a permis de tirer des informations sur la distribution latitudinale du SO<sub>2</sub>. En particulier, pour une altitude de 69 km, ils ont observé quelques dizaines de ppb aux latitudes inférieures à 45°N et près de 100 à 200 ppb de SO<sub>2</sub> à proximité des pôles. Des valeurs augmentant d'environ 1000 ppb ont aussi été trouvées localement. De même, pour une altitude de 62 km, le VMR de SO<sub>2</sub> était de 0,3 à 0,5 ppm aux basses latitudes et de 1 à 2 ppm dans les régions polaires.

Peu après, en 1995, des observations du Télescope Spatial Hubble ont conduit à une abondance de SO<sub>2</sub> de  $20 \pm 10$  ppb (Na *et al.* [40]), révélant à nouveau une diminution de la concentration du dioxyde de soufre au cours du temps.

Par ailleurs, au cours de la dernière décennie, de nombreuses mesures dans la haute atmosphère de Vénus ont été effectuées lors de la mission spatiale Venus Express. En particulier, l'instrument SPICAV-UV a sondé le rayonnement ultraviolet dans la gamme 118-320 nm avec une résolution spectrale de  $\sim 1,5$  nm, en visée nadir (Marcq *et al.* [41-43])

ainsi qu'en occultation solaire (Belyaev *et al.* [44]), identifiant une grande quantité de SO<sub>2</sub> au-dessus des nuages, entre 85 et 100 km d'altitude, qui varie de manière significative dans le temps et selon la latitude. En outre, ces études indiquent que l'abondance de SO<sub>2</sub> influe directement sur sa distribution latitudinale. Pour une forte concentration, la densité de colonne diminue avec l'augmentation de la latitude au-delà de 40°N, alors que si la quantité de SO<sub>2</sub> est faible, le gradient latitudinal s'annule ou s'inverse. Ces résultats sont donc cohérents avec ceux de l'étude [39].

La sonde Venus Express a également détecté le dioxyde de soufre dans la gamme infrarouge 2257-4430 cm<sup>-1</sup> avec une résolution  $\Delta\nu = 0,11\text{-}0,21$  cm<sup>-1</sup> grâce à l'instrument SOIR (Belyaev *et al.* [45], Mahieux *et al.* [46]). Cependant, aucune preuve irréfutable de la variabilité temporelle ou latitudinale n'a été établie en raison de la faible absorption du SO<sub>2</sub> et de la contribution importante du CO<sub>2</sub> dans cette gamme spectrale.

Toutefois, en 2015, les observations dans la région spectrale 190-220 nm du spectromètre ultraviolet STIS ( $\Delta\lambda = 0,27$  nm) à bord du Télescope Spatial Hubble ont permis de déterminer des quantités de SO<sub>2</sub> différentes selon la longitude (Jessup *et al.* [47]).

Durant cette même période, une forte variabilité spatiale et temporelle de SO<sub>2</sub> a aussi été constatée lors de mesures au sol dans le domaine sub-mm ( $\sim 345$  GHz) avec le Télescope Terrestre James Clerk Maxwell, dont la résolution spectrale est comprise entre 30 et 500 kHz (Sandor *et al.* [48, 49]), et l'instrument ALMA (Encrenaz *et al.* [50]). Ces analyses ont révélé une abondance négligeable en-dessous de  $88 \pm 3$  km et constante de  $12 \pm 2,5$  ppbv au-delà de cette altitude. Un profil vertical de SO<sub>2</sub> similaire a été obtenu dans le cadre de mesures infrarouges effectuées par l'instrument TEXES/IRTF, présentant un pouvoir de résolution  $R = 8 \cdot 10^4$  autour de  $7,35$   $\mu\text{m}$  (Encrenaz *et al.* [51, 52]).

Récemment, ces mesures spatiales et terrestres ont à nouveau été analysées en détail par une équipe de l'ISSI. Plus précisément, Vandaele *et al.* [53, 54] ont étudié la variabilité verticale, horizontale et temporelle du SO<sub>2</sub> dans la haute atmosphère de Vénus. Les auteurs ont notamment mis en évidence la présence d'une couche d'inversion située à une altitude d'environ 70-75 km. En-dessous, le VMR de SO<sub>2</sub> semble diminuer alors qu'au-dessus, l'abondance de SO<sub>2</sub> augmente avec l'altitude.

En résumé, les observations dans la mésosphère et la thermosphère inférieure de Vénus ont révélé une variabilité spatio-temporelle considérable de l'abondance de dioxyde de soufre, qui est encore aujourd'hui mal comprise par les modèles théoriques de l'atmosphère vénusienne.

### 6.1.2 Mesures sous les nuages

En ce qui concerne la basse atmosphère de Vénus, des mesures *in situ* ont été réalisées dans les années 1970 par le chromatographe en phase gazeuse de Pioneer Venus Orbiter. Oyama *et al.* [55, 56] ont alors obtenu des abondances de  $185 \pm 43$  ppm à une altitude de 22 km, une limite inférieure de 176 ppm à 42 km et une limite supérieure de 600 ppm à 52 km. Des résultats similaires ont été trouvés par Hoffman *et al.* [57], qui ont analysé les mesures du spectromètre de masse de la sonde PVO, et par Gel'man *et al.* [58] grâce aux observations *in situ* de Venera 12.

Plus tard, en 1996, Bertaux *et al.* [59] ont traité les données provenant du spectromètre ultraviolet ISAV à bord des sondes VEGA 1 et 2. Les mesures de l'instrument ISAV 1 ont conduit à un profil d'abondance présentant un premier pic de 150 ppm à 51,5 km et un second pic de 125 ppm autour de 42,5 km. En comparaison, le profil résultant des observations du spectromètre ISAV 2 possédait un pic de 210 ppm à 43 km. En revanche, les deux profils étaient similaires pour les altitudes inférieures à 40 km, montrant une diminution de SO<sub>2</sub> avec les plus faibles altitudes.

Des mesures au sol ont aussi été effectuées en nightside dans une gamme spectrale infrarouge près de 2,46  $\mu\text{m}$ . À partir de ces observations, Bézard *et al.* [60] ont déterminé une abondance de  $130 \pm 40$  ppm à des altitudes comprises entre 35 et 45 km, et Pollack *et al.* [61] ont déduit un VMR de  $180 \pm 70$  ppm à une altitude de 42 km, ces valeurs étant en bon accord avec les profils de VEGA [59].

En outre, au début du XXI<sup>e</sup> siècle, des observations dans le domaine des micro-ondes ont suggéré une faible quantité de SO<sub>2</sub> sous les nuages, inférieure à 100 ppm à basse latitude et à 50 ppm au niveau des pôles (Butler *et al.* [62], Jenkins *et al.* [63]).

Aucune de ces mesures n'a permis de détecter d'éventuelles variations spatiales et temporelles de l'abondance de SO<sub>2</sub> sous les nuages. Pourtant, en 2014, à partir de mesures terrestres effectuées avec un pouvoir de résolution  $R = 3500$  dans la gamme spectrale 0,96-2,47  $\mu\text{m}$ , Arney *et al.* [64] ont donné un premier VMR de  $140 \pm 37$  ppmv, puis un second de  $126 \pm 32$  ppmv, et ont relevé une abondance plus forte de SO<sub>2</sub> dans l'hémisphère Nord que dans l'hémisphère Sud. Cependant, l'amplitude de cette différence était comprise dans l'incertitude liée à l'inversion de spectre.

À cela s'ajoutent les analyses spectroscopiques de l'émission nocturne de Vénus dans l'infrarouge (2,0-5,0  $\mu\text{m}$ ) par l'instrument VIRTIS-H ( $R = 2000$ ) à bord de la sonde Venus Express. Celles-ci ont permis de déterminer un rapport de mélange volumique moyen du SO<sub>2</sub> d'environ  $130 \pm 50$  ppmv autour de 30-40 km (Marcq *et al.* [65, 66]), bien que l'absorption spectralement étroite du SO<sub>2</sub> dans la gamme ciblée ait rendu difficile le traitement des données.

Récemment, en 2021, Marcq *et al.* [67] ont exploité le spectromètre à haute résolution spectrale iSHELL ( $R \approx 20\,000$ ), monté au NASA Infrared Telescope Facility à Hawaï pour sonder la basse atmosphère de Vénus dans la gamme spectrale infrarouge allant de 2,2  $\mu\text{m}$  à 2,5  $\mu\text{m}$ . Ils ont remarqué une augmentation de la quantité SO<sub>2</sub> avec la latitude dans la troposphère sous les nuages et ont déduit un gradient vertical positif de  $+10$  ppm  $\cdot$  km<sup>-1</sup>. La valeur moyenne latitudinale obtenue pour la quantité de SO<sub>2</sub> était d'environ 180 ppmv.

## 6.2 Paramètres spectroscopiques du SO<sub>2</sub>

Pour l'analyse des paramètres spectroscopiques du dioxyde de soufre (Section 4), nous avons considéré deux ensembles de données tirées de la base de données HITRAN2016 [68], l'un en prenant l'air comme gaz perturbateur et l'autre obtenu avec le dioxyde de carbone.

En particulier, les données spectroscopiques du système gazeux SO<sub>2</sub>-Air sont issues de diverses études expérimentales et théoriques. Pour chaque raie, la position provient de l'analyse de Naumenko *et al.* [69], l'intensité est définie sur base de l'étude d'Underwood *et al.* [70] et les valeurs de l'auto-élargissement collisionnel ont été déduites par Tasinato *et al.* [71]. En outre, les élargissements collisionnels ont été établis par Tan *et al.* [72], tandis que les déplacements collisionnels sont définis par défaut. Les coefficients de dépendance en température de ces paramètres collisionnels sont, quant à eux, tirés des mesures de Rothman *et al.* [73].

Concernant le mélange gazeux SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>, les coefficients d'élargissement collisionnel ont été initialement calculés en se basant sur les coefficients d'élargissement au H<sub>2</sub> publiés en 2016 par Wilzewski *et al.* [74] et un facteur de mise à échelle défini à partir des mesures de Krishnaji *et al.* [75] en 1963 sur une raie rotationnelle de SO<sub>2</sub> élargie par CO<sub>2</sub>.

Plus tard, en 2017, Ceselin *et al.* [76] ont mesuré par spectroscopie infrarouge à diode laser accordable à haute résolution et par spectroscopie à ondes mm-/sub-mm des coefficients d'élargissement au CO<sub>2</sub> pour la bande  $\nu_1$  ( $\sim 1151 \text{ cm}^{-1}$ ) du SO<sub>2</sub> et ont déduit des résultats légèrement plus faibles que ceux de la base de données HITRAN2016 [68].

Plus récemment, l'élargissement et le déplacement collisionnels ainsi que les coefficients de dépendance en température ont été calculés théoriquement sur base d'une méthode semi-empirique [77], en ajustant les résultats avec des mesures expérimentales [78].

En fait, en 2018, Dudaryonok *et al.* [77] ont déterminé théoriquement les coefficients d'élargissement au CO<sub>2</sub> de raies d'absorption du SO<sub>2</sub> à des températures comprises entre 150 et 350 K, en tenant compte des mesures reportées dans l'étude [76]. Peu après, Borkov *et al.* [78] ont mesuré à l'aide d'un spectromètre à transformée de Fourier à haute résolution ( $\Delta\nu = 0,0002\text{-}0,0003 \text{ cm}^{-1}$ ) les paramètres spectroscopiques de ce mélange gazeux. Cette étude visait à déterminer la position, l'intensité ainsi que les paramètres collisionnels de raies autour de  $2500 \text{ cm}^{-1}$  dans la bande ro-vibrationnelle  $\nu_1 + \nu_3$  des isotopologues <sup>32</sup>S<sup>16</sup>O<sub>2</sub> et <sup>34</sup>S<sup>16</sup>O<sub>2</sub>, et dans la bande  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_4$  de l'isotopologue <sup>32</sup>S<sup>16</sup>O<sub>2</sub>. Les mesures ont été prises dans une cellule d'absorption de longueur L = 9,6 m à température ambiante, avec des pressions comprises entre 0,00036 et 0,01160 atm pour le dioxyde de soufre et des pressions allant de 0,00748 à 0,05040 atm dans le cas du dioxyde de carbone. Le rapport signal sur bruit était quant à lui de 1500.

Par l'ajustement d'un profil de Voigt dépendant en vitesse quadratique, la position et l'intensité des raies ont été obtenues avec une précision de 2 à 5% selon l'absorbance de la raie et le niveau de mélange. En revanche, les incertitudes liées à l'élargissement ainsi qu'au déplacement collisionnel sont plus importantes en raison de l'incertitude sur la ligne de base et les pressions partielles ainsi que de la perturbation de raies voisines. En effet, pour chaque raie, l'incertitude sur la valeur de l'élargissement collisionnel est de l'ordre de 3 à 20%, tandis que celle du déplacement collisionnel se situe entre 3% et 100%.

En 2021, Fabris [19] s’est intéressé pour la première fois à l’élargissement collisionnel d’une raie d’absorption ( $\sim 1346 \text{ cm}^{-1}$ ) dans la branche P de la bande vibrationnelle  $\nu_3$  du dioxyde de soufre. Les coefficients d’auto-élargissement et d’élargissement au dioxyde de carbone ont été mesurés par l’ajustement des profils de Voigt, Rautian-Sobel’Man et Galatry, à température ambiante grâce à un spectromètre haute résolution basé sur une source laser à cascade quantique. Les résultats obtenus étaient en bon accord avec ceux reportés dans la littérature pour d’autres gammes spectrales. Ces mesures ont été réalisées en vue d’une application planétologique liée à l’atmosphère de Vénus, comme celle discutée ci-dessous (Section 7).

## 7 Résultats et discussions

Cette partie consiste en une analyse des performances du spectromètre VenSpec-H, c’est-à-dire de sa résolution spectrale et de son SNR, et du rôle des paramètres spectroscopiques du  $\text{SO}_2$  dans le cadre d’une étude atmosphérique de Vénus. À cet égard, de nombreux spectres dans l’infrarouge moyen ( $\sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ ) ont été simulés côté jour et côté nuit en visée nadir, en considérant la contribution d’aérosols et de quelques constituants moléculaires de l’atmosphère vénusienne pour le calcul raie par raie, à savoir le dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ), l’oxysulfure de carbone (OCS), le fluorure d’hydrogène (HF), l’eau ( $\text{H}_2\text{O}$ , HDO) et enfin, le dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ). Ici, contrairement à l’exemple donné dans la Section 5.3, nous n’avons pas pris en compte la contribution du monoxyde de carbone (CO), négligeable dans la gamme spectrale de la bande d’absorption du  $\text{SO}_2$  ( $4000\text{-}4080 \text{ cm}^{-1}$ ). En revanche, un continuum de  $\text{CO}_2$  a été ajouté au calcul raie par raie. Dans chaque cas, en plus des spectres atmosphériques, la qualité et la précision de la solution trouvée lors de l’inversion spectrale sont discutées.

### 7.1 Étude de la résolution spectrale

Afin d’évaluer l’importance des caractéristiques instrumentales lors du sondage atmosphérique d’une planète, des spectres non bruités ont d’abord été calculés pour diverses résolutions spectrales. Plus précisément, la résolution de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ) a été comparée avec deux résolutions très différentes, l’une proche de celle de VIRTIS-H ( $2,5 \text{ cm}^{-1}$ ) à bord de la sonde Venus Express et l’autre correspondant à la résolution du spectromètre terrestre iSHELL ( $0,2 \text{ cm}^{-1}$ ) exploité par Marcq *et al.* [67]. Le résultat côté jour est montré ci-dessous (Fig. 7.1).

On constate que la résolution spectrale de VIRTIS-H (en vert) est trop faible pour pouvoir distinguer les raies individuelles du  $\text{SO}_2$ . Les deux autres résolutions donnent des spectres de meilleure qualité. Cependant, le spectromètre iSHELL permet de visualiser davantage de raies. En effet, en regardant par exemple la radiance calculée autour de  $4039 \text{ cm}^{-1}$  avec la haute résolution (en bleu), on s’aperçoit de la présence d’une raie de faible intensité aux abords de la raie plus intense, ce qui n’est pas visible avec la résolution de VenSpec-H (en rouge). De tels écarts de précision apparaissent également à d’autres nombres d’onde, notamment près de  $4027 \text{ cm}^{-1}$  et  $4042 \text{ cm}^{-1}$ . Ces différences de résolution se reflètent alors sur la radiance mesurée par l’instrument et impactent l’abondance de  $\text{SO}_2$  déduite lors de l’inversion spectrale.

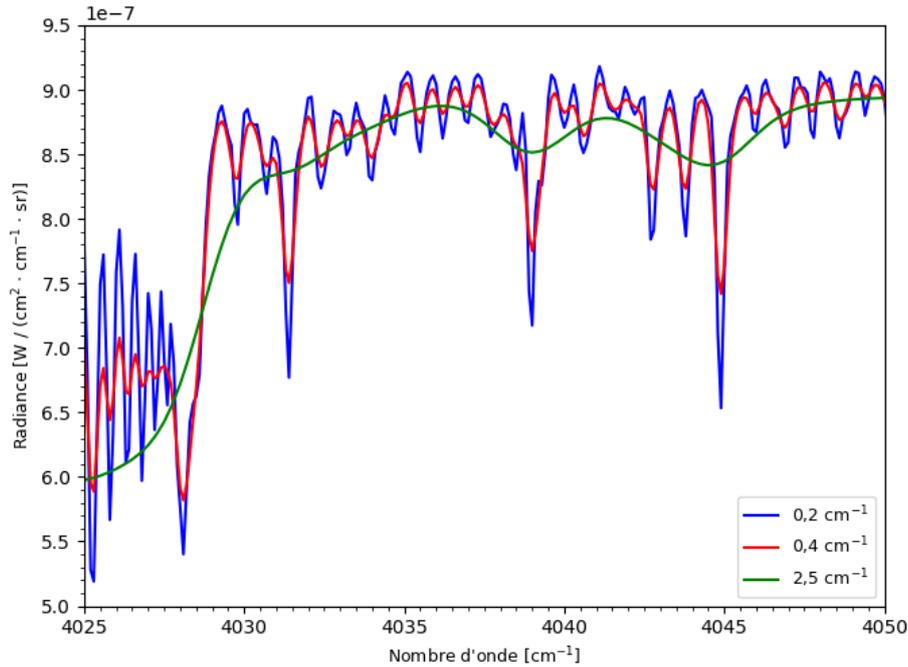


FIG. 7.1: Spectres atmosphériques non bruités côté jour de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL pour différentes résolutions spectrales:  $0,2 \text{ cm}^{-1}$  (en bleu),  $0,4 \text{ cm}^{-1}$  (en rouge) et  $2,5 \text{ cm}^{-1}$  (en vert). La radiance [ $\text{W} / (\text{cm}^2 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{sr})$ ] y est représentée en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ].

Nous avons également effectué cette comparaison de la résolution spectrale pour des spectres atmosphériques côté nuit et des observations similaires ont été faites.

Par la suite, notre intérêt s'est porté sur l'abondance de dioxyde de soufre calculée par ASIMUT-ALVL à partir de ces spectres. De manière générale, les instruments sondant l'atmosphère d'une planète en visée nadir, tels que le spectromètre VenSpec-H à bord de l'orbiteur EnVision, révèlent peu d'information sur la structure verticale du milieu. La radiance totale traversant l'ensemble des couches de l'atmosphère est mesurée, de sorte que le rapport de mélange volumique d'un composant atmosphérique peut être obtenu en colonne pour des latitudes et longitudes données, sans tenir compte d'une distribution spécifique en fonction de l'altitude. Cependant, via l'analyse des profils de raies, des informations sur les différentes couches peuvent être déduites. Chacune d'entre elles étant caractérisée par une pression et une température propres, leur impact sur le profil peut être déterminé et une haute résolution spectrale est dès lors primordiale. Par conséquent, il devient possible de représenter le profil vertical de l'espèce, c'est-à-dire la variation de son VMR en fonction de l'altitude. Dans le cadre de notre analyse de sensibilité, des inversions de spectres ont donc été réalisées simultanément en colonne et en profil.

Ainsi, la Table 3 indique les VMR de  $\text{SO}_2$  obtenus en colonne à partir de spectres atmosphériques calculés en dayside et en nightside pour les différentes résolutions spectrales susmentionnées. Le degré de liberté (Section 5.4.3) qui en résulte est aussi précisé. En outre, nous donnons le coefficient multiplicatif  $x$  entre le VMR trouvé par ASIMUT-ALVL et la solution *a priori* que l'on a considérée (Section 5.4.1).

| Observation | $\Delta\nu$ [cm <sup>-1</sup> ] | VMR [ppm]                   | DOF    | x      |
|-------------|---------------------------------|-----------------------------|--------|--------|
| Dayside     |                                 | <i>a priori</i> : 7533.9313 |        |        |
|             | 0,2                             | 7533.9314 ± 0.0019          | 0.9996 | 1.0000 |
|             | 0,4                             | 7533.9310 ± 0.0020          | 0.9996 | 0.9999 |
|             | 2,5                             | 7533.9309 ± 0.0020          | 0.9996 | 0.9999 |
| Nightside   |                                 | <i>a priori</i> : 7534.3690 |        |        |
|             | 0,2                             | 7534.3689 ± 0.0012          | 0.9999 | 0.9999 |
|             | 0,4                             | 7534.3686 ± 0.0011          | 0.9999 | 0.9999 |
|             | 2,5                             | 7534.3688 ± 0.0011          | 0.9999 | 0.9999 |

TAB. 3: Résultats des inversions de spectres atmosphériques non bruités côté jour et côté nuit de Vénus, obtenus avec diverses résolutions spectrales  $\Delta\nu$  [cm<sup>-1</sup>]. Les VMR [ppm] de dioxyde soufre sont donnés en colonne. Le degré de liberté (DOF) et un facteur multiplicatif ( $x$ ) entre la solution trouvée et l'*a priori* sont indiqués.

Dans chaque cas, on observe un degré de liberté proche de l'unité, traduisant le fait que l'information provient essentiellement du spectre fourni et non de l'*a priori*. Toutefois, les valeurs du facteur multiplicatif montrent que la solution s'approche fortement de l'*a priori*, ce que l'on peut également constater en comparant les VMR. De part ces observations, nous en déduisons que les spectres sont de qualité suffisante pour obtenir une information précise de l'état atmosphérique de Vénus.

Pour mettre en évidence l'effet de la résolution spectrale, des inversions de spectres en profil ont donc été réalisées, telles que présentées à la Figure 7.2 pour des conditions d'observation en dayside.

Les deux résolutions spectrales élevées donnent des résultats comparables, proches de l'*a priori*. Cependant, le VMR obtenu avec la faible résolution spectrale (2,5 cm<sup>-1</sup>) s'écarte davantage de cet *a priori* à des altitudes comprises entre 40 et 80 km. Les raies individuelles sont difficilement distinguables, la radiance mesurée s'en trouve dès lors affectée et l'inversion spectrale perd en précision.

Le profil du degré de liberté en fonction de l'altitude a également été tracé (Fig. 7.3) de façon à visualiser les couches de l'atmosphère de Vénus donnant une information. Puisque nous regardons ici côté jour, cette information provient principalement de la haute atmosphère de Vénus, au sein et au-dessus des épaisses couches de nuages se situant approximativement à 50 km.

D'après ces résultats, la résolution spectrale influe sur la valeur du DOF à ces altitudes. On voit que l'information sur l'état atmosphérique de la planète provient d'autant plus du spectre « expérimental » fourni que la résolution spectrale devient meilleure. En effet, pour des altitudes allant de 50 à 80 km, le DOF calculé avec la résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>) est supérieur au DOF obtenu avec la plus faible résolution de VIRTIS-H (2,5 cm<sup>-1</sup>) et inférieur au DOF déterminé avec la plus haute résolution de l'instrument iSHELL (0,2 cm<sup>-1</sup>).

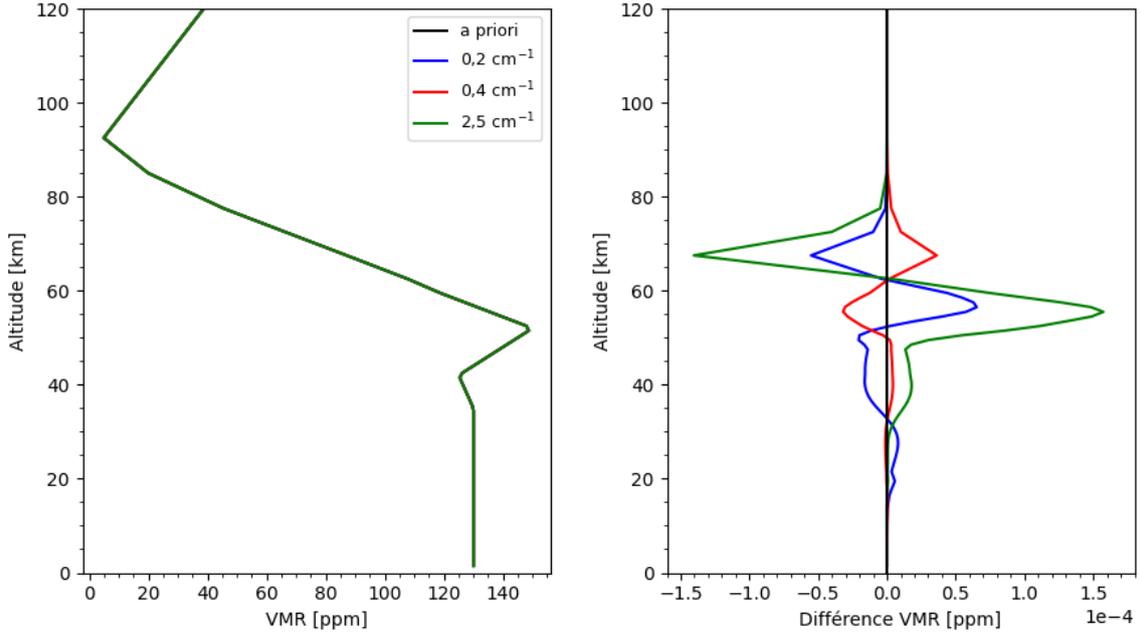


FIG. 7.2: À gauche : Profil du VMR [ppm] de  $\text{SO}_2$  en fonction de l'altitude [km], calculé sans bruit en dayside pour des résolutions spectrales de  $0,2 \text{ cm}^{-1}$  (en bleu),  $0,4 \text{ cm}^{-1}$  (en rouge) et  $2,5 \text{ cm}^{-1}$  (en vert). Le profil vertical *a priori* (en noir) du dioxyde de soufre y est également représenté. À droite : Différence [ppm] entre le VMR de  $\text{SO}_2$  obtenu pour chacune des résolutions spectrales pré-citées et l'*a priori*, en fonction de l'altitude [km].

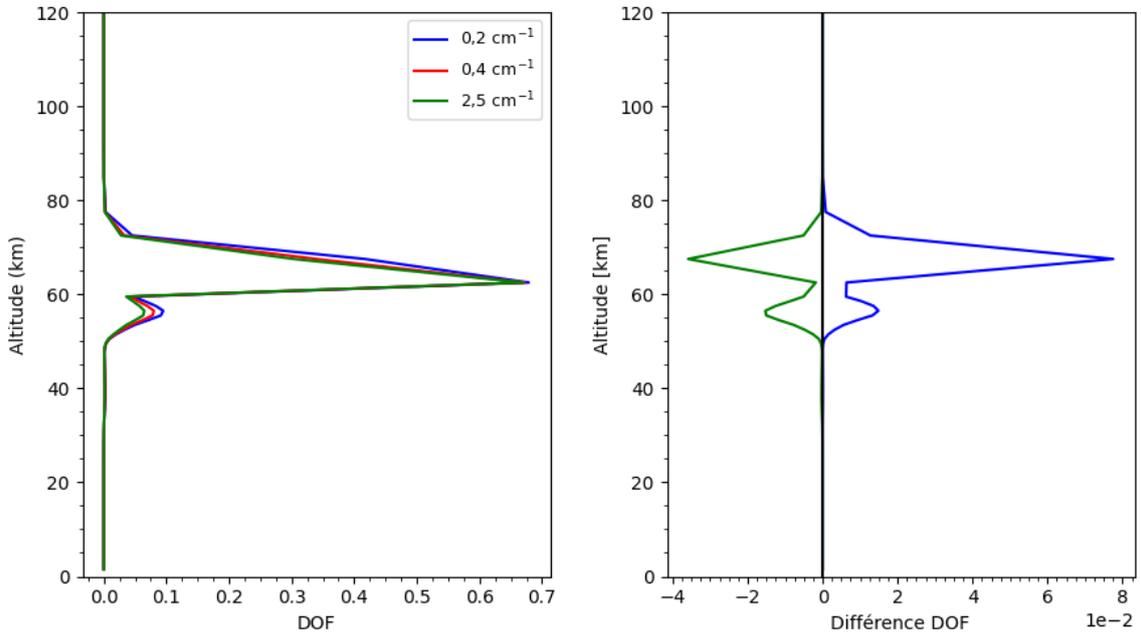


FIG. 7.3: À gauche : Degré de liberté calculé sans bruit en dayside pour des résolutions spectrales de  $0,2 \text{ cm}^{-1}$  (en bleu),  $0,4 \text{ cm}^{-1}$  (en rouge) et  $2,5 \text{ cm}^{-1}$  (en vert), en fonction de l'altitude [km]. À droite : Différence entre le degré de liberté associé à la résolution spectrale de VIRTIS-H ( $0,2 \text{ cm}^{-1}$ ) et iSHELL ( $2,5 \text{ cm}^{-1}$ ), et celui obtenu avec la résolution de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ), en fonction de l'altitude [km].

Étant donné que l'information provient essentiellement de la haute atmosphère de Vénus pour des observations côté jour, il est étonnant de constater une variation de VMR en-dessous de 40 km d'altitude à la Figure 7.2. Ceci pourrait être lié à un manquement dans la définition des nuages implémentée dans ASIMUT-ALVL.

## 7.2 Étude du rapport signal sur bruit

Une autre analyse que nous avons réalisée concerne le rapport signal sur bruit dans les spectres atmosphériques (Tab. 2). En considérant la résolution spectrale de VenSpec-H, des spectres en dayside ont d'abord été simulés sans bruit, avec un SNR = 1000 et un SNR = 250. Ceci est représenté à la Figure 7.4. De manière similaire, pour la même résolution spectrale, des spectres en nightside ont été calculés sans bruit, avec un SNR = 100 et un SNR = 50, comme indiqué à la Figure 7.5.

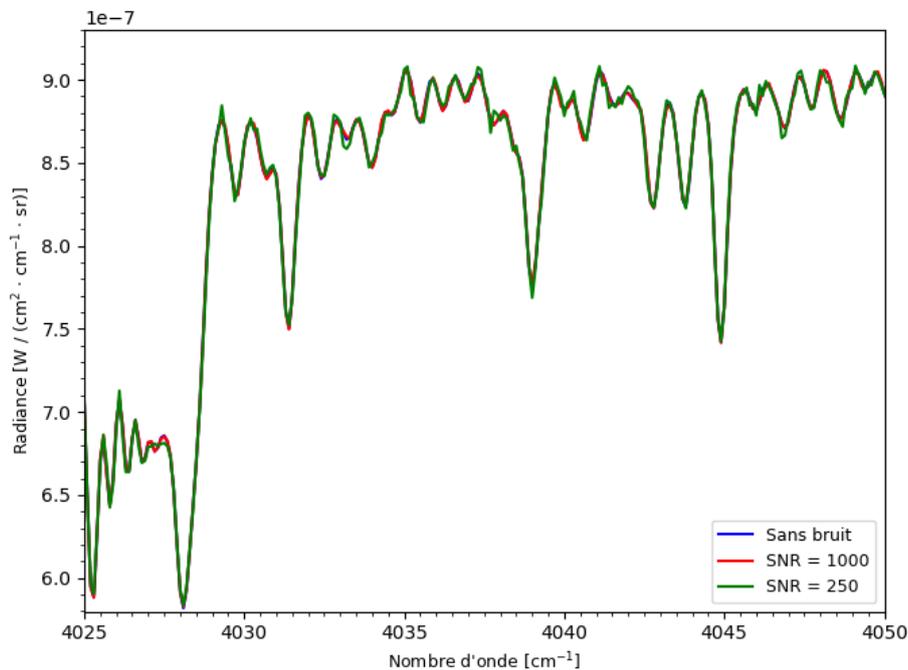


FIG. 7.4: Spectres atmosphériques côté jour de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL sans bruit (en bleu), avec un SNR = 1000 (en rouge) et un SNR = 250 (en vert), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ). La radiance [ $\text{W} / (\text{cm}^2 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{sr})$ ] y est représentée en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ].

Comme attendu, dans un cas comme l'autre, l'ajout d'un bruit dans les spectres entraîne une moins bonne visibilité. Plus le SNR est faible, plus ce bruit est important. Les raies spectrales sont alors moins nettes et il devient difficile de les distinguer.

En dayside, le spectre présentant un SNR = 1000 se confond avec le spectre non bruité. En fait, la résolution spectrale de VenSpec-H est insuffisante pour pouvoir repérer d'éventuelles imperfections dues au faible bruit ajouté. Par contre, dans le spectre atmosphérique associé à un SNR = 250, des oscillations de faible intensité apparaissent à plusieurs nombres d'onde, ce qui pourrait conduire à la détermination d'un VMR de  $\text{SO}_2$  moins précis.

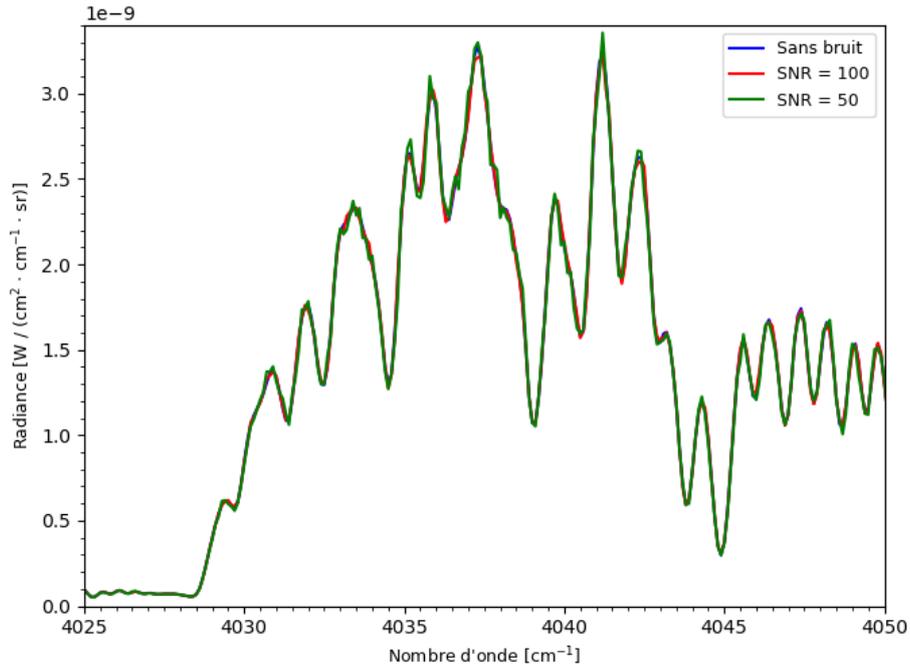


FIG. 7.5: Spectres atmosphériques côté nuit de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL sans bruit (en bleu), avec un SNR = 100 (en rouge) et un SNR = 50 (en vert), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ). La radiance [ $\text{W} / (\text{cm}^2 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{sr})$ ] y est représentée en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ].

En nightside, le bruit ajouté dans les spectres est plus important. Les différences entre le spectre non bruité et celui possédant un SNR = 100 sont déjà bien prononcées. Toutefois, la contribution du bruit devient d'autant plus visible avec SNR = 50.

Ces observations montrent ainsi l'importance d'une résolution spectrale élevée et d'un haut rapport signal sur bruit dans l'interprétation des spectres atmosphériques.

Par après, une inversion de ces spectres en colonne a été réalisée. Les résultats sont résumés dans la Table 4. Quand des spectres non bruités sont inversés, l'*a priori* est bien retrouvé. En revanche, on voit que l'ajout de bruit dans les spectres mène à des VMR déviant de la solution, tant en dayside qu'en nightside. Ces observations sont confirmées par les valeurs du facteur multiplicatif, qui s'écartent de plus en plus de l'unité au fur et à mesure que le SNR diminue. En outre, puisque la qualité des spectres est réduite, il devient difficile d'en tirer de l'information sur l'état atmosphérique de Vénus, ce qui se traduit par de plus faibles valeurs du degré de liberté. Autrement dit, ASIMUT-ALVL détermine des VMR de  $\text{SO}_2$  qui dépendent davantage de l'*a priori*.

| Observation | SNR        | VMR [ppm]                   | DOF    | x      |
|-------------|------------|-----------------------------|--------|--------|
| Dayside     |            | <i>a priori</i> : 7533.9313 |        |        |
|             | Sans bruit | 7533.9310 $\pm$ 0.0020      | 0.9996 | 0.9999 |
|             | 1000       | 7546.8700 $\pm$ 0.0020      | 0.9996 | 1.0017 |
|             | 250        | 7525.5352 $\pm$ 0.0079      | 0.9938 | 0.9989 |
| Nightside   |            | <i>a priori</i> : 7534.3690 |        |        |
|             | Sans bruit | 7534.3686 $\pm$ 0.0011      | 0.9999 | 0.9999 |
|             | 100        | 7533.7996 $\pm$ 0.0113      | 0.9873 | 0.9999 |
|             | 50         | 7521.5146 $\pm$ 0.0225      | 0.9495 | 0.9982 |

TAB. 4: Résultats des inversions de spectres atmosphériques côté jour et côté nuit de Vénus, sans bruit et avec différents SNR, en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ). Les VMR [ppm] de dioxyde soufre sont donnés en colonne. Le degré de liberté (DOF) et un facteur multiplicatif ( $x$ ) entre la solution trouvée et l'*a priori* sont indiqués.

Ensuite, nous avons réalisé une inversion spectrale en profil pour chaque cas. La distribution du VMR de dioxyde de soufre en fonction de l'altitude est montrée ci-dessous, côté jour (Fig. 7.6) et côté nuit (Fig. 7.7).

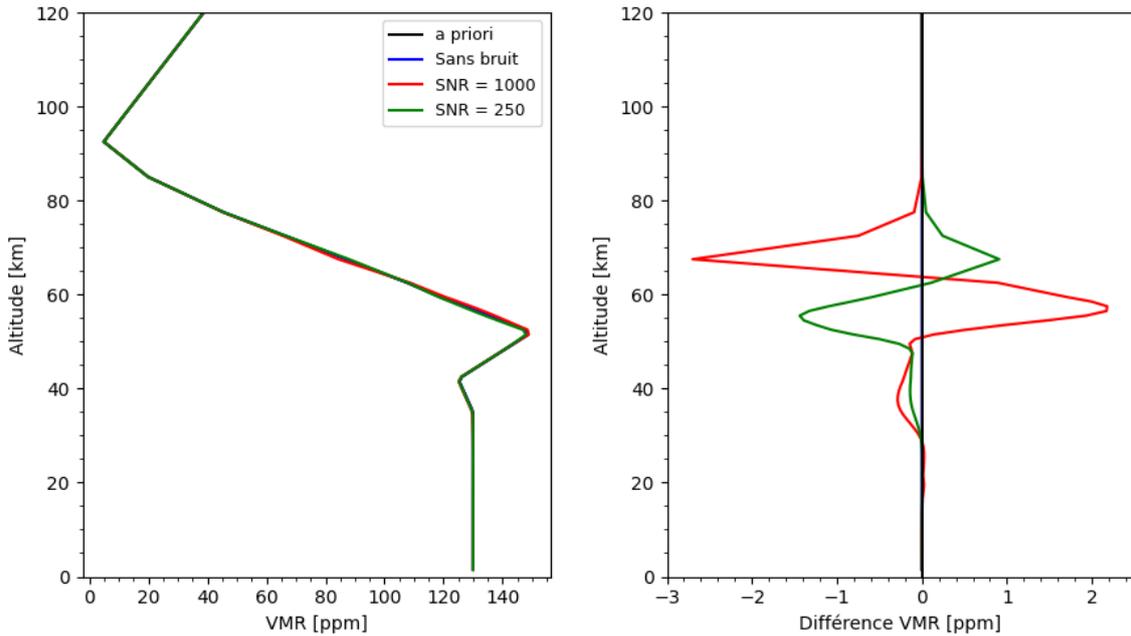


FIG. 7.6: À gauche : Profil du VMR [ppm] de  $\text{SO}_2$  en fonction de l'altitude [km], calculé en dayside sans bruit (en bleu), avec un SNR = 1000 (en rouge) et un SNR = 250 (en vert), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ). Le profil vertical *a priori* (en noir) du dioxyde de soufre y est également représenté. À droite : Différence [ppm] entre le VMR de  $\text{SO}_2$  obtenu sans bruit ainsi que pour chaque SNR pré-cité et l'*a priori*, en fonction de l'altitude [km].

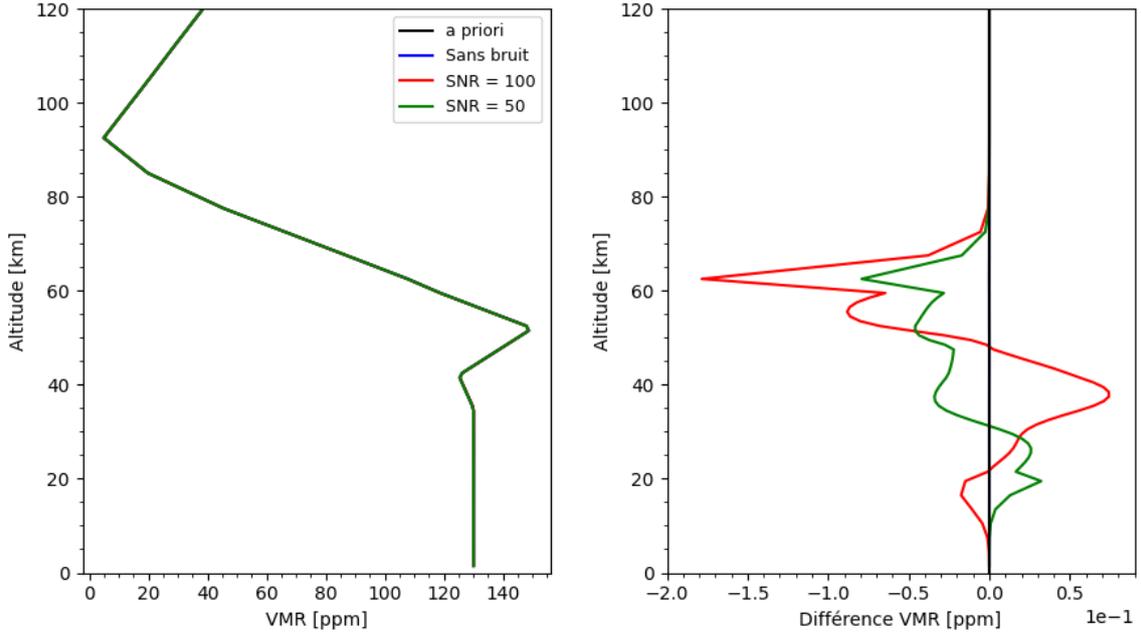


FIG. 7.7: À gauche : Profil du VMR [ppm] de SO<sub>2</sub> en fonction de l'altitude [km], calculé en nightside sans bruit (en bleu), avec un SNR = 100 (en rouge) et un SNR = 50 (en vert), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>). Le profil vertical *a priori* (en noir) du dioxyde de soufre y est également représenté. À droite : Différence [ppm] entre le VMR de SO<sub>2</sub> obtenu sans bruit ainsi que pour chaque SNR pré-cité et l'*a priori*, en fonction de l'altitude [km].

Les profils en dayside montrent des écarts significatifs, de l'ordre du ppm, par rapport à l'*a priori* au niveau et au-dessus des nuages. En outre, des déviations de l'ordre du dixième de ppm sont constatées entre la solution déduite et l'*a priori* en nightside, en-dessous des couches de nuages.

Ces résultats mettent une nouvelle fois en évidence l'influence de la qualité du spectre sur l'inversion spectrale et de ce fait, sur la précision de la détermination du VMR de SO<sub>2</sub>.

Aussi, une étude du degré de liberté a été effectuée pour ces diverses conditions d'observations et de mesures. Les différences observées sont relativement faibles, tant en dayside (Fig. 7.8) qu'en nightside (Fig. 7.9). Néanmoins, la présence de bruit dans les spectres réduit inévitablement la quantité d'information exploitable.

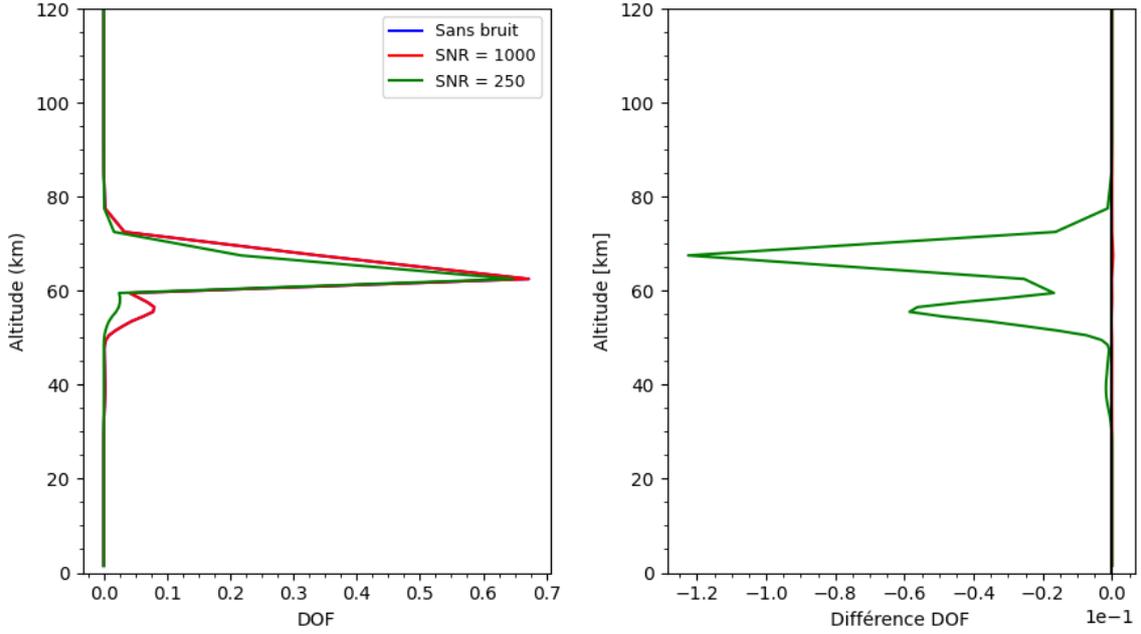


FIG. 7.8: À gauche: Degré de liberté en fonction de l'altitude [km], calculé en dayside sans bruit (en bleu), avec un SNR = 1000 (en rouge) et un SNR = 250 (en vert), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ). À droite: Différence entre le degré de liberté associé à chaque SNR pré-cité et celui obtenu sans bruit, en fonction de l'altitude [km].

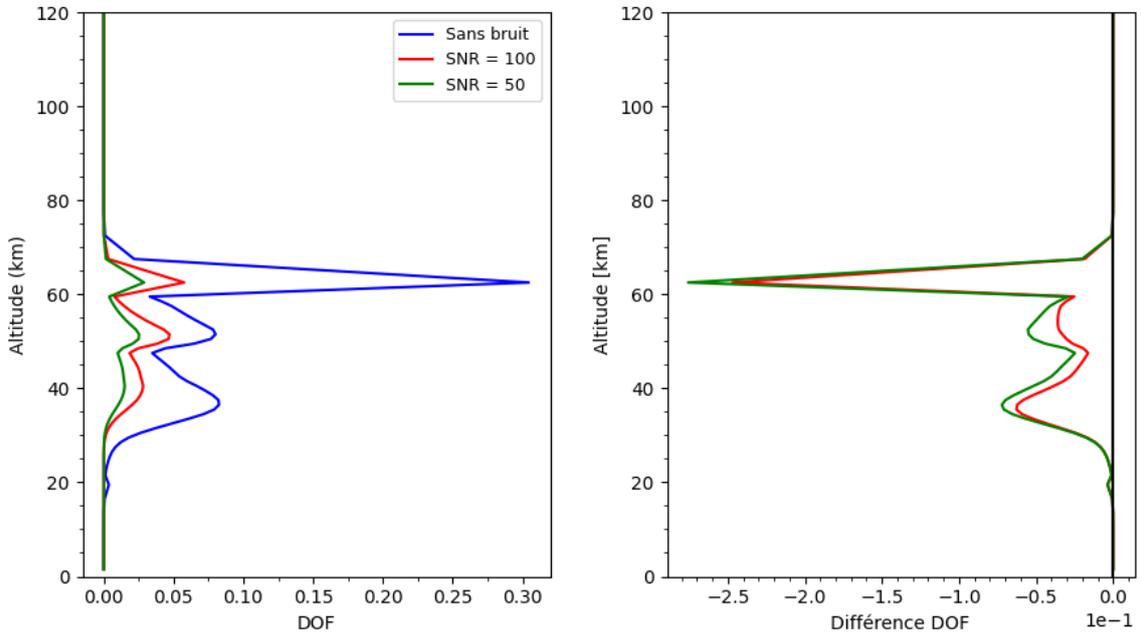


FIG. 7.9: À gauche: Degré de liberté en fonction de l'altitude [km], calculé en nightside sans bruit (en bleu), avec un SNR = 100 (en rouge) et un SNR = 50 (en vert), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ). À droite: Différence entre le degré de liberté associé à chaque SNR pré-cité et celui obtenu sans bruit, en fonction de l'altitude [km].

### 7.3 Étude de l'*a priori*

Un moyen pour évaluer les caractéristiques instrumentales optimales consiste à simuler un spectre atmosphérique en modifiant l'abondance *a priori* de SO<sub>2</sub>, et à vérifier si la qualité de ce spectre est suffisante pour retrouver cette valeur lors de l'inversion spectrale en partant d'un état de référence.

Dès lors, plusieurs spectres atmosphériques ont été calculés en dayside et en nightside, en considérant l'*a priori* initial et des abondances de dioxyde de soufre augmentées de 5%, 10% et 20%. Pour ce faire, nous avons utilisé la résolution spectrale de VenSpec-H ainsi qu'un SNR = 1000 côté jour (Fig. 7.10) et un SNR = 100 côté nuit (Fig. 7.11).

En dayside, des différences relatives assez faibles, inférieures à 1%, sont constatées. En revanche, en nightside, ces différences sont d'un ordre de grandeur plus élevées. Dans chaque cas, les écarts de radiance les plus importants se trouvent au niveau de la branche P du SO<sub>2</sub> entre 4030 et 4050 cm<sup>-1</sup> ainsi que dans la branche R de la molécule entre 4055 à 4075 cm<sup>-1</sup>. Par exemple, un pic de différence de 1,2 % à 4065 cm<sup>-1</sup> côté jour et de 12,5% à 4060 cm<sup>-1</sup> côté nuit sont observés entre le spectre de référence (en bleu) et celui correspondant à l'*a priori* de +20% (en orange). En fait, puisque le SNR en nightside est plus faible que celui en dayside, les spectres contiennent plus de bruit, ce qui impacte d'autant plus la radiance.

Ensuite, ces spectres ont été inversés en colonne, en prenant l'abondance *a priori* initiale de SO<sub>2</sub> comme paramètre d'entrée. L'idée est ainsi de voir si ASIMUT-ALVL est capable de retrouver les VMR modifiés de dioxyde de soufre à partir de ces spectres. Les résultats sont repris dans la Table 5.

| Observation | <i>a priori</i> | VMR [ppm]          | DOF    | x      |
|-------------|-----------------|--------------------|--------|--------|
| Dayside     | 7533.9313       | 7546.8700 ± 0.0020 | 0.9996 | 1.0017 |
|             | +5%             | 7909.0606 ± 0.0019 | 0.9996 | 1.0497 |
|             | +10%            | 8283.6436 ± 0.0019 | 0.9996 | 1.0995 |
|             | +20%            | 9044.5210 ± 0.0020 | 0.9996 | 1.2005 |
| Nightside   | 7534.3690       | 7546.8700 ± 0.0020 | 0.9996 | 1.0017 |
|             | +5%             | 7917.9140 ± 0.0108 | 0.9882 | 1.0509 |
|             | +10%            | 8286.4007 ± 0.0112 | 0.9876 | 1.0998 |
|             | +20%            | 9030.1521 ± 0.0118 | 0.9861 | 1.1985 |

TAB. 5: Résultats des inversions de spectres atmosphériques côté jour et côté nuit de Vénus, pour différentes abondances *a priori* de SO<sub>2</sub>. Un SNR = 1000 en dayside et un SNR = 100 en nightside ont été considérés, et la résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>) a été utilisée. Les VMR [ppm] de dioxyde soufre sont donnés en colonne. Le degré de liberté (DOF) et un facteur multiplicatif (*x*) entre la solution trouvée et l'*a priori* sont indiqués.

Les valeurs du facteur multiplicatif montrent que les solutions trouvées pour les diverses conditions d'observation sont supérieures d'environ 5%, 10% et 20% à l'*a priori* initial.

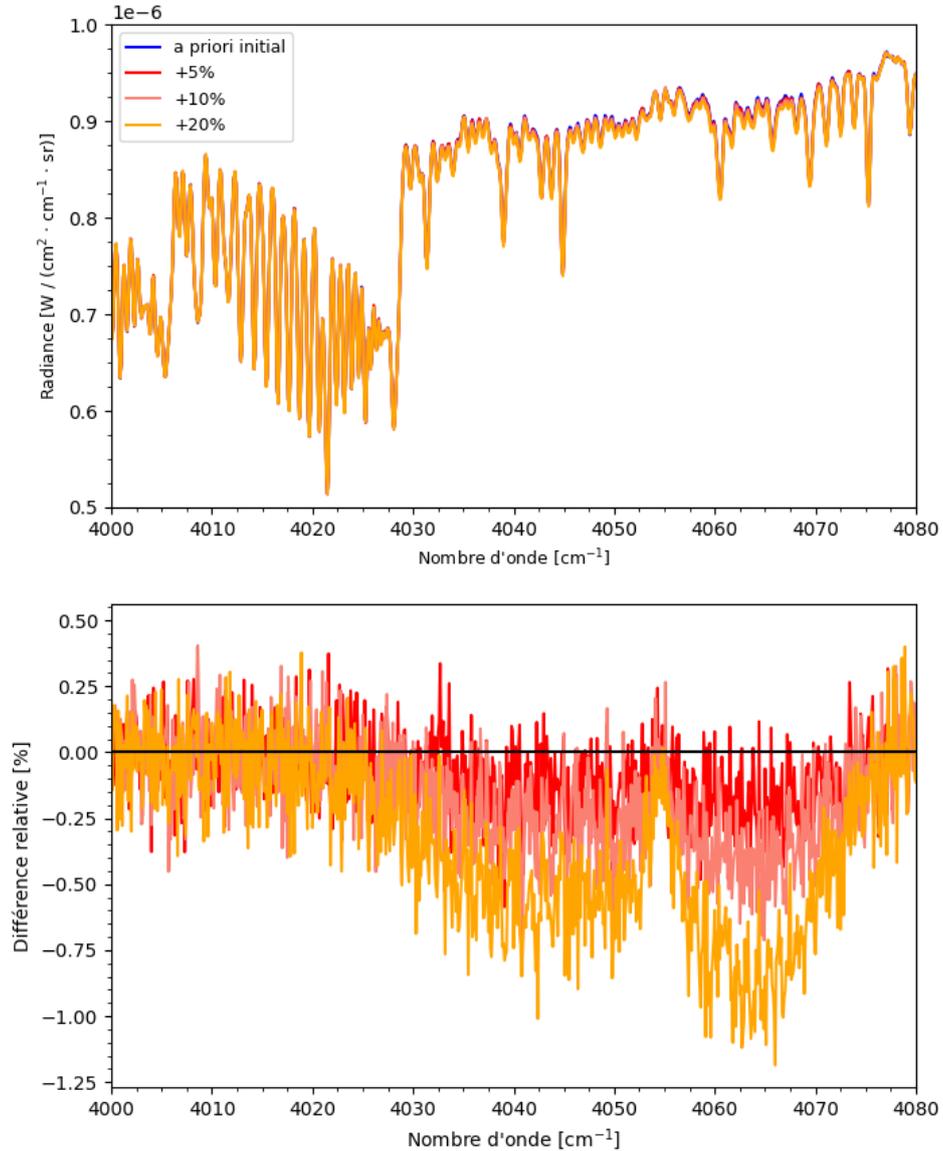


FIG. 7.10: En haut: Spectres atmosphériques côté jour de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL pour une abondance *a priori* de  $\text{SO}_2$  de référence (en bleu), augmentée de 5% (en rouge), de 10 % (en rose) et de 20% (en orange), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ) et un  $\text{SNR} = 1000$ . La radiance [ $\text{W} / (\text{cm}^2 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{sr})$ ] y est représentée en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ]. En bas: Différence relative [%] entre la radiance associée à chaque abondance *a priori* modifiée de  $\text{SO}_2$  et celle correspondant à l'état de référence, en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ].

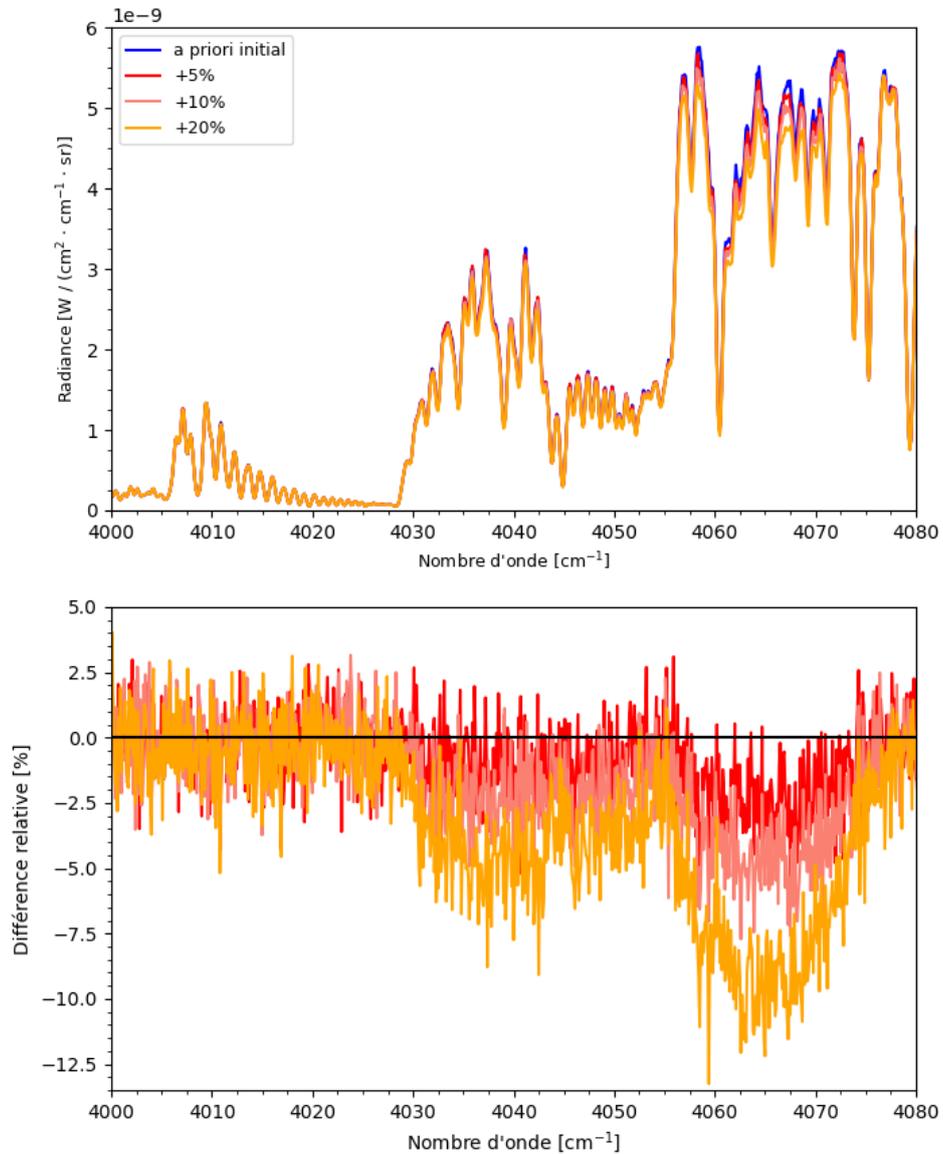


FIG. 7.11: En haut : Spectres atmosphériques côté nuit de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL pour une abondance *a priori* de  $\text{SO}_2$  de référence (en bleu), augmentée de 5% (en rouge), de 10 % (en rose) et de 20% (en orange), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ) et un  $\text{SNR} = 100$ . La radiance [ $\text{W} / (\text{cm}^2 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{sr})$ ]  $y$  est représentée en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ]. En bas : Différence relative [%] entre la radiance associée à chaque abondance *a priori* modifiée de  $\text{SO}_2$  et celle correspondant à l'état de référence, en fonction du nombre d'onde [ $\text{cm}^{-1}$ ].

Cependant, les profils verticaux de concentration côté jour (Fig. 7.12) révèlent des valeurs significativement différentes des valeurs *a priori* modifiées dans la haute atmosphère de Vénus. Comme indiqué ci-dessus (Tab. 4), un SNR = 1000 en dayside réduit la précision de l'abondance de SO<sub>2</sub> déterminée par ASIMUT-ALVL lors de l'inversion spectrale. Par ailleurs, les inversions spectrales en profil côté nuit, données à la Figure 7.13, permettent de retrouver les *a priori* modifiés de l'abondance de SO<sub>2</sub>.

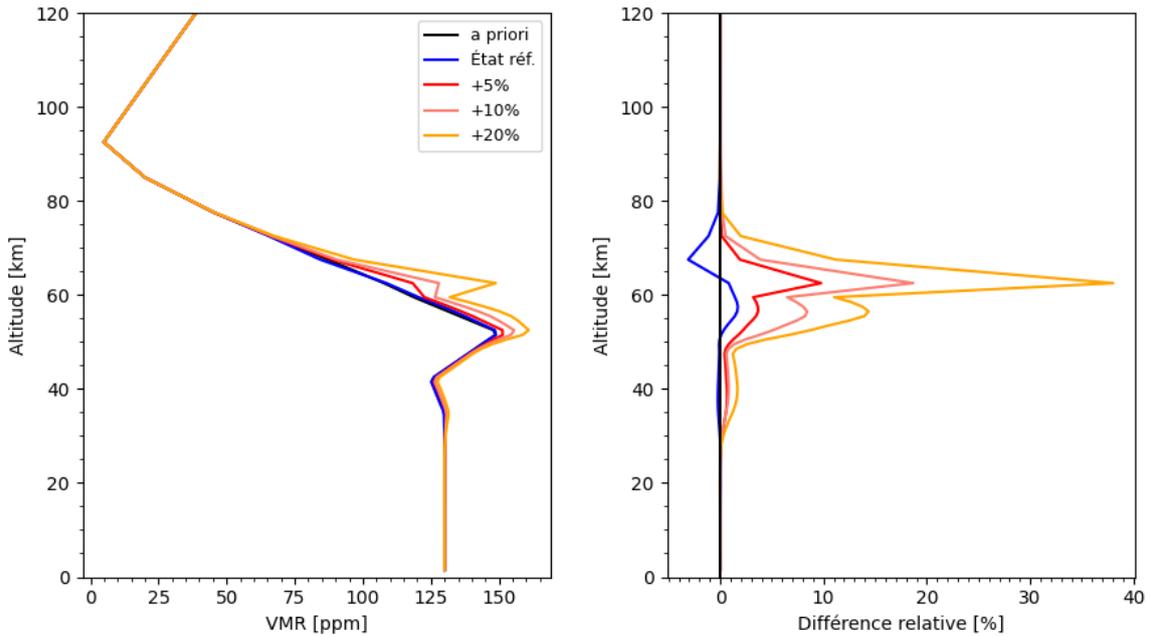


FIG. 7.12: À gauche : Profil du VMR [ppm] de SO<sub>2</sub> en fonction de l'altitude [km], calculé en dayside pour des spectres atmosphériques associés à une abondance *a priori* de SO<sub>2</sub> de référence (en bleu), augmentée de 5% (en rouge), de 10% (en rose) et de 20% (en orange), en considérant l'état de référence comme *a priori* initial (en noir). La résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>) et un SNR = 1000 ont été considérés. À droite : Différence relative [%] entre le VMR de SO<sub>2</sub> obtenu pour chaque *a priori* et l'état initial de l'atmosphère, en fonction de l'altitude.

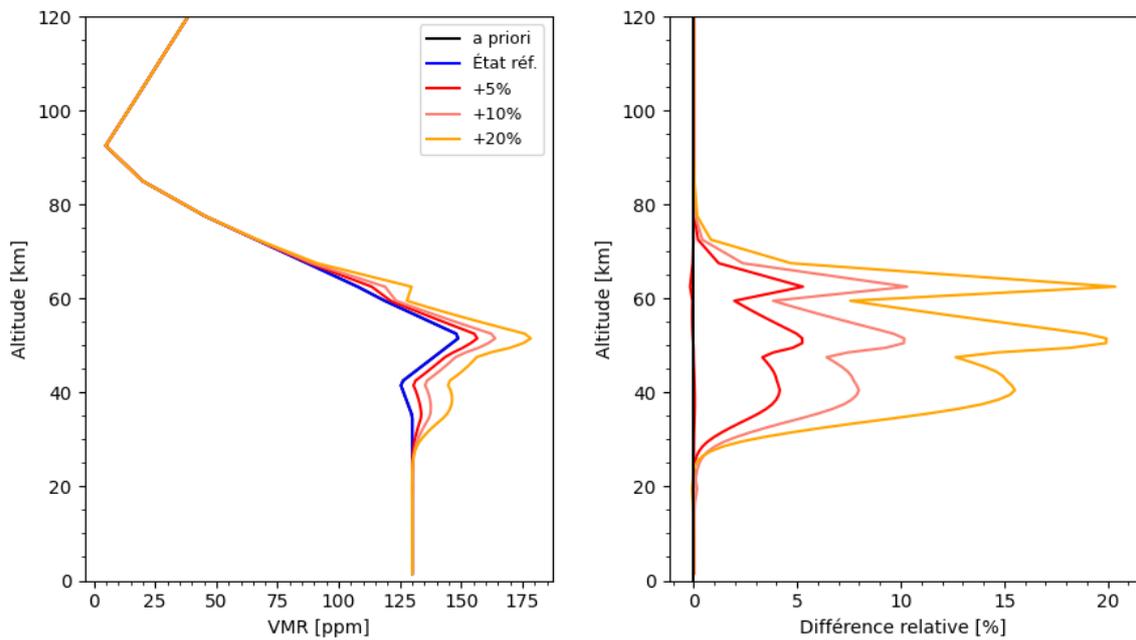


FIG. 7.13: À gauche : Profil du VMR [ppm] de  $\text{SO}_2$  en fonction de l'altitude [km], calculé en nightside pour des spectres atmosphériques associés à une abondance *a priori* de  $\text{SO}_2$  de référence (en bleu), augmentée de 5% (en rouge), de 10% (en rose) et de 20% (en orange), en considérant l'état de référence comme *a priori* initial (en noir). La résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ) et un  $\text{SNR} = 100$  ont été considérés. À droite : Différence relative [%] entre le VMR de  $\text{SO}_2$  obtenu pour chaque *a priori* et l'état initial de l'atmosphère, en fonction de l'altitude.

## 7.4 Étude des paramètres spectroscopiques du SO<sub>2</sub>

La dernière analyse que nous avons réalisée consiste à évaluer l'impact des paramètres spectroscopiques du dioxyde de soufre sur la précision de l'inversion spectrale. Dans ce contexte, des spectres atmosphériques ont été calculés sur base des paramètres spectroscopiques du mélange gazeux SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> et SO<sub>2</sub>-Air décrits dans la Section 6.2, en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ainsi qu'un SNR = 1000 en dayside (Fig. 7.14) et un SNR = 100 en nightside (Fig. 7.15).

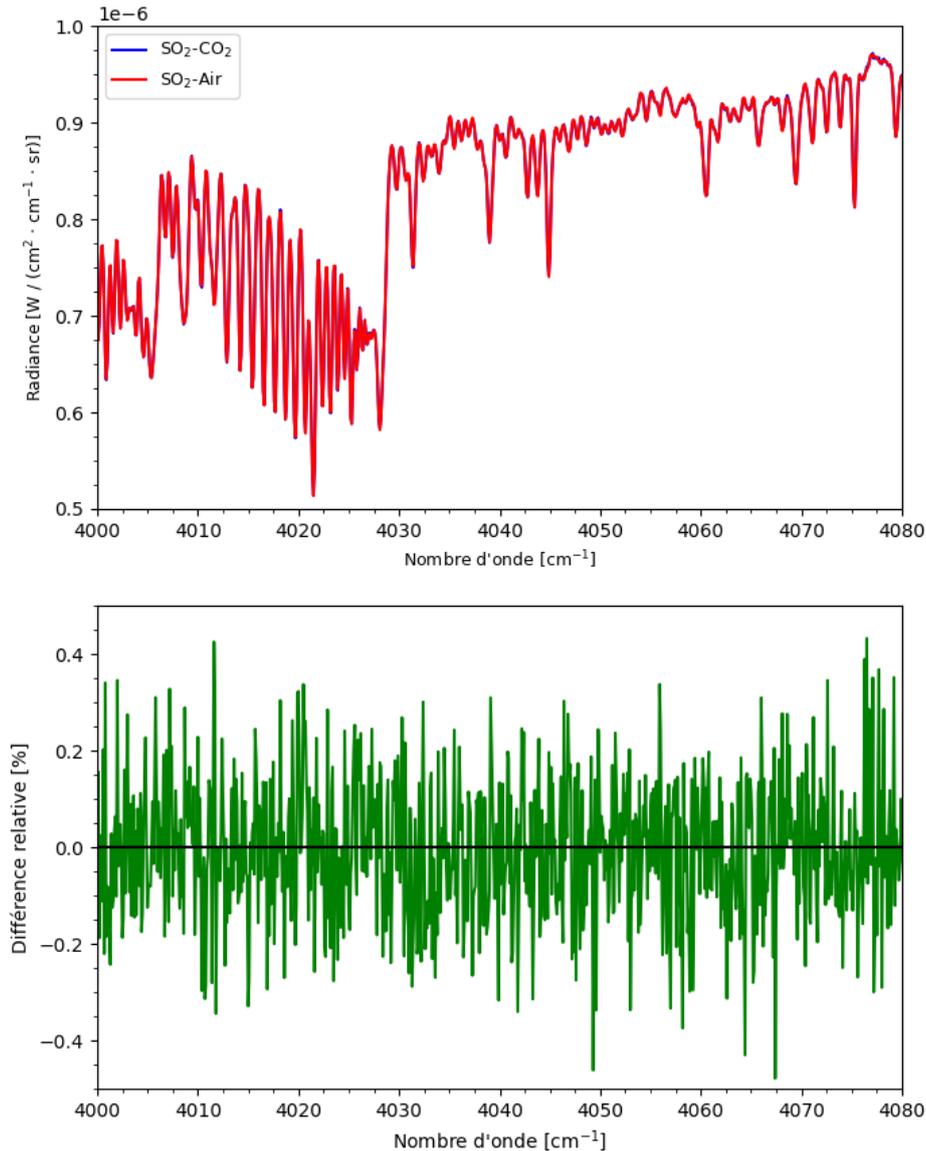


FIG. 7.14: En haut: Spectres atmosphériques côté jour de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL pour deux ensembles de paramètres spectroscopiques, l'un associé au gaz SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> (en bleu) et l'autre correspondant au système SO<sub>2</sub>-Air (en rouge), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>) et un SNR = 1000. La radiance [W/ (cm<sup>2</sup> · cm<sup>-1</sup> · sr)] y est représentée en fonction du nombre d'onde [cm<sup>-1</sup>]. En bas: Différence relative [%] (en vert) des radiances obtenues pour le gaz SO<sub>2</sub>-Air et SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>, en fonction du nombre d'onde [cm<sup>-1</sup>].

Au-dessus des nuages, les différences de radiances restent relativement faibles sur toute la gamme spectrale infrarouge, l'écart relatif maximal que l'on observe étant d'environ 0,4%. En revanche, dans la basse atmosphère de Vénus, les différences relatives de radiances sont considérablement plus importantes. Ces spectres en nightside sont davantage bruités en comparaison aux spectres en dayside, ce qui pourrait expliquer de tels écarts.

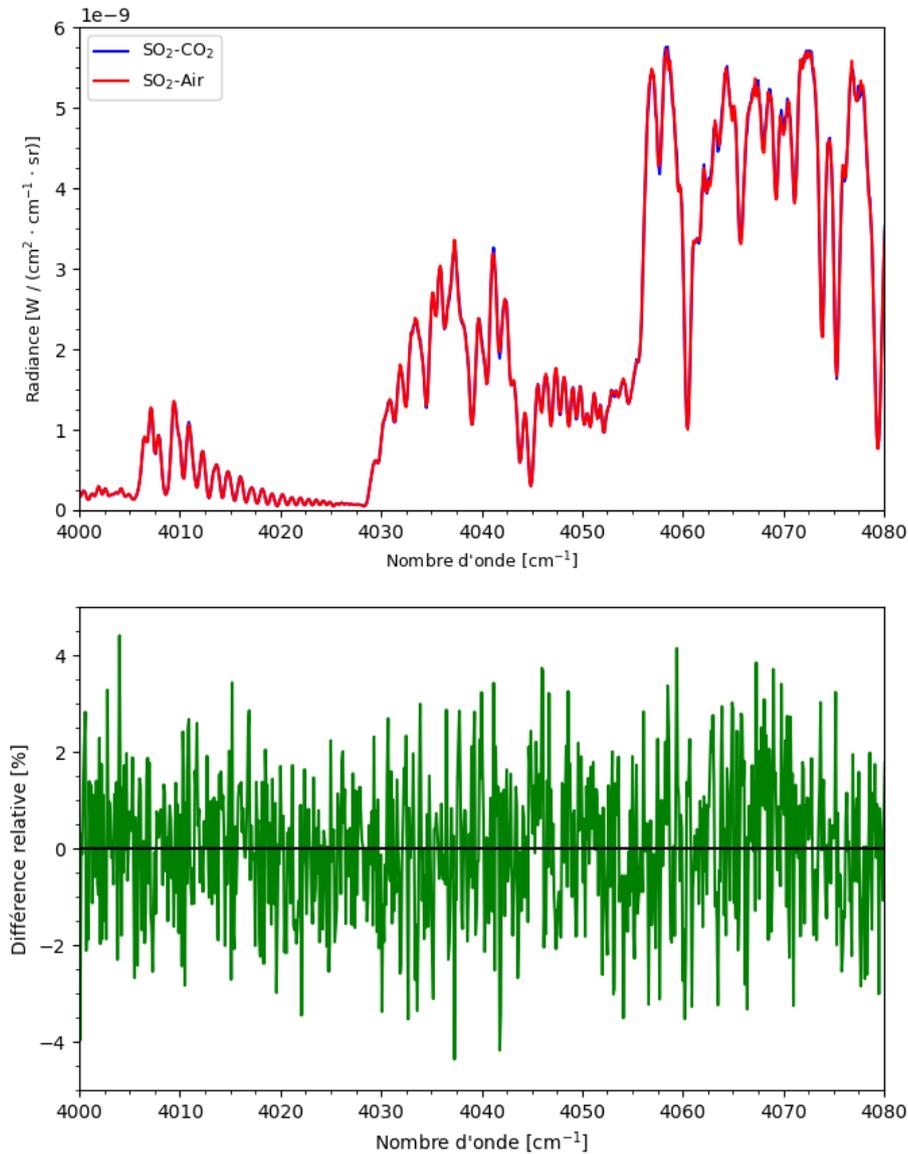


FIG. 7.15: En haut: Spectres atmosphériques côté nuit de Vénus, simulés à l'aide d'ASIMUT-ALVL pour deux ensembles de paramètres spectroscopiques, l'un associé au gaz  $\text{SO}_2\text{-CO}_2$  (en bleu) et l'autre correspondant au système  $\text{SO}_2\text{-Air}$  (en rouge), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H ( $0,4 \text{ cm}^{-1}$ ) et un  $\text{SNR} = 100$ . La radiance  $[\text{W} / (\text{cm}^2 \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{sr})]$  y est représentée en fonction du nombre d'onde  $[\text{cm}^{-1}]$ . En bas: Différence relative [%] (en vert) des radiances obtenues pour le gaz  $\text{SO}_2\text{-Air}$  et  $\text{SO}_2\text{-CO}_2$ , en fonction du nombre d'onde  $[\text{cm}^{-1}]$ .

Par la suite, les spectres simulés avec le mélange gazeux SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> ont été inversés en colonne, en fournissant d’abord les paramètres spectroscopiques correspondants, puis ceux du mélange gazeux SO<sub>2</sub>-Air (Tab. 6).

| Observation | Param. Spec.                      | VMR [ppm]                   | DOF    | x      |
|-------------|-----------------------------------|-----------------------------|--------|--------|
| Dayside     |                                   | <i>a priori</i> : 7533.9313 |        |        |
|             | SO <sub>2</sub> - CO <sub>2</sub> | 7546.8700 ± 0.0020          | 0.9996 | 1.0017 |
|             | SO <sub>2</sub> - Air             | 7566.8111 ± 0.0019          | 0.9996 | 1.0044 |
| Nightside   |                                   | <i>a priori</i> : 7534.3690 |        |        |
|             | SO <sub>2</sub> - CO <sub>2</sub> | 7533.7996 ± 0.0113          | 0.9873 | 0.9999 |
|             | SO <sub>2</sub> - Air             | 7490.2415 ± 0.0107          | 0.9886 | 0.9941 |

TAB. 6: Résultats des inversions de spectres atmosphériques côté jour et côté nuit de Vénus, pour différents ensembles de paramètres spectroscopiques du SO<sub>2</sub>. Un SNR = 1000 en dayside et un SNR = 100 en nightside ont été considérés, et la résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>) a été utilisée. Les VMR [ppm] de dioxyde soufre sont donnés en colonne. Le degré de liberté (DOF) et un facteur multiplicatif (*x*) entre la solution trouvée et l’*a priori* sont indiqués.

Quand les spectres sont inversés avec les paramètres spectroscopiques adéquats du SO<sub>2</sub>, l’ajustement s’approche fortement de l’*a priori*. Comme expliqué ci-dessus, les déviations observées proviennent du bruit ajouté aux spectres. Par contre, en tronquant ces paramètres spectroscopiques du SO<sub>2</sub>, on obtient des VMR s’écartant significativement de l’*a priori*, tant du côté jour que du côté nuit. Ceci est encore plus clair lorsque nous regardons les profils verticaux de VMR du SO<sub>2</sub>. En dayside (Fig. 7.16), des différences de VMR allant jusqu’à 7,5 ppm sont en effet observées. Ces différences sont plus faibles en nightside (Fig. 7.17) en raison du plus petit SNR et donc, de la moins bonne qualité des spectres. Cependant, des valeurs de l’ordre du ppm sont tout de même constatées.

Ces résultats montrent l’intérêt de disposer de paramètres spectroscopiques précis lors d’études atmosphériques. Pour connaître la variabilité verticale du dioxyde de soufre dans l’atmosphère de Vénus, et donc obtenir des informations sur le volcanisme ou la formation des nuages au sein de la planète, des mesures précises en laboratoire des paramètres spectroscopiques du mélange gazeux SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> sont donc requises pour la gamme spectrale ciblée par VenSpec-H.

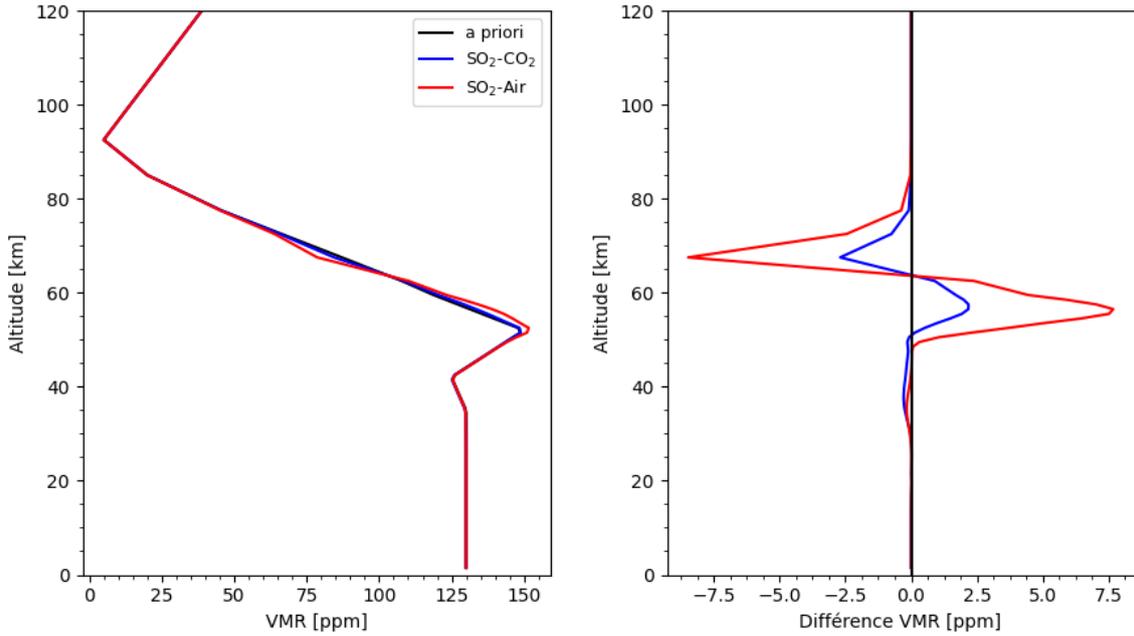


FIG. 7.16: À gauche : Profil du VMR [ppm] de SO<sub>2</sub> en fonction de l'altitude [km], calculé en dayside pour deux ensembles de paramètres spectroscopiques, l'un associé au gaz SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> (en bleu) et l'autre correspondant au système SO<sub>2</sub>-Air (en rouge), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>) et un SNR = 1000. Le profil vertical *a priori* (en noir) du dioxyde de soufre y est également représenté. À droite : Différence [ppm] entre les VMR obtenus pour le gaz SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> et SO<sub>2</sub>-Air, en fonction de l'altitude.

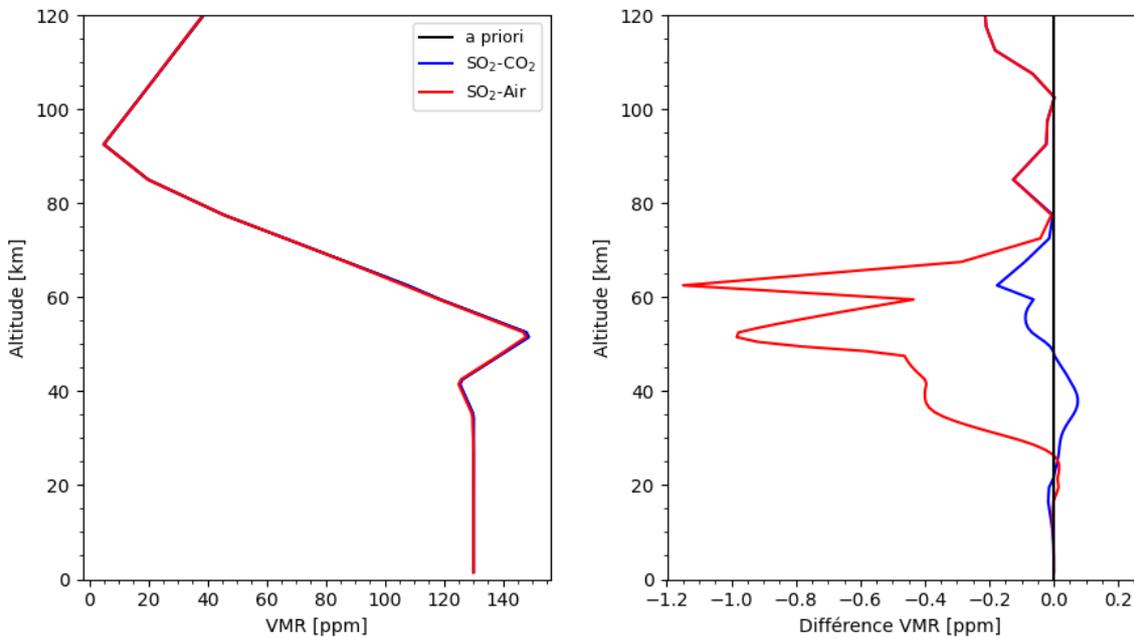


FIG. 7.17: À gauche : Profil du VMR [ppm] de SO<sub>2</sub> en fonction de l'altitude [km], calculé en nightside pour deux ensembles de paramètres spectroscopiques, l'un associé au gaz SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> (en bleu) et l'autre correspondant au système SO<sub>2</sub>-Air (en rouge), en considérant la résolution spectrale de VenSpec-H (0,4 cm<sup>-1</sup>) et un SNR = 100. Le profil vertical de *a priori* (en noir) du dioxyde de soufre y est également représenté. À droite : Différence [ppm] entre les VMR obtenus pour le gaz SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> et SO<sub>2</sub>-Air, en fonction de l'altitude.

## 8 Conclusions et perspectives

Dans le cadre de ce mémoire, nous avons analysé les performances du spectromètre VenSpec-H à bord de la sonde spatiale EnVision ainsi que l'effet des paramètres spectroscopiques du dioxyde de soufre sur la précision de la détermination de son abondance dans l'atmosphère de Vénus. Pour ce faire, de nombreux spectres atmosphériques en visée nadir ont d'abord été simulés côté jour et côté nuit dans l'infrarouge moyen à l'aide du logiciel ASIMUT-ALVL, en considérant la contribution d'aérosols et des principaux composants atmosphériques de la planète. Ensuite, à partir de ces données, des inversions spectrales ont été réalisées par la méthode de l'estimation optimale afin de déterminer le VMR de SO<sub>2</sub> en colonne et en profil.

En l'absence de bruit, les spectres atmosphériques calculés avec une résolution spectrale de 0,4 cm<sup>-1</sup> étaient d'une qualité suffisante pour permettre à ASIMUT-ALVL de retrouver la concentration *a priori* de SO<sub>2</sub>. En effet, des différences relativement faibles, de l'ordre de 10<sup>-4</sup> ppm en dayside et de 10<sup>-5</sup> ppm en nightside, ont été trouvées. En outre, cette première étude a permis de mettre en évidence l'impact de la résolution spectrale sur la quantité d'information qui peut être déduite d'un spectre. Des écarts de degré de liberté d'environ 10<sup>-2</sup> ont été observés selon la résolution spectrale. Par la suite, nous nous sommes intéressés au SNR et nous avons remarqué que les VMR calculés déviaient de la solution *a priori* de quelques ppm en dayside et de plusieurs dixièmes de ppm en nightside quand le bruit augmentait dans les spectres. Ceci s'est également reflété sur le DOF, plus faible lorsqu'un plus petit SNR est considéré.

En tenant compte de ces résultats, des spectres atmosphériques bruités à haute résolution spectrale (0,4 cm<sup>-1</sup>) ont été simulés avec d'autres abondances *a priori*, puis inversés avec la concentration *a priori* initiale du SO<sub>2</sub>, confirmant alors les résultats précédents.

Ces analyses montrent que davantage d'information peut être déduite des spectres atmosphériques en augmentant le SNR lors de la conception de l'instrument. En outre, Vincent *et al.* [79] ont étudié diverses méthodes pour maximiser le degré de liberté du signal. Celles-ci visent en fait à sélectionner de façon optimale une grille verticale en se basant sur l'emplacement de l'information. La première méthode consiste en une décomposition de l'atmosphère en niveaux verticaux régulièrement espacés, la seconde méthode repose sur le calcul de la trace cumulative du noyau de moyennage et enfin, la troisième méthode exploite la corrélation entre les niveaux de l'atmosphère. Il serait donc intéressant d'implémenter l'une de ces méthodes dans ASIMUT-ALVL de manière à déterminer les altitudes de l'atmosphère vénusienne fournissant le plus d'information.

Enfin, nous avons montré que les paramètres spectroscopiques du SO<sub>2</sub> influaient fortement sur l'inversion spectrale. Des différences d'abondance de l'ordre du ppm ont été constatées en colonne et en profil, tant en dayside qu'en nightside, lorsque le jeu de paramètres du mélange gazeux SO<sub>2</sub>-Air était considéré. Par ailleurs, les paramètres spectroscopiques du gaz SO<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub> dans la base de données HITRAN2016 proviennent principalement de considérations théoriques. Des mesures spectroscopiques en laboratoire devraient dès lors être envisagées dans la gamme spectrale infrarouge ciblée par VenSpec-H afin d'obtenir les paramètres de raies les plus précis possibles.

## Références

- [1] P. J. MOHR, D. B. NEWELL et B. N. TAYLOR : Codata recommended values of the fundamental physical constants : 2014, 2015.
- [2] M. LEPÈRE et Suppl. A. C. VANDAELE : Cours - Sondage et physique de l'atmosphère. Université de Namur, 2022.
- [3] OBSERVATOIRE DE PARIS - LABORATOIRE D'ÉTUDES SPATIALES ET D'INSTRUMENTATION EN ASTROPHYSIQUE (LESIA) : EnVision - Understanding why Earth's closest neighbour is so different. <https://sites.lesia.obspm.fr/envision/>. Consulté le 02/06/2022.
- [4] L. ROSSI : *Étude des nuages de Vénus par polarimétrie avec les données de l'instrument SPICAV-IR à bord de Venus Express*. Thèse de doctorat, Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines, 2015.
- [5] M. LEFÈVRE : *Modélisation petite échelle de l'atmosphère de Vénus: convection et onde de gravité*. Thèse de doctorat, Sorbonne Université, 2018.
- [6] EUROPEAN SPACE AGENCY (ESA) : EnVision - Understanding why Earth's closest neighbour is so different. Rapport d'étude d'évaluation (Yellow Book), 2021.
- [7] INSTITUT ROYAL D'AÉRONOMIE SPATIALE DE BELGIQUE (BIRA-IASB) : VenSpec-H Design Definition File. Rapport de la Phase A d'EnVision, 2021.
- [8] J. HELBERT, A. C. VANDAELE, E. MARCQ, S. ROBERT, C. RYAN, G. GUIGNAN, Y. M. ROSAS-ORTIZ, E. NEEFS, I. THOMAS, G. ARNOLD, G. PETER, T. WIDEMANN et L. M. LARA : The VenSpec suite on the ESA EnVision mission to Venus. *In Infrared Remote Sensing and Instrumentation XXVII*, volume 11128 de *A1112804*, page 6, San Diego, 2019. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE).
- [9] S. ROBERT, C. MACOVENCO, M. LEFÈVRE, C. WILSON, E. MARCQ, B. BÉZARD, J. HELBERT et A. C. VANDAELE : Detecting Venus volcanic gas plumes with VenSpec-H. volume 15, conférence virtuelle, 2021. European Planetary Science Congress (EPSC).
- [10] J. VANHAMEL, A. C. VANDAELE, E. NEEFS, S. ROBERT, L. JACOBS, S. BERKENBOSCH, I. THOMAS, B. BEECKMAN, W. MOELANS, S. LESSCHAEVE, A. ALGOEDT, L. De VOS et M. VAUGHAN : Design and Development of the VenSpec-H Instrument. volume 14, conférence virtuelle, 2020. Europlanet Science Congress (EPSC).
- [11] INSTITUT ROYAL D'AÉRONOMIE SPATIALE DE BELGIQUE (BIRA-IASB) : Sulphur dioxide in the Earth's atmosphere. <https://sacs.aeronomie.be/so2-atmos.php>. Consulté le 15/05/2022.
- [12] A. C. VANDAELE : *Développement d'instruments pour la détection de constituants troposphériques minoritaires par spectroscopie différentielle dans le domaine UV-Visible*. Thèse de doctorat, Université Libre de Bruxelles, 1997.
- [13] E. BIÉMONT : *Spectroscopie moléculaire: structures moléculaires et analyse spectrale*. De Boeck, Bruxelles, 2008.
- [14] G. HERZBERG : *Molecular spectra and molecular structure. Vol.2: Infrared and Raman spectra of polyatomic molecules*. Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1945.
- [15] P. F. BERNATH : *Spectra of atoms and molecules*. Topics in physical chemistry. Oxford University Press, New York, 1995.
- [16] D. PAPOUŠEK et M. R. ALIEV : *Molecular vibrational-rotational spectra: theory and applications of high resolution infrared, microwave, and Raman spectroscopy of po-*

- lyatomic molecules*. Numéro 17 de Studies in physical and theoretical chemistry. Elsevier Scientific Pub. Co., Amsterdam, 1982.
- [17] M. LEPÈRE: Cours - Physique moléculaire et environnement. Université de Namur, 2021.
- [18] M. LEPÈRE: Cours - Profils spectraux. Université de Namur, 2021.
- [19] L. FABRIS: Étude par spectroscopie QCL du mélange gazeux SO<sub>2</sub> - CO<sub>2</sub> en vue d'une application planétologique liée à l'atmosphère de Vénus. Projet de recherche de Master, Université de Namur, 2020.
- [20] C. CASTAGNOLI: *Study of Jupiter's auroral regions through the measurements of the Juno/JIRAM instrument*. Thèse de doctorat, Université de Bologne, 2020.
- [21] B. VISPOEL: *Étude par spectroscopie diode-laser de paramètres collisionnels de raies d'absorption infrarouge du méthane aux basses et hautes températures*. Thèse de doctorat, Université de Namur, 2016.
- [22] L. FISSIAUX: *Paramètres collisionnels de raies d'absorption infrarouge d'hydrocarbures: des basses jusqu'aux hautes températures*. Thèse de doctorat, Université de Namur, 2013.
- [23] M. LÓPEZ-PUERTAS et F. W. TAYLOR.: *Non-LTE Radiative Transfer in the Atmosphere*, volume 3 de *Series on Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics*. World Scientific, Singapore, 2001.
- [24] K. N. LIOU: *An introduction to atmospheric radiation*. Numéro v. 84 de International geophysics series. Academic Press, Amsterdam ; Boston, seconde édition, 2002.
- [25] G. W. PETTY: *A first course in atmospheric radiation*. Sundog Publishing, Madison, Wisconsin, seconde édition, 2006.
- [26] INSTITUT ROYAL D'AÉRONOMIE SPATIALE DE BELGIQUE (BIRA-IASB): Radiative transfer modelling and spectrum retrieval in a non-scattering atmosphere (ASIMUT) and scattering atmosphere ((V)LIDORT). Manuel d'utilisation et description scientifique d'ASIMUT-ALVL, 2022.
- [27] C. D. RODGERS: *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*, volume 2 de *Series on Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics*. World Scientific, Singapore, 2000.
- [28] M. MAAHN, D. D. TURNER, U. LÖHNERT, D. J. POSSELT, K. EBELL, G. G. MACE et J. M. COMSTOCK: Optimal Estimation Retrievals and Their Uncertainties: What Every Atmospheric Scientist Should Know. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 101(9):E1512–E1523, 2020.
- [29] A. C. POVEY: *The application of optimal estimation retrieval to lidar observations*. Thèse de doctorat, Université d'Oxford, St. John's College, 2013.
- [30] F. DUCHENE: Étude spectroscopique et atmosphérique du méthane dilué dans l'azote. Mémoire de Master, Université de Namur, 2015.
- [31] E. S. BARKER: Detection of SO<sub>2</sub> in the UV spectrum of Venus. *Geophysical Research Letters*, 6(2):117–120, 1979.
- [32] R. R. CONWAY, R. P. MCCOY, C. A. BARTH et A. L. LANE: In situ detection of sulfur dioxide in the atmosphere of Venus. *Geophysical Research Letters*, 6(7):629–631, 1979.
- [33] A. I. STEWART, D. E. ANDERSON, L. W. ESPOSITO et C. A. BARTH: Ultraviolet Spectroscopy of Venus: Initial Results from the Pioneer Venus Orbiter. *Science*, 203(4382):777–779, 1979.

- [34] L. W. ESPOSITO, M. COPLEY, R. ECKERT, L. GATES, A. I. STEWART et H. WORDEN : Sulfur dioxide at the Venus cloud tops, 1978–1986. *Journal of Geophysical Research*, 93(D5):5267–5276, 1988.
- [35] C. Y. NA, L. W. ESPOSITO et T. E. SKINNER : International ultraviolet explorer observation of Venus SO<sub>2</sub> and SO. *Journal of Geophysical Research*, 95(D6):7485–7491, 1990.
- [36] W. E. MCCLINTOCK, C. A. BARTH et R. A. KOHNERT : Sulfur Dioxide in the Atmosphere of Venus: I. sounding rocket observations. *Icarus*, 112(2):382–388, 1994.
- [37] C. Y. NA, L. W. ESPOSITO, W. E. MCCLINTOCK et C. A. BARTH : Sulfur Dioxide in the Atmosphere of Venus. *Icarus*, 112(2):389–395.
- [38] V. I. MOROZ, D. SPÄNKUCH, D. V. TITOV, K. SCHÄFER, A. V. DYACHKOV, W. DOHLER, L. V. ZASOVA, D. OERTEL, V. M. LINKIN et J. NOPIRAKOWSKI : Water vapor and sulfur dioxide abundances at the Venus cloud tops from the Venera-15 infrared spectrometry data. *Advances in Space Research*, 10(5):77–81, 1990.
- [39] L. V. ZASOVA, V. I. MOROZ, L. W. ESPOSITO et C. Y. NA : SO<sub>2</sub> in the Middle Atmosphere of Venus: IR Measurements from Venera-15 and Comparison to UV Data. *Icarus*, 105(1):92–109, 1993.
- [40] C. Y. NA et L. W. ESPOSITO : UV Observation of Venus with HST. Acte de la 27e réunion annuelle de l’AAS/DPS, Hawaï, 1995.
- [41] E. MARCQ, D. BELYAEV, F. MONTMESSIN, A. FEDOROVA, J. L. BERTAUX, A. C. VANDAELE et E. NEEFS : An investigation of the SO<sub>2</sub> content of the venusian mesosphere using SPICAV-UV in nadir mode. *Icarus*, 211(1):58–69, 2011.
- [42] E. MARCQ, J. L. BERTAUX, F. MONTMESSIN et D. BELYAEV : Variations of sulphur dioxide at the cloud top of Venus’s dynamic atmosphere. *Nature Geoscience*, 6(1):25–28, 2013.
- [43] E. MARCQ, K. L. JESSUP, L. BAGGIO, T. ENCRENAZ, Y. J. LEE, F. MONTMESSIN, D. BELYAEV, O. KORABLEV et J. L. BERTAUX : Climatology of SO<sub>2</sub> and UV absorber at Venus’ cloud top from SPICAV-UV nadir dataset. *Icarus*, 335:113368, 2020.
- [44] D. BELYAEV, F. MONTMESSIN, J. L. BERTAUX, A. MAHIEUX, A. FEDOROVA, O. I. KORABLEV, E. MARCQ, Y. L. YUNG et X. ZHANG : Vertical profiling of SO<sub>2</sub> and SO above Venus’ clouds by SPICAV/SOIR solar occultations. *Icarus*, 217(2):740–751, 2012.
- [45] D. BELYAEV, O. KORABLEV, A. FEDOROVA, J. L. BERTAUX, A. C. VANDAELE, F. MONTMESSIN, A. MAHIEUX, V. WILQUET et R. DRUMMOND : First observations of SO<sub>2</sub> above Venus’ clouds by means of Solar Occultation in the Infrared. *Journal of Geophysical Research*, 113(E00B25):10, 2008.
- [46] A. MAHIEUX, A. C. VANDAELE, S. ROBERT, V. WILQUET, R. DRUMMOND, S. CHAMBERLAIN, D. BELYAEV et J. L. BERTAUX : Venus mesospheric sulfur dioxide measurement retrieved from SOIR on board Venus Express. *Planetary and Space Science*, 113-114:193–204, 2015.
- [47] K. L. JESSUP, E. MARCQ, F. P. MILLS, A. MAHIEUX, S. LIMAYE, C. WILSON, M. ALLEN, J. L. BERTAUX, W. MARKIEWICZ, T. ROMAN, A. C. VANDAELE, V. WILQUET et Y. YUNG : Coordinated Hubble Space Telescope and Venus Express Observations of Venus’ upper cloud deck. *Icarus*, 258:309–336, 2015.
- [48] B. J. SANDOR, R. T. CLANCY, G. MORIARTY-SCHIEVEN et F. P. MILLS : Sulfur chemistry in the Venus mesosphere from SO<sub>2</sub> and SO microwave spectra. *Icarus*, 208(1):49–60, 2010.

- [49] B. J. SANDOR, R. T. CLANCY et G. MORIARTY-SCHIEVEN : Upper limits for H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> in the mesosphere of Venus. *Icarus*, 217(2):839–844, 2012.
- [50] T. ENCRENAZ, R. MORENO, A. MOULLET, E. LELLOUCH et T. FOUCHET : Submillimeter mapping of mesospheric minor species on Venus with ALMA. *Planetary and Space Science*, 113-114:275–291, 2015.
- [51] T. ENCRENAZ, T. K. GREATHOUSE, H. ROE, M. RICHTER, J. LACY, B. BÉZARD, T. FOUCHET et T. WIDEMANN : HDO and SO<sub>2</sub> thermal mapping on Venus: evidence for strong SO<sub>2</sub> variability. *Astronomy & Astrophysics*, 543(A153):7, 2012.
- [52] T. ENCRENAZ, T. K. GREATHOUSE, M. J. RICHTER, J. LACY, T. WIDEMANN, B. BÉZARD, T. FOUCHET, C. DEWITT et S. K. ATREYA : HDO and SO<sub>2</sub> thermal mapping on Venus: II. The SO<sub>2</sub> spatial distribution above and within the clouds. *Astronomy & Astrophysics*, 559(A65):9, 2013.
- [53] A. C. VANDAELE, O. KORABLEV, D. BELYAEV, S. CHAMBERLAIN, D. EVDOKIMOVA, T. ENCRENAZ, L. W. ESPOSITO, K. L. JESSUP, F. LEFÈVRE, S. LIMAYE, A. MAHIEUX, E. MARCQ, F. P. MILLS, F. MONTMESSIN, C. D. PARKINSON, S. ROBERT, T. ROMAN, B. SANDOR, A. STOLZENBACH, C. WILSON et V. WILQUET : Sulfur dioxide in the Venus atmosphere: I. Vertical distribution and variability. *Icarus*, 295:16–33, 2017.
- [54] A. C. VANDAELE, O. KORABLEV, D. BELYAEV, S. CHAMBERLAIN, D. EVDOKIMOVA, T. ENCRENAZ, L. W. ESPOSITO, K. L. JESSUP, F. LEFÈVRE, S. LIMAYE, A. MAHIEUX, E. MARCQ, F. P. MILLS, F. MONTMESSIN, C. D. PARKINSON, S. ROBERT, T. ROMAN, B. SANDOR, A. STOLZENBACH, C. WILSON et V. WILQUET : Sulfur dioxide in the Venus Atmosphere: II. Spatial and temporal variability. *Icarus*, 295:1–15, 2017.
- [55] V. I. OYAMA, G. C. CARLE, F. WOELLER et J. B. POLLACK : Venus Lower Atmospheric Composition: Analysis by Gas Chromatography. *Science*, 203(4382):802–805, 1979.
- [56] V. I. OYAMA, G. C. CARLE, F. WOELLER, J. B. POLLACK, R. T. REYNOLDS et R. A. CRAIG : Pioneer Venus gas chromatography of the lower atmosphere of Venus. *Journal of Geophysical Research*, 85(A13):7891–7902, 1980.
- [57] J. H. HOFFMAN, R. R. HODGES, T. M. DONAHUE et M. B. MCELROY : Composition of the Venus lower atmosphere from the Pioneer Venus Mass Spectrometer. *Journal of Geophysical Research*, 85(A13):7882–7890, 1980.
- [58] B. G. GEL'MAN, V. G. ZOLOTUKHIN, N. I. LAMONOV, B. V. LEVCHUK, A. N. LIPATOV, L. M. MUKHIN, D. F. NENAROKOV, V. A. ROTIN et B. P. OKHOTNIKOV : Analysis of the chemical composition of the Venus atmosphere on the Venera 12 automatic interplanetary station with a gas chromatograph. *Cosmic Research*, 17: 585–589, 1979.
- [59] J. L. BERTAUX, T. WIDEMANN, A. HAUCHECORNE, V. I. MOROZ et A. P. EKONOMOV : VEGA 1 and VEGA 2 entry probes: An investigation of local UV absorption (220–400 nm) in the atmosphere of Venus (SO<sub>2</sub> aerosols, cloud structure). *Journal of Geophysical Research: Planets*, 101(E5):12709–12745, 1996.
- [60] B. BÉZARD, C. de BERGH, B. FEGLEY, J. P. MAILLARD, D. CRISP, T. OWEN, J. B. POLLACK et D. GRINSPOON : The abundance of sulfur dioxide below the clouds of Venus. *Geophysical Research Letters*, 20(15):1587–1590, 1993.
- [61] J. B. POLLACK, J. B. DALTON, D. GRINSPOON, R. B. WATTSON, R. FREEDMAN, D. CRISP, D. A. ALLEN, B. BEZARD, C. de BERGH, L. P. GIVER, Q. MA et R. TIPPING : Near-Infrared Light from Venus' Nightside: A Spectroscopic Analysis. *Icarus*, 103(1):1–42, 1993.

- [62] B. BUTLER, P. G. STEFFES, S. H. SULEIMAN, M. A. KOLODNER et J. M. JENKINS : Accurate and Consistent Microwave Observations of Venus and Their Implications. *Icarus*, 154(2):226–238, 2001.
- [63] J. M. JENKINS, M. A. KOLODNER, B. J. BUTLER, S. H. SULEIMAN et P. G. STEFFES : Microwave Remote Sensing of the Temperature and Distribution of Sulfur Compounds in the Lower Atmosphere of Venus. *Icarus*, 158(2):312–328, 2002.
- [64] G. ARNEY, V. MEADOWS, D. CRISP, S. J. SCHMIDT, J. BAILEY et T. ROBINSON : Spatially resolved measurements of H<sub>2</sub>O, HCl, CO, OCS, SO<sub>2</sub>, cloud opacity, and acid concentration in the Venus near-infrared spectral windows. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 119(8):1860–1891, 2014.
- [65] E. MARCQ, B. BÉZARD, P. DROSSART, G. PICCIONI, J. M. REESS et F. HENRY : A latitudinal survey of CO, OCS, H<sub>2</sub>O, and SO<sub>2</sub> in the lower atmosphere of Venus: Spectroscopic studies using VIRTIS-H. *Journal of Geophysical Research*, 113(E00B07):9, 2008.
- [66] E. MARCQ, F. P. MILLS, C. D. PARKINSON et A. C. VANDAELE : Composition and Chemistry of the Neutral Atmosphere of Venus. *Space Science Reviews*, 214(1):10, 2018.
- [67] E. MARCQ, I. AMINE, M. DUQUESNOY et B. BÉZARD : Evidence for SO<sub>2</sub> latitudinal variations below the clouds of Venus. *Astronomy & Astrophysics*, 648(L8):4, 2021.
- [68] I. E. GORDON, L. S. ROTHMAN, C. HILL, R. V. KOCHANOV, Y. TAN, P. F. BERNATH, M. BIRK, V. BOUDON, A. CAMPARGUE, K. V. CHANCE, B. J. DROUIN, J. M. FLAUD, R. R. GAMACHE, J. T. HODGES, D. JACQUEMART, V. I. PEREVALOV, A. PERRIN, K. P. SHINE, M. A. H. SMITH, J. TENNYSON, G. C. TOON, H. TRAN, V. G. TYUTEREV, A. BARBE, A. G. CSÁSZÁR, V. M. DEVI, T. FURTENBACHER, J. J. HARRISON, J. M. HARTMANN, A. JOLLY, T. J. JOHNSON, T. KARMAN, I. KLEINER, A. A. KYUBERIS, J. LOOS, O. M. LYULIN, S. T. MASSIE, S. N. MIKHAILENKO, N. MOAZZEN-AHMADI, H. S. P. MÜLLER, O. V. NAUMENKO, A. V. NIKITIN, O. L. POLYANSKY, M. REY, M. ROTGER, S. W. SHARPE, K. SUNG, E. STARIKOVA, S. A. TASHKUN, J. V. AUWERA, G. WAGNER, J. S. WILZEWSKI, P. WCISŁO, S. YU et E. J. ZAK : The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 203:3–69, 2017.
- [69] O. V. NAUMENKO et V.-M. HORNEMAN : Communication privée. 2019.
- [70] D. S. UNDERWOOD, J. TENNYSON, S. N. YURCHENKO, X. HUANG, D. W. SCHWENKE, T. J. LEE, S. CLAUSEN et A. FATEEV : ExoMol molecular line lists – XIV. The rotation–vibration spectrum of hot SO<sub>2</sub>. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 459(4):3890–3899, 2016.
- [71] N. TASINATO, A. P. CHARMET, P. STOPPA, G. BUFFA et C. PUZZARINI : A complete listing of sulfur dioxide self-broadening coefficients for atmospheric applications by coupling infrared and microwave spectroscopy to semiclassical calculations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130:233–248, 2013.
- [72] Y. TAN, R. M. KOCHANOV, L. S. ROTHMAN et I. E. GORDON : The Broadening Coefficients Of SO<sub>2</sub>. Rapport technique, Zenodo, 2016.
- [73] L. S. ROTHMAN, R. R. GAMACHE, A. GOLDMAN, L. R. BROWN, R. A. TOTH, H. M. PICKETT, R. L. POYNTER, J. M. FLAUD, C. CAMY-PEYRET, A. BARBE, N. HUSSON, C. P. RINSLAND et M. A. H. SMITH : The HITRAN database: 1986 edition. *Applied Optics*, 26(19):4058–4097, 1987.

- [74] J. S. WILZEWSKI, I. E. GORDON, R. V. KOCHANOV, C. HILL et L. S. ROTHMAN: H<sub>2</sub>, He, and CO<sub>2</sub> line-broadening coefficients, pressure shifts and temperature-dependence exponents for the HITRAN database. Part 1: SO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, HF, HCl, OCS and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 168:193–206, 2016.
- [75] KRISHNAJI et S. CHANDRA: Molecular Interaction and Linewidth of the Asymmetric Molecule SO<sub>2</sub>. II. SO<sub>2</sub>–CO<sub>2</sub> Collisions. *The Journal of Chemical Physics*, 38(4):1019–1021, 1963.
- [76] G. CESELIN, N. TASINATO, C. PUZZARINI, A. P. CHARMET, P. STOPPA et S. GIORGIANNI: CO<sub>2</sub>-, He- and H<sub>2</sub>-broadening coefficients of SO<sub>2</sub> for  $\nu_1$  band and ground state transitions for astrophysical applications. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 203:367–376, 2017.
- [77] A. S. DUDARYONOK et N. N. LAVRENTIEVA: Theoretical estimation of SO<sub>2</sub> line broadening coefficients induced by carbon dioxide in the 150–300 K temperature range. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 219:360–365, 2018.
- [78] Yu. G. BORKOV, O. M. LYULIN, T. M. PETROVA, A. M. SOLODOV, A. A. SOLODOV, V. M. DEICHULI et V. I. PEREVALOV: CO<sub>2</sub>-broadening and shift coefficients of sulfur dioxide near 4  $\mu\text{m}$ . *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 225:119–124, 2019.
- [79] R. A. VINCENT, A. DUDHIA et L. J. VENTRESS: Vertical level selection for temperature and trace gas profile retrievals using IASI. *Atmospheric Measurement Techniques*, 8(6):2359–2369, 2015.