

Géophysique externe, climat et environnement

Vers une meilleure représentation de la distribution et de la variabilité de l’ozone atmosphérique par l’assimilation des données satellitaires

Sébastien Massart ^{a,*}, Daniel Cariolle ^{a,b}, Vincent-Henri Peuch ^b

^a Centre européen de recherche et formation avancée en calcul scientifique (Cerfacs), 31057 Toulouse cedex 1, France

^b Météo-France, Centre national de recherches météorologiques (CNRM), 31057 Toulouse cedex 1, France

Reçu le 5 octobre 2004 ; accepté après révision le 7 juillet 2005

Disponible sur Internet le 1^{er} septembre 2005

Présenté par Jean-Claude André

Résumé

L’assimilation de données joue un rôle important dans l’analyse des données atmosphériques, en particulier pour la prévision numérique du temps et la détection des variations climatiques. Les techniques d’assimilation se sont récemment développées en chimie atmosphérique afin d’étudier la distribution des espèces, spécifiquement l’ozone. Le présent travail expose les résultats de l’assimilation des profils verticaux d’ozone de l’instrument GOME par le modèle de chimie-transport MOCAGE avec la technique variationnelle 3D-FGAT. Nous montrons que cette méthode est très bien adaptée à l’assimilation de l’ozone et qu’elle peut être étendue à divers capteurs et d’autres espèces. *Pour citer cet article : S. Massart et al., C. R. Geoscience 337 (2005).* © 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Towards an improvement of the atmospheric ozone distribution and variability by assimilation of satellite data. Data assimilation plays an important role in the analysis of atmospheric data, in particular for numerical weather prediction and the detection of climate variations. In the field of atmospheric chemistry, assimilation techniques have been recently developed to study the distribution of tracer species, with emphasis on the ozone content. The present work reports on assimilation experiments of vertical ozone profiles from the GOME instrument performed with MOCAGE, a chemical-transport model and a 3D-FGAT variational technique. It is shown that this technique is very well adapted for ozone assimilation and can be extended to various sensors or other trace species. *To cite this article: S. Massart et al., C. R. Geoscience 337 (2005).* © 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Assimilation de donnée ; Ozone ; Dynamique atmosphérique

Keywords : Data assimilation; Ozone; Atmospheric dynamic

Abridged English version

Atmospheric ozone plays an important role in terrestrial environment because of its UV absorption ef-

* Auteur correspondant.

Adresse e-mail : massart@cerfacs.fr (S. Massart).

fect in the stratosphere and because of its contribution to the greenhouse effect and to photochemistry in the troposphere. Moreover, ozone can remain in the lower stratosphere from a few days to several months and thus is an appropriate tracer of air mass [5] that can be used to improve wind fields in global circulation models (GCMs). Both for environmental reasons and numerical weather predictions, the analysis of global ozone distribution is an important part of several international programs. Measurements of ozone concentrations come from ground based stations, aircraft and satellites, each type of observation having its own specific properties [20]. Using transport and atmospheric chemistry modelling, data assimilation is the most appropriate way to obtain global ozone fields from all these measurements. To this aim, variational approach has demonstrated its potential [10] and has been used for tropospheric [7] and stratospheric studies [8]. CERFACS ('Centre européen de recherche et formation avancée en calcul scientifique') and Météo-France, CNRM ('Centre national de recherches météorologiques') are working together on recent satellite chemical observations in order to evaluate the contribution of modern variational assimilation techniques [3,4] already successfully applied in meteorology, oceanography and atmospheric chemistry [9]. Thus, this work shows an important step in the improvement of the Météo-France operational assimilation system for global ozone analysis and forecast.

In contrast to previous assimilation methods employed by Météo-France using total ozone data in the numerical weather prediction model [1], the originality of our work arises from the use of the chemistry transport model (CTM) MOCAGE [6,12,16]. MOCAGE is a three-dimensional model that details photochemical processes and transport in the stratosphere and troposphere. The 3D-FGAT [11] assimilation method has been chosen for its ability to evolve towards more sophisticated methods such as 4D-VAR [18]. The modularity of the system is obtained by the use of the PALM software [13] to build the assimilation algorithm. Assimilated ozone profiles have been derived by the 'Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut' (KNMI) from the spectrometer GOME [15] aboard the ERS-2 satellite.

The assimilation algorithm computes daily analysis by dividing each day into 8 windows of 3 h. The analysed increment is added to the background at the beginning of each window and integrated during 6 h. The last 3 h are used to obtain the new background for the next assimilation window. This procedure was investigated for the 1 March 2000 with a background coming from a free MOCAGE run of one month. The one-day

forecast from the analysis is compared to the free run and GOME observations. The main deviation between the forecast and the free run is located from the upper troposphere to the stratosphere, where most of the ozone concentrations are located (Fig. 1). The benefit from assimilation has been also evaluated by comparison with independent satellite data (Fig. 2) from TOMS (Total Ozone Mapping Spectrometer). The assimilation reduces the bias between MOCAGE forecasts and TOMS measurements and improves the correlation between the two ozone fields. Moreover, the unusual and very large model error on total ozone column in a narrow high-latitude band is reduced to a more acceptable error. This behaviour is typical for the entire study period of March 2000, and shows that the assimilation system is able to extract information from local satellite measurements [2,19] to improve global ozone fields.

This study shows that variational assimilation of satellite data provides a significant improvement in the representation of global atmospheric ozone fields. The present method can easily be expanded to an incremental 4D-Var [14] in order to better take into account the atmospheric dynamics. In addition, more recent data from SCHIAMACHY and MIPAS aboard the ENVISAT satellite can be used. It should be very interesting to assimilate simultaneously all these data over longer periods in order to determine the contribution of each instrument and possible synergies, while providing an evaluation of both model and instrument deficiencies.

Besides ozone, the MOCAGE model computes many other trace species that are measured by satellite with a sufficient spatial coverage to be assimilated. The methodology used in this study can be directly applied to these species. Moreover, ozone being a good air tracer [5], it can provide information on the dynamics of the high atmosphere. Good-quality ozone from an analysis by a chemistry-transport model like MOCAGE can be assimilated by the global circulation model like ARPEGE to improve the estimation of the winds.

The results obtained in this study show that modern data-assimilation methods, already successfully used in meteorology and oceanography, are also well adapted to atmospheric chemistry for predicting the 'chemical weather' as well as for process studies [17].

1. Introduction

L'ozone atmosphérique joue un rôle important dans l'environnement terrestre [5]. Dans la stratosphère, il participe à l'équilibre radiatif et filtre les rayonnements ultraviolets, nocifs pour les êtres vivants. Dans la troposphère, à l'inverse, il contribue à l'effet de serre et

participe aux épisodes de pollution photochimique. La surveillance de son contenu et la détermination de sa distribution spatiale sont donc des objectifs fondamentaux des programmes internationaux de surveillance du climat et de l'environnement. Actuellement réalisée à l'aide d'une grande variété de techniques, cette surveillance fournit des mesures depuis les réseaux de stations au sol, in situ par avion et par satellites, avec chacune des caractéristiques instrumentales spécifiques et des fréquences temporelles et spatiales très variables [20]. Obtenir à partir de ces données des champs d'ozone globaux pour en étudier les variations nécessite l'utilisation de techniques d'assimilation mettant en œuvre des modélisations plus ou moins développées du transport et de la chimie atmosphérique. Les techniques modernes d'assimilation variationnelles [3,4], utilisées avec succès en météorologie et en océanographie, ont été mises en œuvre pour la chimie atmosphérique dans les années 1990. Les travaux de Fisher et Lary [10], notamment, démontrent les avantages de ces méthodes pour analyser plusieurs espèces chimiques dans un modèle de chimie complet, avec différents types de mesures. Depuis, diverses études ont été menées avec des modèles chimiques complets pour la troposphère [7] et la stratosphère [8].

Cependant, les récentes missions spatiales offrent des opportunités nouvelles pour l'étude de la composition chimique de l'atmosphère [9]. Le Centre européen de recherche et formation avancée en calcul scientifique (Cerfacs) s'est associé au Centre national de recherches météorologiques (CNRM) de Météo-France pour évaluer ces opportunités. Cette note présente ainsi une étape importante dans le perfectionnement de la chaîne opérationnelle de Météo-France d'analyse et de prévision des champs globaux d'ozone, par assimilation variationnelle des données niveau 2 du spectromètre GOME (*Global Ozone Monitoring Experiment*) du satellite ERS-2. Les résultats obtenus montrent la faisabilité et la puissance des techniques mises en œuvre, et ouvrent la voie à une utilisation optimale des données des multiples capteurs mesurant l'ozone à bord des satellites opérationnels (ERS, METEOSAT) ou de recherche (ENVISAT, ODIN).

2. Méthodologie pour l'assimilation des profils d'ozone

Les données brutes issues des différents instruments mesurant les espèces mineures de l'atmosphère à bord des satellites subissent une succession de traitements, afin d'en extraire une mesure géophysique pertinente. Les profils verticaux des espèces chimiques peuvent

ainsi être obtenus avec des résolutions verticales de plusieurs kilomètres et une couverture spatio-temporelle souvent très limitée. Les satellites polaires défilants, notamment, n'assurent que quelques passages co-localisés par semaine. La démarche retenue ici s'appuie sur les méthodes d'assimilation, dont le but est d'estimer des champs globaux à partir de mesures locales et des lois physiques régissant l'évolution de ces champs. Ces lois physiques sont disponibles sous la forme d'un modèle numérique discrétisé.

Par rapport aux méthodes d'assimilation antérieurement testées à Météo-France qui utilisent des quantités intégrées d'ozone [1], ce dernier étant considéré comme un traceur passif, l'originalité de notre travail réside dans la prise en compte de mesures de profils verticaux d'ozone et dans leur analyse par le modèle de chimie-transport (CTM) MOCAGE [6,12,16]. MOCAGE est un modèle tridimensionnel global qui prend en compte de manière détaillée les processus photochimiques et le transport des espèces à longue durée de vie dans la troposphère et la stratosphère. Le transport par les vents et la température utilisée pour le calcul des vitesses des réactions chimiques proviennent du modèle Arpège, modèle de circulation générale (MCG) opérationnel de prévision du temps de Météo-France.

Le choix d'une méthode d'assimilation doit reposer à la fois sur le type et la qualité des données disponibles et sur les caractéristiques du modèle utilisé. De plus, il est primordial d'utiliser un système modulaire permettant une évolution aisée vers des méthodes plus complexes décrivant mieux les systèmes impliqués. Notre choix s'est donc porté sur une assimilation variationnelle de type 3D-FGAT (*First-Guess At the right Time*) [11], dont l'algorithme est piloté par le logiciel PALM (Projet d'assimilation par logiciel multi-méthodes [13]). Cette méthode se dissocie du 3D-Var classique (analyse séquentielle d'un champ 3D) [18], en prenant en compte la dynamique du système pour calculer l'écart entre le modèle et toutes les observations situées dans une fenêtre temporelle donnée. Cependant, contrairement au 4D-Var (analyse temporelle d'un champ 3D) [18], la correction apportée au champ initial est indépendante de la dimension temporelle et donc de la dynamique du système.

Les données utilisées pour l'assimilation sont des profils verticaux d'ozone de l'instrument GOME [15] pour l'année 2000, calculés et fournis par le Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut (KNMI, Institut royal néerlandais de météorologie). Avec une couverture globale obtenue en trois jours et une quinzaine d'orbites par jour du satellite opérationnel ERS-2, soit environ 800 profils, avec une vingtaine de mesures par

profil entre 800 hPa et 5 hPa, ces données constituent un jeu de référence ayant une bonne pérennité. En cohérence avec cette résolution spatiale, le modèle MOCAGE est utilisé dans sa version globale de $2^\circ \times 2^\circ$, avec un domaine vertical de 47 niveaux qui s'étendent de la surface jusqu'à 5 hPa, avec une résolution d'environ 800 m dans la haute troposphère et la stratosphère.

Les corrélations entre les mesures ont été négligées sous l'hypothèse de données indépendantes. En l'absence d'information sur les erreurs associées aux mesures, la variance d'erreur choisie est de 10 % de la valeur observée. Le champ d'ozone 3D a priori, à partir duquel l'analyse est effectuée, a été obtenu en intégrant le modèle MOCAGE à partir d'un champ climatologique pendant un mois, afin que l'ozone s'adapte au forçage dynamique. Pour maximiser l'impact des observations sur l'analyse, l'erreur d'ébauche a été surestimée avec une variance de 50 % de la valeur donnée par le modèle comme ébauche.

3. Résultats de l'assimilation

L'algorithme d'assimilation effectue des analyses journalières en divisant chaque journée en 8 fenêtres de 3 h. L'analyse des observations dans chaque fenêtre est insérée en début de fenêtre et intégrée sur 3 h, pour que le modèle puisse s'adapter à cette modification du champ d'ozone. L'intégration est poursuivie pendant les 3 h suivantes, afin d'obtenir la nouvelle ébauche pour la fenêtre suivante. Nous avons mis en œuvre cette procédure pour la journée du 1er mars 2000, qui fournit ainsi un champ d'ozone analysé pour le 1er mars à 24 h à partir du champ a priori à 0 h. Ce dernier a été pa-

rallèlement intégré jusqu'au 2 mars 24 h et constitue l'expérience nommée *simulation de contrôle*. L'analyse est, elle aussi, intégrée jusqu'au 2 mars 24 h et appelée *prévision après assimilation*. Ces deux simulations sont comparées aux données GOME de la journée du 2 mars 2000.

La Fig. 1 montre que les différences principales entre les deux prévisions (contrôle et après assimilation) et les observations résident dans la stratosphère et la haute troposphère (au-dessus de 200 hPa), altitudes où les concentrations d'ozone sont les plus importantes. L'assimilation permet de réduire ces écarts de façon significative et améliore par conséquent la prévision à un jour d'échéance.

Pour mesurer l'apport de l'assimilation à la détermination des champs d'ozone, nous avons aussi comparé les deux prévisions à des données satellitaires indépendantes provenant du capteur TOMS (*Total Ozone Mapping Spectrometer*), qui mesure les colonnes totales d'ozone. Les écarts entre les données TOMS et la prévision (Fig. 2) sont nettement réduits grâce à l'assimilation, aussi bien en valeur qu'en extension spatiale. En moyenne, la corrélation entre les données TOMS et les champs d'ozone MOCAGE passe de 0,745 pour le contrôle à 0,825 pour l'analyse. De plus, l'amélioration globale montre que, malgré des mesures de GOME localisées sous la trace du satellite, l'information locale représentative d'une zone géographique située à proximité de la mesure [2] diffuse aux régions voisines [19]. Ce résultat, qui se généralise à l'ensemble de la période que nous avons étudiée, démontre en particulier l'apport du système d'assimilation dans la représentation de champ global d'ozone.

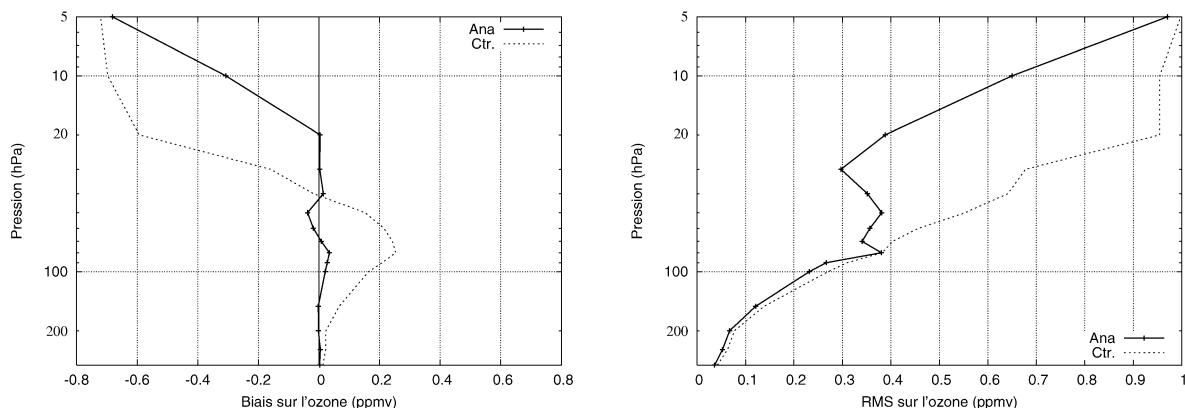


Fig. 1. Biais (à gauche) et écart quadratique moyen (à droite) moyennés en longitude–latitude, fonction de la pression (hPa), entre les observations GOME du 2 mars 2000 et une simulation de contrôle de MOCAGE (ligne pointillée) et la prévision d'un jour de MOCAGE après assimilation des données GOME du 1^{er} mars (ligne pleine).

Fig. 1. Latitude and longitude average bias (left) and RMS (right), in function of pressure level (hPa), between the 2 March 2000 GOME observations, a free MOCAGE run (dotted line) and a one day MOCAGE forecast after an assimilation of the 1 March GOME data (full line).

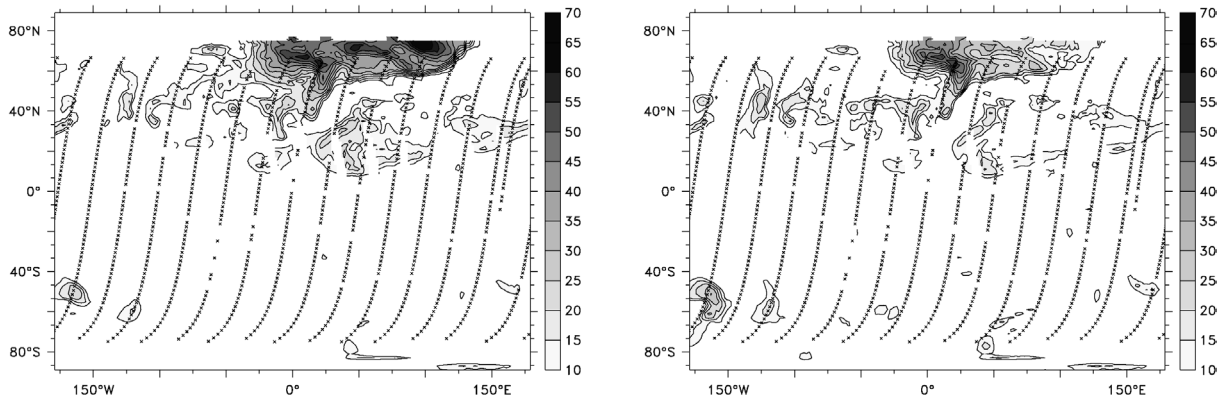


Fig. 2. Répartition en longitude latitude le 3 mars 2003 à 0 h UT de la différence (en %) entre les colonnes totales d’ozone mesurées par TOMS (données indépendantes) et (à gauche) les colonnes totales issues d’une simulation de contrôle de 2 jours de MOCAGE et (à droite) d’une prévision d’un jour après assimilation des données GOME du 1^{er} mars 2000 (croix).

Fig. 2. Latitude longitude distribution for the 3 March 2000 at 0 h UT of difference (in %) between total ozone column measured by TOMS (independent data) and (left) total column ozone forecast by a 2-day free MOCAGE run and (right) a one-day MOCAGE run after assimilation of the 1 March 2000 GOME data (cross).

Bien que les observations déduites des mesures de TOMS et de GOME soient indépendantes, puisque les deux instruments sont embarqués sur des satellites différents et mesurent l’ozone par un principe différent, l’assimilation d’un jeu de données rapproche le modèle de l’autre type de données. Si nous supposons que le modèle est de qualité inférieure aux données, l’assimilation améliore donc les simulations. Ce résultat est également obtenu avec le même modèle MOCAGE, mais pour d’autres techniques d’assimilation et d’autres types d’observations [2,17].

4. Conclusion

Les premiers résultats que nous avons obtenus montrent que l’assimilation variationnelle de données satellites peut apporter une amélioration sensible de la représentation globale de l’ozone atmosphérique. La méthode d’assimilation choisie est donc bien adaptée au problème posé. Elle peut être perfectionnée pour mieux prendre en compte la dynamique atmosphérique avec un 4D-Var incrémental [14]. Parallèlement, nous utiliserons par la suite les données récentes des instruments SCHIAMACHY et MIPAS embarqués à bord du satellite ENVISAT, qui présentent une meilleure résolution sur la verticale. Il sera, en particulier, très intéressant de pouvoir assimiler simultanément l’ensemble de ces données sur de plus longues périodes de temps, pour déterminer l’apport respectif de chaque capteur et évaluer les éventuelles déficiences du modèle ou des instruments.

Outre l’ozone, le modèle MOCAGE prend en compte de nombreuses espèces, dont certaines font également l’objet de mesures satellitaires de qualité et de couver-

ture spatiale suffisantes pour être assimilées simultanément. La méthodologie adoptée dans cette étude pourra être directement utilisée pour ces espèces, en ayant soin de bien adapter le couplage entre le modèle météorologique et le modèle chimique en fonction des durées de vie des espèces et des erreurs instrumentales.

Enfin, avec une durée de vie de plusieurs jours à plusieurs mois dans la basse stratosphère, l’ozone se comporte comme un bon traceur des masses d’air [5], donnant ainsi des informations sur la dynamique de la haute atmosphère. Ainsi, les observations d’ozone sont assimilées dans certains modèles de circulation générale utilisés pour la prévision du temps. Outre son importance pour le climat, l’amélioration de la connaissance des variations spatio-temporelles des champs d’ozone peut donc aussi conduire à une meilleure détermination des champs de vent dans le modèle Arpège.

Les résultats obtenus dans cette étude démontrent cependant, d’ores et déjà, que les méthodes modernes d’assimilation de données utilisées avec succès en météorologie et en océanographie sont également adaptées à la prévision à quelques jours du « temps chimique ». De plus, les séquences de champs assimilés permettent, par exemple, des études de processus ou bilan [17], qu’il n’est pas possible de mener à bien avec les jeux de données brutes, dispersées dans le temps et dans l’espace.

Remerciements

Ce travail a été effectué avec le soutien du projet européen ASSET (*ASSimilation of Envisat data*).

Références

- [1] A. Baverez-Peuch, Assimilation variationnelle et impact dynamique des colonnes d'ozone observées par l'instrument HIRS, thèse, université Toulouse-3, 2004, 211 p.
- [2] M.-L. Cathala, J. Pailleux, V.-H. Peuch, Improving global chemical simulations of the UT/LS with sequential assimilation of MOZAIC data, *Tellus 55B* (2003) 1–10.
- [3] P. Courtier, O. Talagrand, Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. II: Numerical results, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 114 (1987) 1321–1346.
- [4] P. Courtier, J.-N. Thépaut, A. Hollingsworth, A strategy for operational implementation of 4D-Var, using an incremental approach, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 120 (1994) 1367–1388.
- [5] E.F. Danielsen, Stratospheric–tropospheric exchange based on radioactivity, ozone and potential vorticity, *J. Atmos. Sci.* 25 (1968) 502–518.
- [6] A. Dufour, M. Amodei, G. Ancellet, V.-H. Peuch, Observed and modelled 'chemical weather' during ESCOMPTE, *Atmos. Res.*, in press.
- [7] H. Elbern, H. Schmidt, Ozone episode analysis by four-dimensional variational chemistry data assimilation, *J. Geophys. Res.* 106 (2001) 3569–3590.
- [8] Q. Errera, D. Fonteyn, Four-dimensional variational chemical assimilation of CRISTA stratospheric measurements, *J. Geophys. Res.* 106 (2001) 12253–12265.
- [9] H.J. Eskes, P.F.J. van Velthoven, P.J.M. Valks, H.M. Kelder, Assimilation of GOME total ozone satellite observations in a three-dimensional tracer transport model, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 129 (2003) 1663–1682.
- [10] M. Fisher, D.J. Lary, Lagrangian four-dimensional variational data assimilation of chemical species, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 121 (1995) 1681–1704.
- [11] M. Fisher, E. Andersson, Developments in 4D-Var and Kalman filtering, Technical Memorandum Research Department, 347, ECMWF, Reading, UK, 2001.
- [12] B. Josse, P. Simon, V.-H. Peuch, Radon global simulations with the multiscale chemistry and transport model MOCAGE, *Tellus 56B* (2004) 339–356.
- [13] T. Lagarde, A. Piacentini, O. Thual, A new representation of data assimilation methods: the PALM flow charting approach, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 127 (2001) 189–207.
- [14] H. Manzoni, Vers une assimilation 4D-Var des profils d'ozone dans MOCAGE-PALM, rapport de stage du DEA «Océan, Atmosphère, Environnement», université Paul-Sabatier, Toulouse-3, 2004.
- [15] Y.J. Meijer, R.J. Van der A, R.F. Van Oss, D.P.J. Swart, H.M. Kelder, P.V. Johnston, Global Ozone Monitoring Experiment ozone profile characterization using interpretation tools and Lidar measurements for intercomparison, *J. Geophys. Res.* 108 (2003).
- [16] V.-H. Peuch, M. Amodei, T. Barthet, M.-L. Cathala, B. Josse, M. Michou, P. Simon, MOCAGE : Modèle de chimie atmosphérique à grande échelle, Actes des Ateliers de modélisation de l'atmosphère 1999, Météo-France, Centre national de recherches météorologiques, 1999.
- [17] S. Pradier, J.-L. Attié, M. Chong, J. Escobar, V.-H. Peuch, J.-F. Lamarque, B. Khattatov, D. Edwards, Evaluation of 2001 spring-time CO transport over West Africa using MOPITT CO measurements assimilated in a global chemistry transport model, *J. Geophys. Res.*, in revision.
- [18] O. Talagrand, Assimilation of observations, an introduction, *J. Meteorol. Soc. Jpn.* 75 (1997) 191–209.
- [19] A. Weaver, P. Courtier, Correlation modelling on the sphere using a generalized diffusion equation, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 127 (2001) 1815–1846.
- [20] WMO (World Meteorological Organization), Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2002, Global Ozone Research and Monitoring Project, report 47, Geneva, Switzerland, 2003, 498 p.