

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

Towards an improvement of the atmospheric
ozone distribution and variability by
assimilation of satellite data

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.*



Email address: massart@cerfacs.fr, tel : 05.61.19.31.36, fax :
05.61.19.30.00 (Sébastien Massart).

Abstract

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 a chemical-transport model (CTM) 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 and al. C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I xxx (2004).*

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 and al, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I xxx (2004).

Keywords : Data assimilation ; Ozone ; Atmospheric dynamic

Mots clés : Assimilation de donnée ; Ozone ; Dynamique atmosphérique

Abridged English version

Atmospheric ozone plays an important role in terrestrial environment because of its UV absorption effect 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. For instance, measurements of ozone concentrations come from ground based stations, aircrafts and satellites, with their own specification [16]. Using transport and atmospheric chemistry modelling, data assimilation is the most appropriate way to obtain global ozone fields from all these measurements. Cerfacs (Centre Européen de Recherche et Formation Avancée en Calcul Scientifique) and CNRM (Centre 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 and oceanography. Thus, this work shows an important step in the improvement of the Météo-France operational assimilation system for

global ozone analysis and forecast. Results obtained with the ozone level 2 data of the spectrometer GOME aboard the ERS-2 satellite illustrate the feasibility and the strength of variational assimilation techniques for such measurements.

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 comes from the use of the chemistry transport model (CTM) MOCAGE [6,8,12]. MOCAGE is a three-dimensionnal model that details photochemical processes and transport on the stratosphere and troposphere. The 3D-FGAT [7] assimilation method has been chosen for its ability to evolve towards more sophisticated methods such as 4D-VAR [14]. The modularity of the system is obtained by the use of the PALM software [9] to build the assimilation algorithm. Assimilated retrieval ozone vertical profiles (level 2 data) have been computed by the Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut (KNMI) from the GOME instrument [11] for the year 2000.

The assimilation of the first three hours of GOME data for the first of March 2000 tends, as expected, to modify the MOCAGE simulation to better represent the observations (figure 1). The RMS between simulation and measurements decreases from around 0.6 ppmv to 0.2 ppmv after assimilation. This general result allows us to validate the three-hour assimilation window. The procedure was then repeated for the whole day. The forecast for the March, 2^{sd}, 2000, after one day assimilation, called *forecast after assimilation*, is compared to a free MOCAGE run and GOME observations. The main difference between these two forecasts is located from the upper troposphere to the stratosphere, where most of the ozone concentrations are located (figure 2). The benefit from assimilation has been also evaluated by comparison with independent satellite data (figure 3). Assimilation reduces the bias between MOCAGE forecasts and

TOMS (Total Ozone Mapping Spectrometer) measurements and, for the specific case studied here, reduces the maximum zonal mean total ozone column error of 70 DU, indicating an unusual and very large model error in a narrow high-latitude band, to a more acceptable maximum zonal mean total ozone column error of 20 DU, localized in the same place. This behavior is typical for the entire study period of March 2000, and shows that the assimilation system is able to spread local satellite measurements [2,15] to improve global ozone fields.

The first results of this study show that variational assimilation of satellite data provides a significant improvement in the representation of global atmospheric ozone fields. Moreover, it can easily be expanded to an incremental 4D-Var [10] in order to take into account better 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 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. In particular, a multivariate assimilation should be able to produce analyses of global ozone fields close to observations and influence the dynamics of the GCM.

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 [13].

1 Introduction

L'ozone atmosphérique joue un rôle important dans l'environnement terrestre. Dans la stratosphère, il agit positivement en participant à l'équilibre radiatif et en filtrant 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 par 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 [16]. 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.

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. Outre son importance pour le climat, l'amélioration de la connaissance des variations spatio-temporelles des champs d'ozone peut donc conduire à une meilleure détermination des champs de vent dans les modèles de circulation générale (MCG) utilisés pour la prévision du temps.

Les récentes missions spatiales offrant des opportunités nouvelles pour l'étude de la composition chimique de l'atmosphère, le Centre Européen de Recherche et Formation Avancée en Calcul Scientifique (Cerfacs) s'est associé au Centre de Recherches Météorologiques (CNRM) de Météo-France pour évaluer l'apport des techniques modernes d'assimilation variationnelle [3,4] utilisées avec succès en météorologie et en océanographie. 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 du satellite ERS-2. Les résultats obtenus montrent la faisabilité et la puissance des techniques mises en œuvre, et ouvre 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. Notamment, les satellites polaires défilant n'assurent que quelques passages co-localisés par semaine. Le rôle primordial des systèmes d'analyse est donc d'étendre ces mesures locales à l'ensemble du globe en tenant compte des caractéristiques thermodynamiques de l'atmosphère. La démarche retenue ici s'appuie sur les méthodes d'assimilation variationnelle déjà bien connues

et exploitées en météorologie et en océanographie.

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 [6,8,12]. 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, MGC 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 [7] dont l'algorithme est piloté par le logiciel PALM (Projet d'Assimilation par Logiciel Multi-méthodes [9]). Cette méthode se dissocie du 3D-Var classique [14] en prenant en compte la dynamique du système pour calculer l'écart entre le modèle et les observations. Cependant, la correction calculée qui minimise cet écart, sous certaines contraintes, est persistante en temps, contrairement au 4D-Var [14].

Les données utilisées pour l'assimilation sont des profils verticaux d'ozone de l'instrument GOME [11] pour l'année 2000 calculés et fournis par le Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut (KNMI, institut royal de la météorologie

hollandaise). Ces données ont été choisies car elles sont issues du satellite opérationnel ERS-2 et constituent donc un jeu de référence ayant une bonne pérennité. En cohérence avec leur résolution spatiale le modèle MOCAGE est utilisé dans sa version globale de $2^\circ \times 2^\circ$ avec un domaine vertical qui s'étend de la surface jusqu'à 5 hPa.

Les corrélations entre les mesures ont été négligées afin d'avoir des données indépendantes dont la variance d'erreur a été choisie à 10% de la valeur observées. Afin d'avoir un effet important des observations sur l'analyse, l'erreur d'ébauche a été surestimé avec une variance de 50% de la valeur donnée par le modèle comme ébauche.

3 Résultats de l'assimilation

La figure 1 montre les concentrations d'ozone à 10 hPa observées, ainsi que celles issues du modèle sans assimilation et celles obtenues par l'assimilation 3D-FGAT sur une fenêtre d'assimilation de 3 heures pour le 1er mars 2000. Il apparaît clairement que l'assimilation permet à la simulation de s'approcher des observations. La moyenne RMS de l'écart entre profil simulé et mesuré est réduite d'environ un facteur 3 avec une valeur finale de l'ordre de 0,2 ppmv.

L'assimilation de 3 heures de données étant ainsi validée, elle a ensuite été répétée sur l'ensemble de la journée du 1er mars, temps nécessaire au satellite ERS-2 pour parcourir l'ensemble du globe (sans pour autant revenir à son point de départ qu'il atteint après trois jours d'orbite). L'état chimique de l'atmosphère du 1er mars 2000 obtenu après une journée d'assimilation divisée en 8 fenêtres a servi de condition initiale pour une simulation d'une journée,

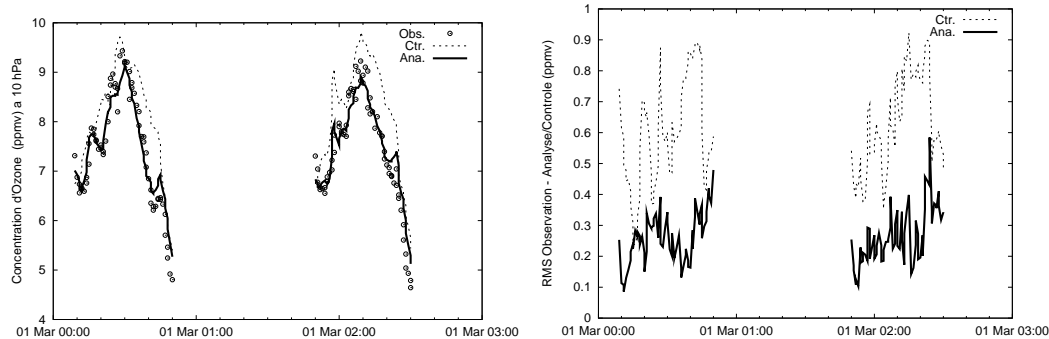


Fig. 1. Effet de l’assimilation des 3 premières heures des données GOME du 1^{er} mars 2000 sur la concentration d’ozone à 10 hPa (à gauche) et sur l’ensemble du profil (à droite). Cette figure est obtenue en moyennant (RMS) l’écart entre le profil observé et le profil simulé par MOCAGE avant (ligne pointillée) ou après (ligne pleine) assimilation.

Fig. 1. *Impact of the first 3 assimilation hours of march 2000 the 1st GOME data on ozone concentration at 10 hPa (left) and on the whole profile (right). This last figure is obtained using the root mean square of the difference between the observed profile and the computed profile before (dotted line) and after assimilation (line).*

que nous appellerons par la suite *prévision après assimilation*. Celle-ci est comparée à une simulation basée sur une condition initiale non issue de l’assimilation (obtenue par intégration du modèle MOCAGE forcée uniquement par les analyses météorologiques d’Arpège-), appelée *simulation de contrôle*, et aux données GOME de cette journée du 2 mars 2000.

La figure 2 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-delà 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.

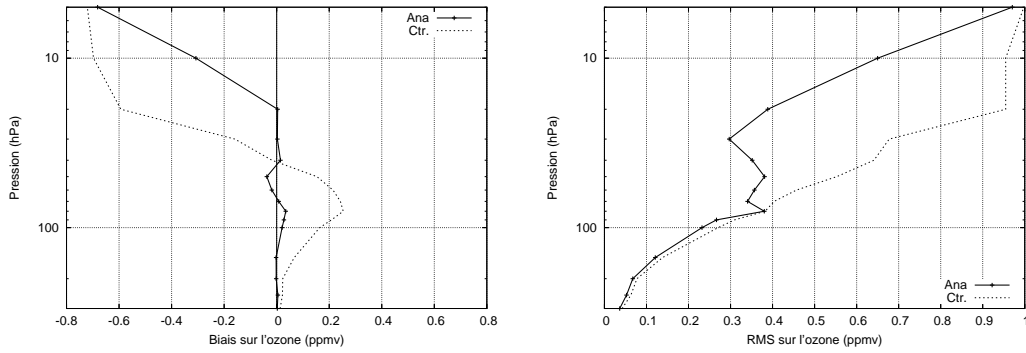


Fig. 2. Biais (à gauche) et RMS (à droite) moyennés en longitude–latitude, fonction de la pression (hPa), entre les observations GOME du 2 mars 2000 et une simulation de contrôle de MOCAGE (ligne pointillée) et la prévision d’un jour de MOCAGE après assimilation des données GOME du 1^{er} mars (ligne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

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

Afin de 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’ozone¹. Les écarts entre les données TOMS et la prévision (figure 3) sont nettement réduits grâce à l’as-

¹ L’ozone total communément mesurée en unités Dobson est la quantité totale d’ozone qui se trouve dans une colonne d’air s’étendant de la surface de la Terre jusque dans l’espace. Si la totalité de l’ozone comprise dans cette colonne d’air était ramenée à la température et à la pression de l’atmosphère standard (0°C et 1 atmosphère) et répartie uniformément sur la section au sol de la colonne, on obtiendrait alors une couche d’une certaine épaisseur. Une unité Dobson (notée DU pour Dobson Unit en anglais) est définie comme une couche de 0.01 mm d’épaisseur à la température et la pression de l’atmosphère standard.

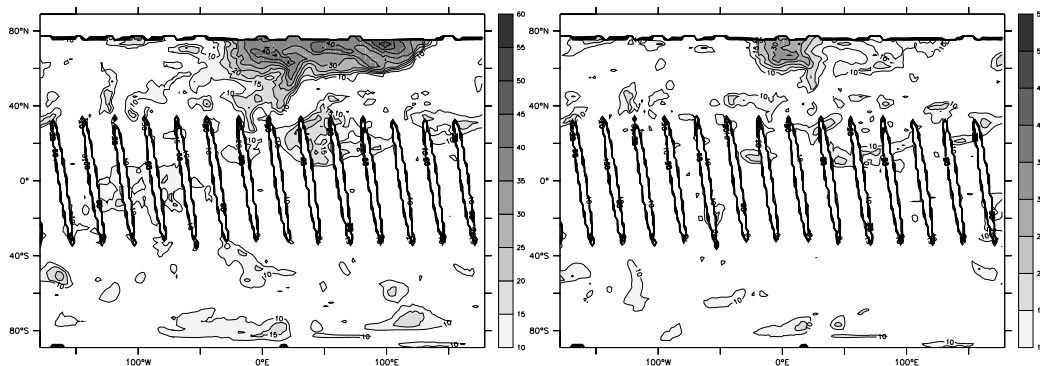


Fig. 3. Répartition en longitude latitude le 3 mars 2003 à 0h UT de la différence (en %) entre les colonnes totales d’ozone mesurées par TOMS (données indépendantes) et les colonnes totales issues d’une simulation de contrôle de 2 jours de MOCAGE (à gauche) et d’une prévision d’un jour après assimilation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

Fig. 3. *Latitude longitude distribution on March 3rd, 2000 at 0 UT of difference (in %) between total ozone column measured by TOMS (independant data) and total column ozone forecast by a 2 days free MOCAGE run (left) and a one day MOCAGE run afer assimilation of March 1st, 2000 GOME data (right).*

simulation, aussi bien en valeur qu’en extension spatiale. En particulier, en moyenne zonale, l’écart maximal avec TOMS aux hautes latitudes initialement de l’ordre de 70 DU dans une bande aux latitudes élevées, indiquant une erreur locale du modèle d’une ampleur exceptionnelle probablement liée à cette situation dynamique spécifique, est réduit à 20 DU environ, pour des concentrations moyennes de 400 DU. 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. En effet, bien que les mesures de GOME soient effectuées sous la trace du satellite,

l'information locale représentative d'une zone géographique située à proximité de la mesure [2], se diffuse aux régions voisines [15]. Malgré le fait que les observations déduites des mesures de TOMS et de GOME sont 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 est bien bénéfique aux simulations. Ce type de constatation sur le bénéfice de l'assimilation est également illustré pour le même modèle MOCAGE, mais pour d'autres techniques d'assimilation et d'autres type d'observations [2,13].

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 sera de plus perfectionnée pour mieux prendre en compte la dynamique atmosphérique avec un 4D-Var incrémental [10]. Parallèlement, nous utiliserons par la suite les données récentes des instruments SCHIAMACHY et MIPAS embarqués à bord du satellite ENVISAT qui présentent une meilleure précision 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 instrument 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 couverture spatiale suffisante 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, en suivant une approche variationnelle multivariée il sera possible non seulement d'obtenir des champs d'ozone proches des observations mais également de contraindre les variables dynamiques issues du 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 [13] 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 de l'Université

- Toulouse III (2004), 211 pp.
- [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.* (2004), in press.
 - [7] M. Fisher, E. Andersson, Developments in 4D-Var and Kalman Filtering, Technical Memorandum Research Department, 347 (2001), ECMWF, Reading, UK.
 - [8] B. Josse, P. Simon, V.-H. Peuch, Radon global simulations with the multiscale chemistry and transport model MOCAGE, *Tellus*, 56B (2004), 339–356.
 - [9] T. Lagarde, A. Piacentini, O. and Thual, A New Representation of Data Assimilation Methods : the PALM Flow Charting Approach, *Q.J.R. Meteorol. Soc.*, 127 (2001), 189–207.
 - [10] H. Manzoni, Vers une assimilation 4D-Var des profils d’ozone dans MOCAGE-PALM, Rapport de stage du DEA Océan, Atmosphère, Environnement (2004), Université Paul Sabatier, Toulouse III.
 - [11] 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, *Journal of Geophysical Research*, 108 (2003).

- [12] V.-H. Peuch, M. Amodei, T. Barthet, M. L. Cathala, B. Josse, M. Michou, P. Simon, MOCAGE : Modèle de Chimie Atmosphérique à Grande Echelle, Actes des Ateliers de Modélisation de l'Atmosphère 1999, Météo-France, Centre National de Recherches Météorologiques, (1999).
- [13] S. Pradier, J.-L. Attié, M. Chong , J. Escobar, V.-H. Peuch, J.-F. Lamarque, B. Khattatov and D. Edwards, Evaluation of 2001 springtime CO transport over West Africa using MOPITT CO measurements assimilated in a global chemistry transport model, *Journal of Geophysical Research*, in revision.
- [14] O. Talagrand, Assimilation of observations, an introduction, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 75 (1997), 191–209.
- [15] A. Weaver, P. Courtier, Correlation modelling on the sphere using a generalized diffusion equation, *Q.J.R. Meteorol. Soc.*, 127 (2001), 1815–1846.
- [16] WMO (World Meteorological Organization), Scientific Assessment of Ozone Depletion : 2002, Global Ozone Research and Monitoring Project, report 47 (2003), 498 pp., Geneva.