

**Organisationseinheit
Atmosphärenprozessoren**

Jahresbericht 2004



Herausgeber:

Organisationseinheit Atmosphärenprozessoren
des Instituts für Methodik der Fernerkundung

Inhaltliche Verantwortung:

Prof. Dr. Thomas Trautmann

Redaktion und Layout:

Prof. Dr. Thomas Trautmann,
Dr. Manfred Gottwald und Brigitte Rüba

Titelbild:

Helligkeitstemperaturen, gemessen über Portugal mit dem Sensor AIRS bei einer
Wellenzahl von 2400 cm^{-1} ($\lambda = 4.2 \mu\text{m}$) am 14. August 2003 (siehe Beitrag ECOFIRE in
Kap. 3.12)

Oberpfaffenhofen, Januar 2005

Inhaltsverzeichnis

1.	Vorwort	4
2.	Höhepunkte des Jahres 2004.....	5
2.1	Entwicklung des GOME-Datenprozessors UPAS/GDOAS: GDP 4.0	5
2.2	SCIAMACHY – Instrumentkalibrierung und Datenprozessierung	11
3.	Laufende Projekte und Vorhaben	15
3.1	Ozone Monitoring SAF.....	15
3.2	Langfristbeobachtungen der Kalibrationsparameter von GOME/ERS-2.....	17
3.3	Verbesserung der Kalibration von GOME für die Ozon-Profilbestimmung	19
3.4	Status der SCIAMACHY-Datenprozessoren Level 2.....	21
3.5	SCIAMACHY Operations Support.....	23
3.6	Ein effizienter Inversionsalgorithmus zum Retrieval atmosphärischer Spurengasprofile	25
3.7	Studien zur Level 2-Prozessierung von MIPAS	26
3.8	MIPAS-Wasserdampfdaten für COBI/DEKLIM	28
3.9	Die Atmospheric Dynamics Mission – ADM	30
3.10	Infrarot-Strahlungstransfer und Streuprozesse	31
3.11	MultiGrid-Verfahren für Molekülabsorptions-Querschnitte	33
3.12	ECOFIRE: Retrieval von CO ₂ -Säulen über Vegetationsfeuern	35
3.13	Virtuelles Labor	38
3.14	Saharan Mineral Dust Experiment	39
3.15	3D-Strahlungstransporteffekt in einem gemessenen Stratocumulus als Funktion des Sonnenzenitwinkels	41
3.16	Strahlung und Vegetationsbrände im Rahmen von EFEU	43
3.17	Linearisierung des solaren Strahlungstransportes und Anwendung auf Wolkenfelder	44
3.18	Aktinische Strahlungsflussdichte in einem dreidimensionalen inhomogenen Wolkenfeld	46
4.	Veröffentlichungen, Vorträge und Tagungen	49
4.1	Zeitschriftenartikel	49
4.2	Proceedingsbeiträge	49
4.3	Dokumente und Berichte	50
4.4	Vorträge und Pressemitteilungen	51
4.5	Besuchte Tagungen	53
4.6	Diplom- und Doktorarbeiten	53
	Abkürzungen und Akronyme.....	55

1. Vorwort

Der vorliegende Jahresbericht für 2004 beschreibt in seiner nunmehr vierten Ausgabe unterschiedliche Arbeiten und Entwicklungen in der Organisationseinheit *Atmosphärenprozessoren* des Instituts für Methodik der Fernerkundung (IMF-AP). Wie bereits in den Vorjahren bilden die Kapitel *Höhepunkte* und *Laufende Projekte und Vorhaben* die Kerninhalte dieser Jahreszusammenstellung.

Die technisch-wissenschaftlichen Arbeiten im Jahre 2004 waren für unsere Organisationseinheit gekennzeichnet durch den ENVISAT-Routinebetrieb für die Instrumente SCIAMACHY und MIPAS. Trotz einer Reihe von Verzögerungen in der SCIAMACHY Prozessorenentwicklung, deren Ursachen in den unterschiedlichsten Bereichen zu suchen sind, konnten dennoch substanziale Fortschritte erzielt werden, die erwarten lassen, dass für SCIAMACHY die Produktpalette im ENVISAT-Bodensegment im Jahr 2005 weiter vervollständigt werden kann.

Sehr erfreulich war für unsere Aktivitäten der weitere Betrieb von GOME auf ERS-2, so dass im Laufe des Jahres 2005 schließlich ein Datensatz von insgesamt zehn Jahren Länge mit hochwertigen Atmosphärenprodukten vorliegen wird. Da der GOME-Datenprozessor Ende 2004 die Version GDP 4.0 erreicht hat, sind die mit diesem Prozessor erzielbaren Genauigkeiten für Ozongesamtsäulen erstmals vergleichbar mit der Genauigkeit von Bodenmessungen des Gesamtzoons. Auf diese Weise können GOME-Daten in Zukunft mit hoher Qualität für eine Vielzahl klimarelevanter Fragestellungen wie beispielsweise Ozon-Trendanalysen oder Untersuchungen polarer Atmosphärenphänomene verwendet werden.

Obwohl die auf SCIAMACHY bezogenen Arbeiten noch für einen längeren Zeitraum eines der wichtigen Standbeine der Organisationseinheit *Atmosphärenprozessoren* sein werden, wurden im vergangenen Jahr wichtige Weichen für zukünftige Projekte gestellt. Hier sind beispielhaft die Projekte ADM und ECOFIRE zu nennen, die sich mit der Prozessorentwicklung für die aktive Fernerkundung des atmosphärischen Windfeldes mittels eines satellitengestützten Doppler-Windlidars bzw. der passiven Fernerkundung von CO₂-Gesamtsäulen über Vegetationsfeuern befassen. Ergänzt werden unsere missionsbezogenen Arbeiten durch Entwicklungen im theoretisch-methodischen Bereich der Analyse von Atmosphärenspektren, die sich mit der Verbesserung von Retrievalmethoden zur Ableitung von Spurengasen befassen.

Allen Autoren sei an dieser Stelle für ihre Beiträge im Jahresbericht 2004 herzlich gedankt.

Prof. Dr. Thomas Trautmann

Dr. Manfred Gottwald

2. Höhepunkte des Jahres 2004

2.1 Entwicklung des GOME-Datenprozessors UPAS/GDOAS: GDP 4.0

D. Loyola, Y. Livschitz, P. Valks, T. Ruppert (DFD-MM), M. Van Roozendael (BIRA, Brüssel), R. Spurr (SAO, Cambridge), J-C. Lambert (BIRA, Brüssel), D. Balis (AUTH, Thessaloniki), P. Kenter (S&T, Delft), L. Butenko (Technische Universität München)

Das Global Ozone Monitoring Experiment (GOME) misst seit Juli 1995 Gesamtsäulendichten von Ozon. Dabei werden operationelle GOME-Datenprodukte durch den GOME-Datenprozessor (GDP) an der deutschen Prozessierungs- und Archivierungseinrichtung (German Processing and Archiving Facility, D-PAF) am DFD im Auftrag der ESA erzeugt. Um die Genauigkeit der ermittelten Säulendichten im Level 2-Schritt weiter zu steigern, wurde unter Federführung von IMF-AP ein neuer Algorithmus, GDP 4.0, zusammen mit Wissenschaftlern von BIRA und SAO entwickelt. Unabhängige geophysikalische Validierungskampagnen zeigten, dass mit GDP 4.0 Genauigkeiten im Prozentbereich erreicht werden können. Damit sind Ozon-Spurengasbestimmungen aus GOME-Beobachtungen in ihrer Güte vergleichbar mit denjenigen aus bodengestützten Messungen. Dies eröffnet die Möglichkeit, Ozondaten von GOME nun auch in solchen geowissenschaftlichen Fragestellungen einzusetzen, die erhöhte Anforderungen an die Zuverlässigkeit der verwendeten Daten stellen wie beispielsweise Ozon-Trendanalysen oder Untersuchungen polarer Atmosphärenphänomene. Gerade im Hinblick auf den Einsatz des GOME-Nachfolgers GOME-2 auf den Satelliten der METOP-Serie – der erste METOP-Start ist Anfang 2006 geplant – bedeutet dies, in Zukunft mehr als 25 Jahre operationelle Atmosphärenüberwachung aus dem erdnahen Orbit mit bisher unerreichter Qualität zur Verfügung zu haben.

Das Projekt zur Entwicklung des GDP 4.0 wurde von ESA initiiert. Technischer Verantwortlicher auf ESA-Seite war C. Zehner aus ESRIN. Ein ehrgeiziger Zeitplan sah vor, nach Projektbeginn im Mai 2004 bereits im Dezember 2004 die bestehenden GOME-Daten mit dem neuen Prozessor re-prozessiert zu haben, um ihre Berücksichtigung im WMO-Ozonreport zu garantieren. Innerhalb dieser sieben Monate konnten die

- Integration des neuen GDOAS-Algorithmus in das neue operationelle UPAS-System (UPAS = Unified Processor for Atmospheric Spectrometers)
- Validierung des Systems UPAS/GDOAS: GDP 4.0
- Erstellung der gesamten Dokumentation einschließlich Algorithm Theoretical Baseline Document – ATBD, Product Specification Document – PSD, Validation Report, Disclaimer
- Re-Prozessierung des gesamten GOME-Datensatzes

erfolgreich durchgeführt werden.

Historie des GOME-Datenprozessors

Die erste Version des GDP bestand aus einem Prototyp, der nach dem Start von ERS-2/GOME in der zweiten Jahreshälfte 1995 erstmals in operationeller Weise Level 2-Datenprodukte lieferte. Spezielle Validierungskampagnen zeigten, dass die erhaltenen Ergebnisse innerhalb eines gewissen Qualitätsrahmens wissenschaftlich einsetzbar waren. Sie identifizierten jedoch Bereiche, die einer Verbesserung bedurften. Diese wurden im darauffolgenden Jahr 1996 umgesetzt und ergaben den ersten operationellen GOME-Datenprozessor GDP 2.0. An weiteren Verbesserungen folgten:

- GDP 2.4 von 1998-2000
- GDP 2.7 von 2000-2002
- GDP 3.0 von 2002-2004

Jede dieser GDP-Versionen musste, bevor sie zur operationellen Datenverarbeitung eingesetzt werden konnte, einen umfangreichen Validierungszyklus durchlaufen. Er beinhaltete jeweils spezielle Validierungssorbits, für die in Bodenmesskampagnen Vergleichsdaten gewonnen wurden. Ergebnisse solcher Kampagnen und der jeweils zu überprüfenden GDP-Version wurden in Validierungstreffen Mai und Juni 1996, Januar 1998, Mai und Juni 1999 sowie Januar und April 2002 vorgestellt und diskutiert.

GOME Level 1

Um im Level 2-Prozessierungsschritt möglichst exakte Atmosphärenparameter ableiten zu können, ist es erforderlich, über ein möglichst genaues Level 1-Produkt zu verfügen. Generell besitzen GOME Level 1-Daten eine hohe Wellenlängenstabilität, was bereits als Hinweis auf eine hervorragende Instrumentgenauigkeit verstanden werden kann. Natürlich treten über den Gesamtverlauf der Mission auch instrumentell bedingte Veränderungen auf, welche teilweise über geeignete Korrekturen im GDP berücksichtigt werden müssen. In erster Linie ist hier die Degradation der Empfindlichkeit zu nennen, die das Signal in den UV-Kanälen 1 & 2 am stärksten beeinflusst. Im Jahr 2004 war die registrierte solare Irradianz im Wellenlängenintervall 240-250 nm um ca. 85% gegenüber dem Beginn der Mission reduziert, während sie im gleichen Zeitraum am anderen Ende der Wellenlängenskala zwischen 600-790 nm um 4% höher lag. Aufgrund des als selbstkalibrierend geltenden im Level 2-Prozessierungsschritt verwendeten DOAS-Verfahrens beeinflussen derartige Veränderungen jedoch nicht wesentlich die Ableitung von Gesamtsäulen. In DOAS werden Reflektanzen (= solare Irradianzen/terrestrische Radianzen) benutzt, sodass sich zahlreiche Komponenten der Degradation herausmitteln. Von größerer Bedeutung ist die Polarisationskorrektur des Erdscheinspektrums, die generell eine radiometrische Kalibration von GOME mit einer Genauigkeit von 3% zulässt. Nur im UV-Bereich unterhalb 350 nm steigt dieser Wert auf 5% an.

Um das dynamische Verhalten der Degradation des Instruments über die Missionsdauer einheitlich beschreiben zu können, wurde eine Datenbank geschaffen, die das zeitliche Verhalten der entsprechenden Kalibrationsparameter beschreibt. Näheres dazu findet man in Kap. 3.2.

GOME Level 2 – Algorithmus für Gesamtsäule

Das grundlegende DOAS-Verfahren (DOAS = Differential Optical Absorption Spectroscopy) beinhaltet die spektrale Anpassung der scheinbaren schrägen Säulendichten und die nachfolgende Konversion in Gesamtsäulen durch Einsatz eines berechneten Air Mass Factors (AMF) und Korrektur von Wolkeneinflüssen, wobei letztere aus Wolkeninformation von GOME abgeleitet wird. Dieser Ansatz wurde im Jahr 2003 von BIRA, SAO und ESA zum *GDOAS*-Algorithmus (GODFIT DOAS, GODFIT = GOME Direct Fitting) ausgebaut, der die Basis des GDP 4.0 bildet. Die wesentlichen Inhalte von GDP 4.0 umfassen

- Anwendung einer verbesserten Korrektur des Ring-Effekts: In GDP 4.0 werden bei der Korrektur des Ring-Effekts erstmals neben solaren Fraunhoferlinien auch atmosphärische Absorptionslinien („Telluric Lines“) berücksichtigt. Dies geschieht über eine erweiterte Einbeziehung der Raman-Streuung. Mit dem neuen Ansatz gelingt es, schräge Säulendichten über alle geografischen Breiten und Jahreszeiten mit hoher Genauigkeit abzuleiten (Abb. 1).
- Verbesserte Bestimmung der AMFs: Durch Nutzung von on-line LIDORT V2.5-Berechnungen entfällt die rechenaufwändige Notwendigkeit, mehrdimensionale Lookup-Tabellen bei der Ermittlung der AMFs zu erzeugen. GDP 4.0 besitzt damit eine weitaus höhere Flexibilität als GDP 3.0. Zusätzlich werden die AMFs nun bei einer Wellenlänge von $\lambda = 325.5$ nm am unteren Ende des DOAS Fit-Fensters für Ozon berechnet, anstatt wie bisher bei $\lambda = 325$ nm. Dieser Unterschied reduziert auftretende Ungenauigkeiten in Gesamtsäulen bei hohen Sonnenzenitwinkeln $> 80^\circ$ von 5% auf nur noch 1-2% (Abb. 2).
- Einsatz neuer Wolkenalgorithmen: GDP 3.0 verfügte immer noch über den ursprünglichen Wolkenalgorithmus ICFA (Initial Cloud Fitting Algorithm). Weiterentwicklungen auf diesem Gebiet führten zu den Methoden OCRA und ROCINN. OCRA kann über sub-Pixel PMD-Information den Wolkenanteil bestimmen während ROCINN aus dem atmosphärischen O₂ A-Band die Parameter *Cloud-Top-Height* und *Albedo* ableitet.
- Ableitung effektiver Absorptionstemperaturen: Ozonabsorptionsquerschnitte weisen eine starke Temperaturabhängigkeit auf. In den frühen GDP-Versionen wurde nur ein einziger Querschnitt verwendet, dessen Temperaturzuordnung man einer externen Klimatologie entnahm. Deutlich bessere Ergebnisse erzielt man, wenn zwei Querschnitte bei unterschiedlichen Temperaturen benutzt werden. In Anlehnung an GDP 3.0 wird die Effektivtemperatur direkt aus den Spektraldaten abgeleitet, sodass Unsicherheiten durch externe Parameter entfallen.
- Einsatz besserer Atmosphären- und Oberflächendatenbanken sowie spektrales Re-Sampling: Ebenso wie GDP 3.0 benutzt GDP 4.0 die neueste Version der GOME Flugmodell-Absorptionsquerschnitte für O₃ und NO₂, die sogenannten *GOME FM98*-Daten. Für die Wellenlängenzuordnung kommen in GDP 4.0 Sonnenspektren zum Einsatz. Die gemessenen

Erdscheinspektren werden auf deren Referenz-Wellenlängengitter durch einen „shift-and-squeeze“ Ansatz, dessen Ursache vor allem auf dem im Sonnenspektrum auftretenden Dopplereffekt beruht, abgebildet.

Eine detaillierte Beschreibung des GDP 4.0 Algorithmus findet sich im ATBD.

Zusätzlich zu den wissenschaftlich/algorithmischen Aspekten erfuhr die GOME-Prozessierungskette mit dem Einbau von GDP 4.0 in die UPAS-Umgebung eine deutliche Aufwertung. Das UPAS-System basiert auf einer C++-Architektur und bietet weitaus flexiblere Ansätze als die bisherigen GDP-Versionen.

GOME Level 2 – Validierung

Der GDP 4.0-Algorithmus wurde durch wissenschaftliche Arbeitsgruppen von BIRA und AUTH validiert. Für die Kampagnen wählte man 5000 spezielle Validierungsorbits aus. Sie mussten folgende Anforderungen erfüllen:

- Kompatibilität mit bodengebundenen Messungen von Ozon-Säulendichten, die in Datenbanken von NDSC, WOUDC und ENVISAT Cal/Val gespeichert sind.
- Möglichkeit, zyklische Änderungen festzustellen. Dazu zählen Abhängigkeiten von Jahreszeit, geografischer Breite, Sonnenzenitwinkel sowie Absolutwert der Säulendichte.
- Möglichkeit, die Validierung an GOME-Ozonsäulen von 1995 bis 2004 vorzunehmen.
- Möglichkeit, die Validierung an EP-TOMS-Ozonsäulen von 1996 bis 2004 vorzunehmen.
- Übereinstimmung der Validierungsergebnisse aus diesen Orbits mit denjenigen für die Validierung von GDP 3.0
- zusätzliche Möglichkeit, GOME NO₂-Säulen von 1995 bis 2004 zu verifizieren.

Abgeleitete GOME-Gesamtsäulen konnten mit SAOZ/DOAS UV-VIS Brewer- und Dobson-Spektrometermessungen aus 40 Stationen, die den Breitenbereich von Pol zu Pol abdeckten, verglichen werden. Ebenso kamen Daten anderer Satellitensensoren (EP-TOMS) zum Einsatz. Generell stimmten GOME-Ergebnisse und aus bodengebundenen Beobachtungen abgeleitete Atmosphärenparameter im Prozentbereich überein. Vorläufige Validierung der Datenpunkte lässt darauf schließen, dass sich die Übereinstimmung in polaren Breiten und für Sonnenzenitwinkel > 80° leicht verschlechtert, jedoch nicht mehr als um maximal 5%. Es ist besonders hervorzuheben, wie trotz der nachweislich vorhandenen Degradation des Instruments (siehe Kap. 3.2) die mit GDP 4.0 berechneten Gesamtsäulendichten gleichbleibend hohe Qualität aufweisen und keine langzeitliche Verschlechterung erkennbar ist.

Eine umfangreiche Erläuterung der Validierung der GOME-Datenprodukte bieten der *Product Disclaimer*, der *Delta Validation Report* sowie die GOME Validierungs-Webseiten von BIRA (<http://www.oma.be/GOME/>) und AUTH (<http://lap.physics.auth.gr/o3safval/>).

Datenprozessierung

Nach Fertigstellung und Validierung des operationellen GDP 4.0 konnte im Berichtszeitraum der gesamte GOME-Datensatz, beginnend im Juli 1995, re-prozessiert und qualitätskontrolliert werden. Innerhalb vier Wochen lag ein kompletter Satz von ca. 50000 Orbits mit GOME Level 2-Ozondatenprodukten vor. Die wissenschaftliche Nutzergemeinde kann auf ihn über einen öffentlichen FTP-Server zugreifen. Potentielle Nutzer wenden sich mit ihren Anfragen bzgl. ihrer Registrierung an den ESA Help & Order Desk. (<http://earth.esa.int>).

Weitere Information sowie Visualisierung der Level 2-Daten vermittelt der Internetauftritt des World Data Centers for Remote Sensing of the Atmosphere (WDC-RSAT) am Deutschen Fernerkundungsdatenzentrum (DFD) unter <http://wdc.dlr.de/sensors/gome/gdp4.html>.

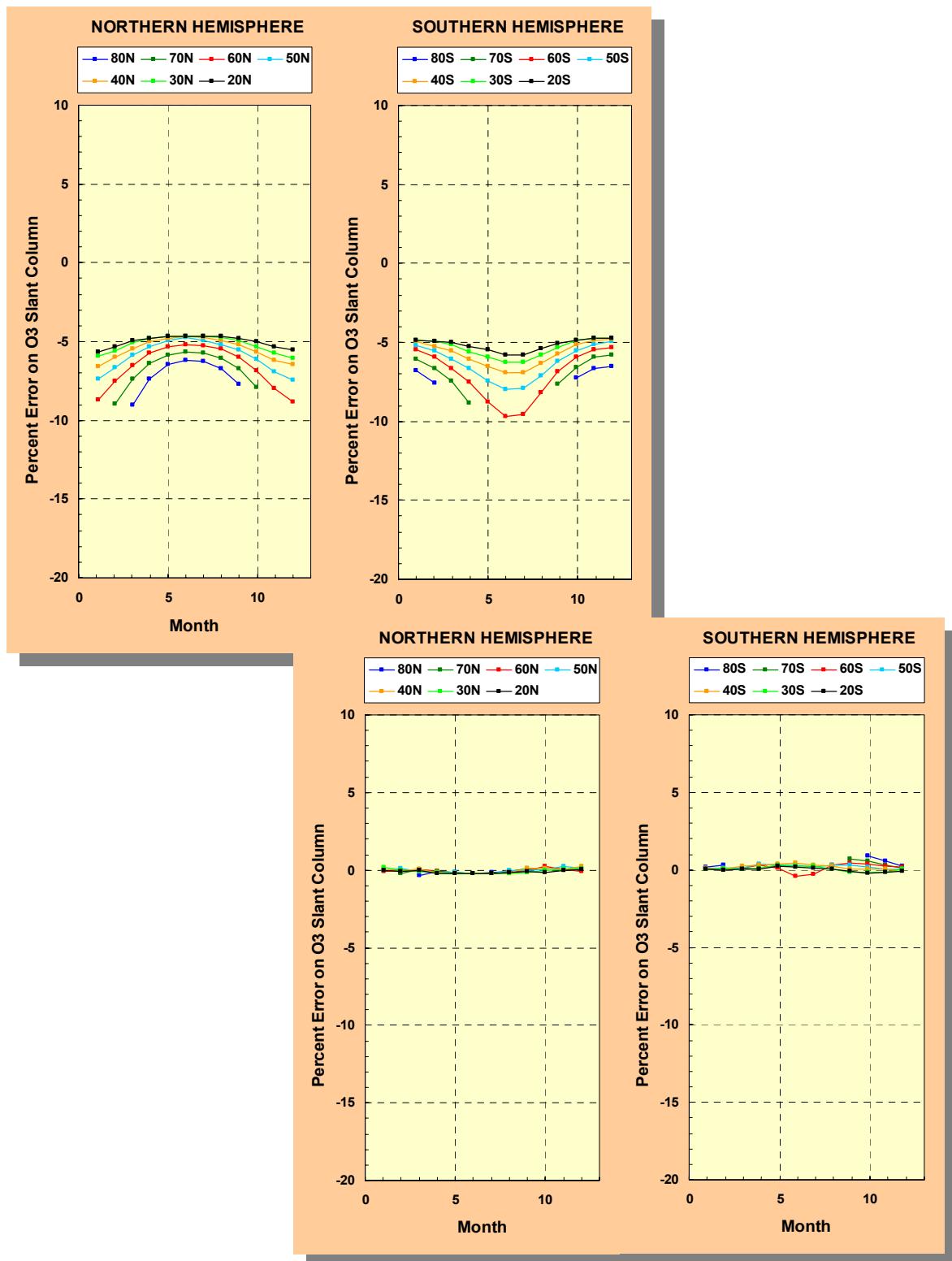


Abb. 1: Ergebnisse des Ring-Effekt Closed-Loop Tests. Oben sieht man den relativen Fehler der Ozongesäule ohne Berücksichtigung der molekularen Korrektur (GDP 3.0), unten ist diese enthalten (GDP 4.0). Der Fehler wird dadurch drastisch reduziert. (nach Delta validation report for ERS- 2 GOME data processor upgrade to 4.0, ERSE-CLVL-EOPG-TN-04-0001)

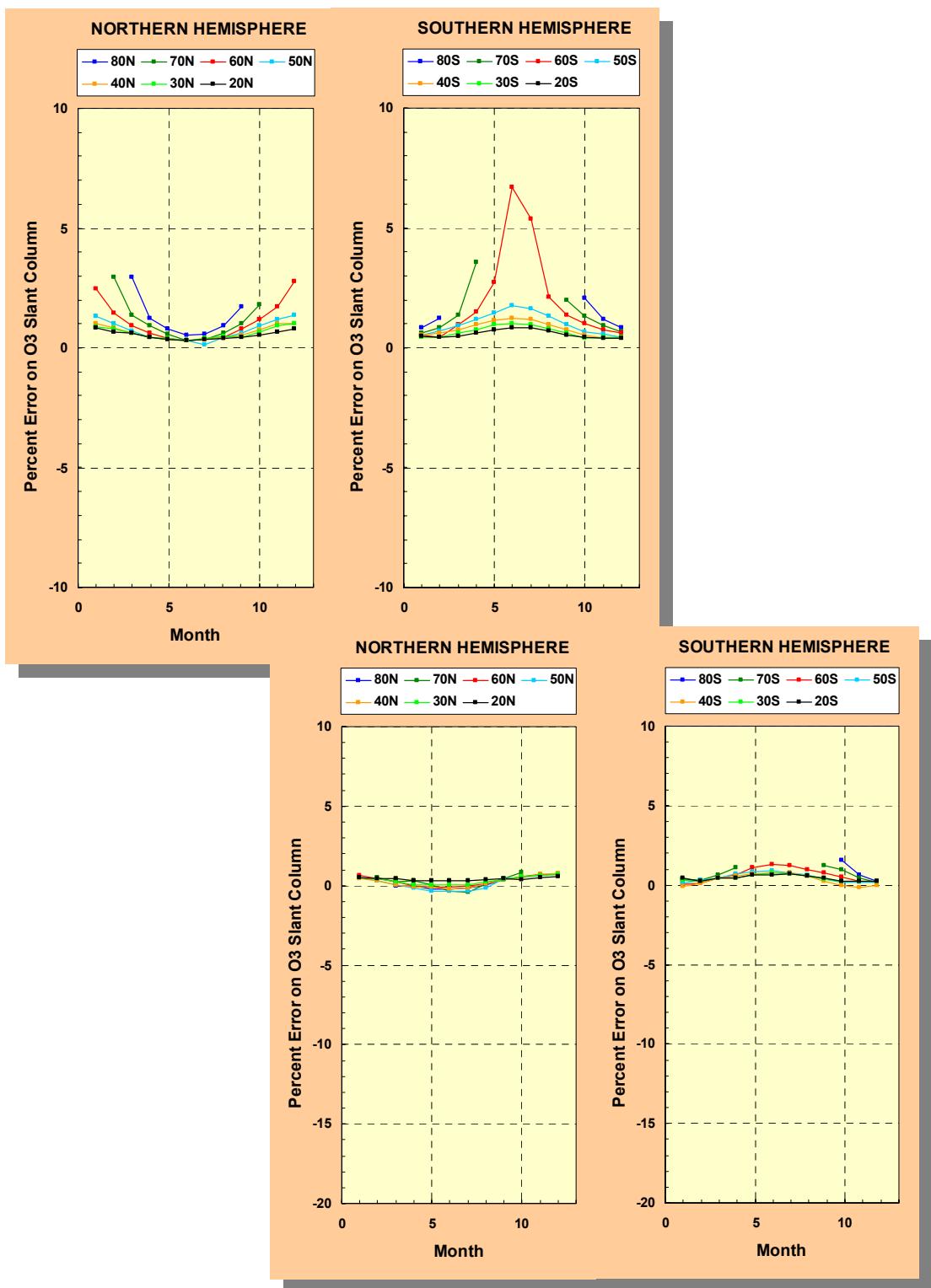


Abb. 2: Ring-Effekt Closed-Loop Tests mit unterschiedlicher Wellenlänge für AMF-Berechnung. Oben liefert der bisherige Wert von $\lambda = 325$ nm relativ große Fehler der Ozongesamtsäule (GDP 3.0), unten ist er auf $\lambda = 325.5$ nm gesetzt (GDP 4.0) und führt zu einer deutlichen Genauigkeitssteigerung. (nach Delta validation report for ERS-2 GOME data processor upgrade to 4.0, ERSE-CLVL-EOPG-TN-04-0001)

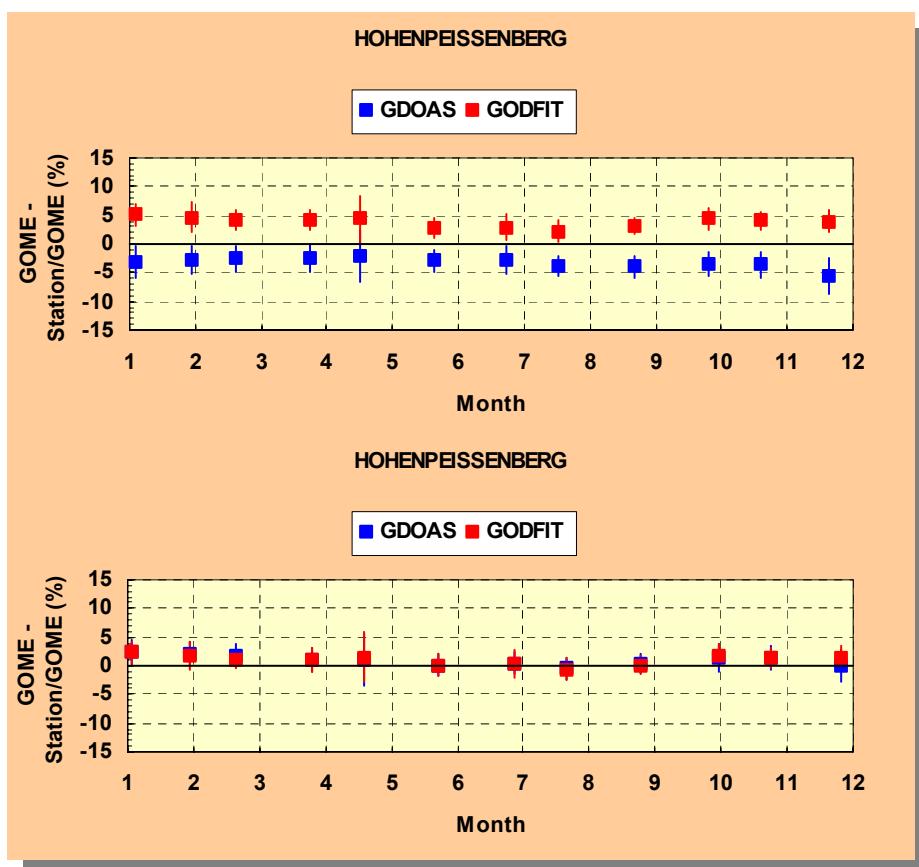


Abb. 3: Vergleich der Ozondichten, jeweils berechnet nach der GDOAS- bzw. der GODFIT-Methode.
Oben wird die einfache Korrektur des Ring-Effekts angewandt, unten die im GDP 4.0 zum Einsatz kommende. Die erzielte Verbesserung ist deutlich erkennbar. (nach Delta validation report for ERS- 2 GOME data processor upgrade to 4.0, ERSE-CLVL-EOPG-TN-04-0001)

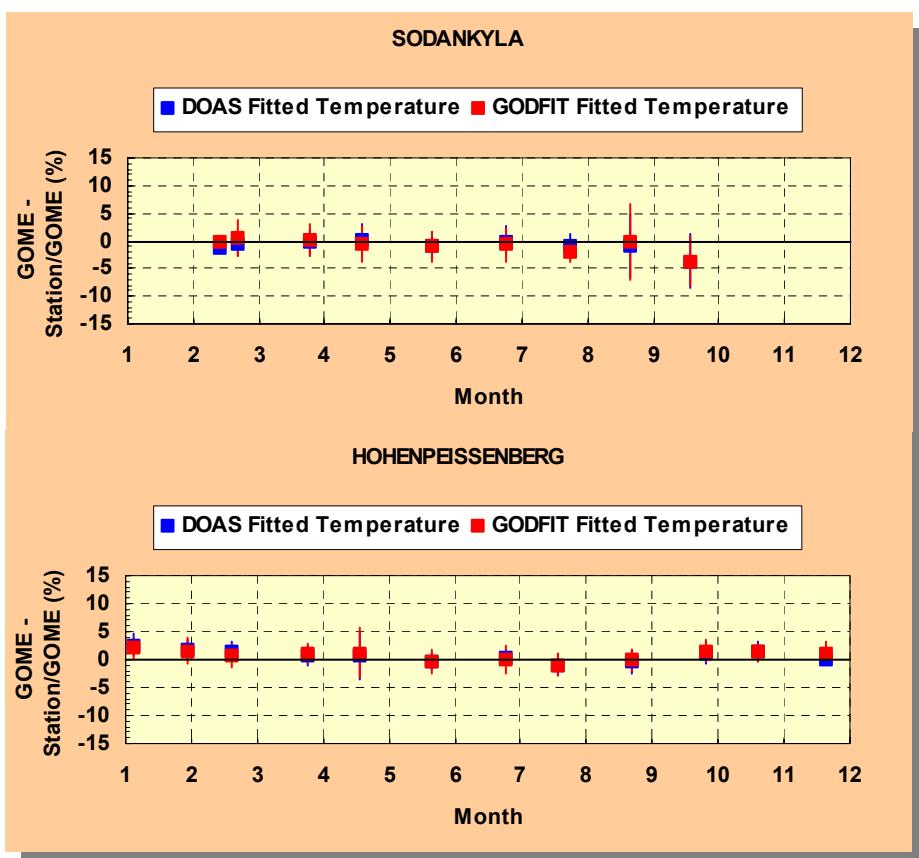


Abb. 4: Vergleich der Ozondichten, wobei die Temperaturen nach der DOAS- bzw. der GODFIT-Methode abgeleitet wurden. Die Ergebnisse stimmen sehr gut überein, sowohl in hohen als auch in mittleren Breiten. (nach Delta validation report for ERS- 2 GOME data processor upgrade to 4.0, ERSE-CLVL-EOPG-TN-04-0001)

2.2 SCIAMACHY – Instrumentkalibrierung und Datenprozessierung

A. von Bargen, S. Slijkhuis, B. Aberle, S. Wahl, K. Kretschel

Das Instrument SCIAMACHY auf ENVISAT ermöglicht die Messung von Spurengaskonzentrationen in der Erdatmosphäre, sowohl in der Stratosphäre als auch unter speziellen Randbedingungen in der Troposphäre und Mesosphäre. Es besteht aus acht Kanälen, die den Spektralbereich vom UV/VIS bis zum SWIR abdecken (Tab. 1). Ziel der Mission ist es, nicht nur Spurengaskonzentrationen als Säulendichten für Ozon und andere Spezies aus Messungen in der senkrecht zur Erdoberfläche blickenden Beobachtungsgeometrie (*Nadir*) zu bestimmen, sondern auch mit Hilfe der vertikalen Sondierung (*Limb*) Profile über die Höhenschichten der Atmosphäre abzuleiten. In Ergänzung misst der Sensor gegen die aufgehende Sonneneinstrahlung in Absorption (*Okkultation*). Für all diese Ziele – gerade unter dem Aspekt der Langzeitstabilität – ist eine sehr genaue Kalibrierung der Messdaten und eine weitgehend vollständige Korrektur der störenden Messeffekte notwendig.

Kanal	1	2	3	4
Spektralbereich in nm	240-314	309-405	394-620	604-805
Kanal	5	6	7	8
Spektralbereich in nm	785-1050	1000-1750	1940-2040	2265-2380

Tab. 1: Spektralbereiche von SCIAMACHY

Als deutsch-holländisch-belgisches Projekt besitzt SCIAMACHY den Status eines *Announcement of Opportunity Instruments (AOI)* auf ENVISAT. Im Rahmen der vertraglichen Verpflichtungen von ESA und den AOI-bereitstellenden Agenturen umfasst der deutsche Beitrag auch den Bereich operationelle Datenprozessierung. Dieser enthält algorithmen- und prozessorrelevante Tätigkeiten im Hinblick auf die Spezifikation, Umsetzung und Test der entsprechenden Softwaresysteme und ihren Einbau in das Datenbodensegment von ENVISAT am D-PAC. Um hierbei über die Missionsdauer eine gleichbleibend hohe Produktqualität zu erhalten, ist es unbedingt erforderlich, exakt ausgewertete Kalibrierungsdaten zu besitzen und diese in die Weiterverarbeitung der Daten einzubringen. Dies umfasst alle im IMF-AP angesiedelten Entwicklungen der Datenprozessoren von Level 0 bis Level 2, sowohl die Near-Realtime-Kette (NRT) im ESA-Auftrag als auch die Offline-Prozessierung (OL) der Level 1b Produkte nach Level 2 in nationaler Verantwortung.

Verarbeitungsstufe	Inhalt
Level 0	originale Messdaten, an den Empfangsstationen für die Weiterverarbeitung formatiert
Level 1b	gemessene Spektren und Kalibrierungsdaten, jeweils getrennt zusammengefasst
Level 1c	gemessene Spektren, auf die Kalibrierung und Korrekturen angewandt sind
Level 2	aus Spektren extrahierte Säulendichten und Profile von Spurengasen, jeweils bezogen auf gemessene Geolokation
Level 3 und höher	kombinierte / assimilierte Datenprodukte bezogen auf die gesamte Erdoberfläche

Tab. 2: Verarbeitungsstufen in der Datenprozessierungskette

Die Arbeit an den Datenprozessoren ist in die Zusammenarbeit mit nationalen Raumfahrtagenturen (DLR, NIVR), ESA sowie externen Forschungsinstituten eingebettet. Letztere sind im Rahmen ihrer Verantwortlichkeiten mit Studien zur Kalibrierung der Daten beauftragt. Mögliche Änderungen der Prozessoren, die aus diesen Tätigkeiten resultieren, werden formalisiert durch so genannte *Processing Change Requests (PCR)* behandelt.

Im abgelaufenen Jahr brachten neue Korrekturen und Erweiterungen des Level 1b-Datenprozessors in Bezug auf die Kalibrierung einen wesentlichen Fortschritt in der Datenqualität, insbesondere im UV/VIS-Bereich. Für die Kanäle 1-5 ist nun ein Status erreicht, der bei gleichbleibendem Instrumentbetrieb als nahe dem Endzustand anzusehen ist. Weitere Änderungen sollten hier mit keinem hohen Aufwand mehr verbunden sein. Auch die kalibrierten Spektren der Infrarotkanäle 6-8 weisen nun deutliche Verbesserungen auf, bedürfen jedoch immer noch einiger Korrekturen, um im operationellen Umfeld die geforderte Genauigkeit zu besitzen. Dies ist vor allem durch die Vereisung der Detektoren 7 & 8 sowie dem Vorhandensein von zeitlich variablem Streulicht bedingt. Die dazu nötigen Arbeiten sollen in naher Zukunft in einem zweiten Verarbeitungsschritt geleistet werden. Dabei können auch die Ende 2004 gefundenen unvorhergesehenen Änderungen in der Charakteristik der Bad/Dead-Pixelverteilung behandelt werden. Um eine durchgängige Datenauswertung zu gewährleisten ist es erforderlich, ein derartiges Verhalten so zu quantifizieren, dass es in der operationellen Prozessorumgebung berücksichtigt werden kann. Wie trotz der beschriebenen Problematik der Detektoren 7 & 8 bereits die momentanen Erweiterungen zu signifikant verbesserten Spektren führen, demonstriert Abb. 5 für Kanal 8. Gut erkennbar ist die wesentlich genauere Darstellung des Sonnenspektrums, hier zwischen 2275 und 2295 nm, aufgrund der einzelnen Korrekturen. Damit ist für die operationelle Nutzung von Detektor 8 eine breitere Basis geschaffen. Detektor 7 ist derzeit leider durch Streulichteffekte, welche gegenwärtig algorithmisch nicht darstellbar sind, operationell kaum nutzbar. Dieser Kanal lässt nur experimentelle Einzelauswertungen zu.

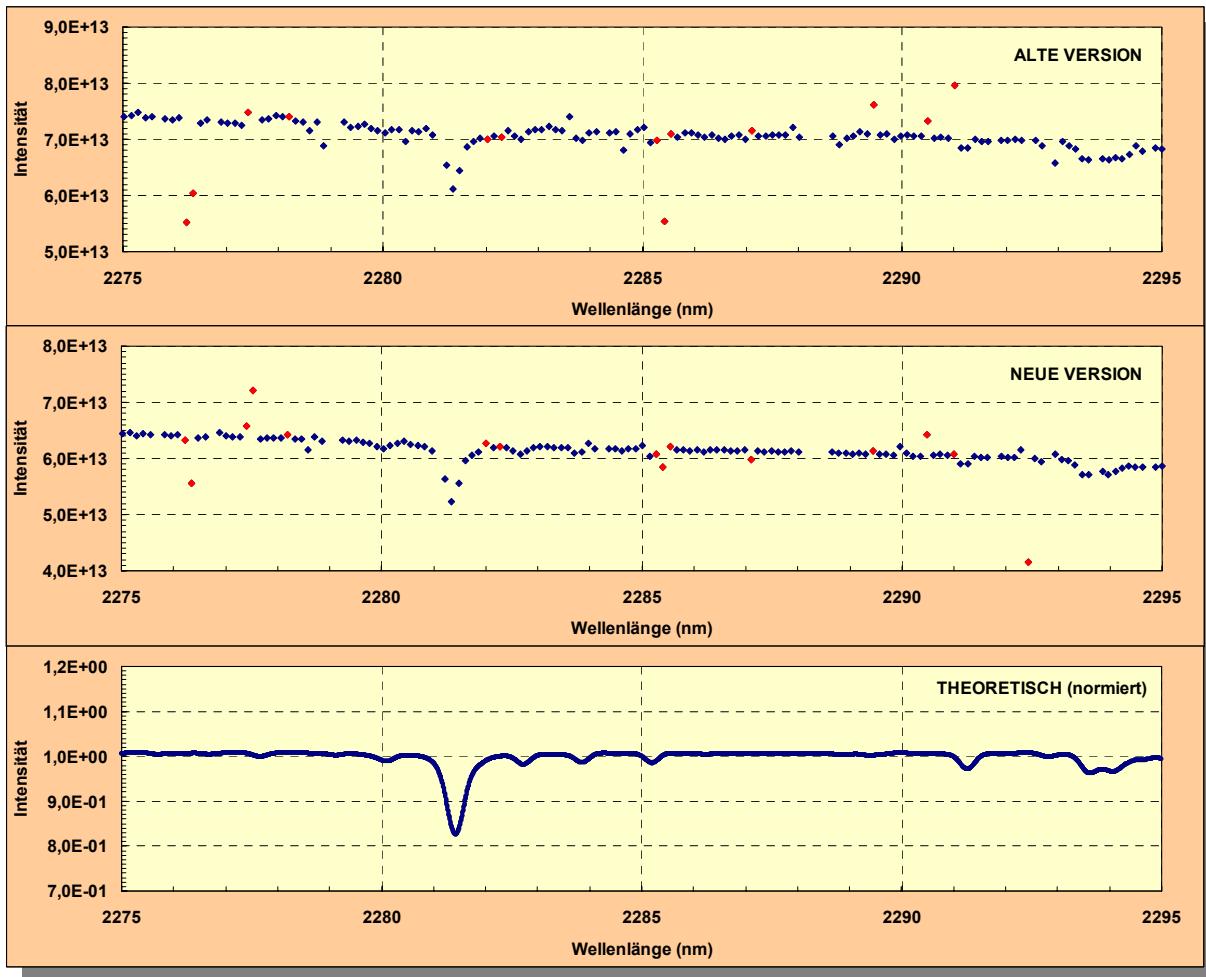


Abb. 5: Ausschnitt eines Sonnenspektrums vom 26. Oktober 2003, gemessen in Detektor 8 (oben und Mitte). Die blauen Datenpunkte sind die kalibrierten und korrigierten Messwerte. Rote bzw. fehlende Pixel stellen Bad Pixel dar. Das obere Bild zeigt die Ergebnisse der Prozessorversion vom November 2003, das mittlere die neue Version vom Dezember 2004 (enthält neue Non-Linearity-Korrektur, Dunkelströme und IFE-Keydaten). Deutlich ist die höhere Qualität des Spektrums zu erkennen. Schwache Fraunhoferlinien werden sichtbar und das Kontinuumsrauschen ist reduziert. Im unteren Bild ist ein hochaufgelöstes FTS-Spektrum vom Kitt Peak dargestellt, das der SCIAMACHY-Auflösung angepasst wurde.

Level 1b-Erweiterung – Detektorelemente:

In den UV/VIS-Kanälen (Kanäle 1-5) muss beim Auslesen der Detektorelemente in Kauf genommen werden, dass aus vorhergehenden Messungen noch Informationen im Detektorelement verbleiben. Dieser *Memory Effect* ist eine Detektoreigenschaft, die sich vor dem Start am Boden charakterisieren ließ. Der Betrieb im Orbit zeigte jedoch, dass eine verbesserte Korrekturfunktion nötig ist. Während die eigentliche Korrekturfunktion relativ einfach zu beschreiben war, erforderte die Umsetzung im Datenprozessor einige Aufwand. Der Grund dafür lag in der Anforderung, diese Korrekturinformation in komprimierter Form mit Hilfe eines einzigen Bytes zu beschreiben. Abhilfe schaffte eine geschickte Parametrisierung, bei der die entsprechenden Konstanten aus einem möglichst großen Testdatensatz bestimmt wurden. Ebenso musste diese Komprimierungsinformation im Vergleich zur Vorgängerversion des Prozessors geändert werden, um zu gewährleisten, dass die optimale Korrektur angewandt wird. Daher war die Weiterverarbeitung im folgenden Datenprozessierungsschritt (Level 1b-2) jeweils versionsabhängig anzupassen. Dies ist erforderlich, da der Datenprozessor auch die Verarbeitung von Level 1b-Produkten aus früheren Versionen bewältigen soll.

In den IR-Kanälen 6-8 ist die Auslesefunktion in einigen Bereichen nicht-linear, was in einer entsprechenden Signalkorrektur berücksichtigt werden muss. Auch dabei wurde eine wellenlängenabhängige Funktion in reduzierte und komprimierte Information gepackt, wodurch nur noch ein Byte pro Kanal für die Weitergabe im Produkt bzw. in den höheren Verarbeitungsstufen notwendig war. Ebenso wie beim *Memory Effect* musste die entsprechende Anwendung im Level 1b-2-Datenprozessor versionsabhängig umgesetzt werden.

Entscheidend für die Nutzbarkeit der Messdaten ist die Kenntnis des Dunkelstroms, welcher als Hintergrundbeitrag im ausgelesenen Signal enthalten ist. Die Bestimmung und Berechnung des Dunkelstroms ist einer der aufwändigsten Teile in der Datenprozessierung. Um die Berechnung zu vereinfachen, teilt man diese in zwei Teile auf:

- einen orbitabhängigen Anteil, der durch eine große Anzahl von Messungen über den Orbit in periodischen Abständen bestimmt wird
- einen „konstanten“ Anteil, der anhand von fünf Dunkelstrom-States ermittelt wird

Im verbesserten Level 1b-Algorithmus bestimmt man nun den konstanten täglichen Anteil des Dunkelstroms aus dem gleichen Orbit, aus dem die Messdaten stammen (bisher benutzte man Information aus den Umläufen des Vortages). Zusätzlich wurde die Berechnung des periodisch angenommenen Verlaufs des variablen Anteils des Dunkelstroms über den Orbit modifiziert. Da ein Großteil der Dunkelstromberechnungen innerhalb der von ESA in ESRIN betriebenen *Instrument Engineering & Calibration Facility (IECF)* stattfindet, waren umfassende Abgleiche zwischen Datenprozessor und IECF notwendig.

Level 1b-Erweiterung – Polarisationskorrektur:

Das optische Konzept von SCIAMACHY sieht nicht vor, den Polarisationsgrad der registrierten Strahlung direkt zu messen. Vielmehr verfolgt man den Ansatz, die ausgelesenen Detektorsignale bezüglich ihres Polarisationsgrads zu korrigieren. Zu diesem Zweck ist das Instrument mit sieben Polarisationsmesselementen (*Polarization Measurement Device, PMD*) versehen, die breitbandig über den Spektralbereich von SCIAMACHY in einer definierten Polarisationsrichtung sensitiv sind. Diese Messelemente integrieren das gesamte Signal eines Spektralbereichs und können keine spektralen Signaturen auflösen. Um nicht nur eine Polarisationsebene zu registrieren, wurde die Ausrichtung des siebten Messelements um 45° gegen die optische Achse versetzt. Im ursprünglichen Konzept zur Auswertung dieser PMDs sollte PMD 'D' (Zählweise beginnend im UV mit 'A') mit dem um 45° versetzten PMD kombiniert berücksichtigt werden. Da die empfangenen Signale jedoch zu schwach waren, um diesen Ansatz erfolgreich umzusetzen, wurde die Berechnung zwischen diesen beiden PMDs entkoppelt. Insgesamt erreicht die Polarisationskorrektur nun Genauigkeiten, die den wissenschaftlichen Anforderungen entsprechen.

Level 1b-Erweiterung – sonstige Änderungen:

Als wichtigste Aspekte, die nun eine höhere Level 1b-Datenqualität liefern, sind zu nennen:

- Bereitstellung einer neuen Version der am Boden gemessenen Kalibrierungsdaten (*Key Data*) durch TPD/TNO: Hier wurden neu analysierte Werte der Polarisationskorrektur in Nadir-Beobachtungsgeometrie eingeführt. Zusätzlich erweiterten unsere Partner an der Universität Bremen

(IUP/IFE) den Satz der *Key Data*, der anschließend von IMF-AP in die operationelle Umgebung eingebunden wurde.

- geänderte Korrektur des Streulichtes in Kanal 1
- geringes, bisher nicht berücksichtigtes Mispointing zwischen SCIAMACHY und der Satellitenplattform ENVISAT in Azimutausrichtung
- Fehlberechnung in der Dopplerverschiebung für solare Spektren, die über den Azimutscanspiegel (ASM) gemessen werden.

Weiterverarbeitung der Level 1b-Produkte

Es hat sich bei der Verarbeitung der Level 1b-Produkte zu Level 2-Säulendichten bzw. Profilinformation von Spurengasen gezeigt, dass unter Umständen ein genaueres Ergebnis erzielt werden kann, wenn nicht nur das solare Spektrum, das über den Elevationscanspiegel (ESM) gemessen wird, in der Auswertung als Referenzspektrum benutzt wird, sondern auch das über den ASM erhältene. Im Extremfall gibt es sogar Situationen, bei denen man auf die Kalibrierung der solaren Daten ganz verzichten kann. Daher wurden die Prozessoren so angepasst, dass im Level 1b-Produkt neben dem kalibrierten solaren ESM Spektrum auch ein kalibriertes ASM Spektrum, sowie die jeweils unkalibrierten Versionen bereitgestellt werden. Grundsätzlich stellt der Level 0-1b-Datenprozessor noch weitere solare Spektren zur Verfügung. Es handelt sich dabei um die Messungen, die in Okkultationsgeometrie sowie über den subsolaren Port durchgeführt werden. Da beide bisher aber nicht sinnvoll in der Level 1b-2 Auswertung genutzt werden können, sind sie derzeit nicht im Level 1b Produkt enthalten. Eine Hinzunahme würde dieses ohnehin schon große Produkt (~ 120 MB/konsolidiertem Orbit) volumenmäßig erheblich vergrößern.

Einem verbesserten Handling der Level 1b Produkte für die weiterführende Datenprozessierung dient die Einführung des so genannten *Decontamination Flags*. Da der Radiant Cooler SCIAMACHYs (SRC) in regelmäßigen Zeitabständen von potentiell vorhandenen Verunreinigungen befreit werden soll, findet seit Beginn des Routinebetriebs mindestens zweimal im Jahr eine Dekontamination des Instruments statt. Dabei werden zusätzliche Heizer betrieben, wodurch die Temperaturen der Detektoren und der Optischen Bank für bis zu zwei Wochen stark ansteigen können. Im Verlauf der Mission hat sich erwiesen, dass die „Reinigung“ des SRC momentan nicht erforderlich ist, die Dekontamination aber sehr wohl einen positiven Effekt auf die Empfindlichkeit der Detektoren 7 & 8 hat, die von einer dünnen Eisschicht betroffen sind. Mit Hilfe des Aufheizens während der Dekontamination erreicht man eine deutliche Verbesserung der Situation. Infolge der erhöhten Detektortemperaturen verschlechtert sich das Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Daten, die während einer Dekontamination aufgenommen wurden, sind nun mittels *Decontamination Flag* gekennzeichnet, sodass jeder Nutzer für sich entscheiden kann, ob er solche Daten benutzen möchte bzw. solche mit möglicherweise geringerer Datenqualität. Im Fall von Level 2 Daten signalisiert das Flag eine möglicherweise geringere Datenqualität.

3. Laufende Projekte und Vorhaben

3.1 Ozone Monitoring SAF

D. Loyola, P. Valks, Y. Lischitz, S. Slijkhuis, B. Pfug (IMF-GW), H. Witt (IMF-GW), S. Kiemle (DFD-IT)

Im vergangenen Jahr lag das Hauptaugenmerk in unserer Arbeit für EUMETSATs *Satellite Application Facility on Ozone Monitoring (O3M-SAF)* in der Weiterentwicklung der O3M-SAF-Infrastruktur und prä-operationeller GOME-2/METOP-Datenprodukte. Das operationelle System, das im Rahmen des O3M-SAF die Verarbeitung von GOME-2-Daten zu Gesamtsäulen, einschließlich Ozon, NO₂, SO₂, BrO, ClO und HCHO, übernimmt, ist unter der Bezeichnung *Universal Processor for UV/VIS Atmospheric Spectrometers (UPAS)* bekannt. UPAS wurde in den zurückliegenden drei Jahren in IMF-AP konzipiert und entwickelt. Dieser Prozessor ist in das Daten- und Informationsmanagementsystem DIMS des Clusters *Angewandte Fernerkundung* eingebunden, das wiederum eine Schnittstelle zum Datenmanagementsystem UMARF von EUMETSAT besitzt. Inhaltlich entspricht der operationelle UPAS/GDOAS-Algorithmus der Version 4.0 des GOME-Datenprozessors (GDP), mit dessen Hilfe Ozon-Gesamtsäulen für die 9-jährige Gesamtdauer der GOME/ERS-2-Mission re-prozessiert wurden (siehe Kap. 2.1). Er bildet die Grundlage für die zukünftige Prozessierung von GOME-2/METOP-Daten.

Readiness Reviews

Ein wichtiger Meilenstein im Entstehen des O3M-SAF war das *Infrastructure Readiness Review (IRR)* vom 29.11.-1.12.2004. Das IRR hatte zum Ziel, den Status der Prozessierungs- und Archivierungssysteme am DLR und den anderen, in den meteorologischen Instituten Finnlands (FMI), Dänemarks (DMI) und der Niederlande (KNMI) angesiedelten operationellen O3M-SAF-Zentren zu überprüfen. Im IRR wurde geprüft, ob die prä-operationelle Infrastruktur wie spezifiziert vorhanden und entsprechend den Vorgaben konfiguriert ist, um die Verifikationsaktivitäten, einschließlich derer mit dem gesamten EPS-Bodensegment, zu beginnen. Im Oktober wurde am DLR das *System Integration Readiness Review (SIRR)* abgehalten. Neben der Vorstellung von UPAS und DIMS stand die Präsentation von Testergebnissen im Vordergrund. Im November fanden schließlich die Review-Aktivitäten mit einem erfolgreichen Review Board-Meeting am Hauptquartier von EUMETSAT in Darmstadt ihr vorläufiges Ende. Dabei wurde nochmals seitens EUMETSAT und des O3M-SAF die Entwicklung von UPAS und DIMS sowie deren umfangreiche Tests hervorgehoben.

Wissenschaftlicher Prototyp

Die Arbeiten am wissenschaftlichen Prototypen konzentrierten sich auf die Verbesserung der Retrieval-Algorithmen zur Ableitung der Säulendichten für Stickstoffdioxid (NO₂) und Brommonoxid (BrO). Außerdem befand sich ein Algorithmus zur Bestimmung der spektralen Oberflächenalbedo in Arbeit.

Die Ableitung von NO₂-Dichten aus GOME-2-Daten profitiert von den Entwicklungen der Version 4.0 des GDP. Im neuen GDP-Algorithmus für NO₂ wurden die Einstellungen zum Retrieval schräger Säulen verbessert bei gleichzeitiger Verwendung realistischerer Referenzspektren. Zusätzlich kann nun der *Air Mass Factor (AMF)* für NO₂ mittels des Strahlungstransfermodells LIDORT mit Mehrfachstreuung direkt berechnet werden. Um jahreszeitliche und breitenabhängige Zusammenhänge berücksichtigen zu können basieren die AMF-Berechnungen auf einer neuen Klimatologie stratosphärischer NO₂-Profile. Eine weitere Verbesserung des Algorithmus betrifft die Ableitung von NO₂-Säulen über Regionen mit stark verschmutzter Troposphäre. Hierbei kommt ein spezieller korrigierter troposphärischer AMF zum Einsatz. Zur Unterstützung unserer NO₂-Aktivitäten nahm ein *O3M-SAF Visiting Scientist* vom IUP/IFE der Universität Bremen im Oktober 2004 seine Arbeit für einen Zeitraum von 6 Monaten bei uns auf.

Algorithmenaktivitäten im Falle von BrO umfassten ebenfalls die Weiterentwicklung der AMF. Es wurden Studien durchgeführt mit dem Ziel, die Abhängigkeit des BrO AMF von den BrO-Konzentrationen in der Troposphäre, der Oberflächenalbedo und Aerosoleigenschaften zu quantifizieren. Als zusätzliche Aufgaben ist vorgesehen, die Ableitung von BrO in polaren Regionen, wo manchmal stark variable Mengen von BrO beobachtet werden können, zu verbessern.

Im Rahmen des O3M-SAF entsteht in IMF-AP ein Algorithmus, der die spektrale Oberflächenalbedo aus von GOME-2 gemessenen *Top-of-Atmosphere (TOA)* Strahldichten berechnen soll. Dieser Parameter ist eine wichtige Größe im Retrieval von Spurengasen, insbesondere bei operationellen Near-Realtime-

Aufgaben. Der neue Oberflächenalbedo-Algorithmus basiert auf einem weiterentwickelten *Minimum Lambert Equivalent Reflectivity (MLER)* Code mit einem variablen Zeitfenster.

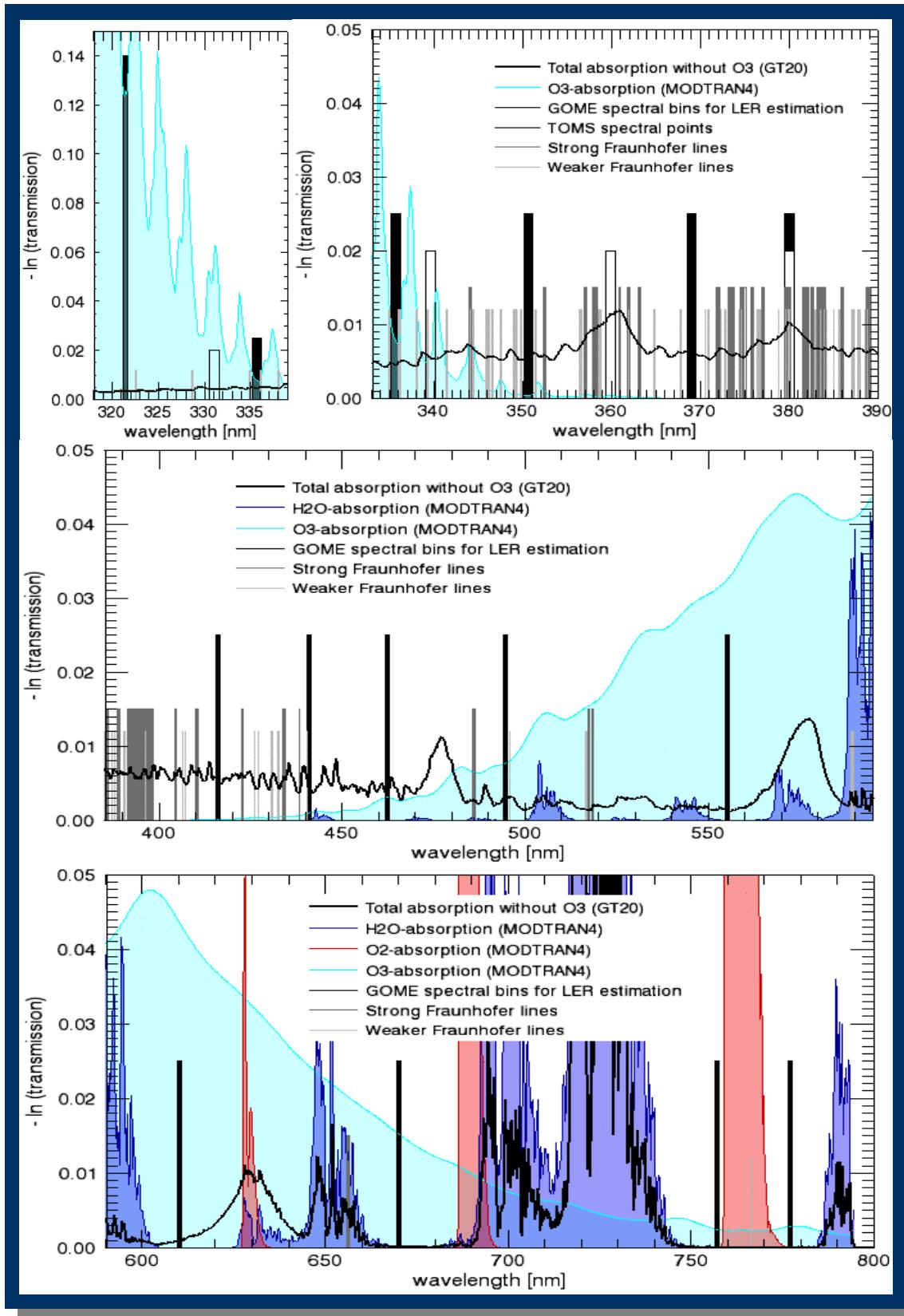


Abb. 6: Entwicklung eines spektralen Oberflächenalbedo-Algorithmus für GOME-2. Gezeigt sind die spektralen Bereiche für die LER-Abschätzung innerhalb des atmosphärischen Absorptions- und des solaren Fraunhofer-Linienspektrums. Die Absorptionsspektren wurden mittels GOMETRAN und MODTRAN berechnet.

3.2 Langfristbeobachtungen der Kalibrationsparameter von GOME/ERS-2

S. Wahl, B. Aberle, S. Slijkhuis, D. Loyola

Als Teil der GOME-Aufgaben im Rahmen der D-PAF-Funktion wurden die Kalibrationsparameter der Level 0-1 Prozessierungskette untersucht. Die meisten dieser Parameter sind in einer Datenbank gespeichert, die die gesamte GOME-Mission umfasst. Untersucht wurden

- Sun Mean Reference (SMR)
- Wellenlängenkalibration
- Pixel-to-Pixel Gain (PPG)
- Dunkelstrom
- PMD Korrektur Faktoren

Die genannten Parameter vermitteln einen zuverlässigen Eindruck über die Langzeitstabilität des Instrumentes im Orbit. Mit Hilfe der *Sun Mean Reference* lässt sich außerdem die Instrumentendegradation erfassen.

SMR und Degradation

Beobachtungen seit dem Start von ERS-2 zeigen, dass Messungen des Sonnenspektrums gegenüber den ersten Sonnenbeobachtungen des Jahres 1995 einen Intensitätsabfall aufweisen. Am stärksten tritt der Effekt in den beiden ersten Kanälen von GOME auf. Der Grund für die Degradation ist ein Ausgasen der optischen Vergütung (Coating). Abb. 7 zeigt das Verhältnis der SMR vom 9. Januar 1996 zu den jeweils am selben Tag der folgenden Jahre gemessenen Spektren. In Kanal 1 (240 - 316 nm) beträgt die Abnahme der Intensität seit 1996 ca. 80%. In Kanal 2 liegt sie bei etwa 60%.

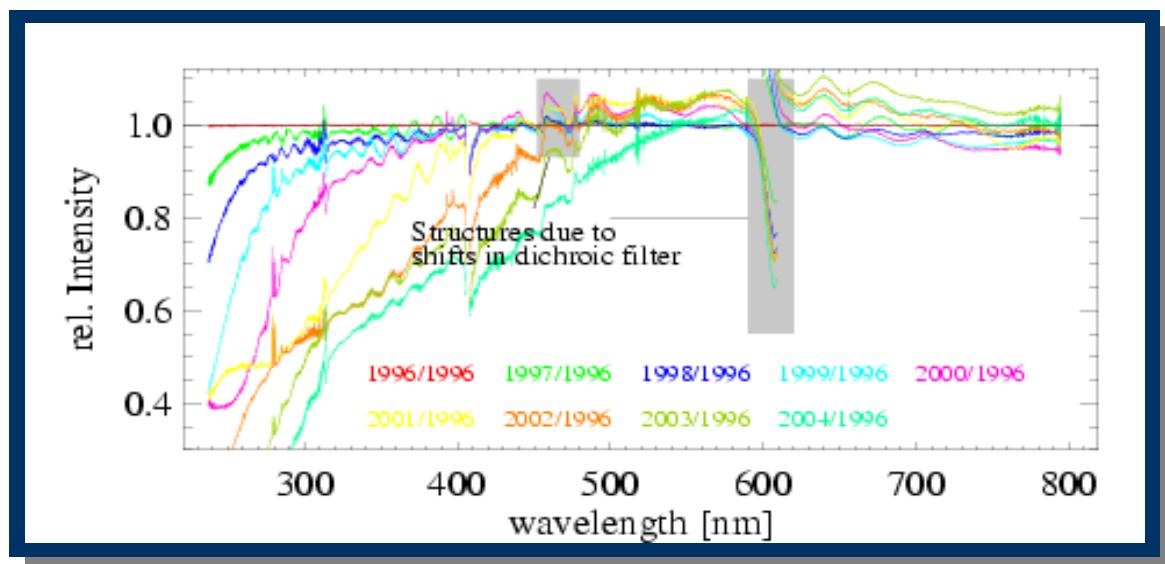


Abb. 7: Degradation der GOME-Kanäle der letzten 9 Jahre

Kalibrationsparameter

Abb. 8a-d illustrieren die Zeitreihen von vier unabhängigen Kalibrationsparametern. Es handelt sich dabei um

- jahreszeitliche Schwankung der SMR-Messungen bei 750 nm
- Wellenlänge am Pixelpunkt 859 (Kanal 4), die mit Hilfe der in der Datenbank gespeicherten Polynomparameter der Wellenlängenkalibration berechnet wurde. Die Wellenlängenkalibration ist zusätzlich abhängig von der Temperatur.
- Detektortemperatur
- RMS-Fehler der PPG, gemittelt über den gesamten Kanal 4.

Auffällig ist der sich ähnelnde Verlauf der Parameter a)-c). Zur Verdeutlichung sind deshalb in Abb. 8e alle Parameter übereinander gezeichnet. In regelmäßigen Abständen sind Maxima zu erkennen. Die Maxima der SMR stimmen mit den Maxima der Wellenlängenkalibration überein, während die Maxima der Temperatur leicht phasenverschoben sind. Der RMS des PPG scheint keinen Zusammenhang mit den

anderen Parametern aufzuweisen. Zu Beginn des Jahres 2001 weisen sowohl die Wellenlänge als auch der RMS des PPG einen großen Sprung auf. Das Verhalten der Kalibrationsparameter bedarf noch detaillierterer Untersuchungen, um seine Ursachen sowohl qualitativ als auch quantitativ zu verstehen.

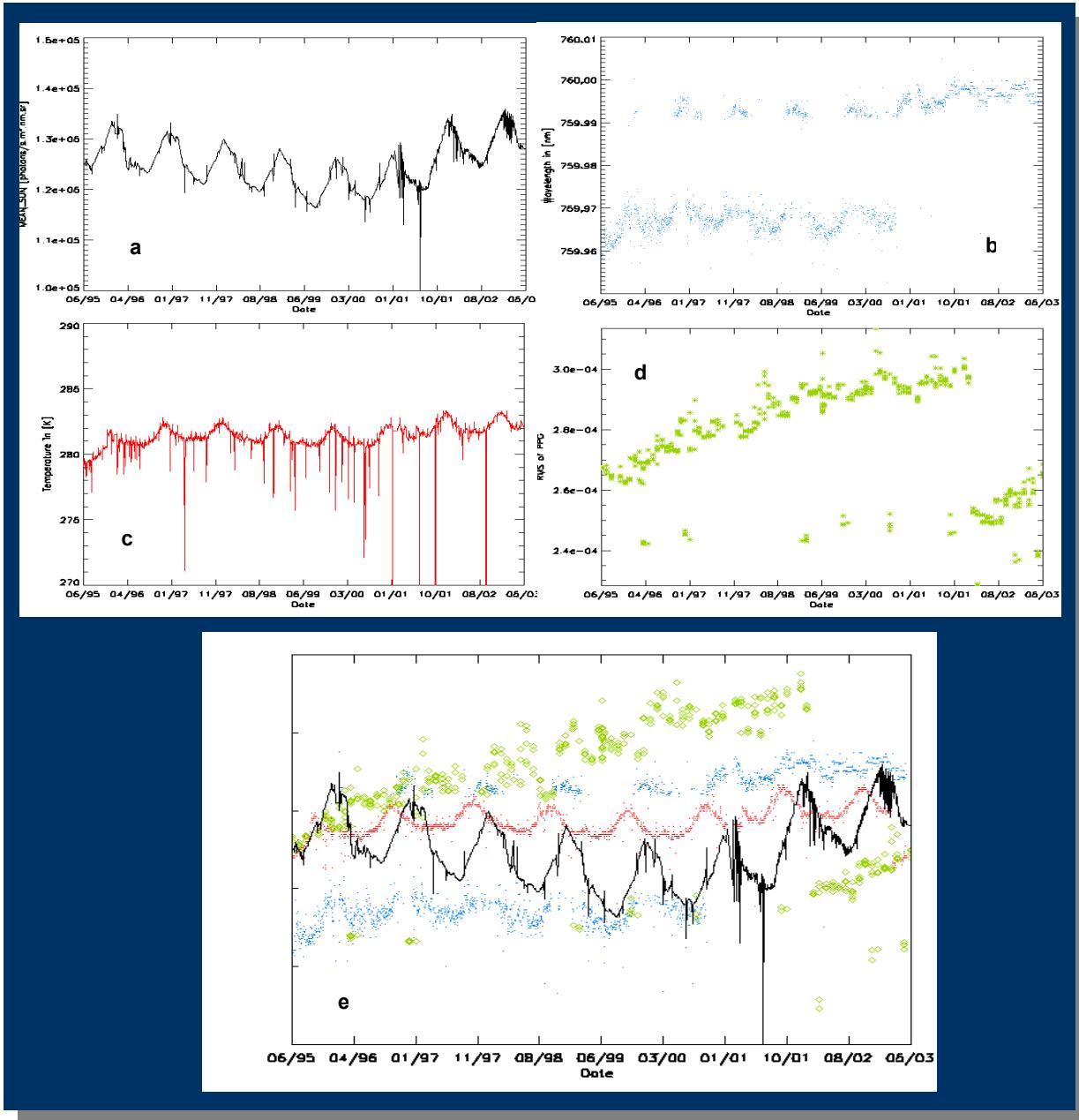


Abb. 8: Sun Mean Reference (a), Wellenlängenkalibration (b), Temperatur (c) und RMS des PPG (d) in Kanal 4. Abb. e stellt die zeitlichen Verläufe gegenüber.

Q-Faktoren

Die Q-Faktoren beschreiben die Differenz aus dem gemessenen PMD-Signal und demjenigen, das sich aus einer Modellierung berechnet, in die neben der registrierten Kanalintensität auch Keydaten eingehen. Die Bezeichnung als „Faktor“ ist nur historisch bedingt. Abb. 9 stellt die Zeitreihe aller drei Q-Faktoren entsprechend der drei PMDs dar. Der Abfall des Signals von PMD 1 resultiert aus der nicht vollständig erfassbaren Degradation des Instrumentes, während der weitgehend horizontale Verlauf der Kurven für PMD 2 und 3 anzeigt, dass man hier das Langzeitverhalten bereits sehr gut darstellen kann.

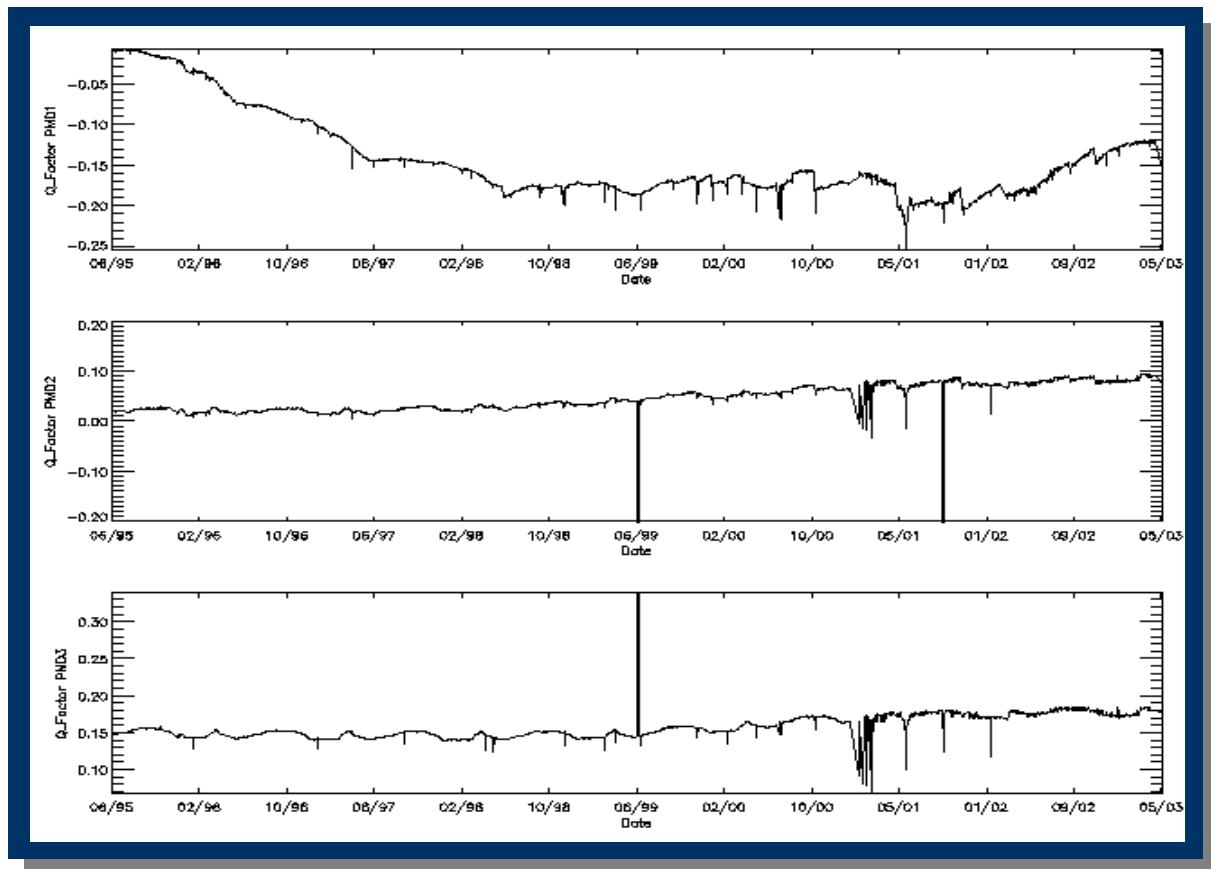


Abb. 9: Zeitreihe der Q-Faktoren für alle drei PMDs über die gesamte Missionsdauer

3.3 Verbesserung der Kalibration von GOME für die Ozon-Profilbestimmung

S. Slijkhuis, S. Wahl, B. Aberle, D. Loyola

Seit neun Jahren werden im DLR operationell Daten von GOME mit einer Genauigkeit, die ausreichend ist für die Bestimmung von Gesamtsäulen von Ozon und anderen Spurengasen, kalibriert (= Level 1-Prozessierung). Das DOAS-Verfahren wertet hierzu *relative* Absorptionsstrukturen in den GOME-Spektren aus den Kanälen 2-4 aus. Etliche Studien haben bewiesen, dass es für Ozon auch möglich ist aus GOME-Messungen den Ozongehalt in einzelnen Höhenschichten, d.h. das Ozonprofil, zu bestimmen. Eines dieser experimentellen Verfahren, NNORSY (entwickelt vom Zentrum für Sonnenenergie und Wasserstoff-Forschung in Stuttgart – ZSW), wird auch bereits operationell am DLR betrieben. Grundvoraussetzung für eine erfolgreiche Ozon-Profilbestimmung ist eine sehr genaue *absolute* Kalibration, wobei berücksichtigt werden muss, dass sich die wichtigste Profilinformation in Kanal 1 befindet, demjenigen Wellenlängenbereich, in dem die Kalibrierung von GOME stellenweise besonders anspruchsvoll ist.

Die Studie CHEOPS (Climatology of Height-resolved Earth Ozone and Profiling Systems) für GOME wurde von ESA initiiert. IMF-AP übernimmt darin die Verbesserung der Kalibration, während DLR-DFD an der Erstellung einer Klimatologie aus den gerechneten Ozonprofilen beteiligt ist.

Bestimmung vom Signal-Hintergrund in Kanal 1

Der Kanal 1 von GOME leidet unter *Crosstalk* des Detektor-Kühlers auf die Signal-Leitung. Außerdem hat sich herausgestellt, dass das Streulicht auf dem Detektor nur unzureichend kalibriert war, wobei diese Art von Kalibrierung in der Praxis mit sehr hohem Aufwand durchzuführen ist. Es wurde deshalb ein Verfahren entwickelt, welches mittels einiger „unbeleuchteter“ Pixel auf dem Detektor diese Störeffekte abschätzt.

Bestimmung von saisonaler Abhangigkeit in der Diffuser-BSDF

Zur Kalibrierung der spektralen Intensitat wird die von der Erde zuruckgestreute Strahlung mit Sonnenstrahlung verglichen, die uber einen Diffuser im gleichen Lichtweg innerhalb des Gerates gestreut wird. Das Verfahren setzt eine genaue Kalibrierung der *Bi-directional Scattering Distribution Function (BSDF)* des Diffusers voraus. Die Streu-Intensitat der Sonnenstrahlung hangt auch vom genauen Azimutwinkel, unter dem das Sonnenlicht auf den Diffuser einfalt, ab. Dieser Azimutwinkel weist eine jahreszeitliche Anderung auf, da die wahre Bahn der Erde um die Sonne nicht kreisformig, sondern elliptisch ist. Zur Bestimmung der Azimutabhangigkeit wurden mit GOME gemessene Sonnenspektren analysiert. Erschwerend kommt hinzu, dass die gemessene Sonnenintensitat nicht nur von der Diffuser-BSDF abhangt, sondern auch von Degradation im Gerat beeinflusst wird. Beide Effekte mussen entkoppelt werden. Nach Modellierung und Korrektur der Degradation ergibt sich das in Abb. 10 dargestellte Verhalten. Es zeigt fur eine Wellenlange pro Kanal die gemessene Sonnenintensitat als Funktion des Azimutwinkels. Die Kurven verdeutlichen die Azimutabhangigkeit, obwohl sie Abweichungen untereinander aufgrund von Unzulanglichkeiten in der Degradationskorrektur zeigen. Unsere Untersuchungen lassen erkennen, dass das Verhalten der BSDF wesentlich komplizierter ist als in fruheren Bestimmungen angenommen.

Die neuen Kalibrierungen wurden als Option in die GOME-Datenprozessor Level 1-Extraction-Software integriert, und damit der wissenschaftlichen Nutzergemeinde zur Verfugung gestellt.

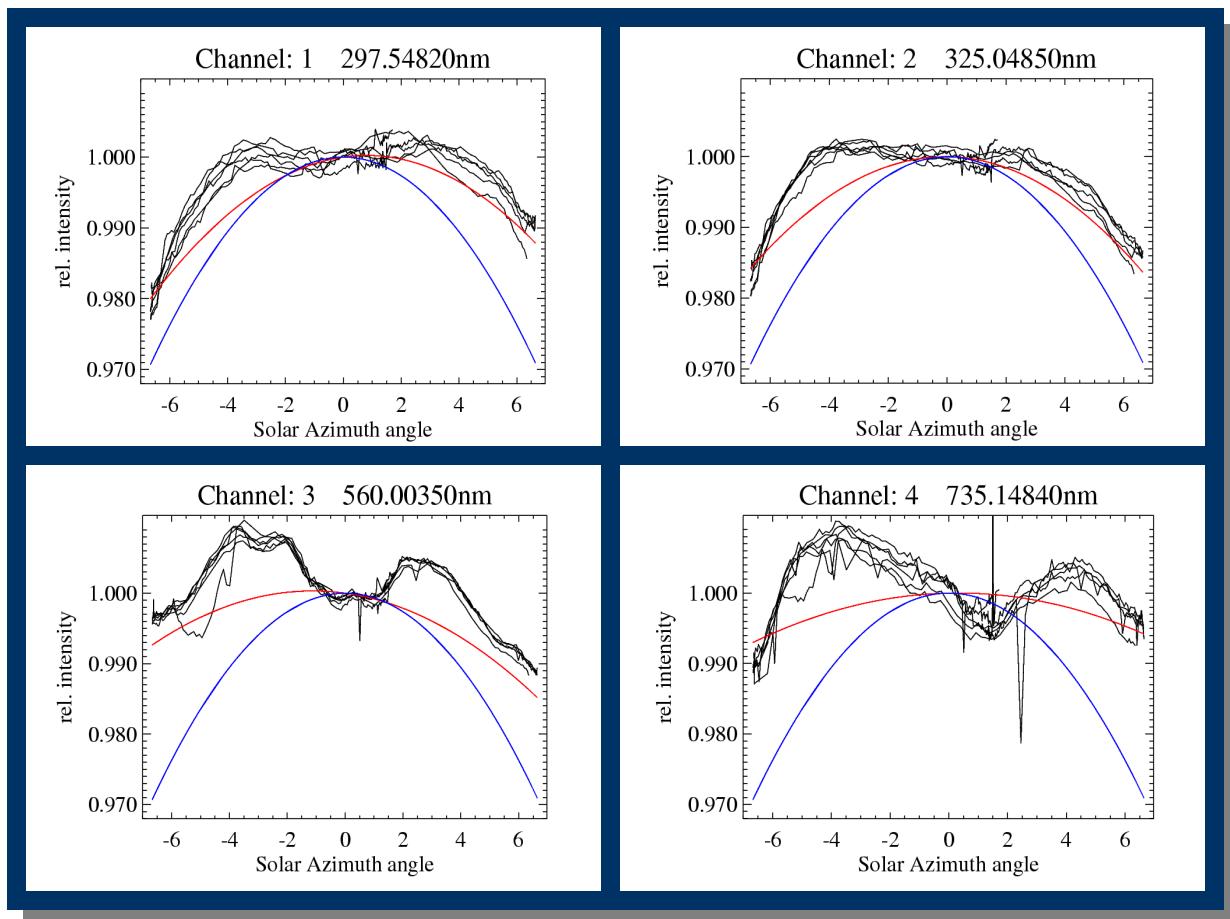


Abb. 10: Azimutwinkel-Abhangigkeit der BSDF des GOME-Diffuser fur 4 Wellenlangen, gemessen von 1995 bis 1998, nach Korrektur der Instrument-Degradation (schwarze Kurven). Die farbigen Linien geben fruhere Bestimmungen wieder.

3.4 Status der SCIAMACHY-Datenprozessoren Level 2

A. von Bargen, K. Kretschel, B. Aberle, A. Doicu, M. Hess, S. Hilgers, F. Schreier, S. Slijkhuis, S. Wahl

IMF-AP trägt die Verantwortung für die Entwicklung der Datenprozessoren für die Verarbeitungsschritte Level 0-1b und Level 1b-2. In diesem Rahmen implementiert und wartet die Organisationseinheit den SCIAMACHY Level 1b-2-Offline-Datenprozessor, der im deutschen Prozessierungs- und Archivierungszentrum (D-PAC) im Auftrag der ESA betrieben wird. Gemeinsam mit ESA war 2004 vereinbart worden, die Entwicklung der NRT- und OL-Datenprozessorensysteme zu vereinfachen bzw. zusammenzufassen. Deshalb bildet seit Beginn des Jahres der Prototyp des Level 1b-2-OL-Datenprozessors die Grundlage für beide Implementierungen. Um seine Möglichkeiten nutzen zu können, besitzt die Entwicklung des OL-Prozessors höhere Priorität als diejenige des NRT-Prozessors. Neben den prozessornahen Tätigkeiten übernimmt IMF-AP im ENVISAT-Bodensegment die Aufgabe eines *Expert Support Laboratory (ESL)* für SCIAMACHY und stellt damit seine Algorithmen- und Datenverarbeitungsexpertise in operationellen Fragen zur Verfügung (siehe Kap. 2.2).

Das Jahr 2004 war für die SCIAMACHY-Prozessorenentwicklung Level 2 geprägt durch die erfolgreiche Abnahme des SCIAMACHY Level 1b-2-OL-Prozessors durch ESA im *Factory Acceptance Test* sowie durch die Implementierung von grundlegenden Strukturen, welche eine vielseitigere Nutzung der Algorithmen erlaubt. Ende 2004 konnte deshalb der operationelle Level 1b-2 OL-Prozessor im ENVISAT-Bodensegment seinen Betrieb aufnehmen. Darüber hinaus wurde die Fortentwicklung der Algorithmen, insbesondere für Limb-Beobachtungsgeometrie, weiter vorangetrieben. Vorbereitungen für eine Erweiterung des DOAS-Algorithmus auf die Version 4.0 des GOME Datenprozessors (siehe Kap. 2.1) hatten zum Ziel, im kommenden Jahr einen entscheidenden Fortschritt in der Bestimmung der Ozonsäulendichten aus UV/VIS-Spektren in Nadir-Beobachtungsgeometrie zu erzielen.

Nach der Verifikation des bestehenden NRT-Datenprozessors (Version 5.01-5.04) im Frühjahr 2004, der auf Basis des DLR-Prototyps von unserem industriellen Partner JENA-OPTRONIC GmbH im Jahr 2003 realisiert worden war, wurden die dabei gewonnenen Erfahrungen zusammengefasst und empfohlen, sie bei nachfolgenden Weiterentwicklungen umzusetzen. Diese Empfehlungen bezogen sich sowohl auf einzelne Produkte als auch auf einzelne Algorithmenbereiche. Tabelle 3 beschreibt den Zusammenhang zwischen Spurengas bzw. Atmosphärenparameter und Algorithmengruppe, jeweils bezogen auf Spektralbereich und Beobachtungsgeometrie.

	UV/VIS Nadir DOAS Säulendichte	IR Nadir BIAS Säulendichte	UV/VIS Limb Profile	Wolken & Aerosole
O ₃	X		X	
NO ₂	X		X	
BrO	X			
SO ₂	X			
OCIO	X			
HCHO	X			
CO		X		
CH ₄		X		
H ₂ O		X		
N ₂ O		X		
Wolkenbedeckungsgrad				X
Aerosol Index				X

Tab. 3: Spurengase und Atmosphärenparameter als Funktion des Spektralbereichs und der Beobachtungsgeometrie

Prozessierung der Nadir-Daten

Folgende Verbesserungen und Erweiterungen konnten erfolgreich umgesetzt werden:

- Solare Referenzspektren: Prinzipiell ist es jetzt möglich, nicht nur wie bisher das über den Diffuser des Elevationscanners gemessene solare Spektrum als Referenz zu benutzen, sondern auch die Sonnenspektren, welche über den Diffuser des Azimutscanners, den subsolaren Port und in Okkultation aufgenommen werden. Außerdem wurde die Option eingeführt, alle vier solaren Spektren in kalibrierter oder unkalibrierter Form anzuwenden. Diese Bereitstellung der solaren Spektren erforderte einen größeren Eingriff in die interne Struktur, da ursprünglich nur die Anwendung des solaren Spektrums aus Messungen über den Elevationsdiffuser vorgesehen war. Zusätzlich musste der Level 0-1b-Datenprozessor sowie die von ESA betriebene IECF angepasst werden, um eine korrekte Datenversorgung zu gewährleisten. Die Bereitstellung der unterschiedlichen solaren Spektren ermöglicht eine wesentlich bessere Feinabstimmung der einzelnen Nadiranwendungen, insbesondere im UV/VIS-Spektralbereich.
- Datenbanken für die Referenzspektren (Absorptionsquerschnitte): Neben Alternativen für BrO, SO₂ und OCIO wurde die Möglichkeit gegeben, Kalibrierungsdaten aus Bodenmessungen spektral abhängig in der numerischen Anpassung der Säulendichtenbestimmung als weitere Parameter zu berücksichtigen. Dazu gehört ebenfalls die Berücksichtigung eines inversen solaren Spektrums als Fit-Parameter. Letzteres bedeutete einen größeren Eingriff in die Struktur des Level 2 Prozessors.
- Alternative Prozessorenversion: Eine wesentliche Änderung betrifft die Einführung der Option, den Prozessor kompatibel zur Version 3.4 des GOME-Datenprozessors zu betreiben. Dazu wurde die Berechnung der Luftmassenfaktoren (AMF) auf die Basis eines neuronalen Netzwerks gestellt und die schräge Säulendichte nach ihrer Bestimmung durch eine Korrektur des Ring-Effekts ergänzt. Dabei erfolgt die Bestimmung der vertikalen Säulendichte iterativ unter Einbeziehung der Luftmassenfaktorberechnung sowie einer Profilklimatologie für Ozon, hier TOMS V7.
- Wolkenbedeckungsgrad: Eine Korrektur in seiner Bestimmung vermeidet nun in den Resultaten Blickwinkelabhängigkeiten über einen State. Diese Abhängigkeit konnte man bisher in einer Größenordnung < 0.1 Wolkenbedeckungsgrad beobachten (die Validierung erfolgt bisher mit einer Genauigkeit von 0.1 Bedeckungsgrad, sodass es sich hier um einen kleinen, aber doch wahrnehmbaren Effekt handelt).
- Parametereinstellungen: Die Ableitung von Produkten aus UV/VIS Nadir-Messungen wurde angepasst, indem die Einstellungen der individuellen Anwendungen den Empfehlungen gemäß verfeinert wurden. Dazu zählen die Benutzung der Referenzspektren, die Größe und Lage des Spektralfensters und die Einstellung von Faktoren zur Skalierung, Glättung und Berücksichtigung von spektralen Shifts.

Produkte im Infrarot (IR)-Spektralbereich konnten Nutzern bisher noch nicht zur Verfügung gestellt werden, da hier die Verfahren noch unter dem Ausmaß der unbefriedigenden Level 1b-Datenqualität leiden. Infolge der inzwischen deutlichen Qualitätssteigerungen der Level 1b-Daten ist hier jedoch für das Jahr 2005 die Ausweitung der Produktpalette auf IR-Daten zu erwarten. Aus diesem Grund wurde der IR-Ableitungsalgorithmus bereits im Berichtszeitraum auf den Prüfstand gestellt, um so früh wie möglich wesentliche Verbesserungen zu konzipieren. Dazu zählen die Berücksichtigung der Spaltfunktion, eine unabhängige Anpassung der Basislinie des Spektrums sowie der Albedo. Ebenfalls sollen die numerischen Anpassungsroutinen ausgetauscht werden, die später ermöglichen, eine Anpassung unter Nebenbedingungen („Bounds“) durchzuführen.

Prozessierung der Limb-Daten

Die Auswertung von Limb-Messdaten wurde mit dem existierenden Algorithmus optimiert und in einer ersten operationellen Version freigegeben. Da sich im Laufe der Entwicklung zeigte, dass der Ableitungsansatz limitiert ist, konnte parallel dazu ein effizienter Retrievalalgorithmus ausgearbeitet werden, welcher die Regularisierung der Daten optimiert (siehe dazu Kapitel 3.6). Derzeit besteht die Limb-Produktpalette aus Ozonprofilen, abgeleitet im UV-Bereich sowie NO₂, basierend auf dem sichtbaren Spektralbereich.

Prozessorumgebung

Ein wesentlicher Schwerpunkt der Arbeiten bildete wiederum die Fortentwicklung der systemtechnischen Struktur, die für den Nutzer der Daten in den meisten Fällen nicht sichtbar ist. Dazu zählten eine effizientere Fehlerbehandlung, die Anpassung des Datenprozessors auf höhere Betriebssystemversionen und die Optimierung der Kommunikation der verteilten Prozesse. Ebenso wurde die Leistungsfähigkeit

des Prozessors wesentlich durch eine systematische Analyse der Abläufe optimiert, sodass nun ein einzelner Orbit mit den derzeitig erforderlichen Anwendungen in weniger als 15 Minuten gerechnet werden kann. Damit verbleiben im Prozessor genügend Reserven, um komplexere und rechenaufwändiger Verfahren umzusetzen.

3.5 SCIAMACHY Operations Support

M. Gottwald, E. Krieg, W. Döhler, K. Reissig (IBR), J. How (DFD-IT)

Im Jahr 2004 wurde der 2003 begonnene Routinebetrieb von SCIAMACHY weitergeführt. Er entsprach in den Bereichen

- Missionsplanung
- Pflege des Betriebskonzepts, einschließlich der Onboard-Messtabellen
- Langzeitüberwachung

in vollem Umfang den wissenschaftlich-technischen Anforderungen.

Final Flight-Konfiguration und Operation Change Requests

Zur Optimierung des Routinebetriebs wurde der *Operations Change Request (OCR)* Prozess konsequent weitergeführt. Auch wenn dieser Prozess manchmal stark formalisiert wirkt, so erlaubt er doch, Änderungen an den Final Flight Definitionen - sowohl bei Missionsszenarien, States und Timelines - in einer konfigurationskontrollierten Weise vorzunehmen. Nur damit ist es möglich, den Bordzustand des Instruments jederzeit exakt beschreiben und ihn im Falle von Anomalien jederzeit reproduzieren zu können. Trotz der Komplexität der Schnittstellen in den Bodensegmenten ließen sich die Bearbeitungszeiten der OCRs kurz halten, sodass sinnvolle Änderungen so schnell wie möglich umsetzbar waren. Die inzwischen vorhandenen umfangreichen S/W-Tools ermöglichten, auch Änderungen zu analysieren, die tief in die Betriebslogik des Instruments eingreifen, wodurch eventuell erforderliche Unterstützung seitens der Industrie auf ein Minimum reduziert werden konnte.

Master-Archiv für Level 0-Messdaten

SOST-IMF konzentriert sich bei der Analyse von Messdaten auf die systemnahen Level 0-Daten, sowohl unkonsolidiert (NRT) als auch konsolidiert (offline). Während der Betrieb des Satellitenlinks zum Transfer der NRT-Produkte wie geplant funktionierte, erforderte die Verwendung von konsolidierten Daten zusätzliche Anstrengungen im Bereich der Qualitätssicherung, z.B. um unvollständige Dateien oder Mehrfachprodukte zu identifizieren. Es wurde das Level 0-Master-Archiv – gekennzeichnet durch genau ein vollständiges Datenprodukt pro Orbit – initiiert und mit konsolidierten Level 0-Produkten des Jahres 2004 gefüllt. Die hierfür nötige Schnittstelle zwischen dem ENVISAT D-PAC und dem Daten- und Informationsmanagementsystem (DIMS) des DFD erreichte damit auch bzgl. der konsolidierten Level 0-Daten ihren operationellen Status. Produktqualitätsfilter wurden innerhalb dieser Schnittstelle eingerichtet, erfolgreich getestet und betrieben. Somit können nur solche konsolidierten Level 0-Dateien diese Filter auf ihrem Weg nach DIMS passieren, deren Dateninhalte mit dem geplanten Messbetrieb von SCIAMACHY übereinstimmen und deren Produktformate der Spezifikation entsprechen.

Level 0-NRT-Produkte werden momentan weiterhin im Interimsarchiv, das aus sechs Linux-PCs besteht, gespeichert. Aufgrund des nun existierenden Master-Archivs wurde begonnen, den PC-Cluster als *Rolling Archive* zu konfigurieren. Sobald ein konsolidiertes Level 0-Produkt im Master-Archiv verfügbar ist, werden die entsprechenden NRT-Produkte im PC-Cluster gelöscht. Mit den NRT-Produkten im *Rolling Archive* und den konsolidierten Daten im Master-Archiv stehen nun zwei Archivumgebungen zur Verfügung, die den Anforderungen von SOST-IMF für die Gesamtdauer der SCIAMACHY-Mission genügen.

Instrumentüberwachung und Anomalien

Im Jahr 2004 traten Instrumentanomalien mit recht geringer Häufigkeit auf. Für SCIAMACHY waren in erster Linie der bekannte *MCMC CCA Check Error* sowie die *Single Event Upsets (SEU)* genannten Störungen aufgrund des Einwirkens solarer energiereicher Teilchen von Bedeutung. Der erstgenannte Fehler ereignete sich in Übereinstimmung mit der abgeschätzten Frequenz von ca. 2-3-mal pro Jahr. SEUs sind in gewisser Weise korreliert mit der Sonnenaktivität. Die vier aufgetretenen Ereignisse passen in die SEU-Gesamtstatistik von ENVISAT. Hervorzuheben ist die auf den ursprünglich von Astrium

entwickelten S/W-Paketen basierende Fähigkeit, in Anomaliefällen rasch eine detaillierte Fehleranalyse durchführen zu können, durch die Auszeiten des Instruments auf ein Minimum reduziert werden konnten. Hierbei soll auch die Verfügbarkeit betriebsrelevanter Information über die von SOST-IMF unterhaltenen Webseiten (<http://atmos.af.op.dlr.de/projects/scops/>) hervorgehoben werden. Sie erlaubten einen schnellen Zugriff auf Planungsdaten und den On-Board-Status der Messkonfiguration. Zusammen mit der inzwischen gewonnenen Erfahrung ließ sich dadurch die Ursache aufgetretener Anomalien bereits jeweils im Vorfeld eingehender Untersuchungen einkreisen.

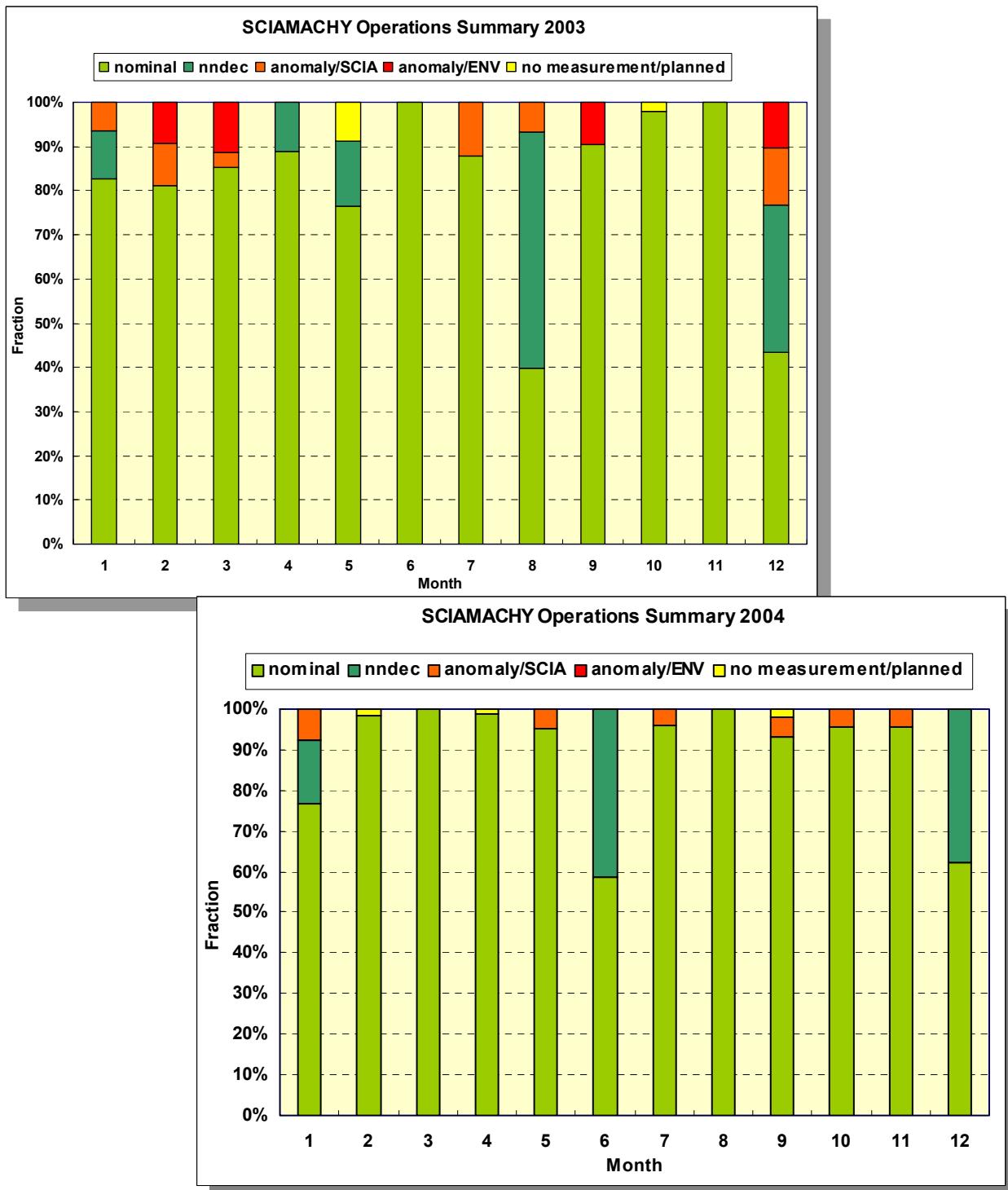


Abb. 11: Betriebsstatistik von SCIAMACHY im Jahr 2004 (unten) und zum Vergleich 2003 (oben)

Betriebsstatistik

Die Erfolgsquote des Instruments war im Jahr 2004 erfreulich hoch (siehe Abb. 11). Mehr als 95% der Orbits konnten für Messungen genutzt werden, wobei innerhalb eines Orbites wiederum mehr als 90% der Umlaufzeit mit Messungen abgedeckt war. Im Oktober 2004 hatte SCIAMACHY 50% seiner spezifizierten Lebensdauer erreicht. Wenn es uns zusammen mit den anderen am Projekt beteiligten Partnern gelingt, den Betrieb für die folgenden Jahre auf einem ähnlich hohen Niveau zu halten, ist weiterhin die Grundlage für die Gewinnung wissenschaftlich hochwertiger Messdaten gegeben.

3.6 Ein effizienter Inversionsalgorithmus zum Retrieval atmosphärischer Spurengasprofile

A. Doicu, S. Hilgers

Verschiedene Atmosphäreninstrumente messen Radianzen vom Erdhorizont (Limb), um vertikale Spurengasprofile zu gewinnen. Diese Messungen bestehen aus einer Sequenz horizontaler Limb-Scans, in dem jeder Scan einer bestimmten Tangentenhöhe entspricht, für die im Retrieval die gesuchten Parameter abgeleitet werden. Die Sensoren MIPAS und SCIAMACHY auf ENVISAT verfügen beide über den Limb-Messmodus. MIPAS registriert thermale Emission und stellt daraus Information über Temperatur, Wasserdampf, Ozon (O_3), Methan (CH_4), Salpetersäure (HNO_3), Lachgas (N_2O) und Stickstoffdioxid (NO_2) bereit. SCIAMACHY beobachtet die gestreute solare Einstrahlung und liefert im Limb-Modus Kenntnis über mindestens O_3 , NO_2 , CH_4 und BrO .

Inverse Probleme, wie sie in der Atmosphärenfernkundung auftreten, sind nicht-linear und *schlechtgestellt*. Oftmals handelt es sich um Mehrparameter-Probleme, d.h. mehrere Atmosphärenprofile werden gleichzeitig mit einem Satz von Zusatzdaten (*Auxiliary Parameter*) abgeleitet. Deshalb müssen die Atmosphärengrößen, also der Zustandsvektor, spezifische Nebenbedingungen erfüllen, um realistische Lösungen erhalten zu können. Die Vorteile dieses Ansatzes zeigen sich oftmals im praktischen Retrieval, da in der Realität der Wertebereich der Atmosphärenvariablen tatsächlich sowohl eingeschränkt ist als auch damit vermieden wird, im Laufe der Iteration physikalisch nicht-mögliche Zwischenlösungen zu erzeugen. Normalerweise wird diese Art von *Inversen Problemen* durch die Verwendung einer Mehrparameter-Regularisierungsmethode mit Beschränkung der Variablen gelöst.

Im Rahmen des SCIAMACHY-Projekts entwickelten wir im abgelaufenen Jahr einen effizienten Algorithmus für Limb-Retrieval. Er beinhaltet zwei Regularisierungsmethoden – die Thikonov-Regularisierung und ein iteratives regularisiertes Gauß-Newton-Verfahren. Das Datenmodell ist im Gegensatz zur *Optimal Estimation*-Methode oder dem *Bayesian*-Ansatz, welche immer ein stochastisches Datenmodell erfordern, semistochastisch.

Die Schritte des Retrievalalgorithmus umfassen

- Formulierung und Lösung des Minimierungsproblems mit Nebenbedingungen: Das Minimierungsproblem ist als Verfahren nach der Methode der kleinsten Quadrate formuliert, wobei zu dessen Lösung eine nichtlineare Anpassung mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate eingesetzt wird. Um die Schrittweite auswählen zu können, wurde eine Gauss-Newton-Methode mit einer vereinfachten Version eines Schrittweiten-Algorithmus sowie eine Methode, basierend auf einer Vertrauensregion unter Verwendung einer variablen Anzahl der Unbekannten, eingeführt. Im ersten Algorithmus bleiben die Variablen während des Iterationsprozesses frei, während im zweiten Algorithmus die Variablen durch Nebenbedingungen mit Grenzwerten eingeschränkt werden. Es ist zu beachten, dass der zweite Algorithmus weitaus anspruchsvoller aber auch deutlich effizienter als der erste Algorithmus ist.
- Auswahl der Regularisierungsparameter: Der Regularisierungsparameter stellt eine Balance her zwischen den einschränkenden Nebenbedingungen und der Residuumsumme. Somit bestimmt dieser Parameter die Stabilität der Lösung. Die Parameterauswahl-Methoden legen diesen Regularisierungsparameter fest, indem entweder der linearisierte Vorhersagefehler oder der linearisierte Gesamtfehler analysiert wird. Im ersten Fall wird die Analyse im gesamten Datenraum (Messungen) ausgeführt, während sie im zweiten Fall im Zustandsraum (gesuchte Profilgrößen) vorgenommen wird. Die folgenden Parameterauswahl-Methoden sind in unserem S/W-Code implementiert: die *L-Kurven*-Methode, die verallgemeinerte *Kreuzvalidierungs*-Methode, ein Verfahren zur Risikoschätzung ohne systematischen Fehler, eine Methode mit kleinster unterer

Schranke für den Fehler des Zustandsvektors sowie das *Fehlerrausch*-Kriterium. Diese Verfahren garantieren eine optimale Wahl des Regularisierungsparameters.

- Ableitung der globalen Regularisierungsmatrix für Mehrparameter-Probleme: Infolge des Mehrparameter-Charakters des Problems muss man für jede Komponente des Zustandsvektors spezifische Nebenbedingungen stellen. Für atmosphärische Zustandsprofile werden Regularisierungsmatrizen verwendet, die für die Glattheit der Lösung (im Sinne der diskreten Approximation der ersten oder zweiten Ableitung bzw. mit a priori Kovarianzmatrizen) sorgen, wohingegen für die Zusatzdaten Diagonalmatrizen geeignet sind, mit denen die Größenordnung der Lösung kontrolliert werden kann. Der globale Regularisierungsterm wird als Linearkombination der Regularisierungsterme der individuellen Komponenten des Zustandsvektors ausgedrückt. Der Beitrag einer individuellen Regularisierungsmatrix zur globalen Regularisierungsmatrix wird über Gewichtsfaktoren festgelegt, die im ersten Iterationsschritt mit Hilfe der Lösung eines Einparameter-Regularisierungsproblems in Kopplung mit der verallgemeinerten *Kreuzvalidierungs*-Methode oder der *L-Kurven*-Methode abgeleitet werden.
- Fehleranalyse: Die Fehleranalyse besteht aus der Berechnung der Glättungsfehler und des Rauschens an der gefundenen genäherten Lösung. Zusätzlich erlauben Diagnosewerkzeuge, wie die diskrete Picard-Bedingung und die Historie der Iterationen und Residuen, Aussagen über die Güte des Iterationsprozesses.

3.7 Studien zur Level 2-Prozessierung von MIPAS

G. Schwarz, S. Hilgers

Im Jahr 2004 wurden zwei Studien abgeschlossen, die das Ziel hatten, die erreichbare Güte von MIPAS Level 2-Produkten zu beurteilen. Diese Studien umfassten

- einen Endbericht an die ESA im Rahmen der CalVal-Unterstützung für MIPAS Level 2 (*Enhanced Simulations and Retrieval Analysis*)
- eine Beteiligung am *Announcement of Opportunity* AO-191 der ESA, das die Federführung für einen Validierungsvergleich von MIPAS/ENVISAT zu FTIR-Bodenvergleichsmessungen beim Institut für Meteorologie und Klimaforschung des Forschungszentrums Karlsruhe vorsah.

MIPAS Level 2-CalVal-Unterstützung

Die Studie für ESA im Rahmen unserer CalVal-Unterstützung bei ENVISAT beschreibt in mehreren Kapiteln numerisch und laufzeittechnisch günstige Ansätze zum Retrieval von Spurengas-Vertikalprofilen aus MIPAS-Spektralprofilen. Der fachliche Schwerpunkt lag dabei auf

- speziellen Problemstellungen beim Spurengas-Retrieval
- Verbesserungspotenzial herkömmlicher Verfahren
- Auswahl von Gittern und Diskretisierungen
- grundlegenden Skalierungstechniken
- ausgewählten nichtlinearen Skalierungstechniken
- Nutzung von Eigenwert-Transformationen
- Einsatz von Basisfunktionen
- Neuronalen Netzen
- Kombination von Verfahren
- vergleichenden Bewertungen.

Im Wesentlichen stellt der Bericht einen Vergleich verschiedener Alternativen dar, die sich aus oft nicht genutzten Effizienz- und Güteaspekten der Aufgabenstellung beim Retrieval von Spurengas-Vertikalprofilen ergeben. Dabei werden die Komponenten und Schnittstellen eines Retrievalsystems verglichen, wenn man ihre Ergebnisse in alternativen (Unter-)Räumen berechnet und übergibt. Unterräume, die zu einem verringerten Rechenaufwand führen, können beispielsweise durch eine geschickte Auswahl ausgedünnter Spektralpunkte gegeben sein. Räume, in denen effizient gerechnet wird, kann man durch (nichtlineare) Skalierung von Intensitäten definieren. Ein einfaches Beispiel dazu zeigt die nachfolgende Tabelle. Hier wird dargestellt, wie sich ein typischer Retrievalansatz mit Vorwärtsmodell, Ableitungen, iterierten Profilen und a priori-Annahmen ergibt, wenn man logarithmisch

skalierte Profile benutzt, wie sie – aufgrund der starken Dynamik der Intensitäten – oft für Wasserdampf zum Einsatz kommen. Bezuglich der Einzelheiten der Notation sei auf die in der Fachwelt übliche Nomenklatur verwiesen.

Das Ergebnis unserer Studie zeigt, dass die verfügbare Literatur zwar eine Vielzahl verschiedener Ideen beschreibt, ein systematischer Gesamtansatz, welcher auch numerische Gütekriterien in Betracht zieht, jedoch in der Regel vom Ersteller eines Retrievalpakets in eigener Verantwortung erbracht werden muss. Die beschriebenen Optionen reichen aus, um den Entwurf von Retrievalsoftware mit einer eleganten und insgesamt stimmigen Architektur durchzuführen.

Im Endbericht wurde auch auf Zukunftsaspekte hingewiesen, durch die man eine noch höhere Effizienz, vor allem durch eine geschickte Verzahnung von Vorwärtsmodellierung und Iterationsansatz beim Retrievalablauf, erreichen kann. Voraussetzung hierfür ist allerdings der Verzicht auf intuitiv physikalisch vorstellbare Größen und Parameter, damit der Aufbau des grundlegenden Konzepts nicht durch menschliche Veranschaulichung, sondern nur nach formal optimalen Kriterien erfolgt, beispielsweise wechselseitig verwendbare Linearkombinationen von Parametern.

Variable	Allgemeine Regel	Auswirkung logarithmierter Profile
Profil x	$x = \text{skaliertes}(x)$	$x = \ln(x)$
Jacobimatrix K	$K = K \times \frac{\partial x}{\partial t}$	$K = K \times \frac{I}{x}$
Inv. Kovarianz der Messung S_y^{-1}		(ohne Auswirkung)
Inv. a priori Kovarianz S_a^{-1}	Verwendung von $S_a(i, j) > 0$	$S_a^{-1} = \left[\ln(\sqrt{S_a(i, j)})^2 \right]^{-1}$
Messung y		(ohne Auswirkung)
Modellierte Messung $F(x)$		(ohne Auswirkung)
a priori Profil x_a	$x_a = \text{skaliertes}(x_a)$	$x_a = \ln(x_a)$

Tabelle 4: Durchzuführende Adaptionen beim Arbeiten mit logarithmierten Profilen

Validierungsstudie AO-191

Die Mitarbeit an der Validierungsstudie AO-191 bestand in der gezielten Beratung zur Datenqualität von MIPAS-Messungen. Im Laufe des Betriebs von MIPAS trat eine Reihe instrumenteller Effekte auf, deren Berücksichtigung beim Re-Prozessieren der Daten eine deutliche Verbesserung ergeben. Die wichtigsten dieser Störgrößen sind bzw. waren:

- Eine zeitlich variable Pointing-Ungenauigkeit im Nickwinkel. Dieser Effekt betrifft sowohl MIPAS als auch SCIAMACHY auf ENVISAT und konnte, insbesondere durch Untersuchungen des IMK in Karlsruhe, inzwischen eindeutig identifiziert und bei Bedarf korrigiert werden.
- Die kontinuierlich wachsende Ablagerung von Eis auf den Detektoren - ein Effekt, der wiederum sowohl MIPAS als auch SCIAMACHY betrifft. Hier hat sich gezeigt, dass bei MIPAS durch ausreichend häufige Kalibrationsmessungen und Verringerung der Eisablagerung durch zwischenzeitliche Abschaltung der Kühlung der Detektoren ein stabiles Retrieval von Spurengas-Vertikalprofilen möglich wird.
- Eine Spektralverschiebungskorrektur der MIPAS-Messungen, die eine hochgenaue Übereinstimmung zwischen modellierten und gemessenen Spektren herstellt. Diese Korrektur gleicht auch eventuelle Ungenauigkeiten nach der Doppler-Korrektur der Spektren aufgrund der Beobachtungen vom schnell bewegten Satelliten her aus und kann ohne weiteres Vorwissen aus den Daten selbst durchgeführt werden.

- Korrekturbedürftig sind vor allem in Methanprofilen auftretende *Zickzack*-Effekte, welche nach einer zwischenzeitlich stattgefundenen Verbesserung von nichtlinearen Sensorkennlinien zwar weitaus schwächer, aber immer noch wahrnehmbar sind.

Details der Validierungsstudie AO-191, vor allem zu den Beiträgen der verschiedenen Partner, finden sich in *Blumenstock et al. (2004)*.

zitierte Literatur:

Blumenstock et al.: Validation of MIPAS and SCIAMACHY Data by Ground-Based Spectroscopy at Kiruna, Sweden and Izana, Tenerife Island (AOID-191), 2004

3.8 MIPAS-Wasserdampfdaten für COBI/DEKLIM

G. Schwarz, A. Drescher

Das Deutsche Klimaforschungsprogramm DEKLIM (<http://www.deklim.de>), eines der zurzeit nach Abschluss des Programms AFO2000 vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Atmosphärenthemen, gliedert sich in die vier Bereiche Paläoklima, Regionale Prozessstudien im Ostseeraum, Klimawirkungsforschung sowie Klimavariabilität und Vorhersagbarkeit.

Der letztgenannte Bereich umfasst eine Reihe von Themen wie Simulation und Analyse der Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Komponenten des physikalischen Klimasystems, biogeochemische Zyklen und ihre Rückkopplung in die Atmosphäre, mesoskalige ozeanische Prozesse, die Genauigkeit regionaler Klimasimulationen sowie auch das Projekt COBI. COBI (Koordinator: Prof. R. Sausen vom DLR-Institut für Physik der Atmosphäre) untersucht durch Beiträge der verschiedenen Projektpartner, welche Ursachen dafür verantwortlich sind, dass in Modellen der Allgemeinen Atmosphärischen Zirkulation, d.h. in Computersimulationen wie beispielsweise ECHAM, in der Regel in der untersten Stratosphäre außerhalb der Tropen tendenziell zu kalte Temperaturen – ein *cold bias* – berechnet werden.

Neben einer Reihe potenzieller Ursachen befasst sich COBI auch mit der Rolle des Wasserdampfes. Dazu werden zuverlässige Wasserdampfdaten als Klimatologie benötigt. Das Instrument MIPAS auf dem europäischen Umweltsatelliten ENVISAT lieferte bereits eine Vielzahl von Wasserdampfdaten als Vertikalprofile von Volumenmischungsverhältnissen. Allerdings muss man aus dieser Vielzahl vorliegender und nicht immer ungestörter Profile erst eine verwertbare Datenbasis zusammenstellen. Dies geschah im Rahmen von COBI.

Dabei waren folgende Punkte zu beachten:

- Aufgrund der Streuung einzelner Profile müssen mehrere Profile gemittelt werden, um zu verwertbaren Aussagen zu kommen. In der Regel bildet man Monatsmittel. Bei einer Mittelung sind pro betrachtetes Zeitintervall einzelne Breitenzonen zu unterscheiden und jeweils getrennt zu behandeln. In unserem Fall wurden neben Breitenintervallen von 15° (mittig zum Äquator) auch 12° Längsbereiche $\pm 30^\circ$ mit mittigem Nullmeridian definiert, um bessere Aussagen über regionale Effekte machen zu können. Darüber hinaus wurden Tag- und Nacht-Messungen unterschieden.
- Da jedes abgeleitete Profil individuell verschiedene Fehlerbalken aufweist, darf man bei einer Mittelung nicht einen arithmetischen Mittelwert bestimmen, sondern muss – gewichtet mit der jeweiligen Ungenauigkeit des Retrievals – eine gewichteten Mittelwert ermitteln. Erschwert wird dies durch die unterschiedlichen Höhenraster der erhaltenen Profile. Die unterschiedlichen Höhenraster ergeben sich aus dem prinzipiellen Messverfahren, das mittels *Limb Sounding* die Abplattung der Erde nachvollzieht, was zu eigentlich charakteristischen Sequenzen von Messhöhen führt. Daher wurden die Messhöhen auf ein einheitliches Höhenraster interpoliert. Bei dieser Interpolation ist darauf zu achten, dass die jeweiligen höhenabhängigen Fehlerbalken korrekt umgerechnet werden.
- Eine Reihe von Messungen liegen zwar als abgeleitete Profile vor, liefern jedoch keine qualitativ hochwertigen bzw. unbrauchbaren Daten. Eine automatisierte Qualitätskontrolle muss unbrauchbare Datensätze aussortieren. Als Kriterium kann man die Güte des ermittelten Druckprofils sowie Plausibilitätschranken verwenden (Details dazu siehe weiter unten).

- Das Instrument MIPAS hat in den vergangenen Monaten eine sehr unterschiedliche Anzahl von Messungen pro Tag geliefert. Ursache hierfür sind zwischenzeitliche Kalibrierungen, Testläufe in speziellen Betriebsmoden zur Kontrolle des internen Verhaltens sowie generell technische Probleme beim Betrieb des Instruments, vor allem im Jahr 2004.
- Eine Problematik liegt in der Bereitstellung von wissenschaftlich zuverlässigen Daten über den verfügbaren Höhenbereich. Brauchbare Wasserdampfergebnisse decken dabei in der Regel den Bereich von ca. 10 km bis ca. 55 km ab, tiefer liegende Messungen sind oft durch Wolken beeinträchtigt, höher liegende Messungen durch spektroskopische und NLTE-Probleme. Aus Validierungsvergleichen weiß man, dass MIPAS bei Wasserdampf in den unteren Höhenbereichen tendenziell einen etwas zu geringen Gehalt misst, während in den oberen Höhen gegenüber früher geflogenen Instrumenten ein etwas höherer Gehalt ermittelt wird (natürlich ist nicht auszuschliessen, dass es sich hierbei auch tatsächlich um einen physikalischen Effekt handelt).
- Bei der Interpretation der Daten ist darauf zu achten, dass bei Wasserdampf kein reiner Jahresgang, sondern eine Überlagerung mit mehrjährigen Phänomenen verschiedener Phasenlage auftritt. Monatsmittelwerte sind daher auf das Messjahr zu beziehen und die verschiedenen Jahre zeigen daher leicht unterschiedliche Ergebnisse.

In der Qualitätskontrolle wirkt sich aus, dass die Datengüte von den jeweils verwendeten Kalibrierungsdaten beeinflusst wird. Durch unterschiedliche Qualität der Kalibrierungsdaten ergeben sich innerhalb eines Monats manchmal kleinere Güteschwankungen, die nur im monatlichen Vergleich sichtbar werden. Daneben gibt es generelle Effekte, wie beispielsweise Wolkeneffekte, welche sich von den unteren Messhöhen bis hin nach oben auswirken. Derartige Effekte werden in den neueren Versionen der abgeleiteten Daten zunehmend besser beherrscht, weshalb die erreichbare Datengüte auch von der Re-Prozessierungsversion der Daten abhängt.

Die nachfolgende Abbildung 12 zeigt ein typisches Ergebnis von im September 2003 gemessenen Wasserdampfdaten. Die durchgezogene Kurve entspricht den Verhältnissen in mittleren nördlichen Breiten, die gestrichelte Kurve entstand aus äquatornahen Messungen. Man sieht deutlich, wie sich die Profilformen unterscheiden.

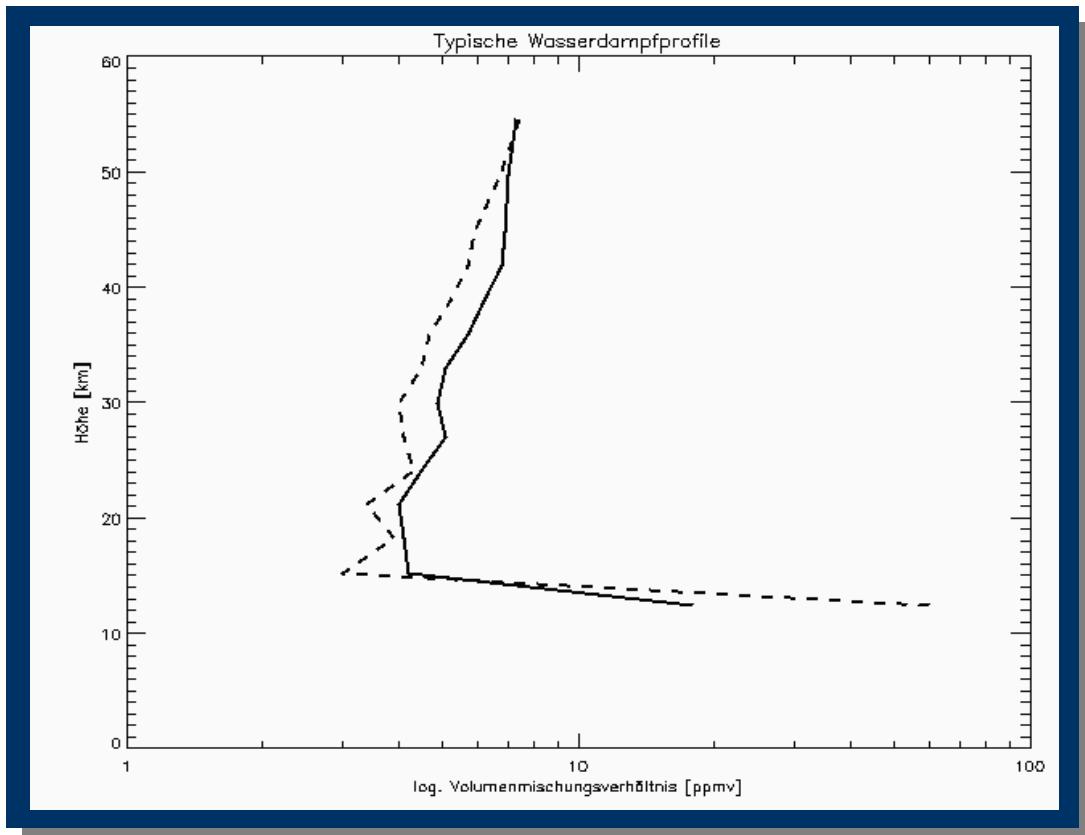


Abb. 12: MIPAS-Wasserdampfprofil in mittleren und äquatornahen (gestrichelt) Breiten

3.9 Die Atmospheric Dynamics Mission – ADM

D. Huber

Die Arbeiten zur zukünftigen Earth Explorer-Mission *Atmospheric Dynamics Mission (ADM-Aeolus)* umfassen zwei Teilaufgaben – ein DLR-internes Projekt und ein weiteres im ESA-Auftrag.

DLR-internes Teilprojekt

Die erste Phase des ADM-Projektes, Ausarbeitung eines Konzepts zur quasi-operationellen Datenprozessierung, wurde im Juni erfolgreich abgeschlossen. Die zweite Phase beginnt im Januar 2005. Sie wird in den folgenden vier Jahren am *Institut Physik der Atmosphäre (IPA)* den Einsatz eines Airborne-Demonstrators in einer Bodenkampagne und zwei Flugkampagnen vorsehen. Das Institut für Methodik der Fernerkundung wird sich an diesem Projekt mit dem Bau eines L1b-Referenzprozessorprototypen beteiligen. Dieser Prozessor wird zunächst auf der Grundlage der von Industrie zu liefernden Geräte-, Produkt- und Algorithmenspezifikation codiert. Anschließend soll dieser Prozessor mit den im Verlauf der Kampagnen gewonnenen Erkenntnissen in drei Schritten optimiert werden, um in der späteren Satellitendatenauswertung dem realen Geräteverhalten so nahe wie möglich zu kommen. Für diese Zukunftsaufgaben konnte ein Projektplan ausgearbeitet werden, der unsere weitere Mitarbeit an ADM-Aeolus spezifiziert.

ADM-Aeolus im ESA-Auftrag

Im September dieses Jahres konnte der Vertrag zur „Consolidation of ADM-Aeolus Ground Processing Algorithms“ mit der ESA unterzeichnet werden. Im Rahmen dieses Auftrages wurden bisher in vier Iterationen Produkt- und Algorithmenspezifikationen durchgeführt.

Die in Vorbereitung auf das Codereview und den Referenzprozessorbau durchgeföhrten Arbeiten im *Virtuellen Labor (VL)* und am Simulator sollen hier näher vorgestellt werden.

Nutzung des Virtuellen Labors

Das ESA-Projekt ist eine Kooperation von sechs Partnern aus drei Ländern. Gemeinsam sollen die beteiligten Parteien sowohl vorgeschlagene Algorithmen prüfen als auch Verbesserungsvorschläge in ablauffähigen S/W-Code umsetzen, der allen Parteien zur Verfügung steht. Von der Industrie gelieferte S/W-Codeteile sind einer Begutachtung zu unterziehen, werden erprobt und bei Bedarf verbessert. Um hierfür das Zusammenwirken aller Parteien zu erleichtern, wurde als Plattform das VL gewählt. Im VL (siehe Kapitel 3.13) bestehen deshalb für ADM-Aeolus zwei dedizierte Fachlabore – ein nur den Entwicklern zugängliches Labor, in dem die aktuelle Entwicklungsarbeit stattfindet und ein öffentliches Labor, in dem entwickelte und verifizierte Algorithmen auch im Vergleich zu industriellen Algorithmen von allen Parteien getestet und genutzt werden können. Letzteres bietet auch dem Auftraggeber ESA die Möglichkeit, den Fortschritt der Implementierungsarbeiten zu verfolgen. Weitere Informationen sind unter <http://vl.nz.dlr.de> zu finden.

Im Vorgriff auf die im Jahr 2005 anstehenden Implementierungsarbeiten konnten auf Grundlage des industriellen Algorithmendokumentes die beiden Algorithmen *Mie-Core* und *Rayleigh-Core* der Level 1a-1b-Datenauswertung bereits implementiert werden. Jeweils mit einer Testumgebung versehen, befinden sich beide Module bereits im Virtuellen Labor.

Stand des End-to-End-Simulators

Die Entwicklung eines Referenzprozessors ist eng gekoppelt an die Weiterentwicklung eines End-to-End-Simulators für das Gerät *Aladin*. Dieser Simulator, betreut vom Kooperationspartner *Physics Solutions* in Wörth, erzeugt synthetische Daten, mit denen anschließend der Referenzprozessor getestet werden kann. Er wurde bereits erfolgreich an die neuesten Gerätespezifikationen angepasst. Nachdem auch bereits Algorithmen zur Datenauswertung integriert sind, liegen die visualisierten Ergebnisse erster Testläufe vor. Sie sind in Abb. 13 dargestellt.

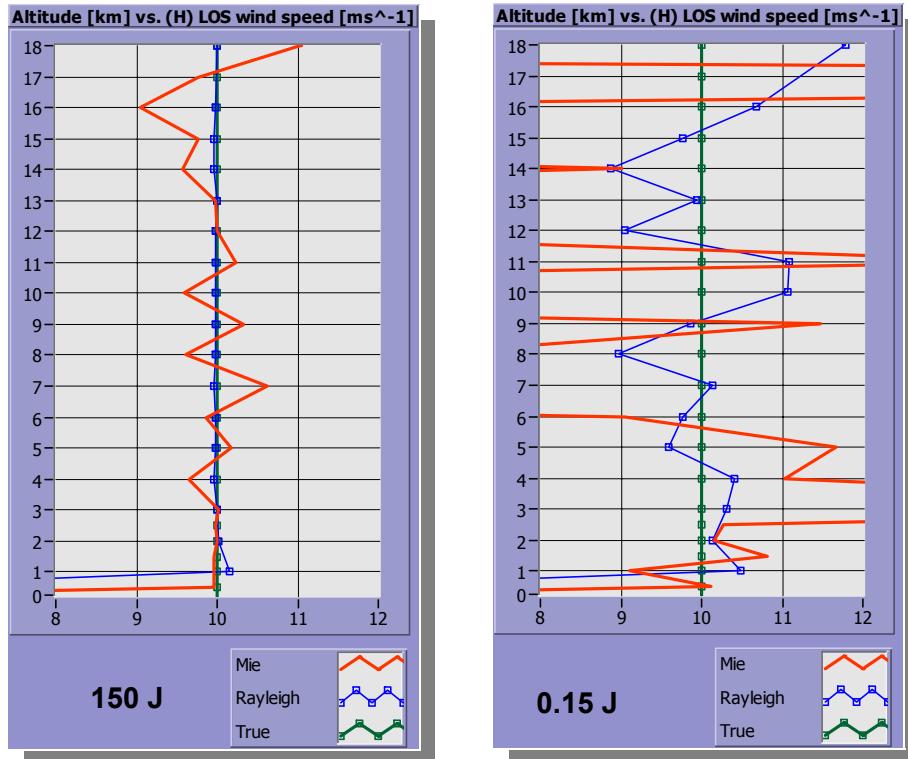


Abb. 13: Simulierte Line-of-Sight Windgeschwindigkeiten, gemessen von Aladin bei einer Laserleistung von 150 J (links) und 0.15 J (rechts). Erläuterung siehe Text.

Hierfür wurden Messdaten des Aladin-Gerätes in Dunkelheit bei einer Laserleistung von 150 Joule bzw. 0.15 Joule und einer angenommenen Windgeschwindigkeit von 10 ms^{-1} simuliert. Aus diesen Daten wurden Kalibrierungswerte für den Rayleigh- und den Mie-Kanal berechnet, und anschließend aus den Messdaten Windgeschwindigkeiten abgeleitet. Grundlage für die eingesetzten Algorithmen war auch hier die Algorithmenspezifikation der Industrie. Die Schwankungen der Ergebnisse in der rechten Graphik zeigen deutlich, dass die Algorithmen noch Verbesserungsfähig sind, da die angenommene Laserleistung von 0.15 Joule der tatsächlichen Leistung von Aladin entspricht.

3.10 Infrarot-Strahlungstransfer und Streuprozesse

J. Mendrok

Im Zuge der verstärkten Nutzung von Instrumenten zur Atmosphärenfernkundung, die im Limb-Modus messen (SCIAMACHY, MIPAS auf ENVISAT, OSIRIS auf ODIN, TES auf EOS-Aura, etc.), ist es erforderlich, den Strahlungstransfer unter Beachtung der Sphärizität von Erdkörper und Atmosphäre zu modellieren. Dabei stellt die Modellierung von Streuprozessen bzw. des Streuanteils der Strahlung in sphärischen Atmosphären eine besondere Herausforderung dar. Streustrahlung wirkt zunächst als Störgröße bei der Ableitung von Spurengasprofilen. Sie enthält andererseits Informationen über die streuenden Objekte – wesentliche Atmosphärenkomponenten wie Wolken und Aerosole.

Im Rahmen einer Dissertation wird ein (pseudo-)sphärisches Strahlungstransfermodell entwickelt, welches Emission thermaler Strahlung durch Erdkörper und Atmosphäre sowie Streuung von Strahlung thermalen wie solaren Ursprungs an Aerosolen oder Wolkenteilchen als Quellen vereint. Die Extinktion wird entsprechend als Summe spektral stark variierender Absorption durch verschiedene Gasmoleküle sowie breitbandiger Absorption und Streuung an Aerosolen bzw. Wolkenteilchen beschrieben. Das Modell greift auf die – in ihrer allgemeinen Form von der Geometrie des Erde-Atmosphäre-Systems (EAS) unabhängige – Integralform der Strahlungstransfergleichung zurück.

$$I = I_{Back} \cdot e^{-\tau_s} + \int_0^{\tau} J \cdot e^{-\tau_s'} \cdot d\tau_s'$$

Das heißt, die Quellen J werden entlang der Sichtlinie integriert und zum Beobachter transmittiert. Die optische Dicke τ der durchstrahlten Atmosphärenschichten wird dazu in Abhängigkeit der Weglänge s , anstatt wie üblich der Höhe z , formuliert und je Atmosphärenschicht parametrisiert. Der Quellterm J umfasst die von den Atmosphärenpartikeln entsprechend dem Planck-Gesetz emittierte Strahlung J_B , den solaren Einfachstreuterm J_{SS} , welcher durch einen Streuprozess in den Sichtweg gelenktes Sonnenlicht umfasst, sowie den Mehrfachstreuterm J_{MS} , der alle weitere Streustrahlung beschreibt.

$$J = J_B + J_{SS} + J_{MS}$$

Die Berechnung der Quellterme J_B und J_{SS} ist vollständig unter Beachtung der Sphärität des EAS umgesetzt. Der Mehrfachstreuterm

$$J_{MS} = \frac{\omega_0}{4\pi} \cdot \int I(\Omega') \cdot P(\Omega, \Omega') \cdot d\Omega'$$

ist vom einfallenden Strahlungsfeld $I(\Omega')$ abhängig. Dieses wird unter der Annahme von lokaler Planparallelität des EAS mithilfe planparalleler bzw. pseudosphärischer (die Transmission direkten Sonnenlichts durch eine sphärische Atmosphäre, alles weitere unter Annahme einer planparallelen Atmosphäre beschreibend) Strahlungstransfermodelle berechnet. Mit Einbeziehung der genannten Quellterme ist das Modell in der Lage, sowohl Strahlungstransfersimulationen im Überlappbereich von thermaler und solarer Strahlung ($\sim 2.5\text{-}4.0 \mu\text{m}$) als auch ausschließlich im Infrarot bei Anwesenheit streuer Objekte wie Wolken durchzuführen.

Das Modell stützt sich soweit wie möglich auf bereits vorhandene Grundbausteine. Zur spektral hochauflösten (*Line-by-Line*) Berechnung der Absorptionskoeffizienten der Atmosphärengase werden Module des S/W-Pakets MIRART (*Schreier und Böttger, 2003*) genutzt. Die optischen Eigenschaften von Aerosolen und Wolkenteilchen werden einer Sammlung vorberechneter Daten entnommen. Diese umfasst momentan mithilfe der Datenbank OPAC (*Hess et al., 1998*) erzeugte Standardmischungen von Aerosolen für verschiedene Atmosphärenschichten und -typen. Daneben steht ein beispielhafter Satz optischer Eigenschaften von polaren Stratosphärenwolken (PSC) zu Demonstrations- und Testzwecken zur Verfügung (bereitgestellt durch M. Höpfner, IMK-FZ). Schließlich wird das Strahlungsfeld für den Mehrfachstreuterm auf Basis des pseudosphärischen *Diskrete-Ordinate*-Modells PS_DISORT errechnet (*Dahlback und Stamnes, 1991*).

Im Berichtsjahr 2004 wurden insbesondere die zur Berechnung des Mehrfachstreu-Quellterms J_{MS} benötigten Routinen und Modelle eingearbeitet. Weiterhin wurde die zunächst stark auf OPAC und eine Standardschichtung der Atmosphäre (*boundary layer, free troposphere, stratosphere*) bezogene Eingabe der Aerosoldaten in das Modell allgemeiner gestaltet. Um anstehende Vergleiche mit anderen Strahlungstransfermodellen zu unterstützen, wurde außerdem die Datensammlung zu Wolken und Aerosolen um den bereits erwähnten Satz von PSC-Eigenschaften erweitert. Im Rahmen eines dreimonatigen Gastaufenthaltes bei Prof. K.-N. Liou am Department for Atmospheric and Oceanic Sciences der University of California Los Angeles besteht Zugang zu einer umfangreichen Datenbank gemessener und parametrisierter optischer Eigenschaften verschieden geformter Eisteilchen, wie sie in Zirruswolken und PSCs zu finden sind (*Yang et al., 2000*). Auf dieser Grundlage werden demnächst Datensätze typischer Zirruswolken generiert, um den Einfluss von Zirruswolken auf Infrarotspektren mithilfe des entwickelten Strahlungstransfermodells aufzuzeigen und solche Effekte tatsächlich in MIPAS-Spektren nachzuweisen.

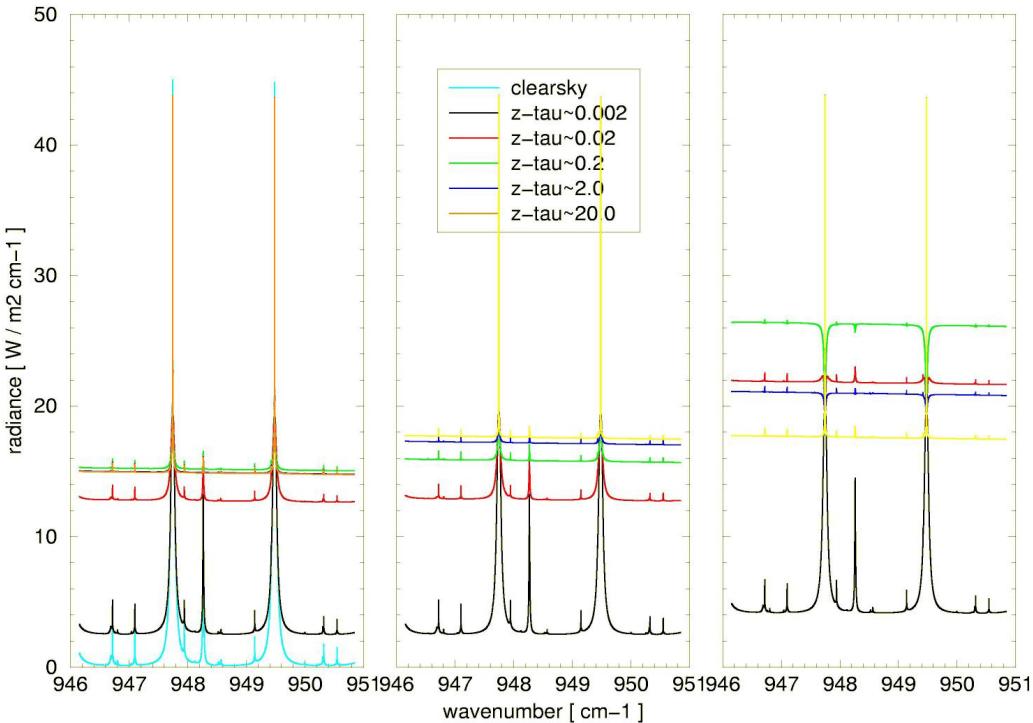


Abb. 14: Einfluss von Wolken (PSC) verschiedener optischer Dicken auf Strahlungssimulationen (Extinktion enthält jeweils Absorption und Streuung der PSC, Quellterme v.r.n.l.: Emission der PSC; Emission und Streuung in der Atmosphäre; Emission und Streuung bzw. Reflektion in der Atmosphäre und am Boden)

Zitierte Literatur

- Dahlback, A.; Stamnes, K.: A new spherical model for computing the radiation field available for photolysis and heating at twilight, *Planetary and Space Science*, 39-5:671-683, 1991
- Hess, M.; Koepke, P.; Schult, I.: Optical Properties of Aerosols and Clouds: The Software Package OPAC, *Bulletin of the American Meteorological Society*, 79-5:831-844, 1998
- Schreier, F.; Böttger, U.: MIRART, a line-by-line code for infrared atmospheric radiation computations incl. derivatives, *Atmospheric and Oceanic Optics*, 16-3:262-268, 2003
- Yang, P.; Liou, K.-N.; Wyser, K.; Mitchell, D.: Parameterization of the scattering and absorption properties of individual ice crystals, *Journal of Geophysical Research*, 105-D4:4699-4718, 2000

3.11 MultiGrid-Verfahren für Molekülabsorptions-Querschnitte F. Schreier

Eine genaue und effiziente Modellierung des Strahlungstransfers in der Atmosphäre ist wesentlich für die Level 1-2-Prozessierung gegenwärtiger und zukünftiger hochauflösender Infrarot-Sensoren wie AIRS, MIPAS, TES oder IASI. Hierbei stellt die *Line-by-Line*-Berechnung (LbL) der molekularen Absorptions-Querschnitte die größte rechentechnische Herausforderung dar. Für ein einzelnes Molekül wird der Absorptions-Querschnitt durch Summation der Beiträge aller relevanten Absorptionslinien gebildet, $k(v) = \sum_l f_l(v)$, wobei jede Linie durch die Profilfunktion f sowie ihre Position, Stärke und Breite bestimmt wird. In der Regel erfolgt dabei die Rechnung auf einem äquidistanten Wellenzahlgitter v_1, \dots, v_n , welches den interessierenden Spektralbereich abdeckt, wobei jedoch der Stützstellenabstand hinreichend fein gewählt werden muss, sodass auch schmale Linien gut abgetastet werden. Wegen der Druck- und Temperaturabhängigkeit der Linienbreite erfordert dies im Infraroten für ein Spektralintervall

der Breite 1 cm^{-1} bis zu mehrere Millionen Spektralpunkte, sodass eine direkte Berechnung der Summe extrem zeitaufwändig wäre.

Die im Infraroten benutzten Linienprofilfunktionen (Lorentz, Doppler, Voigt, o.ä.) variieren jedoch nur nahe den Linienzentren stark mit der Wellenzahl, sodass im Prinzip in den Linienflügeln ein größeres Stützstellengitter ausreicht. Es wäre daher naheliegend, für jeden einzelnen Summanden (Linie) nur den Beitrag des Linienzentrums auf dem feinen Gitter zu berechnen, die Linienflügel dagegen auf einem größeren Gitter mit anschließender Interpolation und Summation.

Eine effiziente Vorgehensweise ist hierbei, die Beiträge der Linienzentren auf dem feinen Gitter und die Beiträge der Flügel auf einem groben Gitter getrennt zu summieren und die Interpolation nur einmal durchzuführen. Wesentliche Voraussetzung dafür ist jedoch die Stetigkeit der zu interpolierenden Funktion, d.h. man benötigt eine Zerlegung der Linienprofilfunktion in einen langsam (und stetigen) und einen schnell mit der Wellenzahl variierenden Anteil

$$f(\nu) = f^{fast}(\nu) + f^{slow}(\nu)$$

Das Problem, die Summe effizient zu berechnen, wurde damit auf das Problem der Zerlegung der Summanden in geeignete langsam und schnell variierende Funktionen übergeführt. Um den somit optimierten Algorithmus vielseitig anwenden zu können, sollte diese Zerlegung möglichst allgemein vorgenommen werden. Der einfachste und gleichzeitig auch allgemein verwendbare Ansatz für $f^{slow}(\nu)$ ist es, die Funktion f selbst zu verwenden, welche *nur* auf einem groben Stützstellengitter (im gesamten interessierenden Spektralbereich) berechnet wird. Per Definition ist diese stetig, und die Summe aller langsam veränderlichen Beiträge kann somit problemlos interpoliert werden. Der schnell veränderliche Anteil wird dagegen nur für einige wenige Stützstellen in einem kleinen Bereich um das Linienzentrum herum berechnet. Um den Beitrag des Linienzentrums nicht doppelt zu summieren, muss der grobe Anteil allerdings in der Konstruktion kompensiert werden, also

$$f^{fast} \equiv f(\nu) - I[f^{slow}]$$

wobei der Operator I die Interpolation bezeichnet. Damit ergibt sich ein effizientes Zweigitter-Verfahren

$$k(\nu) = \sum_l f_{fast}^l(\nu) + I \left[\sum_l f_{slow}^l(\hat{\nu}) \right] (\nu)$$

Der mit dem Zweigitter-Verfahren erreichbare Zeitgewinn wird durch das Verhältnis der Zahl der Gitterpunkte auf dem groben und feinen Gitter bestimmt. Da allzu große Verhältnisse ungünstig sind, ist somit auch der Zeitgewinn des Zweigitter-Verfahrens nur moderat und die Verwendung weiterer, noch größeren Gitter ist naheliegend. Allerdings steigt damit auch die Komplexität des Programmablaufs. In verschiedenen Versuchsreihen hat sich ein Dreigitter-Verfahren mit 8 feinen Stützstellen je „grobes“ Intervall bewährt, sodass ein Gewinn um den Faktor $8*8=64$ erreichbar ist. Eine weitere Beschleunigung erzielt man, wenn man zusätzlich bei der Berechnung der Profilfunktion auf dem groben (dritten) Gitter noch asymptotische Näherungen berücksichtigt. Auf diese Weise lassen sich Beschleunigungen um mehrere Faktoren 100 erreichen (siehe Abb. 15).

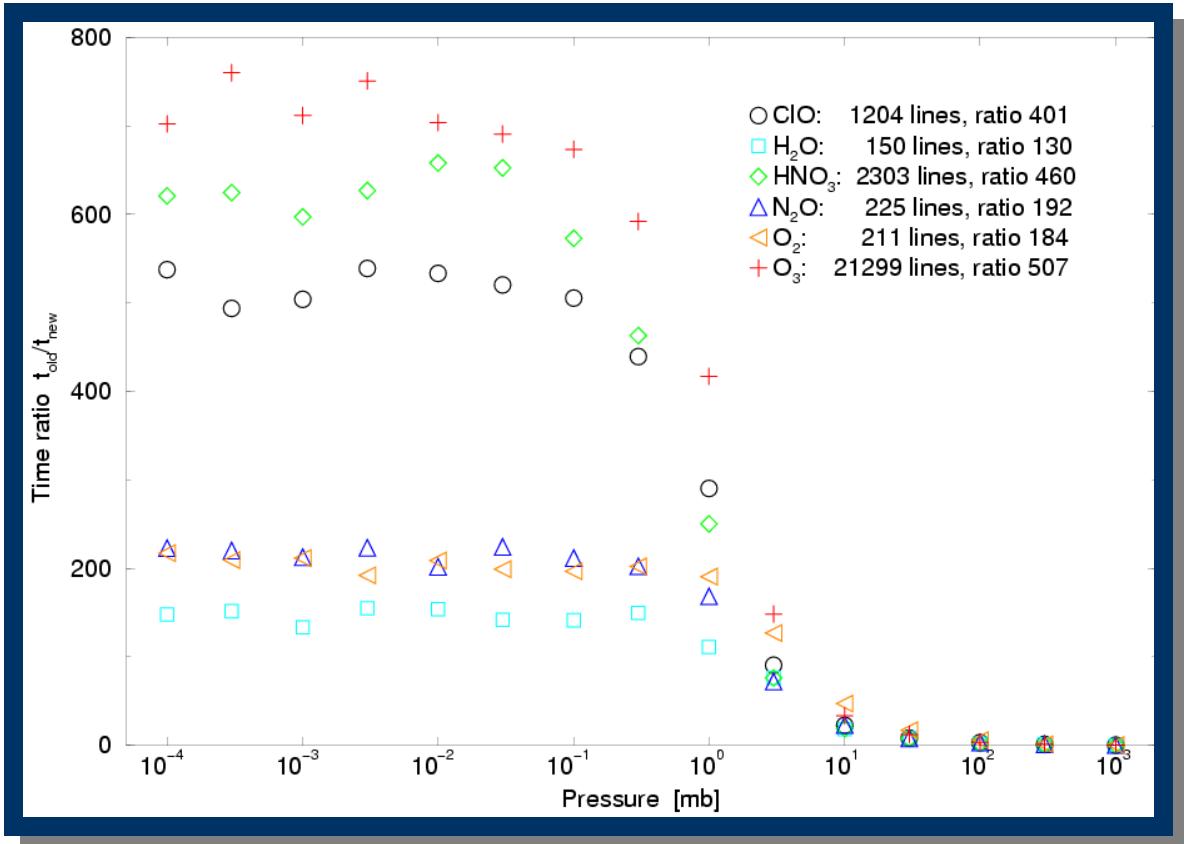


Abb. 15: Zeitgewinn bei Verwendung eines Dreigitter-Verfahrens mit asymptotischen Näherungen

3.12 ECOFIRE: Retrieval von CO_2 -Säulen über Vegetationsfeuern

M. Heß, F. Schreier

Durch anthropogene und natürliche Vegetationsfeuer werden weltweit erhebliche Mengen Kohlendioxid (CO_2) freigesetzt. Diesen Beitrag zum Treibhauseffekt versucht man bisher vor allem durch die Beobachtung der verbrannten Flächen zu bestimmen. Kennt man die Größe einer solchen Fläche und die Art des verbrannten Bewuchses, lassen sich daraus mit Hilfe weiterer Annahmen und Informationen, wie beispielsweise der Feuchtigkeit der Vegetation vor dem Brand, die Gesamtmenge des emittierten CO_2 und Kohlenmonoxids (CO) abschätzen. Der einzige erforderliche Parameter dieser Methode, der im globalen Maßstab vom Satelliten aus gemessen werden kann, ist die verbrannte Fläche, alle anderen beruhen weitgehend auf Annahmen. Eine direkte satellitengestützte Bestimmung der emittierten Menge an CO_2 wäre daher eine wertvolle Ergänzung der bisherigen Methoden. Ähnliche Überlegungen gelten für die Emissionen von anderen Spurengasen und Aerosolen durch Vegetationsfeuer und Vulkanausbrüche. In den vergangenen Jahren wurden am DLR einige Studien zur Vorbereitung eines satellitengestützten Systems zur Feuererkennung und zur Analyse der Feueremissionen (FOCUS) durchgeführt. Im Anschluss an diese Machbarkeitsstudien sollen nun im Projekt ECOFIRE, in Zusammenarbeit mit deutschen und internationalen Partnern, die Möglichkeiten existierender Satellitensysteme hinsichtlich der Analyse von Vegetationsfeuern und Vulkanausbrüchen untersucht, mit den wissenschaftlichen Anforderungen verglichen, und daraus Empfehlungen für eventuelle zukünftige Missionen abgeleitet werden.

Wir befassten uns in diesem Zusammenhang mit dem Algorithmus zur Datenfusion eines spektral hochauflösenden IR-Spektrometers und eines bildgebenden räumlich hochauflösenden IR-Gerätes. Dieser Algorithmus entstand im Rahmen der oben erwähnten Studien anhand simulierter Messungen und wurde erstmals auf reale Daten existierender Satelliteninstrumente angewendet. Eine Fallstudie bestimmte aus der Kombination von Messungen der Instrumente AIRS und MODIS, beide auf dem Satelliten AQUA untergebracht, Gesäulen von CO_2 über Waldbränden in Portugal im Sommer 2003.

Der Datenfusionsalgorithmus berücksichtigt, dass die Fläche eines Waldbrandes immer deutlich kleiner ist als das Gesichtsfeld (FOV) eines satellitengestützten IR Spektrometers. Im Fall von AIRS beträgt der Durchmesser des FOV 13 km. Für die Simulation eines solchen Messspektrums benötigt man Informationen über die Ausdehnung des Feuers und über die mittlere Feuertemperatur. Diese Informationen liefert das abbildende Spektrometer, für das in diesem Fall MODIS mit einer räumlichen Auflösung von 1 km benutzt wird.

Aus Beobachtungen des Feuerbeobachtungssatelliten BIRD sind Ort und Zeitpunkt eines Waldbrandes bekannt. Es handelt sich um ein Ereignis an der Südküste von Portugal am 14. August 2003. Das Feuer brannte mindestens eine Nacht und einen Tag. Für die Auswertung wurden Messungen während der Nacht ausgewählt, um damit mögliche Störungen durch gestreute Sonnenstrahlung auszuschließen. Abb. 16 vermittelt eine Übersicht über die verwendeten AIRS- und MODIS-Datensätze. Einige Spektren, die entlang der Südküste von Portugal gemessen wurden, sind in Abb. 18 dargestellt. Die rote Kurve entspricht dem ausgewählten Waldbrand, der in der geographischen Verteilung der Helligkeitstemperaturen, welche aus diesen Spektren berechnet wurden und in Abb. 17 zu sehen sind, deutlich erkennbar ist. Die Auswertung der MODIS-Daten (durchgeführt von DLR-OS Berlin) ergab, dass 7 MODIS Pixel innerhalb des AIRS-FOV Feuer enthalten, und dass insgesamt 2.6% der Fläche des FOV von Feuer bedeckt sind. Die mittlere Temperatur des Feuers ist 576 K. Diese Angaben bildeten die Grundlagen für das weitere Retrieval.

Beim Retrieval von Spurengassäulen werden Anfangswerte von Höhenprofilen der Gase skaliert, d.h. sie werden mit einem Höhenkonstanten Faktor so lange verschoben, bis der Abstand zwischen gemessenem und modelliertem Spektrum minimal ist. Aus dem resultierenden Höhenprofil am Ende dieses Prozesses wird dann der Gesamtsäulengehalt berechnet. In diesem Fall ergab sich – auch bei Verwendung unterschiedlicher Startprofile – jeweils eine CO₂ Säule von etwa 14 kg/m², was dem zweieinhalbfachen des Wertes über einem feuerfreien Nachbarpixel entspricht.

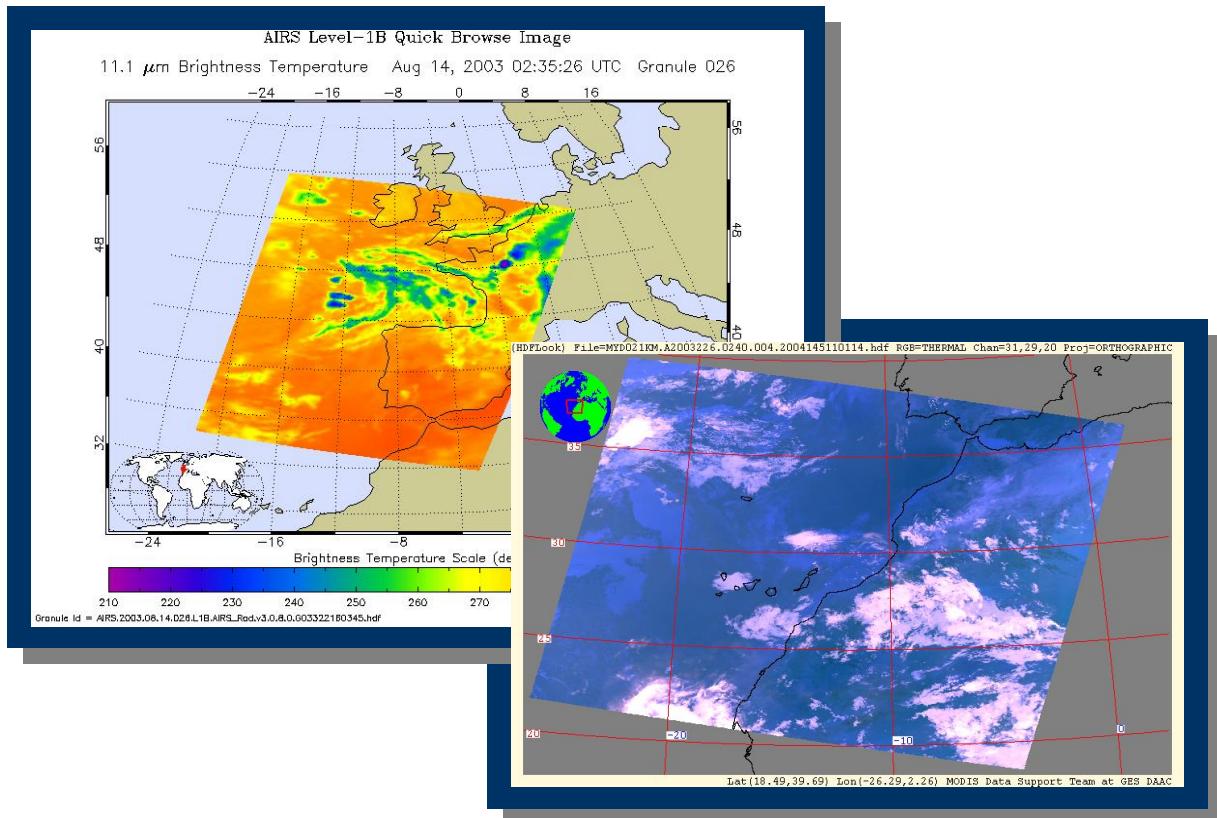


Abb. 16: Übersicht der verwendeten AIRS (links) und MODIS (rechts) Daten vom 14. August 2003

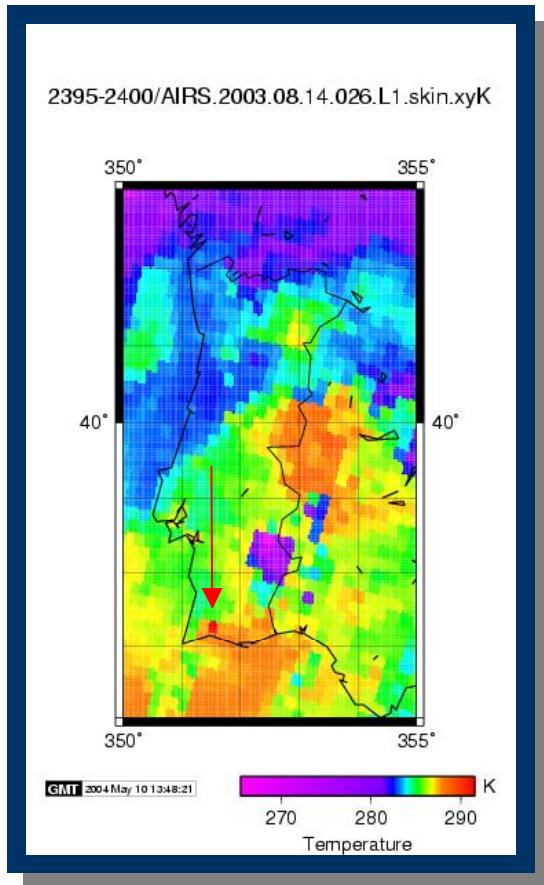


Abb. 17: Verteilung der Helligkeitstemperaturen, berechnet aus AIRS-Spektren bei 2400 cm^{-1} . Das Feuer (Pfeil) ist deutlich an der Südküste Portugals zu sehen. Diese Temperaturen entsprechen einem mittleren Signal über das FOV von 13 km Durchmesser. Daher ist die hier angegebene Temperatur des Feuerpixels viel geringer als die tatsächliche Temperatur eines Feuers.

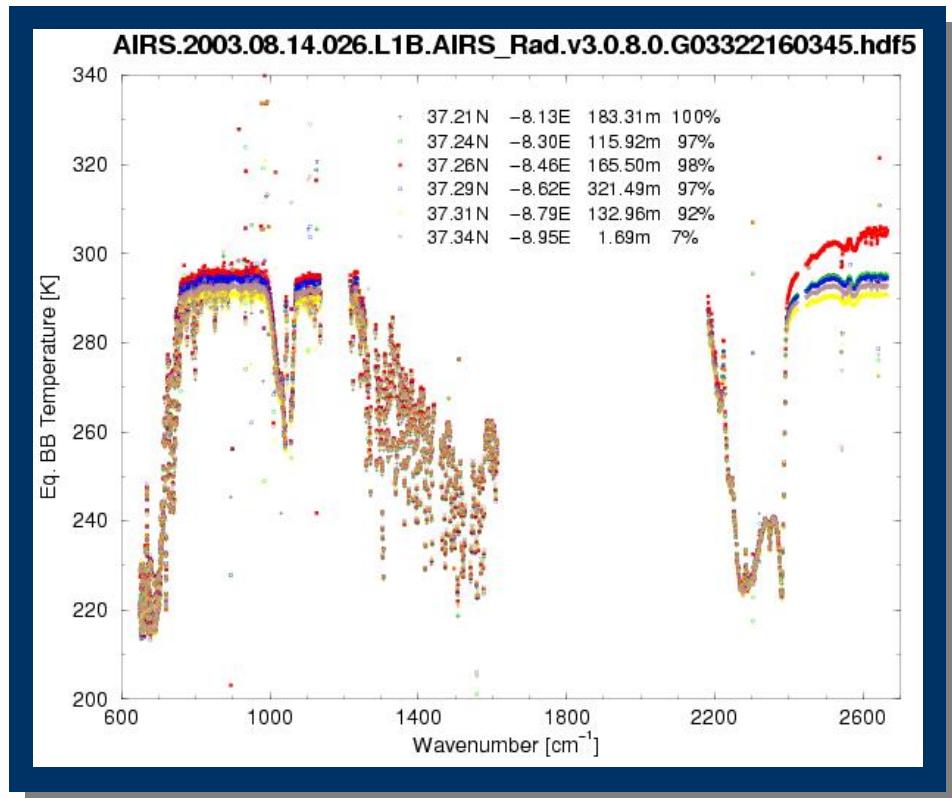


Abb. 18: Spektren von AIRS, entlang der Südküste von Portugal (Algarve) gemessen. Die rote Kurve gehört zu dem ausgewählten Feuerpixel.

3.13 Virtuelles Labor

J. Wauer, T. Rother, T. Ernst (FhG-FIRST)

Mit dem *Virtuellen Labor (VL)* wurde in den letzten Jahren eine Softwareplattform für die web-basierte Nutzung wissenschaftlicher Software entwickelt. Ziel des VL ist es, wissenschaftliche Software internen und externen Interessenten aus Forschung, Entwicklung, Ausbildung und Lehre auf einfache Art über das Internet für eine Onlinenutzung zur Verfügung zu stellen. Das VL wird durch den Bereich Innovationsmanagement und Technologiemarketing des DLR gefördert. Grundlage bildet eine generische Softwareplattform, welche standardisierte Schnittstellen zu Fachlaboren sowie zu den Nutzern besitzt.

Das Virtuelle Labor wurde von Mai 2002 bis November 2004 erfolgreich im Testbetrieb erprobt. Die dabei gewonnenen Erfahrungen führten zu einer aktualisierten Software (VL1.0), mit der gegenwärtig der operationelle Betrieb des virtuellen Labors vorbereitet wird. Eine wichtige Funktionalität der Software VL1.0 ist das gründlich überarbeitete Konzept von im VL betriebenen Fachlaboren. Fachlabore sind hierbei fachspezifische bzw. projektspezifische Ansammlungen wissenschaftlicher Software. Ein Nutzer des VL muss sich in einem ersten Schritt für ein konkretes Fachlabor entscheiden, in dem er sich anschließend anmelden und arbeiten kann. Die Berechtigung zur Nutzung eines Fachlabors erfolgt über ein Gruppenkonzept. Einzelnen Nutzern wird dabei Zugang nur zu denjenigen Fachlaboren gestattet, wenn sie der dafür registrierten Nutzergruppe angehören.

Perspektive

Gegenwärtig wird die Nutzung des Virtuellen Labors in zwei Projekten vorbereitet. Im Rahmen des DFG-Verbundprojektes SAMUM (Sahara Mineral Dust Experiment, siehe Kap. 3.14) werden Streurechnungen an nichtspärischen Teilchen zur Interpretation der Messergebnisse an Sahara-Staub vorgenommen. Weiterhin wird das VL zur Validierung der Anteile des Prototypprocessors benutzt, die im DLR im Rahmen der ADM-Aeolus-Mission entstehen (siehe Kapitel 3.9).

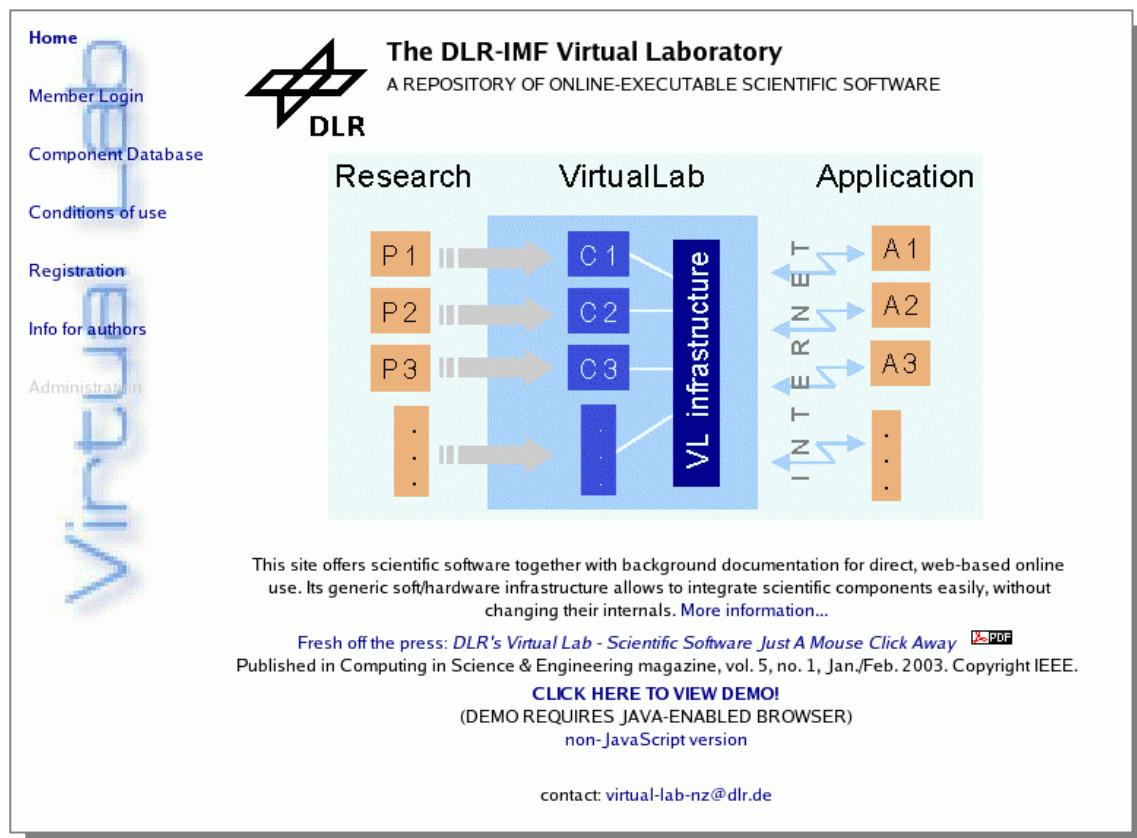


Abb.19: Aktuelle Startseite des *Virtuellen Labors* (<http://vl.nz.dlr.de>)

3.14 Saharan Mineral Dust Experiment

S. Otto, T. Trautmann

Eine der bedeutendsten Quellen für den natürlichen Eintrag von terrestrischer Materie in die Atmosphäre ist Mineralstaub. Dieser Eintrag und der Transport der Staubpartikel kann sich großräumig vollziehen (Abb. 20). Periodisch werden große Mengen mineralischen Ursprungs (hauptsächlich aus Gebieten der Sahara) global transportiert, beispielsweise aus Nordafrika bis nach Mittel- und Südamerika. Aber auch in Europa verfärbten diese Aerosolpartikel den Himmel orange, wenn großräumige Strömungsmuster deren Transport dorthin ermöglichen. Mineralstaub besitzt nicht nur Auswirkungen auf den Nährstoffhaushalt der Böden wie etwa im Amazonasgebiet, sondern beeinflusst ebenso über seine optischen Eigenschaften den Strahlungshaushalt der Erdatmosphäre.

Das *Saharan Mineral Dust Experiment (SAMUM)* setzt sich zum Ziel, diese optische Wirksamkeit von Mineralstaub zu untersuchen. Die beteiligten Institutionen

- Institut für Physik der Atmosphäre des DLR
- Institut für Methodik der Fernerkundung des DLR (beide Oberpfaffenhofen)
- Leibniz-Institut für Troposphärenforschung Leipzig e.V.
- Max-Planck-Institut für Biogeochemie Jena
- Institut für Meteorologie der Ludwig-Maximilians-Universität München
- Institut für Physik der Atmosphäre der Universität Mainz
- Institut für Mineralogie der Technischen Universität Darmstadt
- Institut für Umweltphysik und Fernerkundung der Universität Bremen

werden dazu in-situ Flugzeug- sowie Fernerkundungsmessungen durchführen (Forschungsflugzeuge Falcon des DLR und Partenavia der enviscope GmbH, Feldmesskampagne im Juni/Juli 2005), um die räumliche Ausdehnung und den Transport solcher Staubsschichten sowie deren physikalische (z.B. vertikale Anzahlkonzentration-Größenverteilungen) und chemische (z.B. Elementenanalyse der Partikel) Zusammensetzung zu untersuchen.

Im Hinblick auf seine noch ungeklärte Klimawirksamkeit von Mineralstaub (Abb. 21) simuliert daher das SAMUM-Teilprojekt 2 die optische Wirksamkeit von Mineralstaub. Unter Nutzung verschiedener Messdaten (z.B. Größenverteilungen, Partikelformen, Partikelzusammensetzung, optische Eigenschaften) sollen mit Hilfe einer breiten Auswahl an Modellen u.a. folgende Größen des Mineralstaub-Aerosols räumlich – zunächst vertikal – aufgelöst modelliert werden: Extinktion unter Annahme nichtsphärischer Partikel, spektrale Strahlungsflussdichten und aktinische Flüsse sowie spektrale Heizraten. Dazu benutzt man Strahlungstransportmodelle, die den Messungen angepasste Modellatmosphären betrachten und spektral hochauflösend ($\Delta\lambda \leq 1 \text{ nm}$) den gesamten relevanten Wellenlängenbereich von 200 nm bis maximal 100 μm abdecken. Zur Berechnung der Extinktionseigenschaften der Einzelpartikel (Extinktionskoeffizient, Einfachstreualbedo, Asymmetrieparameter und Phasenfunktion) wird insbesondere das Virtuelle Labor des DLR (siehe Kap. 3.13) genutzt, welches unter anderem die Verfahren

- Klassische Mie-Theorie für homogene Sphären,
- Mie-Algorithmen für intern und extern gemischte Aerosolpartikel,
- Oberflächen-Integralverfahren (T-Matrix-Methoden) für nichtsphärische Aerosolpartikel,

beinhaltet. Zur Lösung des atmosphärischen Strahlungstransports finden Modelle wie

- Zweistrom-Verfahren,
- Vierstrom-Verfahren,
- Diskrete-Ordinate-Methode (DISORT),
- Gauss-Seidel-Methode,
- erweiterte Gauss-Seidel-Methode zur Lösung des Stokes-Vektors,
- verschiedene weitere mehrdimensionale (3-D-Strahlungstransfer) Modelle zur räumlichen Auflösung der optischen Wirkung einer Mineralstaubsschicht

Anwendung.

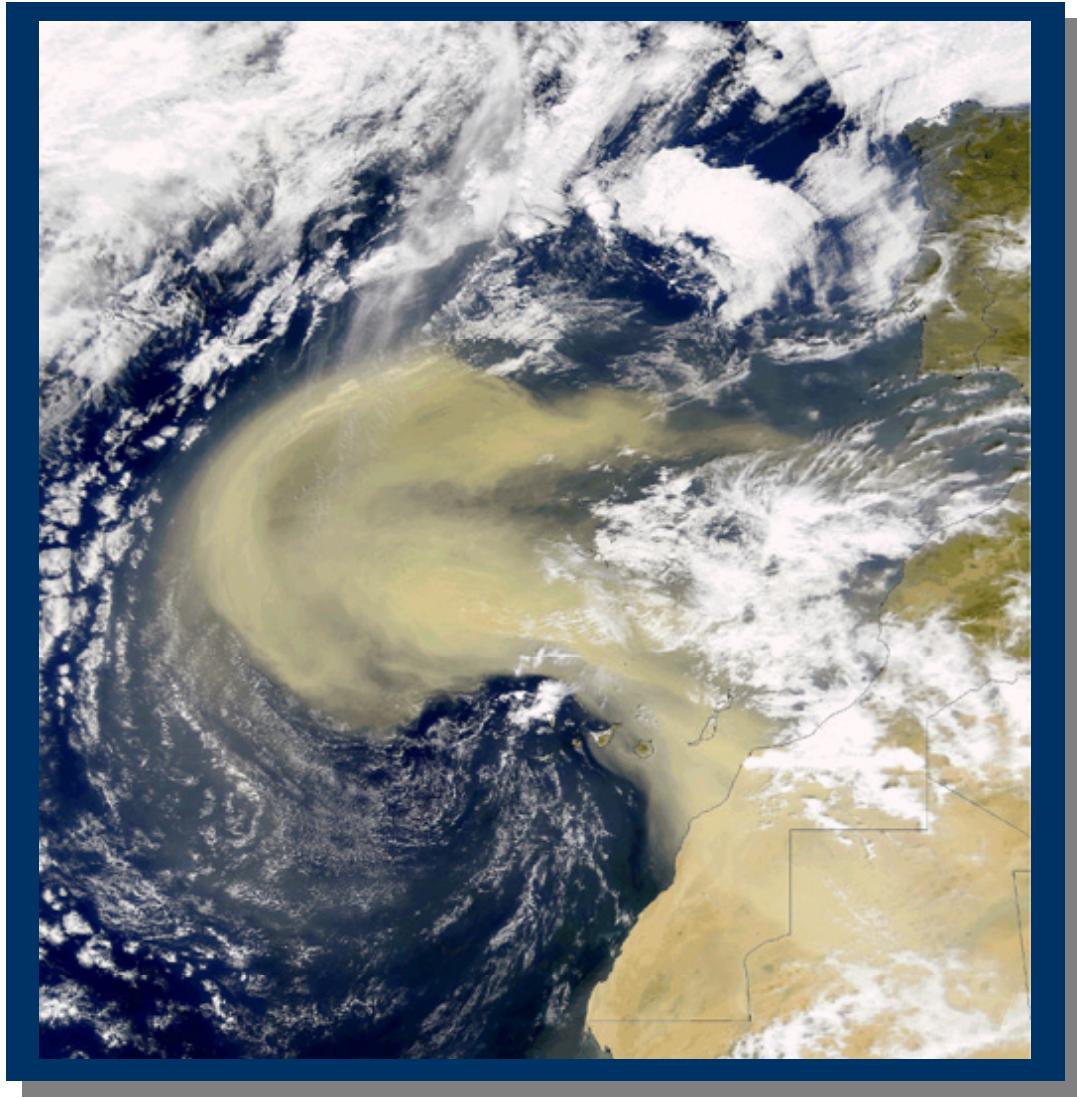


Abb. 20: Großräumiger Staubausbruch über Nordwestafrika (Bild: SAMUM-Homepage <http://www.tropos.de/samum>)

Bislang wurde ein Strahlungstransportpaket (Vierstrom-Verfahren nach *Liou et al.* 1988 und Gasabsorption nach *Fu und Liou, 1992*), welches unter Vorgabe von Aerosolgrößenverteilungen mittels klassischer Mie-Theorie (homogene Kugeln) bandengemittelte Heizraten berechnet, eingesetzt. Die Anwendung erfolgte mit von Prof. Dr. S. Borrmann und Dr. A. Thomas vom Institut für Physik der Atmosphäre der Universität Mainz zur Verfügung gestellten Daten des Projekts ACE-2 (1997). ACE-2 ermittelte Größenverteilungen innerhalb einer Staubschicht sowie in deren direkter Umgebung. Die daraus berechnete mittlere Netto-Heizrate betrug im oberen Teil der Staubschicht bis zu 5 K/Tag.

Ausserdem wurde ein Modellpaket eingerichtet, welches es ermöglicht, den eindimensionalen Strahlungstransport (Strahlungsflussdichten und aktinische Flüsse) mit Zwei-, Vierstrom- und Multistromverfahren (DISORT) vertikal aufgelöst zu simulieren. Die vertikale Auflösung der betrachteten Modellatmosphäre beträgt dabei in den unteren 12 km 100 m und darüber bis in 120 km Höhe 1 km. Ein klassischer Mie-Algorithmus für homogene Sphären berechnet die schichtoptischen Dicken unter Vorgabe des spektralen komplexen Brechungsexponenten und von Anzahlkonzentration-Größenverteilungen. Abgesehen von der Rayleighstreuung durch Luftmoleküle ist die Gasabsorption noch nicht beinhaltet. Hier sollen *Line-by-Line*-Methoden und die *k-Distributions*-Methode zum Einsatz kommen. Damit lassen sich spektrale Heizraten simulieren, die bandengemittelt im solaren und infraroten Spektralbereich Aufschluss über die mittlere Heiz- bzw. Kühlungswirkung des Staubaerosols auf die Erdatmosphäre gibt. Mit diesem Modellpaket konnte die zuvor erwähnte mittlere Netto-Heizrate allein durch das Staubaerosol bestätigt werden.

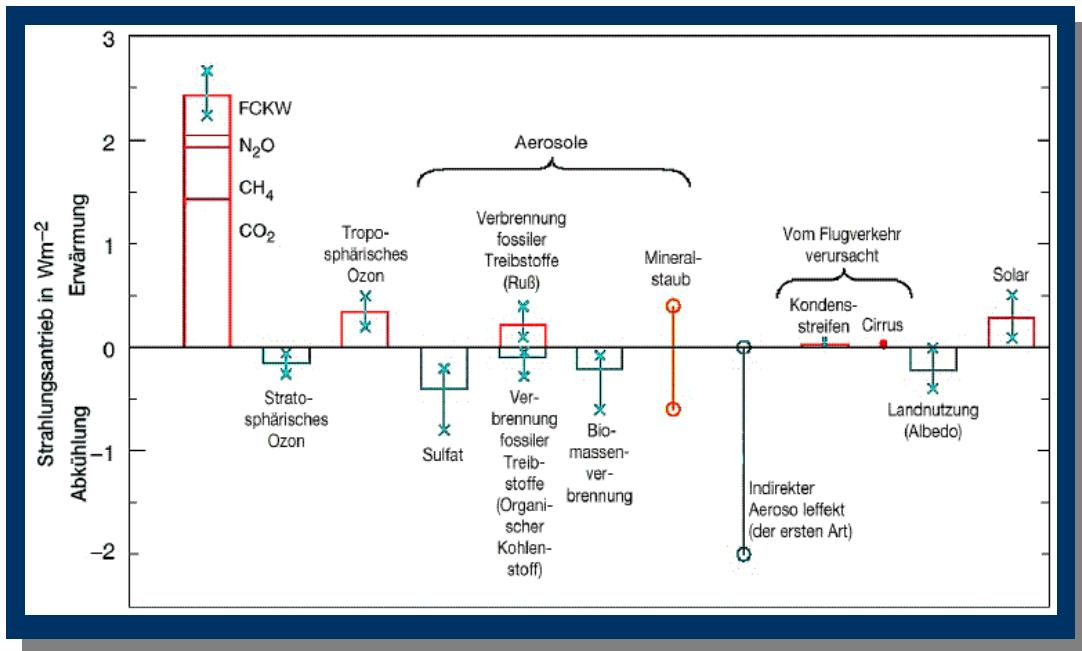


Abb. 21: Externe und interne Strahlungsantriebe des Klimasystems nach IPCC (2001). Balken bedeuten die Wirksamkeit beteiligter Komponenten, Linien geben Unsicherheiten der Schätzungen an.

zitierte Literatur:

- Fu, Q. und K.-N. Liou, K.-N.: On the correlated k-distribution method for radiative transfer in nonhomogeneous atmospheres, *J. Atmos. Sci.*, 49, 2139-2156, 1992
- IPCC 2001: Climate Change 2001 – The Scientific Basis, Cambridge University Press, ISBN 0521014956, 944 S., 2001
- Liou, K.-N., Q. Fu. und T.P. Ackermann: A simple formulation of the delta-four-stream approximation for radiative transfer parameterization, *J. Atmos. Sci.*, 45, 1940-1947, 1988

3.15 3D-Strahlungstransporteffekt in einem gemessenen Stratocumulus als Funktion des Sonnenzenitwinkels

S. Gimeno-García (Universität Leipzig), T. Trautmann

Der Unterschied zwischen der vollständigen dreidimensionalen Berechnung und der sogenannten *Independent Pixel Approximation (IPA)* des Strahlungsfeldes wird als 3D-Strahlungstransporteffekt bezeichnet (Cahalan et al., 1994). Dieser 3D-Effekt ist diejenige Komponente des Strahlungsfeldes, die durch herkömmliche eindimensionale Strahlungstransportmodelle nicht erfasst werden kann. Aufgrund des Rechenaufwands wird der Strahlungstransport in Wetter- und Klimavorhersagemodellen bestenfalls mit IPA berechnet. Daher ist die Untersuchung des 3D-Effekts von zentraler Bedeutung, um den Mangel dieser Annäherung abschätzen und die Beschreibung möglichst zu verfeinerten Parametrisierungen führen zu können.

Die vorliegende Arbeit untersucht den 3D-Effekt als Funktion des Sonnenzenitwinkels. Dazu wurden mehrere spektrale Strahlungstransportrechnungen für eine Wellenlänge von 550 nm auf der Grundlage einer gemessenen Stratocumuluswolke mit 100% Bedeckungsgrad durchgeführt. Die Variation der optischen Dicke dieser Wolke ist in Abb. 22 als durchgezogene schwarze Kurve dargestellt. In die Monte Carlo Simulation des solaren Strahlungstransports gingen insgesamt 10^7 Photonen je Realisierung ein (vgl. Gimeno und Trautmann, 2003). Zur Vereinfachung sind dabei keine atmosphärischen Effekte berücksichtigt. Der Sonnenazimutwinkel betrug 0° bei einem Sonnenzenitwinkel, der zwischen 0° bis 75° in jeweils 15° -Schritten variierte. Alle Simulationen wurden sowohl im 3D- als auch im IPA-Berechnungsmodus des Monte Carlo Modells gerechnet.

Wie zu erwarten, zeigen die Berechnungen die Abhängigkeit des 3D-Effekts vom Sonnenstand. Für kleine Sonnenzenitwinkel (hoher Sonnenstand) können Photonen, deren Bewegung in den 1D-Rechnungen des Strahlungstransports in einer vertikalen Säule eingeschränkt ist, in 3D-Rechnungen die bewölkten Gitterzellen an deren Seitenflächen verlassen. Durch diesen Effekt, welcher insbesondere an den seitlichen Rändern von Wolkenelementen deutlich auftritt, wird die Transmission der Wolke lokal erhöht. Gleichzeitig verringert sich die Reflektion. Bei großen Sonnenzenitwinkeln (niedriger Sonnenstand) besteht für die Photonen im 3D-Fall die Möglichkeit, seitlich in die bewölkten Gittervolumina einzutreten. Unter diesen Umständen führt eine kleine Änderung an der Flugrichtung zur Aufwärtsbewegung der Photonen, sodass im Vergleich zu 1D-Rechnungen die Reflektion erhöht und die Transmission vermindert wird. Derartige 3D-Effekte sind in Abb. 22 deutlich zu erkennen – vor allem ausgeprägt an denjenigen Stellen, an denen die Wolke verhältnismäßig optisch dünn ist.

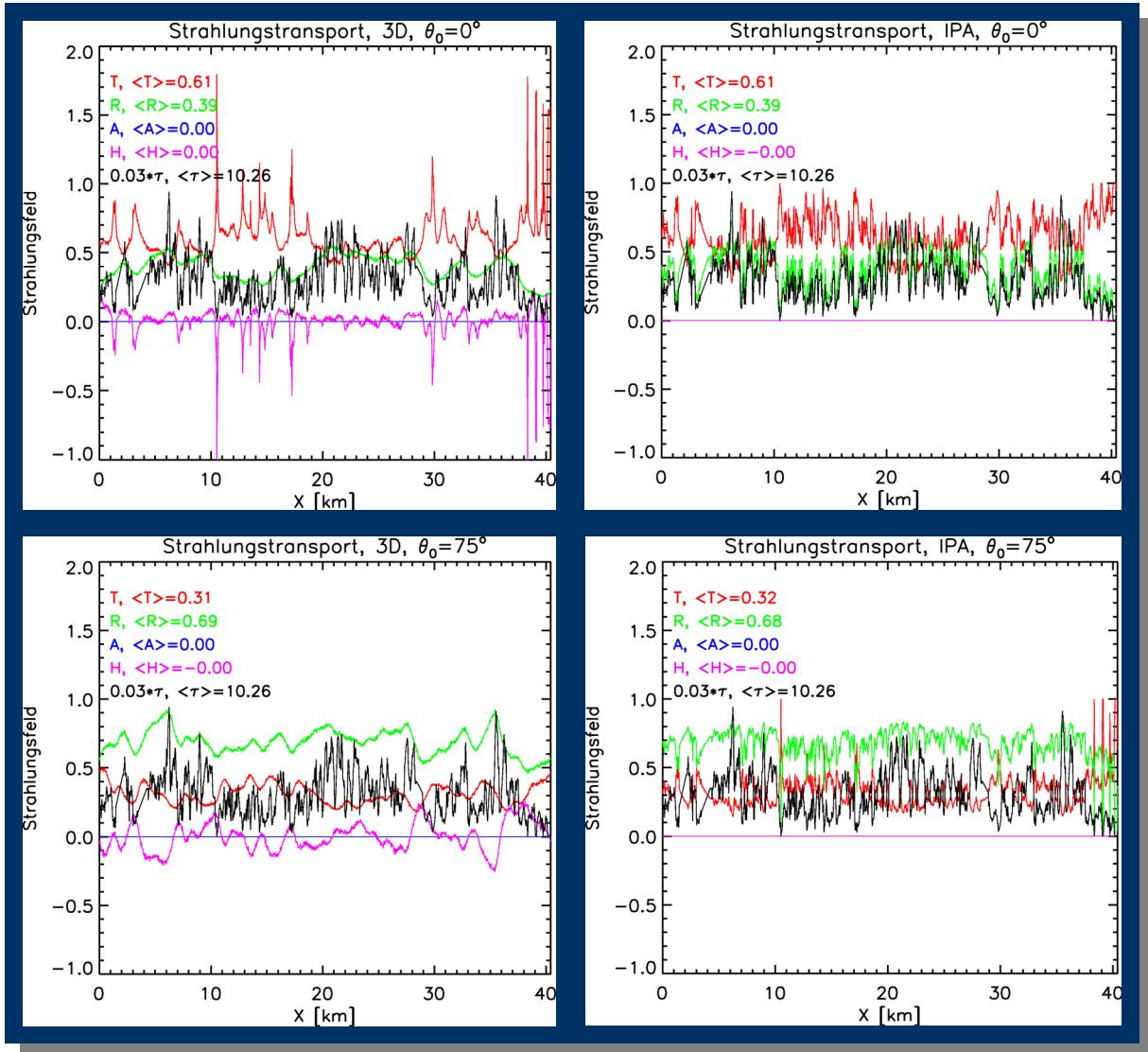


Abb. 22: Von links nach rechts, 3D- und IPA-gerechnete Transmission T, Reflektion R und horizontale Nettostrahlungsfluxdichte H für einen SZW von 0° (oben) und 75° (unten). Die optische Dicke (τ) ist als schwarze Kurve gezeichnet, damit man die Variabilität aller Strahlungsfelder mit der Variabilität von τ vergleichen kann.

Die Vernachlässigung des horizontalen Strahlungstransports in vollständig bedeckten Stratocumuluswolken (ohne Wolkenlücken) kann in den Strahlungsfeldern zu großen lokalen Abweichungen führen. Allerdings ist der Anteil des 3D-Effektes am gesamten Photonentransport in der hier betrachteten Wolke relativ klein, wenn man räumlich gemittelte Größen betrachtet. Folglich sind im gewählten Fall IPA-Rechnungen des Strahlungstransports ausreichend. Größere 3D-Effekte können

dagegen in durchbrochener stratiformer Bewölkung und insbesondere in Cumulus-Wolkenfeldern erwartet werden.

zitierte Literatur:

Cahalan, R. F., W. Ridgway, W.J. Wiscombe, S. Gollmer, Harshvardhan: Independent pixel and Monte Carlo estimates of stratocumulus albedo. J. Atmos. Sci., 51, 3776-3790, 1994

Gimeno-García., S., T. Trautmann: Radiative transfer modelling in inhomogeneous clouds by means of the Monte Carlo method. Wiss. Mitt. Inst. f. Meteorol. Univ. Leipzig, 30, 29-43, 2003

3.16 Strahlung und Vegetationsbrände im Rahmen von EFEU

K. Hungershöfer (Universität Leipzig), T. Trautmann

Während der Verbrennung von Biomasse werden sowohl photochemisch aktive Gase (NO, CO, CH₄) als auch Treibhausgase (CO₂, CH₄, N₂O) in signifikanten Mengen freigesetzt. Von den ebenfalls emittierten Aerosolpartikeln ist bekannt, dass sie den Strahlungshaushalt entweder direkt – durch Extinktion – oder indirekt – über die Wolkenbildung – beeinflussen. Quantitative Aussagen über diese Effekte sind aber nach wie vor mit großen Unsicherheiten behaftet. Aus diesem Grund beschäftigte sich das im Rahmen des Atmosphärenforschungsprogramms AFO 2000 vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderte Projekt EFEU mit dem Einfluss von Vegetationsfeuern auf die Zusammensetzung der Atmosphäre. Dazu wurden sowohl Laborexperimente als auch verschiedene Modellstudien durchgeführt. Bei dem am Leipziger Institut für Meteorologie (LIM) ansässigen EFEU-Teilprojekt stehen die Simulationen der optischen Eigenschaften des Biomassenaerosols und die Entwicklung eines effizienten Strahlungstransportcodes für Prozessstudien im Vordergrund.

Als Beispiel für den Vergleich zwischen den gemessenen optischen Eigenschaften und Modellsimulationen soll Abb. 23 dienen. Dargestellt ist ein Vergleich der Einfachstreualbedo (SSA = Single Scattering Albedo) bei einer Wellenlänge von 0.55 µm für ein Eichenfeuer.

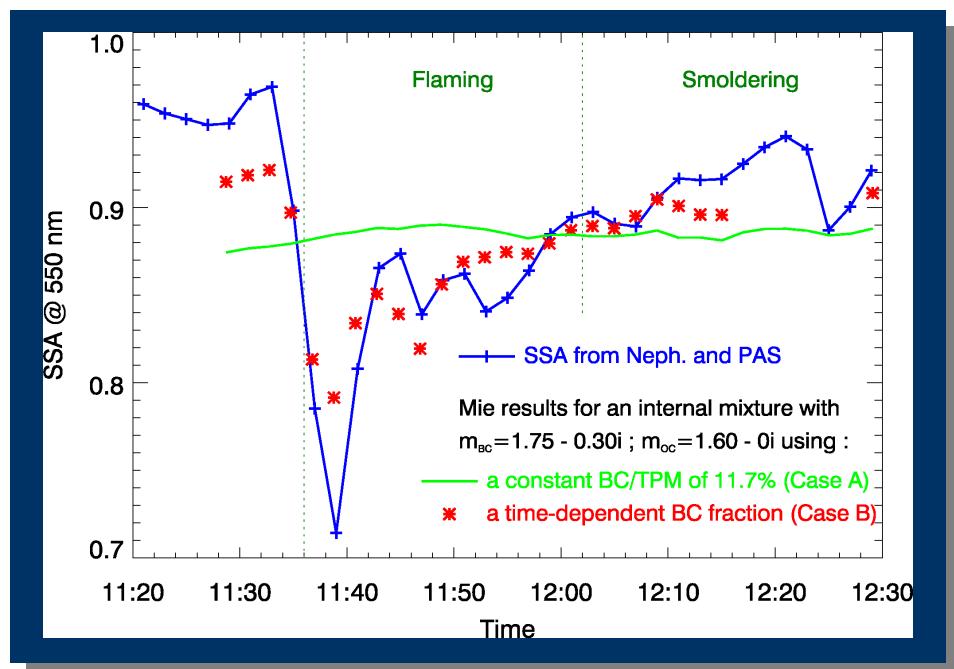


Abb.23: Vergleich zwischen gemessener und berechneter Einfachstreualbedo bei 0,55 µm für ein Eichenfeuer (Neph. = Nephelometer, PAS = photoakustisches Spektrometer, TPM = total particulate matter)

Die blaue Kurve zeigt den zeitlichen Verlauf der aus Streu- und Absorptionsmessungen abgeleiteten Einfachstreualbedo. Man erkennt, dass die Einfachstreualbedo während der Verbrennung mit offener Flamme (*flaming*) aufgrund der erhöhten Emission des stark absorbierenden schwarzen Kohlenstoffes

sehr niedrige Werte bis etwa 0.7 annimmt. In der anschließenden Schwellphase (*smoldering*) steigt die Einfachstreualbedo dagegen auf Werte über 0.9 an. Ebenfalls in Abb. 23 dargestellt sind die Ergebnisse aus zwei unterschiedlichen Modellrechnungen (grüne Kurve und rote Punkte). In beiden Simulationen wurden die gemessenen Gesamtkonzentrationen und die Anzahlgrößenverteilungen in der Form von Zwei-Minutenmitteln als Eingangsparameter benutzt und der komplexe Brechungsindex mit Hilfe einer Mischungsregel für ein Zweikomponentensystem aus organischem (OC) und schwarzem Kohlenstoff (BC) berechnet. Für den dazu notwendigen Massenanteil des schwarzen Kohlenstoffs lieferte die chemische Analyse für das betrachtete Eichenfeuer einen Wert von 11.7 %. Der Nachteil des chemischen Verfahrens besteht allerdings darin, dass dies ein Mittelwert für die Gesamtdauer des Experiments darstellt. Die Ergebnisse der Mie-Rechnungen unter der Annahme eines zeitlich konstanten BC-Anteils (grüne Linie) in Abb. 23 zeigen allerdings, dass die Messergebnisse in diesem Fall nur unzureichend durch die Simulationen wiedergegeben werden. Die zeitliche Variabilität der Größenverteilung reicht nicht aus, um die Variation der gemessenen Einfachstreualbedo zu simulieren. Entscheidend sind Änderungen in der chemischen Zusammensetzung der Partikel. Aus diesem Grund wurde ein funktionaler Zusammenhang zwischen dem BC-Anteil und der aus Gasphasenmessungen von CO und CO₂ abgeleiteten Verbrennungseffizienz bestimmt, der es ermöglicht aus den Gasphasenmessungen einen zeitabhängigen BC-Anteil abzuleiten. Wie in Abb. 23 zu sehen ist, ergibt sich in diesem Fall eine sehr viel bessere Übereinstimmung der Modellrechnungen (rote Punkte) mit den Messwerten. Mit Hilfe des gefundenen Zusammenhangs ist es somit möglich, einen zeitabhängigen BC-Anteil zu bestimmen. Der komplexe Brechungsindex ist damit bei unserem Modellsatz die einzige verbleibende Unbekannte und kann durch Anpassen der Modellergebnisse an die gemessenen optischen Eigenschaften bestimmt werden.

3.17 Linearisierung des solaren Strahlungstransportes und Anwendung auf Wolkenfelder

M. Jerg (Universität Leipzig), T. Trautmann

Methode und Weiterentwicklungen

Bei der verwendeten Methode handelt es sich um die *Strahlungsstörungstheorie*. Bei dieser wird die Strahlungstransportgleichung in der Umgebung eines zu wählenden Grundzustandes bzgl. der optischen Eigenschaften und eines zu wählenden Strahlungseffektes linearisiert. Dieser Schritt wurde bereits im Laufe des Jahres 2003 für die Nettostrahlungsflussdichte als Effekt erreicht. Im Berichtszeitraum 2004 kamen folgende Erweiterungen hinzu:

- Als Effekte können nun zusätzlich die auf- und abwärts gerichtete Flussdichte sowie die aktinische Flussdichte betrachtet werden.
- Beliebige höhenabhängige Störungen können betrachtet werden, Ergebnisse werden an jeder Modellschicht geliefert.
- Neben der Störung der optischen Dicke kann auch die Phasenfunktion gestört werden.
- Es können beliebig viele Grundzustände bzgl. der totalen optischen Dicke benutzt werden. Zur Verbesserung der Genauigkeit der Approximation kann zwischen den Ergebnissen mittels der *Hermite-Interpolation* interpoliert werden.
- Der Einfluss der Bodenalbedo lässt sich mittels eines Superpositionsansatzes als diffuse Reflektion am Unterrand behandeln.
- Alle Entwicklungen stehen nicht nur als „Stand-Alone“-Modell zur Verfügung, sondern können in einem dreidimensionalen Modellgebiet im *Independent-Pixel-Modus* auf realistische Wolken angewandt werden. In einem bisher sehr einfachen Postprocessing der optischen Eigenschaften wird hierzu gegenwärtig die Lage der Grundzustände halbautomatisch bestimmt.
- Es wurden insgesamt drei sehr unterschiedliche Wolkenfelder bearbeitet (Stratocumulus, Cumulus und Stratus).

Ergebnisse – 1) Störung der optischen Dicke einer einzelnen Säule:

Hier wird ein konservatives Medium so gestört, dass ausgehend von einem höhenkonstanten Extinktionskoeffizienten von $\sigma_t = 0.005\text{m}^{-1}$ nach zehn Störungsschritten der Extinktionskoeffizient im Höhenintervall bis 500m und über 1500m um 50% erhöht und im dazwischenliegenden Höhenbereich um 100% erhöht wurde, siehe Abb. 24 (links). Es wurde eine konstante *Henyey-Greenstein* Phasenfunktion

mit Asymmetrieparameter $g = 0.75$ verwandt. Die Bodenalbedo beträgt 0.3, der Kosinus des Sonnenzenitwinkels 0.7.

In Abb. 24 (rechts) ist die Nettostrahlungsflussdichte in 600 m in Abhängigkeit des Störungsschrittes gezeigt. Die exakt berechneten Werte sind als Kreuze dargestellt, die Ergebnisse der linearen Störungstheorie in Bezug auf drei verschiedene Grundzustände (bei den Störungsschritten 0, 5 und 10) erkennt man als die farbige Linien. Es ist offensichtlich, dass die Behandlung allein durch die Linearisierung unzureichend ist. Wird nun jedoch abschnittsweise die *Hermite-Interpolation* angewendet – diese verwendet neben den Funktionswerten an den Stützstellen auch die Funktionalableitungen des gesuchten Strahlungseffektes bzgl. der betrachteten Störgröße – so wird das Ergebnis, dargestellt durch die Karos, wesentlich verbessert. Überlagerungen von Störungen des Streu- und Absorptionskoeffizienten sowie der Entwicklungskoeffizienten der Phasenfunktion sind möglich.

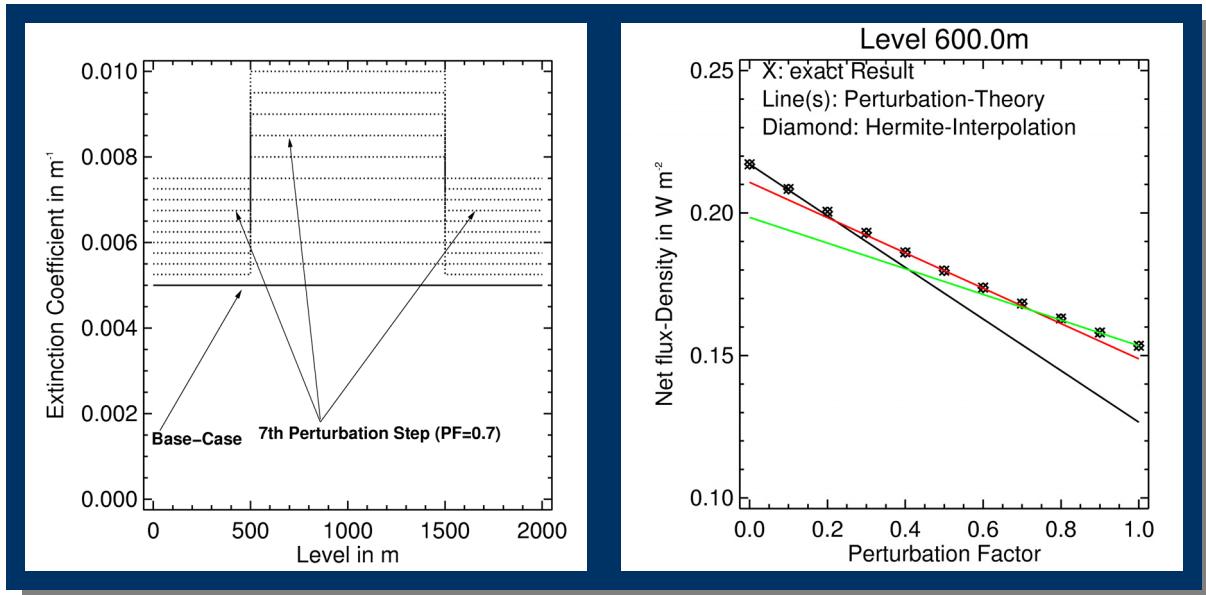


Abb. 24: Variation des Extinktionskoeffizienten mit der Höhe (links) und Ergebnis der Störungsrechnung und Interpolation (rechts).

Ergebnisse – 2) Betrachtung einer Wolkenszene (*Stratocumulus*)

Da die Störungstheorie bzw. die anschließende Interpolation es erlauben, mit einer relativ geringen Anzahl von Stützstellen, d.h. sehr wenigen Strahlungstransportrechnungen, ein vergleichsweise großes Intervall der optischen Dicke zu überdecken, wurde die Methode auch auf realistische Wolken angewendet. In Abb. 25 (links) ist das Feld der totalen optischen Dicke einer Wolke gezeigt (hinsichtlich der Erzeugung der optischen Eigenschaften siehe auch Beiträge in Kap. 3.16 und 3.18).

Es wurden 8 Grundzustände entsprechend der Verteilung der optischen Dicke im Modellgebiet mit insgesamt 112×193 Pixel gewählt, auf welche zwei verschiedene Phasenfunktionen verteilt wurden. In Abb. 25 (rechts) ist das Histogramm der absoluten Fehler von Transmission und Reflektion bezüglich der exakten *Independent-Pixel*-Rechnung mit DISORT gezeigt. Dazu sind vier Ströme, d.h. diskrete Polarwinkel, benutzt. Wie man erkennt, liegen die meisten Werte ganz in der Nähe von Null. Eine geringe Anzahl von Pixel weist Abweichungen bis zu ca. 6% auf. Werden die Mittelwerte von Transmission und Reflektion bzgl. des gesamten Modellgebietes gebildet, so erhält man hier als absolute Fehler $\Delta T \approx 2 \cdot 10^{-3}$ und $\Delta R \approx -0.5 \cdot 10^{-3}$. Die von dieser Methode erhoffte Rechenzeitsparnis konnte leider nicht im gewünschten Ausmaß erreicht werden. Hierfür gibt es zwei Gründe:

- Um den gesuchten Effekt an jeder Schichtgrenze des Modells zu erhalten, ist es nötig, ebenso viele adjungierte Strahlungstransportprobleme wie es Schichtgrenzen gibt, zu lösen. Dies führt selbst bei effizienter Ausnutzung bereits erhaltener Teilergebnisse der Vorwärtslösung zu einer starken Erhöhung der Rechenzeit.
- Sollen alle möglichen Störungen der optischen Eigenschaften behandelt werden, muss in jeder Modellzelle der Anteil der Störung der Phasenfunktion berücksichtigt werden. Dadurch erhöht sich die Rechenzeit im Vergleich zur reinen Vorwärtsschrechnung für jede der 112×193 vertikalen Säulen in inakzeptabler Weise.

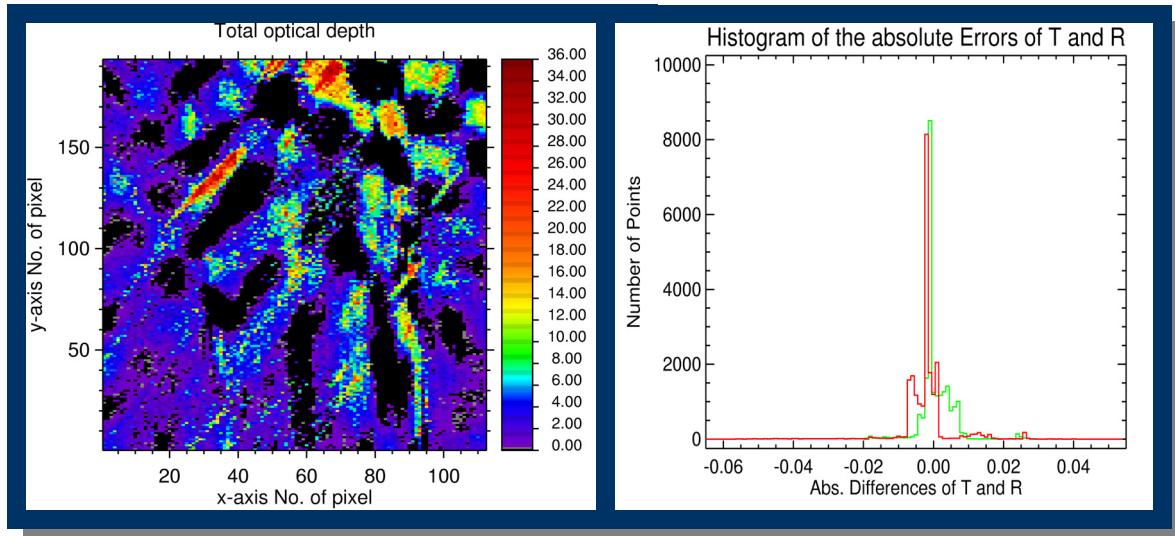


Abb. 25: Feld der totalen optischen Dicke (links) und Histogramm der absoluten Fehler der Transmission T und Reflektion R (rechts).

Um die Methode erfolgreich in Bezug auf eine Rechenzeitsparnis anwenden zu können, ist es daher erforderlich, sich auf ausgewählte Modellflächen zu beschränken. Beispielsweise lassen sich so die obigen Transmissionen jeder Säule bestimmen. Inwieweit der Störungsansatz mit dieser Einschränkung zur Parametrisierung von solarem Strahlungstransport geeignet ist, wird Gegenstand weiterer Untersuchungen sein.

3.18 Aktinische Strahlungsflussdichte in einem dreidimensionalen inhomogenen Wolkenfeld A. Kniffka (Universität Leipzig), T. Trautmann

Im Rahmen des DFG-Projekts „Der Einfluss von Aerosol-, Wolken-, und Bodenalbedoinhomogenitäten auf das aktinische Strahlungsfeld in der Atmosphäre“ wird das aktinische Strahlungsfeld untersucht, welches sich bei Anwesenheit von dreidimensional inhomogener Bewölkung ergibt. Für die erforderlichen Analysen kommt das Strahlungstransportmodell SHDOM (Evans, 1998) zum Einsatz unter Verwendung möglichst realistischer, dreidimensionaler atmosphärischer Szenarien beziehungsweise Modellatmosphären. Eine Modellatmosphäre beinhaltet Informationen über Aerosole, Wolkentropfen, Ozon und eine Hintergrundatmosphäre (z.B. Druckprofil). SHDOM wurde auf Daten der ersten Messkampagne des EU-Projektes INSPECTRO (siehe Kylling *et al.*, 2004) angewandt. Diese Kampagne bestimmte unter anderem sowohl aktinische Strahlung als auch Aerosolgrößenverteilungen und mikrophysikalische Parameter wie Flüssigwassergehalt und Tropfengrößenverteilungen einer Wolke anhand flugzeuggetragener Messungen. Vor der eigentlichen Strahlungstransportsimulation werden die optischen Eigenschaften der Atmosphäre des untersuchten Messtages mittels eines hierfür entwickelten Programmpaketes aus vorhandenen Messdaten und ergänzenden Literaturdaten berechnet (siehe Kniffka und Trautmann, 2003). Die Informationen zur Beschaffenheit des Wolkenfeldes stammen aus dem Modell CLABAUTAIR (siehe Scheirer und Schmidt, 2004).

Im Folgenden wird hier eine Simulation zu den Daten des 28. September 2002 erläutert. Die Modellatmosphäre beinhaltet vertikal inhomogenes Aerosol mit einer gesamten optischen Dicke von 0.019 bei 550 nm sowie dreidimensional inhomogene Informationen über das Wolkenfeld, welches lokal optische Dicken von bis zu 33.75 bei 550 nm besaß. Der Säulenwert von Ozon betrug nach Messungen von GOME auf ERS-2 an diesem Tag 260 DU. Das Simulationsfeld umfasste $10 \times 20 \times 60 \text{ km}^3$ mit $50 \times 100 \times 60$ Gitterpunkten in x-, y- und z-Richtung.

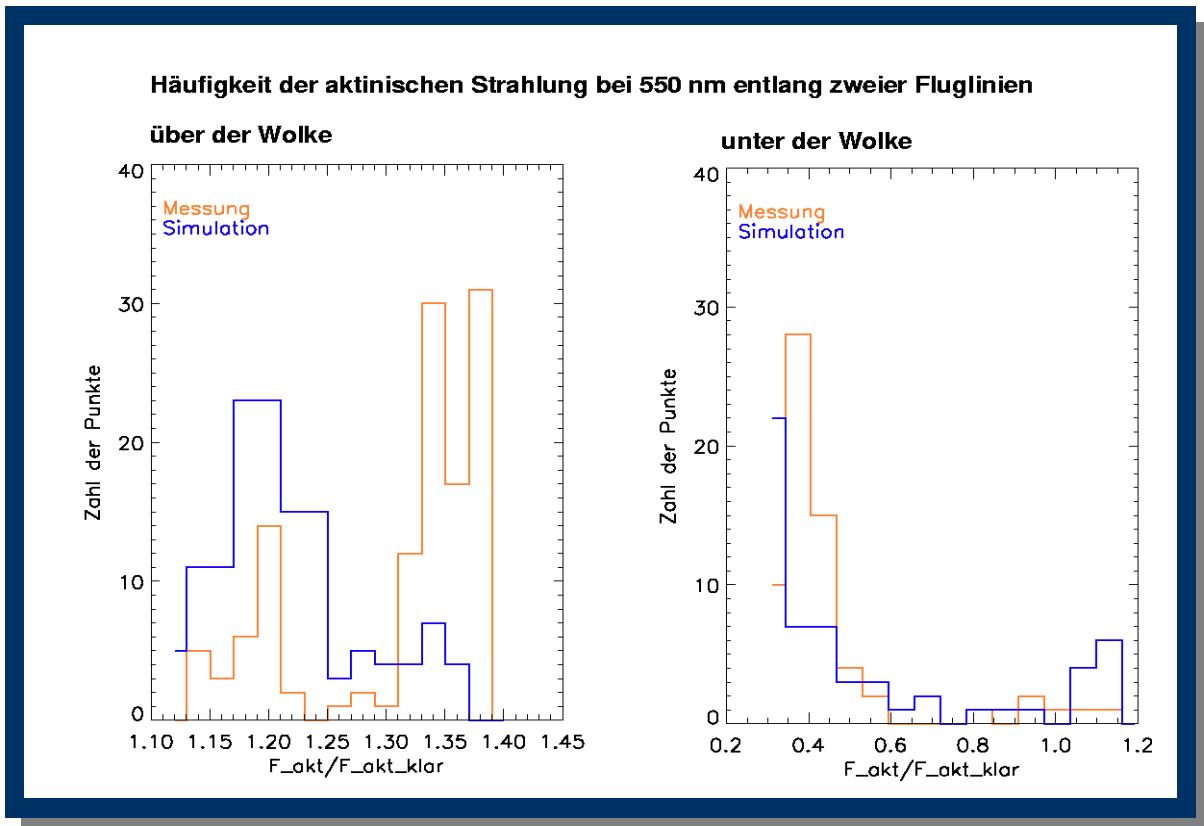


Abb. 26: Histogramm der aktinischen Strahlungsflussdichte entlang der Fluglinie, Simulation und Messung vom 28. September 2002, $\lambda = 550$ nm.

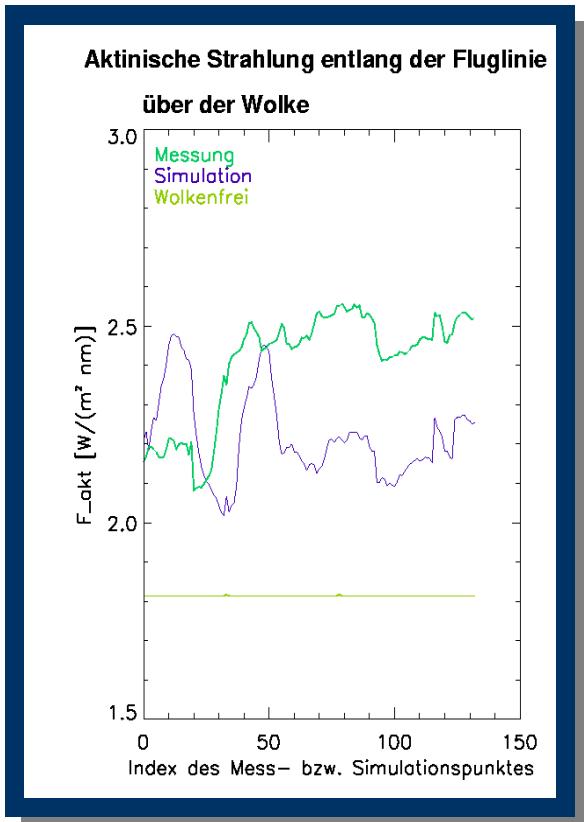


Abb. 27: Verlauf der aktinischen Strahlungsflussdichte entlang der Fluglinie, zum Vergleich der simulierte Wert der gleichen Atmosphäre wolkenfrei.

In Abb. 26 sind Vergleiche von Simulation und Messung in Form von Häufigkeitsverteilungen der aktinischen Strahlung zu sehen. Es wurden Flugbahnen über und unter dem Wolkenfeld untersucht, die Häufigkeitsverteilungen sind normiert auf den jeweiligen *clear sky*-Wert des aktinischen Fluxes bei 550 nm dargestellt. Bei Betrachtung von Abb. 26 lässt sich eine gute Übereinstimmung von Simulation und Messung erkennen, was eine gelungene Rekonstruktion des Wolkenfeldes nahelegt. Die Häufigkeitsverteilungen der aktinischen Strahlung über und unter dem untersuchten Wolkenfeld zeigen qualitative Ähnlichkeiten in der Struktur der Felder. In den Verteilungen über der Wolke finden sich beispielsweise sowohl in der Messung als auch in der Simulation große Häufungen bei den Werten der aktinischen Strahlung um 1.12, die kaum den *clear sky*-Wert übertreffen, und auch Häufungen bei großen Werten um 1.35. Daraus lässt sich schließen, dass der Bedeckungsgrad und auch die räumliche Verteilung der Wolkenstrukturen sehr gut rekonstruiert wurden. Auch die Zeitreihe für den Flugabschnitt über den Wolken, also bei einem direkten Vergleich von Mess- und Simulationspunkten, weist deutliche Korrelation zwischen dem realen und dem konstruierten Wolkenfeld bezüglich deren räumlicher Struktur auf (Abb. 27). Die absoluten Abweichungen der Werte sind jedoch groß. Dies ist nicht verwunderlich, denn schon eine kleine räumliche Verschiebung eines Wolkenpaketes erzeugt sehr große Unterschiede in der Messung bzw. Simulation der Strahlung. Auch die Auflösung der Modellgitter sowie der Integrationszeitraum der Messungen spielen eine auf keinen Fall zu vernachlässigende Rolle.

zitierte Literatur:

Evans, K. F. : The spherical harmonic discrete ordinate method for three-dimensional atmospheric radiative transfer, J. Atmos. Sci., 55, 429-446, 1998

Kniffka, A. und Trautmann, T.: Verwendung von mikrophysikalischen Messungen zur Charakterisierung von Aerosol und Wolken für Strahlungsübertragungsrechnungen, Wiss. Mitt. Inst. f. Meteorol. Univ. Leipzig, 34, 13-29, 2003

A. Kylling, A. R. Webb, R. Kift, G. P. Gobbi, L. Ammannato, F. Barnaba, A. Bais, S. Kazadzis, M. Wendisch, E. Jäkel, S. Schmidt, A. Kniffka, S. Thiel, W. Junkermann, M. Blumthaler, R. Silbernagl, B. Schallart, B. Kjeldstad, T. M. Thorseth, R. Scheirer, und B. Mayer: Spectral Actinic flux in the Lower Troposphere: Measurement and Simulations for Cloudless, Broken Cloud and Overcast Situations, eingereicht bei Atmos. Chem. Phys, 2004

R. Scheirer und S. Schmidt: Retrieving inhomogeneous clouds, in Proc. IAMAS - International Conference on clouds and precipitation, Bologna, Italien, 2004

4. Veröffentlichungen, Vorträge und Tagungen

4.1 Zeitschriftenartikel

Crewell, S., H. Bloemink, A. Feijt, S. Gimeno-García, D. Jolivet, O. A. Krasnov, A. Van Lammeren, U. Löhnert, E. Van Meijgaard, J. Meywerk, M. Quante, K. Pfeilsticker, S. Schmidt, T. Scholl, C. Simmer, M. Schröder, T. Trautmann, V. Venema, M. Wendisch, U. Willén
The BALTEX Bridge Campaign: an integrated approach for a better understanding of clouds
Bulletin of the American Meteorological Society, 85, 1565-1584, 2004

Doicu, A., F. Schreier, M. Hess: Iterative regularization methods for atmospheric remote sensing, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Volume 83, Pages 47-61, 2004

Fix A., G. Ehret, H. Flentje, G. Poberaj, M. Gottwald, H. Finkenzeller, H. Bremer, M. Bruns, J.P. Burrows, A. Kleinböhl, H. Küllmann, J. Kuttippurath, A. Richter, P. Wang, K.-P. Heue, U. Platt, and T. Wagner: SCIAMACHY validation by aircraft remote measurements. Design, execution and first results of the SCIA-VALUE mission, *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 4, 8381-8423, 2004

Gimeno-García., S., T. Trautmann: Simulations of the solar radiative transfer in measured and generated cloud fields, *Wiss. Mitt. Inst. f. Meteorol. Univ. Leipzig*, 34, 30-42, 2004

Heintzenberg, J., K. Okada, T. Trautmann, P. Hoffmann: Modelling of the signals of an optical particle counter for real nonspherical particles, *Appl. Opt.*, 43, 5893-5900, 2004

Hungershöfer, K., T. Trautmann, J. Trentmann: Ein erster Vergleich der optischen Eigenschaften von Partikeln aus Laborfeuern und Modellrechnungen, *Wiss. Mitt. Inst. f. Meteorol. Univ. Leipzig*, 34, 1-12, 2004

Kniffka A., T. Trautmann: Verwendung von mikrophysikalischen Messungen zur Charakterisierung von Aerosol und Wolken für Strahlungsübertragungsrechnungen, *Wiss. Mitt. Inst. f. Meteorol. Univ. Leipzig*, 34, 13-29, 2004.

Otto, S., T. Trautmann: Zweistrom-Methoden zur Simulation photochemisch relevanter Strahlung in vegetationsbeständen, *Wiss. Mitt. Inst. f. Meteorol. Univ. Leipzig*, 34, 43-58, 2004

Qin, Y., M.A. Box, T. Trautmann: Higher-order radiative perturbation theory, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 84, 105-114, 2004

Wauer, J., K. Schmidt, T. Rother, T. Ernst, M. Hess: Two software tools for plane-wave scattering on nonspherical particles in the German Aerospace Center's virtual laboratory *Appl. Opt.*, 43, 6371-6379, 2004

4.2 Proceedingsbeiträge

Blumenstock, T., S. Mikuteit, A. Griesfeller, F. Hase, G. Kopp, I. Kramer, M. Schneider, H. Fischer, M. Gil, J.R. Moreta, M. Navarro Coma, U. Raffalski, E. Cuevas, B. Dix, G. Schwarz: Validation of MIPAS and SCIAMACHY Data by Ground-Based Spectroscopy at Kiruna, Sweden, and Izana, Tenerife Island (AOID-191), *Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)*, Frascati, 3.-7. Mai 2004

Chlebek Ch., S. Noël, J. Skupin, M. Gottwald, E. Krieg: SCIAMACHY Instrument Status, *Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)*, Frascati, 3.-7. Mai 2004

Drescher, A.: Anmerkungen zu den geometrischen Grundlagen der luftgestützten 3D-Registrierung durch Laserscanner und digitale Kameras im urbanen Bereich, *Photogrammetrie, Laserscanning, Optische 3D-Messtechnik*, Wichmann-Verlag, S. 304-311, Oldenburg, Februar 2004

Drescher, A.: Geometrische Grenzen für den Einsatz der Time Delay and Integration (TDI) Methode in Zeilenkameras für Fernerkundung, *Publikationen der DGPF*, S. 565-571, Halle, 15.-17. September 2004

Loyola, D.: Automatic Cloud Analysis from Polar-Orbiting Satellites Using Neural Network and Data Fusion Techniques, *IEEE Proceedings of IGARSS'04*, S. 2530-2533, Anchorage, 20.-24. August 2004

Loyola, D.: Using Neural Network Ensembles for the Operational Retrieval of Ozone Total Columns, *IEEE Proceedings of IGARSS'04*, S. 1041-1044, Anchorage, 20.-24. August 2004

4.3 Dokumente und Berichte

Blumenstock, T., S. Mikuteit, A. Griesfeller, F. Hase, G. Kopp, I. Kramer, M. Schneider, H. Fischer, M. Gil, J.R. Moreta, M. Navarro Coma, U. Raffalski, E. Cuevas, B. Dix, G. Schwarz: Validation of MIPAS and SCIAMACHY Data by Ground-Based Spectroscopy at Kiruna, Sweden, and Izana, Tenerife Island (AOID-191), *ESA Special Publications*, ESA SP-562, 2004

Lambert, J.-C., D. S. Balis, P. Gerard, J. Granville, Y. Livschitz, D. Loyola, R. Spurr, P. Valks, M. Van Roozendael: Delta Validation Report for ERS-2 GOME Data Processor Upgrade to Version 4.0, ERSE-CLVL-EOPG-TN-04-0001, Issue 1.0, December 2004

Livschitz, Y., D. Loyola, P. Kenter: Component Test Specification Document for the UPAS System, SAF/O3M/DLR/CTSD/001, Issue 1/B, 15 September 2004

Livschitz, Y., D. Loyola: Output Product Format Document for GOME Total Column Densities of Ozone and Minor Trace Gases, DLR/UPAS/GOME/OPF/01, Issue 1/A, 1 November 2004

Loyola, D., W. Thomas, W. Balzer: Product Specification Document of the GOME Data Processor, ER-PS-DLR-GO-0016, Iss./Rev. 4/B, December 2004

Pruin, B., S. Kiemle, D. Loyola: Component Test Specification Document for O3M-DIMS Components, SAF/O3M/DLR/CTSD/002, Issue 1.1, 27 October 2004

FMI, KNMI, DLR (D. Loyola), DWD, LAP, HNMS, DMI, M-F, KMI: Ozone SAF Report on IRR Scientific Prototyping Report, SAF/O3/FMI/ALG/RP/001, Rev.1.1, September 2004

Pruin, B., S. Kiemle, D. Loyola: DLR On-Site Integration Test Plan, SAF/O3M/DLR/V&V/PL/014, Issue 1.0, 1 November 2004

Schreier F., Doicu, A: Erweiterung und Verbesserung der Level 2 Datenprodukte von MIPAS, Abschlussbericht HGF Vernetzungsfond, 2004

Slijkhuis, S.: CHEOPS-GOME Study on seasonal effects on the ERS-2/GOME diffuser BSDF, CH-TN-DLR-GO-0001, May 2004

Slijkhuis, S.: CHEOPS-GOME Study on Correction of Signal Background on the ERS-2/GOME Level 1 data, CH-TN-DLR-GO-0002, September 2004

Slijkhuis, S.: CHEOPS-GOME Algorithm Theoretical Basis Document Level 0 to 1 Processing Update, CH-TN-DLR-GO-0003, Oktober 2004

Slijkhuis, S.: GOME Data Processor Extraction Software User's Manual, ER-SUM-DLR-GO-0045, Issue: 3, December 2004

Spurr, R.J.D., M. van Roozendael, D. Loyola: Algorithm Theoretical Basis Document for GOME Total Column Densities of Ozone and Nitrogen Dioxide UPAS/GDOAS: GDP 4.0, ERSE-DTEX-EOPG-TN-04-0007, Iss./Rev. 1/A, 15 December 2004

4.4 Vorträge und Pressemitteilungen

Doicu, A.: Iteratively regularized Gauss-Newton method for atmospheric inverse problems. 6. International Radiative Transfer Modeling Workshop, Universität Bremen, Institut für Umweltphysik (IUP/IFE), Satellite Atmospheric Sounding Group, Bredbeck, 21.-24. Juni 2004

Doicu A., F. Schreier, S. Hilgers, A. von Bargen, S. Slijkhuis, M. Hess, B. Aberle: Iteratively regularized Gauss Newton method for atmospheric remote sensing applied to MIPAS and SCIAMACHY limb sounding observations, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Doicu, A.: Semi-stochastic retrieval algorithm for atmospheric remote sensing, Second International Limb Workshop, Stockholm, 11.-14. Oktober 2004

Ebertseder, T., V. Eyring, M. Dameris, M. Bittner, D. Loyola: Comparison of zonal variability in total ozone derived from ERS-2 GOME and a coupled chemistry-climate model, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Gimeno-García, S., T. Trautmann, V. Venema: Dreidimensionale solare Strahlungstransportsimulation in gemessenen und generierten inhomogenen Stratocumulusfeldern, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), 7.-10. September 2004, Karlsruhe

Gimeno-García, S., T. Trautmann: Three-dimensional Radiative Transfer Effect in Measured and Generated Inhomogeneous Stratocumulus Fields. BBC2 Workshop, De Bilt, Niederlande, 18.-19. Oktober 2004

Gimeno-García, S., T. Trautmann: "Exakter" und IPA- Strahlungstransport in gemessenen und generierten zwei- und dreidimensionalen Wolken. 4DWOLKEN-Treffen, Berlin, 18.-19. November 2004

Gottwald, M.: Das Bild der Erde, eingeladener Vortrag, Planetarium Hamburg, 1. Oktober 2004

Gottwald, M.: Der Betrieb von SCIAMACHY auf ENVISAT – von der Planung zur Messung, Vortrag Kolloquium Angewandte Fernerkundung, Oberpfaffenhofen, 10. November 2004

Gottwald, M.: Erforschung der Erde aus dem Weltraum, eingeladener Vortrag, Planetarium Hamburg, 19. November 2004

Hess, M., F. Schreier, A. Doicu: Informationsgehalt von IR-Bildsensor und FTIR-Messungen zur Bestimmung von CO₂ und CO Säulen über Vegetationsfeuern, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), Karlsruhe, 7.-10. September 2004

Hilgers, S., G. Schwarz, S. Slijkhuis: Performance Verification of Two ENVISAT Limb Sounding Processors, EGU General Assembly, Nizza, 25.-30. April 2004

Hungershöfer, K., T. Trautmann: Single Scattering Properties of Biomass Burning Particles for Radiative Transfer, AFO2000 Abschluss-Symposium, Bad Tölz, 22.-24. März 2004

Hungershöfer, K., O. Schmid, K. Zeromskiene, Y. Iinuma, R. Singh Parmar, G. Helas, M. O. Andreae, A. Wiedensohler, H. Herrmann, T. Trautmann: Calculated optical properties of particles from laboratory fires using the measurements as input parameters and for the comparison, International Radiation Symposium, Poster, Busan, Korea, 23.-28. August 2004

Hungershöfer, K., T. Winterrath, J. Trentmann, G. Luderer, M. O. Andreae, T. Trautmann: Photolysefrequenzen und Heizraten in einer feuer-induzierten konvektiven Wolke, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), Karlsruhe, 7.-10. September 2004

Jerg, M., S. Gimeno-García., T. Trautmann: Solar Radiative Transfer in Three-dimensional Clouds: Exact Computations and Development of Parameterizations. AFO2000 Abschluss-Symposium, Bad Tölz, 22.-24. März 2004

Jerg, M. T. Trautmann: Solare Strahlungstransportparametrisierung mittels Störungstheorie, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), Karlsruhe, 7.-10. September 2004

Kniffka, A., S. Gimeno-García, E. Jäkel, S. Schmidt, M. Wendisch, R. Scheirer, T. Trautmann Simulations of spectral actinic flux density fields in scattered and overcast cloud conditions: Comparison

with INSPECTRO aircraft measurements, Poster, Current Problems in Atmospheric Radiation, International Radiation Symposium, International Radiation Commission, Busan, Korea, 23.-28. August 2004

Kniffka, A., S. Gimeno-García, E. Jäkel, S. Schmidt, M. Wendisch, R. Scheirer, T. Trautmann: Spektrale aktinische Strahlung in homogener und inhomogener Bewölkung während INSPECTRO: Simulationen versus Messungen, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), Karlsruhe, 7.-10. September 2004

Loyola, D., Y. Livschitz, T. Ruppert: Optimal Combination of Polarization and Spectral Information for the Retrieval of GOME/ERS-2 Cloud Parameters, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Loyola, D., W. Lengert, M. Weber, T. Ruppert, K. Reiniger, et al.: The GOME Near-Real-Time Service: Mission Continuity, Status and Future Plans, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Mendrok, J.: Radiative transfer modelling of solar and thermal source in spherical atmospheres. 6. International Radiative Transfer Modeling Workshop, Universität Bremen, Institut für Umweltphysik (IUP/IFE), Satellite Atmospheric Sounding Group, Bredbeck, 21. - 24. Juni 2004

Noël S., H. Bovensmann, J. Skupin, M.W. Wuttke, J.P. Burrows, M. Gottwald, E. Krieg: SCIAMACHY Long-Term Monitoring Results, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Otto, S., T. Trautmann: Modellierung des aktinischen Flusses in hochreichender Vegetation mittels Zweistrom-Verfahren im Vergleich zu Spektroradiometermessungen, Poster, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), Karlsruhe, 7.-10. September 2004

Schmid, O., D. Chand, G. Helas, K. Hungershöfer, Y. Iinuma, K. Zeromskiene, H. Herrmann, A. Maßling, R.S. Parmar, M. Simmel, T. Trautmann, A. Wiedensohler, M.O. Andreae: Physical Properties of Biomass Burning Aerosol from Various Fuel Types, 8th International Conference on Carbonaceous Particles in the Atmosphere, Wien, 14.-16. September, 2004

Schreier, F., J. Mendrok, U. Böttger: Hochauflösende Infrarot-Modelle im Virtuellen Strahlungstransfer-Labor, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), Karlsruhe, September 2004

Schreier, F.: Spectral Grid Optimization Scheme for Line-by-Line Cross Section Evaluation.6. International Radiative Transfer Modeling Workshop, Universität Bremen, Institut für Umweltphysik (IUP/IFE), Satellite Atmospheric Sounding Group, Bredbeck, 21.-24. Juni 2004

Schwarz, G., S. Hilgers, A. Drescher: Analysis of Methane Isopleths using MIPAS Data, EGU General Assembly, Nizza, 25.-30. April 2004

Skupin J., S. Noël, M.W. Wuttke, M. Gottwald, H. Bovensmann, M. Weber, J.P. Burrows: SCIAMACHY Solar Irradiance Observation in the Spectral Range from 240 to 2380 nm, Poster, EGU General Assembly, Nizza, 25.-30. April 2004

Skupin J., S. Noël, M.W. Wuttke, M. Gottwald, H. Bovensmann, M. Weber, J.P. Burrows: SCIAMACHY Solar Irradiance Observation in the Spectral Range from 240 to 2380 nm, COSPAR, Paris, 18.-25. Juli 2004

Slijkhuis, S., S. Wahl, B. Aberle, D. Loyola: Re-analysis of GOME/ERS-2 Diffuser Properties, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Slijkhuis, S., B. Aberle, J. Frerick, A. von Bargen, S. Wahl: Advancements of the operational Level 0-1 processing of SCIAMACHY, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Tank, V., M. Hess, F. Schreier, E. Lindermeier: Remote Detection and Quantification of Hot Combustion Products - Experimental Instrumentation and Determination of Optimal Infrared Spectral Micro Windows, EUCMOS XXVII, Krakau, 5.-10. September 2004, AGH - University of Science and Technology, Krakow, XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy, S. 92-92, Wydawnictwo Naukowe „Akapit“, Krakow, 2004

Van Roozendael, M., D. Loyola, R. Spurr, D. Balis, J.-C. Lambert, et al.: UPAS/GDOAS: GDP 4.0 – Upgrade of the GOME Data Processor for Improved Total Ozone Columns, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

Wurzler, S., M. Simmel, K. Diehl, T. Hennig, H. Herrmann, Y. Iinuma, K. Lehmann, A. Massling, F. Stratmann, A. Wiedensohler, G. Zech, K. Zeromskiene, R. Posselt, K. Hungershöfer, T. Trautmann, M. O. Andreae, D. Chand, U. Dusek, G. P. Frank, G. Helas, R. S. Parmar, O. Schmid, T. Winterrath, M. Welling, J. Trentmann, H. F. Graf, B. Langmann, F. Nober, C. Textor: Report on the AFO2000 project, The eggs, Newsletter and Information Service of the E.G.U., Ausgabe 9, September 2004

Wahl, S., B. Aberle, S. Slijkhuis, D. Loyola: Long Term Monitoring of GOME/ERS-2 On-fly Calibration Parameters, ENVISAT/ERS-Symposium, Salzburg, 6.-10. September 2004

4.5 Besuchte Tagungen

Oldenburger 3D-Tage, Februar 2004, Oldenburg

AFO2000 Abschluss-Symposium, 22.-24. März 2004, Bad Tölz

HGF-Vernetzungsfonds-Treffen, 1.-2. April 2004, Karlsruhe

EGU General Assembly 2004, 25.-30. April 2004, Nizza, Frankreich

Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3.-7. Mai, Frascati, Italien

DEKLIM-Treffen, 18.-19. Mai 2004, DLR, Oberpfaffenhofen

Sixth Radiative Transfer Modeling Workshop, 21.-24. Juni 2004, Bredbeck

IGARSS'04, 20.-24. August 2004, Anchorage, Alaska

International Radiation Symposium, 23.-28. August 2004, Busan, Korea

ENVISAT/ERS-Symposium, 6.-10. September 2004, Salzburg, Österreich

Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung (DACH), 7.-10. September 2004, Karlsruhe

Jahrestagung der DGPF, 15.-17. September 2004, Halle

Second International Limb Workshop, 11.-14. Oktober 2004, Stockholm, Schweden

Baltex Bridge Campaign 2 (BBC2) Workshop, 18.-19. Oktober 2004, De Bilt, Niederlande

SAMUM-Projekttreffen, 8.-9. November 2004, Mainz

5th DLR-CNES Workshop Information Extraction, 29. November - 1. Dezember 2004, DLR, Oberpfaffenhofen

4.6 Diplom- und Doktorarbeiten

Gimeno-García, S.: Modellierung des solaren Strahlungstransports in 3D-inhomogener Bewölkung und Vergleich mit spektroradiometrischen Messungen. Dissertation, Fakultät für Physik und Geowissenschaften, Universität Leipzig. (Betreuer: Prof. Dr. Thomas Trautmann)

Hungershöfer, K.: Simulation des Strahlungstransports zur Rolle der Biomassenverbrennung für Chemie und Dynamik in der regionalen und globalen Skala. Dissertation, Fakultät für Physik und Geowissenschaften, Universität Leipzig. (Betreuer: Prof. Dr. Thomas Trautmann)

Jerg, M.: Parametrisierung des solaren Strahlungstransports in realistischer dreidimensionaler Bewölkung. Dissertation, Meteorologisches Institut, Ludwig-Maximilians-Universität München. (Betreuer: Prof. Dr. Susanne Crewell und Prof. Dr. Thomas Trautmann)

Kniffka, A.: Einfluss von Aerosol-, Wolken-, und Bodenalbedoinhomogenitäten auf das dreidimensionale aktinische Strahlungsfeld in der Atmosphäre. Dissertation, Fakultät für Physik und Geowissenschaften, Universität Leipzig. (Betreuer: Prof. Dr. Thomas Trautmann)

Mendrok, J.: Infrarot-Strahlungstransfer und Streuprozesse. Dissertation, Freie Universität Berlin. (Betreuer: Prof. Dr. J. Fischer, Institut für Weltraumwissenschaften, Freie Universität Berlin und Dr. F. Schreier, IMF-AP)

Otto, S.: Modellierung des eindimensionalen Strahlungstransports in hochreichender Vegetation mit Zweistrom-Methoden. Diplomarbeit, Abgabe September 2003, Fakultät für Physik und Geowissenschaften, Universität Leipzig. (Betreuer: Prof. Dr. Thomas Trautmann)

Steinwagner, J.: Optimierung der Parameterauswahl für ein operationelles Off-Line-Retrieval von Spurengas-Vertikalprofilen aus MIPAS-Daten. Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München. (Betreuer: Prof. Dr. H. Quenzel, Meteorologisches Institut, Ludwig-Maximilians-Universität München und G. Schwarz, IMF-AP, Prüfung am 28. Juni 2004 an der LMU München)

Abkürzungen und Akronyme

ACE	Aerosol Characterization Experiment
ADM	Atmospheric Dynamics Mission
AIRS	Atmospheric Infrared Sounder
AMF	Air Mass Factor
AO	Announcement of Opportunity
AOI	AO Instrument
AP	Atmosphärenprozessoren
AQUA	Satellit zur Untersuchung der Hydrosphäre
ASM	Azimuth Scan Mechanism
ATBD	Algorithm Theoretical Baseline Document
AUTH	Aristotle University of Thessaloniki
BC	Black Carbon
BIRA	Belgisch Instituut voor Ruimte-Aëronomie
BIRD	Bispectral Infra-Red Detection, Projektname für deutschen Kleinsatelliten
BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
BSDF	Bi-directional Scattering Distribution Function
CCA	Communication Area
CHEOPS	Climatology of Height-resolved Earth Ozone and Profiling Systems
CLABAUTAIR	Cloud Liquid Water Content and Effective Radius Retrieval by an Automated Use of Aircraft Measurements
COBI	Cold Bias in Modellen der Allgemeinen Atmosphärischen Zirkulation
DEKLIM	Deutsches Klimaforschungsprogramm
DFD	Deutsches Fernerkundungsdatenzentrum
DFG	Deutsche Forschungsgemeinschaft
DIMS	Data & Information Management System
DISORT	Discrete Ordinate Radiative Transfer
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
DMI	Danmarks Meteorologiske Institut
DOAS	Differentielle Optische Absorptions-Spektroskopie
D-PAC	Deutsches Processing and Archiving Centre
D-PAF	Deutsche Processing and Archiving Facility
DU	Dobson Unit
EAS	Erde-Atmosphäre-System
ECHAM	GCM based on ECMWF forecast models, modified and extended in Hamburg
ECOFIRE	Studie zur Beobachtung von Hochtemperaturereignissen aus dem Weltraum
ENVISAT	Environmental Satellite
EOS	Earth Observing System
EPS	European Polar System
EP-TOMS	Earth Probe TOMS
ERS	European Remote Sensing Satellite
ESA	European Space Agency
ESL	Expert Support Lab
ESM	Elevation Scan Mechanism
ESRIN	European Space Research Institute
EUMETSAT	European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites
FhG-FIRST	Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik
FM	Flight Model

FOCUS	Projektname für einen Sensor zur Detektion von Hochtemperaturereignissen
FOV	Field of View
FTIR	Fourier Transform Infrared Spectroscopy
FTS	Fourier Transform Spectrometer
GCM	General Circulation Model
GDOAS	GODFIT DOAS
GDP	GOME Data Processor
GODFIT	GOME Direct Fitting
GOME	Global Ozone Monitoring Experiment
GOMETRAN	Strahlungstransfermodell der Universität Bremen
IASI	Infrared Atmospheric Sounding Interferometer
ICFA	Initial Cloud Fitting Algorithm
IECF	Instrument Engineering & Calibration Facility
IFE	Institut für Fernerkundung
IMF	Institut für Methodik der Fernerkundung
INSPECTRO	Influence of Clouds on the Spectral Actinic Flux in the Lower Troposphere
IPA	Institut für Physik der Atmosphäre
IPA	Independent Pixel Approximation
IR	Infrarot
IRR	Infrastructure Readiness Review
IUP	Institut für Umweltphysik
KNMI	Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut
LER	Lambert Equivalent Reflectivity
LIDORT	Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer
LIM	Leipziger Institut für Meteorologie
MCMD	Macrocommand
METOP	Meteorological Operational Polar Satellites of EUMETSAT
MIPAS	Michelson Interferometer Passive Atmospheric Sounder
MIRART	Modular Infrared Atmospheric Radiative Transfer
MLER	Minimum LER
MODTRAN	Moderate Transmittance Code
MODIS	Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer
NDSC	Network for the Detection of Stratospheric Change
NIVR	Nederlands Instituut voor Vliegtuigontwikkeling en Ruimtevaart
NLTE	Non-local Thermal Equilibrium
NNORSY	Neural Network Ozone Retrieval System
NRT	Near Realtime
O3M	Ozone Monitoring
OC	Organic Carbon
OCR	Operation Change Request
OCRA	Optical Cloud Retrieval Algorithm
ODIN	Satellit für Untersuchungen im Bereich Earth und Space Science
OL	Offline
OPAC	Optical Properties of Aerosols and Clouds
OSIRIS	Optical Spectrograph and Infrared Imaging System
PAS	Photoakustisches Spektrometer
PCR	Processing Change Request
PMD	Polarization Measurement Device
PPG	Pixel to Pixel Gain
PSC	Polar Stratospheric Cloud
PSD	Product Specification Document
PS-DISORT	Pseudosphärisches DISORT
RMS	Root Mean Square
ROCINN	Retrieval of Cloud Information using Neural Networks
SAF	Satellite Application Facility

SAMUM	Sahara Mineral Dust Experiment
SAO	Smithsonian Astrophysical Observatory
SAOZ	Système d' Analyse par Observation Zénithale
SCIAMACHY	Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography
SEU	Single Event Upset
SHDOM	Spherical Harmonic Discrete Ordinate Method
SMR	Sun Mean Reference
SOST	SCIAMACHY Operations Support Team
SRC	SCIAMACHY Radiant Cooler
SSA	Single Scattering Albedo
S&T	Science & Technology
SWIR	Short Wave Infrared
S/W	Software
TES	Tropospheric Emission Spectrometer
TPM	Total Particulate Matter
TOA	Top of Atmosphere
TOMS	Total Ozone Mapping Spectrometer
TPD/TNO	Technisch Physische Dienst / Nederlandse Organisatie voor Toegepast Natuurwetenschappelijk Onderzoek
UMARF	Unified Meteorological Archive and Retrieval Facility
UPAS	Universal Processor for Atmospheric Spectrometers
UV	Ultraviolett
VIS	Visible
VL	Virtuelles Labor
WDC-RSAT	World Data Center for Remote Sensing of the Atmosphere
WMO	World Meteorological Organization
WOUDC	World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Center
ZSW	Zentrum für Sonnenenergie und Wasserstoff-Forschung