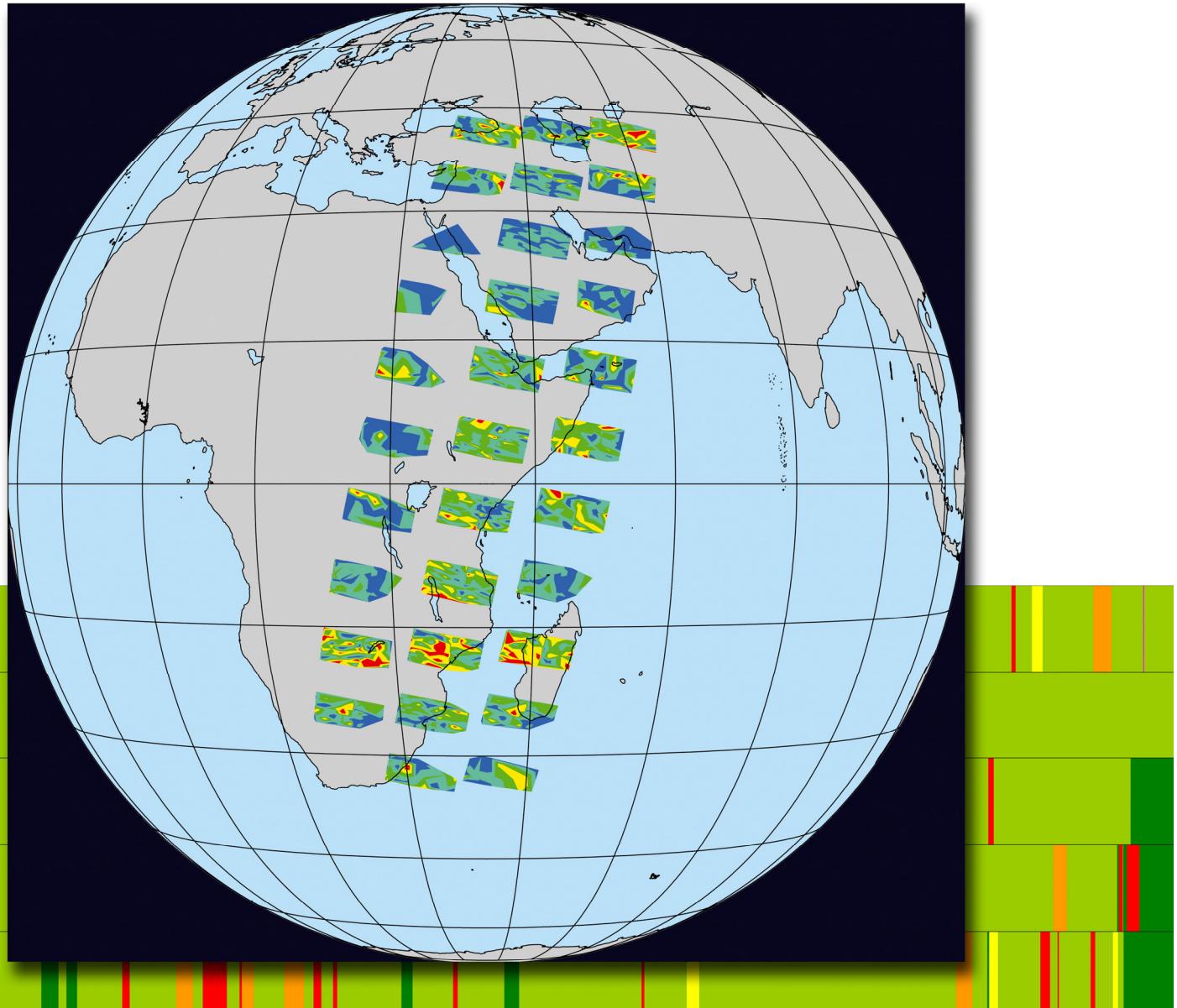




**Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt**  
**Cluster Angewandte Fernerkundung**

**Institut für Methodik der Fernerkundung**



**Organisationseinheit**  
**Atmosphärenprozessoren**

**Jahresbericht 2006**



*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:*

Das Atmosphäreninstrument SCIAMACHY auf ENVISAT nimmt einen breiten Raum in der Arbeit unserer Organisationseinheit ein. Das Titelbild vereint die beiden wichtigsten Aufgabengebiete hierbei – Ableitung geophysikalischer Atmosphärenparameter und Instrumentbetrieb. Details hierzu finden sich in den Kapiteln 2 sowie 3.6.

Oberpfaffenhofen, Februar 2007

## **Inhaltsverzeichnis**

<b>1. Vorwort .....</b>	<b>2</b>
<b>2. Höhepunkte des Jahres 2006 – Fünf Jahre SCIAMACHY-Betrieb auf ENVISAT.....</b>	<b>3</b>
<b>3. Laufende Projekte und Vorhaben .....</b>	<b>11</b>
3.1 Status of the Ozone Monitoring SAF.....	11
3.2 Update of the GOME Data Processors.....	13
3.3 SCIAMACHY-Datensatz konsolidierte Level 0-Daten.....	17
3.4 SCIAMACHY – Entwicklungsstatus Level 0-1b Datenprozessierung.....	19
3.5 Von kalibrierten Spektren zu geophysikalischen Parametern – Verbesserung der SCIAMACHY Level 2 Prozessierung .....	20
3.6 SCIAMACHY Nadir-IR .....	21
3.7 Die Atmospheric Dynamics Mission – ADM-Aeolus .....	24
3.8 Profilretrieval mit Hilfe von Entropie .....	25
3.9 Radiative Transfer Modeling in Spherical Atmospheres including Emission and Scattering – Application to Remote Sensing of High Altitude Clouds .....	27
3.10 Schnittstellen für das WDC-RSAT .....	30
3.11 The GMES Service Element for Atmospheric Monitoring - PROMOTE .....	32
3.12 Virtuelles Labor .....	34
3.13 Lichtstreuung an Chebyshev-Teilchen höherer Ordnung .....	35
3.14 3D Solar Radiative Transfer with Monte Carlo – Contributions by the University of Leipzig to the 4D-CLOUDS Project .....	37
3.15 Lehrbuch über Lichtstreuung an Teilchensystemen.....	39
3.16 Studie zum Streuverhalten von Plasmateilchen .....	41
3.17 The Saharan Mineral Dust Experiment – Contributions of Subproject 2 .....	44
<b>4. Veröffentlichungen, Vorträge und Tagungen .....</b>	<b>47</b>
4.0 Buchveröffentlichungen.....	47
4.1 Zeitschriftenartikel .....	47
4.2 Proceedingsbeiträge .....	48
4.3 Dokumente und Berichte .....	49
4.4 Vorträge, Poster und Pressemitteilungen .....	50
4.5 Besuchte Tagungen und Gastaufenthalte .....	51
4.6 Diplom- und Doktorarbeiten .....	52
<b>Abkürzungen und Akronyme.....</b>	<b>53</b>

## 1. Vorwort

Die vorliegende sechste Ausgabe des Jahresberichts dokumentiert Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, die in der Organisationseinheit *Atmosphärenprozessoren* des Instituts für Methodik der Fernerkundung (IMF-AP) im zurückliegenden Jahr 2006 durchgeführt wurden.

Mehrere wichtige Ereignisse prägten unsere Arbeit im Jahre 2006. Mit dem Start von MetOp-A am 16. Oktober 2006 ist für das IMF eine wichtige Phase der operationellen Atmosphärenfernerkundung angebrochen. Im Auftrag von EUMETSAT ist das *Cluster Angewandte Fernerkundung* für Erzeugung, Verteilung und Archivierung von Produkten für Spurengasgesamtsäulen, Wolken- und Aerosolparameter auf der Basis des auf MetOp-A befindlichen GOME-2 Instrumentes verantwortlich. Mit der auf 15 Jahre angelegten MetOp-Mission stellt dies eine herausfordernde langfristige operationelle Aufgabe dar, zu welcher selbstverständlich auch die kontinuierliche Verbesserung und Erweiterung der eingesetzten Fernerkundungsalgorithmen gehört.

Bei den SCIAMACHY-Datenprozessoren wurde mit der Implementierung der GDP 4.0 GDOAS-Algorithmen für O<sub>3</sub> und NO<sub>2</sub> ein wichtiger Meilenstein erreicht, so dass die Qualität dieser SCIAMACHY-Produkte mit denen von GOME auf ERS-2 gleichzieht. Hinzu kommt die Verbesserung der Limb-Profil Algorithmen für O<sub>3</sub> und NO<sub>2</sub>, die sich bzgl. der Produktqualität nun mit den in der SCIAMACHY-Community publizierten wissenschaftlichen Algorithmen messen lassen können.

Die im zurückliegenden Jahr von ESA und den beteiligten Raumfahrtagenturen offiziell bestätigte Verlängerung der ENVISAT-Mission um mehrere Jahre bis mindestens 2010 bedeutet, unseren Anteil an diesem sehr erfolgreichen Erdbeobachtungsunternehmen auch weiterhin beitragen zu können. Dies betrifft insbesondere die Aufgaben im *SCIAMACHY Operations Support* mit dem Ziel, SCIAMACHY auch weiterhin im gewohnten exzellenten Zustand zu halten.

Der Leser wird bemerken, dass zahlreiche Beiträge dieser Ausgabe in englischer Sprache verfasst sind, vor allem bedingt durch unsere Einbindung in ein internationales Umfeld. Wir setzen uns deshalb zum Ziel, den nächsten Jahresbericht vollständig in Englisch zu verfassen, um seine Verteilung künftig nicht mehr auf den deutschen Sprachraum beschränken zu müssen.

An alle Autoren geht von dieser Stelle ein Dank für die Bereitstellung der Beiträge in diesem Jahresbericht!

Prof. Dr. Thomas Trautmann

Dr. Manfred Gottwald

## 2. Höhepunkte des Jahres 2006 – Fünf Jahre SCIAMACHY-Betrieb auf ENVISAT

*M. Gottwald, E. Krieg, K. Reissig, J. How (DFD-IT)*

Als am 1. März 2002 eine Ariane 5-Rakete ENVISAT in den erdnahen Orbit brachte, begann Europas bisher anspruchsvollste Erdbeobachtungsmission. Ausgelegt für eine Betriebsdauer von 5 Jahren sollte das System Erde in seiner Gesamtheit – Lithosphäre, Hydrosphäre, Atmosphäre, Kryosphäre und Biosphäre – untersucht werden. Für den Bereich Atmosphäre war eine Nutzlast vorgesehen, die sich aus SCIAMACHY (Scanning Imaging Spectrometer for Atmospheric Chartography), MIPAS (Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding) und GOMOS (Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars) zusammensetzte.

SCIAMACHY besitzt dabei den Sonderstatus eines *Announcement of Opportunity* (AO) Sensors. AO-Instrumente sind der ENVISAT-Mission von nationalen Agenturen beigestellte Geräte, d.h. sie werden unter nationaler Zuständigkeit finanziert und entwickelt. Für SCIAMACHY zeichnen Deutschland und die Niederlande, letztere mit einer belgischen Beteiligung, verantwortlich. Für das DLR beinhaltet dies nicht nur Aufgaben im Bereich der Projektleitung, sondern auch technisch-wissenschaftliche Herausforderungen hinsichtlich

- Algorithmen- und Prozessorentwicklung zur operationellen Datenverarbeitung im ENVISAT-Bodensegment, sowohl für Level 1b als auch Level 2
- Instrumentbetrieb, einschließlich Planung, Messkonfiguration und Langzeitüberwachung.

Auf beiden Gebieten leistet unsere Abteilung wichtige Beiträge zum Gelingen der SCIAMACHY-Mission. Zusammen mit ESA als ENVISAT-Missionsbetreiber, *Astrium* und *Dutch Space* als Leiter der industriellen Konsortien und zahlreichen Arbeitsgruppen innerhalb der wissenschaftlichen SCIAMACHY-Gemeinde haben wir damit erreicht, die vor dem Start spezifizierte Missionsdauer von 5 Jahren erfolgreich zu bewältigen. Damit trägt SCIAMACHY zum hervorragenden Zustand von ENVISAT bei und rechtfertigt ebenfalls die 2006 getroffene Entscheidung, diese Erdbeobachtungsmission zunächst bis 2010 und, falls möglich, auch darüber hinaus zu verlängern.

In den bisherigen Jahresberichten der OE *Atmosphärenprozessoren* wurde regelmäßig über die geleisteten Arbeiten berichtet, sowohl aus dem algorithmischen als auch dem operationellen Bereich. Hier soll nun keine Wiederholung der bisher publizierten Aussagen erfolgen, sondern der „Lebenslauf“ SCIAMACHYs im erdnahen Orbit in den letzten Jahren erläutert werden.

### Betriebsstatistik

Seit dem 11. März 2002, als SCIAMACHY zum ersten Mal angeschaltet wurde, arbeitet unser Instrument fast kontinuierlich im erdnahen Weltraum. Der erste Teil der annähernd 6-monatigen Commissioning Phase beinhaltete einen umfangreichen instrumentellen funktionalen Check-Out, das Öffnen kritischer Mechanismen (Nadir- und Limb-Fenster, Radiant Cooler) und die Charakterisierung der Sensoreigenschaften zu Missionsbeginn („Begin of Life“ – BOL). Anfänglich noch bestimmt durch die strikten Rahmenbedingungen der Commissioning Phase konnte sich bereits ab Anfang August 2002 ein quasi-routinemäßiger Messbetrieb etablieren, der dem späteren tatsächlichen Routinebetrieb in vieler Hinsicht glich. Unter diesen Voraussetzungen wurden die geplanten Validierungskampagnen erfolgreich unterstützt. Mitte Dezember 2002 erfolgte schließlich die Definition der Final Flight Instrumentkonfiguration, dem sich ab Januar 2003 der offizielle Beginn des Routinebetriebs anschloss. Dies war auch der Zeitpunkt, an dem die Betriebsverantwortung auf AOP-Seite von Industrie auf das SCIAMACHY Operations Support Team (SOST) überging.

Vom Start im März 2002 bis zum Ende des Jahres 2006 hat SCIAMACHY mehr als 25000 Orbits zurückgelegt. Das vor dem Start definierte Betriebskonzept, welches ein praktisch kontinuierliches Messprogramm entlang der Umlaufbahn vorsah, konnte wie geplant umgesetzt werden. Dies führte zu sehr hohen Werten für die Verfügbarkeit des Instruments. Im Mittel werden in mehr als 95% eines Orbits Messungen durchgeführt. Annähernd beeindruckend fällt auch die Statistik über längere Zeiträume aus (Abb. 2-2). War die Commissioning Phase noch durch eine etwas höhere Frequenz an instrumentell bedingten Anomalien gekennzeichnet (siehe nachfolgenden Abschnitt), so übertraf der mittlere jährliche Duty Cycle im Routinebetrieb immer 90%. Besonders hervorzuheben sind monatelange Phasen, in denen die Messungen nur durch kurze Perioden geplanter ENVISAT-Aktivitäten unterbrochen werden mussten.

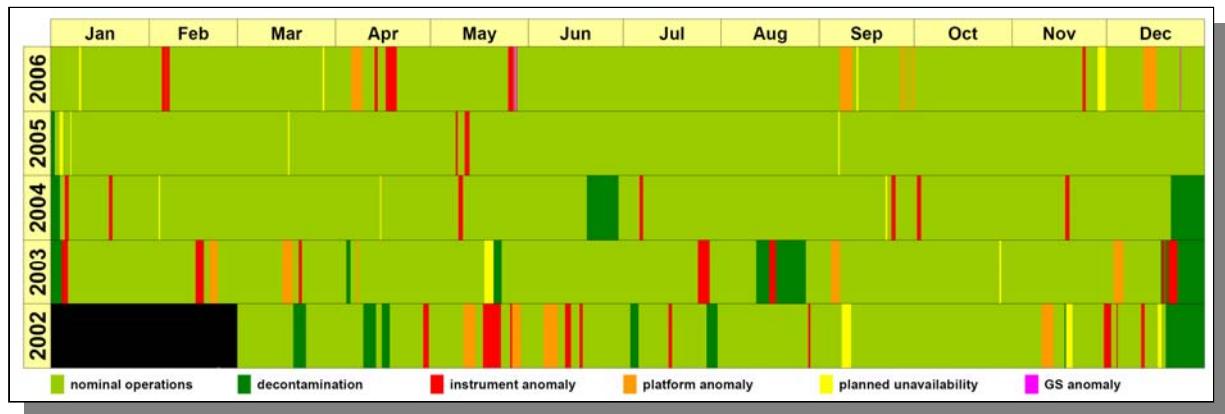


Abb. 2-1: Verfügbarkeit SCIAMACHYs seit Missionsbeginn

### Betriebsunterbrechungen

Die Abb. 2-1 lässt erkennen, dass die häufigsten ungeplanten Abschaltungen entweder auf Instrument- oder Plattformebene geschehen. In all diesen Fällen bringt sich SCIAMACHY autonom in einen sicheren Zustand unterhalb des MEASUREMENT Modus. Auf Instrumentebene tragen zwei Ereignisse zu derartigen Anomalien bei:

- Macrocommand Check Error: Aufgrund einer Inkonsistenz in der S/W der Instrument Control Unit (ICU) kann es gelegentlich zu einer Blockade der Schnittstelle zwischen ICU und dem ENVISAT Nutzlastcomputer kommen, die nachfolgend den Transfer des Instruments in einen Sicherheitsmodus auslöst. Eine S/W-Korrektur erfolgte im Oktober 2002, welche die Häufigkeit dieses Fehlers deutlich reduzierte, sodass er seitdem im Mittel nur mehr 1-2-mal pro Jahr auftrat.
- Single Event Upset (SEU): Im erdnahen Orbit treffen kontinuierlich hochenergetische geladene Teilchen des Sonnenwindes auf ENVISAT und seine Nutzlast. Einige dieser Teilchen, insbesondere schnelle Protonen, können in elektronischen Bauteilen zu Zustandsänderungen führen, welche die Kontrolllogik des Instruments als Fehler interpretiert und deshalb auch in solchen Fällen einen Transfer in einen Sicherheitsmodus initiiert. Hohe Teilchendichten treten vor allem in der Südatlantischen Anomalie (SAA) aber auch entlang der Polgebiete auf. Immer wenn sich ENVISAT in diesen Gebieten befindet, erhöht sich die Wahrscheinlichkeit eines SEU, wobei man ihr Auftreten entlang der gesamten Umlaufbahn nie ausschließen kann. Mit insgesamt 14 derartigen Vorkommnissen in 4 Jahren bilden die SEU die häufigsten Anomalieauslöser.

Geplante Unterbrechungen entstehen durch besondere Bahnmanöver („Out-of-Plane“) oder Arbeiten an der Plattform, beispielsweise Updates an der S/W des Service Modules. Falls möglich, versucht man ihren Einfluss auf den Messbetrieb so gering wie möglich zu halten.

Auch wenn jede Anomalie eine „unangenehme“ Unterbrechung der Messroutine darstellt – noch verstärkt durch die scheinbare Häufung an Wochenenden oder Feiertagen – so sind durch das Zusammenspiel zwischen ESOC und SOST inzwischen recht kurze Wiederanschaltzeiten möglich, die den Verlust an Messdaten auf ein Minimum reduzieren. Bei SCIAMACHY-bedingten Anomalien erreichen wir mittlere Recoveryintervalle von etwa 1.5 Tagen, wobei der größte Teil davon für das Erreichen eines thermisch stabilen Zustandes benötigt wird. Etwas länger dauern die Wiederanschaltzeiten nach Plattformanomalien. Hier muss sich SCIAMACHY in die Sequenz der weiteren Instrumente einordnen. Zudem kann man annehmen, dass Fehleranalysen auf Plattformebene generell vielschichtiger sind und deshalb mehr Zeit erfordern.

### Messbetrieb

In den Jahren vor dem Start war von SOST ein komplexes Betriebskonzept entwickelt worden, das auf die im Instrumentdesign definierten per Makrokommando programmierbaren States und Timelines aufbaute und gleichzeitig die Rahmenbedingungen des ENVISAT-Betriebs berücksichtigte. Ziel dieses Konzepts war, einerseits die im Instrument vorhandene Flexibilität maximal auszunutzen, andererseits

dafür aber einen so weit wie möglich reduzierten Kommandierungsaufwand betreiben zu müssen. In Zusammenarbeit mit Industrie und Kalibrierungsexperten gelang es, ein ausgewogenes Verhältnis zwischen Mess- und Kalibrier- bzw. Monitoringfunktionen zu finden. Etwa die Hälfte der 70 an Bord gespeicherten States führt reine wissenschaftliche Messungen durch (Nadir, Limb, Okkultation), die andere Hälfte liefert Informationen zur Charakterisierung des Instrumentzustandes. Entsprechend der wissenschaftlichen Anforderungen ließen sich die States zu Timelines gruppieren, wodurch sich Messphasen autonom, gestartet nur durch ein einziges Kommando, abarbeiten ließen. In einigen Fällen überdecken einzelne Timelines bis zu 2/3 eines Orbits. Da die Aktivierung von Timelines gänzlich vom Stand der Sonne oder des Mondes abhängt, mussten in eingehenden Orbitanalysen deren saisonale Abhängigkeiten untersucht und als Timelineeigenschaften parametrisiert werden. Damit gestaltet sich der Planungsprozess als Umsetzung der geforderten Missionsszenarien, jeweils abhängig von solaren bzw. lunaren himmelsmechanischen Voraussetzungen. Gerade die Mondbeobachtungen stellten eine Herausforderung dar, da die Verknüpfung des Laufs des Mondes mit der Bahnbewegung von ENVISAT sowie den Gesichtsfeldern von SCIAMACHY stark variable Sichtbarkeitsbedingungen zur Folge hat. Um dabei alle Messanforderungen erfüllen zu können, sind mehr als die an Bord speicherbaren 63 Timelines nötig, sodass der Austausch von Timelines zur optimalen Nutzung der Mondokkultationen einen wichtigen Teil der Planungsaktivitäten einnimmt.

Mit Beginn des SCIAMACHY-Betriebs kurz nach dem Start konnte das hier nur kurz beschriebene Konzept seine Tauglichkeit unter Beweis stellen. Es ermöglichte, das sehr komplexe Messprogramm der frühen Commissioning Phase fehlerfrei zu bewältigen. In einem Zeitraum von ca. 130 Tagen wurden 5500 Timelines gestartet, die wiederum mehr als 78000 States ausführten. Viele dieser States waren extra für Commissioning-Zwecke definiert und erforderten häufiges Umkonfigurieren des Instruments, manchmal innerhalb weniger Orbits. Am Ende der Commissioning Phase konnten schließlich die Parameter der Final Flight States und Final Flight Timelines kommandiert werden um den Routinebetrieb aufzunehmen. Da das Betriebskonzept entweder aufgrund von sich wandelnden Instrumenteneigenschaften oder neuen wissenschaftlichen Anforderungen nicht als unveränderlich angesehen werden kann, begann mit dem Routinebetrieb die Umsetzung des Operations Change Request (OCR) Verfahrens. Es erlaubt, den Final Flight Status des Instruments bzgl. Missionsszenarien, States und Timelines in einer kontrollierten Weise zu ändern. Der OCR-Mechanismus ist auch erforderlich, um zu gewährleisten, dass das Messprogramm so weit wie möglich in immer der gleichen Art und Weise abläuft, eine der Voraussetzungen, um lange stabile Zeitreihen für klimatologische Untersuchungen

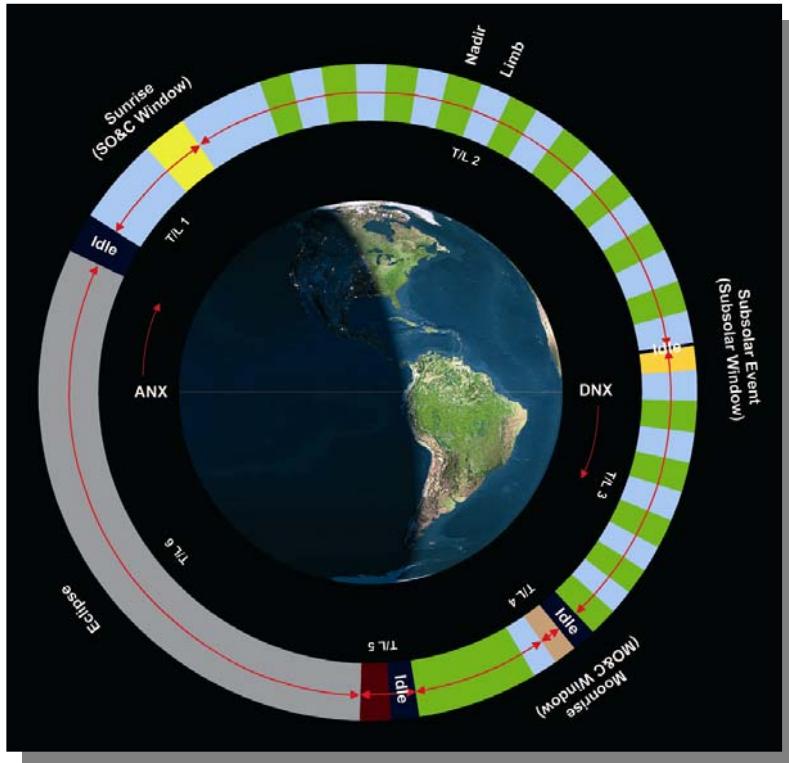


Abb. 2-2: Schematischer Standard-Messorbit SCIAMACHYs. Limb- (grün) und Nadir-States (blau) wechseln sich auf der Tagseite ab, teilweise unterbrochen durch Sonnen- bzw. Mondbeobachtungen

zu erhalten. Im Normalfall, d.h. keine Mondokkultationen, keine speziellen Messkampagnen, kann der komplette Orbit mit nur 4 Timelines abgedeckt werden. Sie arbeiten ein Standardprogramm ab, welches mit einer Beobachtung der Sonnenokkultation über der Nordhemisphäre beginnt. Danach folgt eine Sequenz abwechselnder Limb-/Nadirmessungen mit  $\pm 480$  km Scanbreite. Diese sind zeitlich so angeordnet, dass das gleiche Atmosphärenvolumen sowohl in Limb- als auch Nadirgeometrie untersucht

wird, wodurch in der Datenanalyse Unterscheidungen zwischen Troposphäre und Stratosphäre ermöglicht werden. Nahe des Äquators erreicht die Sonne ihren scheinbar höchsten Stand und kann über ein Fenster im Instrument zu speziellen Eichmessungen herangezogen werden. Danach werden Limb-/Nadirsequenzen fortgesetzt, entweder bis zum Eintritt in den Erdschatten oder bis eine Mondokkultation möglich ist. Auf der Nachtseite des Umlaufs beenden geeignete Kalibrieraktivitäten wie beispielsweise Dunkelstrombestimmungen das Messprogramm, bis nach insgesamt 100 Minuten ein neuer Sonnenaufgang den folgenden Orbit eröffnet (Abb. 2-2).

## Thermalbetrieb

SCIAMACHY ist ein hochkomplexes Spektrometer, das zahlreiche optische Komponenten enthält. Die spezifizierten Leistungen sowohl dieser Komponenten als auch des Gesamtsystems können nur erreicht werden, wenn sich Betriebsbedingungen im Orbit nicht von denjenigen am Boden unterscheiden, unter denen das Instrument charakterisiert und kalibriert wurde. Eine der wichtigsten Kenngrößen bildet hierbei das thermale Verhalten. Störungen des Thermalstatus werden durch die wechselnden Beleuchtungsverhältnisse im Orbit und die im Instrument durch den Betrieb erzeugte Wärme hervorgerufen. An Bord verfügt SCIAMACHY über zwei Systeme, mit denen die Temperaturen kontrolliert werden können:

- Active Thermal Control – ATC: Es hält die Temperatur der optischen Bank, d.h. der optischen Komponenten nahe des Idealwertes zwischen  $-17.6$  und  $-18.2$  °C. Das ATC arbeitet autonom über drei Regelkreise.
- Thermal Control – TC: Um die spezifizierten Signal-zu-Rauschverhältnisse zu erreichen, müssen die Betriebstemperaturen der Detektoren deutlich unter denjenigen der optischen Bank liegen. Die niedrigsten Temperaturen mit ca. 140-150 K verlangen dabei die beiden Detektoren für das kurzwellige Infrarot. Das TC-System besteht aus einem Strahlungskühler (Radiant Cooler), Heatpipes zum Transport thermischer Energie zwischen Detektoren und Kühler sowie drei Heizern. Da sich das TC-System nicht selbst innerhalb der erlaubten Temperaturgrenzen einregeln kann, muss es im Gegensatz zum ATC häufiger durch Anpassung der Heizer justiert werden.

Im Juni 2002 wurden beide Systeme so eingestellt, dass man damit die spezifizierten Temperaturen erreichte. Seitdem benötigte die ATC keine weiteren Korrekturen mehr; die resultierende mittlere Temperatur der optischen Bank ist von sehr hoher Genauigkeit gekennzeichnet (Abb. 2-3). Die Parameter des TC-Systems mussten zu Beginn des Routinebetriebs noch relativ oft geändert werden, bis ausreichend Erfahrung mit der Reaktion der Detektoren auf die kommandierte Heizleistung gewonnen war. Nach einer Anpassung der thermalen Empfindlichkeitsmatrix (Temperaturänderung der Detektoren als Funktion der Heizleistung) braucht man das TC-System nun im Mittel nur noch 1-2-mal pro Jahr zu justieren. Der saisonale Temperaturverlauf der Detektoren 1 bis 6 weist ein sehr reguläres Muster auf (Abb. 2-4). Wegen der engen Temperaturgrenzen bestimmen vor allem die Detektoren 4 und 5, wann eine Neueinstellung der TC-Heizer erforderlich ist. Gänzlich anders verhält es sich mit den beiden kurzweligen Infrarotdetektoren 7 und 8. Hier war lange Zeit das Temperaturverhalten durch die Existenz einer Eisschicht im Lichtweg (siehe nächstes Kapitel) gekennzeichnet. Erst als die Eisbildung durch eine modifizierte Dekontaminationsprozedur weitgehend verhindert werden konnte, zeigten sich auch hier jahreszeitliche Schwankungen (Abb. 2-5).

Die Thermalsysteme waren für eine 5-jährige Missionsdauer ausgelegt. Dabei hatte man bereits vor dem Start vorhergesagt, dass am Ende der Mission (End of Life – EOL) aufgrund von Degradation nicht mehr alle thermalen Spezifikationen aufrecht erhalten werden können. Durch Alterungseffekte sollten beispielsweise die Temperaturen bestimmter Detektoren die definierten Grenzen überschreiten und nicht mehr zurückgeregelt werden können. Im Gegensatz zu diesen Vorhersagen erwiesen sich jedoch beide Systeme als weit weniger alterungsanfällig. Erst gegen Ende der Mission zeigten sich in den Thermaldaten Anzeichen einer Degradation. Die Temperaturen der Detektoren erhöhen sich mit einer Rate von etwa 0.2-0.3 K (Kanäle 1-6) bzw. 1 K (Kanäle 7 und 8) pro Jahr unabhängig von saisonalen Schwankungen. Auch im ATC-System erreicht man in naher Zukunft spezifizierte Limits und muss entsprechend gegensteuern. All diese Effekte werden den Thermalbetrieb in einer verlängerten Mission beeinflussen (siehe übernächstes Kapitel).

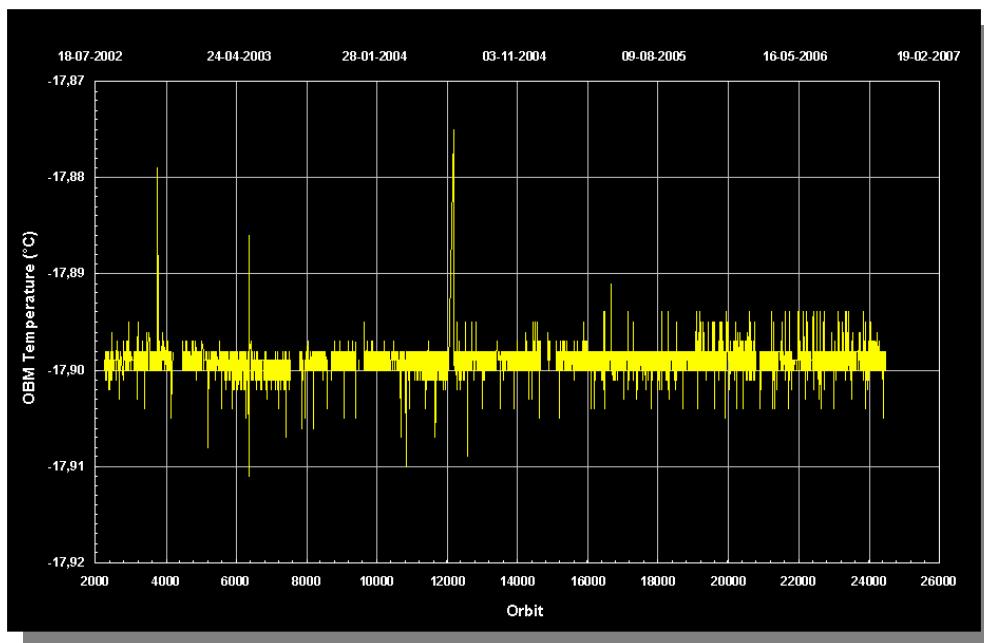


Abb. 2-3: Mittlere OBM-Temperatur pro Orbit seit Beginn des wissenschaftlichen Messbetriebs.

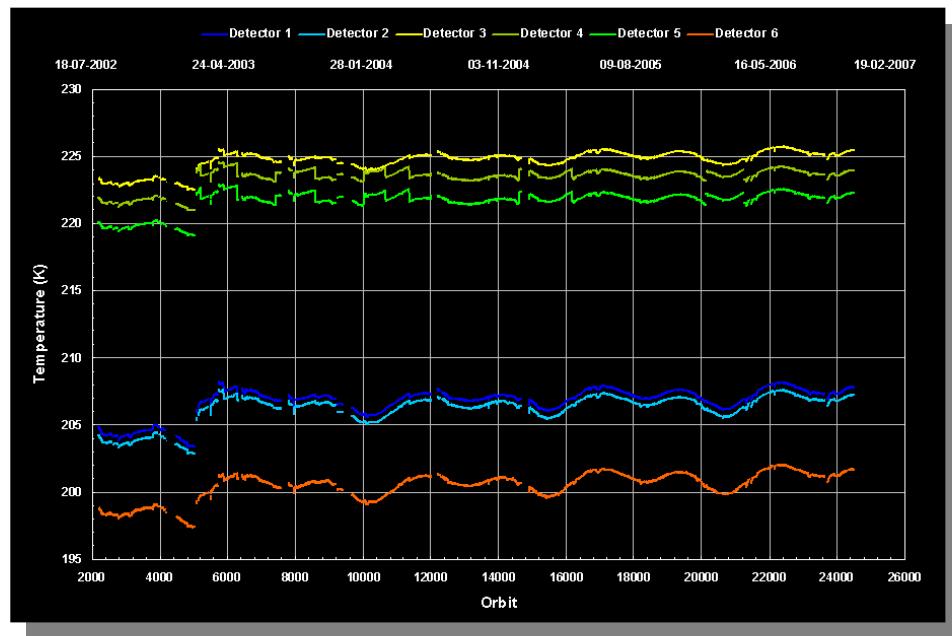


Abb. 2-4: Mittlere Detektortemperaturen pro Orbit für die Kanäle 1-6. Zeiten unterhalb des MEASUREMENT-Modus und Dekontaminationen sind ausgeblendet. Man erkennt den sich jährlich wiederholenden saisonalen Gang.

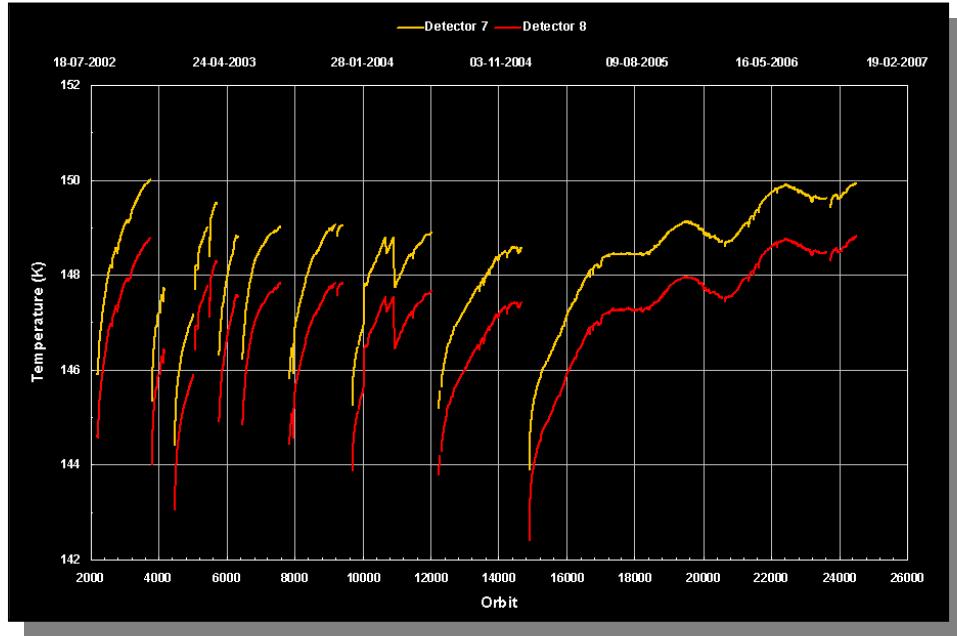


Abb. 2-5: Mittlere Detektortemperaturen pro Orbit für die Kanäle 7 und 8. Zeiten unterhalb des MEASUREMENT-Modus und Dekontaminationen sind ausgeblendet. Man erkennt zunächst den Einfluss der Eisschicht und ab ca. Orbit 18000 das Sichtbarwerden der saisonalen Trends.

## Instrumentverhalten

Qualitativ hochwertige Messdaten können nur erzeugt werden, wenn sich das Instrument im Orbit entsprechend seiner Spezifikationen verhält. Es ist eigentlich unrealistisch anzunehmen, dass bei einem derartig komplexen Spektrometer alle festgestellten In-Orbit Eigenschaften exakt den Vorgaben entsprechen. Trotzdem hat sich SCIAMACHY im Verlauf der letzten Jahre bei ausgezeichneter Leistung extrem stabil verhalten. Die gewonnenen Daten übertreffen in vielerlei Hinsicht die Erwartungen. Um das erreichte Niveau zu halten und bei Bedarf zu erhöhen, beteiligen sich zahlreiche Gruppen an der Kalibrierung und Überwachung des Instruments. Dabei haben sich eine Reihe von Besonderheiten gezeigt, deren Verständnis – im Falle von Anomalien auch deren Korrektur – es erlaubte, die Datenqualität weiter zu verbessern. Erwähnenswerte Themen sind:

*Eis in Kanälen 7 und 8 einschließlich Dekontamination:* Bereits kurz nach Aktivieren des Radiant Coolers zeigte sich in den Daten der kurzweligen Infrarotdetektoren 7 und 8 eine drastische Reduzierung der Signalhöhe. Untersuchungen ließen darauf schließen, dass sich eine Eisschicht im Lichtweg dieser Kanäle gebildet hatte. Das Eis stammte vermutlich von Wasser, das aus ENVISAT-Komponenten ausgaste und an den kältesten Detektoren kondensierte. Über eine durch das Eis erhöhte Infrarotabsorption führte die stetig wachsende Schicht auch zu einem stetigen Temperaturanstieg in diesen beiden Kanälen (siehe Abb. 2-5). Auch regelmäßiges Dekontaminieren, d.h. Aufheizen der optischen Bank und der Detektoren, brachte keine Abhilfe. Zwar verschwand das Eis zunächst, doch nach dem Abkühlen auf nominelle Betriebstemperaturen begann sich das Wasser wieder als Eis niederzuschlagen. Offensichtlich bestand keine Möglichkeit, es dauerhaft aus Kanal 7 und 8 zu entfernen. Eine zufällige Anomalie während der Abkühlphase nach einer Dekontamination um die Jahreswende 2003/2004 half schließlich, das Eisproblem zu lösen. Nach dieser Anomalie war die Bildung der Eisschicht ausgeblieben, vermutlich durch die Aktivierung einer zweiten – unbekannten – Kältefalle im Detektorsystem. Wir nehmen an, dass durch die anomaliebedingte Abschaltung des Instruments die Detektortemperaturen zwar unter die Betriebstemperatur fielen, sich das Wasser aber auf einer deutlich kälteren Stelle beim Detektor außerhalb des Lichtweges als Eis absetzte. In einer Dekontamination 2004/2005 wurde die Anomalie per Kommando simuliert und damit diese „Kältefalle“ wieder aktiviert. Seitdem sind die Kanäle 7 und 8 weitgehend stabil.

Optischer Throughput: Der 5-jährige Aufenthalt im Orbit führte wie erwartet zur Degradation von optischen Komponenten. Erfreulicherweise fiel sie jedoch viel geringer aus als befürchtet. Seit August 2002, dem Beginn quasi-routinemäßiger Messungen, ist das Signal im UV-Bereich um 25% (Detektor 1) bzw 15% (2) gesunken. Bei sichtbaren Wellenlängen beobachtet man dagegen weiterhin Throughput-Werte, die weniger als 5% unter dem Maximalwert liegen. Diese insgesamt recht geringe Degradation gewährleistet weiterhin hohe Signal-zu-Rauschverhältnisse.

Tangentenhöhe: Limbprofile erfordern eine genaue Kenntnis der aus Scannerdaten abgeleiteten Sichtlinie während eines horizontalen Scans, d.h. der Tangentenhöhe. Die aus SCIAMACHYs Limbmessungen erhaltenen Profile wiesen zu Beginn der Mission eine Verschiebung gegenüber Referenzprofilen auf von bis zu 3 km, die auf einen systematischen Effekt hindeuteten. Auch MIPAS und GOMOS registrierten eine ähnliche Problematik im Pointing. Es stellte sich schließlich heraus, dass die Ursache in der Art und Weise zu suchen war, wie die ENVISAT-Plattform die vom ESOC kommandierte Orbit-Statevektorinformation verarbeitete. Eine Änderung der Statevektorgenerierung am Boden verbesserte die Situation wesentlich, jedoch zeigt sich immer noch ein Bias von mehr als 1 km mit einer saisonalen Variation. Weitere Untersuchungen sind erforderlich, um eine Höhenzuordnung von Limbprofilen mit einer Genauigkeit von wenigen 100 m zu erreichen.

Die hier beschriebenen drei Themen stellen nur einen kleinen Ausschnitt der Gebiete dar, auf denen versucht wird, die Datenqualität weiter zu verbessern. Kontinuierliche Arbeiten in den Bereichen Kalibrierung und Monitoring sind eine Voraussetzung dafür, das volle Potenzial, welches in SCIAMACHY steckt, auszuschöpfen.

## Ausblick

Wenn die ENVISAT-Mission ab März 2007 in ihre "Verlängerung" geht, wird auch SCIAMACHY sein Messprogramm wie bisher fortsetzen. Trotzdem verlangt diese Phase gewisse Betriebsanpassungen, da das Instrument ursprünglich für eine Lebensdauer von 5 Jahren spezifiziert wurde. Vor allem Komponenten, die im Laufe des Betriebs ständig belastet werden, bekannt unter der Bezeichnung Life Limited Items – LLI, werden erhöhte Aufmerksamkeit erfordern. Zu den LLI zählen *Aperture Stop* Mechanismus, *Neutral Density Filter*, *Nadir Calibration Window* Mechanismus sowie die Weißlicht- und Spektrallampe. Um sicherzustellen, dass der Gebrauch der für Sonnenbeobachtungen notwendigen LLI nicht die vorgegebenen Grenzen überschreitet, wurden die Missionsszenarien modifiziert. Damit ist sichergestellt, bis mindestens 2010 innerhalb der spezifizierten Anzahl von Betriebszyklen bzw. Betriebsdauer zu bleiben.

Wie bereits oben beschrieben wurde, können auch die Thermalsysteme nicht von Alterungseffekten verschont bleiben, wenngleich diese bisher wesentlich geringer als erwartet ausfallen. Deshalb wird es in Zukunft nötig sein, das ATC-System neu zu justieren. Das TC-System, das die Detektortemperaturen reguliert, wird am Ende einer verlängerten Mission womöglich einige Detektoren nicht mehr innerhalb der Temperaturgrenzen halten können. Wir hoffen aber, dass bis dahin die Datenverarbeitung derartige Temperatureffekte recht gut bewältigen kann und ihren Einfluss auf die Ergebnisse gering hält. Schließlich sei auf die erhöhten Anforderungen an das Langzeitmonitoring hingewiesen. Komponenten, die bisher als unkritisch betrachtet wurden, z.B. beide Scannermechanismen, sollten demnach auch regelmäßig überwacht werden. Bisherige Untersuchungen haben gezeigt, dass hierfür die bestehenden Prozeduren und Werkzeuge ausreichen.

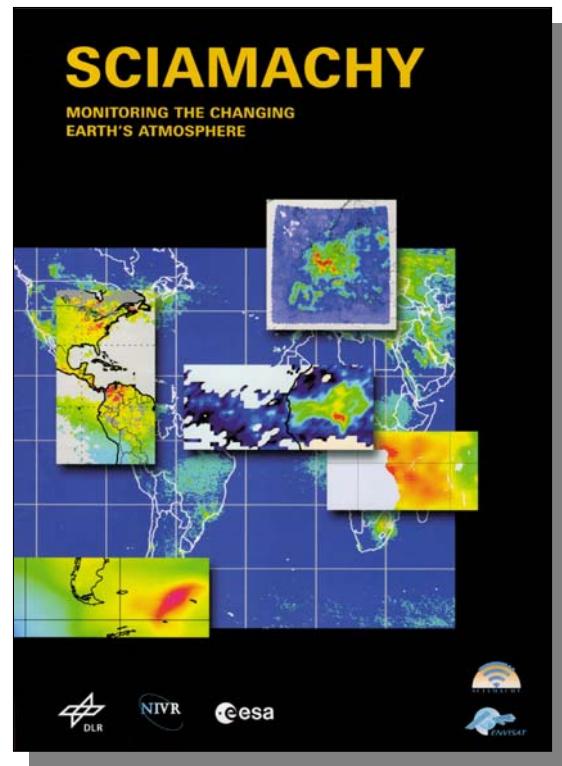


Abb. 2-6: Titelseite des SCIAMACHY-Buches

Im Sommer 2006 wurde das Buch *SCIAMACHY – Monitoring the Changing Earth's Atmosphere* veröffentlicht. Hintergrund für das federführend in unserer Abteilung entstandene Werk war der bisher sehr erfolgreiche Verlauf der Mission, der es rechtfertigte, für die potenzielle Leserschaft – Atmosphären-Nutzergemeinde, EO-Management, Lehre und interessierte Öffentlichkeit – einen möglichst vollständigen Überblick bereitzustellen. Deshalb beginnt der Inhalt mit einer Erläuterung, weshalb Atmosphärenforschung aus dem erdnahen Weltraum überhaupt nötig ist, bevor in den Kapiteln des technischen Teils die ENVISAT-Plattform, das Instrument und sein Betrieb sowie die Grundlagen der Charakterisierung und Kalibrierung dargestellt werden. Eine Zusammenfassung der ersten Jahre im Orbit schließt diesen Themenkomplex ab. Danach folgen Kapitel, die einen Einblick in die algorithmischen Grundlagen zur Ableitung geophysikalischer Atmosphärenparameter vom UV- bis zum kurzweligen Infrarotbereich vermitteln, gefolgt von ihrer Umsetzung im ENVISAT-Bodensegment sowie den Aktivitäten zur Validierung der Produktinhalte. Schließlich wird im letzten Kapitel das enorme Potenzial SCIAMACHYs gezeigt, in dem auf einer Exkursion durch die Atmosphäre, von der Troposphäre bis zur Mesosphäre mit einem „Abstecher“ bis zur Sonne, bisher erzielte wichtige Resultate gezeigt werden. Gerade dieses Kapitel verdeutlicht, mit welch hohem Aufwand operationelle und wissenschaftliche Einrichtungen die Datenauswertung betreiben, um den Informationsgehalt der Daten bestmöglichst zu nutzen. So wie SCIAMACHY das Ergebnis einer europaweiten Kooperation im Großen ist, so war auch die Erstellung des Buches das Produkt intensiver Zusammenarbeit im Kleinen. IMF-AP steuerte dabei neben der Editor-Aufgabe und organisatorischen Verantwortlichkeiten mehrere Kapitel bei; die weiteren Texte stammen aus der Feder von Autoren kooperierender Institute. Mit der Veröffentlichung des Buches konnte letztendlich der Öffentlichkeit die SCIAMACHY-Mission in einem angemessenen Rahmen präsentiert werden.

### 3. Laufende Projekte und Vorhaben

#### 3.1 Status of the Ozone Monitoring SAF

*D. Loyola, P. Valks, W. Zimmer, S. Kiemle (DFD-IT), B. Pflug (MF-GW), B. Aberle, S. Slijkhuis, L. Butenko, T. Ruppert (DFD-MM)*

The Ozone Monitoring Satellite Application Facility project (O3M-SAF) is a key component of EUMETSAT's Polar System (EPS) Ground Segment. The EPS mission comprises 3 MetOp satellites that will supply operational products during the next 14 years, providing unique data products for GMES. The first MetOp, successfully launched in October 2006, initiated a new era for atmospheric remote sensing, moving GOME from research (ESA) to operational (EUMETSAT) applications.

##### Operational Readiness Review A – Part I

The first part of the operational readiness review (ORR-A) was held in Helsinki at end of 2006. We presented the status of the O3M-SAF facilities and the corresponding test results. All test were successfully passed, there was no major RID on the DLR's contributing system.

Two EUMETCast receiving stations are installed and operational at DFD:

- 1.2 m antenna, Dell Optiplex minitower, 3.0 GHz, 1 GB mem, 80 GB disk, Windows OS
- Tellique DVB Ingest SW, DISPATCH/LIMIT and HOTSTANDBY SW
- one station had signal (gain) failure, reception continued seamlessly

The *Universal Processor for Atmospheric Spectrometers* (UPAS) was installed in the operational environment:

- UPAS operational on high-availability cluster system (NRT processing and delivery):
  - 2 Transtec 1002L AMD Opteron PCs, 2.4 GHz, 4 GB RAM
  - Red Hat Enterprise Linux, incl. Cluster Suite
  - Transtec 6100 RAID system, 4 TB, dual controller, fiber channel
- UPAS operational on two additional hosts for off-line processing
- configurations for GOME NRT, offline, GOME-1, reprocessing

The *Data Information and Management System* (DIMS) was configured and deployed:

- two Processing System Management (PSM) instances operational:
  - NRT and offline processing, 4 NRT destinations: EUMETCast (BUFR only – reception @ FMI), WDC RSAT, KNMI and LAP
  - Product quality assurance tool
- Product Library (PL) archiving operational for L2 PDU (temporary), L1b orbits, L2 orbits
- WDC RSAT provides operational access to L2 PDU and L2 orbits (both HDF5)
- User Information Interface (UI) – UMARF interfacing operational for product upload
- UMARF SAF client (prototype) operational in DLR demilitarized zone

##### Continuous Development and Operations Phase

A very important task for the project was the preparation of the *Continuous Development and Operations Phase* (CDOP) proposal. This proposal regulates the next 5 years of the project, starting in March 2007. The O3M-SAF will be renamed to *Ozone and Atmospheric Chemistry Monitoring SAF* in the CDOP phase. The new name makes clearer that the O3M-SAF is responsible for all atmospheric aspects within the SAF network. DLR was able to even enhance its role in the CDOP phase. On the scientific aspects, DLR will work on the enhancement of the GOME-2 total column operational products ( $O_3$ ,  $NO_2$ ,  $BrO$ ) and the experimental products ( $SO_2$ ,  $OCIO$ ,  $HCHO$ ). On top of that, new products will be developed for the determination of tropospheric  $O_3$  and  $NO_2$ , total columns of  $H_2O$ , as well as the joint development of GOME-2 and IASI products. An inter-SAF activity will be also initiated together with DFD-KA and CM-SAF for the determination of aerosol products.

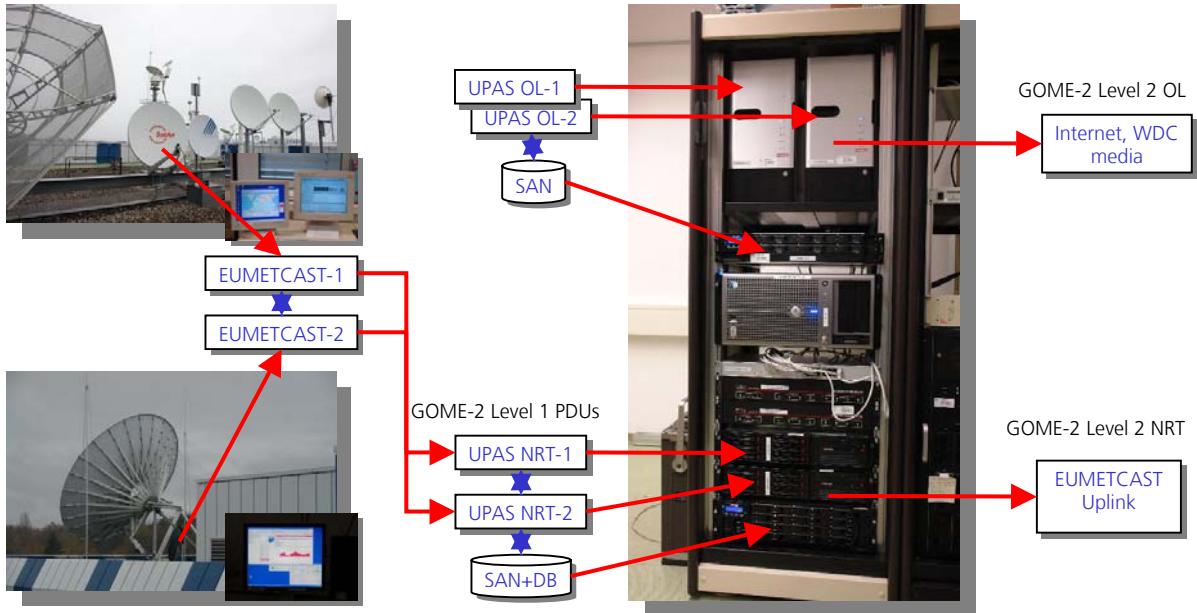


Fig. 3-1: O3M-SAF operational equipment at DLR.

### First GOME-2 Data

The GOME-2 sensor is currently in the In-Orbit Verification phase of the Commissioning activities. EUMETSAT provided us with initial GOME-2 level 1b test products including Sun calibration data at the beginning of 2007. Even as the level 1b calibration is preliminary and as such quality of the data cannot be guaranteed at this point, DLR was able to produce the first GOME-2 images.

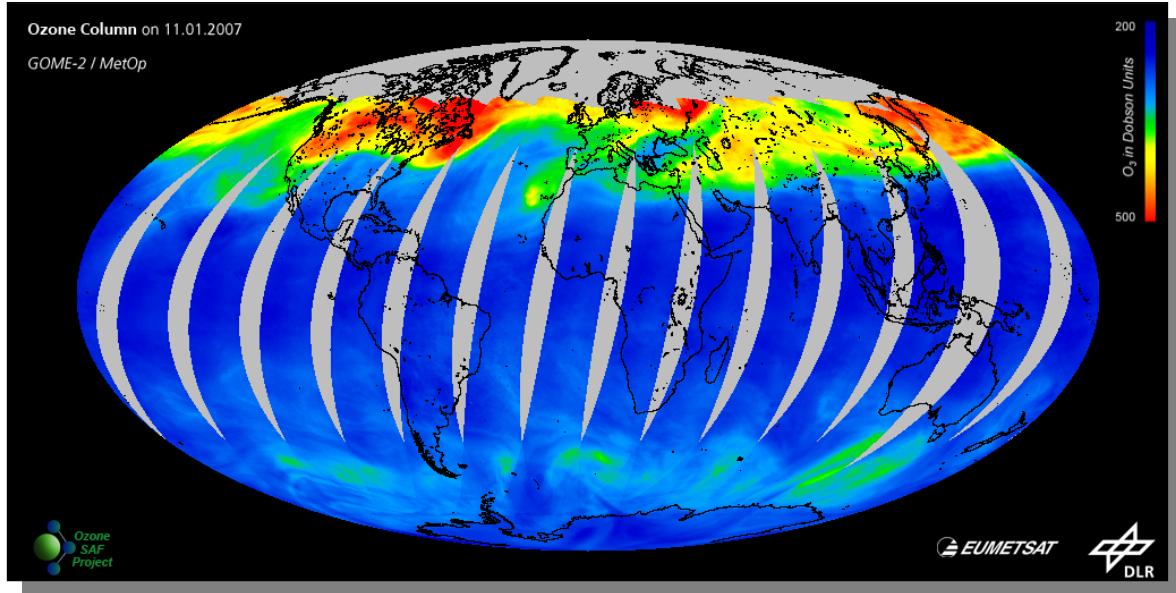


Fig. 3-2: Total ozone amount in the atmosphere as measured by the GOME-2 instrument on 11 January 2007 during one day of successive orbits of the MetOp-A satellite. A global coverage at equator can be almost reached on a daily basis; the field of view of the instrument covers 1920 km.

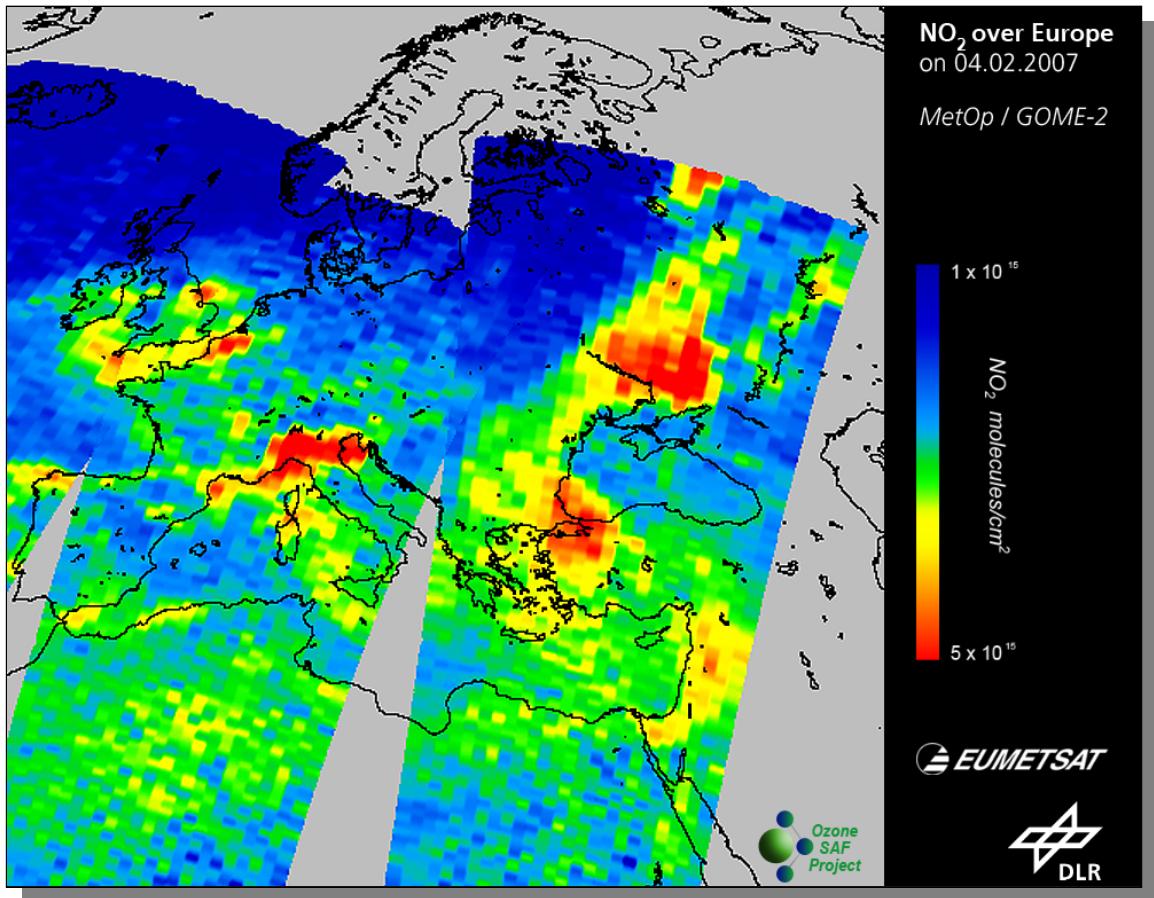


Fig. 3-3: Total amount of nitrogen dioxide ( $\text{NO}_2$ ) in the atmosphere above Europe on 4 February 2007, as measured by the GOME-2 instrument on MetOp-A. With the GOME-2 instrument, nitrogen dioxide can be measured worldwide on a daily basis, and at a city size scale. The GOME-2 pixel size is 80x40 km.

### 3.2 Update of the GOME Data Processors

*D. Loyola, S. Slijkhuis, B. Aberle, M. Coldewey-Egbers, W. Zimmer, P. Valks, L. Butenko, T. Ruppert (DFD-MM)*

The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME) is the first atmospheric European sensor flying on board the Second European Remote Sensing Satellite (ERS-2) since April 1995. Since its launch, we have developed the required level 0-1 (L01) and level 1-2 (L12) processing systems and are continuously improving their algorithms. In 2006 the operational NRT and Off-line GOME Data Processors (GDP) were updated under a dedicated D-PAF CCN.

#### GDP Update Objective and L01 Re-hosting

The main objectives of the GDP upgrade project were to

- provide a homogeneous GOME level 1 dataset for the complete mission improving wavelength calibration and other algorithms, and including all valid daily Sun calibrations.
- reprocess the GOME level 2 dataset using the new level 1 products expecting improvements for data newer than 2003 (daily Sun calibration).
- provide GOME level 2 products also in HDF5 format ensuring the forward compatibility with GOME-2.

The GDP L01 processing software had been re-hosted from Solaris to Linux. While the old version used Solaris Workshop 3.0 as development environment and SCCS as version control system, the new version is compiled using Gnu C++ version 3.3.3 under SUSE Linux 9.1 and put under version control using

“subversion”. The database system, which was Objectivity/DB, had been replaced by the open-source database PostgreSQL.

#### GDP L01 Algorithm Updates

The update covered changes in parameter settings (spectral and solar calibration), algorithm changes for L01 processing, and algorithm changes for the L01 extraction software.

Spectral lines, which during the GOME lifetime often showed erratic behaviour, were removed from the spectral line database. This resulted in improved wavelength stability; especially in channels 3 and 4 (see fig. 3-4).

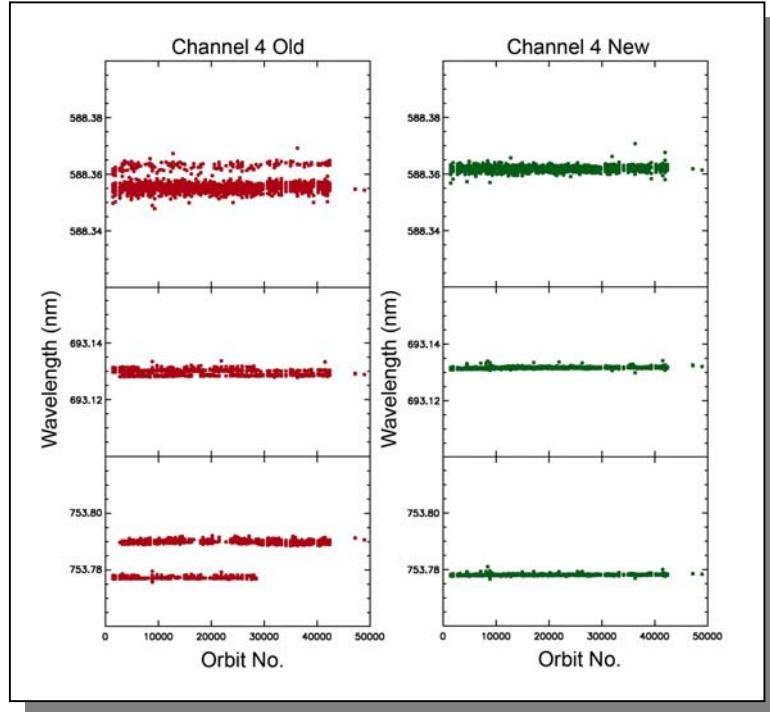


Fig. 3-4: Wavelengths of three detector pixels in channel 4 for the complete GOME mission. The new parameters (right panel) are much more stable than the old ones (left panel).

The limits for the Sun intensity check now became different for different time periods. Solar measurements below the old limit were now accepted, which drastically improved the situation for GOME measurements after 2003. Additionally one algorithm modification improved the Precision Errors on the Sun Mean Reference spectrum.

The algorithm changes in the Level 1 extraction software were developed in the framework of the ESA project CHEOPS-GOME (*Climatology of Height-resolved Earth Ozone and Profiling Systems for GOME*). This project focused on channels 1 and 2, where a higher level of absolute radiometric accuracy was required for the retrieval of height-resolved O<sub>3</sub> profiles. The changes included:

- Correction of signal background in GOME Channel 1 using the straylight 1a band as an offset correction (see fig. 3-5). The results were validated using forward model simulations of KNMIs O<sub>3</sub>-profile retrieval software OPERA.
- New parameterization of the polarization curve between ~300 nm and ~325 nm. The algorithm is based on the approach used in the KNMI GomeCal software, which uses the results of *Schutgens and Stammes (2002)*.
- The seasonal variation of the diffuser BSDF was derived as a function of solar zenith angle. Two Lookup Tables had been generated to be included in the new GDP software, for a smoothed BSDF and for an unsmoothed BSDF.
- An option was added to correct the reflectivity (= ratio of earthshine/solar) in channels 1 and 2, based on a Lookup Table calculated by SRON.

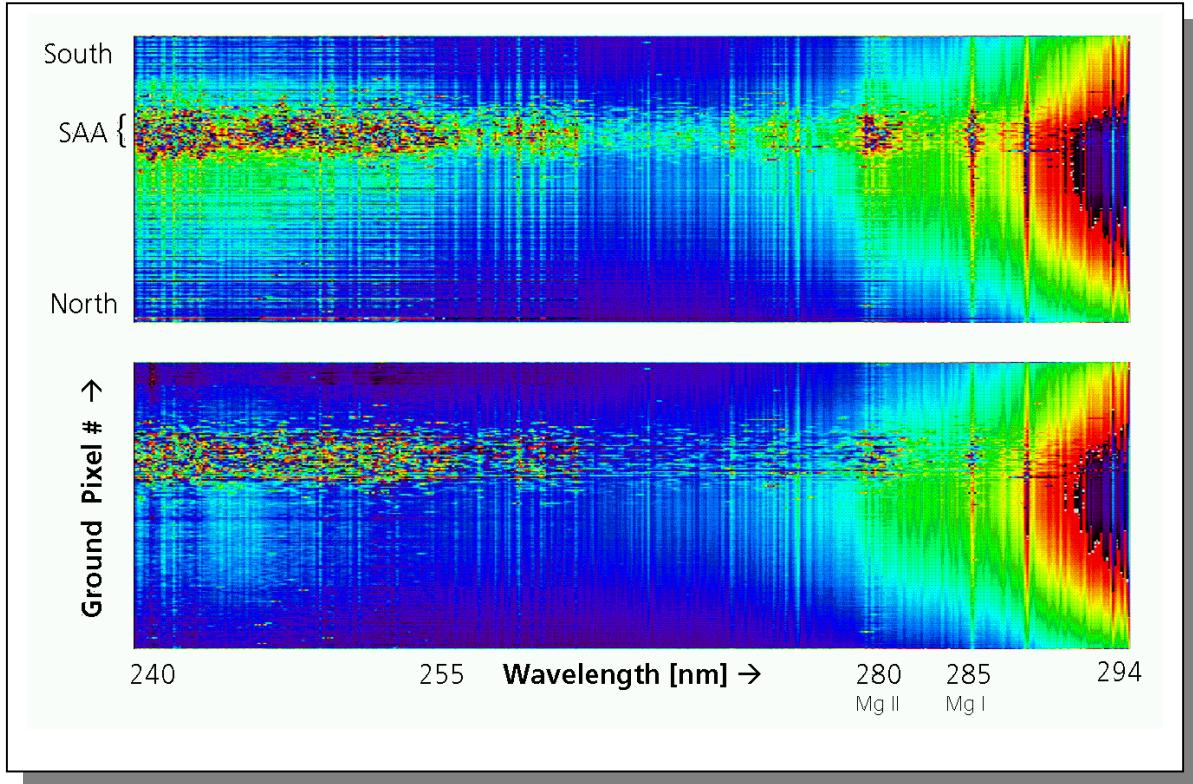


Fig. 3-5: Normalised reflectance spectra (Radiance/Irradiance, each row represents a normalised spectrum) in channel 1a, over one orbit of data. The top panel corresponds to the old, the lower panel to the new background correction.

#### GDP Level 1 and Level 2 Reprocessing

For the reprocessing GDP L01 processor version 3.0.2 and L12 processor version 4.1 had been used. The latter one generated the new HDF5 products in addition to the current ERS format of the level 2 (LV2) product. Starting with orbit 970 of July 1995 all orbits until June 2006 (orbit 58854) underwent reprocessing. The input comprised 76626 level 0 downlink files from which 52501 level 1 and 52486 level 2 files were generated. For quality control purposes the available quality tools for regular processing had been used.

Reprocessing of level 0 data from the non-nominal stations required manual ingestion. Since the complete dataset of historical GOME downlinks from the non-nominal stations is not available at D-PAF, the reprocessed products from June 2003 onwards included only a subset of all available GOME downlinks.

#### GDP Level 1&2 Verification

M. Van Roozendael (BIRA-IASB) was responsible for the verification of the updated GDP products using the GDOAS prototype code. A subset of the upgraded GOME data products, consisting of 127 orbit files covering the whole period from 1995 until 2006, had been ingested into the BIRA processing chain. Resulting total ozone columns have been compared to the operational GDP 4.1 LV2 total ozone data product and the observed differences have been checked against known algorithmic differences between GDP 4.1 and GDOAS. The overall agreement obtained was highly satisfying.

#### GDP Level 2 Validation

The validation of the GDP L2 products was performed by D. Balis, M. Koukouli and V. Amiridis (AUTH), and by J.-C. Lambert, J. Granville, P. Gerard, and M. Van Roozendael (IASB-BIRA). The AUTH team used total ozone data from Brewer and Dobson spectrophotometers from the *World Ozone and UV Data Center* (WOUDC) at Toronto, Canada. Data up to September 2006 were available. These have been compared with GDP4.0 and GDP4.1, available until October 2006 and July 2006 respectively. GDP4.1 performs slightly better in the post 2003 period. The mean bias of GDP4.1 remains within 1% relative to both instruments (-0.3% for the Brewer and 0.2 for the Dobson), see fig. 3-6. The new version did not introduce any new feature not already known from the validation of GDP4.0.

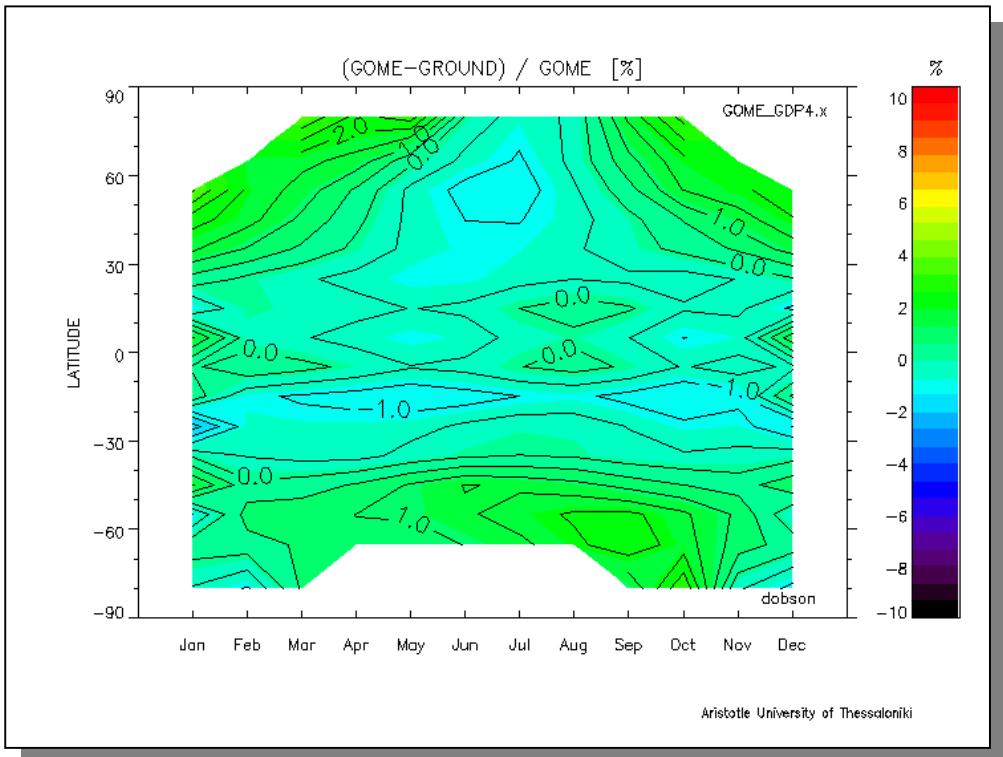


Fig. 3-6: Monthly mean differences between GDP 4.1 and Dobson measurements (courtesy D. Balis, AUTH).

The IASB-BIRA team used ground-based data from the *Network for the Detection of Atmospheric Composition Change* (NDACC) and WOUDC to assess the impact of the GDP upgrade on O<sub>3</sub> and NO<sub>2</sub> column data products. Ground-based comparisons based on the entire GOME data record have confirmed the expected conclusion that this GDP L01 upgrade did not produce a significant impact on the quality of the GOME O<sub>3</sub> and NO<sub>2</sub> column data products. Only slight changes have been observed in the statistical agreement (monthly means and mean SZA dependence) at individual stations. The mean agreement between GDP 4.1 and ground-based data remains within the 1% level for O<sub>3</sub> columns up to 80°-85° SZA and 60° of latitude, and within a few 10<sup>14</sup> molec.cm<sup>-2</sup> for NO<sub>2</sub> columns under unpolluted conditions.

### Conclusions

The GDP upgrade project concluded successfully. The complete GOME level 1 and level 2 dataset starting in June 1995 has been reprocessed with the improved system:

- GDP Level 0-to-1 version 3.0.2
- GDP Level 1-to-2 (UPAS) version 4.1

All reprocessed products are available at the D-PAF FTP (<ftp://ops.de.envisat.esa.int>) server. The new GDP system will be used for near-real-time and off-line processing starting with GOME data from January 2007.

### References

*Schutgens, N.A.J. and P. Stammes: Parameterisation of Earth's polarisation spectrum from 290 to 330 nm, J. Quant. Spectr. Rad. Transfer, 75, 239, 2002*

### 3.3 SCIAMACHY-Datensatz konsolidierte Level 0-Daten

*M. Gottwald, E. Krieg, K. Reissig, J. How (DFD-IT)*

Mit dem Ende des Jahres 2006 nähert sich SCIAMACHY seiner spezifizierten Missionsdauer von 5 Jahren und beginnt anschließend den bis mindestens 2010 dauernden verlängerten Betrieb. Das Messprogramm in den bisher durchgeführten mehr als 25000 Orbits spiegelt sich am eindeutigsten in den konsolidierten Level 0-Daten (cL0) wieder. Diese Datenprodukte überdecken exakt einen Orbit von ANX zu ANX und können direkt mit dem orbitbezogenen Messprogramm, wie in den Planungsdokumenten beschrieben, verglichen werden. Im Gegensatz dazu fehlt den Level 0-NRT-Daten die eindeutige Zuordnung zu absoluten Orbitnummern, da sie jeweils Daten zwischen aufeinander folgenden Downlinks enthalten, deren Lage zeitlich entlang des Orbits variiert. Da die Verarbeitung zu konsolidierten Level 1b- bzw. Level 2-Produkten auf den cL0-Daten beruht, ist es unbedingt erforderlich, diese soweit wie möglich korrekt und vollständig zu erzeugen. Gerade im Hinblick auf Reprozessierungskampagnen stellt deshalb ein Archiv an fehlerfreien cL0-Produkten einen unschätzbaren Vorteil dar.

Das ENVISAT Payload Data Segment (PDS) erzeugt cL0-Daten im LRAC (Kiruna) aus den an den Payload Data Handling Stations (PDHS, Kiruna und Esrin) erzeugten NRT-Produkten und sendet diese anschließend an das D-PAC (Oberpfaffenhofen). Dabei werden nur eingeschränkte Qualitätskontrollen durchgeführt. Auch wenn auf diese Weise die Daten von ca. 90% der durchgeführten Orbits korrekt konsolidiert werden, so verbleibt für den Rest doch erheblicher Klärungsbedarf. Da die cL0-Daten für den SCIAMACHY Operations Support eine wichtige Quelle zur Erledigung der Monitoringaufgaben sind, hat SOST mit Beginn der Lieferung von cL0-Produkten ein eigenes System aufgebaut, welches erforderliche Qualitätsprüfungen bereitstellt. Dieses System besteht aus einem S/W-Paket, das in der Schnittstelle zwischen dem D-PAC und dem Daten Informationsmanagement System (DIMS) im DFD installiert ist. Konsolidierte Level 0-Produkte werden von SOST nach DIMS übertragen, um dort ein cL0-Masterarchiv zu generieren. Hierbei gelangen nur solche Produkte nach DIMS, deren Eigenschaften spezifizierte Qualitätskriterien, hauptsächlich beschrieben im *Main Product Header*, erfüllen. Softwaretechnisch betrachtet findet jeweils ein Vergleich mit Planungsinformation, insbesondere bzgl. der erwarteten Produktdauer, und Formateigenschaften statt. Die Ergebnisse der Filterung werden in Log-Dateien abgespeichert und erlauben, detaillierte cL0-Statistiken auszuarbeiten. Aufgrund der Tatsache, dass die hier beschriebenen Aktivitäten von SOST nur auf „Best Effort“-Basis erfüllt werden können – sie sind keine reinen Betriebsaufgaben – würden weitergehende Qualitätsprüfungen, beispielsweise das Auslesen der State-Sequenzen zum Auffinden stateinterner Fehler, den akzeptablen Ressourcenrahmen sprengen. Trotzdem ist es mit diesem Ansatz möglich, den Status der cL0-Produkte zu analysieren und, falls erforderlich, eine Neukonsolidierung im PDS zu initiieren.

Der Transfermechanismus vom D-PAC nach DIMS lief im Berichtszeitraum weitgehend störungsfrei. Es wurden die jeweils im D-PAC anfallenden cL0-Produkte des laufenden Jahres transferiert sowie versucht, den Status zurückliegender Jahre sukzessive zu verbessern. Letztere Aufgabe bearbeitet die Jahre 2002-2005. Dafür wurden von SOST Orbits spezifiziert, die eine Level 0-Rekonsolidierung erfordern und nach erfolgter Prozessierung am LRAC die entsprechenden Produkte in der Schnittstelle D-PAC/DIMS qualitätskontrolliert. Durch dieses Wechselspiel zwischen SOST und ESRIN konnte die Verfügbarkeit der cL0-Daten der vergangenen Jahre kontinuierlich verbessert werden. Wir betrachten den momentanen Stand als noch nicht endgültig. Unser Ziel ist es, an die 97%-98% der durchgeführten Messungen in Form von cL0-Daten vorliegen zu haben. Aktuell enthält das DIMS-Masterarchiv die Level 0-Daten von mehr als 17500 Orbits der Jahre 2002-2006 in konsolidierter Form.

Das cL0-Masterarchiv in der DIMS-Umgebung ist inzwischen auch für andere SCIAMACHY-Missionsteilnehmer von großem Nutzen. Deshalb stellt SOST den aktuellen cL0-Status über die SOST-Webseiten (<http://atmos.caf.dlr.de/projects/scops>) der Allgemeinheit zur Verfügung. Auch das PDS bedient sich des Masterarchivs, um Inkonsistenzen im SCIAMACHY-Datensatz des D-PAC zu korrigieren. Um die hier beschriebenen cL0-Qualitätsprüfungen zukünftig auf eine solide Ressourcenbasis zu stellen, wurde mit ESA vereinbart, die Arbeiten über einen speziellen Vertrag als Ergänzung zu den Data Processing Quality Control (DPQC) Tätigkeiten zu etablieren.

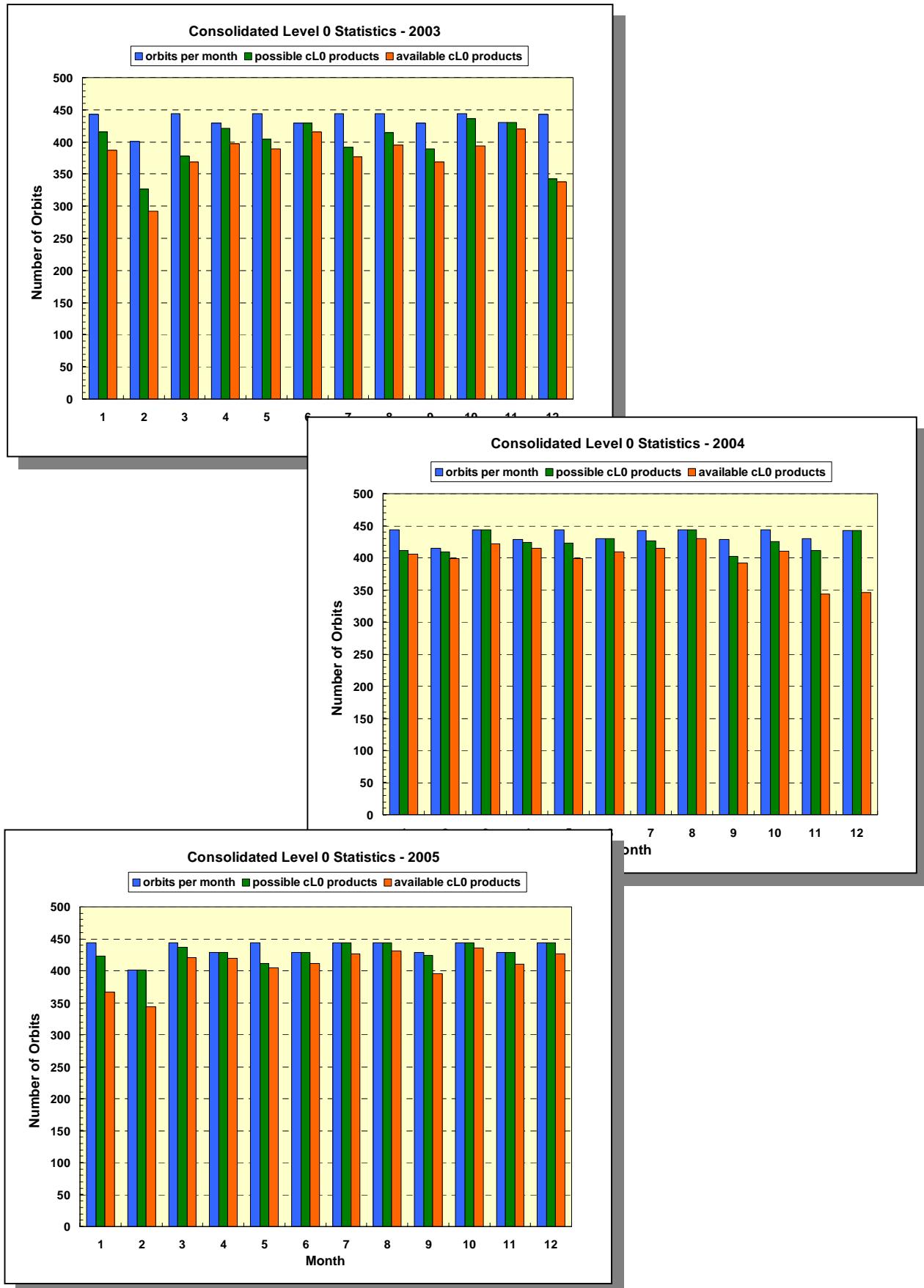


Abb. 3-7: Statistik der im Level 0-Masterarchiv vorhandenen konsolidierten Level 0-Daten (rot) für die Jahre 2003-2005. Die Gesamtzahl der Orbita pro Monat (blau) und der möglichen konsolidierten Daten (grün) ist zum Vergleich angegeben. Letztere unterscheiden sich immer dann, wenn das Instrument geplant oder ungeplant den Messmodus verlassen hat. Man vergleiche mit den Abbildungen im Jahresbericht 2005 (Kapitel 3.5).

### 3.4 SCIAMACHY: Entwicklungsstatus Level 0-1b Datenprozessierung

*A. von Bargen, S. Slijkhuis, G. Lichtenberg, D. Scherbakov, B. Aberle*

Die Entwicklung der Datenprozessierung von Rohdaten (Level 0) zu Spektren (= kalibrierte Radianzen) und Kalibrierungsdaten, d.h. Level 1b-Produkten, war bisher durch die stetige Verbesserung der operationellen Prozessierung im ENVISAT-Bodensegment geprägt. Die inhaltlichen Entwicklungen erfolgten im Jahr 2005 im Rahmen des DLR-eigenen Prototyps, wobei die Begleitung der Inbetriebnahme und die wissenschaftliche Validation der operationellen Software, bekannt als Instrument Processing Facility – IPF, der Version 6 im Vordergrund stand. Parallel zum offiziellen Start der IPF in Version 6.02 wurde das neue Layout der Kalibrierungsdatenberechnung im ENVISAT-Bodensegment in Betrieb genommen und für die Nutzer das Softwaretool *SciaL1c* in neuer Version freigegeben, welches die Erzeugung kalibrierter Daten (Level 1c) aus Level 1b Produkten mit optionalen Kalibrierungseinstellungen erlaubt.

Das neue Layout der Datenprozessierung von Level 0 nach Level 1b war bereits detailliert im Jahresbericht 2005 im Zusammenhang mit der Beschreibung der Softwaretools *SciCal* und *SciaL1c* beschrieben worden. *SciCal* ersetzt die Datenverarbeitungskapazität der Instrument Engineering Calibration Facility (IECF), indem es, aufsetzend auf Level 0 Produkten, die bisher von der IECF gelieferten Auxiliary Data Files (ADFs) erzeugt und in die IECF-Datenbank für die Level 0-1b Prozessierung einstellt. *SciCal* ist vom DLR entwickelt und implementiert worden und setzt in Teilen auf dem Level 0-1b Prototypprozessor des DLR auf. Damit ist Kompatibilität der Algorithmen zwischen Datenprozessor und operationellem Kalibrierungswerkzeug gewährleistet, so dass ein möglicher Update unkompliziert und schnell vorgenommen werden kann. Darüber hinaus verringert sich drastisch die Zeit zur Reprozessierung aller bisher gemessenen Datensätze. Der letzte Aspekt wird mit zunehmender Missionsdauer immer wichtiger, da einerseits die Wahrscheinlichkeit neuer Prozessorversionen, die sich wesentlich von ihren Vorgängern unterscheiden, zunimmt und andererseits konsistente Missionsdatensätze für eine Weiterverarbeitung erforderlich sind.

Die wesentlichen inhaltlichen Änderungen mit Einführung der Version 6.02, basierend auf der bisherigen operationellen Version 5.4, umfassen:

- Update der Memory-Effekt-Korrektur
- Update der Korrektur der Nichtlinearität der Detektorenkanäle im SWIR
- Einführung einer dynamischen „Dead & Bad Pixel Mask“ (experimentell)
- Update der Keydaten für die radiometrische Kalibrierung (externe Zulieferung durch Universität Bremen)
- Update der Dunkelstromkorrekturalgorithmen: Im Offline-Prozessierungsmodus werden künftig die Dunkelstrommessungen aus dem gleichen Orbit zur Berechnung der Korrektur ausgewertet. Im NRT-Prozessierungsmodus kommen die Daten aus dem aktuellsten ADF in Anwendung
- Korrektur des Pointings der Satellitenplattform durch Einbeziehung eines externen ADFs (AUX\_FRA) in Offline-Modus
- Zusätzliche konstante Winkelkorrektur zwischen Satellitenplattform und Sensor
- Korrektur der Integrationszeit in den SWIR Detektorkanälen
- Update der Streulichtberechnung in den Überlappbereichen von Kanal 1
- Update der „Out-of-band“-Korrektur für die Polarisationskorrektur
- Überarbeitung des Bereichs der Südatlantischen Anomalie (SAA)
- Ergänzung des Produktheaders (SPH) durch die Versionsnummer der Initialisierungsdatei und Einführung eines Dekontaminierungsflags pro Detektorkanal.

Die operationelle Inbetriebnahme der neuen IPF-Version zusammen mit *SciCal* und dem Bodensegment stellte eine besondere Herausforderung für das Bodensegment dar. Die bei einer derartigen Aktion zwangsläufig zu Tage tretenden Softwarebugs ließen sich den Anforderungen gemäß beheben. Durchgeführte Tests zeigten schließlich, dass die erwarteten Produktverbesserungen tatsächlich realisiert werden konnten.

Auch das Tool *SciaL1c* wurde offiziell herausgegeben, wobei in einer ersten Phase Nutzerfeedbacks in eine Verbesserung des Tools einflossen. Darüber hinaus konnte das S/W-Paket für die Betriebssysteme HP-UX und Linux auf DecAlpha verfügbar gemacht werden, das nach einer Beauftragung durch ESA zusätzlich durch eine Windowsversion ergänzt werden soll.

Die künftigen Arbeiten an der Level 0-1b Prozessorentwicklung werden durch ein Zusammenrücken der Partner aus dem *Calibration Tiger Team* (DLR, Universität Bremen, SRON) in der Quality Working Group (QWG) eine intensivere Zusammenarbeit finden. Die QWG kann in diesem Zusammenhang als konsequente Fortsetzung der guten Zusammenarbeit innerhalb des *Calibration Tiger Teams* angesehen werden. Sie lässt auf jeden Fall eine weitere Verbesserung der Datenqualität in naher Zukunft erwarten.

### 3.5 Von kalibrierten Spektren zu geophysikalischen Parametern – Verbesserung der SCIAMACHY Level 2 Prozessierung

*A. von Bargent, T. Schröder, A. Doicu, F. Schreier, K. Kretschel, S. Hilgers*

Die Ableitung geophysikalischer Parameter für Spurengase und Wolkenparameter aus SCIAMACHY Messdaten konnte im Berichtsjahr durch die Freigabe der neuen Version (3.0) des Level 1b-2 Off-line Datenprozessors wesentlich verbessert werden. Dadurch ließ sich die Qualität der abgeleiteten Atmosphäreneigenschaften deutlich steigern. Die Veränderungen beinhalteten die Integration

- der Algorithmen des GDP 4.0 zur Berechnung der Gesamtsäulen aus Nadir Messdaten im UV/VIS
- des Wolkenalgorithmus SACURA der Universität Bremen und
- der DLR-Entwicklung DRACULA für die Bestimmung der Spurengasprofile aus Limb-Messdaten im UV/VIS.

Im Mittelpunkt des Interesses standen insbesondere der Abschluss der Integrationsaktivitäten und die wissenschaftliche Verifikation, welche mit dem Acceptance Test des Prozessors einschließlich seiner Inbetriebnahme abgeschlossen wurde.

Abb. 3-8 skizziert die Zusammenhänge zwischen den genannten Algorithmen. Die Wolkenalgorithmen einschließlich der Algorithmen zur Bestimmung von Aerosoleigenschaften sind im *Climatological Pre-processing* Modul zusammengefasst. Ihre Resultate (OCRA: Wolkenbedeckungsgrad *cfr*; SACURA: Wolkenoberkante *cth* und optische Dichte *cot*) werden einerseits in das Produkt übernommen, andererseits werden sie aufbereitet, um als Wolkenbedeckungsgrad, Druck an der Wolkenoberkante und Wolkenalbedo in der Bestimmung der Gesamtsäulen von Ozon und NO<sub>2</sub> angewandt zu werden. Dabei berücksichtigt man die unterschiedlichen Integrations- und Messzeiten. Die Bestimmung der Spurengasgesamtsäulen erfolgt in einem Modul, das ursprünglich aus dem GDP 4.0 übernommen wurde. Erforderlich waren vor allem Anpassungen an das Datenbankmodell einschließlich Datenbankzugriff. Das darin benutzte Vorwärtsmodell basiert auf LIDORT Version 2.2+, wobei die Bestimmung der Gesamtsäule iterativ erfolgt, basierend auf einer klimatologischen Annahme für die eingehenden Profile. Da der Originalansatz des Algorithmus bei BIRA auf einem unterschiedlichen Wolkenparameteralgorithmus beruht (FRESCO), wurde die Prozessierungssoftware durch ein Derivat erweitert, welches erlaubt, FRESCO-Daten bei der Gesamtsäulenbestimmung einzulesen und zu benutzen. Die Verifikation erfolgte schließlich in zwei Schritten: Zunächst wurden die Säulendichten anhand der von BIRA ursprünglich benutzten FRESCO-Daten bestimmt, danach wurde der Einfluss anderer

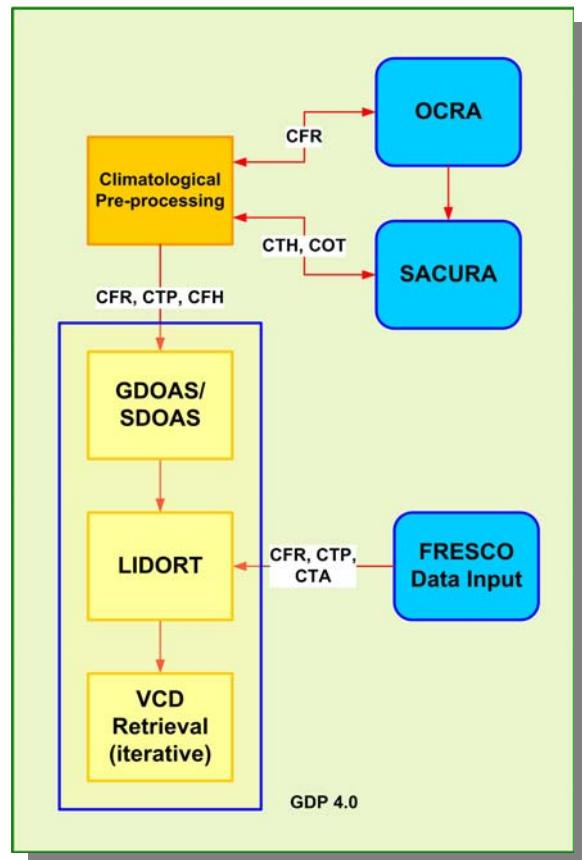


Abb. 3-8: Skizzierter Algorithmenablauf für Nadir UV/VIS (Details siehe Text).

Wolkenalgorithmen auf die Gesamtsäulenbestimmung untersucht. Es kamen dabei 60 Orbits zum Einsatz, die über das Jahr 2003 verteilt waren. Für  $O_3$  und  $NO_2$  Gesamtsäulen beobachtete man im ersten Verifikationsschritt eine mittlere Abweichung von  $-0.4\%$  mit einer Standardabweichung von  $0.35\%$  bzw.  $0.25\%$ . Bis auf wenige Ausnahmen überschritten beide Datensätze nicht die  $1\%$ -Grenze, was im Hinblick auf die Komplexität des Algorithmus sowie seiner unterschiedlichen Implementierung als sehr respektables Ergebnis betrachtet werden kann. Der zweite Verifikationsschritt zeigte für  $NO_2$  erwartungsgemäß gegenüber der Prozessierung mit FRESCO im Mittel eine Abweichung von  $+0.02\%$  ( $\sigma = 0.25\%$ ). Im Fall von  $O_3$  war die mittlere Abweichung höher ( $+0.4\%$ ) bei einer größeren Streuung ( $1.4\%$ ). Da hier troposphärische Einflüsse eine größere Rolle spielten, war ein derartiges Ergebnis erwartet worden.

Ein zweiter Prozessorupdate betraf die Integration des Retrievalpaket DRACULA und dessen operationelle Nutzung. Vorteil von DRACULA ist das Vorhandensein eines Cross-Checks zwischen verschiedenen Retrievalmethoden innerhalb des operationellen Systems. Das ist von Vorteil, da mit der Auswertung von Limb-Satellitenmessungen im UV/VIS Neuland betreten wurde. Um, wie von Nutzern gewünscht, einen *Averaging Kernel* bereitzustellen, wird in der operationellen Umgebung letztendlich die Tikhonov-Regularisierung benutzt. Die gewählte Umsetzung zeigte, dass die Inversionsmethoden in ihrem Feinheits- und Optimierungsgrad annährend vollständig ausgereizt sind, was wiederum als Hinweis interpretiert werden kann, bei zukünftigen Änderungen den Schwerpunkt auf das Vorwärtsmodell zu legen. Für diesen Fall wurde in die Prozessierungssoftware bereits die Berechnung der Vielfachstreuterme anhand der Picard-Iteration integriert.

Sowohl Verifikation als auch Validation haben die starke Verbesserung in den abgeleiteten Profilen von  $O_3$  und  $NO_2$  gezeigt. Gerade  $NO_2$  weist eine sehr gute Übereinstimmung mit HALOE-Messungen auf. Für  $O_3$  beobachtet man – wie auch in Fällen wissenschaftlicher Retrieval – einen systematischen Bias von im Mittel  $5\%$ . Weiterhin sind die Profilergebnisse von der Bestimmung der Tangentenhöhe beeinflusst. Die Ableitung der Tangentenhöhe profitierte zwar durch die Verwendung von Korrekturen der Plattformlage doch gibt es immer noch einen systematischen Restfehler, der die Qualität der Profile, vor allem von Ozon, beeinträchtigt. Hier sind weitere Verbesserungen erforderlich.

### 3.6 SCIAMACHY Nadir-IR

*F. Schreier, M. Hess, T. Schröder, A. Doicu, A. von Bargen*

Die SCIAMACHY-Daten im nahen, d.h. kurzweligen Infrarot (Kanal 6: 971 – 1773 nm, Kanal 7: 1934 – 2044 nm, Kanal 8: 2259 – 2386 nm) werden im Nadir-Beobachtungsmodus für die Ableitung der vertikalen Gesamtsäulendichten von bestimmten Spurengasen, insbesondere  $CO$ ,  $CH_4$ ,  $N_2O$ ,  $CO_2$  und  $H_2O$  genutzt. Dafür wurden an mehreren europäischen Instituten wissenschaftliche Auswertealgorithmen entwickelt. Zudem entstand am Smithsonian Astrophysical Observatory (SAO) mit dem BIAS (Basic Infrared Absorption Spectroscopy) Code ein erster Prototyp für die operationelle Level 1-2 Prozessierung. Aufbauend auf den Entwicklungen zur hochauflösenden Line-by-Line Modellierung des Infrarot-Strahlungstransports (MIRART, vgl. beispielsweise Kapitel 2.2 im Jahresbericht 2003) und den Erfahrungen mit dem Prototype-Retrieval System PyReS (Kapitel 3.6 im Jahresbericht 2002) wurden mit BIRRA (Better InfraRed Retrieval Algorithm) die Grundlagen einer Neu-Implementierung des operationellen Level 1-2 Prozessors entwickelt (vgl. Kapitel 3.8 im vorangegangenen Jahresbericht).

Kern des dabei geschaffenen Level 1-2 Prozessors ist ein nichtlinearer Least-Squares-Fit zur Schätzung der Skalierungsfaktoren von geeigneten Referenz-Dichteprofilen sowie weiterer „Auxiliary“-Parameter, welche das Spektrum beeinflussen. Die dem Fit zugrunde liegende Modelfunktion, die an das beobachtete Spektrum angepasst wird, besteht im Wesentlichen aus dem Faltungsintegral der instrumentellen Responsefunktion (*Slitfunction*) mit der Gas-Transmission entlang des gesamten optischen Weges Sonne-Erboden-Satellit, entsprechend dem Beer-Gesetz.

Wesentliche Aspekte des BIRRA-Code sind:

- Nonlinear Least Squares basierend auf Optimierungsroutinen der PORT-Library, welche auf numerisch robusten Implementierungen des Levenberg-Marquardt *trust region* Algorithmus beruhen und optional die Berücksichtigung einfacher Schranken erlauben.

- Ein wichtiger „Auxiliary“ Fit-Parameter ist die Boden-Reflektion, welche linear in das Vorwärtsmodell eingeht und somit einen separablen nonlinear Least-Squares erlaubt.
- Optionale Line-by-Line Berechnung der Absorptionsquerschnitte, z.B. aufgrund verbesserter Spektraldata, Wechsel des Mikrowindows oder anderer Druck- und Temperatur-Profile.
- Möglichkeit zum Fit instrumenteller Parameter wie Spaltbreite oder Baseline.
- Erweiterungsmöglichkeit des Vorwärtsmodells bzgl. (Einfach-) Streuung.

Zentraler Aspekt der Arbeiten im Berichtsjahr waren Simulationsstudien zur „Performance“ und die Verifizierung des BIRRA-Codes durch Vergleich mit Ergebnissen des WFM-DOAS Codes der Universität Bremen. WFM-DOAS ist ein modifizierter DOAS-Algorithmus. Er basiert auf einem linearisierten Strahlungstransfermodell, wobei die Säulendichten sowie die Koeffizienten eines Polynoms  $P(\lambda)$  niedriger Ordnung an den Logarithmus der normalisierten gemessenen Strahldichte angepasst werden (Buchwitz 2000, 2004).

Zielgröße der Studie war vor allem das zeitlich und räumlich stark variable Kohlenmonoxid (CO). Für die Untersuchungen wurden Level 1 Daten des Orbits 8663 vom 27. Oktober 2003 verwendet, welcher, von Norden kommend, über Russland, die arabische Halbinsel und Ostafrika führt. Zum Beobachtungszeitpunkt existierten in Ostafrika große Biomassefeuer. Dementsprechend sollten aus den SCIAMACHY-Daten erhöhte CO-Säulendichten ableitbar sein. Der Orbit 8663 war aus diesem Grund auch Grundlage einer Studie im Rahmen des *EU-Network of Excellence* ACCENT, die den Vergleich der Algorithmen der Universität Bremen (WFM-DOAS), SRON (IMLM, Gloudemans et al. 2005) und Universität Heidelberg (IMAP-DOAS, Frankenberg et al., 2005) zum Ziel hatte (Buchwitz et al., 2005).

Die Ableitung von CO-Säulendichten aus SCIAMACHY-Infrarotspektren ist aus mehreren Gründen ein anspruchsvolles Problem: Die CO-Absorptionsbande im Bereich um  $2\mu\text{m}$  ist vergleichsweise schwach (ca. 1% Absorption im Bandenmaximum für einen Vertikalweg durch die Atmosphäre) gegenüber den hauptsächlichen Absorbern  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{CH}_4$ . Die Retrievalergebnisse sind daher extrem empfindlich auf Variationen des für die Auswertung benutzten Spektralbereichs (Mikrowindow).

Zudem steht nur ein Teil der 1024 Detektorelemente (Pixel) im Kanal 8 zur Verfügung, da aufgrund der überaus schwierigen Dotierung – die Infrarot-Detektorarrays sind Sonderanfertigungen – die Qualität der Pixel stark variiert. Die für die Level 1 Daten zugrunde gelegte Pixelmaske hat jedoch einen erheblichen Einfluss auf die geschätzten Säulendichten. Weitere Unsicherheiten resultieren auch aus der mangelhaften Kenntnis der spektroskopischen Liniensparameter, z.B. signifikante Unterschiede bzgl. Wasser zwischen den verschiedenen Versionen der HITRAN-Datenbasis und zu GEISA, der Wellenlängen-Kalibrierung ( $\lambda$ -shift) sowie der korrekten Modellierung der Spaltfunktion.

In Abb. 3-9 werden die auf die gleichzeitig aus Kanal 8 abgeleiteten  $\text{CH}_4$ -Säulen normierten CO-Säulen ( $\text{xCO} = 2.384 \cdot 10^{18} * \text{CO/CH}_4$  [molec/cm<sup>2</sup>]) verglichen, die aus den Daten des Orbits 8663 für verschiedene Pixelmasken, d.h. Ausschnitten aus dem gesamten Spektralbereich eines Kanals und Spektralbereiche mit unserem Verfahren abgeleitet wurden. An Pixelmasken wurden verwendet

- SRON-Maske: Diese Maske enthält 71 xy-Wertepaare im Bereich  $4285.15 - 4305.80 \text{ cm}^{-1}$ . Die mit der SRON-Maske ermittelten CO-Säulen sind deutlich höher als die entsprechenden Werte für die Bremer Maske, weshalb in der Abbildung die Werte mit dem Faktor 0.5 skaliert wurden. Sie sind in Abb. 3-9 als mittlere Sequenz von Nadir-States gezeigt.
- Bremen-Maske (um 10 Grad in Abb. 3-9 nach Westen verschoben) mit 51 xy-Wertepaaren im Bereich  $4282.69 - 4302.13 \text{ cm}^{-1}$ .
- Erweiterte Bremen-Maske (um 10 Grad in Abb. 3-9 nach Osten verschoben) mit 50 xy-Wertepaaren im Bereich  $4282.69 - 4302.13 \text{ cm}^{-1}$ , zusätzlich wurde  $4291.67 \text{ cm}^{-1} = 2330.10 \text{ nm}$  als Bad Pixel eingestuft (das Pixel liegt nahe einer starken CO Linie!)

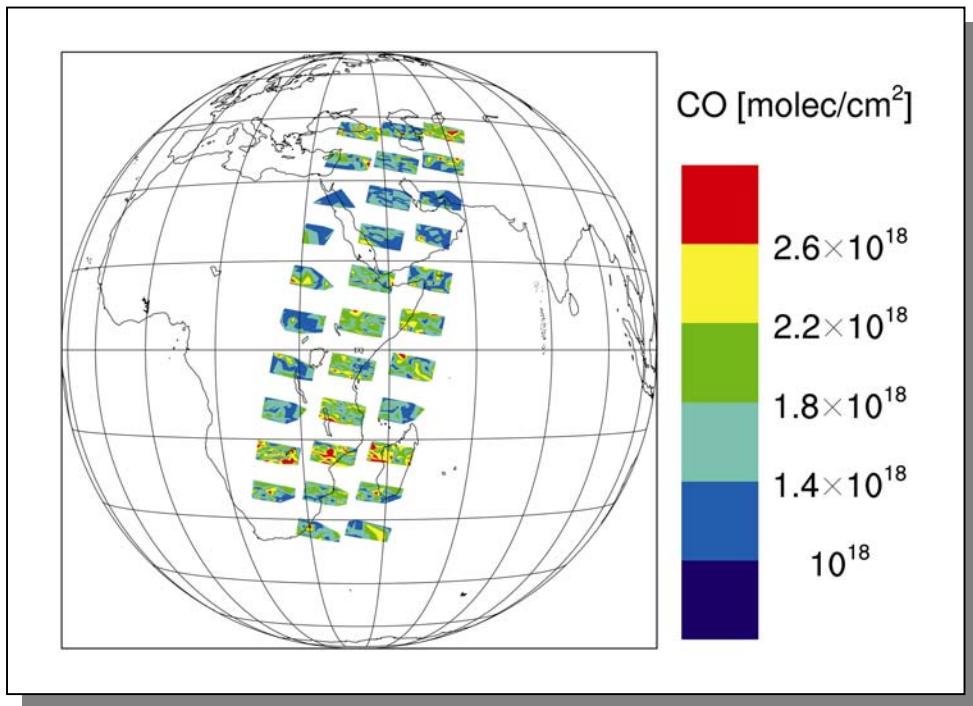


Fig 3-9: Vergleich der mit dem BIRRA-Code abgeleiteten CO-Säulendichten für 11 States des Orbit 8663 und für verschiedene Pixelmasken (Erläuterungen siehe Text)

Abb. 3-10 zeigt einen Vergleich mit den Ergebnissen der Bremer WFM-DOAS Analyse. Beide Abbildungen verdeutlichen einerseits die extreme Sensitivität des CO-Retrievals auch auf kleine Änderungen der Maske bzw. des Microwindows. Andererseits sind in allen Rechnungen die erhöhten CO-Werte im Bereich von Mozambique deutlich erkennbar, d.h. Trends und Verteilungen werden bei beiden Codes ähnlich ermittelt.

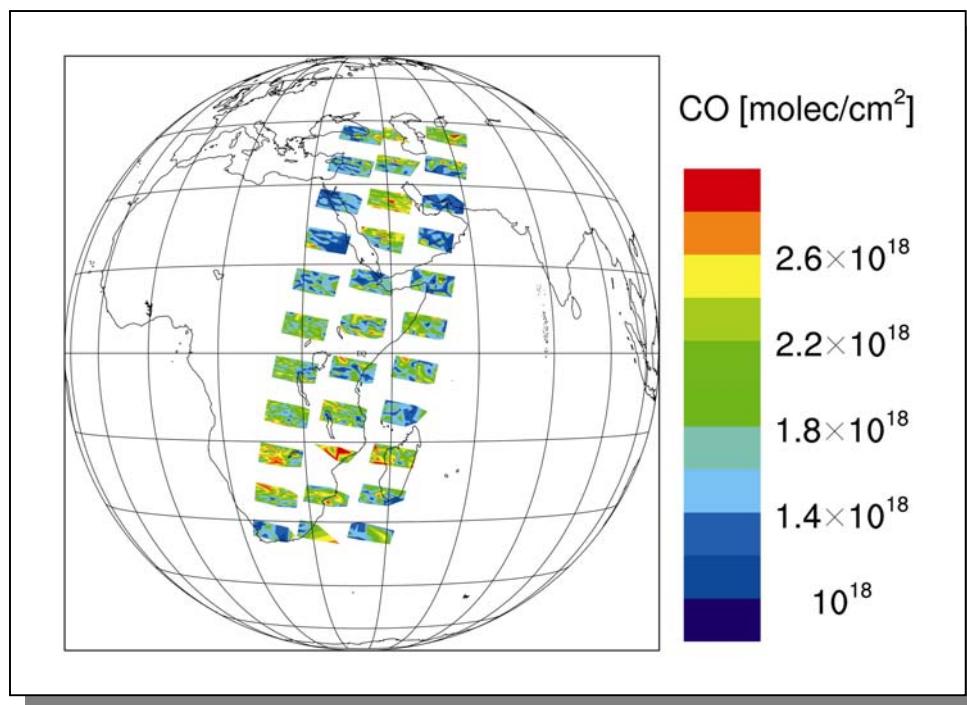


Fig 3-10: Vergleich der CO-Säulendichten des BIRRA-Codes mit den Ergebnissen des WFM-DOAS Codes (mittlere Sequenz; M. Buchwitz, Universität Bremen, private Mitteilung). Die Ergebnisse des BIRRA-Codes mit SRON-Maske (xCO-Werte skaliert mit Faktor 0.5) sind um 10 Grad nach Westen verschoben. Zum Vergleich zeigt die um 10 Grad nach Osten verschobene Reihe die Resultate des BIRRA-Codes mit der erweiterten Bremen-Maske.

### zitierte Literatur:

*Buchwitz M., V.V. Rozanov, J.P. Burrows:* A near-infrared optimized DOAS method for the fast global retrieval of atmospheric CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, and N<sub>2</sub>O total column amounts from SCIAMACHY Envisat-1 nadir radiances, *J. Geophys. Res.*, 105, 15231-15245, 2000

*Buchwitz M., R. de Beek, K. Bramstedt, S. Noël, H. Bovensmann, J.P. Burrows:* Global carbon monoxide as retrieved from SCIAMACHY by WFM-DOS, *Atmos. Chem. Phys.*, 4, 1954-1960, 2004

*Buchwitz M., R. de Beek, J.P. Burrows, C. Frankenberg, A. M. S. Gloudemans:* Methane, carbon monoxide and carbon dioxide retrieved from SCIAMACHY by WFM-DOAS, in *Proc. The Changing Chemical Climate of the Atmosphere, First ACCENT Symposium*, Urbino, Italy, September 12-16, 2005

*Frankenberg C., U. Platt, T. Wagner:* Iterative maximum a posteriori (IMAP)-DOAS for retrieval of strongly absorbing trace gases: Model studies for CH<sub>4</sub> and CO<sub>2</sub> retrieval from near infrared spectra of SCIAMACHY onboard ENVISAT, *Atmos. Chem. Phys.*, 5, 9-22, 2005

*Gloudemans A.M.S., H. Schrijver, Q. Kleipool, M.M.P. van den Broek, A.G. Straume, G. Lichtenberg, R.M. van Hees, I. Aben, J.F. Meirink:* The impact of SCIAMACHY near-infrared instrument calibration on CH<sub>4</sub> and CO total columns, *Atmos. Chem. Phys.*, 5, 2369-2383, 2005

### **3.7 Die Atmospheric Dynamics Mission – ADM-Aeolus**

*D. Huber, K. Reissig, K. Schmidt*

Die ADM-Prozessorkette beinhaltet folgende Produktlevel:

- Level 1A (L1A): geolokalisierte Rohdaten
- Level 1B (L1B): kalibrierte, geolokalisierte Rückstreuesignale und erste Windprofile
- Level 2B (L2B): mit zusätzlichen meteorologischen Informationen korrigierte L1B-Daten
- Level 2C (L2C): Resultat der Wettervorhersagemodelle.

Zusätzlich werden die L1B-Daten auch zur Berechnung von L2A-Daten, die weitere geophysikalische Parameter wie optische Dicke, Rückstreuoeffizienten oder Wolkenklassifizierung enthalten, herangezogen.

#### Level 1B-Prozessierung

In der ersten Jahreshälfte konzentrierten sich die Arbeiten auf den erfolgreichen Abschluss der laufenden ESA-Studie. Details hierzu finden sich im Jahresbericht 2005. Ein wesentlicher Meilenstein war hierbei die Kodierung des L1B-Prototyps. Dies führte zu einer wesentlichen Verbesserung der Datenauswertung im Mie-Kanal. Außerdem erlaubten sie, eine Reihe zusätzlicher Algorithmen zur Kennzeichnung der Qualität der Daten zu integrieren, beispielsweise solche zur Ermittlung des Signal-Rauschverhältnisses oder des *Backscatter-Ratio*. Zusätzlich wies eine Optimierung der implementierten Algorithmen nach, dass die derart erweiterte Datenprozessierung die Anforderung der ESA nach einer Prozessierungszeit von weniger als 5 Minuten für einen Orbit mit durchschnittlicher Datenmenge erfüllt.

Um die Weiterführung dieser Arbeiten sicherzustellen, erfolgte schließlich im zurückliegenden Jahr eine Verlängerung des Vertrages, in deren Rahmen die Auswertung der Rayleigh- und Kalibrierungsdaten erfolgen wird. Als gänzlich neuen Bestandteil beinhaltet dieser Vertrag zudem den Aufbau des operationellen L2A-Prozessors.

#### Level 2A-Prozessierung

Dieser Prozessor wird in eine bei der ESA entwickelte Umgebung eingebettet und dort zusammen mit anderen ADM-Datenprozessoren zur automatischen Datenprozessierung angesteuert. Die Arbeiten konzentrierten sich zunächst auf die Entwicklung einer ersten Version, die die Wechselwirkung mit der den Prozessor umgebenden Software, der sogenannten *Thin Layer*, und der Ein- und Ausgabe der spezifizierten Dateien simuliert. Daneben entstand zur Vereinfachung der Bedienung eine graphische Benutzeroberfläche, deren Eingangsseite in Abb. 3-11 gezeigt ist. Schließlich konnten die Arbeiten am L2A-Prozessor mit einem erfolgreichen Factory Acceptance Test abgeschlossen werden.

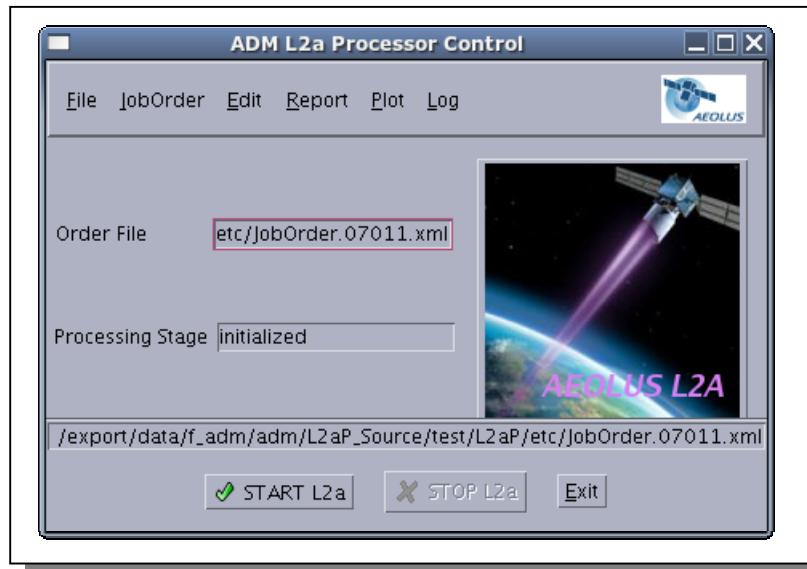


Abb. 3-11: Graphische Nutzeroberfläche des operationellen L2A Prozessors

#### ADM Workshop bei ESA/ESTEC

Ein Höhepunkt des Jahres war der erste ADM-Workshop, der im September bei ESA/ESTEC stattfand. Der Workshop brachte annähernd 100 Vertreter der europäischen Wetterdienste, der Industrie, interessierte Wissenschaftler aus den USA, Japan, Kanada und der Schweiz zusammen. Drei Tage lang hatten die Teilnehmer Gelegenheit, über den Stand der Entwicklung des Instruments, die Arbeiten in den begleitenden Studien zur Datenauswertung und den erwarteten Nutzen der Daten für Klimaforschung und Wettervorhersage zu diskutieren. Den Abschluss bildete der interessante Ausblick auf geplante Nachfolgemissionen. Weitergehende Informationen hierzu finden sich auf den Internetseiten unter [http://www.esa.int/esaLP/SEMRGVKKSE\\_LPadmaelus\\_0.html](http://www.esa.int/esaLP/SEMRGVKKSE_LPadmaelus_0.html).

### 3.8 Profilretrieval mit Hilfe von Entropie

*G. Schwarz, J. Steinwagner (jetzt: Institut für Umweltphysik der Universität Bremen)*

In den zurückliegenden Jahren wurde im DLR ein Offline-Prozessor zur Bestimmung von atmosphärischen Spurengasvertikalprofilen aus MIPAS-Daten entwickelt. Neben einer inzwischen fertig gestellten Dissertation (J. Steinwagner: Optimierung der Parameterauswahl für ein operationelles Off-Line-Retrieval von Spurengas-Vertikalprofilen aus MIPAS-Daten) wurden dazu auch eine Reihe von Untersuchungen für Profilretrievals aus Limbmessungen mit Hilfe von Entropie durchgeführt.

Eine vergleichende Gegenüberstellung der Grundgedanken der klassischen Retrievaltechniken (*Optimal Estimation* und *Tikhonov*) gegenüber dem gewählten Entropieverfahren musste folgende Fragen beantworten:

- Nach welchem generellen Prinzip arbeitet das jeweilige Verfahren?
- Benötigt man dazu a priori Wissen?
- Wenn ja, welches a priori Wissen wird benötigt?
- Welches Funktional für den jeweiligen *constraint* gibt es?
- Ist das jeweilige Funktional linear?
- Gibt es eine allgemein gültige Iterationsvorschrift für alle Verfahren?
- Wie bildet sich der jeweilige *constraint* methodenspezifisch in der allgemeinen Iterationsvorschrift ab?

Die wesentlichen Ergebnisse dieser Gegenüberstellung sind in Tabelle 3-1 zusammengefasst (hinsichtlich der grundlegenden Vorgehensweise von Profilbestimmungen von Spurengasen aus Limbmessungen sei auf einschlägige Literatur verwiesen).

	Entropie-Verfahren	Optimal Estimation	Tikhonov
Prinzip	Gleichförmige Verteilung der zweiten Ableitungen eines Profilvektors	Gewichtete Mittelung von Messung und Vorwissen	Glatte Lösung durch Hinzunahme diskretisierter Ableitungen
Vorwissen	nein	ja	ja
Art des Vorwissens	entfällt	a priori Profil und Varianzen	a priori Profil Annahme: glattes Profil
constraint $c(\mathbf{x})$	$c(\mathbf{x}) = -\gamma \sum_{i=1}^N q_i^a \log q_i^a$	$c(\mathbf{x}) = \ \mathbf{x} - \mathbf{x}_a\ _{S_a}$	$c(\mathbf{x}) = \alpha L \ \mathbf{x} - \mathbf{x}_a\ $
Lineares Funktional des constraints	nein	ja	ja
Allgemeine Iterationsvorschrift	$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + [2\mathbf{K}_k^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_k + \nabla(\nabla c(\mathbf{x}_k))]^{-1} [2\mathbf{K}_k^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}^d - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)) - (\nabla c(\mathbf{x}_k))]$		
Methodenspezifische Form des Funktional	$\nabla c(\mathbf{x}_k) = \nabla \gamma_\alpha S_\alpha(\mathbf{x}_k)$ $\nabla(\nabla c(\mathbf{x}_k)) = \nabla(\nabla \gamma_\alpha S_\alpha(\mathbf{x}_k))$	$\nabla c(\mathbf{x}_k) = \mathbf{S}_a^{-1}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_a)$ $\nabla(\nabla c(\mathbf{x}_k)) = \mathbf{S}_a^{-1}$	$\nabla c(\mathbf{x}_k) = \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_a)$ $\nabla(\nabla c(\mathbf{x}_k)) = \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L}$

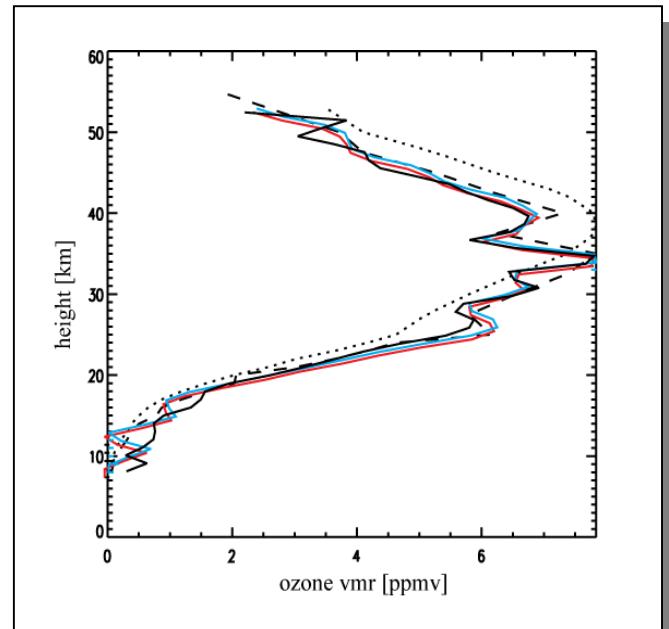
Tabelle 3-1: Vergleich verschiedener Retrievalverfahren

Dabei bedeuten:

- $\mathbf{y}$  und  $\mathbf{S}_y$ : Messungen und deren Kovarianzmatrizen
- $\mathbf{x}_k$ ,  $\mathbf{x}_{k+1}$  und  $\mathbf{x}_a$ : Profilvektoren der aktuellen und der nächsten Iteration, a priori Profilvektoren
- $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$  und  $\mathbf{K}_k$ : modellierte Spektren und deren Ableitungen
- $\mathbf{S}_a$ : Regularisierungsterm
- $\mathbf{L}$ : Tikhonov-Ableitungsoperator
- $q$ : Profilcharakteristika
- $\gamma$  und  $\alpha$ : Stärke-Parameter

Das dabei von uns ausgewählte Entropieverfahren beruht auf der Maximierung des Informationsgehalts eines Profils, charakterisiert durch die zweiten Ableitungen des abzuleitenden Profils. Diese fließen über einen optimal bestimmten Regularisierungsterm in die Lösungsvorschrift ein. Das Entropieverfahren reagiert sehr robust auf suboptimale Stärke-Parameter und zeigt eine gute Höhenauflösung der erhaltenen Profile. Darüber hinaus ist es einfach zu realisieren und benötigt kein Vorwissen.

Abb. 3-12: Typische Retrievalergebnisse mit simulierten Ozondaten (Erläuterungen siehe Text).



Als typisches Ergebnis wird ein Vergleich von Ozonprofilen aus simulierten Daten gezeigt. Bei der Simulation wurden künstlich generierte Feinstrukturen, d.h. Zacken erzeugt, um zu verifizieren, wie die verschiedenen Retrievalverfahren reagieren. Die Abbildung 3-12 zeigt die verwendeten Simulationsannahmen (gestricheltes Profil), die Startwerte für die Iterationen (gepunktetes Profil), die Ergebnisse des Entropieverfahrens (schwarzes Profil), von Optimal Estimation (rotes Profil) sowie des Tikhonov-Verfahrens (blaues Profil).

Um das Entropieverfahren quantitativ im Vergleich zu den oben aufgeführten Standardverfahren besser zu bewerten, wurde neben der Implementierung auch eine umfangreiche systematische Falluntersuchung sowohl mit synthetisch generierten als auch mit Flugdaten des MIPAS-Instruments durchgeführt. Dabei versuchte man auch, höhenaufgelöste Gütekriterien zu erhalten. Die dafür verwendeten Tools waren (je nach Verfügbarkeit der „wahren“ Lösung bei simulierten und gemessenen Instrumentdaten):

- Freiheitsgrade des abgeleiteten Profils
- Höhenauflösung des abgeleiteten Profils
- relativer Fehler
- absoluter Fehler
- Maximalwert der erwarteten Standardabweichung.

Durch diese Auswahl an quantitativen Gütekriterien konnte der Einfluss der Regularisierung überprüft werden. Eine etwaige Überregularisierung ließ sich sofort erkennen und durch eine verbesserte Parameterisierung vermeiden.

### 3.9 Radiative Transfer Modeling in Spherical Atmospheres including Emission and Scattering – Application to Remote Sensing of High Altitude Clouds

*J. Mendrok (jetzt: Applied Electromagnetic Research Center, National Institute of Information and Communications Technology, Tokyo)*

Within a PhD thesis, the [*Approximate*] *Spherical Atmospheric Radiative Transfer* code (SARTre) has been developed. SARTre is designed for monochromatic high resolution modeling in the infrared (IR) spectral range and beyond for arbitrary viewing geometries in spherical atmospheres, taking emission and scattering into account as radiation sources. SARTre applies the source function integration technique:

$$I(\nu) = I_b(\nu) \cdot e^{-\tau(\nu)} + \int_0^{\tau(\nu)} J(\tau', \nu) \cdot e^{-\tau'(\nu)} d\tau'$$

where  $I(\nu)$  is the monochromatic intensity at wavenumber  $\nu$ ,  $I_b$  denotes background radiation,  $\tau$  is the optical depth along the LoS, and source term  $J$  comprises thermal emission, single scattered solar radiation, and multiple scattering:

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

Assuming a locally plane-parallel atmosphere, the diffuse incident radiation field required for the calculation of the multiple scattering source term is derived using the Radiative Transfer solver DISORT. Aerosol and cloud optical properties are generally taken from external sources. Essentially being a one-dimensional RT model, SARTre offers the option to place the cloud only on one side of the LoS divided by the tangent point. This option is of crucial importance for modeling limb observations of thin clouds with tangent altitudes below the cloud bottom. Molecular absorption is computed by Line-by-Line (LbL) routines adapted from MIRART (*Schreier and Böttger, 2003*) using spectral line catalogs like HITRAN and optionally including continuum corrections. SARTre has been verified by model intercomparisons in the mid-IR and ultraviolet spectral region (*Mendrok, 2006*).

In 2006, SARTre has been used to investigate effects of thin cirrus clouds on IR limb spectra. A sensitivity study with respect to cirrus cloud parameters, e.g., optical thickness and particle size

distribution, was performed. Additionally the estimation of cirrus properties from measurements of the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) could be demonstrated.

### Data

A limb sequence taken on July 17th, 2003 over the Arabian peninsula had been chosen with upper tropospheric spectra (tangent altitudes  $z_{\tan} \approx 15$  km and 12 km) showing distinct spectral features of thin ice clouds, i.e.

- a significantly increased broadband signal in the atmospheric windows, and
- broad absorption line structures of  $\text{H}_2\text{O}$  in place of narrow clear-sky emission lines.

From MIPAS channels A and B three microwindows located at  $825\text{-}830\text{ cm}^{-1}$  (mw1),  $947.5\text{-}950.5\text{ cm}^{-1}$  (mw2) and  $1224\text{-}1228\text{ cm}^{-1}$  (mw3) were chosen, covering the ice absorption band centered around  $12\text{ }\mu\text{m}$ . Focusing on cirrus effects, it was assumed that atmospheric profiles are well known and only major contributing molecules were taken into account. Selected cloud parameters were taken from a priori knowledge of cloud indices and level 1b information. Considering MIPAS' field of view (FoV), cloud top height was estimated as  $14.0 \leq z_{\text{top}} \leq 16.5$  km. Single scattering properties of individual ice crystals originate from a database by *Yang et al. (2005)* and particle size distributions from *Liou (1992)* and *Shettle (1990)*. Finally the instrument's FoV is described by a trapezoidal function of 5 km base width and monochromatic spectra required convolving with an instrumental line shape.

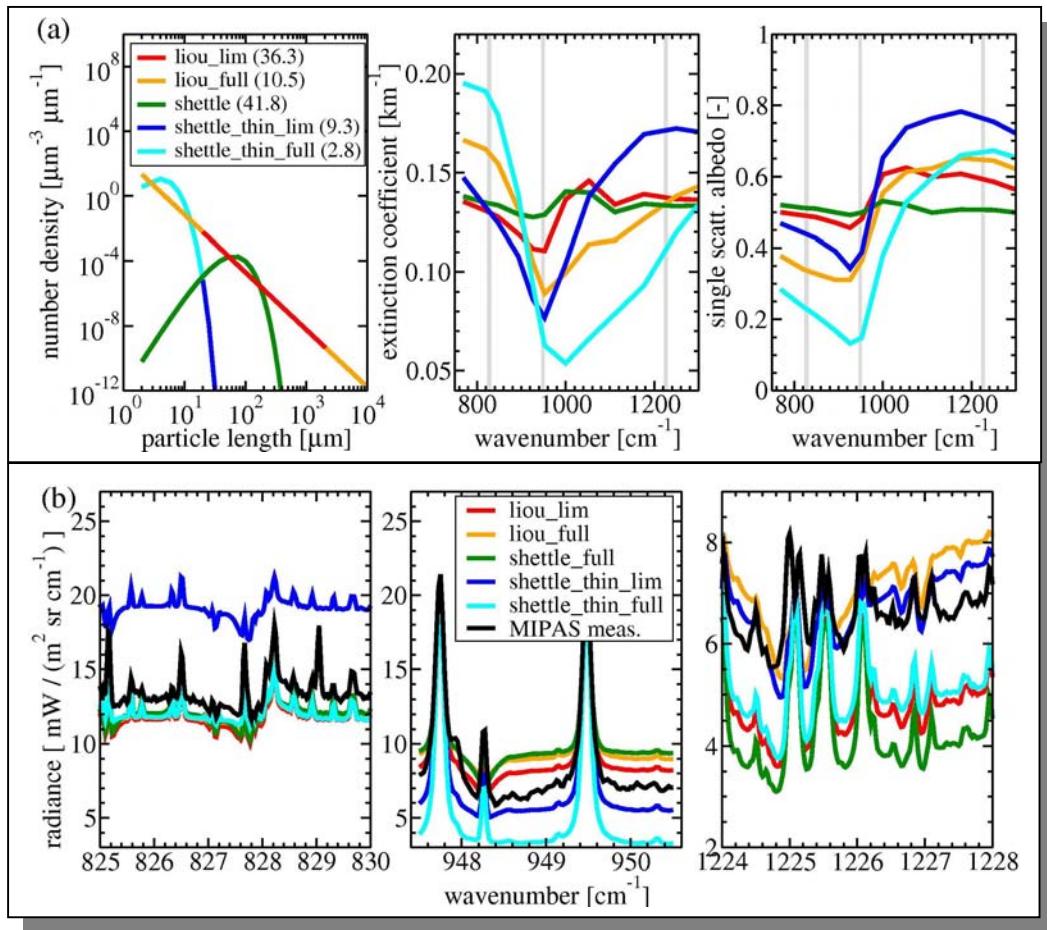


Fig. 3-13: Effects of particle size. (a) Examined size distributions and resulting optical properties. Numbers in brackets denote the effective particle size of the bulk. Grey lines indicate positions of the microwindows. (b) Corresponding limb spectra in the three mid-IR microwindows used in the study.

### Sensitivity Study

Effects of diverse cloud properties, e.g., ice water path (IWP), cloud optical and geometrical thickness  $\tau_c$  and  $\Delta z$ , top height  $z_{\text{top}}$ , and particle size distribution had been studied. Of those parameters IWP and  $\tau_c$  caused the largest variability in the spectra. While being closely linked, their relation highly depends on size distribution and crystal habit, i.e., a certain IWP may translate to a wide range of  $\tau_c$ . For thin clouds a

successive increase of the broadband signal was observed with increasing  $\tau_c$ . Water vapor absorption features occurred as side lobes for  $\tau_c \geq 0.005$  and as inverted lines for  $\tau_c \geq 0.01$ . Corresponding features were obvious for CH<sub>4</sub>, which has a similar vertical distribution. The spectral behavior of the bulk optical properties was clearly influenced by the particle size distribution (fig. 3-13 a). These spectral characteristics are apparent in the spectra (fig. 3-13 b), i.e., the ratio of the size distributions' broadband intensities changed between the chosen microwindows allowing to derive particle size information.

For thin clouds variations of several parameters like optical and geometrical thickness, top height, and fractional cloud covered FoV primarily resulted in offsets of the atmospheric window broadband signal. In contrast, microphysical property variations caused relative intensity changes in the three microwindows. That is, effects of particle size and shape were hardly separable from other parameters in a single microwindow, but cloud properties could be retrieved from microwindows placed over a wider spectral range more conveniently.

Comparing sensitivity study simulations to the cloud observing MIPAS spectra,  $\tau_c \approx 0.005$  was estimated from microwindows 1 and 2, whereas broadband features in microwindow 3 suggested  $\tau_c \approx 0.008$ . These deviations were expected to disappear, when replacing the first guess particle size ( $D_e=36 \mu\text{m}$ ) by a proper estimate.

#### Cirrus Retrieval Results

From measurements with  $z_{\tan} \approx 15 \text{ km}$  and  $12 \text{ km}$  cirrus properties were simultaneously derived, finding the best fit between simulation and measurement for a cloud with  $\text{IWP}=0.1 \text{ g/m}^2$ ,  $\tau_c=0.008$ , and  $D_e=10.5 \mu\text{m}$  ('liou\_full', see fig. 3-13 a), that has a geometrical thickness  $\Delta z=1.0 \text{ km}$  with top height  $z_{\text{top}}=15.5 \text{ km}$ . The cloud was found to be located in front of the tangent point for  $z_{\tan} \approx 12 \text{ km}$  with a LoS pointing below the cloud. Corresponding simulated and measured spectra are shown in fig. 3-14. To illustrate the effects of scattering, model results for clear-sky and cloudy conditions with scattering contributions neglected are plotted for comparison.

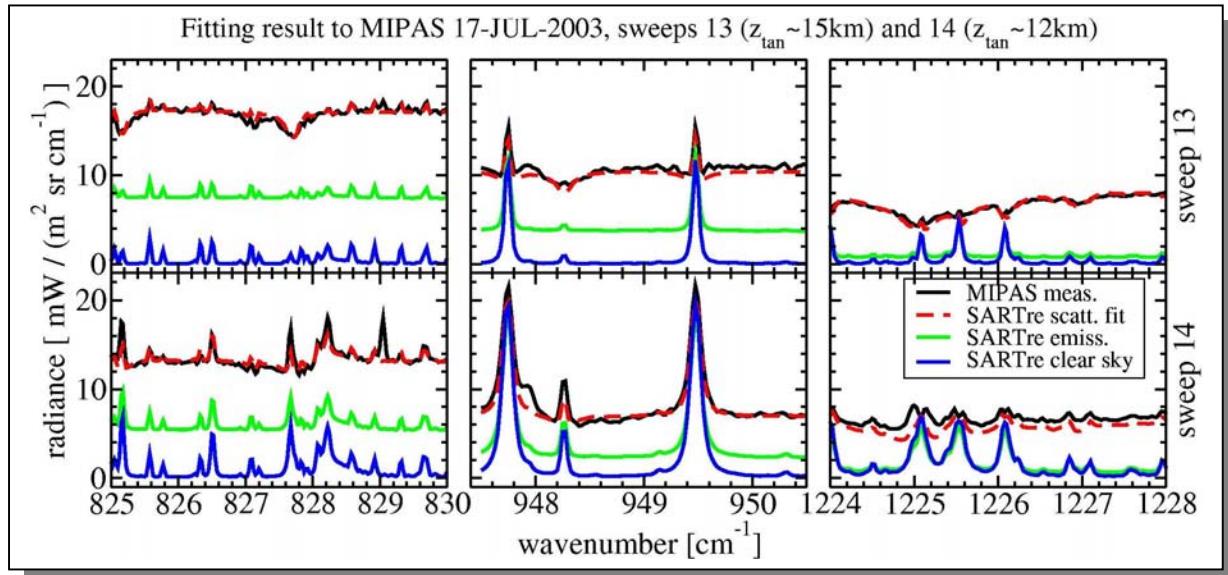


Fig. 3-14: MIPAS measurement and simulated spectra of the retrieved cirrus for  $z_{\tan} \approx 15 \text{ km}$  (upper) and  $z_{\tan} \approx 12 \text{ km}$  (lower panel). Modeled spectra for clear-sky and cloudy conditions with scattering contributions neglected are plotted for comparison.

Results for LoS with  $z_{\tan} \approx 15 \text{ km}$  as well as for microwindow 1 and microwindow 2 of  $z_{\tan} \approx 12 \text{ km}$  agreed to MIPAS spectra within the measurement accuracy. Beside matching the broadband intensity, the water vapor signatures were reproduced well. However, modeled intensities differed clearly from the measurement around an OCS line at  $829.0 \text{ cm}^{-1}$  and a SF<sub>6</sub> line at  $947.9 \text{ cm}^{-1}$ , that were not included in the simulation. The underestimation of the broadband signal in mw3 of  $z_{\tan} \approx 12 \text{ km}$  might be caused by spatial variations of the effective particle size within the cloud, while deviations around the water vapor features are likely due to uncertainties of the H<sub>2</sub>O profile, which become more evident due to stronger H<sub>2</sub>O interference in this microwindow. With  $z_{\text{top}} = 15.5 \text{ km}$  the cloud is located right below the

tropopause. Due to low ambient temperature small particles are expected to dominate, matching the finding of  $D_e \approx 10 \mu\text{m}$ . With its extremely low IWP, the cirrus has not been detected from nearly coincident nadir observations by MODIS and MERIS.

#### Zitierte Literatur

- Liou, K.-N.*: Radiation and Cloud Processes in the Atmosphere. *Oxford University Press*, 192pp, 1992
- Mendrok, J.*: The SARTre Model for Radiative Transfer in Spherical Atmospheres and its Application to the Derivation of Cirrus Cloud Properties. *PhD thesis, Freie Universität Berlin, Germany*, 2006
- Schreier, F., U. Böttger*: MIRART, a line-by-line code for infrared atmospheric radiation computations incl. derivatives. *Atmos. & Oceanic Optics*, 16, 262-268, 2003
- Shettle, E.P.*: Models of Aerosols, Clouds and Precipitation for Atmospheric Propagation Studies. In: Atmospheric Propagation in the UV, Visible, IR and mm-Wave Region and related Systems Aspects, *AGARD Conference Proceedings CP-454*, 1990
- Yang, P., H. Wei, H.-L. Huang, B.A. Baum, Y.X. Hu, G.W. Kattawar, M.I. Mishchenko, Q. Fu*: Scattering and absorption property database for nonspherical ice particles in the near- through far-infrared spectral region. *App. Opt.*, 44:26, 2005

### **3.10 Schnittstellen für das WDC-RSAT**

*M. Hess, F. Schreier, T. Trautmann*

Im Rahmen des *World Data Center for Remote Sensing of the Atmosphere* (WDC-RSAT) sollen neben den Fernerkundungsdaten selbst auch wissenschaftliche Basis-Daten und wissenschaftliche Software, die für Fernerkundungsaufgaben benötigt werden, über Internet zur Verfügung gestellt werden. Für zwei Datenpakete wurden im Berichtsjahr Internet-Schnittstellen erstellt, welche die Extraktion und Visualisierung der Daten mit einem Internet-Browser erlauben.

#### Spektrallinien-Datenbanken HITRAN und GEISA

Beide Datenbanken enthalten die Liniendaten gasförmiger Absorber. Sie umfassen jeweils eine große Menge von Daten im gesamten für die Fernerkundung interessanten Spektralbereich. Ihr Umfang bildet ASCII-Dateien mit einer Größe von jeweils ca. 100 MB.

Zur Extraktion der Daten einzelner Gase in begrenzten Spektralbereichen existieren die Kommandozeilen-Programme `select`, `lines2xs` und `line_atlas` in Python. Das Programm `select` erlaubt die Extraktion von Liniendaten und -stärken eines Gases in einem Spektralbereich, während `lines2xs` daraus unter Zuhilfenahme von Temperatur- und Druckwerten Absorptionsquerschnitte berechnet. Mit `line_atlas` werden die Liniendaten aller Gase in einem Spektralbereich nach Position und Stärke graphisch dargestellt. Diese Routinen wurde eine Internet-Eingabemaske vorgesetzt, die die notwendigen Parameter, insbesondere also den Spektralbereich, das gewünschte Gas und die gewünschte Ausgabegröße auswählt, an die Routinen weiterleitet, und anschließend die Ergebnisse der Datenbankabfrage im Browser in Text- oder Grafikform anzeigt.

#### Aerosol- und Wolkendatenbank OPAC (Optical Properties of Aerosols and Clouds)

Sie besteht aus spektralen optischen Daten typischer Aerosole und Wolken im UV/VIS und IR-Spektralbereich. Zusätzlich enthält die Datenbank ein Programm, das den Zugriff auf diese Parameter über eine umfangreiche Eingabedatei ermöglicht. Auch hier wurde eine Internet-Schnittstelle entwickelt, welche aus einer Folge von Eingabemasken besteht, deren Abfolge je nach Nutzer-Input variiert. Das Ergebnis erhält man entweder in Form einer Textdatei oder eines grafischen Quicklooks.

Die nachfolgenden Beispiele zeigen Bildschirmschüsse beider Schnittstellen.

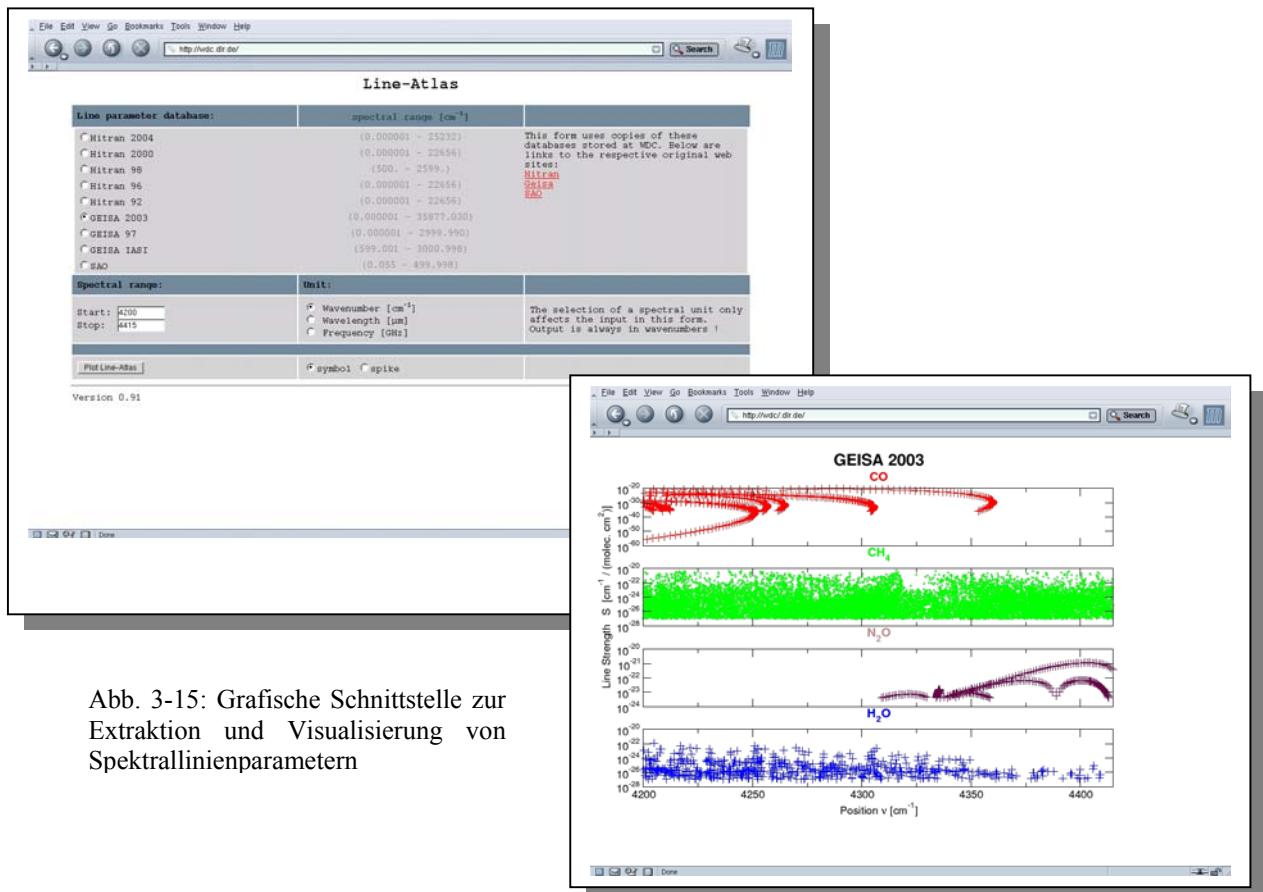


Abb. 3-15: Grafische Schnittstelle zur Extraktion und Visualisierung von Spektrallinienparametern

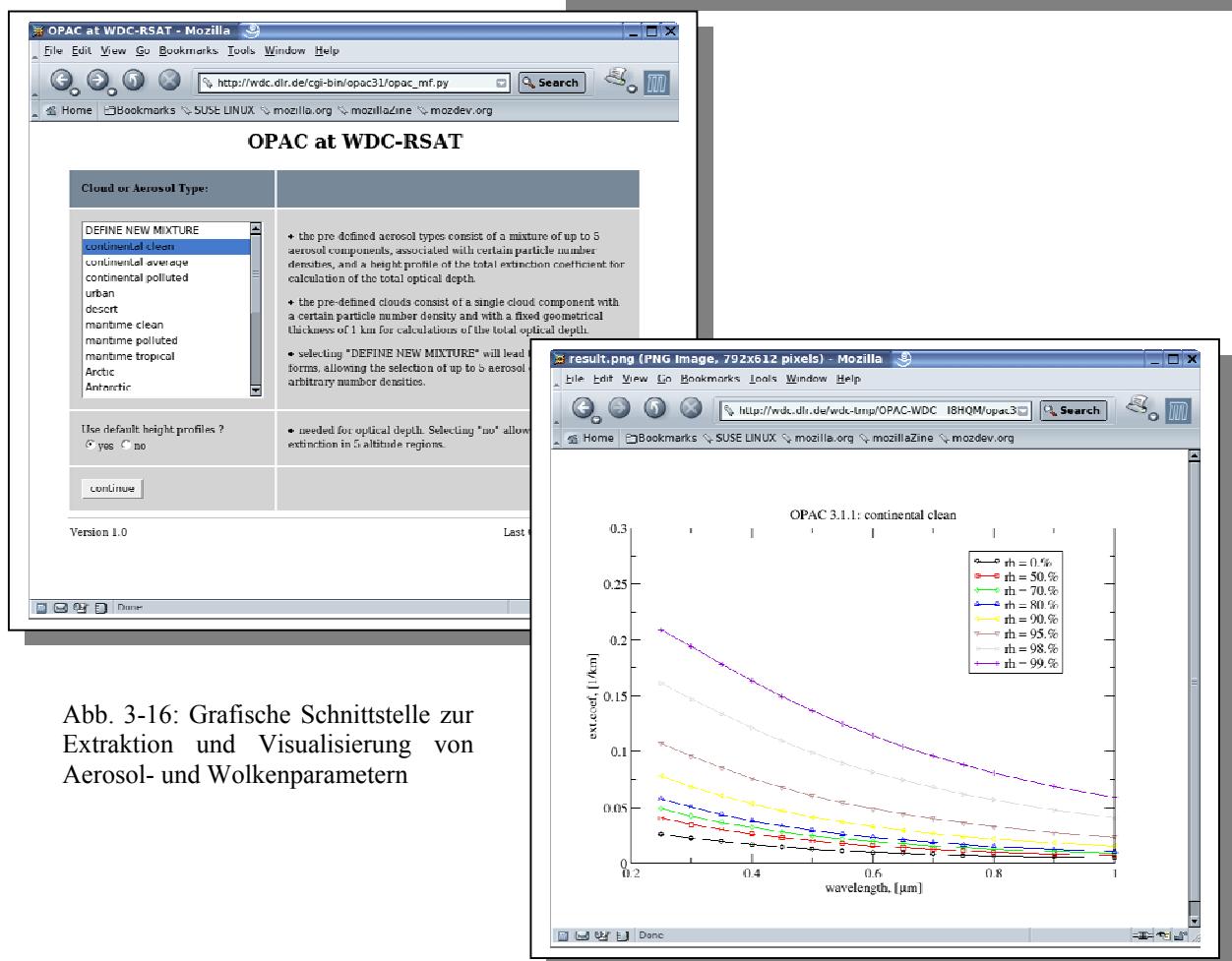


Abb. 3-16: Grafische Schnittstelle zur Extraktion und Visualisierung von Aerosol- und Wolkenparametern

### 3.11 The GMES Service Element for Atmospheric Monitoring - PROMOTE *P. Valks*

PROMOTE, the ESA GMES Service Element for Atmospheric Monitoring provides services on the ozone layer, UV exposure on the ground, air quality and climate change. The services are directed at the needs for information on environment and climate by public authorities and governmental agencies. PROMOTE consists of a large consortium of over 15 service providers and research partners from 11 European countries, and is coordinated by DFD.

#### The First Stage

IMF-AP contributions to the first stage (2004-2005) of the PROMOTE Consolidation Phase were mainly related to the *Air Quality* services. This included the regional tropospheric nitrogen dioxide ( $\text{NO}_2$ ) monitoring service – a collaboration between DFD and IMF – which provides tropospheric  $\text{NO}_2$  columns for the European area to end-users in near real-time. It is based on  $\text{NO}_2$  satellite measurements from the SCIAMACHY instrument, and makes use of stratospheric and tropospheric chemical transport models. SCIAMACHY slant  $\text{NO}_2$  columns are separated into a stratospheric and tropospheric part, using the stratospheric ROSE/DLR model. After this first step, the tropospheric vertical  $\text{NO}_2$  column can be determined by applying an appropriate air mass factor, based on tropospheric  $\text{NO}_2$  profile shape information from the EURAD/RIU air quality model.

#### The Up-scaling Stage

For the up-scaling stage (2006-2009) of the PROMOTE Consolidation Phase, our involvement expanded to additional services. In this second stage, satellite measurements of  $\text{NO}_2$  and formaldehyde (HCHO) from the new GOME-2 instrument, launched onboard the MetOp satellite in October 2006, are used to further improve the PROMOTE Air Quality services.

The new *Aviation Control Support* service of PROMOTE is a cooperation between the Belgian Institute for Space Aeronomy (BIRA), the Royal Netherlands Meteorological Institute (KNMI), Carlo Gavazzi Space (CGS) in Italy, and DLR. Its purpose is to monitor the extension and movement of volcanic plumes over Europe and Africa by using satellite measurements in an analysis & warning system. Volcanic  $\text{SO}_2$  and ash plumes are a major hazard to aviation: volcanic ash can melt in the engines resulting in engine failures and it can limit the view of pilots, while  $\text{SO}_2$  itself is corrosive and creates sulphate deposits in the engine. Atmospheric  $\text{SO}_2$  can be retrieved from GOME and SCIAMACHY backscatter measurements in the UV spectral range (around 320 nm), applying the Differential Optical Absorption Spectroscopy (DOAS) method. This retrieval technique uses the high spectral resolution of both instruments to determine the total column density of  $\text{SO}_2$ . One of the applications of the service occurred late 2004 when SCIAMACHY  $\text{SO}_2$  measurements permitted monitoring the extension of the gas and ash plume from the eruption of the Grímsvötn volcano on Iceland in November 2004. This eruption forced airlines to divert their flights, in order to avoid flying through the volcanic cloud.

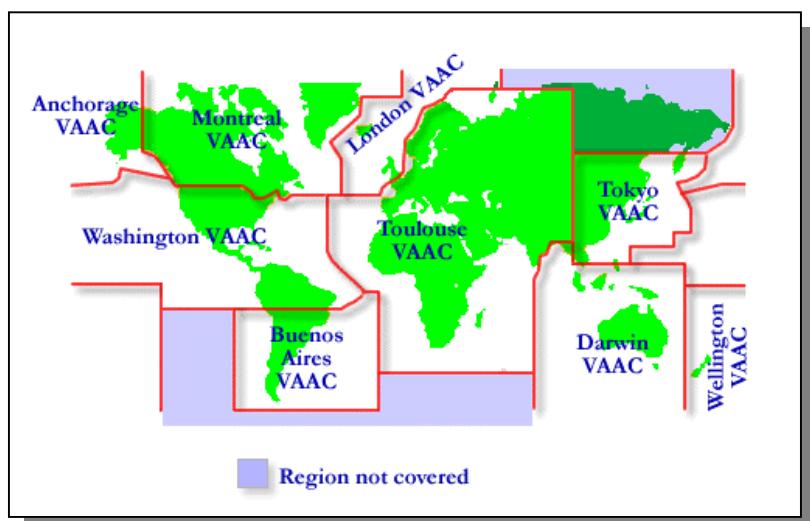


Fig. 3-17: Regional distribution of Volcanic Ash Advisory Centres (VAACs), the core users of the *Aviation Control Support* service.

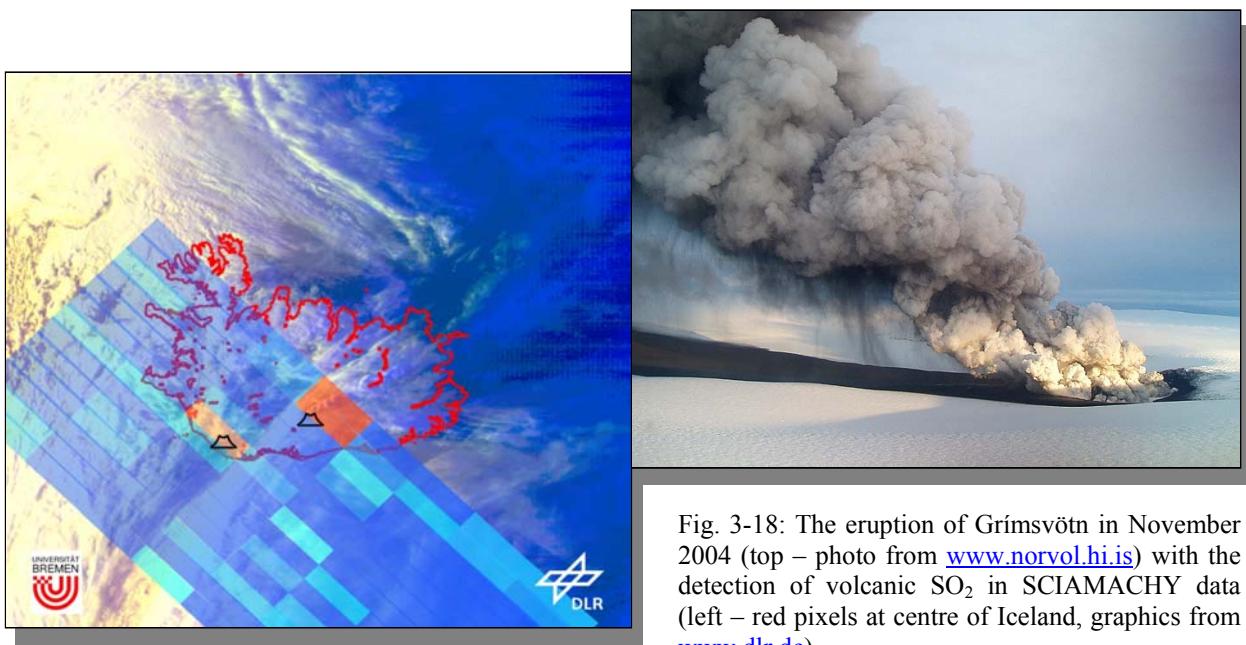


Fig. 3-18: The eruption of Grímsvötn in November 2004 (top – photo from [www.norvol.hi.is](http://www.norvol.hi.is)) with the detection of volcanic SO<sub>2</sub> in SCIAMACHY data (left – red pixels at centre of Iceland, graphics from [www.dlr.de](http://www.dlr.de)).

With GOME-2 and the recent Ozone Monitoring Instrument (OMI) on the EOS-AURA satellite, it is possible to detect and track the volcanic SO<sub>2</sub> and aerosols plumes in near-real time (NRT) and on a global scale, a fact particularly important for an aviation warning service. IMF-AP's contribution to this PROMOTE service concentrates on the provision of NRT SO<sub>2</sub> columns from the GOME-2 instrument. GOME-2 measures the SO<sub>2</sub> column with a spatial resolution of 80x40 km<sup>2</sup>, and provides a global coverage within about one day.

Atmospheric SO<sub>2</sub> is not only a hazard to aviation. Volcanic eruptions and SO<sub>2</sub> emissions from anthropogenic sources are also responsible for strong environmental and health impacts, and play an important role in global climate change. Hence, SO<sub>2</sub> columns from the GOME and SCIAMACHY instruments are not only used for the *Aviation Control Support* service, but also for the PROMOTE *Air Quality* services. Especially for the *Air Quality* services, an accurate retrieval of vertical SO<sub>2</sub> columns is of importance. In the last year, our activities focussed on the calculation of SO<sub>2</sub> air mass factors, which are used to convert the slant SO<sub>2</sub> column into a vertical column. The SO<sub>2</sub> air mass factors are derived with the multiple scattering radiative transfer model LIDORT, and take the vertical distribution of SO<sub>2</sub> into account.

#### Future Services

Two additional PROMOTE services are planned that will be lead by IMF-AP, with contributions from several research partners. The *NRT Ozone Profile* service provides global ozone profiles from GOME and SCIAMACHY to end-users such as the European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF). Finally, the *Water Vapour* column service aims at delivering long-term integrated record of water vapour columns from the ERS-2, ENVISAT and MetOp satellites for European weather forecasting providers and environmental agencies.

### 3.12 Virtuelles Labor

J. Wauer

Das *Virtuelle Labor* (VL – <http://vl.nz.dlr.de>) ist eine Softwareplattform für die web-basierte Nutzung von wissenschaftlicher Software. Ziel des virtuellen Labors 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. Grundlage bildet eine generische Softwareplattform, welche standardisierte Schnittstellen zu Fachlaboren sowie zu den Nutzern besitzt. Die generische Software des VL wurde durch den Bereich *Innovationsmanagement und Technologie-marketing* des DLR gefördert und im Institut für Methodik der Fernerkundung in den letzten Jahren entwickelt.

Seit 2005 wird das VL erfolgreich operationell betrieben. So wird in Streu- und Strahlungstransferlaboren im IMF entwickelte wissenschaftliche Software aus diesen Fachgebieten für externe und interne Nutzer zur Verfügung gestellt. Weiterhin wird im VL enthaltene Software im Rahmen eines Aerosolkurses an der Universität Leipzig durch Studenten genutzt. Der im VL enthaltene Softwarekatalog wird ständig erweitert. Seit kurzem ist für Nutzer auch die optische Aerosol- und Wolkendatenbank OPAC verfügbar, siehe Abbildung 3-19.

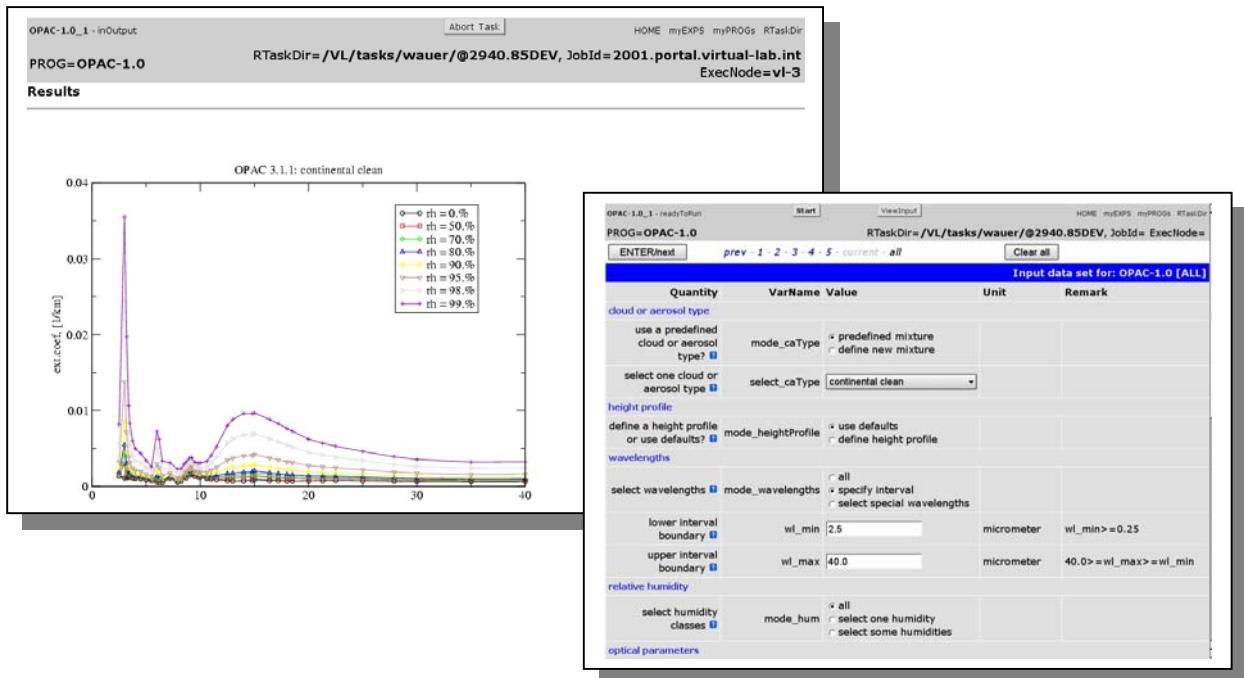


Abb. 3-19: Eingabemaske und Ergebnis eines OPAC-Experiments im *Virtuellen Labor*

Das VL wird darüber hinaus in externen Projekten eingesetzt. Dies geschieht einerseits im Rahmen von ESAs Earth Explorer Mission ADM-Aeolus. Das VL dient hier in der Entwicklungsphase des L1B-Prozessors zur Generierung von Testdaten für den Prototyp-Prozessor des DLR.

Zusätzlich wird das VL in einer Kooperation mit der Scheller Systemtechnik GmbH Wismar (SST) eingesetzt. Die SST hat im Rahmen des Projektes EIP4y eine Enterprise Information Plattform (EIP) entwickelt, mit der Geschäftsprozesse in Firmen optimiert werden können. Dies umfasst beispielsweise typische Anwendungen wie den sicheren und nachverfolgbaren Austausch von Geschäftsdokumenten oder die Abarbeitung und Abrechnung von Bestellungen. Ziel des Projektes EIP4y war die Kopplung der EIP-Software mit dem virtuellen Labor des DLR, wozu unter anderem die VL-Software bei SST installiert wurde. Durch diese Kopplung ist es möglich, die Funktionalität beider Systeme gemeinsam zu nutzen. Eine erste Anwendung ist hierbei die Abrechnung der Rechenzeiten für Nutzer des VL. Dazu wurde eine Schnittstelle zur EIP-Software definiert, so dass diese die dazu notwendige Information einlesen und weiterbearbeiten kann. Durch Einbringen unserer Erfahrungen mit dem VL als universellem Informationsportal bestehen damit sehr gute Aussichten, den Einsatz dieser DLR-Entwicklung im Bereich E-Science und E-Learning zukünftig im kommerziellen Umfeld weiter ausbauen zu können.

### 3.13 Lichtstreuung an Chebyshev-Teilchen höherer Ordnung

*T. Rother, J. Wauer, K. Schmidt*

Chebyshev-Teilchen sind aus mehreren Gründen von besonderem Interesse für Fernerkundungsverfahren wie etwa LIDAR-, Radar- oder Sonnenphotometermessungen. Einer der Gründe ist darin zu sehen, dass mit Hilfe des kontinuierlich veränderbaren Deformationsparameters (siehe unten) Teilchenformen generiert werden können, die sowohl konvexe als auch konkave Formen aufweisen. Weiterhin lassen sich durch die Überlagerung von Chebyshev-Polynomen nahezu beliebig geformte, rotationssymmetrische Partikel generieren, wie etwa Regentropfen oder Hagelkerne, die ab einer gewissen Größe von der Kugelform abweichen. Ihr Lichtstreuverhalten war und ist deshalb immer wieder Gegenstand intensiver Untersuchungen. Die (rotationssymmetrische) Geometrie dieser Teilchen ist durch die Parameterform

$$r(\theta) = r_{\text{basis}}(\theta) \cdot [1 + \varepsilon \cdot \cos(n\theta)]$$

gegeben. Hierbei beschreibt  $r_{\text{basis}}(\theta)$  die Basisgeometrie,  $\varepsilon$  den Deformationsparameter und  $n$  gibt die Ordnung des Polynoms an. Bisher wurden entsprechende Streulichtanalysen ausnahmslos an Chebyshev-Teilchen vorgenommen, welche durch Polynome niedriger Ordnung ( $n \leq 8$ ) charakterisiert sind und als Basisgeometrie die Kugelform, also  $r_{\text{basis}}(\theta) = \text{const.}$  verwenden.

Vor kurzem konnten wir nun erste Ergebnisse zum Streuverhalten von Chebyshev-Teilchen höherer Ordnung ( $n \approx 45$ ) vorstellen und zeigen, dass mit Hilfe solcher Teilchen reguläre und insbesondere auch nichtkugelförmige Basisteilchen mit aufgeprägter Oberflächenirregularität modellierbar sind. Zum Nachweis haben wir die Phasenfunktion und das 33- und 44-Element der Phasenmatrix für eine kugelförmige Basisgeometrie ausgewertet. Überraschend war zum einen die Tatsache, dass die Phasenfunktion für einen fixierten Deformationsparameter mit zunehmender Ordnung des Polynoms unabhängig von der Ordnung wurde und das typische Streuverhalten eines rauen Teilchens zeigte. Abbildung 3-20 zeigt die entsprechenden Phasenfunktionen (Parameter: Brechzahl  $n_r = 1.31$ ,  $\varepsilon = 0.05$ ,  $k_r = 27.5$ ).

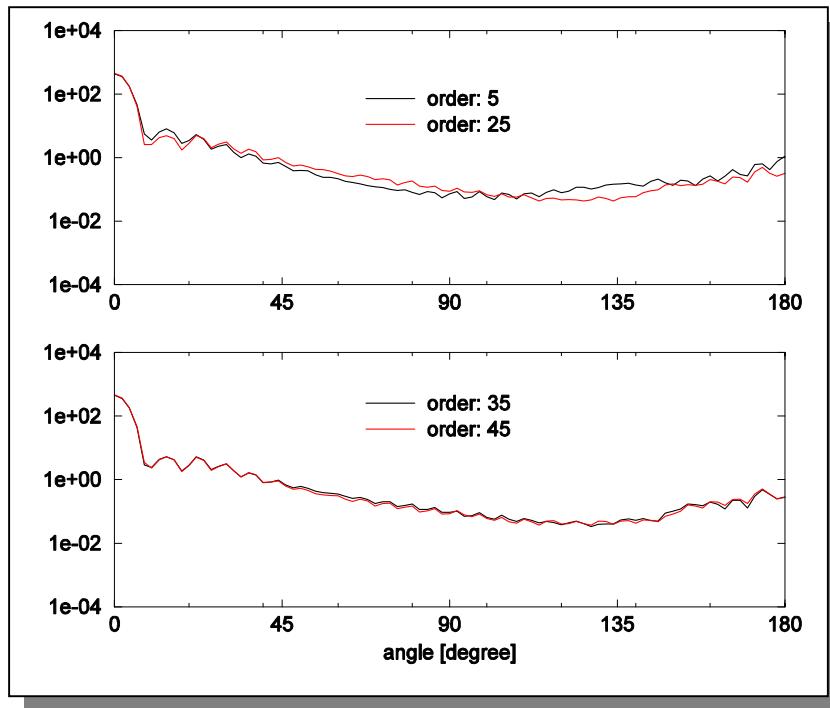


Abb. 3-20: Phasenfunktionen von Chebyshev-Teilchen unterschiedlicher Ordnungen

Im Vergleich zum Streuverhalten der zugrunde liegenden Kugel erhalten wir das für raue Teilchen typische Ansteigen der Intensität im seitlichen Winkelbereich sowie eine im Gegensatz zu regulären nichtkugelförmigen Teilchen ebenfalls erhöhte Rückstreuintensität. Letzteres verstärkt sich mit zunehmendem Größenparameter, insbesondere auch bei stärkerer Absorption der Teilchen. Es handelt

sich hierbei um einen reinen Oberflächeneffekt (vgl. Abb. 3-21). Ein weiteres wesentliches Indiz für die Betrachtung von Chebyshev-Teilchen höherer Ordnung als rauhe Teilchen liefert ein Vergleich der 33- und 44-Elemente der Phasenmatrix, wenn wir als Basisgeometrie einen kugelförmigen Streuer wählen. Aus statistischen Überlegungen folgt, dass beide Elemente in diesem Fall identisch sein müssen. Numerisch konnte dieses Verhalten von uns in der Tat nachgewiesen werden. Wählt man jedoch als Basisgeometrie eine sphäroidale Grundstruktur, geht diese Eigenschaft verloren. Auch das zeigten die von uns erzielten Ergebnisse.

Mit den Chebyshev-Teilchen höherer Ordnung steht somit eine Geometrie zur Verfügung, mit der unterschiedlichste Effekte im Streuverhalten und deren Einfluss auf spezielle Fernerkundungsverfahren mit vertretbarem Aufwand analysiert werden können.

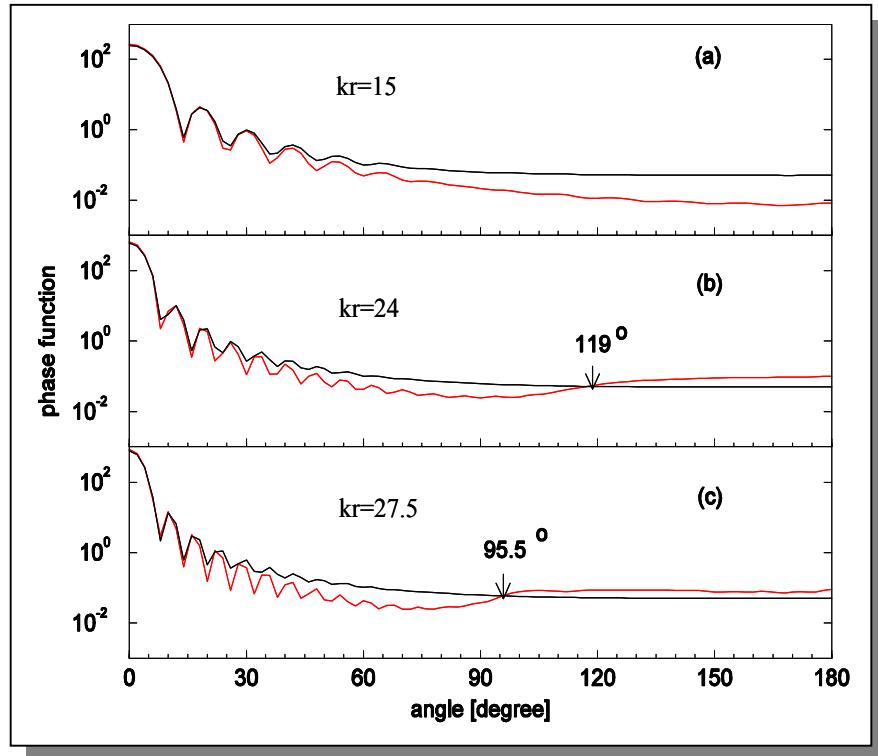


Abb. 3-21: Vergleich der Phasenfunktionen von Chebyshev-Teilchen (rote Kurven) und kugelförmigen Teilchen (schwarze Kurven) mit hoher Absorption bei unterschiedlichen Größenparametern ( $n_r = 1.47 + 0.389i$ ).

### 3.14 3D Solar Radiative Transfer with Monte Carlo – Contributions by the University of Leipzig to the 4D-CLOUDS Project

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

Because of their optical and geometrical properties, clouds are the main modulator of the radiative fluxes in the Earth's atmosphere. As clouds have variability in all the spatial dimensions, three dimensional (3D) calculations are needed for dealing with the exact radiative transfer (RT) in the atmosphere. However, due to its expensive computational cost, this approach is prohibitive for weather forecasting and climate models. One dimensional (1D) parameterizations of the RT are used instead. The independent column approximation (ICA) deals with the spatial variability of the cloud fields by performing 1D calculations in every atmospheric column. Thus, ICA treats the 3D variability of clouds but does not allow for the horizontal photon transfer between the grid columns. The three-dimensional radiative transfer effect (3D effect) is defined as the difference between the full 3D-calculations and the ICA. In order to be able to estimate the 3D effect, realistic clouds are required. However, up to now it is impossible to capture the full 3D cloud structure in space and time by means of remote sensing or in-situ measurements. One way to overcome this problem is to use certain statistical properties from dedicated cloud measurements and to take them as input for stochastic cloud generators for producing 3D clouds, see *Venema et al. (2006)*. In the past year we studied the 3D solar radiative effect in 2D and 3D generated clouds which share the power spectrum and the probability density function with clouds obtained by ground-based measurements.

For computing the solar radiation field for realistic 3D atmospheric scenarios the following hierarchy of approximations were made (see fig. 3-22 for details):

- Plane-parallel (PP) approximation: Here the optical properties of the entire spatial domain filled with clouds is averaged horizontally to produce a single vertically layered cloud to which the standard one-dimensional (1D) RT can be applied.
- Independent column approximation (ICA): Here one deals with 3D spatially resolved fields of optical properties but performs the RT 1D fashion for every single grid column.
- Tilted independent column approximation (TICA): This treats the RT in a one-dimensional fashion by interpreting the optical properties of the 3D cloud in columns which are tilted in the direction of the incident direct solar beam.
- Full 3D RT calculations: Here one takes due account of the fully 3D spatially resolved fields of optical properties and performs the RT in 3D, i.e. allowing the photons to move through the entire atmospheric domain.

According to *Hinkelmann et al. (2005)* the following 3D radiative effects can be defined in connection with clouds:

- 3D radiative transfer effect  $\Delta(\text{ICA}-\text{3D})$ : representing the difference between the ‘exact’ 3D radiative transfer and the independent pixel approximation,
- ‘Horizontal’ radiative transfer effect  $\Delta(\text{TICA}-\text{3D})$ : representing the propagation of photons in the direction perpendicular to the incoming solar beam,
- Cloud sampling effect  $\Delta(\text{ICA}-\text{TICA})$ : representing the error due to the way of sampling the cloud properties in the vertical direction.

$$\begin{aligned}\Delta(\text{ICA}-\text{3D}) &= (X_{\text{ICA}} - X_{\text{3D}}) / X_{\text{3D}}, & X = R, T, A \\ \Delta(\text{TICA}-\text{3D}) &= (X_{\text{TICA}} - X_{\text{3D}}) / X_{\text{3D}} \\ \Delta(\text{ICA}-\text{TICA}) &= (X_{\text{ICA}} - X_{\text{TICA}}) / X_{\text{3D}}\end{aligned}$$

The parameters R, T and A represent the reflection, transmission and absorption of the domain.

The full 3D radiative transfer effect is given by the sum of the ‘horizontal’ radiative transfer effect and the radiative effect caused by the particular way of sampling the extinction field of the cloud, i.e.

$$\Delta(\text{ICA}-\text{3D}) = \Delta(\text{TICA}-\text{3D}) + \Delta(\text{ICA}-\text{TICA})$$

The 3D geometry effect is the error due to the neglect of the horizontal variability of the cloud optical properties. It can be expressed as

$$\Delta(PP - ICA) = (X_{PP} - X_{ICA})/X_{3D}$$

A selection of clouds measured during the second BALTEX Bridge Cloud (BBC2) campaign were used as input for the RT computations (note that the cloud fields' horizontal dimension is approximately 3 km x 3 km). With the help of a stochastic cloud generator it was possible to produce 3D clouds with the same relevant statistical properties as the ones for the measured clouds.

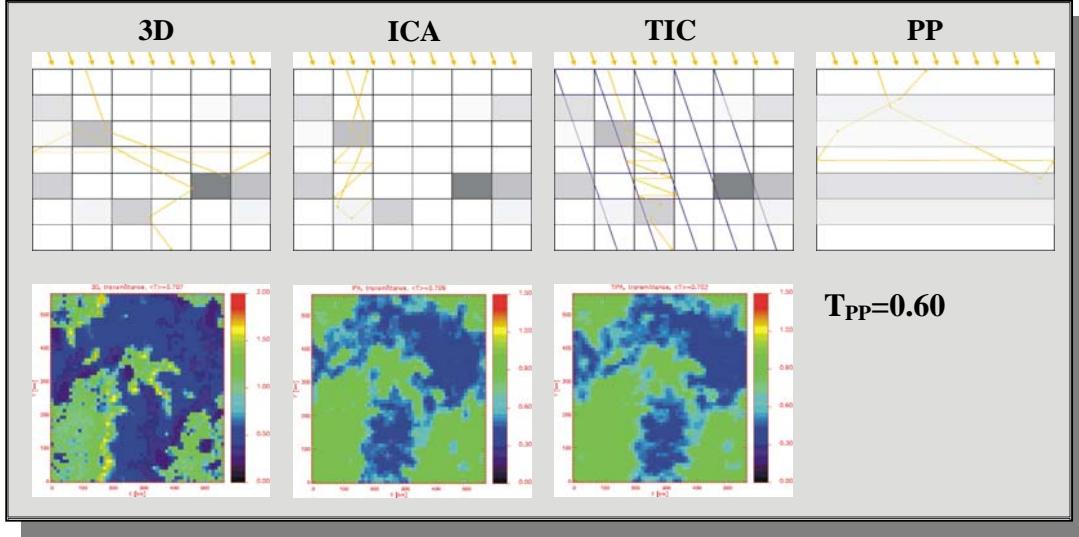


Fig. 3-22: Schematic illustration of the simulation modes 3D, TICA, ICA and PP of the Monte Carlo radiative transfer model: The lower three contour plots show the transmission field  $T(x,y)$  of a 3D cloud field (not shown). Note that for the PP approximation there is only one transmission value for the horizontally homogeneous plane-parallel cloud.

For the Monte Carlo simulations of the solar radiative transfer the following scenarios had been chosen:

- 20 measured and  $2 \times 20$  stochastic clouds
- monochromatic calculations: 550 nm
- $10^7$  photons
- no atmospheric effects
- periodic boundary conditions
- solar zenith angle ( $\theta_0$ ):  $0^\circ, 60^\circ$
- solar azimuth angle ( $\phi_0$ ):  $0^\circ$
- Monte Carlo calculation modes: 3D, TICA, ICA, PP

In fig. 3-23 we exemplarily illustrate the pure 3D geometry effect for the cloud reflection of the  $2 \times 20$  stochastic BBC2 clouds. From similar results for the other radiative effects as defined above (which are not shown here), it can be concluded that always  $\Delta(PP-ICA) > \Delta(ICA-3D)$ . For the spatially highly resolved clouds considered here the geometry effect is about one order of magnitude larger than the 3D radiative transfer effect, i.e. when dealing with RT in ICA mode the major part of the PP bias is removed. Nevertheless, energetically speaking the remaining difference of a few percent between the ICA and 3D radiative effect is of the same order of magnitude as, for example, the effect caused by aerosols, and thus can not be neglected.

The comparison of 3D RT calculations involving the various modes of approximation with spectral irradiance measurements made during the BBC1 and BBC2 campaigns will be carried out as the next step. In this manner we will gain further insight into the complex interplay between the spatial variability of clouds and their radiative budget properties.

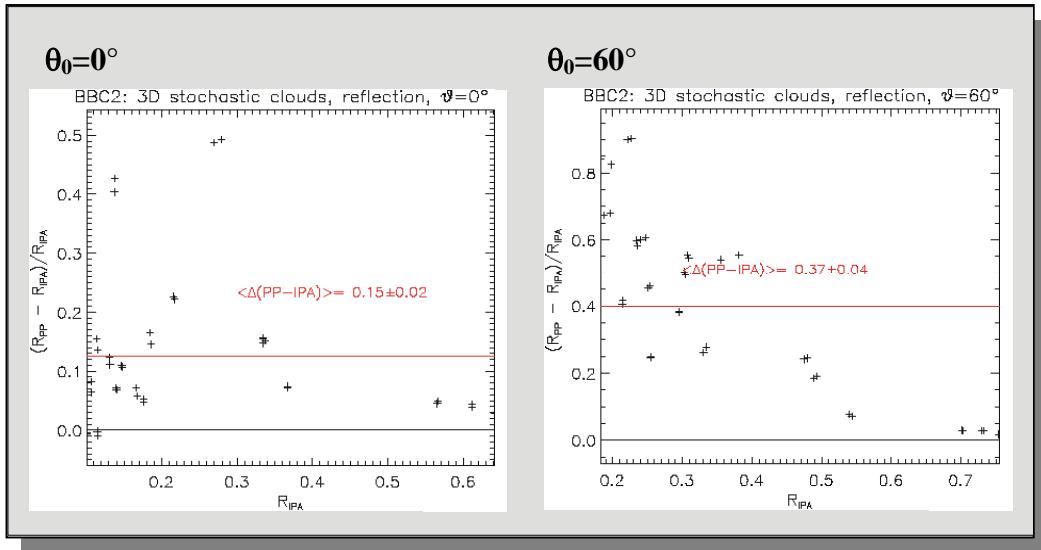


Figure 3-23: Illustration of the pure 3D geometry radiative effect for the set of 20 measured BBC2 clouds.

### References:

- Hinkelman, L.M., B. Stevens, K.F. Evans: A large-eddy simulation of anisotropy in fair-weather cumulus cloud field. *J. Atmos. Sci.*, 62, 2155-2171, 2005
- Venema V., S. Meyer, S. Gimeno G., A. Kniffka, C. Simmer, S. Crewell, U. Löhnert, T. Trautmann, A. Macke: Surrogate cloud fields generated with the Iterative Amplitude Adapted Fourier Transform algorithm. *Tellus*, 58 A, 104-120, 2006

### **3.15 Lehrbuch über Lichtstreuung an Teilchensystemen**

*A. Doicu*

Streuung an Teilchen nimmt einen breiten Raum in der Theorie der Lichtausbreitung ein. Zahlreiche Anwendungen beruhen auf der Untersuchung der Wechselwirkung zwischen Teilchen und elektromagnetischer Strahlung. Insbesondere interessiert uns in unserem Bereich, wie die Fernerkundung der Erdatmosphäre durch Fortschritte auf dem Gebiet der Streutheorie weiterentwickelt werden kann.

Zusammen mit T. Wriedt (Institut für Werkstofftechnik, Universität Bremen) und Y. Eremin (Lomonosov State University, Moskau) wurde ein Lehrbuch verfasst, in dem wir spezielle Methoden zur Untersuchung von Lichtstreuung an Teilchensystemen beschreiben. Das Buch erschien 2006 im Springer-Verlag unter dem Titel: *Light Scattering by Systems of Particles. Null-Field Method with Discrete Sources – Theory and Programs*. Die nachfolgende Beschreibung ist dem Vorwort entnommen.

Since the classic paper by *Mie (1908)* or even the papers by *Clebsch (1863)* and *Lorenz (1890)* there is a permanent preoccupation in light scattering theory. Mie was interested in the varied colours exhibited by colloidal suspensions of noble metal spheres, but nowadays, the theory of light scattering by particles covers a much broader and diverse field. Particles encountered in practical applications are no longer spherical; they are nonspherical, nonrotational symmetric, inhomogeneous, coated, chiral or anisotropic.

Light scattering simulation is needed in optical particle characterization to understand new physical phenomena or to design new particle diagnostics systems. Other examples of applications are climatology and remote sensing of Earth and planetary atmospheres, which rely on the analysis of the parameters of radiation scattered by aerosol, clouds and precipitation. Similar electromagnetic modelling methods are needed to investigate microwave scattering by raindrops and ice crystals, while electromagnetic scattering is also encountered in astrophysics, ocean and biological optics, optical communications engineering and photonics technology. Specifically, in near-field- or nano-optics and the design of optical sensor,

biosensors or particle surface scanners, light scattering by particles on or near infinite surfaces is of interest.

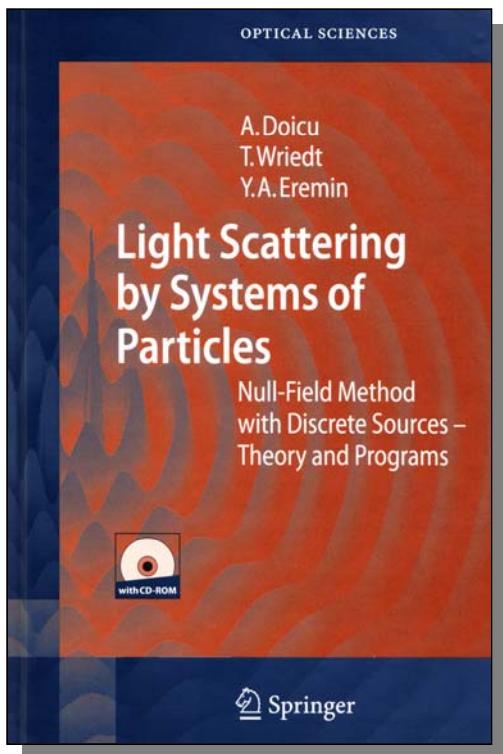


Abb. 3-24: Titelseite des Lehrbuchs über Lichtstreuung

Many techniques have been developed for analyzing scattering problems. Each of the available methods generally has a range of applicability that is determined by the size of the particle relative to the wavelength of the incident radiation. Classical methods of solution like the finite-difference method, finite element method or integral equation method, owing to their universality, lead to computational algorithms that are expensive in computer resources. This significantly restricts their use in studying electromagnetic scattering by large particles. In the last years, the null-field method has become an efficient and powerful tool for rigorously computing electromagnetic scattering by single and compounded particles significantly larger than a wavelength. In many applications, it compares favourably to other techniques in terms of the efficiency, accuracy and size parameter range and is the only method that has been used in computations for thousand of particles in random orientation.

This monograph is based on our own research activity over the last decade and is intended to provide an exhaustive analysis of the null-field method and to present appropriate computer programs for solving various scattering problems. The following outline should provide a fair idea of the main intent and content of the book.

In the first chapter we recapitulate the fundamentals of classical electromagnetics and optics which are required to present the theory of the null-field method. The next chapter provides a comprehensive analysis of the null-field method for various electromagnetic scattering problems. This includes scattering by:

- dielectric (homogeneous, isotropic or uniaxial anisotropic), perfectly conducting and chiral particles with axisymmetric and nonaxisymmetric surfaces,
- inhomogeneous, layered and composite particles,
- clusters of arbitrarily shaped particles, and
- particles on or near a plane surface.

The null-field method is used to compute the  $\mathbf{T}$  matrix of each individual particle and the  $\mathbf{T}$ -matrix formalism is employed to analyze systems of particles. For homogeneous, composite and layered, axisymmetric particles, the null-field method with discrete sources is applied to improve the numerical stability of the conventional method. Evanescent wave scattering and scattering by a half-space with randomly distributed particles are also discussed. To extend the domain of applicability of the method, plane waves and Gaussian laser beams are considered as external excitations. The last chapter covers the numerical analysis of the null-field method by presenting some exemplary computational results.

For all scattering problems discussed in the preceding chapters we developed a Fortran software package which is provided on a CD with the book. After a description of the Fortran programs we present a number of exemplary computational results with the intention to demonstrate the broad range of applicability of the method. These should enable the readers to adapt and extend the programs to other specific applications and to gain some practical experience with the methods outlined in the book. Because it is hardly possible to comprehensively address all aspects and computational issues, we choose those topics that we think are currently the most interesting applications in the growing field of light scattering theory.

This volume is intended for engineering and physics students as well as researchers in scattering theory, and therefore we decided to leave out rigorous mathematical details. The properties of scalar and vector spherical wave functions, addition theorems under translation and rotation of the coordinate systems and

some completeness results are presented in appendices. These can be regarded as a collection of necessary formulas.

### References

*Mie, G.:* Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metalllösungen, Annalen der Physik, Vierte Folge, Band 25, No. 3, 377-445, 1908

*Clebsch, A.:* Über die Reflexion an einer Kugelfläche, Journal für Mathematik, Band 61, Heft 3, 195-262, 1863

*Lorenz, L.:* Lysbevaegelsen i og uden for en af plane Lysbolger belyst Kugle. Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskabs Skrifter, 6, 1-62, 1890

### **3.16 Studie zum Streuverhalten von Plasmateilchen**

*K. Schmidt*

Im Rahmen einer vom Land Mecklenburg-Vorpommern geförderten Initiative zur Stärkung der DLR-Einrichtung Neustrelitz wurde im Auftrag des Instituts für Niedertemperatur-Plasmaphysik (INP) Greifswald eine Studie zum Streuverhalten von Plasmateilchen durchgeführt. Bei den betrachteten Teilchen handelt es sich um feste Mikropartikel, die zusätzlich zu den im Allgemeinen wesentlich kleineren, klassischen Komponenten wie Elektronen, Ionen, Atome, Moleküle oder Radikale im Plasmavolumen vorhanden sind. Derartige Plasmen werden auch als staubige Plasmen bezeichnet. Sie sind weit verbreitet und spielen eine große Rolle in zahlreichen technischen Anwendungen wie beispielsweise dem Ätzen und Beschichten von Oberflächen oder in der Produktion von Nanopartikeln. Aufgrund ihrer Bedeutung ist das INP Greifswald am Aufbau einer *in situ* Diagnostik dieser Teilchen interessiert. Dabei geht es vor allem um die Gewinnung von Informationen über deren morphologische Eigenschaften wie Größe und Form. Hierfür bieten sich Verfahren an, die auf der Streuung von Licht an diesen Partikeln basieren.

Deshalb bestand das Ziel der Studie darin, an ausgewählten Plasmateilchen die Machbarkeit derartiger Verfahren zu untersuchen und ggf. Messszenarien abzuleiten. Auf Vorschlag des INP Greifswald wurden in der Studie folgende zwei Teilchentypen betrachtet:

- Melaminharz-Kugel (2.43  $\mu\text{m}$  Radius, Brechzahl 1.68): beschichtet mit CoTMPP (Brechzahl ca. 1.50-1.54) oder mit wasserstoffhaltigem amorphen Kohlenstoff (a-C:H, Brechzahl 1.59 + j0.66 bei einer Wellenlänge von 491 nm), Schichtdicke bis maximal 3  $\mu\text{m}$
- Kupfer-Cluster in kettenförmiger und in hexagonal dichtgepackter Konfiguration: bestehend aus maximal 15 gleich großen Kugeln (250 nm Radius jeder Kugel, Brechzahl 1.10 + j2.34 bei einer Wellenlänge von 500 nm, Brechzahl 0.56 + j3.01 bei einer Wellenlänge von 630 nm).

Zur Beschreibung der Streuung ebener elektromagnetischer Wellen an Teilchen des ersten Typs wurde ein spezielles Fortran90-Programm entwickelt. Es kann allgemein zur Behandlung von Mehrschicht-Kugeln genutzt werden und basiert auf der Arbeit von *Yang (2003)*, wobei während der durchgeführten Programmtests ein in dieser Arbeit vorhandener Fehler gefunden und im Code entsprechend verbessert wurde. Aufgrund der begrenzten Ressourcen in der Studie war es nicht möglich, ein weiteres Programm zur Beschreibung der Streuung ebener elektromagnetischer Wellen an Teilchen des zweiten Typs zu entwickeln. Für die Untersuchungen wurde deshalb auf das Public-Domain-Programmpaket von *Mackowski, Fuller und Mishchenko (1999)* zurückgegriffen und unseren Zwecken angepasst.

Die beiden Abbildungen zeigen Beispiele von durchgeführten Rechnungen. Insbesondere ist in der Phasenfunktion von mit a-C:H beschichteten Melaminharz-Kugeln ein stark gedämpftes Verhalten ab einem Streuwinkel von ca. 60° zu erkennen (Abb. 3-25). Dieses wird durch den hohen Imaginärteil der Brechzahl von a-C:H verursacht. Ab einer Schichtdicke von ca. 400 nm ist die Dämpfung durch das a-C:H nahezu perfekt. Ferner ist das Anwachsen der Schicht deutlich zu sehen. Dieser Winkelbereich kann also genutzt werden, a-C:H-Schichtdicken aus Streulichtmessungen zu bestimmen. Fehlt die Beschichtung, so liegt das oszillierende Streuverhalten der reinen Melaminharz-Kugel vor. Da die Brechzahl von CoTMPP nicht genau bekannt ist, wurden zusätzlich Untersuchungen durchgeführt, inwieweit sich Änderungen dieser Brechzahl auf das Streuverhalten auswirken. Es konnte gezeigt werden, dass diese Änderungen in den vorliegenden Fällen nur einen relativ geringen Einfluss besitzen.

Insgesamt erbrachte die Studie den Nachweis, Streugrößen und Winkelbereiche zu identifizieren, die für die Ableitung morphologischer Parameter der betrachteten Mikropartikel aus Streulichtmessungen geeignet sind.

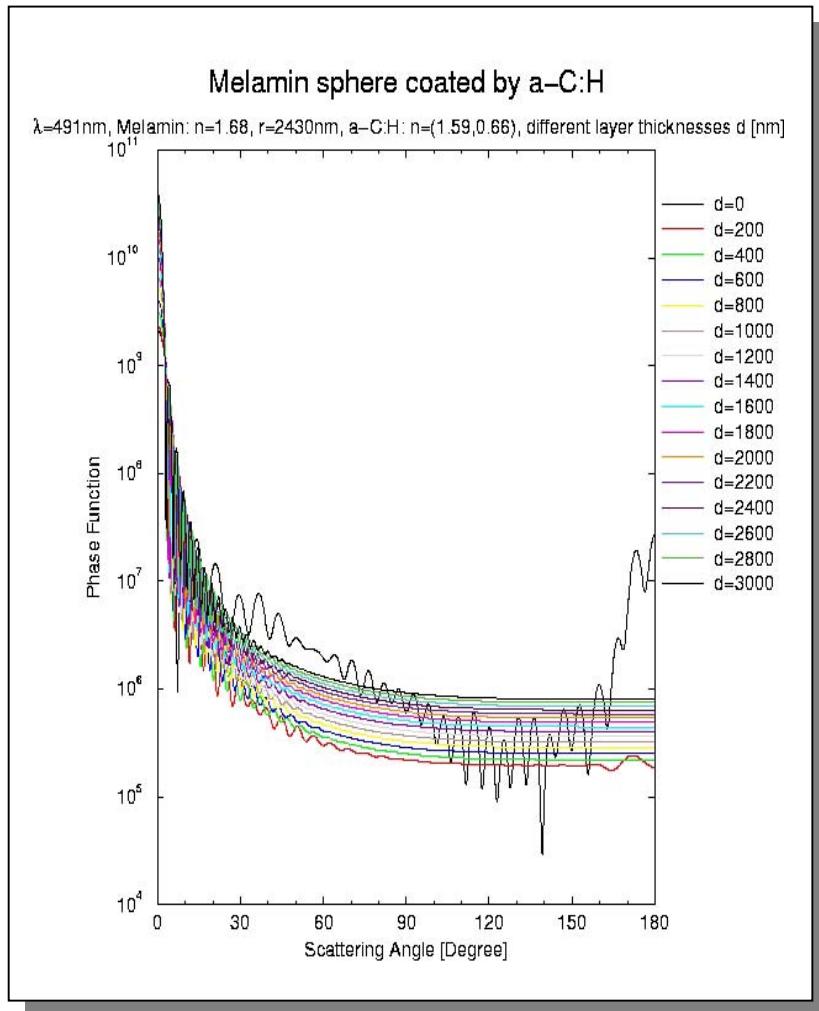


Abb. 3-25: Phasenfunktion einer mit a-C:H beschichteten Melaminharz-Kugel bei wachsender Schichtdicke

Interessant ist, dass sich die im Rahmen der Studie entwickelten bzw. aufbereiteten Programme und die gewonnenen Erfahrungen auch auf atmosphärische Teilchen anwenden lassen. Als Beispiele seien feste und abschmelzende Hagelkörner, rußbedeckte Aerosole und Staubteilchen mit Anlagerungen aus organischem Material, wie sie während des SAMUM-Projektes beobachtet wurden, genannt. Somit liegen die in dieser Studie durchgeführten Arbeiten nicht außerhalb unseres wissenschaftlichen Tätigkeitsfeldes. Vielmehr erweitern sie das Potpourri von atmosphärischen Partikeln, welche einer modellhaften Beschreibung zugänglich sind.

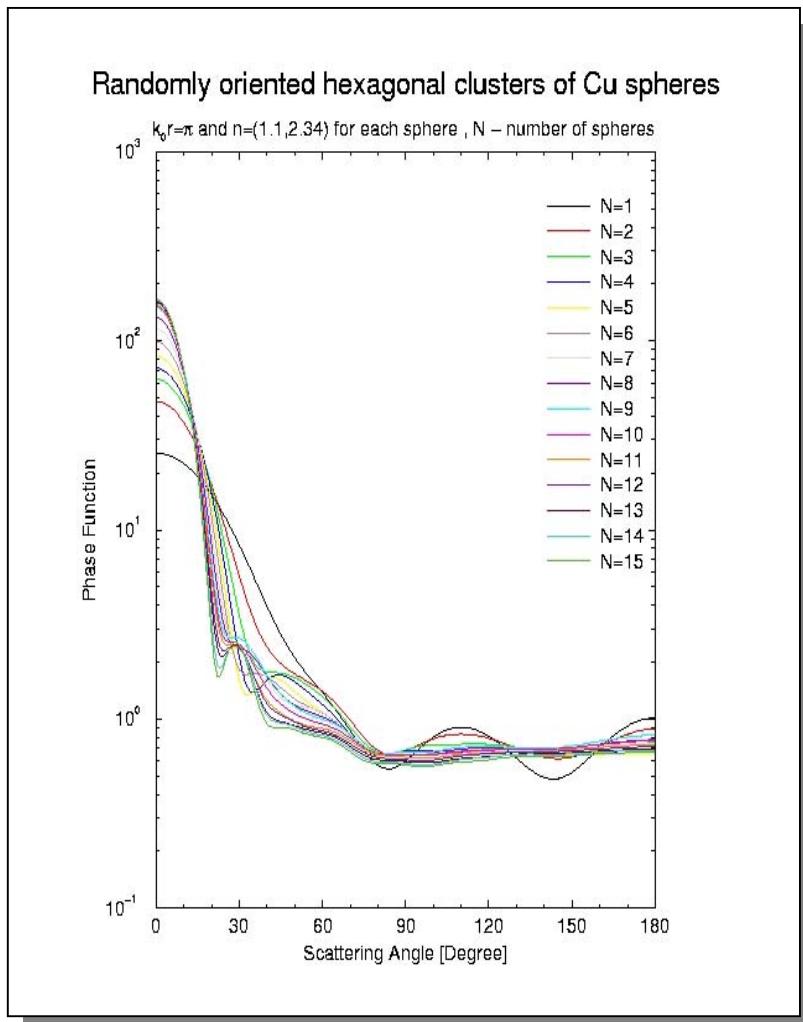


Abb. 3-26: Phasenfunktion eines beliebig orientierten, hexagonal dichtgepackten Clusters aus gleich großen Kupferkugeln bei zunehmender Anzahl der Kugeln

#### Zitierte Literatur

*Mackowski, D. W., Fuller, K., Mishchenko, M.:* Codes for Calculation of Scattering by Clusters of Spheres, <ftp://ftp.eng.auburn.edu/pub/dmckowski/scatcodes/index.html>, 1999

*Yang, W.:* Improved recursive algorithm for light scattering by a multilayered sphere, *Appl. Opt.*, Vol. 42, No. 9, pp. 1710-1720, 2003

### 3.17 The Saharan Mineral Dust Experiment – Contributions of Subproject 2

*S.Otto, T. Trautmann*

There exist several studies about the atmospheric radiative effect (ARE) of mineral dust within the atmosphere. *Quijano et al. (2000)* calculated solar, thermal and total radiative heating rates as well as radiances and the ARE of dust in order to analyse its influence on the radiation budget of the atmosphere. They reported that the vertical distribution of the dust, its optical properties, the presence of clouds, the albedo of the bottom of the atmosphere (BOA) or the sun position have significant impacts on the radiative effect of dust. Total heating rates are always positive, yielding radiative heating of dust layers forced by increasing dust loading. Further, they showed that the diurnally averaged radiative impact at the top of the atmosphere (TOA) depends on the mineralogical composition of the dust. The cloudless total Saharan dust effect at the TOA is reported to be negative ( $\sim -35 \text{ W m}^{-2}$ ) over the ocean for a cosine of the solar zenith angle (SZA) of  $\mu_o = 0.25$  and a dust optical depth of  $\tau_{\text{dust}}(0.5 \mu\text{m}) = 1.0$ , as well as positive ( $\sim +65 \text{ W m}^{-2}$ ) over the desert for  $\mu_o = 0.8$  and  $\tau_{\text{dust}}(0.5) = 1.0$ . Moreover, the dust absorption increases with increasing total dust optical depth such that this negative radiative effect is reduced and can capsize to the positive. *Haywood et al. (2001)* estimated the solar Saharan dust impact at TOA to be about  $-60 \text{ W m}^{-2}$  and the single scattering albedo  $\omega_o(0.55)$  of about 0.87. Furthermore, they found an additional heating in the atmospheric column due to dust absorption. *Myhre et al. (2003)* also predicted a significant negative total radiative effect of mineral dust from the Sahara. The solar impact values ranged from  $-115 \text{ W m}^{-2}$  to  $+8 \text{ W m}^{-2}$ , while the longwave effect was up to  $+8 \text{ W m}^{-2}$ , and the diurnal mean total forcing was found to be close to  $-50 \text{ W m}^{-2}$ .

The second *Aerosol Characterisation Experiment* (ACE-2) was carried out over the North-East Atlantic Ocean between Portugal, the Azores and the Canary Islands during June/July 1997. The main purpose of the experiment was to study the characteristics of natural and anthropogenic aerosols, as well as their transformation and removal processes. Measurements were performed from several ground-based stations, research aircrafts and a research vessel. In our report measured size distributions of Saharan mineral dust aerosols (see fig. 3-27) observed on July 8, 1997 during the ACE-2 campaign were taken as input for radiative transfer computations in order to calculate the solar and longwave ARE of the dust plume. From these aerosol data the vertically resolved spectral optical properties of the Saharan dust layer were calculated via Mie scattering theory. It turned out that both the asymmetry parameter as well as the single scattering albedo vary strongly with altitude and range between  $g(0.55 \mu\text{m}) = 0.65-0.81$  as well as  $\omega_o(0.55) = 0.75-0.96$ . Within the dust layer, containing large particles with diameters  $D_p > 4 \mu\text{m}$ , an asymmetry parameter of  $g(0.55) = 0.81$  and a single scattering albedo of  $\omega_o(0.55) = 0.76$  were found, which is in good agreement with other measurements performed during the ACE-2 experiment. The radiative transfer simulations show a dominant influence of the observed large particles on the extinction and the ARE. As expected, ACE-2 Saharan dust causes a cooling (negative ARE) over ocean but a warming over desert (positive). In particular, it was found out that the large particles contribute at least 20% to the ARE. They always produce a heating of the local atmosphere due to their absorption properties. Fig. 3-28 shows the differences in the radiative heatings if dust particles with diameters larger than  $4 \mu\text{m}$  are totally neglected. We emphasize that the magnitude of the dust radiative heating is significantly affected by the wavelength dependence of the particles' complex refractive index.

The quantitative radiative transfer simulations also point out the effect of uncertainties in the particle size distribution and the complex refractive index of the mineral dust. The aim of future closure studies has to be to measure the large particles when present and to quantify the complex refractive index of mineral dust samples as function of wavelength and particle composition in the particle size ranges. Moreover, for both the interpretation of optical measurements as well as the radiative impact of mineral dust particles their non-spherical shapes as a function of size and composition are expected to play an important role. These are crucial factors for more reliable calculations of the optical properties and the radiative transfer through an atmosphere containing mineral dust. Additionally, in-situ measurements of the optical properties and the shortwave as well as longwave radiation are required for a successful comparison with model simulations. Such in-situ observations have recently been carried out during the SAMUM experiment (<http://samum.tropos.de/>) in summer 2006 in Morocco.

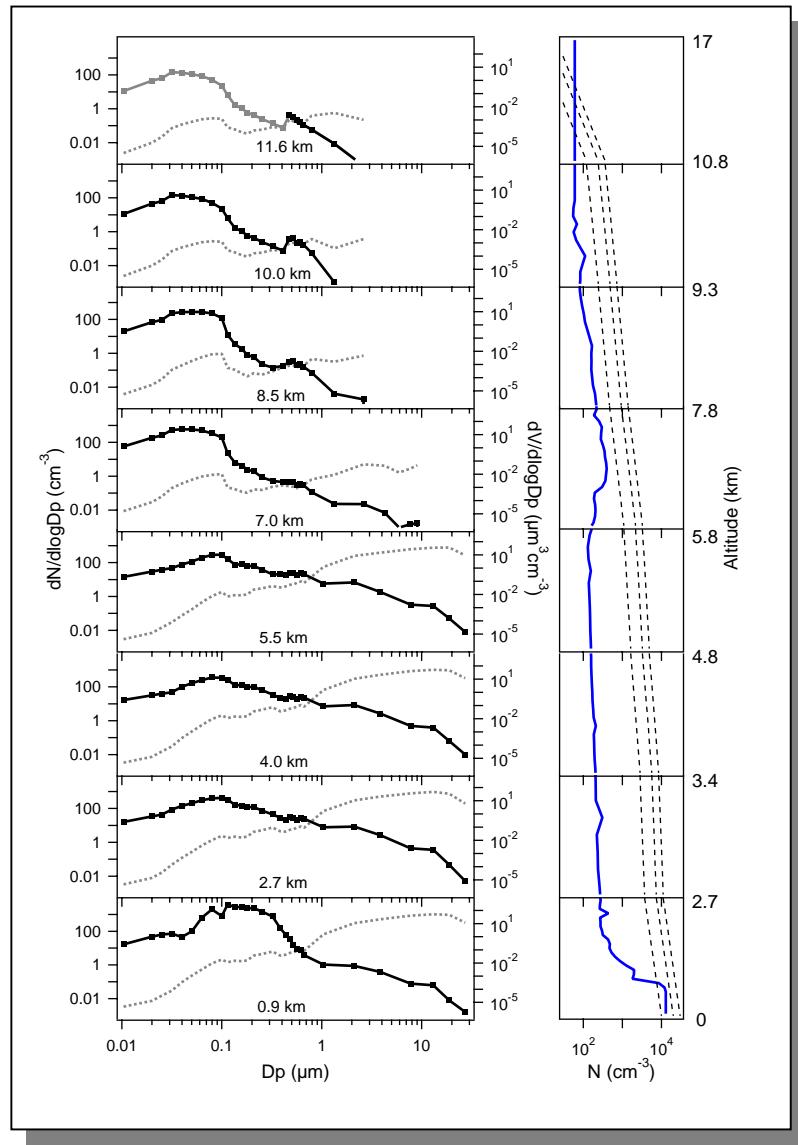


Fig. 3-27: Observed number (solid) and volume (dashed) aerosol size distributions at eight isobaric flight levels with respective altitudes. For further details see *de Reus et al. (2000)*. The right profile shows the observed total number concentration (solid blue), extrapolated to the tropopause (17 km) and the ground. The dotted profiles indicate the number concentrations of the standard maritime and free tropospheric aerosol after *Shettle and Fenn (1979)*.

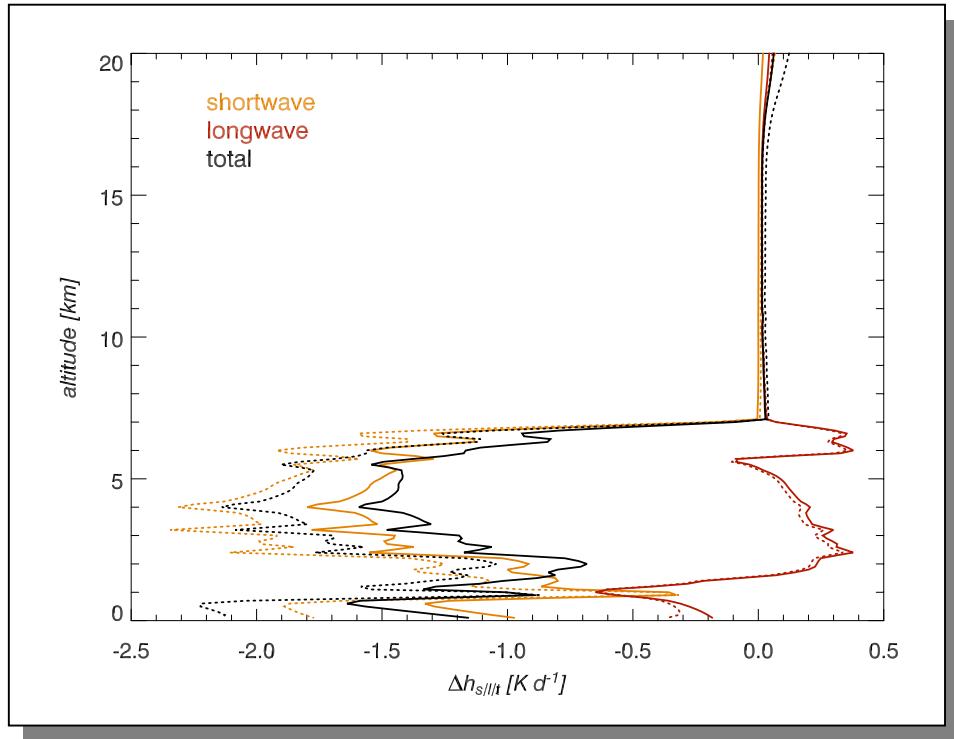


Fig. 3-28: Profiles of the deviation from the shortwave, longwave and total radiative heating rates,  $\Delta h_{s/l/t}$ , of the reference cases *ocean* (solid) and *desert* (dotted), if the large dust particles with diameters beyond  $4 \mu\text{m}$  are neglected.

#### References:

- de Reus, M., F. Dentener, A. Thomas, S. Borrmann, J. Ström, J. Lelieveld*: Airborne observations of dust aerosol over the North Atlantic Ocean during ACE 2: Indications for heterogeneous ozone destruction, *J. Geophys. Res.*, 105, 15263-15275, 2000
- Haywood, J.M., P.N. Francis, M.D. Glew, J.P. Taylor*: Optical properties and direct radiative effect of Saharan dust: A case study of two Saharan dust outbreaks using aircraft data, *J. Geophys. Res.*, 106, No. D16, 18417-18430, 2001
- Myhre, G., A. Grini, J.M. Haywood, F. Stordal, B. Chatenet, D. Tanre, J.K. Sundet, I.S.A. Isaksen*: Modeling the radiative impact of the mineral dust during the Saharan Dust Experiment (SHADE) campaign, *J. Geophys. Res.*, 108, No. D18, 8579, 2003
- Quijano, A.L., I.N. Sokolik, O.B. Toon*: Radiative heating rates and direct radiative forcing by mineral dust in cloudy atmospheric conditions, *J. Geophys. Res.*, 105, No. D10, 12207-12219, 2000
- Shettle, E.P., R.W. Fenn*: Models of the Aerosols of the Lower Atmosphere and the Effects of Humidity Variations on their Optical Properties. Project 7670, Air Force Geoph. Lab., Massachusetts, 1979

## 4. Veröffentlichungen, Vorträge und Tagungen

### 4.0 Buchveröffentlichungen

Doicu, A., T. Wriedt, Y. Eremin: Light Scattering by Systems of Particles. Null-Field Method with Discrete Sources – Theory and Programs, *Springer Series in Optical Science*, 124, Springer, ISBN 3-540-33696-6, 2006

Gottwald, M., H. Bovensmann, G. Lichtenberg, S. Noël, A. von Bargen, S. Slijkhuis, A. Piters, R. Hoogeveen, C. von Savigny, M. Buchwitz, A. Kokhanovsky, A. Richter, A. Rozanov, T. Holzer-Popp, K. Bramstedt, J.-C. Lambert, J. Skupin, F. Wittrock, H. Schrijver, J.P. Burrows: SCIAMACHY, Monitoring the Changing Earth's Atmosphere, M. Gottwald [Ed], DLR/Verlagsservice Rau, 2006

### 4.1 Zeitschriftenartikel

Cosmovici, C., V. Bratina, G. Schwarz, G. Tozzi, M. Mumma, R. Stalio: Comet Hale-Bopp (C/1995 O1): UVSTAR-FUV Spectroscopy from the Space Shuttle, *Astrophysics and Space Science*, 301, 135-143, 2006

Gottwald, M.: La Terre vue de l'espace, *Pour la Science*, 341, 2006

Jerg, M., T. Trautmann: One-dimensional solar radiative transfer: Perturbation approach and its application to independent pixel calculations for realistic cloud fields, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2006

Loyola, D.: Applications of neural network methods to the processing of earth observation satellite data, *Neural Networks*, 19 (2), 168-177, 2006

Loyola, D., P. Valks, T. Ruppert, A. Richter, T. Wagner, W. Thomas, R. van der A, R. Meisner: The 1997 El Niño impact on clouds, water vapour, aerosols and reactive trace gases in the troposphere, as measured by the Global Ozone Monitoring Experiment, *Advances in Geosciences*, 6, 267-272, 2006

Manzini, F., G. Schwarz, C.B. Cosmovici, C. Guaita, L. Comolli, A. Brunati and R. Crippa: Comet Ikeya-Zhang (C/2002 C1): Determination of the Rotation Period From Observations of Morphological Structures, *Earth, Moon, and Planets*, Online First, doi: 10.1007/s11038-005-9062-6, 2006

Mendrok, J., F. Schreier, M. Hoepfner: Estimating cirrus cloud properties from MIPAS data, *Geophys. Res. Lett.*, 2006, submitted

Rother, T., K. Schmidt, J. Wauer, V. Scherbakov, J.F. Gayet: Light scattering on Chebyshev particles of higher order, *Applied Optics*, 45 (23), 6030-6037, 2006

Rother, T.: Self-consistent Green's function formalism for acoustic and light scattering. Part 3: Unitarity and symmetry, *Optics Communications*, 266, 380-389, 2006

Rozanov, V.V., A.A. Kokhanovsky, D. Loyola, R. Siddans, B. Latter, A. Stevens, J.P. Burrows: Intercomparison of cloud top altitudes as derived using GOME and ATSR-2 instruments onboard ERS-2, *Remote Sensing of Environment*, 102 (1-2), 186-193, 2006

Schreier, F.: Optimized Evaluation of a Large Sum of Functions Using a Three-Grid Approach, *Computer Physics Communications*, 174 (10), 783 - 792, doi:10.1016/j.cpc.2005.12.015, 2006

Steinwagner, J. and G. Schwarz: Shape-dependent regularization for the retrieval of atmospheric state parameter profiles, *Applied Optics*, 45, 1000-1009, 2006

Steinwagner, J., G. Schwarz and S. Hilgers: Use of a Maximum Entropy Method as a Regularization Technique during the Retrieval of Trace Gas Profiles from Limb Sounding Measurements, *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 23, 1657-1667, 2006

van Roozendael, M., D. Loyola, R. Spurr, D. Balis, J.-C. Lambert, Y. Livschitz, P. Valks, T. Ruppert, P. Kenter, C. Fayt, C. Zehner: Ten years of GOME/ERS-2 total ozone data – The new GOME data processor (GDP) version 4 : 1. Algorithm description, *Journal of Geophysical Research*, 111 (D14311), doi: 10.1029/2005JD006375, 2006

Venema, V., S. Meyer, S. Gimeno Garcia, A. Kniffka, C. Simmer, S. Crewell, U. Löhnert, T. Trautmann, A. Macke: Surrogate cloud fields generated with the Iterative Amplitude Adapted Fourier Transform Algorithm, *Tellus A*, 58 (1), 104-120, 2006

Walter, H., J. Landgraf, F. Spada, and A. Doicu: Linearization of a radiative transfer model in spherical geometry, *J. Geophys. Res.*, 111, D24304, doi:10.1029/2005JD007014, 2006

## 4.2 Proceedingsbeiträge

von Bargen, A., K. Kretschel, A. Doicu, M. Hess, F. Schreier, T. Schröder, C. Lerot, M. Van Roozendael, M. Vountas, A. Kokhanovsky, W. Lotz, H. Bovensmann: The Major Revisions of the Operational SCIAMACHY Level 1b-2 Off-line Data Processor, Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, ESRIN, Frascati, Italien, 2006

von Bargen, A., T. Schröder, A. Doicu, K. Kretschel, C. Lerot, M. Van Roozendael, A. Kokhanovsky, M. Vountas, H. Bovensmann, M. Hess, B. Aberle, F. Schreier: SCIAMACHY Level1b-2 Data Processing: Update of Off-line Data Processor to Version 3.0, Proceedings of the Third Atmospheric Chemistry Validation for ENVISAT Workshop (ACVE-3), ESRIN, Frascati, 2006

Gottwald, M., E. Krieg, S. Noël, M. Wuttke, H. Bovensmann: SCIAMACHY 4 Years in Orbit - Instrument Operations and In-flight Performance Status, Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, ESRIN, Frascati, 2006

Gottwald, M., E. Krieg, S. Noël, H. Bovensmann, J.P. Burrows, M. Wuttke,: SCIAMACHY on ENVISAT – 4 Years in Space: A Status Report; Proceedings of the IEEE 2006 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS'06), Denver, Colorado, USA, 2006

Hungrershöfer, K., O. Schmid, K. Zeromskiene, Y. Iinuma, R.S. Parmar, G. Helas, M. 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, in: Fischer, H., Sohn, B.-J. [Eds.]: Current Problems in Atmospheric Radiation, International Radiation Symposium, 123-126, 2006

Jäkel, E., M. Wendisch, S. Schmidt, T. Trautmann, A. Kniffka: Airborne measurements of up- and downwelling spectral actinic flux densities during the INSPECTRO campaign, in: Fischer, H., Sohn, B.-J. [Eds.]: Current Problems in Atmospheric Radiation, International Radiation Symposium, 355-358, 2006

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, in: Fischer, H., Sohn, B.-J. [Eds.]: Current Problems in Atmospheric Radiation, International Radiation Symposium, 51-54, 2006

Lichtenberg G., S. Slijkhuis, B. Aberle, D. Sherbakov, A. von Bargen: SCIAMACHY Level 0-1 Processing Updates, Proceedings of the Third Atmospheric Chemistry Validation for ENVISAT Workshop (ACVE-3), ESRIN, Frascati, 2006

Meyer-Arnek, J., P. Valks, M. Fader, T. Erbertseder: Estimation of NO<sub>2</sub> amounts emitted from the Portuguese wildfires in 2005: A synergistic use of observations by imaging and atmospheric instruments and chemistry-transport models, in: Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, Frascati, 2006.

Noël, S., H. Bovensmann, K. Bramstedt, J.P. Burrows, M. Gottwald, E. Krieg: SCIAMACHY Light Path Monitoring Results, Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, ESRIN, Frascati, 2006

Riihisaari T., L. Backman, D. Loyola, R. van Oss, O. Tuinder, J. Kujanpää: Satellite Application Facility on Ozone and Atmospheric Chemistry Monitoring, Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, ESRIN, Frascati, 2006

Schreier, F., M. Hess, A. Doicu, T. Schroeder, A. von Bargen: Recent Advances in SCIAMACHY Near Infrared Nadir Level 2 Algorithm Development. Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, ESRIN, Frascati, 2006

Schreier, F., A. Doicu, G. Schwarz, C. Böckmann: Profile Retrieval from MetOp Nadir Sounders: Inversion by Tikhonov Regularization and Verification Methodology. Proceedings of the First EPS/MetOp Research Announcement of Opportunity Workshop, ESA SP-618, ESRIN, Frascati, 2006

Schwarz, G. and S. Hilgers: MIPAS Data Quality – Lessons Learned, Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, ESRIN, Frascati, 2006

Slijkhuis, S., S. Wahl, B. Aberle, A. von Bargen, M. Hess, R. Koopman, T. Fehr: A new tool for SCIAMACHY level 1b to 1c processing, Proceedings of the First ESA Atmospheric Science Conference, ESA SP-628, ESRIN, Frascati, 2006

Tank, V.; K. Beier, M. Hess, E. Lindermeir, E. Lorenz, F. Schreier, B. Zhukov: Investigations of innovative algorithms for quantitative high temperature event (fires, volcano eruptions, etc.) emission analysis applying infrared spectrum and image data fusion, Proceedings of the First EPS-Metop Research Announcement of Opportunity Workshop, ESA SP-618, ESRIN, Frascati, 2006

Valks, P., D. Loyola, M. Van Roozendael, R. Spurr, D. Balis, J.-C. Lambert, Y. Livschitz, T. Ruppert, P. Kenter, C. Fayt, C. Zehner: Operational GOME-2 total column products: The GDP 4.0 Algorithm, Proceedings of the 2006 EUMETSAT Meteorological Satellite Conference, Helsinki, 2006

#### 4.3 Dokumente und Berichte

Aberle, B., und A. von Bargen: SCIAMACHY SciaL1c Tool: Test Procedure Document, Issue 1/B, ENV-TPD-DLR-SCIA-0067, 3. Mai 2006

von Bargen, A.: SCIAMACHY SciaL1c Tool: Architecture Design Document, Issue 1/A, ENV-ADD-DLR-SCIA-0068, 31. Januar 2006

von Bargen, A.: SCIAMACHY SciaL1c Tool: Detailed Processing Model, Issue 1, ENV-DPM-DLR-SCIA-0069, 3. Februar 2006

von Bargen, A.: SCIAMACHY Level 1b to 2 Off-line Processor: Test Procedure Document, Issue 1/A, ENV-TPD-DLR-SCIA-0072, 27. März 2006

von Bargen, A., J. Frerick: SCIAMACHY SciaL1c Tool: Software User Manual, Issue 6, ENV-SUM-DLR-SCIA-0081, 10. Mai 2006

von Bargen, A.: SCIAMACHY Level 1b to 2 Off-line Processor: Computer Resource Note, Issue 1/A, ENV-CRN-DLR-SCIA-0075, 4. Juli 2006

Doicu, A., A. von Bargen: SCIAMACHY Level 1b-2 Off-line Processor: Instructions for Limb MDS of Level 2 Product, Issue 1, ENV-TN-DLR-SCIA-0077, 20. September 2006

Gottwald, M., E. Krieg, J. How, K. Reissig: SCIAMACHY Consolidated Level 0: Statistics for the Year 2005, PO-TN-DLR-SH-0014, Issue 1, Rev. 0, 11. Juli 2006

Kretschel, K., A. von Bargen: SCIAMACHY Level 1b-2 Off-line Processor: Input/Output Data Definition, Issue 4/G, ENV-IODD-DLR-SCIA-0086, 9. März 2006

Lichtenberg, G.: SCIAMACHY Level 0-1c Data Processing: Memorandum for m-factor implementation, Issue 1, ENV-TN-DLR-SCIA-0076, 31. Juli 2006

Schmidt, K.: Abschlussbericht zur *Studie zum Streuverhalten von Plasmateilchen*, 18. Dezember 2006

Schwarz, G.: PIMS Acceptance Test Scenario, Dezember 2006

Slijkhuis, S.: SCIAMACHY Level 0-1b Data Processor: Configuration Management of Auxiliary Data Files, Issue 1/B, ENV-CMA-DLR-SCIA-0062, 20. März 2006

#### 4.4 Vorträge, Poster und Pressemitteilungen

Badaoui, M., F. Schreier, G. Wagner, M. Birk: Retrieval of Molecular Line Parameters from High Resolution Fourier Transform Laboratory Spectra in Support of Atmospheric Spectroscopy, 3. Congrès International Physique des Interactions Rayonnement Matière, (PIRM III), Marakesch, Marokko, 4.-7. April 2006

Badaoui, M., F. Schreier, G. Wagner, M. Birk: An ILS for line parameters measurements in high resolved spectra recorded by FTS for atmospheric remote sensing purposes, OPTIQUE 06, Rabat, Marokko, 19.-20. April 2006

Bovensmann, H., C. Chlebek, J. Carpay, M. Gottwald, S. Noël, M. Buchwitz, A. Richter, A. Rozanov, C. von Savigny, A. Goede, C. Müller, J.P. Burrows: SCIAMACHY 4 years in space – applications, data usage and outlook for the next 4 years, First ESA Atmospheric Science Conference, ESRIN, Frascati, 8.-12. Mai 2006

Chaabouni, H., M. Datcu, G. Schwarz, M. Soccorsi: Image Classification Using a Support Vector Machine, IAS, Toulouse, 3. Juli 2006

Coldewey-Egbers, M., S. Wahl, S. Slijkhuis, B. Aberle, D. Loyola: Long Term Monitoring of GOME/ERS-2 Calibration Parameters, First ESA Atmospheric Science Conference, ESRIN, Frascati, 8.-12. Mai 2006

Doicu, A. and F. Schreier: Inverse problems in atmospheric remote sensing - regularisation methods and applications, IASI Sounding Science Working Group Meeting, Frascati, 17.-19. Mai 2006

Erbertseder, T., F. Baier, J. Meyer-Arnek, D. Loyola, H. Elbern, J. Schwinger: Assimilation of METOP/GOME-2 and IASI observations for global ozone analysis and forecasting, First EPS-MetOp Research Announcement of Opportunity Workshop, Frascati, 15.-17. Mai 2006

Gottwald, M., E. Krieg, S. Noël, M. Wuttke, H. Bovensmann: SCIAMACHY 4 Years in Orbit - Instrument Operations and In-flight Performance Status, First ESA Atmospheric Science Conference, ESRIN, Frascati, 8.-12. Mai 2006

Gottwald, M., E. Krieg, S. Noël, H. Bovensmann, J.P. Burrows, M. Wuttke,: SCIAMACHY on ENVISAT – 4 Years in Space: A Status Report; IEEE 2006 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS'06), Denver, Colorado, USA, 31. Juli - 4. August 2006

Kins, L., H. Claude, U. Köhler, D. Loyola: Comparison of 10 years GOME Ozone Total Column Data with Ground-Based Measurements at Hohenpeissenberg, 7. Deutsche Klimatagung, LMU, Munich, 9.-11. Oktober 2006

Loyola, D.: Using GOME/ERS-2 Ozone Total Column Measurements for Climate Monitoring, 7. Deutsche Klimatagung, LMU, Munich, 9.-11. Oktober 2006

Loyola, D., M. Van Roozendael, R. Spurr, D. Balis, J.-C. Lambert, Y. Livschitz, P. Valks, T. Ruppert, P. Kenter, C. Fayt, C. Zehner, B. Aberle, S. Slijkhuis: 10-Years Operational GOME/ERS-2 Total Column Products: The GDP 4.0 Algorithm, First ESA Atmospheric Science Conference, ESRIN, Frascati, 8.-12. Mai 2006

Hedelt, P.A., H. Rauer, R. Titz, F. Schreier, T. Brown, W. Schmidt, H. Schleicher, R. Alonso, M. Collados: Remote Sensing of Venus' atmosphere during the June 2004 transit. 4th Planetary Formation Workshop, Heidelberg, 1.-3. März 2006

Hedelt, P.A., H. Rauer, R. Titz, F. Schreier, T. Brown, W. Schmidt, H. Schleicher, R. Alonso, M. Collados: Remote Sensing of Venus' atmosphere during the June 2004 transit, EGU 2006, Wien, 2.-7. April 2006

Mendrok, J.: Radiative Transfer Modeling in spherical Atmospheres including Emission and Scattering - Application to Remote Sensing of High Altitude Clouds, National Institute of Information and Communications Technology, Tokio, Japan, 28. Februar 2006

Mendrok, J., M. Hoepfner, F. Schreier: Retrieving Cirrus Cloud Properties from MIPAS Data, EGU General Assembly, Wien, 2.-7. April 2006

Mendrok, J.: Validating the radiative transfer model SARTre – Retrieving Cirrus Cloud Properties from MIPAS Data, 3<sup>rd</sup> International Limb Workshop, Montreal, Canada, 25.-28. April 2006

Mendrok, J.: The radiative transfer model SARTre – Verification and Validation, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruhe, 5. Mai 2006

Riihisaari, T., L. Backman, D. Loyola, R. van Oss, O. Tuinder, J. Kujanpää: Satellite Application Facility on Ozone and Atmospheric Chemistry Monitoring, First ESA Atmospheric Science Conference, ESRIN, Frascati, 8.-12. Mai 2006

Slijkhuis, S., B. Aberle, D. Loyola: Improvements of GDP Level 0-1 Processing System in the Framework of CHEOPS-GOME, First ESA Atmospheric Science Conference, ESRIN, Frascati, 8.-12. Mai 2006

Schreier, F., M. Hess, A. Doicu, T. Schroeder, A. von Bargen: Recent Advances in SCIAMACHY Near Infrared Nadir Level 2 Algorithm Development, First ESA Atmospheric Science Conference, ESRIN, Frascati, 8.-12. Mai 2006

Schreier, F., A. Doicu, G. Schwarz, C. Böckmann: Profile Retrieval from MetOp Nadir Sounders: Inversion by Tikhonov Regularization and Verification Methodology. First EPS-MetOp Research Announcement of Opportunity Workshop, Frascati, 15.-17. Mai 2006

Schwarz, G., M. Soccorsi, H. Chaabouni, M. Datcu: Information Extraction for Satellite-Based Disaster Monitoring: Current Issues and Expected Progress, EUSC, Torrejon, 27. November 2006

Tank, V.; K. Beier, M. Hess, E. Lindermeir, E. Lorenz, F. Schreier, B. Zhukov: Investigations of innovative algorithms for quantitative high temperature event (fires, volcano eruptions, etc.) emission analysis applying infrared spectrum and image data fusion. First EPS-MetOp Research Announcement of Opportunity Workshop, Frascati, 15.-17. Mai 2006

Wauer, J. , T. Ernst,: ADM L1b Lab in the DLR's Virtual Laboratory: The ADM-Aeolus Workshop, ESA/ESTEC, Noordwijk, 26.-28. September 2006

#### **4.5 Besuchte Tagungen und Gastaufenthalte**

EGU General Assembly, Wien, 2.-7. April 2006

First ESA Atmospheric Science Conference, 8.-12. Mai 2006, ESA/ESRIN, Frascati, Italien

First EPS-MetOp Research Announcement of Opportunity Workshop, Frascati, 15.-17. Mai 2006

IASI Sounding Science Working Group Meeting, Frascati, 17.-19. Mai 2006

Gastaufenthalt F. Schreier in Rabat, Marokko, 5.-11. Juni 2006

EUMETSAT Meteorological Satellite Conference, 12.-16. Juni 2006, Helsinki, Finnland

Le centre de Compétence CNES-DLR-ENST en extraction d'information et compréhension des images pour l'Observation de la Terre, Séminaire, 3. Juli 2006, IAS, Toulouse, Frankreich

Le traitement d'images basé sur la théorie de l'information, Séminaire, 5. Juli 2006, CNES, Toulouse, Frankreich

IEEE 2006 International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS'06), 31. Juli - 4. August 2006, Denver, Colorado, USA

The ADM-Aeolus Workshop, ESA/ESTEC, Noordwijk, 26.-28. September 2006

7. Deutsche Klimatagung, LMU , 9.-11. Oktober 2006, München

ESA-EUSC 2006: Image Information Mining for Security and Intelligence, 27.-28. November 2006, EUSC, Torrejon, Spanien

Third Atmospheric Chemistry Validation for ENVISAT Workshop (ACVE-3), ESRIN, Frascati, 4.-7. Dezember 2006

#### 4.6 Diplom- und Doktorarbeiten

Fagiolini, E.: The impact of atmospheric variability on the determination of the gravity field of the Earth. Dissertation, Technische Universität München. (Betreuer: Gottfried Schwarz)

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, Abschluss: November 2006)

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, Abschluss: Dezember 2006)

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, Abschluss: Juni 2006)

Otto, S.: Die Strahlungswirksamkeit von Saharastaub. Dissertation, Meteorologisches Institut der Ludwig-Maximilians-Universität München. (Betreuer: Prof. Dr. Manfred Wendisch, Johannes Gutenberg-Universität Mainz und Prof. Dr. Thomas Trautmann)

## Abkürzungen und Akronyme

ACCENT	Atmospheric Composition Change: A European Network
ACE	Aerosol Characterization Experiment
ACP	Atmospheric Chemistry & Physics
ADF	Auxiliary Data File
ADM	Atmospheric Dynamics Mission
AFGL	Air Force Geophysics Laboratory
ANX	Ascending Node Crossing
AO	Announcement of Opportunity
AOP	Announcement of Opportunity Provider
ARE	Atmospheric Radiative Effect
ATC	Active Thermal Control
AUTH	Aristotle University of Thessaloniki
BBC	BALTEX Bridge Cloud
BIRA-IASB	Belgisch Instituut voor Ruimte-Aéronomie / Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique
BIRRA	Better InfraRed Retrieval Algorithm
BOA	Bottom of the Atmosphere
BOL	Begin of Life
BSDF	Bidirectional scattering distribution function
CCN	Contractor Change Note
CDOP	Continuous Development and Operation Phase
CGS	Carlo Gavazzi Space
CHEOPS	Climatology of Height-resolved Earth Ozone and Profiling Systems
DFD	Deutsches Fernerkundungsdatenzentrum
DIMS	Data & Information Management System
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
DOAS	Differentielle Optische Absorptions-Spektroskopie
D-PAC	Deutsches Processing and Archiving Centre
D-PAF	Deutsche Processing and Archiving Facility
DPQC	Data Processing and Quality Control
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
EIP	Enterprise Information Plattform
ENVISAT	Environmental Satellite
EOL	End of Life
EOS	Earth Observing System
EPS	EUMETSAT Polar System
ERS	European Remote Sensing Satellite
ESA	European Space Agency
ESOC	European Space Operation Centre
ESRIN	European Space Research Institute
EUMETSAT	European Organisation for the Exploitation of Meteorological Satellites
EUMETCast	EUMETSAT broadcast system for environmental data
EURAD	European Air Pollution Dispersion
FRESCO	Fast Retrieval Scheme for Clouds from the Oxygen A-band
GDP	GO ME Data Processor
GEISA	Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques
GOME	Global Ozone Monitoring Experiment
GOMOS	Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars
HALOE	Halogen Occultation Experiment
HITRAN	High Resolution Transmission Molecular Absorption
IASI	Infrared Atmospheric Sounding Interferometer
ICA	Independent Column Approximation
ICU	Instrument Control Unit

IECF	Instrument Engineering & Calibration Facility
IMAP-DOAS	Iterative Maximum a Posteriori
IMLM	Iterative Maximum Likelihood Method
INP	Institut für Niedertemperatur Plasmaphysik
IWP	Ice Water Path
IPF	Instrument Processing Facility
IR	Infrarot
KNMI	Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut
LIDORT	Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer
LLI	Life Limited Item
LRAC	Low Rate Reference Archive Centre
MetOp	Meteorological Operational Polar Satellites of EUMETSAT
MIPAS	Michelson Interferometer Passive Atmospheric Sounder
MIRART	Modular Infrared Atmospheric Radiative Transfer
NDACC	Network for the Detection of Atmospheric Composition Change
NRT	Near Realtime
O3M	Ozone Monitoring
OPAC	Optical Properties of Aerosols and Clouds
OCR	Operation Change Request
OCS	Carbonyl Sulfide
OCRA	Optical Cloud Retrieval Algorithm
OMI	Ozon Monitoring Instrument
ORR	Operational Readiness Review
PDHS	Payload Data Handling Station
PDS	Payload Data Segment
PL	Product Library
PP	Plane-parallel
PROMOTE	Protocol Monitoring for the GMES Service Element
PSM	Processing System Management
QWG	Quality Working Group
RIU	Rheinisches Institut für Umweltforschung
ROSE	Research on Ozone in the Stratosphere and its Evolution
RT	Radiative Transfer
SAA	South Atlantic Anomaly
SACURA	Semi-Analytical Cloud Retrieval Algorithm
SAF	Satellite Application Facility
SAMUM	Sahara Mineral Dust Experiment
SARTre	pseudoSpherical Atmospheric Radiative Transfer
SCIAMACHY	Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography
SEU	Single Event Upset
SOST	SCIAMACHY Operations Support Team
SRON	Netherlands Institute for Space Research
SST	Scheller Systemtechnik
SWIR	Short Wave Infrared
TC	Thermal Control
TICA	Tilted Independent Column Approximation
TUM	Technische Universität München
UMARF	Unified Meteorological Archive and Retrieval Facility
UPAS	Universal Processor for Atmospheric Spectrometers
UV	Ultraviolet
VAAC	Volcanic Ash Advisory Centres
VIS	Visible
VL	Virtuelles Labor
WFM-DOAS	Weighting Function Modified DOAS
WDC-RSAT	World Data Center for Remote Sensing of the Atmosphere
WOUDC	World Ozone and UV Data Center