



Schlussbericht zum Vorhaben

**Validation of Sciamachy In-flight Measured Irradiances, Radiances
and Selected Tracegas Products by Comparison with Measurements
from Independent Satellite Instruments
(VIRTIS)**

FKZ: 50 EE 0025

gefördert von der



Zuwendungsempfänger:

Institut für Umweltphysik (IUP)
Universität Bremen
Otto-Hahn-Allee 1
Postfach 330 440
28334 Bremen
Fax.: 0421/218-4555

Bewilligungszeitraum:

01.09.2000 – 31.12.2004

Berichtszeitraum:

01.09.2000 – 31.12.2004

Bearbeiter:

Dr. Astrid Bracher
Dr. Jochen Skupin

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	iii
Tabellenverzeichnis	iv
1 Aufgabenstellung	1
2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde	1
3 Planung und Ablauf des Vorhabens	2
3.1 Teilprojekt 1: Validation der mit SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz und Erdradianzen (Level 1 Validation)	2
3.2 Teilprojekt 2: Validation von ausgewählten, mit SCIAMACHY gemessenen Spurengasverteilungen (Level 2 Validation)	2
3.3 Gesamt	3
4 Wissenschaftlicher und technischer Stand zu Beginn des Projektes	4
5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen	5
6 Wissenschaftlich-technische Ergebnisse	7
6.1 Teilprojekt 1: Validation der mit SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz und Erdradianzen (Level 1 Validation)	7
6.1.1 Softwareentwicklung und -evaluation	7
6.1.2 Validation/Verbesserung von Kalibration und 0-1 Prozessor	10
6.1.3 Validation von Sonnenirradienzen	14
6.1.4 Weitere wissenschaftliche Ergebnisse	16
6.2 Teilprojekt 2: Validation von ausgewählten, mit SCIAMACHY gemessenen Spurengasverteilungen (Level 2 Validation)	17
6.2.1 Tools zur Koinzidenzanalyse und Verbesserung derer durch die Berücksichtigung dynamischer Effekte und Test der ESA Software Tools für die Bearbeitung von ENVISAT-Daten (Meilenstein 1)	17
6.2.2 Validierung von SCIAMACHY Spurengasverteilungen durch Vergleich mit anderen Satelliteninstrumenten (Meilensteine 3, 4 und 5)	19
6.2.3 Validation wissenschaftlicher SCIAMACHY-Profil-Daten	22
6.2.4 Vergleich von ENVISAT-Daten untereinander	25
7 Nutzen/Verwertbarkeit der Ergebnisse	33
8 Fortschritt bei anderen Stellen	33
9 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen	33
9.1 Rezensierte Publikationen	33
9.2 Konferenzbeiträge und Berichte	35

9.3 Teilnahme an Veranstaltungen	39
10 Akronyme und Abkürzungen	40
11 Literatur	42
11.1 Literatur zu Teilprojekt 1	42
11.2 Literatur zu Teilprojekt 2	44

Abbildungsverzeichnis

1	Quotient zwischen einer in-orbit WLS-Messung und einer Bodenmessung . . .	9
2	Transmission der Eisschicht auf den Kanälen 7 und 8	9
3	Über Orbit 3959 gemitteltes Detektorsignal von Kanal 7	10
4	Detektorsignal der Limbstates in Orbit 3959 gemittelt über die 600 zentralen Pixel von Kanal 7	11
5	Unterschied der eigenen spektralen Kalibration zu der im Level 1b Produkt enthaltenen	12
6	Von SCIAMACHY gemessene solare Irradianz SMR_{L1b} im Vergleich mit einem Kurucz Spektrum	14
7	Vergleich der mit den Testroutinen kalibrierten solaren Irradianz SMR_{Val} mit einem Kurucz Spektrum und mit Messungen der Instrumente SOLSPEC, SOLSTICE und SUSIM	16
8	Vergleich von Gesamt ozon von gebinneten Daten SCIAMACHY Version 5.01/5.04 mit GOME WFOAS V1	20
9	Mittlere relative Abweichung und deren Standardabweichung aller Kollokationen des Validationsdatensatz von SCIAMACHY- O_3 -Profilen v2.1 zu HALOE v19 und SAGE II v6.2	21
10	Vergleich von kollokierten NO_2 -Profilen von HALOE und SCIAMACHY mit Ergebnissen aus Modellläufen	21
11	Mittlere relative Abweichung und deren Standardabweichung von Ozonprofilen und NO_2 -Profilen bestimmt aus SCIAMACHY-Okkultationsmessungen	23
12	Vergleich von Ozonprofilen in Teilchendichten bestimmt aus HALOE-Okkultationsmessungen und aus SCIAMACHY Limbmessungen	24
13	Vergleich von SCIAMACHY NO_2 -Profilen unterschiedlicher Sonnenzenithwinkel (SZW) mit HALOE NO_2 -Profilen und SAGE II	24
14	Vergleich von O_3 -Profilen kollokiertes MIPAS_IMK und SCIAMACHY_IUP Messungen	27
15	Vergleich von O_3 -Profilen kollokiertes MIPAS_IMK, SCIAMACHY_IUP und GOMOS Messungen	28
16	Statistische Ergebnisse aller Vergleiche von kollokierten O_3 -Profilen	28
17	Vergleich von NO_2 -Profilen kollokiertes MIPAS_IMK und SCIAMACHY_IUP Messungen	29
18	Vergleich von NO_2 -Profilen kollokiertes MIPAS_IMK und GOMOS Messungen	30
19	Vergleich von MIPAS_IMK und SCIAMACHY_IUP Ozon-Profilen	31
20	Vergleich von MIPAS und SCIAMACHY NO_2 -Profilen	32

Tabellenverzeichnis

1	Zeitlicher Verlauf der Teilprojekt 1 Aktivitäten	3
2	Erreichen der Teilprojekt 1 Meilensteine	3
3	Zeitlicher Verlauf der Teilprojekt 2 Aktivitäten	4
4	Erreichen der Teilprojekt 2 Meilensteine	5
5	Geeignete Instrumente zur Level 1 Validation	6
6	Statistischer Vergleich der einzelnen SCIAMACHY Kanäle mit dem Kurucz Spektrum und mit Messungen der Instrumente SOLSPEC, SOLSTICE und SUSIM	17

1 Aufgabenstellung

Das Projekt gliedert sich in zwei Teilprojekte:

1. Validation der mit SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz und Erdradianzen (SCIAMACHY Level 1 Daten)
2. Validation von ausgewählten, mit SCIAMACHY gemessenen Spurengasverteilungen (SCIAMACHY Level 2 Daten) durch Vergleich mit anderen Satelliteninstrumenten

Die Validierung der Level 1 und Level 2 Datenprodukte ist eine notwendige Voraussetzung für die Ableitung von geophysikalischen Parametern mit ausreichender Genauigkeit über die gesamte Lebensdauer des Instruments. Basierend auf den Resultaten dieses Projekts wurden Empfehlungen für eventuell notwendige Modifikationen in der Datenprozessierung (Level 1 und 2) gegeben, um die Sicherung der SCIAMACHY Datenqualität während der gesamten ENVISAT Mission zu gewährleisten.

Teilprojekt 1:

Zur Validierung der mit SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz und Erdradianzen werden Sonnenspektren der Instrumente SOLSTICE und SUSIM auf UARS, des Shuttle-Experiments SOLSPEC sowie das im atmosphärischen Strahlungstransport Modells MODTRAN 3.7 enthaltene Spektrum `newkur.dat` von R. L. Kurucz verwendet. Die Validation der mit SCIAMACHY gemessenen Erdradianzen kann durch Vergleich mit Ergebnissen anderer Satelliteninstrumente erfolgen, wurde aber zugunsten anderer Aufgabenschwerpunkte (siehe Abschnitt 3 auf der nächsten Seite) nicht durchgeführt.

Teilprojekt 2:

Zur Validierung von mit SCIAMACHY gemessenen Spurengasverteilungen durch Vergleich mit anderen Satelliteninstrumenten werden ausgewählte Level 2 Datenprodukte (Spurengasverteilungen) des Instrumentes SCIAMACHY mit zeitlich und räumlich koinzidenten Messungen von anderen Satellitenexperimenten validiert. Die Satelliteninstrumente GOME/ERS-2, HALOE/UARS, SAGE II/ERBS und TOMS/EP bilden wegen ihres langjährigen Betriebs im All und der damit verbundenen hohen Datenqualität den Kern der Satellitenvalidierung.

2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Die Voraussetzungen zur erfolgreichen Durchführung des Projekts war der fehlerfreie Betrieb des ENVISAT Satelliten sowie des Instruments SCIAMACHY. Für die Level 2 Validation in Teilprojekt 2 war insbesondere auch der fehlerfreie Betrieb der für die Validierung notwendigen anderen Satelliteninstrumente (GOME, HALOE, TOMS, SAGE II) erforderlich. Seit Herbst 2001 werden aufgrund von Finanzierungsproblemen aber jeweils nur noch 50% aller SAGE II und HALOE-Daten ausgewertet, was dennoch einen ausreichenden Datensatz für die Validation bietet. Seit Ende Juni 2003 können nach dem Ausfall des Taperecorders auf ERS-2 nur noch wenige Orbits von GOME aufgezeichnet werden. Daher konnten globale Vergleiche mit SCIAMACHY Gesamtsäulen nur für die Zeit von Juli 2002 bis Juli 2003 durchgeführt werden.

Die ca. 15 monatige Verschiebung des ENVISAT-Satellitenstarts und die Verzögerung der Bereitstellung von ENVISAT-Daten führte zu einer Änderung des geplanten Arbeits-, Zeit- und Finanzierungsplans. Bis zum Ende des Projektes standen weder Level 1 (Ir)Radianzen mit für eine Validierung ausreichender Qualität noch Level 2 Datenprodukte von H₂O- und CH₄-Profilen aus SCIAMACHY-Limbmessungen zur Verfügung. Daher konnte für diese Produkte keine Validation erfolgen.

3 Planung und Ablauf des Vorhabens

3.1 Teilprojekt 1: Validation der mit SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz und Erdradianzen (Level 1 Validation)

Für die Arbeits- und Zeitplanung ergaben sich erhebliche Verzögerungen gegenüber der ursprünglichen Planung. Diese werden verursacht durch die Verschiebung des Envisat Starttermins auf den 1. März 2002 sowie durch die mangelnde Datenqualität der Level 1 Produkte. Aufgrund von Problemen des 0-1-Prozessors und der Bodenkalibration des Instruments (den so genannten SCIAMACHY-Keydaten) ist keine für eine Validation hinreichende Kalibration der bis zum 31.12.2004 verteilten Level 1b Daten möglich. Daher hat sich das Erreichen der Meilensteine gemäß Originalantrag um etwa 18 Monate verschoben. Zwar sind erste Validationsaktivitäten durchgeführt worden, die zur Entdeckung verschiedener Defizite (siehe Abschnitt 6.1 auf Seite 7) beigetragen haben, eine systematische Validation von SCIAMACHY Level 1 Daten mit anderen Instrumenten ist aber erst mit fehlerfreien Produkten sinnvoll.

Die Level 1 Validierung wurde daher 2003 und 2004 zugunsten von Arbeiten zur Verbesserung des 0-1 Processings weitgehend zurückgestellt. 2003 erfolgten diese Arbeiten im Rahmen des so genannten 0-1 Masterplans, 2004 wurde dieser durch PCRs (Processor Change Requests) ersetzt (siehe auch Abschnitt 6.1 auf Seite 7). Grund dieser Veränderung der Zielsetzung ist es, den 0-1 Prozessor soweit zu verbessern, daß die erwartete Qualität der Level 1 Produkte erreicht wird. Die systematische Level 1 Validierung wurde bis zum Ende des Vorhabens nicht wieder aufgenommen, da eine hinreichende Qualität der Level 1 Produkte nicht erreicht war.

3.2 Teilprojekt 2: Validation von ausgewählten, mit SCIAMACHY gemessenen Spurengasverteilungen (Level 2 Validation)

Hervorgerufen durch die Verzögerungen beim Start von Envisat und der Bereitstellung von ENVISAT-Daten, hat sich das Erreichen der Meilensteine gemäß Originalantrag um etwa 18 Monate verschoben. Die Vorhabensziele wurden alle erreicht, es wurde lediglich durch die verzögerte Bereitstellung der operationellen SCIAMACHY-Datenprodukte (bzw. bei SCIAMACHY lagen gar keine H₂O- und CH₄-Profile vor) auf andere (wissenschaftliche) SCIAMACHY-Datenprodukte zurückgegriffen.

Zum zeitlichen Verlauf der Projekt-Aktivitäten und dem Erreichen der Meilensteine siehe Tabellen 3 und 4.

Tabelle 1: Zeitlicher Verlauf der Teilprojekt 1 Aktivitäten (Level 1 Validation)

09/00	Zusammenstellung von Sonnenirradianz-Referenzdaten, Simulation von SCIAMACHY Messungen mit der SCIAMACHY Instrument Simulator Software (SISS), Test der ESA Software Tools (ENVVIEW, ESOV), Importfilter für ENVISAT Datenprodukte (NADC_TOOLS von SRON) Vorbereitung des Datentransfers (NILU) und der Datenvisualisierung
06/02	Anomaly Report „Significant loss of radiance response in channel 7“ (Eis auf IR-Detektoren)
08/02	Beginn der ENVISAT Commissioning Phase, Validation erster Sonnenirradianzen, Beginn der Entwicklung von Testroutinen zur radiometrischen Kalibration (u.a. alternative Etalon Korrektur)
02/03	Validation der spektralen Kalibration
04/03	Anomaly Report „Possibility of a light leak in channel 7 of SCIAMACHY“
05/03	Beginn der ENVISAT Main Validation Phase, diverse Arbeiten zur Validation/Verbesserung von Kalibration und 0-1 Prozessor im Rahmen des Masterplans
12/03	SCIAMACHY Mg II Index und Korrelation der relativen Änderung der von SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz mit der effektiven Sonnenfläche
06/04	Beginn der Revision der SCIAMACHY Polarisationskorrektur
08/04	Validation der radiometrischen Korrekturfaktoren
12/04	Erstellung des Endberichts

3.3 Gesamt

Wie in den oben genannten Punkten und in Abschnitt 6 auf Seite 7 dargestellt, leidet die Validation unter der mangelnden Qualität der SCIAMACHY Level 1 und 2 Datenprodukte. Zur Erfüllung der Validations Aufgaben des Vorhabens (hierbei insbesondere die Level 1 Validation von (Ir)Radianzen und die Level 2 Validation von operationellen Produkten) wäre eine Verlängerung des Förderzeitraums um mindestens ein Jahr bis Ende 2005 notwendig, die aber nicht erfolgt ist.

Die unzureichende Validation von SCIAMACHY stellt ein Risiko für das gesamte Projekt dar. Die immer noch unzureichende radiometrische Qualität der Level 1 Datenprodukte gefährdet Produkte wie Aerosole, Wolkenparameter oder das Spurengasretrieval in Kanal 7. Die nach

Tabelle 2: Erreichen der Teilprojekt 1 Meilensteine (Level 1 Validation)

M1	12/02	Bericht über die erstellten Validations-Tools
M2	06/03	Empfehlung zur Verbesserung der spektralen Kalibration an die DLR, Präsentation der Validationsergebnisse im Rahmen des ENVISAT Validation Workshop
M3	06/04	Präsentation der Validationsergebnisse auf dem Second Workshop on Atmospheric Chemistry of ENVISAT (ACVE-2) und dem Envisat & ERS Symposium
M4	12/04	Endbericht

Tabelle 3: Zeitlicher Verlauf der Teilprojekt 2 Aktivitäten (Level 2 Validation)

09/00	Entwicklung von Tools zur Koinzidenzvorhersage, Test der ESA Software Tools für die Bearbeitung von ENVISAT-Daten, Verbesserung der Koinzidenzberechnung von mit verschiedenen Satellitensensoren zu unterschiedlichen Zeiten gemessenen Luftmassen durch die Berücksichtigung dynamischer Effekte, Vorbereitung des Datentransfers und der Datenvisualisierung
05/02	Erste Validierung von wissenschaftlichen SCIAMACHY-Limb-Ozon- und NO ₂ -Profilen mit HALOE, SAGE II und POAM.
09/02	Validierung erster operationeller Datenprodukten von SCIAMACHY Nadir-Ozon- und NO ₂ -Messungen mit GOME und TOMS. Eigentlicher Beginn der ENVISAT Commissioning Phase.
05/03	Eigentlicher Beginn der ENVISAT Main Validation Phase. Vergleich der Ozonprofile der ENVISAT Instrumente MIPAS (operationell), GOMOS (operationell) und SCIAMACHY (wissenschaftliche Produkte des IUP) untereinander (März 2003), Kreuz-Validation von nicht-operationellen Produkten von MIPAS-IMK und SCIAMACHY-IUP (Sept-Okt 2002). Validierung von wissenschaftlichen SCIAMACHY Ozon- und NO ₂ -Profilen aus Sonnen- und Mondokkultation und Limbdaten (neuere Versionen) mit HALOE, SAGE II und POAM. Fortsetzung der langfristigen Validierungsaktivitäten
03/04	Validation von operationellen SCIAMACHY Datenprodukten (Ozon- und NO ₂ -Nadir-Säulen und Limb-Profile) nach Überarbeitung der Datenverarbeitungssoftware bei der ESA und am DFD
06/04	Kreuz-Validation von GOMOS, MIPAS und nicht-operationellen Produkten von MIPAS-IMK und SCIAMACHY-IUP (Okt-Nov 2003). Globale Validierung von operationellen SCIAMACHY Ozonsäulen mit GOME 3.0 und GOME WFDOAS(Jan-Jun 2003)
12/04	Erstellung des Endberichts

wie vor mangelhafte Polarisationskorrektur wirkt sich selbst auf die Qualität robuster Verfahren wie DOAS negativ aus. Obwohl anhand der Validation wissenschaftlicher Level 2 Produkte das Potential des Instruments SCIAMACHY gezeigt werden konnte, ist für eine Veröffentlichung operationeller Level 2 Produkte eine vorherige Validation derselben unerlässlich.

4 Wissenschaftlicher und technischer Stand zu Beginn des Projektes

Erfahrungen in der Validation von satellitengestützten Spektrometern wurden am IP bereits bei der Validation von GOME (Hoogen u. a., 1998) gesammelt. Mit zunehmender Verfügbarkeit von qualitativ hochwertigen Satellitendaten ist die Validation von Datenprodukten neuer Satellitensensoren durch den Vergleich mit Datenprodukten anderer Satellitensensoren dabei eine effizien-

Tabelle 4: Erreichen der Teilprojekt 2 Meilensteine (Level 2 Validation)

M1	07/01 01/02 07/02	Bericht über die erstellten Tools zur Koinzidenzanalyse und die Untersuchung über Vergleich von mit GOME und HALOE gemessenen Ozonprofilen im Jahr 1998. Bericht über die Verbesserung der Koinzidenzanalyse durch die Berücksichtigung dynamischer Effekte, die Untersuchungen zum globalen Vergleich von Gesamtozonsäulen gemessen mit TOMS, GOME und an Dobson-Stationen und zum globalen Vergleich von mit GOME und SAGEII gemessenen Ozonprofilen unter Berücksichtigung dynamischer Aspekte, und Test der ESA Software Tools für die Bearbeitung von ENVISAT-Daten
M2	12/02	Bericht zur ersten Validation von operationellen SCIAMACHY- Ozon- und NO ₂ -Säulen und Empfehlungen zur Optimierung der operationellen Auswertesoftware der ESA und des DFDs im Rahmen des ENVISAT Validation Workshop mit GOME, SAGE II, HALOE
M2	01/03 01/04 07/03 07/04	Bericht zur ersten Validation von wissenschaftlichen SCIAMACHY Ozon- und NO ₂ -Limb-Profilen und NO ₂ -Säulen mit POAM III, SAGE II, HALOE Bericht zum Vergleich der ENVISAT Ozon- und NO ₂ -Profile MIPAS, GOMOS und SCIAMACHY untereinander und der Validation von SCIAMACHY Sonnen- und Mondokkultations-Ozon- und NO ₂ -Profilen mit HALOE, SAGE II, POAM III
M3	05/04	Bericht zur Validation der operationellen SCIAMACHY Daten mit GOME, SAGE II, HALOE nach Optimierung der operationellen Auswertesoftware auf dem Second Workshop on Atmospheric Chemistry of ENVISAT (ACVE-2)
M4	12/04	Endbericht

ente Ergänzung zu den herkömmlichen Validationsaktivitäten (Vergleich mit in-situ Messungen, Boden-, Flugzeugkampagnen).

Zur Level 1 Validation können Daten der in Tabelle 5 auf der nächsten Seite angegebenen Instrumente herangezogen werden. Zusätzlich wird als Referenz für die solare Irradianz das im Strahlungstransferprogramm MODTRAN 3.7 bereitgestellte Sonnenspektrum `newkur.dat` benutzt (Fontenla u. a., 1999; Kurucz, 1995). Für die Level 2 Validation werden Daten der Instrumente GOME, HALOE, POAM, SAGE II und TOMS verwendet. Außerdem erfolgt ein Vergleich mit den Instrumenten GOMOS und MIPAS auf ENVISAT.

5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die Validationsaktivitäten für die ENVISAT-Instrumente MIPAS, GOMOS und SCIAMACHY werden auf europäischer Ebene geplant und koordiniert von der ESA im Rahmen des Atmospheric Chemistry Validation Team (ACVT), das in verschiedene Subgroups unterteilt ist.

Die Level 1 Validation (Teilprojekt 1) ist in die Arbeit des *SCIAMACHY Calibration and Verification Teams* (SCVT, ACVT subgroup leader: Johannes Frerick, ESA) eingebunden. Weiterhin erfolgte eine enge Zusammenarbeit mit anderen Validierern im Rahmen des Calibration/Validation Tiger Teams (Leader: G. Lichtenberg, SRON). Damit wird erreicht, daß alle beteiligten Gruppen den gleichen Kenntnisstand bezüglich der Level 1 Validation haben.

Tabelle 5: Geeignete Instrumente zur Level 1 Validation

Instrument	Data Products	Range in nm	Operation time	Referenz
GOME	Solar Irradiance Nadir Radiance	240 – 790	(1995 – ...)	Hoogen u. a. (1998)
OSIRIS	Solar Irradiance Limb Radiance	280 – 800 (15 – 60 km)	(Feb. 2001 – ...)	Murtagh u. a. (2002)
SAGE III	Solar Irradiance Occult. Radiance	280 – 1000	(Dec. 2001 – ...)	Chu und Mauldin (1999)
SBUV-2	Solar Irradiance	159 – 406	(1984 – ...)	DeLand und Cebula (2001)
SOLSPEC	Solar Irradiance	200 – 2400	Atlas 1–3 and EURECA missions	Thuillier u. a. (2003)
SOLSTICE	Solar Irradiance	119 – 420	(1991 – 2001)	Rottman und Woods (1994)
SUSIM	Solar Irradiance	115 – 411	(1991 – 2001)	Floyd u. a. (2003)

Die Level 2 Validation (Teilprojekt 2) ist in das Team für *Models and Data Assimilation, Satellite Intercomparisons* (MASI, ACVT subgroup leader: Claus Zehner, ESA) eingebunden. In diesem Teilprojekt fand eine besonders enge Zusammenarbeit mit folgenden Arbeitsgruppen statt:

- AME-Team des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) am Forschungszentrum Karlsruhe im Rahmen der Arbeiten zur Kreuzvalidierung von MIPAS_IMK-IAA-Spurengasprodukten mit SCIAMACHY_IUP und GOMOS_ACRI-Produkten
- im Rahmen der Validierung operationeller ENVISAT-Spurengas-Produkten mit dem Atmospheric Chemistry Validation Team – Model Assimilation und Satellite Intercomparison Subgroup (ACVT-MASI) und ESA
- im Rahmen der Validierung von wissenschaftlichen Spurengasprodukten aus SCIAMACHY-Limbbeobachtungen im EU-Projekt Towards the Prediction of Stratospheric Ozone (TOPOZ III; Koordinator Dr. W. Kouker; IMK-FZK)
- im Rahmen der Kreuzvalidierung von MIPAS_IMK-IAA-Spurengasprodukten mit SCIAMACHY_IUP-Produkten im EU-Projekt Advanced MIPAS Level-2 Data Analysis (AMIL2DA; Koordinator Dr. T. von Clarmann, IMK-FZK) und mit dem Instituto de Astrofísica de Andalucía (IAA) (Dr. B. Funke, Dr. M. Lopez-Puertas)
- im Rahmen der Validierung von wissenschaftlichen Spurengasprodukten aus SCIAMACHY-Sonnen- und Mondokkultationsbeobachtungen im AFO 2000-Projekt Synoptical analysis of chemical constituents by advanced satellite data assimilation (SACADA, Koordinator Dr. H. Elbern, EURAT, Uni. Köln) und dem BMBF-Projekt (FKZ 07UFE12/8)

- im Rahmen der Kreuzvalidierung mit GOMOS-Spurengas-Produkten des Prototyp-Prozessors von ACRI mit ACRI-France (Dr. G. Barrot)
- im Rahmen der Validierung wissenschaftlicher GOMOS-Spurengas-Produkte des LPCE mit SCIAMACHY_IUP Mondokkultationen mit dem Laboratoire de Physique et Chimie de l'Environnement (LPCE) am Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS, Dr. J.-B. Renard)
- Im Rahmen der Validierung operationeller MIPAS-Spurengas-Produkten mit der University of Oxford (Dr. A. Dudhia)

6 Wissenschaftlich-technische Ergebnisse

6.1 Teilprojekt 1: Validation der mit SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz und Erdradianzen (Level 1 Validation)

Während der gesamten Projektlaufzeit litt die Level 1 Validation unter der mangelnden Qualität der SCIAMACHY Level 1 Datenprodukte. Um diesem Umstand Rechnung zu tragen, wurde in Absprache mit dem Projektträger die Validation weitgehend ausgesetzt zugunsten der nachträglichen Validation und Verbesserung der Bodenkalibration sowie des 0-1 Prozessors (siehe Abschnitt 3.1 auf Seite 2 und Abschnitt 6.1.2 auf Seite 10). Dies beinhaltete u.a. auch die Entwicklung von eigenen Testroutinen zur Kalibration von SCIAMACHY Level 0 und 1 Daten (siehe Abschnitt 6.1.1). Die Koordination der Arbeiten erfolgte auf verschiedenen Wegen:

- 0-1 Prozessor/Keydaten Validation im Rahmen des *SCIAMACHY Calibration and Verification Teams (SCVT)* (unter Leitung von Johannes Frerick, ESA)
- Action Items im Rahmen des *Calibration/Validation Tiger Teams* (unter Leitung von Günther Lichtenberg, DLR)
- Arbeitspakete im Rahmen des *0-1 Masterplans* (unter Leitung des DLR, Albrecht von Bargen)
- Arbeiten im Rahmen von Processor Change Requests (PCRs) (unter Leitung des DLR, Albrecht von Bargen)

Diese Einteilung hat vorwiegend historische Gründe und es wurde versucht, eine weitgehende Synchronisierung zu erreichen. Die in den einzelnen Bereichen geleisteten Arbeiten wurden in den vorhergehenden Zwischenberichten bereits ausführlich dargestellt und sprengen den Rahmen dieses Schlußberichts. Auf Wunsch kann aber zu allen Bereichen eine detaillierte Dokumentation zur Verfügung gestellt werden.

6.1.1 Softwareentwicklung und -evaluation

EnviView

EnviView – ein im Auftrag der ESA entwickeltes Tool zur Visualisierung und Konvertierung von ENVISAT-Datenprodukten – wurde getestet. Im Vordergrund stand dabei das im EnviView

Softwarepaket enthaltene Tool `SciaL1c` zur Kalibration von SCIAMACHY Level 1b Daten. Damit werden die im Level 1b Datenprodukt enthaltenen Detektordaten (Counts) anhand von ebenfalls enthaltenen Kalibrationsdatensätzen in Radianzen und Irradianzen umgerechnet (das Level 1c Format). Es wurden verschiedene Probleme und Fehler entdeckt (mangelnde Performance, unerwartete Programmabstürze, fehlerhafte Polarisationskorrektur, fehlerhafte Level 1c Ausgabe) und an `EOHelp@esa.int` gemeldet.

NADC-Tools

Bei Projektstart war `EnviView` das einzige Tool um Daten im ENVISAT PDF Format zu lesen, wies aber deutliche Performanceprobleme und Fehler auf, die einem Einsatz für die Validation entgegenstanden. Erst ein Jahr nach dem ENVISAT Start war als offizielle Alternative die *Basic ERS & Envisat Atmospheric Toolbox (BEAT)* verfügbar. Diese enthält jedoch keine dem `SciaL1c`-Tool entsprechenden Routinen zur Kalibration von SCIAMACHY Level 1b Daten.

Daher wurde auf die `NADC_TOOLS` von SRON zurückgegriffen¹. Diese erlauben neben Level 1b, 1c und 2 auch Level 0 Datenprodukte zu lesen. Damit konnte schon zu einem sehr frühen Zeitpunkt, d.h. schon vor der Verteilung von Level 1b Daten, mit der Validation begonnen werden.

Außerdem ist mit den `NADC_TOOLS` eine mit dem `SciaL1C`-Tool vergleichbare Kalibration von Level 1b Daten nach 1c möglich und sie erlauben, ohne den beim `SciaL1c`-Tool notwendigen Umweg über ASCII oder HDF Dateien, Importfilter zu implementieren, die ein direktes Lesen des ENVISAT PDF Formats zulassen.

Testimplementation von 0-1 Kalibrationsroutinen

Zu den Aufgaben des Projekts gehörte die Entwicklung von Vorschlägen zur Verbesserung der Kalibrationsalgorithmen. Hierzu ist eine Entwicklungsumgebung notwendig, die die einfache Modifikation der Algorithmen erlaubt. Aus diesem Grunde wurde ein Teil der im ATBD (ENV-ATB-DLR-SCIA-0041, 2000) angegebenen Routinen sowie alternative Algorithmen im Computeralgebrasystem *MATHEMATICA*[®] (Wolfram, 1994) implementiert. Die so entstandenen Programme und Module umfassen mehr als 30000 Zeilen Code.

Aufbauend auf der NADC-Bibliothek wurden Importroutinen für *MATHEMATICA*[®] entwickelt.

SCIAMACHY Instrument Simulation Software (SISS)

Um schon vor dem ENVISAT Start die Entwickelten Validationsalgorithmen erproben zu können, wurden mit der SCIAMACHY Instrument Simulation Software (SISS) Testdaten erzeugt. Hierzu erfolgte u.a. eine Portierung auf das Betriebssystem Linux.

Mit SISS wurden für alle 70 SCIAMACHY States Testdaten berechnet, aus denen sich Level 0 Produkte mit beliebigen Timelines bis hin zu ganzen Orbits zusammensetzen lassen. Die so erzeugten Level 0 Produkte können mit dem Prototypen des 0-1 Prozessors in ein Level 1b Produkt umgewandelt werden.

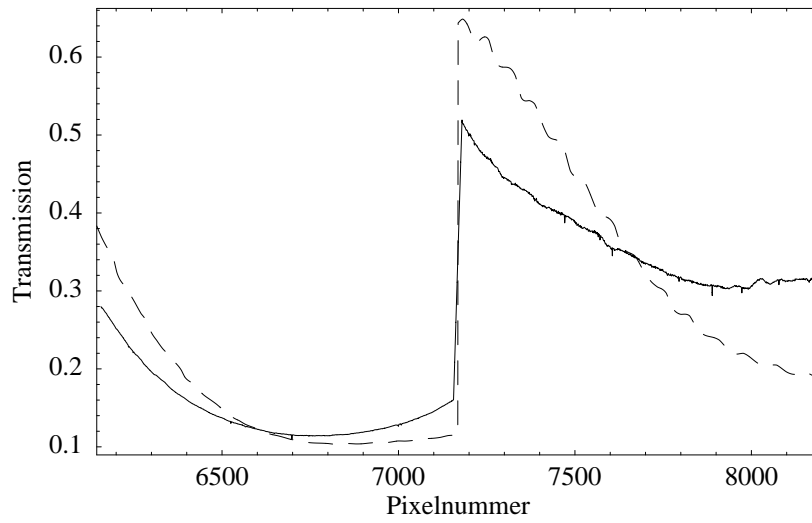


Abbildung 1: Quotient zwischen einer WLS-Messung aus Orbit 1684 und einer Bodenmessung für die Kanäle 7 und 8 (durchgezogen) im Vergleich zur Transmission einer 0,225 mm dicken Eisschicht für Kanal 7 und einer 0,625 mm dicken Eisschicht für Kanal 8 (gestrichelt)

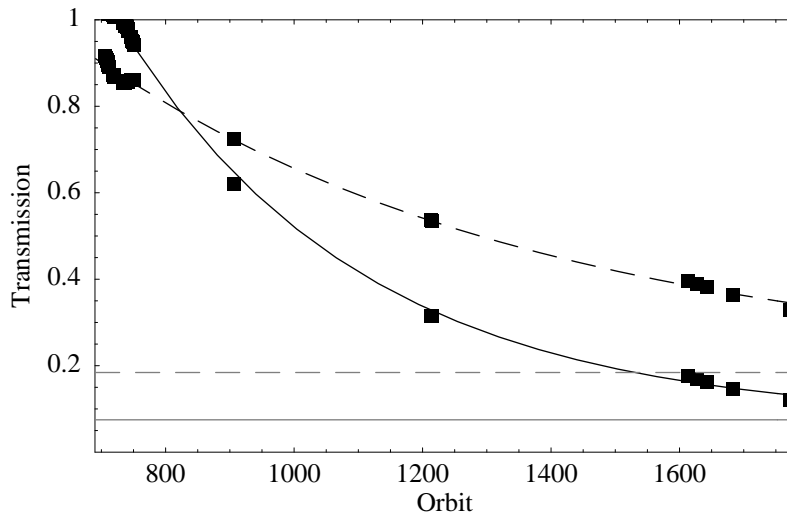


Abbildung 2: Transmission der Eisschicht auf den Kanälen 7 (durchgezogen) und 8 (gestrichelt) aufgetragen vom SRC-Release bis zur Dekontamination ab Orbit 1780

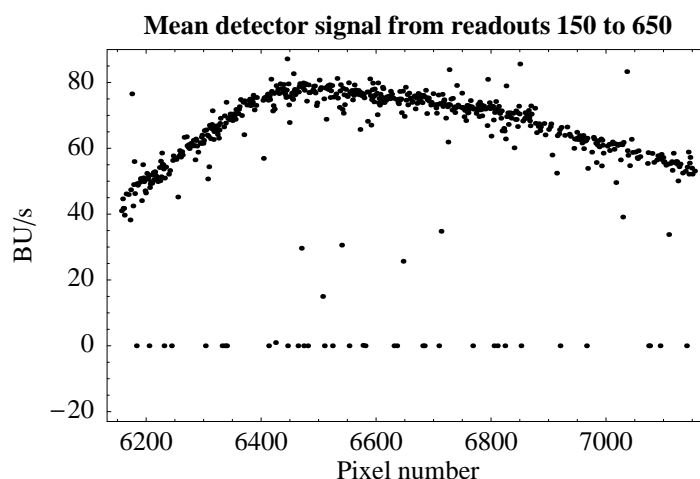


Abbildung 3: Über Orbit 3959 gemitteltes Detektorsignal von Kanal 7, ohne Dead/Bad Pixels.

6.1.2 Validation/Verbesserung von Kalibration und 0-1 Prozessor

Eis auf den Infrarotdetektoren der Kanäle 7 und 8

Schon kurz nach dem Öffnen des Radiant Coolers (SRC) zeigten sich im Quotienten zwischen Boden-WLS-Messungen und WLS-Messungen im Orbit zeitlich variierende Strukturen in Kanal 7. Diese verstärkten sich nach wenigen Wochen zu einer deutlichen Reduktion der gemessenen WLS-Intensität. Der Effekt wurde in schwächerer Form auch in Kanal 8 beobachtet werden. Abbildung 1 auf der vorherigen Seite zeigt das Ratio zwischen einer WLS-Messung aus Orbit 1684 und der Bodenkalkulation für die Kanäle 7 und 8 im Vergleich zur Transmission einer 0,225 mm dicken Eisschicht für Kanal 7 und einer 0.625 mm dicken Eisschicht für Kanal 8. Die Transmission wurde nach Grundy und Schmitt (1998) für eine Temperatur von 150 K berechnet. In Abbildung 2 auf der vorherigen Seite ist bis zur Dekontamination ab Orbit 1780 ein Absinken der Intensität auf ca. 15 % in Kanal 7 und 35 % in Kanal 8 zu erkennen.

Es kommt aufgrund der niedrigen Temperaturen in diesen beiden Kanälen zur Bildung von Eis auf den Detektoren. Die Quelle des Wassers ist bisher nicht eindeutig bestimmt. Um dem Effekt entgegenzuwirken sind regelmäßige Dekontaminationen des Instruments notwendig.

Das Ergebnis dieser Untersuchungen war der Anomaly Report „Significant loss of radiance response in channel 7“. Das weitere Monitoring des Effekts wurde an das IUP SOST übergeben (siehe <http://www.iup.physik.uni-bremen.de/sciamachy/LTM/LTM.html>).

Light-leak in Kanal 7

Auf der Tagseite des Orbits zeigt Kanal 7 ein unerwartetes Signal, das auf ein Light-leak zurückgeführt werden konnte. Hierzu wurden Orbits 3959 und 3960 (Delta-SODAP) ausgewertet, die

¹<http://www.sron.nl/~hees/SciaDC/default.php>

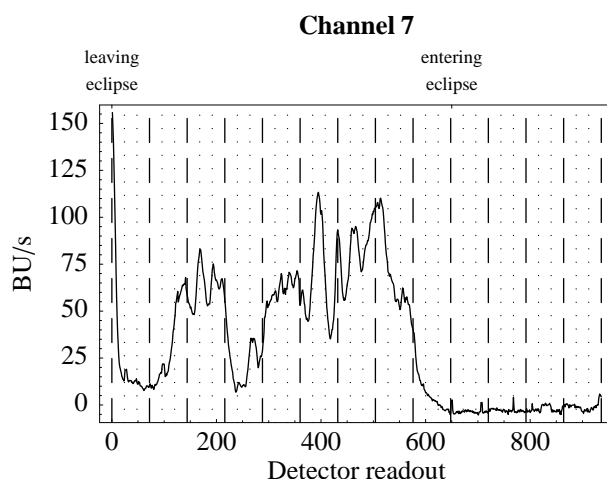


Abbildung 4: Detektorsignal der Limbstates in Orbit 3959 gemittelt über die 600 zentralen Pixel von Kanal 7, States durch gestrichelte und die 3 Tangentenhöhen (150, 200 und 250 km) durch gepunktete Linien getrennt.

nur Dunkelstrommessungen in Limb-Geometrie mit 3 Tangentenhöhen (150, 200 und 250 km) oberhalb der Atmosphäre enthalten.

Das Signal hat eine stabile, spektral glatte Struktur (siehe Abbildung 3 auf der vorherigen Seite), variiert aber über die Zeit stark in der Amplitude (Abbildung 4). Das Ergebnis dieser Untersuchungen war der Anomaly Report „Possibility of a light leak in channel 7 of SCIAMACHY“ (Skupin, 2003b).

Die Amplitudenvariationen sind anscheinend zufällig und ändern sich von Readout zu Readout, was eine Korrektur sehr schwierig macht. Bisher konnte – auch in späteren Untersuchungen von SRON – keine befriedigende Lösung des Problems gefunden werden.

Validation der spektralen Kalibration

Anhand von SLS Messungen im Orbit, den in den Keydaten gelisteten Linienpositionen und Blocking-Shift (RP-SCIA-1000TP/266, 2000) sowie dem im ATBD (ENV-ATB-DLR-SCIA-0041, 2000) angegebenen Algorithmus wurden Testroutinen für die spektrale Kalibration von SCIAMACHY implementiert. Die damit berechnete spektrale Kalibration für die Kanäle 1 bis 6 wurde mit der im Level 1b Produkt (SPECTRAL_BASE aus Orbit 2257)) enthaltenen verglichen.

Aufgrund der geringen Linienanzahl der SLS in den Kanälen 7 und 8 wird sowohl für die eigene spektrale Kalibration als auch für die im Level 1b Produkt enthaltene eine spektrale Kalibration verwendet, die anhand der Messung von Absorptionsspektren mit SCIAMACHY während der Bodenklibration bestimmte wurde (CATGAS Messungen, siehe RP-SCIA-1000TP/266, 2000).

Von der eigenen spektralen Kalibration werden 106 der 108 in den Keydaten angegebenen Linien gefunden. Diese liegen bis auf ± 0.5 Pixel exakt an der angegebenen Position. Da die

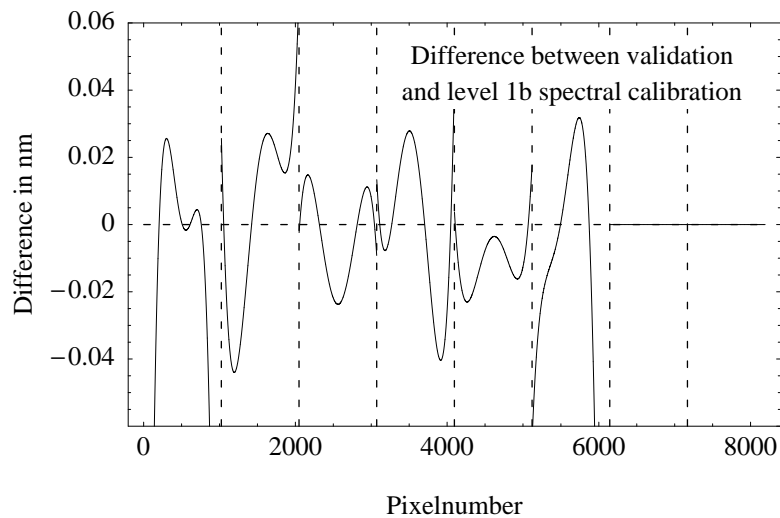


Abbildung 5: Unterschied der mit eigenen Routinen anhand von SLS Messungen im Orbit bestimmten spektralen Kalibration zu der im Level 1b Produkt enthaltenen (Kanalgrenzen sind durch gestrichelte vertikale Linien markiert).

Pixelpositionen in den Keydaten nur ganzzahlig angegeben sind, kann ein besseres Ergebnis nicht erreicht werden.

Laut Eintrag im Level 1b Produkt findet der 0-1 Prozessor nur 48 der 108 Linien. Dies beruht auf der Anwendung zu strenger Qualitätskriterien bei der Auswahl der Linien. Es wurde empfohlen, diese Kriterien zu ändern, damit ein Großteil der SLS Linien für die spektrale Kalibration verwendet wird (Skupin, 2003a).

Abbildung 5 zeigt die Differenz zwischen der eigenen anhand von SLS Messungen im Orbit bestimmten spektralen Kalibration mit der in den Level 1b Daten enthaltenen. Die Differenz liegt in den Kanälen 2 bis 5 im Bereich von ± 0.04 nm, während Kanäle 1 und 6 größere Abweichungen aufweisen. Die Differenz in den Kanälen 7 und 8 ist wie zu erwarten 0, da die gleiche spektrale Kalibration verwendet wird.

Korrektur der radiometrischen Kalibration

Schon erste Validationsergebnisse zeigten Probleme in der radiometrischen Kalibration (radiometric keydata) von SCIAMACHY. Offsets der solaren Irradianz von ca. +10 % und für Nadir Reflektanzen von -15 % bis -25 % wurden ermittelt (Acarreta und Stammes, 2003; Bovensmann u. a., 2002; Skupin u. a., 2003). Zudem zeigte sich (siehe 6. Zwischenbericht, Abschnitt 1.3.5, S. 4ff), daß sämtliche von TPD bis Anfang 2004 bereitgestellten Keydaten zur radiometrischen Kalibration (hierzu gehören auch die Scanner Keydaten) inkonsistent sind und damit die Ursache der radiometrischen Offsets von SCIAMACHY sein könnten. Am IUP Bremen wurden daher die OPTEC Kampagnen 2 bis 5 einer gründlichen Revision unterzogen. Dabei wurden sowohl von TPD durchgeführte Messungen zur radiometrischen Kalibration mit einem

externen Spectralon Diffuser als auch bisher nicht ausgewertete Messungen mit einer von der NASA bereitgestellten Ulbricht Kugel (NASA sphere) analysiert. Anhand der Ergebnisse dieser Revision wurden multiplikative Korrekturfaktoren für die SCIAMACHY Sonnenirradianz sowie für Nadir- und Limb-Radianzen bestimmt (Noël, 2004; Skupin u. a., 2004a). Diese Korrekturfaktoren wurden bereits in reguläre SCIAMACHY Keydaten umgerechnet. Bis zum Projektende waren diese noch nicht im operationellen Processing implementiert.

Alternative Etalon Korrektur

Die im ATBD (ENV-ATB-DLR-SCIA-0041, 2000) beschriebene Methode zur Etalon Korrektur basiert auf der Bestimmung des Etalonneffekts anhand von in-orbit Messungen mit der internen Weißlichtlampe (WLS). Aus diesen Messungen wird durch Fouriertransformation und Bandpaßfilterung der Etalonneffekt bestimmt. Ein Nachteil dieser Methode ist, daß durch die Fouriertransformation keine Etalonkorrektur für die Kanalränder bestimmt werden kann – diese bleiben daher unkorrigiert.

Da das in-orbit Verhalten des Instruments einige weitere – zum Teil unerwartete – Korrekturen erforderlich macht, die ebenfalls anhand von Messungen mit der WLS bestimmt werden können, wurde eine alternative Etalon Korrektur entwickelt. Diese Korrektur wird aus dem Quotienten von Dunkelstrom korrigierten WLS Messungen aus der Bodenkalibration und in-orbit bestimmt. Die Änderungen des Instruments, die dadurch korrigiert werden, umfassen:

- Pixel-to-Pixel-Gain (PPG)
- Etalon
- Detektortemperatur
(genauer: Temperaturabhängigkeit der Quanteneffizienz der Detektoren)
- Änderung der Transmission/Reflexion von optischen Komponenten
(insbesondere auch der Transmissionsverlust durch das Eis auf den Detektoren der Kanäle 7 und 8)

Damit handelt es sich streng genommen nicht mehr um eine reine Etalon Korrektur. Da sie diese jedoch ersetzt, wird im folgenden der Begriff „Etalon Korrektur“ weiter verwendet.

Da es sich bei der WLS um eine unpolarisierte Strahlungsquelle handelt, kann mit dieser Methode keine Änderung der Polarisationsabhängigkeit des Instrumentes korrigiert werden. Zu beachten ist weiterhin, daß die Temperatur der WLS Glühwendel im Orbit um ≈ 85 K erhöht ist gegenüber der Temperatur von 2950 K während der Bodenkalibration. Dieser Effekt ergibt sich aus der unter Schwerelosigkeit fehlenden Konvektionskühlung der Glühwendel durch das in der Lampe enthaltene Gas. Zudem wird eine Erhöhung der Emission der WLS von $\approx 3\%$ beobachtet. Dies kann durch eine Steigerung der Transmission des bei der WLS Messung verwendeten Strahlwegs oder durch eine erhöhte Emissivität der Glühwendel (z.B. durch Einbrandvorgänge) hervorgerufen werden. Die genaue Ursache ist bisher ungeklärt. Die in-orbit Emission der WLS muß um diese Effekte korrigiert werden, bevor der Quotient mit den Bodenmessung gebildet wird. Es ist in der Diskussion mit dem Cal/Val Tiger Team und der DLR, diese alternative Etalon Korrektur auch im operationellen Processing zu verwenden.

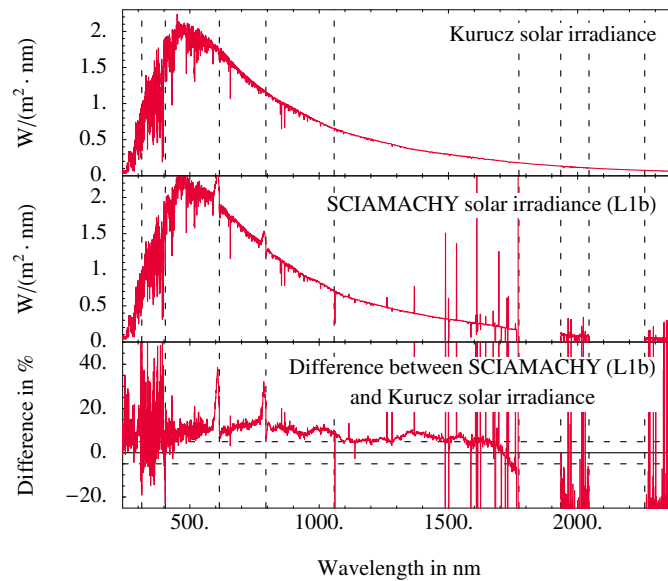


Abbildung 6: Von SCIAMACHY gemessene solare Irradianz SMR_{L1b} im Vergleich mit einem Kurucz Spektrum, Offset von ca. +10 %, Kanäle 7 und 8 von Eisbildung betroffen, SCIAMACHY Kanalgrenzen durch gestrichelte vertikale Linien markiert

Revision der SCIAMACHY Polarisationskorrektur

Ein weiterer im 0-1 Masterplan festgeschriebener Arbeitsschwerpunkt war die Validation der Polarisationskorrektur des SCIAMACHY 0-1 Prozessors.

Es zeigte sich jedoch, daß schon die dieser Polarisationskorrektur zugrunde liegenden TNs teilweise fehlerhaft sind. Da diese Fehler nicht hinreichend dokumentiert sind, erfolgte eine Revision der SCIAMACHY Polarisationskorrektur, die sowohl den Formalismus zur Berechnung der Polarisations-Keydaten als auch die im ATBD (ENV-ATB-DLR-SCIA-0041, 2000) beschriebenen Algorithmen umfaßt. Erste Ergebnisse dieser Arbeiten finden sich in Skupin (2004).

6.1.3 Validation von Sonnenirradianzen

Validiert wurde die Sonne über ESM-Diffusor Messung (State 62). Die Detektor Readouts werden vom 0-1-Prozessor spektral und radiometrisch kalibriert und sind als Sun Mean Reference (SMR) im Global Annotation Dataset (GADS) des Level 1 Datenprodukts enthalten. Dieses Sonnenspektrum wird im folgenden als SMR_{L1b} bezeichnet. Validiert wurden die Ende 2003 verteilten Verification-Orbits:

1. SCI_NL__1PNPDK20020823_085459_000060882008_00451_02509_0899.N1
2. SCI_NL__1PNPDK20020823_103445_000061272008_00452_02510_0900.N1

Da bis zum Projektende die in Abschnitt 6.1.2 auf Seite 12 beschriebenen radiometrischen Korrekturfaktoren nicht in den operationellen Produkten implementiert waren, und somit kei-

ne grundlegende Verbesserung zu erwarten war, wurde außerdem ein mit den in Abschnitt 6.1.1 auf Seite 8 beschriebenen Testroutinen kalibriertes Sonnenspektrum SMR_{Val} validiert. Dieses enthält sowohl die radiometrischen Korrekturfaktoren als auch die alternative Etalon Korrektur. Mit den Testroutinen wurden außerdem alle Lichtwege, die SCIAMACHY für Sonnenmessungen verwendet, validiert. Das Ergebnis dieser Arbeiten ist in (Skupin, 2003c) und im 5. Zwischenbericht (Abschnitt 1.3.6, S. 5ff) dokumentiert.

Die Kalibration von SMR_{Val} umfaßt:

- Korrektur der Nichtlinearität der Infrarotdetektoren
- Korrektur des Memory Effekts
- Korrektur des Dunkelstroms anhand des Dunkelstrommodells aus den Level 1b Daten
- Alternative Etalon Korrektur
- Streulichtkorrektur
- Spektrale Kalibration
- Absolute radiometrische Kalibration inkl. der radiometrischen Korrekturfaktoren und korrigierten Exposure-Times der IR-Kanäle
- Maskieren von dead/bad Pixeln
- Dopplershiftkorrektur
- Korrektur Erde-Sonne-Abstand

SMR_{Lib} und SMR_{Val} wurden mit dem Kurucz Sonnenspektrum (File `newkur.dat`) aus dem Programmpaket MODTRAN 3.7 verglichen. Dieses Spektrum setzt sich aus theoretischen Berechnungen von R. L. Kurucz und Daten aus Messungen zusammen (Kurucz, 1997). Es ist, um eine vergleichbare Wellenlängenauflösung wie SCIAMACHY zu erhalten, mit der Instrumentenspaltfunktion gefaltet.

Abbildung 6 auf der vorherigen Seite zeigt die von SCIAMACHY gemessene solare Irradianz SMR_{Lib} im Vergleich mit dem Kurucz Spektrum. Der Offset von ca. +10 % ist klar zu erkennen. Die dargestellten Differenzen sind in % angegeben und berechnen sich nach:

$$\text{Differenz} = 100 \cdot \left(\frac{\text{Irradianz}_{\text{SCIAMACHY}}}{\text{Irradianz}_{\text{Validationsquelle}}} - 1 \right) \quad (1)$$

Abbildung 7 auf der nächsten Seite zeigt den Vergleich der mit den Testroutinen kalibrierten solaren Irradianz SMR_{Val} vom 05.03.2004 (Orbit 10529²) mit einem Kurucz Spektrum (Kurucz, 1995, 1997) und mit Messungen der Instrumente SOLSPEC (Thuillier u. a., 2003), SOLSTICE (Rottman und Woods, 1994) und SUSIM (Floyd u. a., 2003).

Für die UARS Instrumente SOLSTICE und SUSIM stehen Daten nur für den Wellenlängenbereich bis 420 nm mit einer spektralen Auflösung von 1 nm zur Verfügung. Das SCIAMACHY Spektrum wurde daher ebenfalls auf eine Auflösung von 1 nm herunter gerechnet. Durch die

²erst seit Anfang 2004 werden die IR-Detektoren mit Temperaturen vergleichbar denen der Bodenkaliibration betrieben.

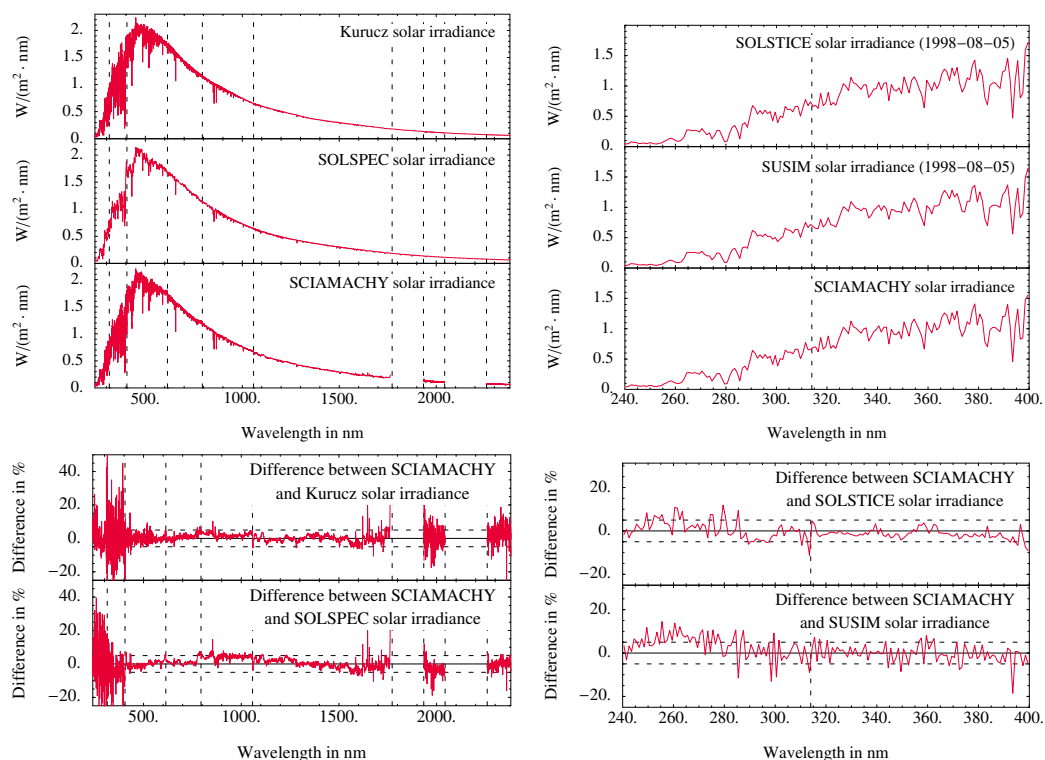


Abbildung 7: Vergleich der mit den Testroutinen kalibrierten solaren Irradianz SMR_{Val} mit einem Kurucz Spektrum und mit Messungen der Instrumente SOLSPEC, SOLSTICE und SUSIM, SCIAMACHY Kanalgrenzen durch gestrichelte vertikale Linien markiert

so erfolgte weitgehende Glättung der Fraunhofer Strukturen findet sich mit niedrig auflösenden Instrumenten im UV generell eine bessere Übereinstimmung.

Statistische Ergebnisse für den mittleren Offset aller 8 SCIAMACHY Kanäle finden sich in Tabelle 6 auf der folgenden Seite. Im gesamten SCIAMACHY Wellenlängenbereich von 340 bis 2380 nm konnte der mittlere Offset pro Kanal von ca. +10 % auf unter ± 3 % reduziert werden.

In Kanal 1 machen sich das schlechte Signal-Rausch-Verhältnis der Kalibrationsmessungen, die Degradation der WLS sowie das Problem, daß dieser Kanal zwischen OPTEC4 und OPTEC5 bezüglich seiner Streulichtanfälligkeit verändert wurde, bemerkbar. Letzteres führt zu Unsicherheiten in der Bestimmung des radiometrischen Korrekturfaktors (Noël, 2004). Hier sind eventuell weitere Arbeiten notwendig um eine ausreichende Korrektur zu finden.

6.1.4 Weitere wissenschaftliche Ergebnisse

Weitere wissenschaftliche Produkte basierend auf SCIAMACHY Level 1 Daten sind:

- Der SCIAMACHY Mg II Index:
siehe 6. Zwischenbericht, Abschnitt 1.3.6 und Skupin u. a. (2005, 2004b)

Tabelle 6: Statistischer Vergleich der einzelnen SCIAMACHY Kanäle mit dem Kurucz Spektrum und mit Messungen der Instrumente SOLSPEC, SOLSTICE und SUSIM

Kanäle							
1	2	3	4	5	6	7	8
<i>Mittlere Differenz in % zwischen SCIAMACHY und Kurucz</i>							
0.62	-1.16	-0.18	0.82	1.96	-0.04	-0.27	2.87
<i>Mittlere Differenz in % zwischen SCIAMACHY und SOLSPEC</i>							
4.2	-2.73	0.	1.25	4.28	0.11	-3.27	0.02
<i>Mittlere Differenz in % zwischen SCIAMACHY und SOLSTICE</i>							
0.8	-1.42	-	-	-	-	-	-
<i>Mittlere Differenz in % zwischen SCIAMACHY und SUSIM</i>							
3.49	-0.42	-	-	-	-	-	-

- Die Korrelation der relativen Änderung der von SCIAMACHY gemessenen solaren Irradianz mit der effektiven Sonnenfläche:

siehe 7. Zwischenbericht, Abschnitt 1.3.5 und Noël u. a. (2004); Skupin u. a. (2005)

Es zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse mit den Validationsquellen, was die hohe spektrale und radiometrische Stabilität von SCIAMACHY belegt.

6.2 Teilprojekt 2: Validation von ausgewählten, mit SCIAMACHY gemessenen Spurengasverteilungen durch Vergleich mit anderen Satelliteninstrumenten (Level 2 Validation)

6.2.1 Tools zur Koinzidenzanalyse und Verbesserung derer durch die Berücksichtigung dynamischer Effekte und Test der ESA Software Tools für die Bearbeitung von ENVISAT-Daten (Meilenstein 1)

Für den Vergleich der Spurengasdaten verschiedener Satelliteninstrumente wurden Kollokationen durch die Auswahl von koinzidenten Messungen bestimmt. Dabei wurden als erstes Datenbanken der für die Validierung notwendigen anderen Satelliteninstrumente (GOME, HALOE, TOMS, SAGE II) aufgebaut. Für die Entwicklung von Tools für die Koinzidenzanalyse, wurden als Koinzidenzkriterien für den Vergleich von GOME Ozonprofilen mit HALOE und SAGE II nur Messungen ausgewählt, die am gleichen Tag und im Abstand von 160 km (innerhalb des GOME-Groundpixels) erfolgten. Da GOME/ERS-2 und ENVISAT nur im Abstand von etwa 30

Minuten in der selben Umlaufbahn fliegen, sind die Ergebnisse recht einfach auf die ENVISAT-Instrumente übertragbar. Ebenso wurden in einer Langzeituntersuchung über einen Zeitraum von 5 Jahren mit verschiedenen Instrumenten (GOME, TOMS und Dobson-Bodenstationen) und Algorithmen bestimmte Gesamt-Ozonsäulen global miteinander verglichen. Zusätzlich wurde mit IDL-Software ein Programm entwickelt, das die statistische Auswertung für die Validation der ENVISAT-Spuren-gase mit anderen Satelliteninstrumenten gemessenen Level-2-Daten ermöglicht. Diese Arbeiten wurden in Bramstedt et al. 2002, Bramstedt et al. 2003 und Bracher et al. 2004a veröffentlicht. Des Weiteren wurde eine Methode entwickelt, um umfangreiche Datensätze von GOME und TOMS-Gesamt-Ozonsäulen, bei denen es Tausende von Kollokationen am Tag gibt, miteinander zu vergleichen. Dabei wurden die Ozon-daten in geografische Quadrate eingeordnet und gemittelt, anschließend miteinander verglichen.

Für langlebige Substanzen, wie z.B. Ozon in der unteren Stratosphäre, entstehen durch Transport Gradienten in der horizontalen Verteilung. Der Meridionaltransport ist am stärksten in der Winterhemisphäre. Am Rande des Polarwirbels entstehen sehr hohe Ozonwerte, die zu beiden Seiten stark abnehmen. Dies erschwert die Validierung an der Grenze von verschiedenen Luftmassen. Eine Methode zur Bestimmung der Ursprünge der Luftmassen ist durch die PV (potentielle Wirbelstärke)-Verteilung gegeben, die sich aus den Winden berechnen lässt, welche im Rahmen einer Langzeitstudie über den Vergleich von GOME und SAGE II Ozonprofilen entwickelt wurde (publiziert in Bracher et al. 2004a): Hier wurden nur solche Kollokationen statistisch verglichen, die auch aufgrund ihrer PV auf der 475 K Isentrope der gleichen Luftmasse zugeordnet werden konnten. Zum einen wurden bzgl. des polaren Vortex nur Kollokationen zugelassen, bei denen beide Messungen entweder innerhalb, am Rand oder außerhalb des polaren Vortex lagen. Des Weiteren wurde versucht koinzidente Messungen auszuschließen, bei denen bei der einen Messung ozonarme Luft in die untere Stratosphäre aus der Tropopause (hohe Tropopause) gedrückt wurde, bei der anderen dagegen in Höhen um 15 km nur stratosphärische Luftmassen mit ozonreicherer Luft vorhanden waren. Dabei wurde für die aus UKMO Daten bestimmte Tangentenhöhe eines Profils eine Differenz von maximal 1 km für die Messungen einer Kollokation zugelassen.

Da im Rahmen dieses Vorhabens auch NO₂-Profile aus SCIAMACHY-Messungen validiert werden sollten und es sich bei NO₂ um ein Spurengas mit sehr ausgeprägten Tagesgang handelt, wurde es notwendig, dass für die Validierung der SCIAMACHY-Daten, die bei sehr unterschiedlichen Sonnenzenithwinkeln (SZW) gemessen werden, die Messungen der Okkultationsgeräte HALOE und SAGE II an den SZW der SCIAMACHY-Messungen skaliert werden. Dafür wurde ein photochemisches Modell entwickelt, dafür eine Fehleranalyse gemacht und für die Validation der SCIAMACHY NO₂-Profile verwendet (Bracher et al. 2005a).

Die oben genannten Methoden wurden für die SCIAMACHY Validation angewendet (siehe Abschnitte 6.2.2 und 6.2.3), wobei hierbei die räumlichen Auswahlkriterien für Koinzidenzen entsprechend der Pixelgröße für SCIAMACHY Nadir bzw. Limbmessungen angepasst wurden. Bei den Vergleichen der Messungen der ENVISAT-Instrumente untereinander (siehe Abschnitt 6.2.4 auf Seite 25) wurde das zeitliche Kriterium weiter eingeschränkt und nur Messungen innerhalb eines Orbits als Kollokation ausgewählt.

Für den Umgang mit den Validationsdaten während der verschiedenen Validierungsphasen wurden die verschiedenen Software-Tools (Extraktion der ENVISAT-Daten mit Pearl Library,

deren Umwandlung in HDF-Format mit EnviView, upload von Geolokationstabellen nach Umwandlung in HDF auf die NILU-Datenbank) von ESA und NILU getestet (u. a. bei verschiedenen Rehearsals der ESA).

6.2.2 Validierung von SCIAMACHY Spurengasverteilungen durch Vergleich mit anderen Satelliteninstrumenten (Meilensteine 3, 4 und 5)

Validation operationeller SCIAMACHY-O₃ und NO₂-Produkte

Von SCIAMACHY wurden sowohl die O₃ und NO₂-Säulen (Versionen 3.53, 4.0, 4.01, 5.0, 5.01, 5.04) mit GOME (3.0), GOME WFDOAS (Coldewey-Egbers et al. 2005, Weber et al. 2004) und TOMS V7 als auch die Profile (einzige ausgegebene Datenversion 2.1) mit HALOE und SAGE II validiert (siehe auch Bracher et al. 2002, 2003a, 2004b, Brinksma et al. 2004, Hilsenrath et al. 2004, Lambert et al. 2004a, von Savigny et al. 2004a).

In den Zwischenberichten von 2002 und 2003 wurde die Validation der O₃- und NO₂-Säulen der Versionen 3.53, 4.0, 4.01 und 5.01 (hier nur die Verifikationsorbits 2509 und 2510 vom 23. August 2002) mit GOME 3.0 und TOMS V7 beschrieben. Des Weiteren wurden die Ergebnisse der Validation der SCIAMACHY Datenprodukte Version 5.01 (nur die Verifikationsorbits 2509 und 2510 vom 23. August 2002) auf dem ACVE-2 Workshop im Mai 2004 in Frascati in den Beiträgen der einzelnen Datenprodukte mit vorgestellt und in einem Poster präsentiert. Eine ausführliche Beschreibung dieser Validation befindet sich in den für die Proceedings dieses Workshops verfassten Publikationen (Bracher et al. 2004a, Hilsenrath et al. 2004, Lambert et al. 2004). Daher werden hier nur die Ergebnisse der Validation der konsolidierten SCIAMACHY Daten von Jan-Jan 2003 mit GOME WFDOAS zusammengefasst. Diese Ergebnisse der Validation mit WFDOAS sind in Bracher et al. (2005b) veröffentlicht. Wie schon in Abschnitt 6.2.1 auf Seite 17 erwähnt wurden für diesen Vergleich aufgrund der Vielzahl der Kollokationen und unterschiedlicher Pixelgrößen, die Daten eines Tages in geografische Quadrate eingeordnet (2.5° Breiten- x 2.5° Längengrad) und gemittelt, anschließend miteinander verglichen. GOME WFDOAS zeigte eine bessere Datenqualität als GOME 3.0, da im Vergleich dazu die Abweichungen zum globalen Netzwerk von Ozon-Bodenmessungen unterhalb von 1% liegen. Abbildung 8 auf der nächsten Seite zeigt die Mittelwerte und Standardabweichung der relativen Abweichung der kollokierten SCIAMACHY Gesamt-Ozonsäulen zu den GOME Gesamt-Ozonsäulen aller Messungen von Januar bis Juni 2003 in Abhängigkeit vom Sonnenzenithwinkel und der Gesamtsäule. Die Abweichung liegen innerhalb von 2 Prozent, trotzdem muß bemerkt werden, dass sich eine, sicher miteinander im Zusammenhang stehende, Abhängigkeit sowohl von der Ozonsäule als auch vom Sonnenzenithwinkel feststellen lässt. Auch schon die Darstellung der Abweichungen für verschiedenen Breitengrad- Zonen (siehe Fig. 3 in Bracher et al. 2005b) zeigt, dass die mittleren Abweichungen stark zwischen den unterschiedlichen Zonen schwanken. Diese Ergebnisse verdeutlichen, dass zwar insgesamt die Datenqualität der SCIAMACHY akzeptabel ist, dass jedoch unnötigerweise eine leichte Abhängigkeit zum Sonnenzenithwinkel, Breitengrad und der Gesamtsäule besteht, der sich leicht vermeiden lassen könnte, wenn endlich der operationelle SCIAMACHY-Datenprozessor von derzeitig GDP 2.4 auf GDP 4.0 angepasst würde. Diese Empfehlung wurde abermals an die ESA/DLR weitergegeben.

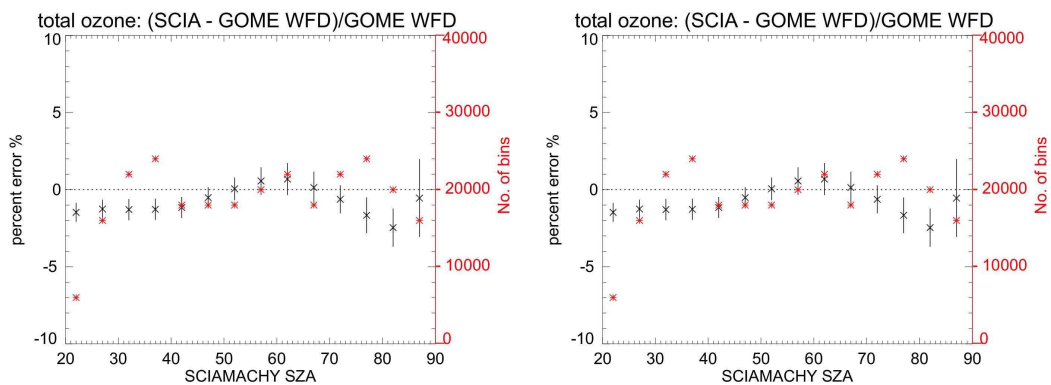


Abbildung 8: Vergleich von Gesamt Ozon von gebinneten Daten SCIAMACHY Version 5.01/5.04 mit GOME WFD OAS V1 von Januar bis Juni 2003. Gezeigt werden in schwarz die mittleren relativen Abweichungen und deren Standardabweichungen und in rot die Anzahl der verglichenen Datenbins in Abhängigkeit vom SCIAMACHY Sonnenzenithwinkel (links) und Gesamt Ozon säule (rechts). Aus Bracher et al. 2005b

Der erste an die Validierungsgruppen (im Rahmen von ACVE-2), zur Verfügung gestellte Datensatz (Validierung ist publiziert in Bracher et al. 2004b, Brinksma et al. 2004, von Savigny et al. 2004) operationeller Limb Ozon und NO_2 -Profilen von SCIAMACHY wurde nach Kollokationen mit SAGE und HALOE durchsucht, wobei der Tangentenpunkt der Okkultationsmessung innerhalb von 1000 km von SCIAMACHY lag und die Messungen innerhalb von 12 Stunden erfolgten. Für die Kollokationen wurde auch festgelegt und überprüft, dass die Messungen bzgl. der Tropopausenhöhe und des polaren Wirbels in der gleichen Luftmasse lagen (nach Bracher et al. 2004a). Für O_3 , konnten 43 Kollokationen mit HALOE (wovon 24 bei 60°N - 90°N , 12 bei 30°N - 60°N , eine in den Tropen, nur 5 in den mittleren und hohen südlichen Breiten lagen) und 44 mit SAGE II (wovon 26 bei 60°N - 90°N , 11 bei 30°N - 60°N , eine in den Tropen, 5 in den mittleren und hohen südlichen Breiten lagen) bestimmt werden.

Abbildung 9 auf der folgenden Seite zeigt die Ergebnisse der statistischen Auswertung: SCIAMACHY O_3 VMR zeigen zwischen 22 und 42 km eine Übereinstimmung mit HALOE von -6 bis 20% ($\pm 20\%$) und mit SAGE II von 0 bis 15% (± 20 to 25%). Diese erste Validation, im Einklang mit Arbeiten anderer im Rahmen von ACVE-2 (siehe Brinksma et al. 2004) zeigt, dass aus SCIAMACHY-Limbdaten schon vernünftige Ozonprofile gewonnen werden können. Trotzdem beeinflusst der, v.a. im Datensatz von 2002-03 vorhandene, Offset in der Tangentenhöhe (verursacht durch ein falsches ENVISAT-Orbitmodell) stark negativ das Ergebnis!

Für NO_2 konnten nur 26 koinzidente SCIAMACHY-Messungen mit HALOE gefunden werden. Davon lagen 21 in den nördlichen mittleren und hohen Breiten. Abbildung 10 auf der nächsten Seite zeigt vier Beispiele, wobei die HALOE-Messung nach Bracher et al. 2004b auf den SCIAMACHY-SZW skaliert wurde. Wie in 10% aller Vergleiche, zeigt Abb. 10 links ein Beispiel von einem SCIAMACHY NO_2 Profil mit völlig unphysikalischen Werten. Die beiden Beispiele Abb. 10 zweite links und zweite rechts zeigen für SCIAMACHY vernünftige Werte zwischen 30 und 40 km; dies entspricht ca. 40% aller Vergleiche. Abb. 10 rechts ist typisch für

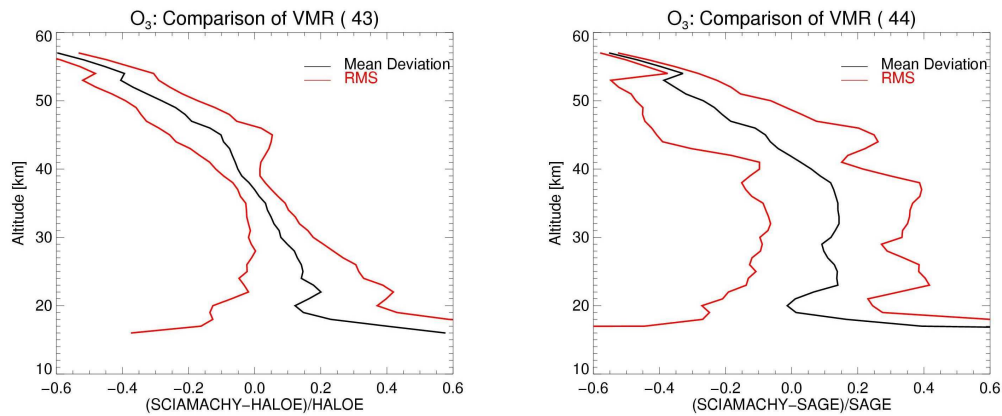


Abbildung 9: Mittlere relative Abweichung (schwarz) und deren Standardabweichung (RMS, rot) aller Kollokationen des Validationsdatensatz von SCIAMACHY-O₃-Profilen v2.1 zu HALOE v19 (links) und SAGE II v6.2 (rechts). Aus Bracher et al. 2004b

die übrigen 50% der untersuchten Profile, hier liegen die SCIAMACHY NO₂ Konzentrationen systematisch höher als die konvertierten HALOE-Werte. Die statistischen Ergebnisse zeigen, wenn unphysikalische SCIAMACHY-Profile herausgenommen werden, dass die SCIAMACHY Profile zwischen 25 und 45 km ca. 50% ($\pm 50\%$) höher als die konvertierten HALOE Profile sind. Aufgrund dieser Untersuchung kann geschlossen werden, dass die operationelle Auswertung von NO₂ aus SCIAMACHY-Limb-Profilen noch mehr Arbeit bedarf. Wir haben als einzige Gruppe im Rahmen von ACVE-2 dieses Datenprodukt validiert.

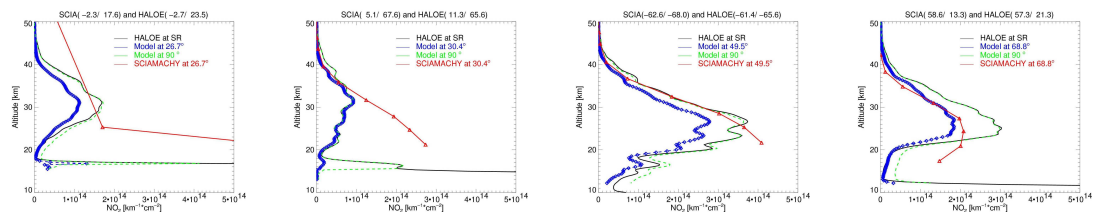


Abbildung 10: Vergleich von kollokierten NO₂-Profilen von HALOE (schwarz) und SCIAMACHY (rot) mit Ergebnissen aus Modellläufen (Details dazu in Bracher et al. 2004b): Model at 90° bezeichnet Model-NO₂-Werte, die in Abhängigkeit zu den HALOE-Werten skaliert wurden, und Model at SCIAMACHY SZW bezeichnet Model-NO₂-Werte, bei denen die Model at 90°-Werte mit Hilfe eines 1-dim photochemischen Modells auf den SZW von SCIAMACHY skaliert wurden. Aus Bracher et al. 2004b

6.2.3 Validation wissenschaftlicher SCIAMACHY-Profil-Daten

Da nur gegen Ende der Projektlaufzeit einige wenige, operationelle SCIAMACHY Spurengasprofile zur Verfügung standen, wurden verschiedene SCIAMACHY Ozon- und NO₂-Profile, die am Institut für Umweltphysik (IUP) aus Level-0 oder Level-1-Daten ausgewertet wurden, zum einen Teil aus Limbbeobachtungen, zum anderen aus Sonnen- und Mondokkultationen, mit Messungen der Okkultationsgeräte HALOE, SAGE II und POAM III verglichen. Die Ergebnisse der Validation von IUP-Mondokkultationsprofilen ist in der Publikation von Amekudzi et al. (2005), die der Sonnenokkultation in Meyer et al. (2005), die der IUP-NO₂-Limbprofile in Bracher et al. (2002), (2003b), (2005a), Rozanov et al. 2005, von Savigny et al. 2005), und die der IUP_Ozon-Limbprofile in Bracher et al. (2002), (2003c) und Brinksma et al. (2004) zusammengefasst. Genauer gehen wird hier auf die Ergebnisse der Validation der Limb- und der Sonnenokkultationsmessungen ein.

Validation von SCIAMACHY-IUP-Sonnenokkultationsmessungen

SCIAMACHY Ozon- und NO₂-Profile werden am IUP der Universität Bremen von J. Meyer aus Level-0-Daten von SCIAMACHY-Okkultationsmessungen mit eigenen Algorithmen berechnet. Diese Produkte wurden mit Messungen der Okkultationsgeräte HALOE, SAGE II und POAM III verglichen. Dabei wurden Kollokationen im Zeitraum zwischen dem 1.8.2002 bis 31.1.2003 so ausgewählt, dass die Messungen am gleichen Tag erfolgten und der Tangentenpunkt der Vergleichsmessung innerhalb von 500 km der SCIAMACHY-Messung lag. SCIAMACHY-Sonnenokkultationsmessungen werden immer nur einmal pro Orbit und am Anfang des jeweiligen Orbits ausgeführt und liegen alle zwischen 64°N und 66°N. Daher konnte mit HALOE im Beobachtungszeitraum nur eine Kollokation, mit SAGE II nur 26 Kollokationen gefunden werden. Hingegen mit POAM, das v. a. in diesen Breiten misst, gab es 278 Kollokationen. Die Ergebnisse der Vergleiche zeigen sowohl für die SCIAMACHY-Okkultations-Ozonprofile als auch für die NO₂-Profile eine gute Übereinstimmung mit den HALOE, POAM und SAGE II-Profilen im Bereich zwischen 15 bis 35 km. Die statistische Auswertung aller Vergleiche von koinzidenten Messungen zeigt für SCIAMACHY zwischen 15 und 35 km für die Ozonprofile eine relative mittlere Abweichung von -7 - 15% (mit Standardabweichung von 5-20%, Abbildung 11 auf der folgenden Seite, links) und für die NO₂-Profile eine relative mittlere Abweichung von 2 - 20% (mit Standardabweichung von 5-17%, Abb. 11, rechts) zu SAGE II. Oberhalb von 35 km zeigen alle Vergleiche große Abweichungen, was vermutlich daran liegt, dass die beiden Retrievals sehr unterschiedliche *A-priori*-Informationen nutzen. In Anbetracht des Sensitivitätsbereich für SCIAMACHY Ozon- und NO₂-Profilauswertungen zwischen 15-35 km und der Genauigkeit der SAGE II O₃-Profile von 10% zwischen 10 und 50 km und der SAGE II NO₂-Profile von 15% zwischen 20-45 km, sind das sehr gute Ergebnisse.

Validation von IUP-SCIAMACHY Limb-Profilen

Die aus dem umfangreichen Datensatz der Level-0- und Level-1-Daten bestimmten wissenschaftlichen SCIAMACHY_IUP Limb-Produkte von O₃ (von Savigny et al. 2005, verschiedene Versionen, hier gezeigt 1.6) und NO₂-Profilen (Rozanov et al. 2005, Version 1) wurden u. a. in Verbindung der Bereitstellung dieser Daten für das TOPOZ III-Projekt mit HALOE, SAGE II und POAM validiert (Rozanov et al. 2003). Insgesamt wurde für alle zur Verfügung stehenden SCIAMACHY-Level-0-Daten vom 24.7.2002 und vom 12.9. bis 15.10.2002 nach Kollokatio-

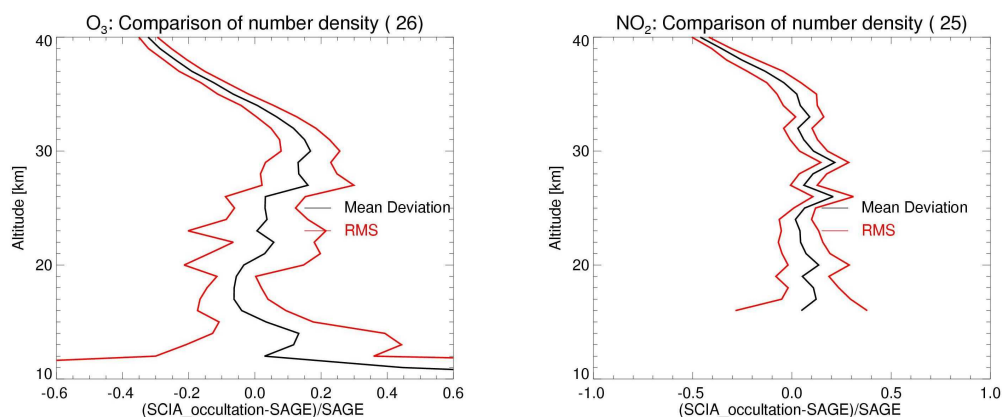


Abbildung 11: Mittlere relative Abweichung (schwarz) und deren Standardabweichung (rot) von Ozonprofilen (links) und NO₂-Profilen (rechts) bestimmt aus SCIAMACHY-Okkultationsmessungen mit der Retrieval-Methode von J. Meyer et al. (2005) mit SAGE II. Diese statistische Analyse schließt alle koinzidenten Messungen (insgesamt 26) mit ein, die für die vorhandenen SCIAMACHY Level-1-Daten vom 1.7.2003 bis 28.02.2003 mit SAGE II gefunden wurden. Aus Meyer et al. 2005

nen mit den drei Okkultationsgeräten gesucht. Als Kollokationskriterium galt, dass die Messungen am gleichen Tag erfolgten und der Tangentenpunkt der Okkultationsmessung innerhalb der SCIAMACHY-Limbmessung lag. Für die aus Level-0-Daten gewonnenen SCIAMACHY_IUP Messungen wurden 75 koinzidente mit HALOE, 96 mit SAGE und 95 mit POAM gefunden. Die SCIAMACHY_IUP Limb-Ozonprofile zeigen gute Übereinstimmung mit den SAGE II, POAM III und HALOE Messungen im Bereich zwischen 18 bis 40 km (Beispiel für Vergleich mit HALOE in Abbildung 12 auf der nächsten Seite, links). Die statistische Auswertung aller Vergleiche von Ozonprofilen von koinzidenten HALOE und SCIAMACHY_IUP-Limbmessungen zeigt eine relative mittlere Abweichung von +/- 10% (mit RMS von 10-20%) zwischen 19 und 38 km für den Vergleich von SCIAMACHY_IUP zu HALOE (Abb. 12, rechts). In Anbetracht des Sensitivitätsbereich für die SCIAMACHY_IUP Ozonprofilauswertung zwischen 15-40 km und der Genauigkeit der HALOE O₃-Profile von 6% zwischen 30 und 60 km und 20% zwischen 15-30 km sind das sehr gute Ergebnisse.

Die SCIAMACHY_IUP Limb-NO₂-Profile zeigen gute Übereinstimmung im Bereich zwischen 20 und 35 km mit HALOE Messungen, die auf den SCIAMACHY-SZW konvertiert wurden. Die Beispiele in Abbildung 13 auf der folgenden Seite zeigen Dreier-Kollokationen zwischen SCIAMACHY, HALOE und SAGE II in den hohen nördlichen Breiten. Da die HALOE-Daten bei Sonnenaufgang, die von SAGE II dagegen bei Sonnenuntergang gemessen wurden, sind diese Messungen nicht direkt vergleichbar, sondern nur die auf den SCIAMACHY SZW konvertierten Okkultationsmessungen. In beiden Beispielen sind die auf den SCIAMACHY SZW konvertierten SAGE II NO₂-Werte signifikant höher als die SCIAMACHY_IUP- und konvertierten HALOE-Werte. Dagegen zeigen die SCIAMACHY_IUP NO₂-Profile oberhalb von 20 km eine gute Übereinstimmung mit den konvertierten HALOE-Profilen. Abgesehen von der

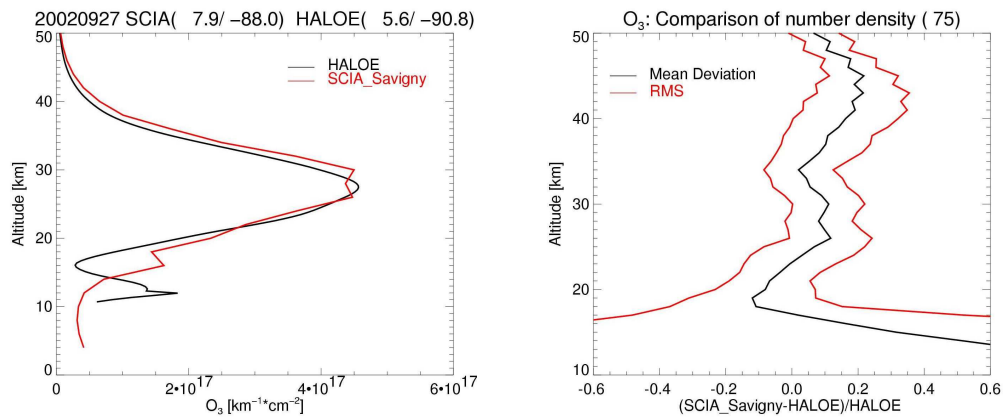


Abbildung 12: Vergleich von Ozonprofilen in Teilchendichten bestimmt aus HALOE-Okkultationsmessungen (schwarz) und aus SCIAMACHY Limbmessungen mit der Retrieval Methode von Savigny et al. 2005 (Version 1.6, rot). Beispiel aus den Tropen (links) und mittlere relative Abweichung (schwarz) und deren Standardabweichung (rot) aller Kollokationen (insgesamt 75). Aus Rozanov et al. 2003

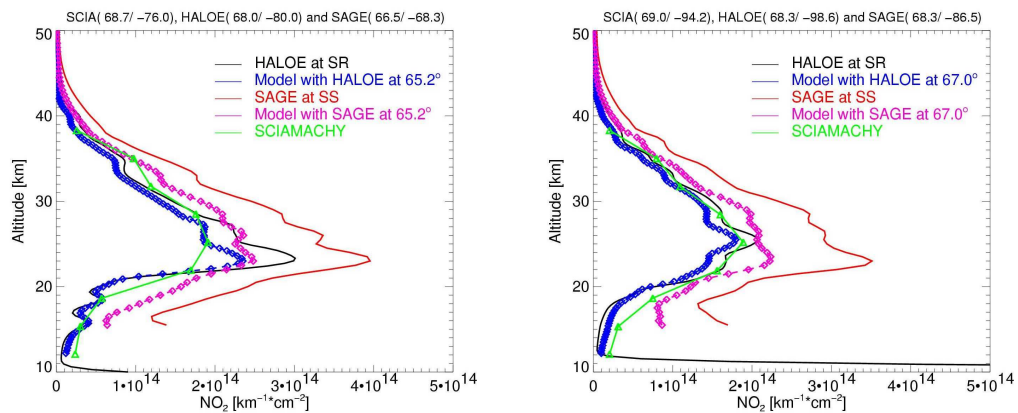


Abbildung 13: Vergleich von mit der Methode von Rozanov et al. (2004) aus SCIAMACHY Level-0-Daten bestimmten NO_2 -Profilen (grün) unterschiedlicher Sonnenzenithwinkel (SZW) mit HALOE NO_2 -Profilen (schwarz) und SAGE II (rot), die bei 90° SZW gemessen wurden und nach Bracher et al. (2004b) auf den SCIAMACHY SZW konvertiert wurden (blau für HALOE und pink für SAGE II). SZW von SCIAMACHY ca. 65° (links), 67° (rechts). Aus Bracher et al. (2005a)

gröberen Auflösung von SCIAMACHY_IUP gibt das SCIAMACHY-Retrieval die Profilstruktur vom konvertierten HALOE-Profil im Beispiel von Abb. 13 links wieder, sogar bis hinunter zu 12 km. Im anderen Beispiel Abb. 13 rechts liegen die SCIAMACHY_IUP-Werte unterhalb von 20 km etwas höher, aber dennoch tiefer als die von SAGE II. Die statistische Auswertung aller Vergleiche von NO₂-Profilen im o. g. Zeitraum zeigt eine relative mittlere Abweichung der SCIAMACHY_IUP-Limb Messungen von 7 bis 12% (mit RMS von 10-20%) zwischen 21 und 33 km mit konvertierten HALOE und von 10 bis -35% (RMS 15%) zwischen 20 und 38 km mit konvertierten SAGE II Messungen. Insgesamt zeigen die Vergleiche zu HALOE eine gute Datenqualität für die SCIAMACHY_IUP-NO₂-Limbprofile zwischen 21 und 33 km. Dagegen können die SAGE II Werte vermutlich als zu hoch eingestuft werden, was in den Untersuchungen von Newchurch and Ayoub (2004) feststellten.

6.2.4 Vergleich von ENVISAT-Daten untereinander

Die Kreuzvalidierung von Ozon- und NO₂-Profilen der drei ENVISAT-Instrumente erfolgte in vier verschiedenen Untersuchungen. Bei zwei Untersuchungen (Tetteh 2003 und Bracher et al. 2005c) wurden von GOMOS die Ozonprofile des Prototyp-Prozessors von ACRI (v5.4, v6.0a), von MIPAS die operationellen Produkte der ESA (Version 4.57 und 4.61) und die SCIAMACHY_IUP-Limbprodukte (Version 1.3 und Version 1.6) verwendet.

Kreuzvalidation von IUP-SCIAMACHY Limb-Ozonprofilen mit operationellen MIPAS und GOMOS Datenprodukten

Im Rahmen einer am IUP angefertigten Masterarbeit (Tetteh 2003) wurden alle verfügbaren Ozondaten von März 2003 von MIPAS v4.57, GOMOS v5.4 und SCIAMACHY_IUP v1.3 miteinander verglichen. Insgesamt zeigen die Vergleiche, dass die Ozonwerte von MIPAS zwischen 23 und 45 km systematisch um 5 bis 25% höher sind als die SCIAMACHY_IUP-Werte und die Ozonwerte von GOMOS zwischen 20 und 47 km +/-20% im Vergleich zu den SCIAMACHY_IUP-Werten liegen. Unterhalb von 20 km zeigt der Vergleich zwischen den ENVISAT-Instrumenten noch große Abweichungen. Sehr unrealistische Ozonwerte unterhalb von 23 km treten häufig in den MIPAS-Profilen dieser Version auf. Nach Auskunft von G. Schwarz (DLR-Oberpfaffenhofen) wird in diesen MIPAS Datenversionen noch in allen Höhen ausgewertet, auch wenn Wolken vorhanden sind. Die Datenauswertung unterhalb von 23 km ist ab Version 4.59 durch eine Wolkenerkennung erheblich verbessert werden. Diese Verbesserungen zeigen sich auch in der folgenden Untersuchung, bei der sich die Vergleichbarkeit der drei ENVISAT-Datensätze unterhalb von 20 km deutlich verbessert: Bei der zweiten Ozon-Kreuzvalidation (Bracher et al. 2004e) wurden alle verfügbaren arktischen (>60°N) Ozondaten von Januar bis März 2003 von den aktuellsten Versionen von MIPAS (v4.61), GOMOS (v6.0a) und SCIAMACHY_IUP (v1.6) miteinander verglichen. Insgesamt zeigen die Vergleiche, dass die Ozonwerte von MIPAS zwischen 17 und 36 km systematisch um 5 bis 25% höher sind als die SCIAMACHY_IUP-Werte und die Ozonwerte von GOMOS zwischen 18 und 36 km bei +20 und -10% im Vergleich zu den SCIAMACHY_IUP-Werten liegen. Die Ozonwerte von MIPAS liegen zwischen 19 und 36 km um 6 bis 15% höher im Vergleich zu GOMOS. Für alle Vergleiche liegt die RMS bei 5 bis 15%. Auch innerhalb des Vortex sind die ENVISAT-Messungen ähnlich

vergleichbar, wenn darauf geachtet wird (mit Hilfe der Methode von Bracher et al. 2004a), dass die Kollokationen diesbezüglich in der gleichen Luftmasse liegen.

Kreuzvalidation von IUP-SCIAMACHY Limb-Ozonprofilen mit MIPAS_IMK und operationellen GOMOS Datenprodukten

Des Weiteren wurden in Zusammenarbeit mit dem Institut für Meteorologie und Klimatologie (IMK) des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK) drei Untersuchungen durchgeführt (Milz et al. 2003, Elbern et al. 2004, Bracher et al. 2005c), bei denen die am IMK ausgewerteten MIPAS-Ozon- und NO₂-Profile mit den SCIAMACHY_IUP-Limb-(Versionen 1.2 und 1.6, da auch mit GOMOS Version 6.0a) und SCIAMACHY_IUP-Okkultationsmessungen verglichen wurden. Die in Zusammenarbeit mit dem EU-Projekt Advanced MIPAS level 2 data analysis (AMIL2DA) erfolgte Kreuzvalidierung von aus SCIAMACHY_IUP Limbmessungen berechnete Ozon- (Version 1.2) und NO₂- Profile mit entsprechenden MIPAS_IMK-Profilen wurde genauer im 2. Zwischenbericht von 2003 beschrieben. Daher stellen wir hier detailliert nur die Kreuzvalidierung der aus am IUP berechneten SCIAMACHY-Limb-Ozon- (Version 1.6) und NO₂-Profile mit entsprechenden MIPAS_IMK-Profilen und GOMOS-Profilen und die Kreuzvalidierung der IUP SCIAMACHY-Okkultations-Ozon- und NO₂-Profile mit entsprechenden MIPAS_IMK-Profilen dar.

Ozon- und NO₂-Profil-Vergleich von SCIAMACHY_IUP Limb, MIPAS_IMK und GOMOS_ACRI von Okt-Nov 2003

Bei diesem Vergleich wurden koinzidente Ozon- und NO₂-Profile von SCIAMACHY_IUP Limb (v1.6)-, MIPAS_IMK- und GOMOS-Messungen aus dem Zeitraum von 21. Okt. bis 12. Nov 2003 kreuzvalidiert. Koinzidenzen wurden so gewählt, dass die ENVISAT-Messungen während des gleichen oder dem nächst folgenden Orbit erfolgten und der Tangentenpunkt der MIPAS- oder GOMOS-Messung innerhalb von 500 km der Mittelpunktskoordinate der SCIAMACHY- oder MIPAS-Messung lag. Zusätzlich wurden entsprechend der Methode von Bracher et al. (2004c) nur Kollokationen zugelassen, bei denen beide Messungen entweder innerhalb, am Rand oder außerhalb des polaren Vortex lagen. Da NO₂ einen relativ starken Tagesgang aufweist, wurden für die Vergleiche dieses Spurengases nur Kollokationen ausgewählt, bei denen die Differenz im Sonnenzenithwinkel (SZA) <5° lag. Da SCIAMACHY-Messungen nur am Tage erfolgen, die GOMOS-Tag-Messungen bis dato keine vernünftige Ozon- und NO₂-Profile liefern, konnten keine direkten Kollokationen gefunden werden. Daher wurden für Ozon Vergleiche zwischen den Datenprodukten dieser beiden Instrumente durchgeführt, bei denen die Messungen am gleichen Tag erfolgten. Vergleiche für NO₂-Profile wurden nicht gemacht, da die Differenz zwischen den SZA zur Zeit dieser Kollokationen zu groß war. In Zukunft sollen aber auch diese Vergleiche, nachdem die Messungen mit Hilfe eines photochemischen Modells an den gleichen SZA skaliert wurden (nach der in Bracher et al. 2004d beschriebenen Methode), gemacht werden.

Insgesamt wurden beim Ozonprofil-Vergleich über 2000 MIPAS-SCIAMACHY-Kollokationen gefunden, die meisten davon bei 30°S bis 30°N. Die Beispiele in Abbildung 14 auf der nächsten Seite zeigen, dass die SCIAMACHY and MIPAS O₃ Werte gut zwischen 20 und 35 km übereinstimmen, darunter werden die Abweichungen sehr groß und darüber liegen die SCIAMACHY O₃ Werte niedriger als die von MIPAS. Für MIPAS und GOMOS wurden 388

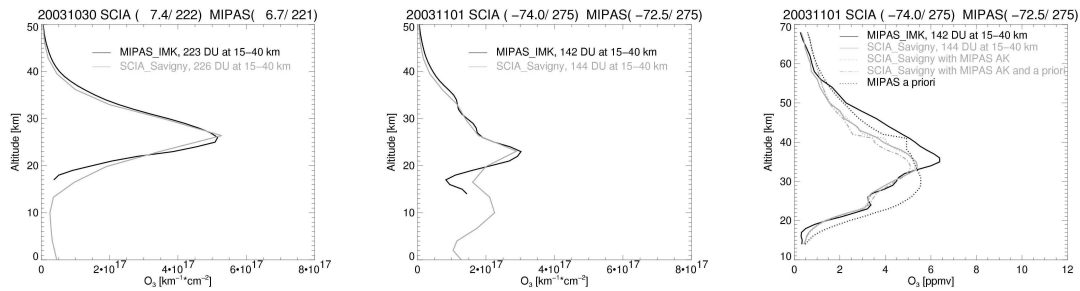


Abbildung 14: Vergleich von O_3 -Profilen kollozierter MIPAS_IMK (schwarz) und SCIAMACHY_IUP (= SCIA_Savigny; grau) Messungen. Beispiele vom 30. Okt und 1. Nov 2003 in den Tropen (links) und hohen südlichen Breiten (mitte) in Teilchendichten und Angabe der Teilsäule von 15 bis 40 km in der Legende. Rechts: Beispiel in den hohen Breiten in VMR von MIPAS_IMK (schwarz, durchgezogen) und SCIA_Savigny (grau, durchgezogen), zusätzlich auch von MIPAS a priori (schwarz, gepunktet), und dem SCIA_SAVIGNY-Profil, welches mit MIPAS a priori (grau, gepunktet) ausgewertet und mit MIPAS Averaging Kernels gefaltet wurde (grau, $\cdot-\cdot$). Abb. aus Bracher et al. 2005c

Kollokationen gefunden, bei 330 davon wurde die GOMOS-Messung während der Dunkelheit durchgeführt (alle zwischen 18°S und 44°S), bei den übrigen in der Dämmerung (alle zwischen 40°N und 75°N). Für GOMOS und SCIAMACHY wurden 68 Kollokationen gefunden (alle zwischen 18°S - 44°S und 40°N - 50°N), die gleichzeitig auch Kollokationen mit MIPAS darstellten. Insgesamt, folgen die GOMOS O_3 Werte denen von MIPAS, aber beim O_3 Maximum sind die Strukturen unterschiedlich da die GOMOS O_3 -Profile stark oszillieren (Abbildung 15 auf der folgenden Seite). Bei den Dreier-Vergleichen stimmen die SCIAMACHY und MIPAS-Profile besser überein als mit GOMOS. Trotzdem sind die SCIAMACHY O_3 -Werte kleiner (Abb. 15, mitte und rechts). Außerdem wurde getestet, ob die Verwendung der gleichen a priori Information (von MIPAS) und Faltung der SCIAMACHY- und GOMOS-Profile mit den MIPAS Averaging Kernels, die Vergleiche verbessern würde (Abb. 14, rechts); doch die Ergebnisse für mehrere Beispiele zeigten, dass dies nicht der Fall war und daher wurden diese Auswerteverfahren nicht weiter berücksichtigt. Die statistische Auswertung der Vergleiche zwischen MIPAS und SCIAMACHY zeigt zonale Unterschiede, die bei den Vergleichen von GOMOS mit MIPAS und SCIAMACHY nicht gefunden wurden (siehe Bracher et al. 2005c). Bei 60°S - 84°S liegen die SCIAMACHY O_3 Konz. zwischen 22 und 42 km bei 20% bis +5% (RMS 10-15%) und für die 15-40 km Teil-Ozonsäule bei 6% (RMS 14%) im Vergleich zu MIPAS. In den Tropen (30°S - 30°N) verringert sich die Abweichung auf 13 bis +8% (RMS 6-10%) für den gleichen Höhenbereich und bei den Teil-Ozonsäulen auf -1% (RMS 5%). Bei 30°N - 45°N liegt SCIAMACHY zwischen 12 und +3% (RMS 5-10%) bei 21-37 km und -7% (RMS 5%) bei den Teil-Ozonsäulen im Vergleich zu MIPAS. Für alle Kollokationen liegt SCIAMACHY im Vergleich zu MIPAS bei 12 zu +5% (RMS 10-13%) zwischen 21 und 42 km und bei 2% (RMS 9%) für die Teil-Ozonsäule (Abbildung 16 auf der nächsten Seite, links). Bei allen SCIAMACHY-GOMOS Kollokationen, liegen die SCIAMACHY-Werte im Vergleich zu GOMOS innerhalb

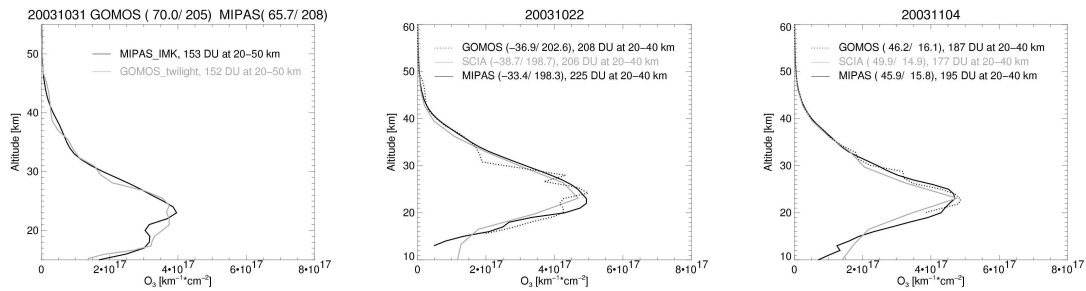


Abbildung 15: Vergleich von O_3 -Profilen kollozierter MIPAS_IMK (schwarz) und GOMOS (grau) Messungen in der Arktis (links) und von Dreier-Kollokationen von MIPAS_IMK (schwarz), SCIAMACHY_IUP (= SCIA; grau) und GOMOS (schwarz, gepunktet) in den nördlichen polaren Breiten (links), Subtropen (mitte) und in den nördlichen mittleren Breiten (rechts). Angabe der Teilsäule von 20 bis 50, bzw. 20 bis 40 km in der Legende. Abb. aus Bracher et al. 2005c

von 9% (RMS 9-12%) bei 22-42 km und zeigen keine mittlere relative Abweichung (RMS 7%) für die 20-40 km Teil-Ozonsäule (Abb. 16, mitte). Bei allen MIPAS-GOMOS Kollokationen, liegen die GOMOS-Werte im Vergleich zu MIPAS um 0 bis 5% (RMS 7-11%) niedriger bei 21-41 km und zeigen 4% (RMS of 5%) Abweichung für die 20-50 km Teil-Ozonsäule (Abb. 16, rechts).

Insgesamt wurden beim NO_2 -Profil-Vergleich über 1300 MIPAS-SCIAMACHY-Kollokationen gefunden, die meisten davon bei 30°S bis 30°N. Die Beispiele in Abbildung 17 auf der folgenden Seite (oben) zeigen, dass SCIAMACHY and MIPAS NO_2 Werte gut zwischen 25 und 45 km übereinstimmen, vor allem wenn die Teilsäulen betrachtet werden. Im tropischen Beispiel scheint das SCIAMACHY-Profil einen Tangenten-Offset von 1-2 km zu haben. Die statistische

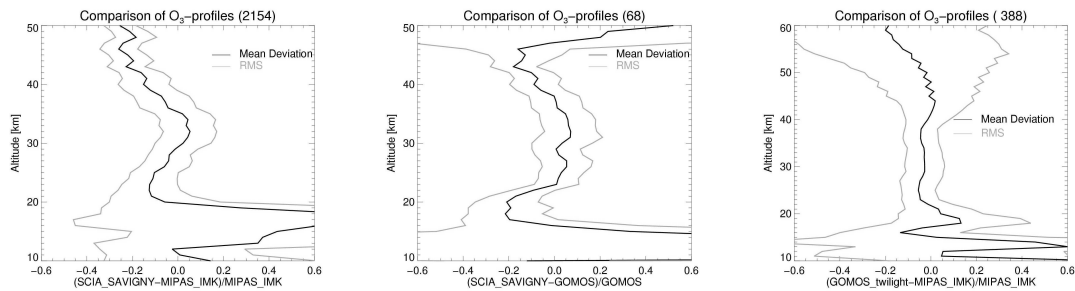


Abbildung 16: Statistische Ergebnisse aller Vergleiche von kollozierten O_3 -Profilen von Okt-Nov 2003 mit mittlerer relativer Abweichung (schwarz) und Standardabweichung der mittleren relativen Abweichung (RMS; grau) bestimmt von allen kollozierten MIPAS_IMK und SCIAMACHY_IUP (SCIA_SAVIGNY; links), SCIAMACHY_IUP und GOMOS (mitte), und MIPAS_IMK und GOMOS (rechts) Messungen. Abb. aus Bracher et al. 2005c

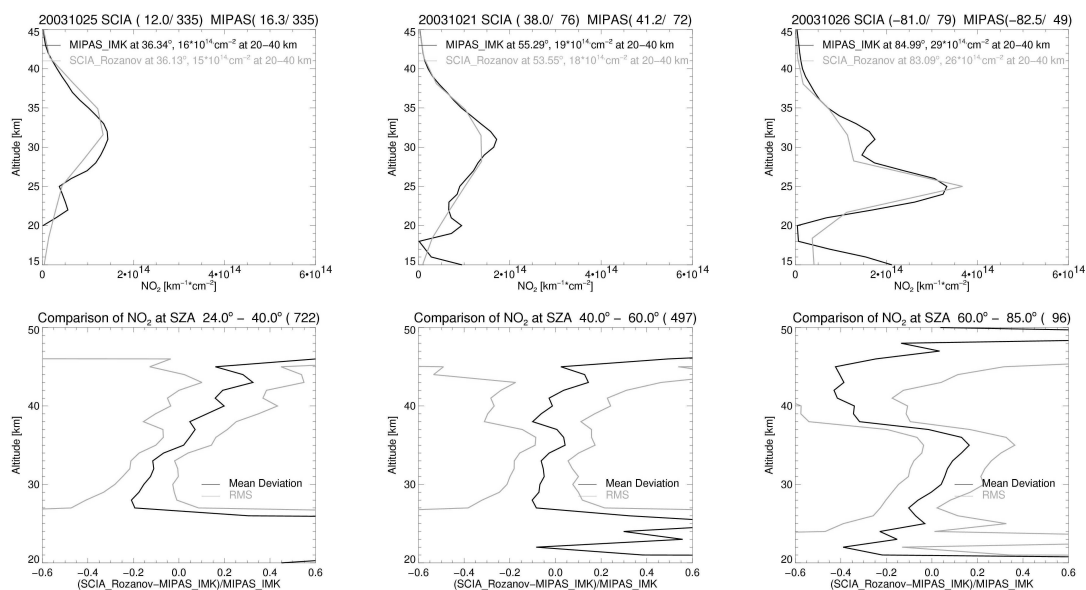


Abbildung 17: Vergleich von NO_2 -Profilen kollozierter MIPAS_IMK (schwarz) und SCIAMACHY_IUP (=SCIA_Rozanov; grau) Messungen von Okt-Nov 2003. Oben: Beispiele bei verschiedenen Sonnenzenithwinkeln (SZA: $\tilde{3}6^\circ$ (links), $\tilde{5}4^\circ$ (mitte), $\tilde{8}4^\circ$ (rechts)), ebenso Angabe der Teilsäule von 20 bis 40 km in der Legende. Unten: Statistische Ergebnisse aller Vergleiche von kollozierten O_3 -Profilen mit mittlerer relativer Abweichung (schwarz) und Standardabweichung der mittleren relativen Abweichung (RMS; grau) bei verschiedenen SZA-Bereichen: 60° bis 85° (links), 40° bis 60° (mitte), und 24° bis 40° (rechts).

Auswertung der Vergleiche zwischen MIPAS und SCIAMACHY zeigt für SZA-Bereich von 24° bis 40° eine mittlere relative Abweichung von SCIAMACHY mit bis zu 20% niedrigeren Werten bei 27-35 km und bis zu 20% zu höheren Werten bei 35-42 km (Abb. 17, unten links) im Vergleich zu MIPAS. Etwas besser ist die Übereinstimmung für den SZA-Bereich 40° bis 60° mit Abweichungen von -10% bis +2% von SCIAMACHY zu MIPAS (Abb. 17, unten mitte). Im hohen SZA-Bereich (60 bis 85° ; Abb. 17, unten rechts) liegt die Übereinstimmung innerhalb von 16%, aber nur bei 26 bis 37 km. Für alle Vergleiche liegt die Übereinstimmung bei 16% für 27 bis 42 km. Die RMS ist für alle statistischen Auswertungen 10-30%. Der Vergleich der 20-40 km Teilsäule zeigt einen 10% (RMS 8%) negativen Offset von SCIAMACHY zu MIPAS.

Insgesamt wurden 361 MIPAS-GOMOS-Kollokationen gefunden, bei 328 davon sind GOMOS-Dunkelmessungen zwischen 18°S bis 44°S , die übrigen sind Messungen in der Dämmerung bei 40°n bis 75°N . Die Beispiele in Abbildung 18 auf der nächsten Seite zeigen, dass die GOMOS und MIPAS NO_2 Werte zwischen 25 und 40 km sich gleichen, außer im tropischen Beispiel (Abb. 18, oben mitte), dort ist die Struktur beider Profile sehr unterschiedlich (vermutlich verschiedenen Luftmassen), vor allem wenn die Teilsäulen betrachtet werden. Die statistische Auswertung der Vergleiche zeigt keine wesentlichen Unterschiede für verschiedene SZA-Bereiche, aber in Abhängigkeit vom GOMOS-Beobachtungsmodus (Abb. 18, unten):

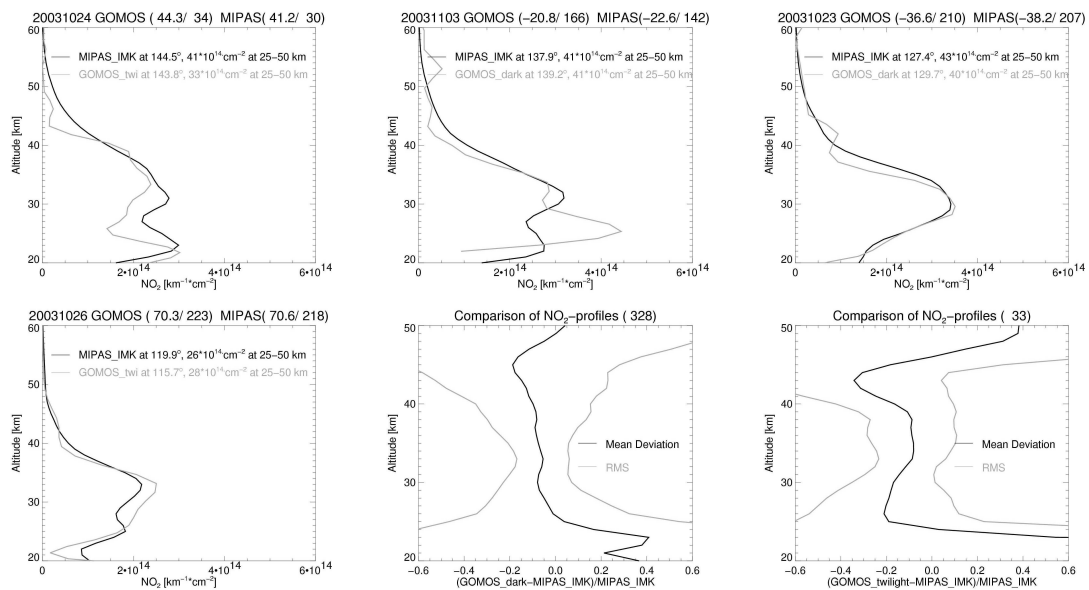


Abbildung 18: Vergleich von NO_2 -Profilen kollozierter MIPAS_IMK (schwarz) und GOMOS (grau) Messungen von Okt-Nov 2003. Beispiele bei verschiedenen Sonnenzenithwinkeln (SZ: $\sim 145^\circ$ mit GOMOS Dämmerungsmessung (oben links), $\sim 138^\circ$ mit GOMOS Dunkelmessung (oben mitte), $\sim 128^\circ$ mit GOMOS Dunkelmessung (oben rechts), $\sim 118^\circ$ mit GOMOS Dämmerungsmessung (unten links), ebenso Angabe der Teilsäule von 25 bis 50 km in der Legende. Unten: Statistische Ergebnisse aller Vergleiche von kollozierten O_3 -Profilen mit mittlerer relativer Abweichung (schwarz) und Standardabweichung der mittleren relativen Abweichung (RMS; grau) für alle MIPAS-GOMOS_Dunkel- (unten mitte) und MIPAS-GOMOS_Dämmerungskoinzidenzen (unten rechts).

GOMOS-Dunkelmessungen liegen zwischen 1 und 10% (RMS 11-33%) bei 26-40 km und 8% für die 25-50 km Teilsäule niedriger als die MIPAS-Werte (Abb. 18, unten mitte). GOMOS-Dämmerungsmessungen dagegen liegen zwischen 8 und 20% (RMS 13-33%) bei 26-40 km und 16% für die 25-50 km Teilsäule niedriger als die MIPAS-Werte (Abb. 18, unten mitte). Für alle Vergleiche, liegen die GOMOS-Werte um 2 bis 10% (RMS 12-33%) bei 26-40 km und 9% für die Teilsäule niedriger als MIPAS.

Ozon- und NO_2 -Profil-Vergleich von SCIAMACHY_IUP Okkultation und MIPAS_IMK von Okt-Nov 2003

Im Rahmen des Projektes SACADA wurden Messungen von MIPAS mit Okkultationsmessungen von SCIAMACHY verglichen (Elbern et al. 2004). Im Vergleich zum üblichen Messverfahren mit SCIAMACHY wird in diesem Fall die Sonne als direkte Strahlungsquelle verwendet und die Vertikalverteilungen der entsprechenden Gase nicht aus dem gestreuten, sondern aus dem absorbierten Anteil des Lichtes ermittelt.

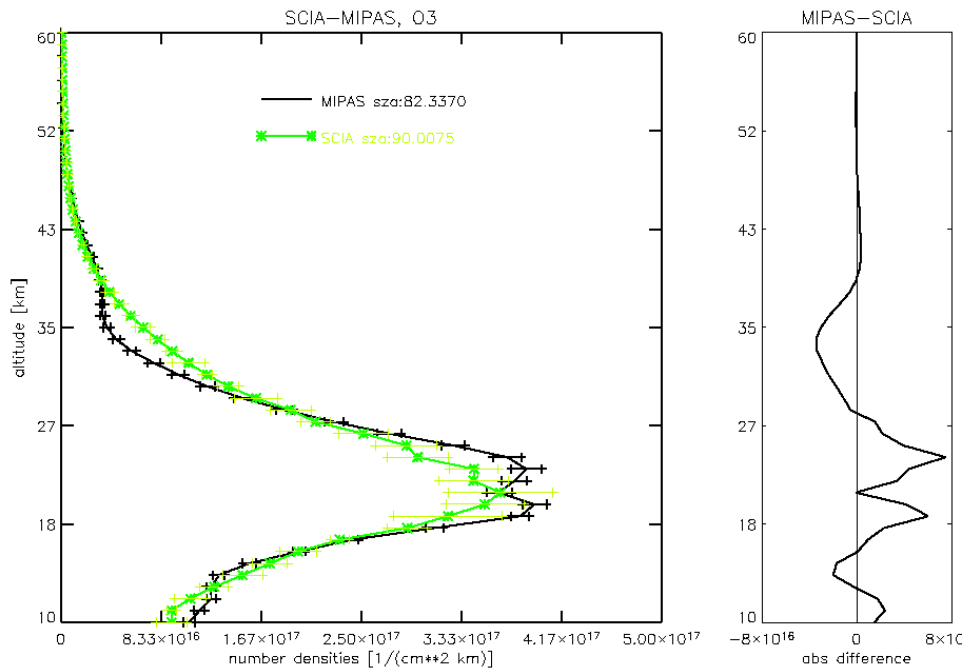


Abbildung 19: Vergleich von MIPAS_IMK und SCIAMACHY_IUP Ozon-Profilen einer geeigneten Kollokation. Die MIPAS Messung erfolgte bei 70,1° N und 0° O um 10:21:41 UTC, die SCIAMACHY Messung erfolgte bei 68,1° N und 11,6° W um 16:44:25 UTC. Die Messungen liegen 504 km und 6 h 22 min auseinander. Rechts ist die Differenz der Profile in Teilchenzahldichten dargestellt.

Als Zeitraum für diesen Vergleich wurde die Periode von Ende Oktober bis Mitte November 2003 ausgewählt. Aufgrund der Einschränkungen in Folge der Okkultationsmessungen sind die Messungen von SCIAMACHY auf Sonnenaufgang beschränkt. Die zu vergleichenden Messungen von MIPAS und SCIAMACHY liegen in einem Breitenbereich von 65° bis 71° N, wobei die Messungen von SCIAMACHY zwischen 66,6° und 68,1° N liegen. Die Tangentenhöhen der SCIAMACHY Messungen wurden um 3 km korrigiert, um die bekannte Abweichung zwischen tatsächlicher und angegebener Messhöhe zu korrigieren.

Der Vergleich der Ozonprofile der ausgewählten Kollokationen zeigt im Bereich des Maximums eine relativ gute Übereinstimmung zwischen beiden Geräten. Die Maxima der Ozonprofile liegen für beide Profile im selben Höhenbereich bei etwa 20 km. In den Flanken des Profils bei etwa 30 km bzw. 10 km weichen die Profile der beiden Instrumente zum Teil stark voneinander ab. MIPAS weist hier im Mittel niedrigere (30 km) bzw. höhere (10 km) Ozonwerte auf. Eine mögliche Ursache ist die Tatsache, dass das Ozonprofil von MIPAS mit ca. 11 Freiheitsgraden deutlich mehr unabhängige Profilwerte liefert als SCIAMACHY mit ca. 4 Freiheitsgraden. In Abbildung 19 ist ein typischer Ozonvergleich dargestellt.

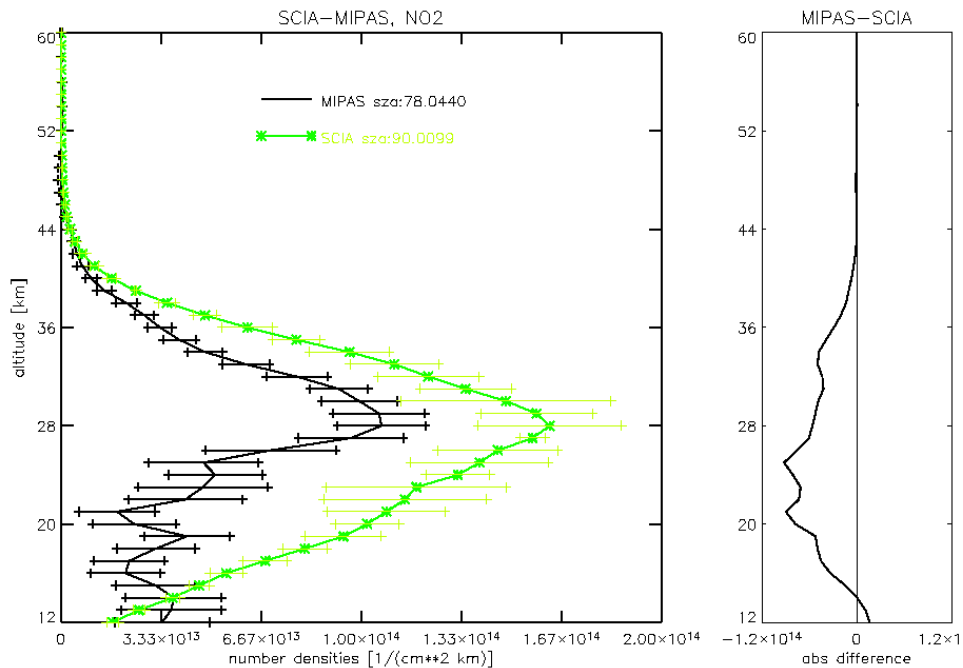


Abbildung 20: Vergleich von MIPAS und SCIAMACHY NO₂-Profilen einer geeigneten Kollokation. Die MIPAS Messung erfolgte bei 65,3° N und 48,4° O um 07:01:50 UTC, die SCIAMACHY Messung erfolgte bei 68,1° N und 38,9° O um 13:23:13 UTC. Die Messungen liegen 520 km und 6 h 21 min auseinander. Rechts ist die Differenz der Profile in Teilchenzahldichten dargestellt.

Der Vergleich Messungen von NO₂ ist schwieriger. NO₂ besitzt einen starken Tagesgang. Für einen direkten Vergleich ist die Anforderung an geeignete Kollokationen deutlich strenger. Für die Messungen darf der Sonnenzenithwinkel zum Zeit der Messung nur geringfügig (kleiner als 5 Grad) voneinander abweichen. Die Okkultationsgeometrie von SCIAMACHY bedingt außerdem starke Horizontalgradienten längs des Sehstrahls. Da beide Instrumente in unterschiedliche Richtungen der Flugrichtung blicken, sind die verglichenen Profile mit einer gewissen Zeitdifferenz gemessen. Zudem stammen einige der Kollokationen aus unterschiedlichen Orbits. Die solaren Zenithwinkel zu den Zeitpunkten der Messungen weichen um mehr als 5 Grad voneinander ab. Als Folge dessen unterscheiden sich die Profile SCIAMACHY und MIPAS zum Teil erheblich und der direkte Vergleich ist hier nicht möglich. In Abbildung 20 ist ein typischer Vergleich der NO₂ Profile dargestellt.

Um einen Vergleich dennoch möglich zu machen, sollen assimilierte Felder des einen Instruments benutzt werden, um am Ort und zur Zeit der Messung des anderen Instruments die Messungen vergleichen zu können. Diese Felder werden im Rahmen des AFO-2000-Projekts SACADA bereitgestellt.

7 Nutzen/Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die Arbeiten leisten einen wichtigen Beitrag zur Validierung der atmosphärischen Datenprodukte des Satellitensensors SCIAMACHY auf dem europäischen Umweltsatelliten ENVISAT. Bestätigt wurde dies durch die hervorragende Beteiligung des IUP an den ENVISAT-Validierungs-Workshops der ESA (ACVT (2002), ACVE-II (2004); siehe Abschnitt 9) sowie durch die Teilnahme an weiteren in Abschnitt 9.3 auf Seite 39 angegebenen Veranstaltungen. Die Validationsergebnisse wurden in der einschlägigen Literatur (Proceedings, Peer Reviewed Journals, Zwischenberichte an den Projektträger) veröffentlicht.

Die VIRTIS Validationsaktivitäten bilden damit gemeinsam mit allen anderen Validierungsmessungen im Rahmen der ACVE-Aktivitäten (Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT) einen wichtigen Beitrag dafür, dass die operationellen Prozessoren von SCIAMACHY kontinuierlich verbessert werden können und die SCIAMACHY/ENVISAT-Mission zu einem Erfolg wird.

8 Fortschritt bei anderen Stellen

Die hier vorgestellten Aktivitäten sind ein integrierter Bestandteil aller Validationsbemühungen für SCIAMACHY auf ENVISAT. Wie in Abschnitt 5 auf Seite 5 dargestellt, werden die SCIAMACHY Level 1 Validationsaktivitäten auf europäischer Ebene im Rahmen des *SCIAMACHY Calibration and Verification Teams* (SCVT) sowie im Calibration/Validation Tiger Team koordiniert. Die Level 2 Validation ist in das Team für *Models and Data Assimilation, Satellite Intercomparisons* (MASI) eingebunden.

Ergebnisse der weiteren an diesen Teams beteiligten Einrichtungen sind an anderer Stelle hinreichend dokumentiert. Online verfügbare Informationen zu ausgewählten Themen – wie Nichtlinearität der IR-Detektoren oder Dunkelstrom – findet sich z.B. unter http://www.sron.nl/~SCIA_CAL/ oder in den Proceedings der ENVISAT Validation Workshops.

Hervorgehoben werden muss, dass die Arbeiten im Teilprojekt 2 (Level 2 Validation) erstmals global alle 3 atmosphärischen ENVISAT-Datensätze verknüpfen und somit wegweisend sind für die synergistische Nutzung der Spurengasinformationen, die aus den Messungen der drei ENVISAT Satelliteninstrumenten gewonnen wurden. Neben der Validierung operationeller Produkte, wurden auch wissenschaftliche SCIAMACHY-Produkte validiert und kreuzvalidiert mit wissenschaftliche MIPAS-Produkten des IMK und operationellen GOMOS-Produkten.

9 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen

9.1 Rezensierte Publikationen

- L. K. Amekudzi, A. Bracher, J. Meyer, A. Rozanov, H. Bovensmann, J. P. Burrows; Lunar occultation with SCIAMACHY: First retrieval results. *Advances in Space Research*, 2005, im Druck

- A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt, S. Tellmann, and J.P. Burrows; Long-term global measurements of ozone profiles by GOME validated with SAGE II considering atmospheric dynamics. *J. Geophys. Res.* 109: d20308, doi:10.1029/2004JD004677, 2004
- A. Bracher, M. Sinnhuber, A. Rozanov, J. P. Burrows; NO₂ Modelling used for the comparison of NO₂ satellite measurements at different solar zenith angles. *Atmospheric Chemistry and Physics* 5: 393-408, 2005
- A. Bracher, H. Bovensmann, K. Bramstedt, J. P. Burrows, T. von Clarmann, K.-U. Eichmann, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, M. Kaufmann, S. Kellmann, M. Kiefer, M. E. Koukouli, A. Linden, M. López-Puertas, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, S. Noël, G. Rohen, A. Rozanov, V.V. Rozanov, C. von Savigny, J. Skupin, M. Sinnhuber, T. Steck, G. P. Stiller, D.-Y. Wang, M. Weber, and M. W. Wuttke; Cross comparisons of O₃ and NO₂ profiles measured by the atmospheric ENVISAT instruments GOMOS, MIPAS, and SCIAMACHY. *Advances in Space Research*, 2005: im Druck
- A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt, M. Coldewey-Egbers, L. Lamsal, J. P. Burrows; Global satellite validation of SCIAMACHY O₃ columns with GOME WFOAS. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion* 5: 795-813, 2005
- K. Bramstedt, K.-U. Eichmann, M. Weber, V. Rozanov and J. P. Burrows; GOME ozone profiles: A global validation with HALOE measurements. *Adv. Space Res.*, 29(11), 1637-1642, 2002
- K. Bramstedt, J. Gleason, D. Loyola, W. Thomas, A. Bracher, M. Weber and J. P. Burrows; Comparison of total ozone from the satellite instruments GOME and TOMS with measurements from the Dobson network 1996–2000. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 3, S. 1409-1419, 2003
- J. W. Kaiser, K.-U. Eichmann, S. Noël, M. W. Wuttke, J. Skupin, C. von Savigny, A. V. Rozanov, V. V. Rozanov, H. Bovensmann and J. P. Burrows; SCIAMACHY Limb Spectra. *Adv. Space Res.*, Vol. 34, No. 4, S. 715–720, 2004
- J. Meyer, A. Bracher, A. Rozanov, A. Schlesier, H. Bovensmann, J. P. Burrows; Solar occultation with SCIAMACHY: Algorithm description and first validation. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion* 5: 17-66, 2005
- S. Noël, H. Bovensmann, J. Skupin, M. W. Wuttke, J. P. Burrows, M. Gottwald and E. Krieg; The SCIAMACHY calibration/monitoring concept and first results. *Adv. Space Res.*, Vol. 32, No. 11, S. 2123–2128, 2003
- G. Rohen, C. von Savigny, E. J. Llewellyn, J. W. Kaiser, K.-U. Eichmann, A. Bracher, H. Bovensmann, J. P. Burrows; Upper stratospheric / lower mesospheric ozone retrieved from SCIAMACHY limb spectra: theory, first validation and ozone depletion at the solar proton event in Oct./Nov. 2003. *Advances in Space Research*, 2005: im Druck
- A. Rozanov, H. Bovensmann, A. Bracher, S. Hrechanyy, V. Rozanov, M. Sinnhuber, F. Stroh, J. P. Burrows; NO₂ and BrO vertical profile retrieval from SCIAMACHY limb measurements: sensitivity studies. *Advances in Space research*, 2005: im Druck
- J. Skupin, S. Noël, M. W. Wuttke, H. Bovensmann, J. P. Burrows, R. Hoogeveen, Q. Kleipool and G. Lichtenberg; In-flight calibration of the SCIAMACHY solar irradiance spectrum. *Adv. Space Res.*, Vol. 32, No. 11, S. 2129–2134, 2003

- J. Skupin, S. Noël, M. W. Wuttke, M. Gottwald, H. Bovensmann, M. Weber and J. P. Burrows; SCIAMACHY Solar Irradiance Observation in the Spectral Range from 240 to 2380 nm. *Adv. Space Res.* (DOI 10.1016/j.asr.2005.03.036), 2005, in print
- F. K. Tetteh; Intercomparison of ozone profiles measured by SCIAMACHY, MIPAS and GOMOS, Masterarbeit am Institut für Umweltphysik, Universität Bremen, 2003

9.2 Konferenzbeiträge und Berichte

- H. Bovensmann, M. Buchwitz, J. Frerick, R. Hoogeveen, Q. Kleipool, G. Lichtenberg, S. Noël, A. Richter, A. Rozanov, V. Rozanov, J. Skupin, C. von Savigny, M. W. Wuttke and J. P. Burrows; SCIAMACHY on ENVISAT: In-flight optical performance and first results. *Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere VIII*, Proc. of SPIE 5235, S. 160–173, 2004
- H. Bovensmann, B. Ahlers, M. Buchwitz, J. Frerick, M. Gottwald, R. Hoogeveen, J. Kaiser, Q. Kleipool, E. Krieg, G. Lichtenberg, R. Mager, J. Meyer, S. Noël, A. Schlesier, C. Sioris, J. Skupin, C. v. Savigny, M. W. Wuttke and J. P. Burrows; SCIAMACHY in-flight instrument performance. *Proceedings of the Envisat Calibration Review (SP-520)*, ESA Publications Division, 9.–13. September 2002
- A. Bracher, K. Bramstedt, A. Richter, M. Sinnhuber, M. Weber, J. P. Burrows; Validation of GOMOS (GOPR 6.0a) and SCIAMACHY (v5.1/2.1) O₃ and NO₂ products with GOME (v3.0), HALOE (v19) and SAGE II (6.2). In: Danesy D. (ed.), *Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)*, 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 397-405, 2004
- A. Bracher, K.-U. Eichmann, C. von Savigny, M. Weber, and J.P. Burrows; Ozone distributions in the Arctic winter 2003 measured by the ENVISAT instruments GOMOS, MIPAS and SCIAMACHY. In: *Proceedings of the 20th Quadrennial Ozone Symposium*, KOS, Greece
- A. Bracher, K.-U. Eichmann, C. von Savigny, M. Weber, K. Bramstedt, J. P. Burrows; Ozone distributions in the Arctic winter/spring 2002/2003 as measured by the ENVISAT instruments GOMOS, MIPAS and SCIAMACHY. In: *Proceedings of the 2004 Envisat & ERS Symposium*, Salzburg, Österreich, 2004: eingereicht
- A. Bracher, M. Sinnhuber, A. Rozanov, J. P. Burrows; Photochemical models used for the validation of NO₂ satellite measurements at different solar zenith angles. Vortrag: 1st EGU General Assembly 2004, Nizza, Frankreich, 2004
- A. Bracher, H. Bovensmann, B. Funke, N. Glathor, M. Milz, A. Rozanov, C. v. Savigny, J.P. Burrows; Cross validation of scientific ozone und NO₂ data products from the ENVISAT satellite sensors MIPAS and SCIAMACHY. Vortrag: AMIL2DA Abschlusstreffen, 26. Juni 2003, IMK-FZK, Karlsruhe, 2003
- A. Bracher, A. Rozanov, C. von Savigny, M. Weber, M. von Koenig, K. Bramstedt, J. P. Burrows; First validation of SCIAMACHY O₃ and NO₂ profiles with collocated measurements from satellite sensors HALOE, SAGE II and POAM III. Posterpräsentation beim EGS-AGU-EUG Joint Assembly, 5-9 April 2003, Nizza, Frankreich, 2003

- A. Bracher, M. Weber, M. von Koenig, K. Bramstedt, J. P. Burrows; First validation of MIPAS O₃, H₂O, and NO₂ profiles with collocated measurements from satellite sensors HALOE and SAGE II. Posterpräsentation beim EGS-AGU-EUG Joint Assembly, 5-9 April 2003, Nizza, Frankreich, 2003
- A. Bracher, M. Weber, M. von Koenig, A. Rozanov, C. von Savigny, K. Bramstedt, J. P. Burrows; Validation of ENVISAT trace gas data products by comparison with GOME/ERS-2 and other satellite sensors. ACVT-MASI (Atmospheric Chemistry Validation Team Model Assimilation and Satellite Intercomparison) Delta Report to ESA. Internal Technical Report, Juli 2003, ESA ESRIN, Frascati, Italien, 2003
- A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt und J. P. Burrows; Global measurements of ozone by GOME: Validation with SAGE II considering dynamical aspects. Posterpräsentation beim *General Assembly of the European Geophysical Society*, Nizza, Frankreich, April 2002
- A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt und J. P. Burrows; Global measurements of ozone profiles by the satellite instruments Global Ozone Monitoring Experiment and Stratospheric Aerosol and Gas Experiment II: Intercomparisons considering dynamical aspects. Posterpräsentation auf der *66. Physikertagung der DPG*, Leipzig, 18.–22. März 2002
- A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt, A. Richter, A. Rozanov, C. v. Savigny, M. v. König and J. P. Burrows; Validation of Envisat trace gas data products by comparison with GOME/ERS-2 and other satellite sensors. *Proceedings of the Envisat Validation Workshop (SP-531)*, ESA Publications Division, 9.–13. Dezember 2002
- K. Bramstedt, J. Gleason, A. Bracher, M. Weber, D. Loyola und J. P. Burrows; Validation of four total ozone values from the satellite instruments GOME and EP-TOMS with measurements from the Dobson network 1996–2000. Posterpräsentation beim *General Assembly of the European Geophysical Society*, Nizza, Frankreich, April 2002
- J. Burkert, B.-M. Sinnhuber, N. Sheode, P. Wang, H. Bremer, A. Kleinböhl, A. Rozanov, F. Stroh, J. P. Burrows; Process studies of the day-night-variation and twilight chemistry of halogen oxides in the lower and middle stratosphere. SPARC 2004, 1-6 August 2004, Victoria, Kanada, 2004
- E. J. Brinksma, A. Pitters, I. S. Boyd, A. Parrish, A. Bracher, C. von Savigny, K. Bramstedt, G. Taha, E. Hilsenrath, T. Blumenstock, G. Kopp, Y. J. Meijer, D. P. J. Swart, G. E. Bodeker, I. S. McDermid, T. Leblanc; SCIAMACHY Ozone Profile Validation. In: ESA-ACVE (Hrsg.) *Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2, SP-562)* 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 124-134, 2004
- C. Camy-Peyret, S. Payan, G. Dufour, H. Oelhaf, G. Wetzell, G. Stiller, T. Blumenstock, C. Blom, A. Engel, M. Pirre, G. Moreau, V. Catoire, A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt; Validation of MIPAS CH₄ profiles by stratospheric balloon, aircraft, satellite and ground based measurements. In: Danesy D. (ed.), *Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)*, 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 257-262, 2004

- E. Hilsenrath, B. Bojkov, G. Labow, A. Bracher, M. Weber; SCIAMACHY Column Ozone Validation. In: ESA-ACVE (Hrsg.) Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2, SP-562) 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 47-50, 2004
- B. J. Kerridge, F. Goutail, A. Bazureau, D.-Y. Wang, A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt, R. Siddans, B. G. Latter, W. J. Reburn, V. L. Jay, A. Dethof, V. H. Payne; MIPAS Ozone Assimilation. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 170-179, 2004
- J.-C. Lambert, J. Granville, T. Blumenstock, F. Boersma, A. Bracher, M. De Maziere, P. Demoulin, I. De Smedt, H. Eskes, M. Gil, F. Goutail, F. Hendrick, D. V. Ionov, P. V. Johnston, I. Kostadinov, K. Kreher, E. Kyrö, R. Martin, A. Meier, M. Navarro Comas, A. Petritoli, J.-P. Pommereau, A. Richter, H. K. Roscoe, C. Sioris, R. Sussmann, M. Van Roozendael, T. Wagner, S. Wood; Geophysical validation of SCIAMACHY NO₂ vertical columns: overview of early 2004 results. In: Danesy D. (Hrsg.) Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2) 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 59-71, 2004
- M. Milz, A. Bracher, C. v. Savigny, A. Rozanov, B. Funke, N. Glatthor, S. Gil, H. Bovensmann and G. Schwarz; Inter-Envisat comparison MIPAS-SCIAMACHY. In: Deliverable 71 of EU project „Advanced MIPAS level 2 data analysis (AMIL2DA)“ (project no. EV61-CT-1999-00015), 2003
- M. Milz, A. Bracher, C. v. Savigny, A. Rozanov, B. Funke, N. Glatthor, S. Gil, H. Bovensmann and G. Schwarz; Comparison to SCIAMACHY data, WP 5620. In: Final Report of EU project „Advanced MIPAS level 2 data analysis (AMIL2DA)“ (project no. EV61-CT-1999-00015), 2003
- S. Noël, J. Skupin, M. W. Wuttke, H. Bovensmann, M. Buchwitz und J. P. Burrows; SCIAMACHY – First instrument performance monitoring. Vortrag auf dem *Envisat Validation Workshop*, ESRIN, Frascati, Italien, 9.–13. Dezember 2002
- S. Noël, M. W. Wuttke, J. Skupin, H. Bovensmann, J. P. Burrows, M. Gottwald and E. Krieg; The SCIAMACHY Instrument on ENVISAT: First Performance Monitoring Results. *IGARSS*, 2003
- J.-B. Renard, G. Gwenaël Berthet, A. Bracher, V. Catoire, M. Chartier, B. Gaubicher, F. Goutail, N. Huret-Brun, H. Oelhaf, J. Ovarlez, J.-P. Pommereau, C. Robert; Validation of GOMOS vertical profiles using balloon-borne instruments and satellite data. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 435-441, 2004
- A. Rozanov, C. von Savigny, H. Bovensmann, A. Bracher, J. P. Burrows; Description of the SCIAMACHY scientific O₃ and NO₂ profile data set for September / October 2002.

- Report within Deliverable 1.3 (Non-operational MIPAS and SCIAMACHY Profiles) of EU-Project Towards the Prediction of Stratospheric Ozone III (TOPOZ III), 2003
- C. von Savigny, A. Bracher, K. Bramstedt, A. Rozanov, M. Sinnhuber, C. Sioris, A. Butz, M. Dorf, K. Pfeilsticker, K. Grunow, F. Goutail, J.-P. Pommereau, N. Hurrett; SCIAMACHY limb NO₂ profile validation. In: Danesy D. (Hrsg.) Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2, SP-562) 3-7 May 2004, ESA ESRI, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 135-142, 2004
 - J. Skupin, M. W. Wuttke, S. Noël, M. Buchwitz, C. v. Savigny, A. Schlesier, J. Meyer, L. K. Amekudzi, H. Bovensmann, J. P. Burrows, B. Ahlers und J. Frerick; SCIAMACHY Spectral Performance, Vortrag auf dem *Envisat Calibration Review*, ESTEC, Noordwijk, Niederlande, 9.–13. September 2002
 - J. Skupin, S. Noël, M. W. Wuttke, H. Bovensmann, J. P. Burrows, R. Hoogeveen, Q. Kleipool und G. Lichtenberg; In-flight calibration of the SCIAMACHY solar irradiance spectrum. Posterpräsentation auf der COSPAR 2002, Houston, USA, 10.–19. Oktober 2002
 - J. Skupin, S. Noël, M. W. Wuttke, H. Bovensmann and J. P. Burrows; Calibration of SCIAMACHY in-flight measured irradiances and radiances – first results of level 1 validation (CASIMIR, Envisat AOID 406). *Proceedings of the Envisat Validation Workshop (SP-531)*, ESA Publications Division, 2003
 - J. Skupin, S. Noël, M. W. Wuttke, H. Bovensmann, J. P. Burrows, R. Hoogeveen, Q. Kleipool und G. Lichtenberg; In-flight calibration and validation of the SCIAMACHY solar irradiance spectrum: results from the first year of operation in orbit. Posterpräsentation beim EGS-AGU-EUG Joint Assembly, Nizza, Frankreich, April, 2003
 - J. Skupin, K. Gerilowski, S. Noël, M. W. Wuttke, H. Bovensmann and J. P. Burrows; Improvement of the SCIAMACHY radiometric calibration and its validation on solar irradiances in the spectral range from 240 to 2380 nm. *Proceedings of the ENVISAT & ERS Symposium (SP-572)*, ESA Publications Division, 2004
 - J. Skupin, S. Noël, M. W. Wuttke, M. Gottwald, H. Bovensmann, M. Weber, and J. P. Burrows; SCIAMACHY Solar Irradiance Observation in the Spectral Range from 240 to 2380 nm. Posterpräsentation beim 1st EGU General Assembly 2004, Nizza, Frankreich, 2004
 - J. Skupin, S. Noël, M. W. Wuttke, M. Gottwald, H. Bovensmann, M. Weber, J. B. Burrows; SCIAMACHY Solar Irradiance Observation in the Spectral Range from 240 to 2380 nm. Posterpräsentation beim Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), Frascati, Italien, 3–7 May 2004
 - J. Skupin, M. Weber, H. Bovensmann and J. P. Burrows; The Mg II solar activity proxy indicator derived from GOME and SCIAMACHY. *Proceedings of the ENVISAT & ERS Symposium (SP-572)*, ESA Publications Division, 2004
 - M. Weber, A. Bracher, S. Noël, J. Skupin and J. P. Burrows; Validation of SCIAMACHY in-flight measured irradiances, radiances and selected Envisat tracegas products by comparison with measurements from independent satellite instruments. In: ESA-ACVE

(Hrsg.) Pre-launch Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE) 16-18 May 2001, WPP 186, 155-159, 2001

9.3 Teilnahme an Veranstaltungen

Neben den fünf Treffen des GSVT in Heidelberg und Bremen (am 12.09.2001, 04.03.2002, 07./08.07.2003, 25.11.2003, 07.12.2004) erfolgte zur Präsentation der Arbeiten in den Projekten und für die Koordination von allgemeinen Validierungsaufgaben die Teilnahme an folgenden Veranstaltungen:

- Treffen der Atmospheric Chemistry Validation Team- Model Assimilation und Satellite Intercomparison Subgroup (ACVT-MASI), 27.–28. Feb. 2001, ESTEC, Noordwijk , NL
- Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE) Prelaunch Workshop, 16.–18. Mai 2001, ESTEC, Noordwijk , NL
- Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE) 2nd Rehearsal Review, 17.–18. Juli 2001, ESA/ESRIN, Frascati, Italien
- ACVT-MASI Readiness Review Meeting, 25.–26. Feb. 2002, ESA/ESRIN, Frascati, Italien
- Physikertagung der DPG Tagung, 18. März 2002, Leipzig
- General Assembly of the European Geophysical Society, 22.–26. April 2002, Nizza, Frankreich
- COSPAR, Houston, USA, 10.–19. Oktober 2002
- ENVISAT Calibration Review, 09.–13. Sep. 2002, ESTEC, Noordwijk , NL
- ENVISAT Validation Workshop, 09.–13. Dez. 2002, ESA/ESRIN, Frascati, Italien
- EGS-AGU-EGU Joint Assembly, 06.–12. April 2003, Nizza, Frankreich
- AMIL2DA Final Meeting, IMK FZK, 23./24. Juni 2003, Karlsruhe
- SCIAMACHY Verification Workshop, 17./18. Dez. 2003
- 1st EGU General Assembly 2004, 26.–30.04.2004, Nizza, Frankreich
- Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 03.–07.05.2004, ESA/ESRIN, Frascati, Italien
- 20th Quadrennial Ozone Symposium, 01.–08.06.2004, KOS, Griechenland
- 35th COSPAR Scientific Assembly, 19.–23.07.2004, Paris, Frankreich
- Envisat & ERS Symposium, 06.–10.09.2004, Salzburg, Österreich
- SCIAMACHY Validation Workshop, 06.–08.12.2004, Bremen

10 Akronyme und Abkürzungen

ABS_IRR	SCIAMACHY radiometric irradiance calibration
ABS_RAD	SCIAMACHY radiometric radiance calibration
ACVE	Atmospheric Chemistry Validation of Envisat
ACVT	Atmospheric Chemistry Validation Team
ADS	Annotation Data Set (time stamped processing data)
AMIL2DA	Advanced MIPAS level 2 data analysis
ASM	Azimuth Scan Mirror
BRDF	Bidirectional Reflectance Distribution Function
CalDP	Calibration / Data Processor
CASIMIR	CALibration of Sciamachy In-flight Measured Irradiances and Radiances
CFI	Customer Furnished Items
DAAC	Distributed Active Archive Center (NASA)
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
EGS	European Geophysical Society
ENVISAT	ENVIronmental SATellite
ERS	European Remote sensing Satellite
ESA	European Space Agency
ESM	Elevation Scan Mirror
ESRIN	European Space Research Institute (Frascati, I)
ESTEC	European Space Research and Technology Centre (Noordwijk, NL)
GADS	Global Annotation Data Set (not time stamped)
GOME	Global Ozone Monitoring Experiment
GSVT	German SCIAMACHY Validation Team
HALOE	HALogen Occultation Experiment
HDF	Hierarchical Data Format
IDL	Interactive Data Language
IECF	Instrument Engineering Calibration Facility (database for SCIAMACHY in-flight calibration data)
IFE	Institut für Fernerkundung
IR	infra-red
IUP	Institut für Umweltphysik
MASI	Model Assimilation & Satellite Intercomparison
NILU	Norsk Institutt for Luftforskning (Norwegian Institute for Air Research)
NIR	Near Infra-Red
NRT	Near Real Time
ODIN	Satellite for astronomy and atmospheric research of the Swedish Space Cooperation
OL	Off-line
OPTEC	SCIAMACHY thermal vacuum calibration set-up at Fokker Space
OSIRIS	Optical Spectrograph and InfraRed Imager System

PDS	(Envisat) Payload Data Segment
PMD	Polarisation Measurement Device
PPG	Pixel to Pixel Gain
PV	Potentielle Wirbelstärke (potential vorticity)
SABER	Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry
SAGE	Stratospheric Aerosol and Gas Experiment
SatVal	Validation of Envisat Trace Gas Data Products by Comparison with GOME/ERS-2 and other Satellite Sensors
SBUV	Solar Backscatter UltraViolet Instrument
SCIAMACHY	SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography
SCIAVALIG	SCIAMACHY Validation and Interpretation Group
SCVT	SCIAMACHY Calibration and Verification Team
SLS	Spectral Light Source
SMR	Sun Mean Reference
SODAP	Switch-On and Data Acquisition Phase
SOLSPEC	Solar Spectrum Instrument
SOLSTICE	Solar/Stellar Irradiance Comparison Experiment
SOST	SCIAMACHY Operations Support Team
SPVCP	SCIAMACHY Processors Calibration and Verification Plan
SRC	SCIAMACHY Radiant Cooler
SRON	Space Research Organisation of the Netherlands
SSAG	SCIAMACHY Science Advisory Group
SUSIM	Solar Ultraviolet Spectral Irradiance Monitor
SZA	Sonnenzenitwinkel
TN	Technical Note
TOMS	Total Ozone Mapping Spectrometer
TPD	TNO Institute of Applied Physics (TNO-TPD, NL)
UARS	Upper Atmosphere Research Satellite
UV	Ultra-Violet
VIS	Visible
WLS	White Light Source

11 Literatur

11.1 Literatur zu Teilprojekt 1

- [Acarreta und Stammes 2003] ACARRETA, J. R. ; STAMMES, P.: Verification of SCIAMACHY's Reflectance over the Sahara. In: SAWAYA-LACOSTE, H. (Hrsg.): *Proceedings of the Envisat Validation Workshop (SP-531)*, ESA Publications Division, 2003
- [Bovensmann u. a. 2002] BOVENSMANN, H. ; AHLERS, B. ; BUCHWITZ, M. ; FRERICK, J. ; GOTTWALD, M. ; HOOGEVEEN, R. ; KAISER, J. ; KLEIPOOL, Q. ; KRIEG, E. ; LICHTENBERG, G. ; MAGER, R. ; MEYER, J. ; NOËL, S. ; SCHLESIER, A. ; SIORIS, C. ; SKUPIN, J. ; SAVIGNY, C. v. ; WUTTKE, M. W. ; BURROWS, J. P.: SCIAMACHY In-Flight Instrument Performance. In: SAWAYA-LACOSTE, H. (Hrsg.): *Proceedings of the Envisat Calibration Review (SP-520)*, ESA Publications Division, 2002, S. 1–21. – distributed on CD, filename of article: sciamachy/scia_02.pdf
- [Chu und Mauldin 1999] CHU, William P. ; MAULDIN, Lemuel E.: Overview of the SAGE III experiment. In: LARAR, Allen M. (Hrsg.): *Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research III* Bd. 3756, 1999, S. 102–109
- [DeLand und Cebula 2001] DELAND, M. T. ; CEBULA, R. P.: Spectral solar UV irradiance data for cycle 21. In: *J. Geophys. Res.* 106 (2001), Nr. A10, S. 21569–21583
- [ENV-ATB-DLR-SCIA-0041 2000] SLIJKHUIS, S.: *ENVISAT-1 SCIAMACHY Level 0 to 1c Processing Algorithm Theoretical Basis Document (ENV-ATB-DLR-SCIA-0041)*. 2. DLR: , 2000
- [Floyd u. a. 2003] FLOYD, L. E. ; COOK, J. W. ; HERRING, L.C. ; CRANE, P. C.: SUSIM'S 11-Year Observational Record of the Solar UV Irradiance. In: *Adv. Space Res.* 31 (2003), S. 2111–2120
- [Fontenla u. a. 1999] FONTENLA, J. ; WHITE, O. R. ; FOX, P. A. ; AVRETT, E. H. ; KURUCZ, R. L.: Calculation of solar irradiances. I. Synthesis of the solar spectrum. In: *The Astrophysical Journal* 518 (1999), S. 480–499
- [Grundy und Schmitt 1998] GRUNDY, W. M. ; SCHMITT, B.: The temperature-dependent near-infrared absorption spectrum of hexagonal H₂O ice. In: *J. Geophys. Res.* 103 (1998), Nr. 25, S. 809–822
- [Hoogen u. a. 1998] HOOGEN, R. ; ROZANOV, V. V. ; BRAMSTEDT, K. ; EICHMANN, K.-U. ; WEBER, M. ; BURROWS, J. P.: Validation of ozone profiles from GOME satellite data. In: *Proc. of Satellite Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere III*. Barcelona, 1998, S. 367–378
- [Kurucz 1995] KURUCZ, R. L.: The solar spectrum: atlases and line identifications. In: SAUVAL, A. J. (Hrsg.) ; BLOMME, R. (Hrsg.) ; GREVESSE, N. (Hrsg.): *Laboratory and Astronomical High Resolution Spectra* Bd. 81, 1995, S. 17–31

- [Kurucz 1997] KURUCZ, R. L.: *The Solar Irradiance by Computation*. <http://cfaku5.harvard.edu/sun/IRRADIANCE/solarirr.tab>. 1997
- [Murtagh u. a. 2002] MURTAGH, D. ; FRISK, U. ; MERINO, F. ; RIDAL, M. ; JONSSON, A. ; STEGMAN, J. ; WITT, G. ; ERIKSSON, P. ; JIMÉNEZ, C. ; MEGIE, G. ; NOË, J. de la ; RICAUD, P. ; BARON, P. ; PARDO, J. R. ; HAUCHCORNE, A. ; LEWELLYN, E. J. ; DEGENSTEIN, D. A. ; GATTINGER, R. L. ; LLOYD, N. D. ; EVANS, W. F. J. ; MCDADE, I. C. ; HALEY, C. S. ; SIORIS, C. ; SAVIGNY, C. von ; SOLHEIM, B. H. ; MCCONNELL, J. C. ; STRONG, K. ; RICHARDSON, E. H. ; LEPPELMEIER, G. W. ; KYRÖLÄ, E. ; AUVINEN, H. ; OIKARINEN, L.: An overview of the Odin atmospheric mission. In: *Can J. Phys.* 80 (2002), April, Nr. 4, S. 309–319
- [Noël 2004] NOËL, S.: Determination of Correction Factors for SCIAMACHY Radiances and Irradiances / IUP Bremen. 2004. – Doc.Nr.: IFE-SCIA-SN-20040712_IrrRadCorrection
- [Noël u. a. 2004] NOËL, S. ; BOVENSMANN, H. ; SKUPIN, J. ; WUTTKE, M. W. ; BURROWS, J. P. ; GOTTWALD, M. ; KRIEG, E.: SCIAMACHY Long-Term Monitoring Results. In: *Proceedings of the ENVISAT & ERS Symposium (SP-572)*, ESA Publications Division, 2004
- [Rottman und Woods 1994] ROTTMAN, G. J. ; WOODS, T. N.: The UARS SOLSTICE. In: *SPIE* 2266 (1994), S. 317–327
- [RP-SCIA-1000TP/266 2000] AHLERS, B.: *OPTEC5: Wavelength calibration of the SCIAMACHY PFM*. 2000-12-04. TNO TPD: , 2000
- [Skupin u. a. 2004a] SKUPIN, J. ; GERIŁOWSKI, K. ; NOËL, S. ; WUTTKE, M. W. ; BOVENSMANN, H. ; BURROWS, J. P.: Improvement of the SCIAMACHY radiometric calibration and its validation on solar irradiances in the spectral range from 240 to 2380 nm. In: *Proceedings of the ENVISAT & ERS Symposium (SP-572)*, ESA Publications Division, 2004
- [Skupin u. a. 2003] SKUPIN, J. ; NOËL, S. ; WUTTKE, M. W. ; BOVENSMANN, H. ; BURROWS, J. P. ; HOOGVEEN, R. ; KLEIPOOL, Q. ; LICHTENBERG, G.: In-flight calibration of the SCIAMACHY solar irradiance spectrum. In: *Adv. Space Res.* 32 (2003), Nr. 11, S. 2129–2134
- [Skupin u. a. 2005] SKUPIN, J. ; NOËL, S. ; WUTTKE, M. W. ; GOTTWALD, M. ; BOVENSMANN, H. ; WEBER, M. ; BURROWS, J. P.: SCIAMACHY Solar Irradiance Observation in the Spectral Range from 240 to 2380 nm. In: *Adv. Space Res.* (2005). – in print
- [Skupin u. a. 2004b] SKUPIN, J. ; WEBER, M. ; BOVENSMANN, H. ; BURROWS, J. P.: The Mg II solar activity proxy indicator derived from GOME and SCIAMACHY. In: *Proceedings of the ENVISAT & ERS Symposium (SP-572)*, ESA Publications Division, 2004
- [Skupin 2003a] SKUPIN, Jochen: Fitting SLS line positions / IUP Bremen. 2003. – Doc.Nr.: IFE-SCIA-JS-20030213_SLS_linefit
- [Skupin 2003b] SKUPIN, Jochen: Possibility of a light leak in channel 7 of SCIAMACHY / IUP Bremen. 2003. – Doc.Nr.: IFE-SCIA-JS-20030430_LightLeakCh7

- [Skupin 2003c] SKUPIN, Jochen: Radiometric calibration of SCIAMACHY solar spectra measured in different viewing geometries / IUP Bremen. 2003. – Doc.Nr.: IFE-SCIA-JS-20031001_CalibrationOfSolarSpectra
- [Skupin 2004] SKUPIN, Jochen: How to calculate phase shift corrected greek keydata (Revision of IFE-TN-211299) / IUP Bremen. 2004. – Doc.Nr.: IFE-SCIA-JS-20041117_CalcGreekKeydata
- [Thuillier u. a. 2003] THUILLIER, G. ; HERSÉ, M. ; LABS, D. ; FOUJOLS, T. ; PEETERMANS, W. ; GILLOTAY, D. ; SIMON, P. C. ; MANDEL, H.: The solar spectral irradiance from 200 to 2400 nm as measured by the SOLSPEC spectrometer from the ATLAS and EURECA missions. In: *Sol. Phys.* 214 (2003), Nr. 1, S. 1–22
- [Wolfram 1994] WOLFRAM, S.: *Mathematica - Ein System für Mathematik auf dem Computer*. Addison-Wesley Verlag GmbH, 1994

11.2 Literatur zu Teilprojekt 2

- L. K. Amekudzi, A. Bracher, J. Meyer, A. Rozanov, H. Bovensmann, J. P. Burrows (2005) Lunar occultation with SCIAMACHY: First retrieval results. *Advances in Space Research*: Im Druck
- T. Blumenstock, et al. (2004) Comparisons of MIPAS O₃ profiles with groundbased measurements. In: Danesy D. (ed.), *Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)*, 3-7 May 2004, ESA ESRIIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 157-163
- A. Bracher, M. Sinnhuber, A. Rozanov, J. P. Burrows (2005a) NO₂ Modelling used for the comparison of NO₂ satellite measurements at different solar zenith angles. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion 5*: 393-408
- A. Bracher, M. Sinnhuber, A. Rozanov, J. P. Burrows (2005b) NO₂ Modelling used for the comparison of NO₂ satellite measurements at different solar zenith angles. *Atmospheric Chemistry and Physics 5*: 393-408
- A. Bracher, H. Bovensmann, K. Bramstedt, J. P. Burrows, T. von Clarmann, K.-U. Eichmann, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, M. Kaufmann, S. Kellmann, M. Kiefer, M. E. Koukouli, A. Linden, M. López-Puertas, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, S. Noël, G. Rohen, A. Rozanov, V.V. Rozanov, C. von Savigny, J. Skupin, M. Sinnhuber, T. Steck, G. P. Stiller, D.-Y. Wang, M. Weber, M. W. Wuttke (2005c) Cross comparisons of O₃ and NO₂ profiles measured by the atmospheric ENVISAT instruments GOMOS, MIPAS, and SCIAMACHY. *Advances in Space Research*: Im Druck
- A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt, S. Tellmann, J. P. Burrows (2004a) Long-term global measurements of ozone profiles by GOME validated with SAGE II considering atmospheric dynamics. *Journal of Geophysical Research* 109: d20308, doi:10.1029/2004JD004677

- A. Bracher, K. Bramstedt, A. Richter, M. Sinnhuber, M. Weber, J. P. Burrows (2004b) Validation of GOMOS (GOPR 6.0a) and SCIAMACHY (v5.1/2.1) O₃ and NO₂ products with GOME (v3.0), HALOE (v19) and SAGE II (6.2). In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 397-405
- A. Bracher, K.-U. Eichmann, C. von Savigny, M. Weber, J. P. Burrows (2004c) Ozone distributions in the Arctic winter 2003 measured by the ENVISAT instruments GOMOS, MIPAS and SCIAMACHY, in: Proceedings of the 20th Quadrennial Ozone Symposium, KOS, Griechenland
- A. Bracher, K.-U. Eichmann, C. von Savigny, M. Weber, K. Bramstedt, J. P. Burrows (2004d) Ozone distributions in the Arctic winter/spring 2002/2003 as measured by the ENVISAT instruments GOMOS, MIPAS and SCIAMACHY, in: Proceedings of the 2004 Envisat & ERS Symposium, Salzburg, Österreich, eingereicht
- A. Bracher, M. Weber, M. von Koenig, A. Rozanov, C. von Savigny, K. Bramstedt, J. P. Burrows (2003a) ACVT-MASI (Atmospheric Chemistry Validation Team Model Assimilation and Satellite Intercomparison) Report until June 2003 on ENVISAT validation since validation workshop: Validation of ENVISAT trace gas data products by comparison with GOME/ERS-2 and other satellite sensors. Delta Report to ESA. Internal Technical Report, Juli 2003, ESA ESRIN, Frascati, Italien
- A. Bracher, A. Rozanov, C. von Savigny, M. Weber, M. von Koenig, K. Bramstedt, J. P. Burrows (2003b) First validation of SCIAMACHY O₃ and NO₂ profiles with collocated measurements from satellite sensors HALOE, SAGE II and POAM III, Posterpräsentation beim EGS-AGU-EUG Joint Assembly, 5-9 April 2003, Nizza, Frankreich
- A. Bracher, M. Weber, K. Bramstedt, A. Richter, A. Rozanov, C. von Savigny, M. von König, J.P. Burrows (2002) Validation of ENVISAT trace gas data products by comparison with GOME/ERS-2 and other satellite sensors, in: Sawaya-Lacoste (Hrsg.) Proceedings of the Envisat Validation Workshop, ESA Publication Division, Noordwijk, Niederlande, SP-531
- K. Bramstedt, J. Gleason, D. Loyola, W. Thomas, A. Bracher, M. Weber, J. P. Burrows (2003) Comparison of total ozone from the satellite instruments GOME and TOMS with measurements from the Dobson network 1996-2000. Atmospheric Chemistry and Physics 3: 1409-1419
- K. Bramstedt, K.-U. Eichmann, M. Weber, V. Rozanov, J. P. Burrows, GOME ozone profiles: A global validation with HALOE measurements, Advances in Space Research 29: 1637-42, 2002
- E. J. Brinksma, A. Piters, I. S. Boyd, A. Parrish, A. Bracher, C. von Savigny, K. Bramstedt, M. Sinnhuber, G. Taha, E. Hilsenrath, T. Blumenstock, G. Kopp, Y. J. Meijer, D. P. J. Swart, G. E. Bodeker, I.S. McDermid, T. Leblanc (2004) SCIAMACHY Ozone Profile Validation. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 124-134
- C. Brühl, S. R. Drayson, J. M. Russell III, P. J. Crutzen, J. M. McInerney, P. N. Purcell, H. Claude, H. Gernandt, T. J. McGee, I. S. McDermid, M. R. Gunson (1996) Halogen Occultation Experiment Ozone Channel Validation, J. Geophys. Res. 101: 10217-10240

- D. M. Cunnold, W. P. Chu, R. A. Barnes, M. P. McCormick, R. E. Veiga (1989) Validation of SAGE II Ozone Measurements, *J. Geophys. Res.* 94: 8447-8460
- H. Elbern, F. Baier, M. Bittner, R. Bochorishvili, H. Bovensmann, L. Hoffmann, W. Joppich, J. Meyer, M. Riese, J. Schwingerl, G. Stiller, T. von Clarmann (2005) SACADA, a new chemical data assimilation system for earth observation. Endbericht im AFO 2000-Projekt Synoptical analysis of chemical constituents by advanced satellite data assimilation (SACADA)
- H. J. Eskes, A. Dethof (2004) SCIAMACHY Ozone Column Validation with Model and Assimilation. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 51-58
- L. L. Gordley, et al. (1996) Validation of nitric oxide and nitrogen dioxide measurements made by the Halogen Occultation Experiment for UARS platform. *J. Geophys. Res.* 101: 10241-10266
- E. Hilsenrath, B. Bojkov, G. Labow, A. Bracher (2004) SCIAMACHY Column Ozone Validation. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 47-50
- J.-C. Lambert, J. Granville, T. Blumenstock, F. Boersma, A. Bracher, M. De Maziere, P. Demoulin, I. De Smedt, H. Eskes, M. Gil, F. Goutail, F. Hendrick, D. V. Ionov, P. V. Johnston, I. Kostadinov, K. Kreher, E. Kyrö, R. Martin, A. Meier, M. Navarro Comas, A. Petritoli, J.-P. Pommereau, A. Richter, H. K. Roscoe, C. Sioris, R. Sussmann, M. Van Roozendaal, T. Wagner, S. Wood (2004a) Geophysical validation of SCIAMACHY NO₂ vertical columns: overview of early 2004 results. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 59-71
- J.-C. Lambert, et al. (2004b) First ground-based validation of SCIAMACHY v5.01 ozone column. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 39-46
- J. Meyer, A. Bracher, A. Rozanov, A. Schlesier, H. Bovensmann, J. P. Burrows (2005) Solar occultation with SCIAMACHY: Algorithm description and first validation. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion* 5: 17-66
- M. Milz, A. Bracher, C. v. Savigny, A. Rozanov, B. Funke, N. Glatthor, S. Gil, H. Bovensmann, G. Schwarz, WP 5620: Comparison to SCIAMACHY data, Final Report of EU project Advanced MIPAS level 2 data analysis (AMIL2DA) (project no. EV61-CT-1999-00015), 2003.
- M. Newchurch, M. Ayoub (2004) Comparison of the SAGE II v6.0 measurements of NO₂ with ATMOS 3.1 and HALOE v19, http://vortex.nsstc.uah.edu/atmchem/strat_no2/stra_no2.html
- A. Rozanov, H. Bovensmann, A. Bracher, S. Hrechanyy, V. Rozanov, M. Sinnhuber, F. Stroh, J. P. Burrows (2005) NO₂ and BrO vertical profile retrieval from SCIAMACHY limb measurements: sensitivity studies. *Advances in Space research*: im Druck

A. Rozanov, C. von Savigny, H. Bovensmann, A. Bracher, J. P. Burrows (2003) Description of the SCIAMACHY scientific O₃ and NO₂ profile data set for September / October 2002. Report within Deliverable 1.3 (Non-operational MIPAS and SCIAMACHY Profiles) of EU-Project Towards the Prediction of Stratospheric Ozone III (TOPOZ III)

Sander et al., Chemical Kinetics and photochemical data for use in atmospheric studies, JPL publication, 02-25, 2003

F.K. Tetteh, Intercomparison of ozone profiles measured by SCIAMACHY, MIPAS and GOMOS, Masterarbeit am Institut für Umweltphysik, Universität Bremen, Bremen, 2003

B. Theodore et al. (2004a) Validation of GOMOS ozone measurements using data assimilation. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 451-453

C. von Savigny, A. Bracher, K. Bramstedt, A. Rozanov, M. Sinnhuber, C. Sioris, A. Butz, M. Dorf, K. Pfeilsticker, K. Grunow, F. Goutail, J.-P. Pommereau, N. Hurrett (2004) SCIAMACHY limb NO₂ profile validation. In: Danesy D. (ed.), Proceedings of the Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2), 3-7 May 2004, ESA ESRIN, Frascati, Italien, ESA Publications Division, Noordwijk, Niederlande, SP-562: 135-142

C. von Savigny, A. Rozanov, H. Bovensmann, K.-U. Eichmann, J.W. Kaiser, S. Noël, V.V. Rozanov, B.-M. Sinnhuber, M. Weber, J.P. Burrows (2005) The Ozone hole break-up in September 2002 as seen by SCIAMACHY on ENVISAT. *J. Atmosph. Sci.* 62(3): 721-734