

# Kapitel 3

## Optische Eigenschaften der Atmosphäre

In diesem Kapitel sollen die optischen Eigenschaften der in den Simulationen berücksichtigten atmosphärischen Inhaltsstoffe vorgestellt werden. Die vorgenommenen Parameterisierungen basieren zum Großteil auf Definitionen und Modellen, wie sie in den *Algorithm Theoretical Basis Documents (ATBD)* zur Beschreibung der von der ESA im Bodensegment verwendeten MERIS-Algorithmen festgehalten sind (*Antoine und Morel 2000, Montagner 2001*). Alle, bereits im Kapitel 2.1 eingeführten, grundlegenden Definitionen der inhärenten optischen Eigenschaften, wie Streu- und Absorptionskoeffizienten sowie Phasenfunktionen, gelten auch weiterhin für die Beschreibung der atmosphärischen Streuer und Absorber. Zusätzlich soll an dieser Stelle die optische Tiefe  $\tau$  als eine weitere inhärente optische Eigenschaft zur Beschreibung der atmosphärischen Extinktion eingeführt werden. Die dimensionslose optische Tiefe ist definiert durch das Integral des Extinktionskoeffizienten  $c$  vom Unterrand der Atmosphäre in der Höhe Null bis zum Oberrand der Atmosphäre (TOA) durch:

$$\tau(\lambda) \equiv \int_0^{z_{\text{TOA}}} c(z, \lambda) dz \quad .$$

Da sich die inhärenten optischen Eigenschaften additiv zusammensetzen lassen, ergibt sich die gesamt optische Tiefe  $\tau$  in Abhängigkeit der Wellenlänge durch:

$$\tau(\lambda) = \tau_r(\lambda) + \tau_a(\lambda) + \tau_{\text{O}_3}(\lambda) + \tau_{\text{gas}}(\lambda)$$

als Summe der Rayleigh-optischen Tiefe  $\tau_r$ , der aerosoloptischen Tiefe  $\tau_a$  sowie der optischen Tiefen des Ozons  $\tau_{\text{O}_3}$  und der durch andere Gase  $\tau_{\text{gas}}$ . Die Parameterisierungen der

einzelnen Extinktionen und ihr Einfluß auf die optischen Eigenschaften der Atmosphäre soll nun nachfolgend dargelegt werden.

### 3.1 Rayleigh-Streuung

Streuung an Partikeln, die deutlich kleiner sind als die Wellenlänge des einfallenden Lichts, lassen sich durch eine von *Rayleigh* (1871) entwickelte Streutheorie beschreiben; so auch die in der Luft enthaltenen Moleküle im sichtbaren Spektralbereich, deren mittlere Radiengröße etwa  $10^{-4} \mu\text{m}$  beträgt. In der Theorie werden die Partikel als kugelförmig und voneinander unbeeinflusst angenommen. Die auf die Moleküle einfallenden elektromagnetischen Primärwellen sind nach der Streutheorie von Rayleigh in der Lage in den Molekülen Dipolmomente zu induzieren, sodaß diese zu erzwungenen Schwingungen anregt als Hertz'sche Oszillatoren Sekundärwellen abstrahlen. Als ein Ergebnis der Theorie ist der Streukoeffizient umgekehrt proportional zur vierten Potenz der Wellenlänge. In dieser Arbeit wird die Rayleigh-optische Tiefe für eine Wellenlänge  $\lambda$  [ $\mu\text{m}$ ] bei einem Druck  $P$  [hPa] nach einem Ansatz von *Hansen und Travis* (1974) bestimmt durch:

$$\tau_r(\lambda, P) = \frac{P}{P_0} [(8,524 \cdot 10^{-3}) \lambda^{-4} + (9,63 \cdot 10^{-5}) \lambda^{-6} + (1,1 \cdot 10^{-7}) \lambda^{-8}], \quad (3.1)$$

mit  $P_0 = 1013,25$  hPa. Die vertikale Änderung der Extinktion durch Rayleigh-Streuung folgt dem Druckverlauf einer vorgegebenen *U.S.-Standard* Atmosphäre (*US-Government*, 1976). Wie die Volumenstreuungsfunktion von reinem Wasser, so ist auch die Streufunktion der Rayleigh-Atmosphäre symmetrisch bezüglich ihres Minimums bei einem Streuwinkel von  $\theta = 90^\circ$ . Mit einem Depolarisationsfaktor von  $\delta = 0,0279$  (*Young*, 1980), der die optische Anisotropie einiger Moleküle berücksichtigt, wird die Rayleigh-Volumenstreuungsfunktion in dieser Arbeit durch:

$$\tilde{\beta}_r(\theta) = \frac{3}{16\pi(1+2\gamma)} [(1+3\gamma) + (1-\gamma)\cos^2(\theta)]$$

mit:

$$\gamma = \frac{\delta}{2-\delta}$$

berechnet.

## 3.2 Streuung und Absorption an Aerosolen

Entgegen der geringen Schwankung der Rayleigh-optischen Tiefe, die sich als Funktion des Drucks gut berechnen lässt, sind die optischen Eigenschaften der Aerosole je nach Luftmassenherkunft, Zusammensetzung und Konzentration äußerst variabel. Ihre Berechnung erfolgt numerisch mit Hilfe der Mie-Theorie unter Vorgabe von Größenverteilungen sowie Angaben zum komplexen Brechungsindex (*Mie*, 1908). Im Vergleich zur  $\lambda^{-4}$ -Abhängigkeit der Rayleigh-Streuung ist der spektrale Verlauf der Extinktion durch Aerosole wesentlich flacher und zeigt typischerweise eine Abhängigkeit, die im Bereich zwischen  $\lambda^{-2}$  und  $\lambda^{-0,5}$  variiert. Die Größenverteilungen der Aerosole, deren Radien etwa fünf Größenordnungen von  $10^{-3}\mu\text{m}$  bis  $10\mu\text{m}$  umfassen, können durch eine, bzw. bei multimodal verteilten Aerosolgrößen, durch die Summe logarithmischer Normalverteilungen in der Form:

$$n(r) = \frac{dN(r)}{d(\log r)} = \sum_{i=1}^n \left[ \left( \frac{N_i}{\sqrt{2\pi \log \sigma}} \right) \exp \left( -\frac{(\log r - \log r_i)^2}{2 (\log \sigma)^2} \right) \right] \quad (3.2)$$

beschrieben werden, wobei  $N(r)$  die Zahl der Teilchen im Radienintervall von  $\log r$  bis  $\log r + d(\log r)$  und  $N_i$  die Gesamtteilchenzahl der  $i$ -ten Komponente angibt. Weitere Parameter zur Beschreibung der Form der Verteilung sind der Modalradius  $r_i$  und die Standardabweichung  $\sigma$ .

### 3.2.1 Verwendete Aerosolmodelle

Im Strahlungstransport dieser Arbeit werden drei Aerosolmodelle verwendet, die sich aus insgesamt sechs Komponenten zusammensetzen und auf Arbeiten von *Shettle und Fenn* (1979) und dem Report des *World Climate Project (WCP)* aus dem Jahr 1986 basieren (*WCP*, 1986). Auf Grundlage umfangreicher von verschiedenen Autoren durchgeführten Messungen werden in den genannten Arbeiten physikalische Eigenschaften wie Brechungsindizes und Größenverteilungen für eine Reihe von Aerosolkomponenten zusammengestellt. Mit ihnen werden diverse Standard-Aerosolmodelle definiert, deren optische Eigenschaften mit Hilfe der Mie-Theorie berechnet und im Strahlungstransport verwendet werden können. Eine Übersicht der in dieser Arbeit verwendeten Modelle, die sich in *Maritim*, *Kontinental* und *Stratosphärisch* unterteilen, sowie ihre Zusammensetzung und Verwendung im Strahlungstransport gibt die Tabelle 3.1.

Tabelle 3.1: Die in dieser Arbeit verwendeten Aerosolmodelle mit einer Aufgliederung der einzelnen Aerosolkomponenten und deren prozentuale Anteile am Gesamtvolumen bzw. an der Teilchenanzahl. Aufgrund von Rundungsfehlern weicht die Summe der Gesamtteilchenzahl des kontinentalen Modells leicht von 100% ab. <sup>1)</sup> *Shettle und Fenn* (1979) <sup>2)</sup> *WCP* (1986)

| Aerosolmodell                 | Komponente                     | Volumen [%] | Teilchenanzahl [%] | Berücksichtigung im Strahlungstransport |
|-------------------------------|--------------------------------|-------------|--------------------|---|
| Maritim <sup>1)</sup>         | Rural                          | 10          | 99                 | Grenzschicht<br>Höhe:<br>0-2 km         |
|                               | Oceanic                        | 90          | 1                  |   |
| Kontinental <sup>2)</sup>     | Water-soluble                  | 29          | 93,876             | Troposphäre<br>Höhe:<br>2-12 km         |
|                               | Dust-like                      | 70          | 0,0002             |   |
|                               | Soot                           | 1           | 6,1230             |   |
| Stratosphärisch <sup>2)</sup> | H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> | 100         | 100                | Stratosphäre<br>Höhe:<br>12-50 km       |

### Maritimes Aerosol

Das verwendete maritime Modell wurde nach *Shettle und Fenn* (1979) adaptiert und repräsentiert ein leicht kontinental beeinflusstes, maritimes Aerosol, das sich aus den beiden Komponenten *Oceanic* und *Rural* zusammensetzt. Mit der *Oceanic* Komponente werden die Seesalzpartikel beschrieben, die an der rauhen Wasseroberfläche durch Verdunstung von feinen, zerplatzenden Gischttröpfchen entstehen. Sie bilden hygroskopische Kondensationskerne, die in den untersten Schichten der marinen Atmosphäre in Abhängigkeit der relativen Feuchte unterschiedliche Größen annehmen. Nach Schätzungen platzen auf den Weltmeeren etwa  $\sim 10^{18} - 10^{20}$  Bläschen pro Sekunde, die etwa  $10^9$  Tonnen Seesalz pro Jahr in die Atmosphäre befördern (*Zimmermann*, 1991). Die Größenverteilung der *Oceanic* Komponente wird durch eine unimodale logarithmische Normalverteilung nach Gleichung 3.2 mit einer Standardabweichung von  $\sigma = 0,4$  parameterisiert. Mit Modalradien zwischen  $r_{i,70} = 0,20 \mu\text{m}$  und  $r_{i,99} = 0,75 \mu\text{m}$  für relative Luftfeuchten im Bereich von 70 – 99% stellen die Seesalze relativ große Partikel dar. Der kontinentale Einfluß wird im maritimen Aerosolmodell durch die *Rural* Komponente beschrieben. Wie in *Shettle und Fenn* (1979) definiert, setzt sie sich aus einer Mischung der Komponenten *Water-soluble* (70%) und *Dust-like* (30%) zusammen, die anders als die gleichnamigen Komponenten des kontinentalen Modells des WCP-Reports *WCP* (1986) in Abhängigkeit der relativen Feuchte parameterisiert werden können. Für das maritime Modell nach *Shettle*

Tabelle 3.2: Verwendete Aerosolkomponenten mit Angaben der Eingabeparameter für die Mie-Rechnungen zur Bestimmung der inhärenten optischen Eigenschaften der Aerosole. Die Angaben zum Real- und Imaginärteil des Brechungsindex beziehen sich auf eine Wellenlänge von 560 nm.

| Komponente    | rel. Feuchte [%]                      | Modalradius $r_i$ [ $\mu\text{m}$ ] | Standardabw. $\sigma$ | Realteil $m_r$ | Imaginärteil $m_i$   |
|---------------|---------------------------------------|-------------------------------------|-----------------------|----------------|----------------------|
| Rural         | 70                                    | 0,02846                             | 0,35                  | 1,501          | $5.63 \cdot 10^{-3}$ |
|               | 80                                    | 0,03274                             | 0,35                  | 1,443          | $3.70 \cdot 10^{-3}$ |
|               | 95                                    | 0,04238                             | 0,35                  | 1,384          | $1.71 \cdot 10^{-3}$ |
|               | 99                                    | 0,05215                             | 0,35                  | 1,360          | $9.16 \cdot 10^{-4}$ |
| Oceanic       | 70                                    | 0,2041                              | 0,40                  | 1,412          | $7.20 \cdot 10^{-9}$ |
|               | 80                                    | 0,3180                              | 0,40                  | 1,354          | $4.52 \cdot 10^{-9}$ |
|               | 95                                    | 0,4606                              | 0,40                  | 1,340          | $3.82 \cdot 10^{-9}$ |
|               | 99                                    | 0,7505                              | 0,40                  | 1,335          | $3.57 \cdot 10^{-9}$ |
| Water-soluble | <70                                   | 0,0050                              | 0,48                  | 1,530          | $6.00 \cdot 10^{-3}$ |
| Dust-like     | <70                                   | 0,5000                              | 0,48                  | 1,530          | $8.00 \cdot 10^{-3}$ |
| Soot          | <70                                   | 0,0118                              | 0,30                  | 1,750          | $4.39 \cdot 10^{-1}$ |
| H2SO4         | A=324, $\alpha=1$ , $\gamma=1$ , b=18 |                                     |                       | 1,430          | $1.06 \cdot 10^{-8}$ |

und Fenn (1979) wird jedoch davon ausgegangen, daß die großen, mineralischen Partikel ( $r_{i,99} = 1,18 \mu\text{m}$ ) der *Dust-like* Komponente beim Luftmassentransport über dem Ozean bereits aussedimentiert sind. Die Größenverteilung der *Rural* Komponente wird deshalb nur durch Parameter der *Water-soluble* Komponente bestimmt, die sehr kleine Partikel wie Sulfate, Ammoniumsalze aber auch organische Verbindungen kennzeichnet. Bei relativen Feuchten zwischen 70% und 99% betragen die Modalradien der *Water-soluble* Komponente  $r_{i,70} = 0,03 \mu\text{m}$  bzw.  $r_{i,99} = 0,05 \mu\text{m}$  mit einer Standardabweichung von  $\sigma = 0,35$ . Das auf diese Weise charakterisierte maritime Aerosol wird in den Simulationen nur in untersten Modellschichten bis zwei Kilometern Höhe gleichverteilt als Grenzschichtaerosol verwendet.

### Kontinentales Aerosol

Das kontinentale Aerosolmodell dieser Arbeit wird auf Basis des WCP-Reportes von 1986 WCP (1986) verwendet und enthält neben den bereits beschriebenen Komponenten *Water-soluble* und *Dust-like*, zusätzlich die Komponente *Soot*, die sich aus Rußpartikeln und Partikeln aus Verbrennungsrückständen zusammensetzt. Kennzeichen dieser kleinen ( $r_i = 0,0188 \mu\text{m}$ ) anthropogen kohlenstoffhaltigen Teilchen ist ihre hohe Absorption,

die durch einen großen Imaginärteil des komplexen Brechungsindex gekennzeichnet ist (s. Tabelle 3.2). Der Einfluß der Absorption zeigt sich auch auf die in Abbildung 3.1 dargestellte, berechnete spektrale Einzelstreueralbedo des kontinentalen Modells. Wie bereits erwähnt, beschreibt die *Dust-like* Komponente mineralischen Staub, wie er für Bodenarten der mittleren Breiten typisch ist und sollte daher nicht mit dem sogenannten *Desert Dust* Aerosol verwechselt werden. In Tabelle 3.2 finden sich die verwendeten Parameter zur Kennzeichnung der Größenverteilung des kontinentalen Modells, die sich aus der Summe dreier logarithmischer Normalverteilungen zusammensetzen läßt. Die Angaben der Aerosolparameter im WCP-Report beziehen sich auf relative Feuchten von weniger als 70% und wären daher zur Beschreibung der maritimen atmosphärischen Grenzschicht ungeeignet. In den Simulationen wird das kontinentale Aerosol gleichverteilt nur für die Modellschichten der freien Troposphäre verwendet, die sich von 2 bis 12 Kilometern erstrecken.

### Stratosphärisches Aerosol

Ebenfalls gleichverteilt wird für die Stratosphäre im Modell, zwischen 12 und 50 Kilometern Höhe, ein aus feinen Schwefelsäuretröpfchen bestehendes, nicht absorbierendes Hintergrundaerosol verwendet, dessen optische Tiefe im Gegensatz zur Grenzschicht und der Troposphäre konstant gehalten wird. Für die Zusammensetzung der Tröpfchen, dieses durch vulkanische Aktivitäten produzierten Aerosols, wird ein Verhältnis von 75% Schwefelsäure zu 25% Wasser angenommen. Die Größenverteilung dieses Aerosols wird durch eine modifizierte Gamma-Verteilung in der Form:

$$n(r) = A r^\alpha \exp(-b r^\gamma) \quad (3.3)$$

beschrieben, deren Koeffizienten  $A$ ,  $b$ ,  $\alpha$  und  $\gamma$  in der Tabelle 3.2 wiedergegeben sind.

### 3.2.2 Ergebnisse der Mie-Rechnungen

Mit Hilfe von Mie-Rechnungen werden die im Strahlungstransport benötigten Streu- und Absorptionskoeffizienten sowie die Phasenfunktionen der einzelnen Aerosolmodelle durch Integration der Größenverteilungen berechnet. Die hierzu benötigten Eingabeparameter zur Beschreibung der Größenverteilungen mit Angaben zum Brechungsindex sind für eine beispielhaft gewählte Wellenlänge von 560 nm in der Tabelle 3.2 zusammengestellt. Für die Berechnung der optischen Eigenschaften werden die Brechungsindizes allerdings spektral aufgelöst vorgegeben. Abbildung 3.1 zeigt als Ergebnis der

Mie-Berechnungen die Streufunktionen der Aerosolmodelle, die im Vergleich zur analytisch berechneten Streufunktion der reinen Rayleigh-Atmosphäre, ein ausgeprägtes Maximum der Streuung in Vorwärtsrichtung besitzen. Desweiteren ist die berechnete und auf 900 nm normierte spektrale Extinktion der Aerosolmodelle dargestellt. Erwartungsgemäß zeigt die Extinktion für die großen Aerosolpartikel der maritimen Modelle einen flachen spektralen Verlauf. Die Extinktion dieser Modelle, wie auch die des stratosphärischen Aerosols, basieren vorwiegend auf Streuung, gekennzeichnet durch spektrale Einzelstreueralbeden nahe Eins. Das kontinentale Aerosol mit der absorbierenden *Soot* Komponente besitzt eine Absorption, die 10 – 18% der Gesamttextinktion beträgt.

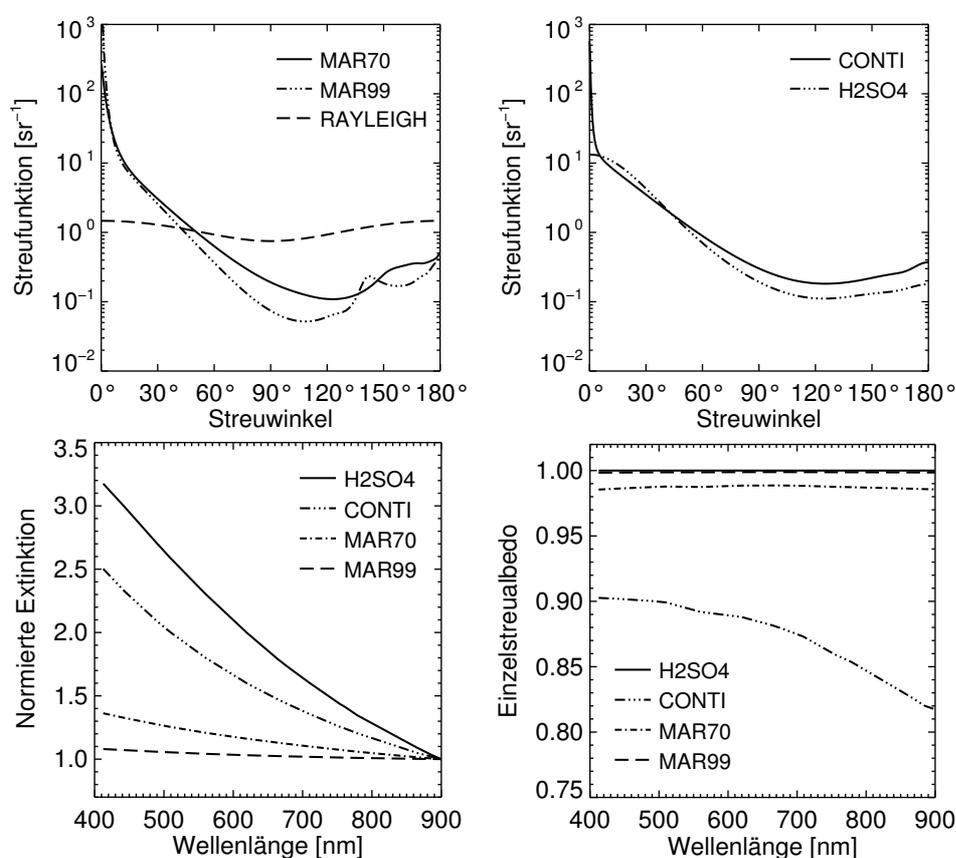


Abbildung 3.1: Mit Hilfe der Mie-Theorie berechnete inhärente optische Eigenschaften der verwendeten Aerosolmodelle. Oben links: Streufunktionen der maritimen Modelle (MAR70, MAR99) für 70% und 99% relativer Feuchte im Vergleich zur Rayleigh-Streufunktion. Oben rechts: Streufunktionen des kontinentalen (CONTI) und des stratosphärischen Modells (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>). Unten links: Spektrale Extinktionskoeffizienten normiert auf 900 nm. Unten rechts: Spektrale Einzelstreueralbedo. Beide unteren Abbildungen jeweils für die Modelle H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, CONTI sowie MAR70 und MAR99.

### 3.3 Absorption durch Ozon

Für den in dieser Arbeit betrachteten Spektralbereich des MERIS-Instrumentes von 412 – 885 nm wird die elektromagnetische Strahlung durch die breitbandige Absorption des Ozons in der Chappuis-Bande im Bereich von zwischen 450 – 750 nm beeinflusst. Im Strahlungstransport dieser Arbeit wird die Absorption durch das Ozon in der äußersten Modellschicht als Schwächung der solaren Ein- bzw. Ausstrahlung behandelt. Hierzu wird das Strahlungsfeld mit der Transmission des Ozons  $T_{O_3}(\lambda, \theta_s)$  multipliziert. Diese Vorgehensweise ist gerechtfertigt, da sich der Hauptteil des atmosphärischen Ozons in der Stratosphäre befindet. Mit der ozonoptischen Tiefe  $\tau_{O_3} = a_{O_3} M_{O_3}$ , als Produkt des Ozon-Absorptionskoeffizienten  $a_{O_3}$  und der Ozonsäulenmasse  $M_{O_3}$ , berechnet sich die Transmission des Ozons bei einem Sonnenzenitwinkel  $\theta_s$  durch:

$$T_{O_3}(\lambda, \theta_s) = \exp\left(-\frac{\tau_{O_3}(\lambda)}{\cos(\theta_s)}\right). \quad (3.4)$$

Die spektralen Absorptionskoeffizienten des Ozons in der Chappuis-Bande wurden nach *Linke* (1953) parameterisiert. Für die Ozonsäulenmasse wird ein Durchschnittswert von 350 Dobson Einheiten berücksichtigt.

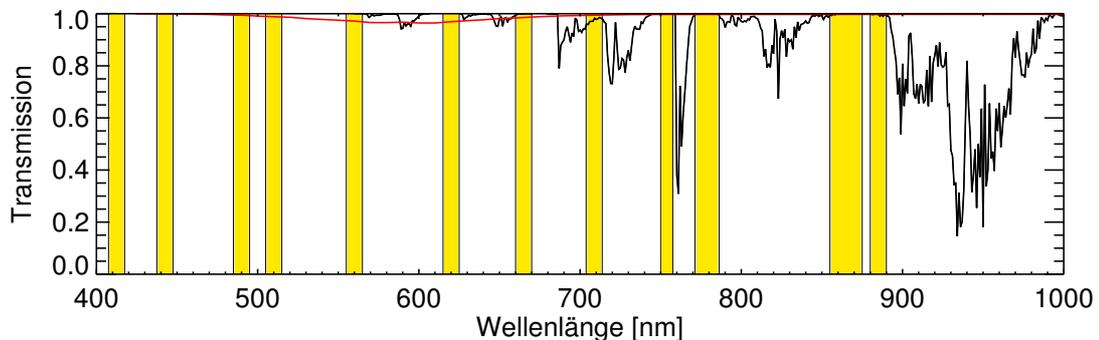


Abbildung 3.2: Direkt an der Meeresoberfläche berechnetes Transmissionsspektrum für eine *mid-latitude summer* Atmosphäre mit den spektralen Positionen der in dieser Arbeit verwendeten MERIS-Kanäle in gelb. Separat in rot dargestellt ist die Transmission des Ozons für einen Säulengehalt von 344 Dobson-Einheiten.

### 3.4 Absorption durch andere Gase

Die für die Verfahren gewählten MERIS-Kanäle sind nur geringfügig durch Absorption von Wasserdampf bzw. Sauerstoff beeinflusst, wie die berechneten Transmissionen der Tabelle 3.3 wiedergeben. Abbildung 3.2 zeigt die spektrale Position und Breite der in dieser

Arbeit verwendeten MERIS-Kanäle in einem berechneten Transmissionsspektrum der atmosphärischen Gase für eine *mid-latitude summer* Atmosphäre direkt an der Wasseroberfläche und einer relativen durchstrahlten Luftmasse von Eins. Dennoch wird die Gasabsorption für die gewählte Standard-Atmosphäre durch ein modifiziertes k-Distributionsverfahren berücksichtigt (*Bennartz und Fischer, 2000*). Der Einfluß der Gasabsorption auf die Transmission von Wasserdampf und Sauerstoff am Unterrand der Atmosphäre in den verwendeten MERIS-Kanälen kann der Tabelle 3.3 entnommen werden. Der maximale Einfluß des Wasserdampfs auf die gewählten Kanäle beträgt etwa 3% im Kanal 9 bei 708,75 nm. Dagegen ist der maximale Einfluß von Sauerstoff mit weniger als 0,5% im Kanal 12 bei 778,75 nm zu vernachlässigen.

Tabelle 3.3: Einfluß der Gasabsorption durch Wasserdampf und Sauerstoff auf die Transmission einer *mid-latitude summer* Atmosphäre bei einem Sonnenzenit von  $30^\circ$  und einer Beobachtergeometrie in Nadirrichtung nach *Santer et al. (2002)*.

| MERIS-Kanal | Wellenlänge [nm] | Transmission H <sub>2</sub> O | Transmission O <sub>2</sub> |
|-------------|------------------|-------------------------------|-----------------------------|
| 1           | 412,50           | 1,0000                        | 1,0000                      |
| 2           | 442,50           | 0,9994                        | 1,0000                      |
| 3           | 490,00           | 0,9998                        | 1,0000                      |
| 4           | 510,00           | 0,9965                        | 1,0000                      |
| 5           | 560,00           | 1,0000                        | 1,0000                      |
| 6           | 620,00           | 1,0000                        | 1,0000                      |
| 7           | 665,00           | 1,0000                        | 1,0000                      |
| 9           | 708,75           | 0,9675                        | 1,0000                      |
| 10          | 753,75           | 0,9997                        | 1,0000                      |
| 12          | 778,75           | 0,9996                        | 0,9985                      |
| 13          | 865,00           | 0,9990                        | 1,0000                      |
| 14          | 885,00           | 0,9920                        | 1,0000                      |

### 3.5 Polarisation

In den durchgeführten Simulationen wird die Polarisation nicht berücksichtigt. Die Vernachlässigung der Polarisation im Strahlungstransport führt im MERIS-Kanal 2 ( $\lambda = 442,5 \text{ nm}$ ) nach Modellrechnungen von *Santer et al. (2002)* zu einem maximalen Fehler von 2,1% in den aufwärtsgerichteten Strahldichten am Oberrand einer reinen Rayleigh-Atmosphäre über Case-1-Gewässern. Für den MERIS-Kanal 13 ( $\lambda = 865 \text{ nm}$ ) reduziert sich der maximal zu erwartende Fehler auf 1,4%. In einer maritimen Atmosphäre betragen die zu erwartenden Fehler in den genannten Kanälen 1,7% bzw. 1,2%.