



VIRTUAL INSTITUTE FOR INVERSE MODELLING OF THE ATMOSPHERIC CHEMICAL COMPOSITION

◆ [IMACCO Homepage](#)

- ◆ [Participating Institutions](#)
- ◆ [Objectives](#)
- ◆ [Recent Results](#)
- ◆ [Management structure](#)
- ◆ [Organisation](#)
- ◆ [Virtual Institute ?](#)
- ◆ [Contact](#)



Universität zu Köln

Virtual Institute for

IMACCO

INVERSE **M**ODELLING OF THE **A**TMOSPHERIC **C**HEMICAL **C**OMPOSITION



Participating Institutions:

Universities

- University of Cologne
Institute for Geophysics and Meteorology with the Rhenish Institute for Environmental Research (RIU) at the University of Cologne
[▶ University of Cologne, IGM/RIU](#)
[✉ Prof. Dr. M. Kerschgens](#), [✉ Prof. Dr. A. Ebel](#), [✉ PD Dr. H. Elbern](#)
Kerpener Str. 13, D- 50923 Köln
- University of Karlsruhe
Institute for Meteorology and Climate Research
[▶ University of Karlsruhe, IMK](#)
[✉ PD Dr. Th. v. Clarmann](#)
Postfach 6920, D-76128 Karlsruhe



Research Centres

- Forschungszentrum Jülich GmbH
Institute for Chemistry and Dynamics of the Geosphere II: Troposphere
[▶ Forschungszentrum Jülich GmbH, ICG-II](#)
[✉ Prof. Dr. A. Wahner](#), [✉ Prof. Dr. D. Poppe](#)
Leo Brandt Str., D-52425 Jülich
- Forschungszentrum Jülich GmbH
Institute for Chemistry and Dynamics of the Geosphere I: Stratosphere
[▶ Forschungszentrum Jülich GmbH, ICG-I](#)
[✉ Prof. Dr. M. Riese](#)
Leo Brandtstr., D-52425 Jülich
- Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Institute for Meteorology and Climate Research
[▶ Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, IMK-ASF](#)
[✉ Prof. Dr. H. Fischer](#), [✉ Dr. G. Stiller](#)
Postfach 3640, D-76021 Karlsruhe



Objectives

The General Objectives

Today, it is widely recognised that the present changes in the earth's environment, challenges our ability to detect and understand the various atmospheric processes and to assess the resulting impacts. The urgently needed knowledge about the present state of the atmosphere as part of the earth system, its atmospheric trace gas and aerosol budgets and their future variability requires reliable analyses, resting on information about observations of the governing processes.

The prevailing problem

Even increasingly accurate and comprehensive measurements, only provide sparse snapshots of the instantaneous state of the system. Numerical models produce complete space-time data sets, based on our present, yet incomplete knowledge of the underlying processes. Hence, the results of pure model calculations are of limited and, more importantly, often unknown validity.

The solution: Inversion

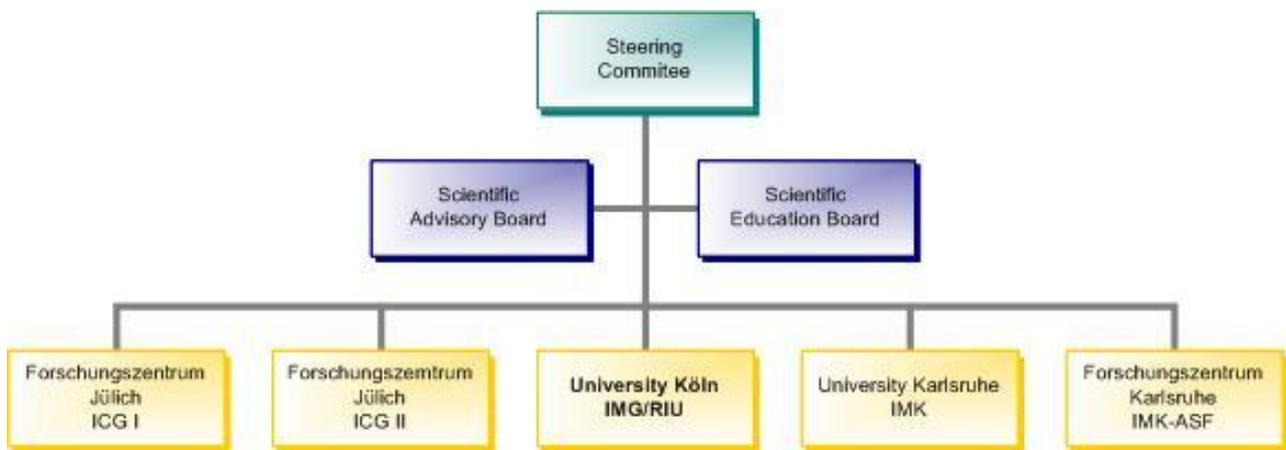
Improved conclusions must be inferred from processing procedures, which are able to combine observational data with models in a consistent and synergistic manner. The requested techniques can only be provided by advanced spatio-temporal data assimilation and inversion methods. The mission, objective and work program of IMACCO are aligned to this basic principle. A key technique adopted here is the variational calculus, resting on the tangent-linear and adjoint model derivatives. The four-dimensional variational data assimilation method is central to the methods used.

Recent Results

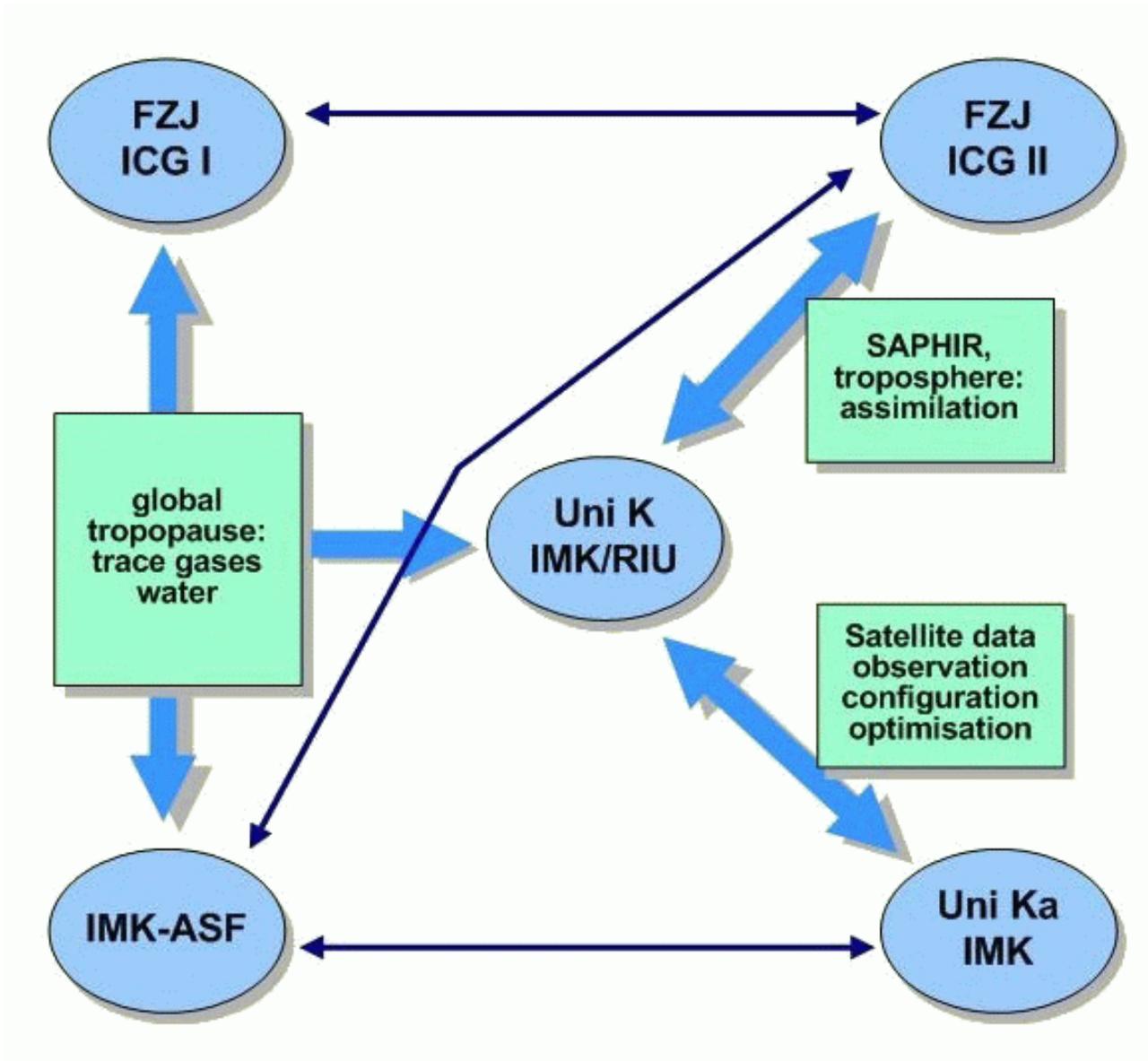
Results from the Workshop in Cologne, November 2006

Topic	Author	Collaboration
→ CRISTA-NF	Lars Hoffmann	RIU and ICG-I
→ Adaptive observation optimisation	Nadine Goris	IMK and RIU
→ MIPAS observations of biomass burning plumes	Thomas von Clarmann	RIU and IMK
→ High resolution 4-dimensional data assimilation for campaign applications	Ketevan Kasradze	ICG-I, IMK, and RIU

Management structure



IMACCO Organisation



Principal interactions (broad arrows) in the foundation configuration of the virtual Institute. Further connections will be added upon approval of ensuing new projects.

Organisation Troposphere

Trace gases of the troposphere: **SAPHIR and field experiments (ICG-II with IGM/RIU)**

➤ [ICG-II](#) plans a comprehensive study of the budget of reactive nitrogen and carbon compounds and of the radicals OH, HO₂, including organic peroxy radicals. By simulation of the trace gas composition in the atmosphere in the chamber with measured compounds, the influence of other, yet unknown compounds is to be identified. In order to fully exploit the options of ➤ [SAPHIR](#), a simulation of the transport processes inside the chamber is required. Inverse modelling of the chemistry mechanism is scheduled to be a key method for the quantification of the chamber parameter, gas-surface interactions, and data analysis.

It is further planned to devise suitable assimilation tools for the planning of field experiments and the interpretation of their results.

Organisation Tropopause

High resolution satellite retrievals of trace gases at deeper tropopause levels (IMK-ASF and ICG I with IMG/RIU)

The ➤ [MIPAS](#) sensor on board of ➤ [ENVISAT](#) provides reliable height profiles of numerous species for the middle and upper stratosphere, while retrievals of atmospheric parameters from spectra observed in the lower stratosphere and upper troposphere is subject to major difficulties. The general aim here is to extend the usable height levels of MIPAS observations significantly downwards. An essential portion of these difficulties is attributed to small scale atmospheric structures, which were as yet not taken into account for radiative transfer modelling, with the consequence of biased and noisy results. The concept of model based data assimilation, especially the four-dimensional variational approach, introduces further updated a priori information for the retrieval. This is expected to overcome the limitations of spatial resolution experienced today. Forschungszentrum Karlsruhe ➤ [IMK-ASF](#) will use the results of the refined assimilation method primarily for the retrieval of trace gases, while ➤ [ICG-I](#) will place the emphasis on the retrieval of water.

Organisation Satellite Data

Optimisation of the retrieval configuration (UK-IMK and IGM/RIU)

The objective of this project is to optimize the configuration of future satellite instruments (as well as the analysis of currently available satellite measurements) such that they contribute the largest possible amount of information to a scientific question. For example, the improvement of the spatial resolution of a measurement will lead to reduced precision and vice versa. Typical competing data characteristics are

- precision
- horizontal resolution
- altitude resolution
- time resolution
- spectral resolution

The optimal trade-off between competing data characteristics depends on the particular scientific question under investigation and shall be optimized by sensitivity studies in the context of inverse modelling. This then leads to optimized instrument and retrieval configuration.

Virtual Institute

What is a Virtual Institute?

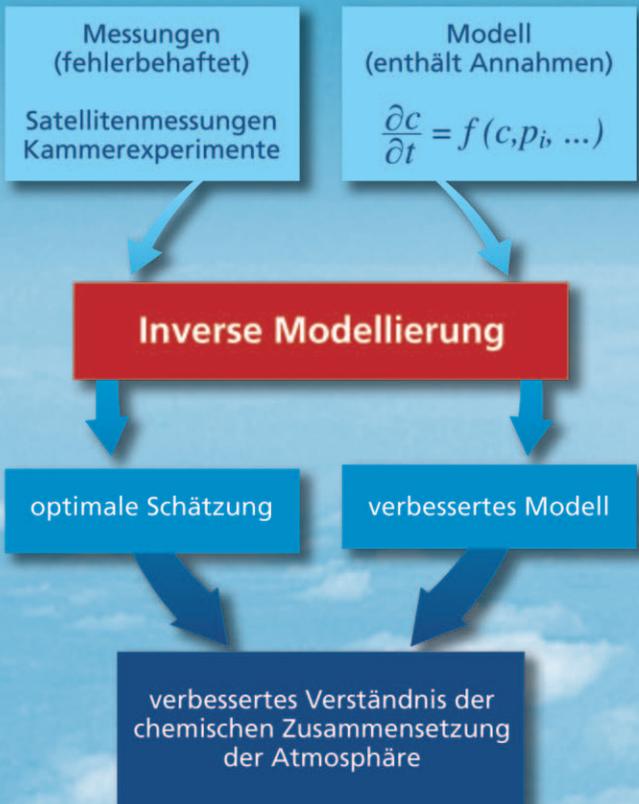
A virtual institute is a co-operation of HGF partners and universities on a well-defined topic; emphasis is lead on education and training by offering lectures, summer schools, training courses etc., exchange of students between the partners by joint supervision of theses.

Contact

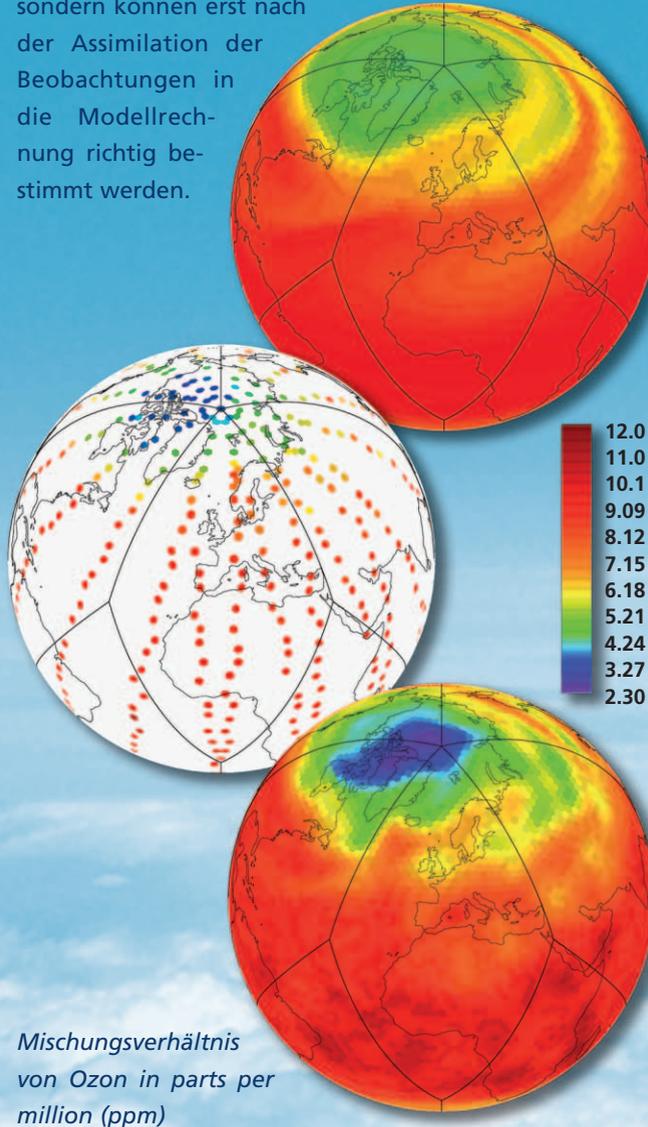
Spokesman [✉ H. Elbern](mailto:H.Elbern)

Department Spokesman [✉ A. Wahner](mailto:A.Wahner)

Die Inverse Modellierung umfasst Algorithmen, mit denen Fehler aus Beobachtungsdaten und numerischen Modellen, die aufgrund experimenteller Unsicherheiten vorhanden sind, besser berücksichtigt werden können. Dadurch ist eine – den Fehlerstatistiken entsprechende – bestmögliche Bestimmung des Zustandes der Atmosphäre möglich. Zugleich können die Unsicherheiten der damit zusammenhängenden chemischen und physikalischen Modellparameter verkleinert werden. IMACCO arbeitet dabei mit angepassten Methoden der Variationsrechnung, einem wichtigen Konzept der Mathematik, das in Physik und Technik in großem Umfang angewendet wird, um mit tangential-linearen und adjungierten Formen die Aussagekraft des Modells weiter zu verbessern.



Das Volumenmischungsverhältnis von Ozon am 4. November 2003 in circa 33 km Höhe wurde in einer Modellrechnung vorhergesagt (oben), vom Satelliteninstrument MIPAS gemessen (Mitte) und in einer sechstägigen Datenassimilation bestmöglich bestimmt (unten). Die niedrigen Ozonwerte über dem Nordpol werden vom Modell nicht korrekt vorhergesagt, sondern können erst nach der Assimilation der Beobachtungen in die Modellrechnung richtig bestimmt werden.



Kontakt:

PD Dr. H. Elbern: HE@eurad.uni-koeln.de
<http://www.fz-juelich.de/icg/icg-ii/imacco>

Teilnehmende Institute:

Universität zu Köln

Institut für Geophysik und Meteorologie
 Prof. Dr. M. Kerschgens: MK@meteo.uni-koeln.de
 Kerpener Straße 13, D-50923 Köln



Rheinisches Institut für Umweltforschung
 Prof. Dr. A. Ebel: AE@eurad.uni-koeln.de
 PD Dr. H. Elbern: HE@eurad.uni-koeln.de
 Aachener Straße 201-209, D-50931 Köln



Universität Karlsruhe

Institut für Meteorologie und Klimaforschung
 PD Dr. Th. v. Clarmann: Thomas.Clarmann@imk.fzk.de
 D-76128 Karlsruhe



Universität Karlsruhe (TH)
 Forschungsuniversität · gegründet 1825

Forschungszentrum Jülich

Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre I: Stratosphäre
 Prof. Dr. M. Riese: M.Riese@fz-juelich.de
 Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre II: Troposphäre
 Prof. Dr. A. Wahner: A.Wahner@fz-juelich.de
 Prof. Dr. D. Poppe: D.Poppe@fz-juelich.de
 Leo Brandtstr., D-52425 Jülich

Forschungszentrum Jülich
 in der Helmholtz-Gemeinschaft



Forschungszentrum Karlsruhe

Institut für Meteorologie und Klimaforschung
 Atmosphärische Spurengase und Fernerkundung
 Prof. Dr. H. Fischer: Herbert.Fischer@imk.fzk.de
 Dr. G. Stiller: Gabriele.Stiller@imk.fzk.de
 Postfach 3640, D-76021 Karlsruhe



Forschungszentrum Karlsruhe
 in der Helmholtz-Gemeinschaft

Die Bilder des Satelliten ENVISAT wurden mit freundlicher Unterstützung der ESA zur Verfügung gestellt.

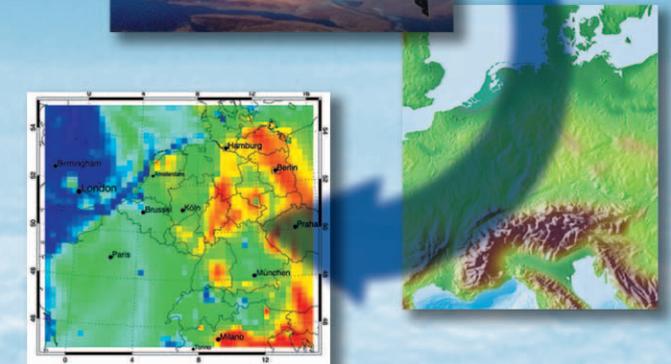
Stand: April 2006



VIRTUAL INSTITUTE FOR INVERSE MODELLING OF THE ATMOSPHERIC CHEMICAL COMPOSITION

Inverse Atmosphärische Modellierung

Auf dem Weg zu einer verbesserten Vorhersage der Spurenstoffzusammensetzung der Atmosphäre



Ein Kompetenzzentrum auf Initiative der Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren



Atmosphärische Spurenstoffe und Modellierung

Der Einfluss des Menschen auf die Umwelt ist unübersehbar. Menschliche Aktivitäten wie Industrie und Verkehr aber auch die Natur setzen große Mengen von Spuren- und Schadstoffen frei und beeinflussen damit Atmosphäre und Klima.

Um die zukünftige Entwicklung einschätzen zu können, ist es von zentraler Bedeutung, die physikalischen und chemischen Prozesse und ihre gegenseitigen Abhängigkeiten besser zu verstehen. Nur auf diese Weise können wir verlässliche Vorhersagen über den zukünftigen Zustand der Atmosphäre und des Klimas gewinnen. Hierzu werden numerische Modelle verwendet, die unser Wissen über das System in mathematischer Form zusammenfassen. Traditionell werden diese Modelle verwendet, um den Zustand der Atmosphäre vorherzusagen. Man kann sie aber auch umgekehrt betreiben, indem die Modellvorhersage mit Messungen verglichen wird, um aus den Unterschieden Schlüsse über einen früheren Zustand der Atmosphäre oder über atmosphärische Prozesse zu ziehen. Die Inverse (umgekehrte) Modellierung ist ein Ansatz, um dieses Problem quantitativ und systematisch zu lösen. Die Wissenschaftler können zum Beispiel durch Inverse Modellierung von Schadstoffverteilungen auf Emissionen zurückschließen oder aber aus Messungen chemischer Spurenstoffe die Geschwindigkeiten berechnen, mit denen sich die Spurengase ineinander umwandeln. Ebenso ist es möglich, aus zeitlich versetzten und lückenhaften Messungen atmosphärischer Zustandsgrößen für einen festen Zeitpunkt ein komplettes und in sich schlüssiges Gesamtbild der Atmosphäre zu erzeugen, das bestmöglich mit den Messungen übereinstimmt. Es lässt sich mit Methoden der Inversen Modellierung weiterhin bestimmen, welchen Spurenstoffen eine Schlüsselrolle zukommt, auf deren Beobachtung nicht verzichtet

werden kann. Im virtuellen Institut IMACCO wird die Inverse Modellierung eingesetzt, um die chemische Zusammensetzung der Atmosphäre besser zu verstehen.

IMACCO

Das virtuelle Institut **IMACCO** (Institute for Inverse **M**odelling of the **A**tmospheric **C**hemical **C**omposition) wurde gemeinsam von Universitäten und Forschungszentren gegründet, in denen mit Inverser Modellierung an atmosphärisch-chemischen Fragestellungen gearbeitet wird. IMACCO plant verschiedene Projekte, um vor allem die Vorgänge in der Troposphäre, der Tropopause und der darüber liegenden Stratosphäre besser zu verstehen.

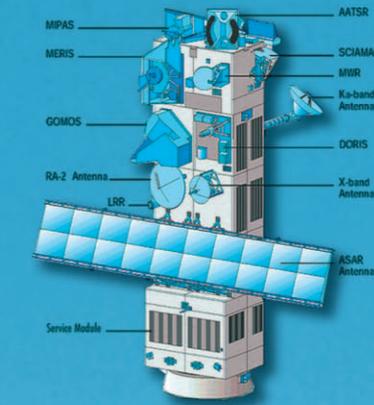
Im ersten Projekt untersucht das „Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre II“ (Forschungszentrum Jülich) zusammen mit dem „Rheinischen Institut für Umweltforschung“ (Universität zu Köln) in einer übergreifenden Studie, wie gut sich Reaktionsmechanismen auf die Chemie der Atmosphäre anwenden lassen. Die chemischen Experimente werden in der Jülicher Experimentierkammer **SAPHIR** (Simulation of **A**tmospheric **P**hotochemistry **I**n a large **R**eaction Chamber) stattfinden, in der atmosphärische Prozesse unter natürlichen Bedingungen nachgestellt werden können.



Es werden Methoden der Inversen Modellierung verwendet, um aus gemessenen Zeitreihen von Spurenstoffen auf die Richtigkeit des zugrunde gelegten Reaktionsmechanismus zu schließen oder gegebenenfalls fehlerhafte Parameter oder nicht berücksichtigte Reaktionen zu erkennen. Die ersten Arbeiten widmen sich der Untersuchung der Radikale OH und HO₂ sowie der organischen Peroxyradikale, die beim Abbau von Schadstoffen eine wichtige Rolle spielen. In einem weiteren Schritt sollen Messungen in bodennahen Luftschichten von einem Zeppelin aus vorbereitet und Feldkampagnen wie etwa **ECHO** (Emission und **C**hemische Umwandlung biogener flüchtiger **O**rganischer Verbindungen), bei der die Chemie in einem europäischen Waldbestand untersucht wurde, ausgewertet werden.

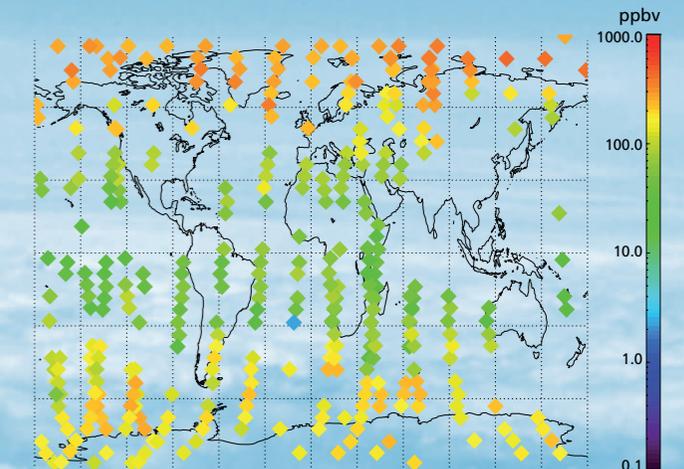


In einem weiteren Projekt untersuchen das „Institut für Meteorologie und Klimaforschung – Atmosphärische Spurengase und Fernerkundung“ (Forschungszentrum Karlsruhe), das „Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre I“ (Forschungszentrum Jülich) und das „Rheinische Institut für Umweltforschung“ die Spurengasverteilung im Tropopausenbereich. Dazu werden die Höhenprofile vieler Spurengase mit dem **MIPAS**-Sensor (**M**ichelson **I**nterferometer for **P**assive **A**tmospheric **S**ounding) an Bord des Satelliten **ENVISAT** (**E**nvironment **S**atellite) gemessen. Zusätzliche Informa-



tionen, mit denen die Höhenauflösung der Spurengasprofile insbesondere in der Tropopausenregion verbessert werden kann, erhalten die Wissenschaftler mit Hilfe der Datenassimilation, einer speziellen Form der Inversen Modellierung.

Im dritten Projekt wollen das „Institut für Meteorologie und Klimaforschung“ und das „Rheinische Institut für Umweltforschung“ die Konfiguration bestehender Satelliteninstrumente analysieren und diejenige zukünftiger optimieren. Zusammen mit der Inversen Modellierung können aus Satellitendaten, die in der Regel nur eine unvollständige Bestimmung von Spurenstoffverteilungen liefern, möglichst umfassende Informationen gewonnen werden um wissenschaftliche Fragen zu klären.



MIPAS-Messungen von Ozon
(Mischungsverhältnis in (American) parts per billion)
am 24. Juli 2003 in 10 km Höhe (Tropopausenbereich). Datenlücken
längs der Satellitenbahn sind durch Wolkenbedeckung bedingt.