



Bundesministerium
für Verkehr und
digitale Infrastruktur

Forschungsprojekt Anwendung von Lidar-Daten zur Verifikation von COSMO-ART- Simulationen und zur Datenassimilation

Schlussbericht: November 2015

BMVI-Auftragsforschung: FE-Nr. 50.356/2012



Erstellt durch:

Institut für Physik und Meteorologie der Universität Hohenheim

Es wird darauf hingewiesen, dass die unter dem Namen des Verfassers bzw. der Verfasser veröffentlichten Berichte nicht in jedem Fall die Ansicht des Herausgebers wiedergeben. Die Verantwortung für den Inhalt liegt daher ausschließlich beim Autor.

Die Verwendung dieses Forschungsberichts oder Auszüge hieraus durch Dritte sind nur mit Quellenangabe zulässig.

**Anwendung von Lidar-Daten zur
Verifikation und Datenassimilation für
COSMO-ART/ICON-ART Simulationen
und Vorhersagen**

Im Auftrag des
Bundesministers für Verkehr,
Bau- und Stadtentwicklung

Forschungsbericht FE-Nr.

50.0356/2012

Thema:

Anwendung von Lidar-Daten zur Verifikation und
Datenassimilation für COSMO-ART/ICON-ART
Simulationen und Vorhersagen

Projektleiter:

PROF. DR. VOLKER WULFMEYER

Mitarbeiter:

DR. ANDREAS BEHRENDT

ARMIN GEISINGER

Institut:

Institut für Physik und Meteorologie
Universität Hohenheim

Institutsleiter:

Prof. Dr. Volker Wulfmeyer

Datum:

30.11.2015

Inhaltsverzeichnis

1. Motivation	6
2. Entwicklung eines Vorwärtsoperators für Lidarsysteme basierend auf COSMO-ART/ICON-ART Daten (AP 1)	9
2.1. Der Rückstreulidar Vorwärtsoperator	10
2.2. Streueigenschaften von Molekülen	11
2.3. Streueigenschaften von Partikeln.....	13
2.4. Partikelverteilungsfunktionen	15
2.5. Transmission.....	18
2.6. Modell-Interface und Programm-Optimierungen für die Reduzierung von Rechenzeit.....	19
3. Entwicklung der Grundlagen für Statistiken der Abweichung von Modell-Simulationen für Lidar-Daten.....	24
3.1. Datenaufbereitung.....	24
3.2. Validierungsstudien.....	25
4. Entwicklung von Evaluierungsmethoden für Lidardaten und Vorbereitung der Assimilationsmethoden für Lidardaten (AP 3 und AP 4).....	34
4.1. Sensitivitätsstudien.....	34
4.2. Erste Sensitivitätsstudie: Variationen der Wellenlänge	34
4.3. Zweite Sensitivitätsstudie: Unsicherheiten des komplexen Brechungsindexes .	37
4.4. Dritte Sensitivitätsstudie: Einfluss der Partikelform auf die Streueigenschaften	45
4.5. Fehleranalyse.....	52
4.6. Diskussion der Ergebnisse der Sensitivitätsstudien	55
4.7. Fehlerfortpflanzung von Modell und Vorwärtsoperator.....	55
4.8. Fehlerfortpflanzung der Lidarmessung.....	56
4.9. Assimilation von ACL Daten.....	58
5. Empfehlungen.....	59
Danksagung	60
Referenzen	61

1. Motivation

Die Eruption des Vulkans Eyjafjallajökull in Island im Frühjahr 2010 führte zu einem Flugverbot innerhalb des Europäischen Luftraums für mehrere Tage. Die Auswirkungen für den Güter- und Personenverkehr waren dramatisch, sodass dieser Vulkanausbruch von vielen Wissenschaftlern mit Hilfe unterschiedlichster Methoden und Instrumenten untersucht und analysiert wurde. Grundlegendes Interesse galt der Verfolgung und Einschätzung der Aschenwolke sowie die Fragestellung wie die Aschepartikel in der Atmosphäre erfasst und verfolgt werden können. Eine der Möglichkeiten hierzu ist beispielsweise die Verwendung von Satellitendaten von SEVIRI (Spinning Enhanced Visible and Infrared Imager), um die räumliche Ausdehnung und Bewegungen der Aschewolke zu beobachten. Von der Erde aus wurden ebenfalls Messungen mit bodenbasierten Instrumenten (Lidargeräte, Partikelanalyseinstrumente) durchgeführt, um die Entscheidungsträger mit wichtigen Messdaten zu versorgen.

Mit Hilfe der Daten sogenannter „automated ceilometer lidar“ (ACL) Systeme können Vertikalprofile der Streueigenschaft unterschiedlicher Atmosphärenschichten erfasst werden. Solche Systeme sind unter anderem in Deutschland weit verbreitet und werden als Netzwerk zur Messung der Wolkenunterkante verwendet. Das deutsche Netzwerk bestand derzeit aus 46 ACL Instrumente des Typs CHM15k vom Hersteller Jenoptik/Lufft. Durch die Auswertung der Messdaten des Netzwerks konnte die Bewegung und Ausbreitung der Aschenwolke über Deutschland abgeschätzt werden (Flentje et al. [2010]).

Die Verfolgung der Wolke mit diesen Daten ist jedoch mit Schwierigkeiten verbunden, da die Daten nicht nur das Signal der Vulkanasche wiedergeben, sondern von anderen Streuern und Streuprozessen in der Atmosphäre verzerrt werden. Aus diesem Grund ist es häufig nicht möglich, gemessene Signale und Strukturen einem bestimmten Aerosol zweifelsfrei zuzuordnen. Daher können die Daten des ACL Netzwerks nicht alleinige Entscheidungsgrundlage für die Einschätzung des Gefahrenpotentials darstellen.

Um weitere Informationen über den Transport von Vulkanasche zu erhalten wurde am Deutschen Wetterdienst (DWD) in Zusammenarbeit mit dem Karlsruhe Institut für Technologie (KIT) das Modellsystem COSMO-ART (Consortium for Small Scale Modeling, Aerosols and Reactive Trace Gases) für eine Aschenausbreitungssimulation eingesetzt (Vogel et al. [2014]). Daraus ergibt sich unter anderem für die wissenschaftliche Analyse der Vorteil, dass alle verwendeten Variablen des Modells direkt verwendet und ausgewertet werden können. Größter Nachteil dieser Methode ist allerdings der eventuell fragliche

Bezug zur Wirklichkeit, sodass der simulierte Modellzustand unter anderem stark von der realen Situation abweichen kann und die Aussagekraft dieser Methode stark limitiert.

Um eine bessere Aussagekraft der Modellberechnungen zu erhalten müssen die Simulationsergebnisse mit Hilfe von Beobachtungen validiert werden. Im Falle des Vulkanausbruchs des Eyjafjallajökull wurden solche Studien mit Hilfe der Messdaten des Forschungsflugzeugs Falcon vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) durchgeführt. Diese Daten stehen allerdings nicht täglich zur Verfügung. Hinzu kommt, dass die Forschungsmission des DLR Falcon zum Eyjafjallajökull erst einige Tage nach dem Vulkanausbruch gestartet wurde. Daraus wird ersichtlich, dass selbst in einem so zentralen Ereignis eine zeitnahe Validierung des Modells mit diesen Daten nicht gewährleistet ist.

Zusätzlich zu den Messungen in der Luft wurden Messdaten von sich am Boden befindlichen Partikelanalyseinstrumente mehrerer Standorte für die Validierung herangezogen. Diese Messdaten sind jedoch stark von anderen Aerosoltypen verunreinigt und geben nur den Zustand in der untersten Modellschicht wieder. Für Modellschichten in größeren Höhen können diese Daten keine Referenzwerte liefern. Da der Bewegungsradius von Aerosolen in hohen Schichten größer ist als der von bodennahen Aerosolen, ist die Messung am Boden kaum für die Vorhersage der Ascheausbreitung geeignet.

Es ist daher von großer Bedeutung, die Messungen des ACL Netzwerks den Modellen zugänglich zu machen. Die noch größte Hürde dabei ist das Fehlen einer gemeinsamen Messgröße, die sowohl vom Messinstrument geliefert als auch vom Modell verwendet werden kann. Während ACL Systeme ein Rückstreusignal für alle Atmosphärenstreuer liefern, berechnet das Modell Anzahldichten und Anzahldichtefunktionen bestimmter Aerosoltypen. Da es nicht möglich ist, vom elastischen Streusignal der ACL Systeme auf die Rückstreuungseigenschaften bestimmter Aerosoltypen geschweige denn deren Anzahldichte zu schließen („retrieval“), müssen umgekehrt Lidarprofile aus den vom Modell berechneten Atmosphärenzuständen berechnet werden („forward model“). Dieses Vorwärtsmodell wird im Rückstreu-Lidar Vorwärtsoperator zusammengefasst, welcher Lidarprofile berechnet, die ein hypothetisches ACL System bei dem vom Modell prognostizierten Atmosphärenzustand messen würde.

Nach Anwenden dieses Operators liegen die Daten von Messung und Modellsimulation in derselben Physikalischen Größe vor und können sowohl qualitativ als auch quantitativ verglichen werden. Anstatt Aschekonzentrationen mit Rückstreuprofilen zu vergleichen, erlaubt der Vorwärtsoperator die Berücksichtigung des physikalischen Modells der Lidarmessung, sodass Abschwächung durch Streuung ebenfalls berücksichtigt ist und Unterschiede zu den Messungen nicht mehr auf den Vergleich zwischen Äpfel und Birnen, sondern auf die Modellsimulation selbst zurückzuführen ist. Der quantitative Vergleich

hingegen erlaubt das Anwenden von statistischen Methoden und numerischen Auswertungen. Dies sind die Grundvoraussetzungen für die Assimilation von ACL Daten in bestehende Modellsysteme wie auch COSMO-/ICON-ART.

Der Bericht ist folgendermaßen strukturiert: Im nächsten Kapitel werden die Grundprinzipien der Lidarmessung sowie die Umsetzung als Vorwärtsoperator-Modell erklärt (Arbeitspaket (AP) 1). Anschließend folgt die Dokumentation unserer Arbeit zu den Arbeitspaketen 2 bis 4. Der Dokumentation der Arbeitspakete folgt eine Auflistung der Empfehlungen, die wir für weitere Forschungsarbeiten sowie für die Zusammenarbeit mit den Herstellern von ACL Systemen, aussprechen können.

2. Entwicklung eines Vorwärtsoperators für Lidarsysteme basierend auf COSMO-ART/ICON-ART Daten (AP 1)

Das Lidarprinzip basiert auf dem Aussenden von Ultraviolett- bis Infrarot-Licht in die Atmosphäre und der Messung der zurückgestreuten Signale. Die empfangene Intensität $I_{rec,\lambda}(z)$ aus einer Entfernung z lässt sich durch folgende Gleichung beschreiben

$$I_{rec,\lambda}(z) = I_{0,\lambda} \eta A_{tel} \frac{O(z) \Delta h(z)}{z^2} \beta_{\lambda}(z) \exp \left(-2 \int_0^z \alpha_{\lambda}(z') dz' \right). \quad (1)$$

Die vom Instrument unabhängigen Variablen der Lidargleichung sind die Überlappfunktion $O(z)$, die Entfernungsauflösung $\Delta h(z)$, die Wellenlänge λ , die Signalstärke des Lasers $I_{0,\lambda}$, die System- und Detektoreffizienz η und die Nettofläche des Empfangsteleskops A_T .

Die Entfernungsauflösung $\Delta h(z)$ hängt von der zeitlichen Auflösung der Datenerfassung $\Delta h(z) = c \Delta t$ ab. Übliche Werte für $\Delta h(z)$ von ACL Geräten betragen wenige Meter. Die Überlappfunktion $O(z)$ hat in Bodennähe einen Wert von 0 (keine Überlappung der Gesichtsfelder von Sende- und Empfangsteleskop) und nähert sich einem Wert von 1 (vollständige Überlappung). Die Höhe in der komplette Überlappung eintritt hängt von der Geometrie der Geräte ab und beträgt etwa 600 m bei den ACL Geräten. Bereiche unterhalb dieser Höhe zeichnen sich durch systematisch schwache Signale aus. Entfernungen, für die $0 < O(z) < 1$ gilt, können Überlapp-Korrigiert werden sofern die entsprechende Überlappfunktion bekannt ist.

Streuprozesse in der Atmosphäre werden durch den Rückstreukoeffizient $\beta_{\lambda}(z)$ und den Extinktionskoeffizient $\alpha_{\lambda}(z)$ in der Lidargleichung beschrieben.

Der Rückstreukoeffizient $\beta_{\lambda}(z)$ repräsentiert die Streuintensität in Richtung des Empfangsteleskops (180° zur Ausbreitungsrichtung im Falle der ACL Geräte). Der Rückstreukoeffizient $\beta_{\lambda}(z)$ hängt von der Wellenlänge, den Arten und Größen von Streuern im durchleuchteten Volumen und deren Anzahldichten ab. Der Rückstreukoeffizient $\beta_{\lambda}(z)$ hat die Einheit $m^{-1} sr^{-1}$.

Der Extinktionskoeffizient $\alpha_{\lambda}(z)$ ist ein Wert für die Abschwächung des Signals durch Absorption und Streuung. Die Einheit ist m^{-1} . Der Extinktionskoeffizient befindet sich im Exponentialterm der Transmission T_{λ} mit einem negierenden Vorzeichen. Aus einem Wert

für die Stärke der Abschwächung wird durch den Transmissions-Term ein Wert für die verbleibende Signalstärke (ein Wert zwischen ~0 und 1):

$$T_{\lambda}(z) = \exp \left(-2 \int_0^z \alpha_{\lambda}(z') dz' \right) \quad (2)$$

Aus den Messungen von Rückstreu-Lidar Geräten ist es nicht möglich, $\beta_{\lambda}(z)$ and $\alpha_{\lambda}(z)$ explizit zu berechnen, da für die Bestimmung dieser zwei Unbekannten nur ein Messwert geliefert wird. Kalibrierte Lidargeräte verwenden daher den abgeschwächten („attenuated“) Rückstreukoeffizienten als Datenprodukt ihrer Messung:

$$\gamma_{\lambda}(z) = \beta_{\lambda}(z) \exp \left(-2 \int_0^z \alpha_{\lambda}(z') dz' \right) \quad (3)$$

welcher die Einheit $\text{m}^{-1} \text{sr}^{-1}$ hat. Der abgeschwächte Rückstreukoeffizient ist demnach unabhängig von allen Gerätespezifischen Eigenheiten mit Ausnahme der Wellenlänge. Aufgrund dieser Eigenschaft ist es mit dieser Größe möglich, Vergleiche mit anderen Geräten, die dieselbe Wellenlänge verwenden, als auch Vergleiche mit den simulierten Lidarprofilen des Vorwärtsoperators durchzuführen.

2.1. Der Rückstreulidar Vorwärtsoperator

Die grundlegendste Aufgabe des Rückstreulidar Vorwärtsoperators ist die Berechnung des Extinktionskoeffizienten $\alpha_{\lambda}(z)$ und des Rückstreukoeffizienten $\beta_{\lambda}(z)$. Sind diese Größen bekannt, wird zudem das Transmissions-Integral gelöst um letztendlich den abgeschwächten Rückstreukoeffizienten $\gamma_{\lambda}(z)$ zu berechnen.

Wenn sich n_s unterschiedliche Arten von Streuern in einem durchleuchteten Volumen befinden, lassen sich Extinktionskoeffizient $\alpha_{\lambda}(z)$ und Rückstreukoeffizient $\beta_{\lambda}(z)$ folgendermaßen berechnen

$$\alpha_{\lambda}(z) = \sum_{i=1}^{n_s} \alpha_{i,\lambda}(z) = \sum_{i=1}^{n_s} N_i(z) \sigma_{\text{ext},i,\lambda} \quad (4)$$

$$\beta_{\lambda}(z) = \sum_{i=1}^{n_s} \beta_{i,\lambda}(z) = \sum_{i=1}^{n_s} N_i(z) \left(\frac{d\sigma_{sca,i,\lambda}}{d\Omega} \right)_{\pi}, \quad (5)$$

wobei N_i die Anzahldichte der Streuer eines Typs i beschreibt, angegeben in m^3 . Die Variable $\sigma_{ext,\lambda,i}$ beschreibt den Extinktionsquerschnitt in m^2 , und $(d\sigma_{sca,\lambda,i} / d\Omega)_{\pi}$ ist der sogenannte "differentielle Rückstreuquerschnitt" mit der Einheit $m^{-1} sr^{-1}$.

Der Extinktionsquerschnitt wird aus der Summe des Streuquerschnitts und des Absorptionsquerschnitts berechnet

$$\sigma_{ext,i,\lambda} = \sigma_{sca,i,\lambda} + \sigma_{abs,i,\lambda}. \quad (6)$$

Im Falle eines Isotropenstreuers wird der differentielle Rückstreuquerschnitt vom Streuquerschnitt $\sigma_{sca,\lambda,i}$ berechnet

$$\left(\frac{d\sigma_{sca,i,\lambda}}{d\Omega} \right)_{\pi} = \frac{\sigma_{sca,\lambda}}{4 \pi sr} \quad (7)$$

Im Falle realer Streuer wird die Phasenfunktion $\phi_{i,\lambda}(\theta)$ benötigt, um die relative Streuintensität in einen Winkel θ zu beschreiben. Da ACL Systeme monostatische Lidarsysteme sind, ist der Winkel zum Empfangsteleskop $\theta = \pi$:

$$\left(\frac{d\sigma_{sca,i,\lambda}}{d\Omega} \right)_{\pi} = \frac{\sigma_{sca,\lambda}}{4 \pi sr} \phi_{i,\lambda}(\pi) \quad (8)$$

Nachfolgend wird die Berechnung der optischen Querschnitte zuerst für Luftmoleküle und anschließend für Aerosole beschrieben.

2.2. Streueigenschaften von Molekülen

ACL Systeme verwenden eine Wellenlänge von etwa $1 \mu m$. Im Vergleich zu dieser Wellenlänge ist der Durchmesser von Luftmolekülen sehr klein. In diesem Fall können

deren Streueigenschaften nach der Rayleigh'schen Streutheorie erfolgen. Aerosole hingegen sind viel größer und erreichen Durchmesser über 50 μm , sodass für deren Streueigenschaften komplexere Streuberechnungen notwendig sind. Es ist daher empfehlenswert, die Streuberechnungen in Streuung an Molekülen und an Partikeln zu differenzieren.

$$\alpha_\lambda(z) = N_{\text{mol}}(z)\sigma_{\text{mol},\lambda} + \sum_{p=1}^{n_p} \alpha_p(z) \quad (9)$$

$$\beta_\lambda(z) = N_{\text{mol}}(z) \left(\frac{d\sigma_{\text{mol},\lambda}}{d\Omega} \right)_\pi + \sum_{p=1}^{n_p} \beta_p(z) \quad (10)$$

Sofern ein Modellsystem mehrere Atmosphärgase wie Stickstoff, Sulfat oder Ammonium separiert und deren Konzentration individuell berechnet, können die unterschiedlichen Streueigenschaften ebenfalls differenziert werden. Dies könnte für Vorwärtsoperatoren wichtig sein, die Lidarsysteme nachbilden deren Funktionsweise ebenfalls die Unterscheidung der Gase erlaubt. Sofern jedoch Aerosole im Vordergrund der Analyse stehen, können die Atmosphärgase in einer Gruppe zusammengefasst werden (hier „atmospheric gas“ genannt). Daraus folgt, dass die Anzahldichte an Luftmolekülen $N_{\text{mol}}(z)$ mit dem Gesetz Idealer Gase berechnet werden können

$$N_{\text{mol}}(z) = \frac{p_{\text{main}}(z)}{k T(z)}, \quad (11)$$

dabei ist p_{main} der Luftdruck in Pa, T ist die Temperatur in K und k ist die Boltzmann Konstante mit einem Wert von $1.3806488 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$.

Die Berechnung des Streuquerschnitts $\sigma_{\text{mol},\lambda}$ und Streuphasenfunktion $\varphi_{i,\lambda}(\pi)$ von Luftmolekülen kann nach empirischen Gleichungen erfolgen. In dieser Arbeit verwenden wir die Gleichungen von Buchholtz [1995], wonach der Streuquerschnitt von Luftmolekülen durch folgende Gleichung bestimmt wird

$$\sigma_{\text{mol},\lambda} = \frac{20 \pi^3 (n_{a,\lambda}^2 - 1)^2}{\lambda^4 N_{a,\lambda}^2 (n_s^2 + 2)^2} \frac{6 + 3p_{n,\lambda}}{6 - 7p_{n,\lambda}}, \quad (12)$$

Dabei ist λ die Wellenlänge in μm , $n_{a,\lambda}$ ist der Brechungsindex von Luft und $p_{n,\lambda}$ ist der Depolarisationsfaktor. Die Molekülanzahldichte von Luft gibt Buchholtz [1995] mit einem Wert von $n_{a,\lambda} = 2.54743 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ an und liefert außerdem eine Tabelle des Depolarisationsfaktors $p_{n,\lambda}$ für Wellenlängen zwischen 200 nm und 1000 nm. Für Wellenlängen $\lambda > 230 \text{ nm}$ beschreibt Buchholtz die Berechnung des Brechungsindex von Luft durch folgende Gleichung

$$(n_{a,\lambda} - 1) \cdot 10^8 = \frac{5791817}{238.0185 - \left(\frac{\mu\text{m}}{\lambda}\right)^2} + \frac{167909}{57.362 - \left(\frac{\mu\text{m}}{\lambda}\right)^2} \quad (13)$$

wobei die Wellenlänge λ ebenfalls in μm angegeben werden muss. Die Phasenfunktion von Luft $\phi_{a,\lambda}(\theta)$ kann durch

$$\phi_{a,\lambda}(\psi) = \frac{3}{4(1 + 2\psi_{a,\lambda})} \left((1 + 3\psi_{a,\lambda}) + (1 - \psi_{a,\lambda}) \cos^2 \theta \right) \quad (14)$$

berechnet werden, wenn θ der Streuwinkel ist. Der Faktor $\psi_{a,\lambda}$ wird definiert durch

$$\psi_{a,\lambda} = \frac{p_{a,\lambda}}{2 - p_{a,\lambda}}. \quad (15)$$

Letztendlich hängt die komplette Berechnung der Streueigenschaften von Luft mit dieser Methode lediglich von der Wellenlänge ab.

2.3. Streueigenschaften von Partikeln

Im Falle relativ großer sphärischer Streuer können die Streueigenschaften mit Hilfe von Mie's Lösung der Maxwell-Gleichungen (Mie [1908]) und den daraus hervorgegangenen Berechnungsalgorithmen (Wiscombe [1980]) berechnet werden. Für nichtsphärische Streuer kommen kompliziertere Algorithmen wie T-Matrix (Mishchenko et al. [2002]) oder die Diskrete-Dipol-Approximation (DDA, Draine and Flatau [1994]) zum Einsatz. Die T-Matrix Methode ist aus Sicht des Rechenzeitbedarfs wesentlich anspruchsloser, jedoch auf rotationssymmetrische Objekte (Kugeln, Ellipsen, Zylinder, Würfel, ...) limitiert. Mit DDA hingegen ist die Streuberechnung von nahezu beliebig geformten Teilchen möglich.

Zieht man den praktischen Nutzen für die in dieser Arbeit benötigten Streuberechnungen in Betracht, disqualifiziert sich DDA aufgrund des hohen Rechenaufwands. Als grobe Einschätzung aus unseren Studien ergibt sich ein um Faktor 10 höherer Rechenzeitbedarf pro Streuquerschnitt, wenn T-Matrix Routinen an Stelle von Mie Routinen verwendet werden. Der Rechenzeitbedarf von DDA hingegen liegt nochmals um bis zu Faktor 100 höher als der Bedarf einer T-Matrix Iteration. Dieser Unterschied wird größer bei zunehmendem Partikeldurchmesser. Als grobe Einschätzung steigt die Rechenzeit exponentiell mit dem Partikelradius an. Wir empfehlen daher die Verwendung von DDA für kleine Partikel oder für Studien zur Streueigenschaft bestimmter Partikelformen. Für die Einschätzung der Streueigenschaften nichtsphärischer Objekte bieten sich sowohl T-Matrix als auch die besonders schnellen Mie Algorithmen an.

Bei allen drei Methoden werden die Streueigenschaften oftmals nicht als Querschnitt sondern als Effizienz ausgedrückt. Die Extinktionseffizienz $Q_{ext,p,\lambda}$, Streueffizienz $Q_{sca,p,\lambda}$, und Rückstreuungseffizienz $Q_{bsc,p,\lambda}$ sind dabei definiert durch das Verhältnis aus dem optischen Querschnitt und dem physischen Querschnitt:

$$Q_{ext,p,\lambda} = \frac{\sigma_{ext,p,\lambda}}{\pi R_p^2}, \quad (16)$$

$$Q_{sca,p,\lambda} = \frac{\sigma_{sca,p,\lambda}}{\pi R_p^2}, \quad (17)$$

$$Q_{bsc,p,\lambda} = \frac{\left(\frac{d\sigma_{sca,p,\lambda}}{d\Omega} \right) \pi}{\pi R_p^2}, \quad (18)$$

Dabei ist R_p der Radius eines Partikeltyps p , angegeben in Meter, wodurch die Effizienzen dimensionslose Größen sind

Unsere Auswahl einer Streuroutine für Mie Berechnungen fiel auf die IDL Prozedur "mie_single" des Department of Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics (AOPP) der Universität Oxford. Die Prozedur benötigt den Realteil m und den Imaginärteil m' des Brechungsindex sowie einen Größenparameter X als Eingangsgrößen und berechnet die entsprechenden Effizienzen für diesen Streuer. Der Größenparameter X_{λ,R_p} hängt von dem Verhältnis von Wellenlänge λ und Partikelradius R_p ab:

$$X_{\lambda,R_p} = \frac{2\pi R_p}{\lambda}. \quad (19)$$

Wenn die Streueigenschaften vom Verhältnis zwischen Wellenlänge und Radius abhängt, können zwei Streuer unterschiedlicher Größe dieselben optischen Eigenschaften haben,

sofern sie mit Licht unterschiedlicher Wellenlänge beleuchtet werden. Diese Eigenschaft kann von großem Vorteil sein, um die Rechenzeit und den benötigten Speicherplatz einer Abruftabelle der Streueigenschaften zu reduzieren.

2.4. Partikelverteilungsfunktionen

Die unendliche Vielzahl an Variationen der Größe, Form und Brechungsindizes von natürlichen Aerosolgemischen erfordert eine vereinfachte Darstellung innerhalb des Modells. Hierfür haben sich drei Darstellungsweisen etabliert: die Einteilung in diskrete Typen, in diskrete Klassen oder beschrieben durch kontinuierliche Verteilungsfunktionen. Während der Partikelradius als kontinuierliche Funktion verstanden wird, sind unterschiedliche Aerosoltypen in Hinsicht auf den komplexen Brechungsindex weiterhin diskret und die Berechnung des Extinktionskoeffizienten und Rückstreuungskoeffizienten aus diesen Verteilungsfunktionen erfolgt nach folgenden Gleichungen

$$\alpha_{p,\lambda}(z) = \sum_{k=1} \int_{R_{\min}}^{R_{\max}} n_k(R, z) \sigma_{\text{ext},m_k,m'_k}(X_\lambda(R)) dR, \quad (20)$$

$$\beta_{p,\lambda}(z) = \sum_{k=1} \int_{R_{\min}}^{R_{\max}} n_k(R, z) \sigma_{\text{ext},m_k,m'_k}(X_\lambda(R)) dR, \quad (21)$$

Dabei beschreibt $n_k(R, z)$ die Anzahldichtefunktion in Abhängigkeit des Radius R für den Aerosoltyp k in einer Entfernung z . Wird das Integral feinskalig diskretisiert, ist die Streuberechnung für jeden diskreten Radius durchzuführen was die Berechnung recht aufwändig gestaltet. Alternative Methoden sind die Diskretisierung des Integrals in größere Intervalle und das Nutzen von Abruftabellen oder die Faltung von Funktionen.

Meist verwendet das Modell diskrete Typen oder Klassen für die Repräsentation der Aerosolanzahldichten. Diskrete Klassen beschreiben Aerosole, deren Größe durch Klassengrenzen definiert ist – vergleichbar eines Partikelgrößen-Histogramms. Innerhalb einer Klasse haben die Aerosole denselben komplexen Brechungsindex und keinen bestimmten Durchmesser.

Werden Aerosolegruppen als diskrete Typen dargestellt, haben diese einen fest definierten Radius und sonst ebenfalls identische Eigenschaften. Diese Darstellung ist einerseits sehr präzise in Hinsicht auf die Größe, erzeugt jedoch auch eine hohe numerische Sensitivität: Wenn der festgelegte Radius der Gruppe nur geringfügig variiert können starke Abweichungen der Streueigenschaften der ganzen Gruppe die Folge sein. Wie auch bei

den diskreten Klassen muss hier eine den jeweiligen Aerosoltyp repräsentierende Streueigenschaft berechnet werden.

Dieser Schritt leuchtet auch aus dem Hintergrund ein, dass die Partikelgrößenverteilungen von natürlichen Aerosolen ebenfalls nicht durch einen Dirac-Puls beschrieben werden, sondern ganz gegenteilig als Verteilung. Wir definieren daher repräsentative Streueigenschaften durch Mittelwertbildung und bezeichnen die Repräsentativwerte als „Effektive“ optische Querschnitte. Im Fall der Vulkanasche mit lediglich einer unterscheidbaren Aerosolspezies (Vulkanasche) mit einem definierten Brechungsindex würden die Effektivwerte folgendermaßen berechnet

$$\overline{\sigma_{\text{ext},R_d,\lambda}} = \frac{1}{R_{db} - R_{da}} \int_{R_{da}}^{R_{db}} Q_{\text{ext}}(X_{\lambda,R_d}, m, m') \pi R_d^2 dR_d, \quad (22)$$

$$\overline{\sigma_{\text{bsc},R_d,\lambda}} = \frac{1}{R_{db} - R_{da}} \int_{R_{da}}^{R_{db}} Q_{\text{bsc}}(X_{\lambda,R_d}, m, m') \pi R_d^2 dR_d, \quad (23)$$

wobei R_{da} und R_{db} die Grenzen der jeweiligen Größenklasse R_d sind. Für die praktische Berechnung am Rechner werden die Integrale diskretisiert

$$\overline{\sigma_{\text{ext},R_d,\lambda}} = \frac{1}{n_{\text{samples}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{samples}}} Q_{\text{ext}}(X_{\lambda,R_{d_i}}, m, m') \pi R_{d_i}^2, \quad (24)$$

$$\overline{\sigma_{\text{bsc},R_d,\lambda}} = \frac{1}{n_{\text{samples}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{samples}}} Q_{\text{bsc}}(X_{\lambda,R_{d_i}}, m, m') \pi R_{d_i}^2, \quad (25)$$

dabei ist n_{samples} die Anzahl an Stichproben für die Mittelung und R_{d_i} ist eine Zahlenreihe aus Partikelradii, z.B. berechnet durch den Algorithmus

$$R_{d_i} = i \frac{R_{db} - R_{da}}{n_{\text{samples}}} + R_{da} \quad (26)$$

Diese Berechnung der Effektivwerte muss für jede diskrete Größenklasse durchgeführt werden, wodurch man eine Abruftabelle der effektiven optischen Querschnitte erhält. Mit dieser Vorarbeit reduziert sich die Arbeit des Vorwärtsoperators auf das Lösen der folgenden Summengleichungen

$$\alpha_{p,\lambda}(z) = \sum_{d=1} N_d(z) \overline{\sigma_{\text{ext}, R_d, \lambda}} \quad (27)$$

$$\beta_{p,\lambda}(z) = \sum_{d=1} N_d(z) \overline{\sigma_{\text{bsc}, R_d, \lambda}} \quad (28)$$

wobei N_p die vom Modell berechnete Anzahldichte der Größenklasse d ist.

Würde das Modell mehrere Partikeltypen k (mit dem jeweiligen Brechungsindex (m_k, m'_k)) unterscheiden, würde sich die Berechnung des Extinktionskoeffizienten und des Rückstreukoeffizienten auf folgende Summenformel erweitern:

$$\alpha_{p,\lambda}(z) = \sum_{d=1} \sum_{k=1} N_{d,k}(z) \overline{\sigma_{\text{ext}, R_d, m_k, m'_k, \lambda}}, \quad (29)$$

$$\beta_{p,\lambda}(z) = \sum_{d=1} \sum_{k=1} N_{d,k}(z) \overline{\sigma_{\text{bsc}, R_d, m_k, m'_k, \lambda}}. \quad (30)$$

Für den Eyjafjallajökull Fall jedoch gibt es nur einen Aerosoltyp „volcanic ash“ in 6 Größenklassen d (1 μm , 3 μm , 5 μm , 10 μm , 15 μm , und 30 μm Durchmesser). Ergebnisse der Berechnung der effektiven optischen Querschnitte sowie deren Sensitivitäten wird im dritten Arbeitspaket behandelt.

2.5. Transmission

Sofern der Operator die Vertikalausschnitte aus dem Modellfeld erhält (vertical column), kann die Berechnung der Transmission durchgeführt werden. Im Fall der vertikal messenden ACL Systeme besteht die Extraktion aus dem Auslesen des Modellgitters an der Koordinate der Ceilometerstation über alle Höhengschichten.

Die absolute Höhenangabe ist für diesen Term nicht von Bedeutung sondern die Dicke der einzelnen Schichten. Aufgrund der variablen Höheneinteilung vieler Modelle wie auch COSMO-/ICON-Art muss die Schichtdicke der einzelnen Schichten explizit angegeben oder für jeden geografischen Standort neu berechnet werden.

Für die Beschreibung des vertikalen Modellgitters haben sich die Begriffe "minor levels" und "major levels" etabliert. Minor levels sind die Grenzen der Höhengschichten, für die Grenzüberschreitende Variablen wie die Windgeschwindigkeiten definiert sind. Major levels befinden sich im arithmetischen Mittel zwischen den minor levels und sind der Ort für die der Großteil der Variablen definiert ist, wie zum Beispiel Temperatur, Druck und letztendlich auch die Aerosolkonzentration

Die Berechnung der Transmission erfolgt durch die Diskretisierung des Höhenintegrals im Exponentialterm:

$$T_{\lambda}(z) = \exp \left(-2 \sum_{z=0}^{n_z(z)} \alpha_{\lambda}(z) \Delta h(z) \right), \quad (31)$$

wobei $n_z(z)$ die Anzahl der Schichten zwischen der untersten und der momentanen Schicht ist und $\Delta h(z)$ ist die Dicke der Schichtnummer z .

Daraus wird ersichtlich, dass für die Berechnung des Transmissionsterms und letztendlich des Lidarprofils das gesamte Profil berücksichtigt werden muss: Befinden sich viele Streuer in der planetaren Grenzschicht (planetary boundary layer, PBL), wird das Signal dadurch stark geschwächt und Signale aus höheren Schichten werden vom Instrument schwächer wahrgenommen als dies in einer Aerosolfreien Grenzschicht der Fall wäre. Dieses Faktum ist besonders dann problematisch, wenn die Abschwächenden Schichten entweder nicht erkannt wurden oder in den Messdaten nicht erscheinen, weil z.B. bodennaher Nebel das Signal zerstreut bevor ein Überlapp zwischen dem Empfangs- und Sendeteleskop erreicht wurde.

2.6. Modell-Interface und Programm-Optimierungen für die Reduzierung von Rechenzeit

Neben der Optimierung der jeweiligen Codes auf effiziente Ausführung von Schleifen und sonstigen Berechnungen entsprechend der Stärken von IDL und FORTRAN wurden Abruftabellen der optischen Querschnitte erzeugt. Die Abruftabellen haben drei Dimensionen: Größenparameter $X_\lambda (R_p)$, Realteil des Brechungsindex m und Imaginärteil des Brechungsindex m' . Die Abruftabellen decken einen großen Bereich an Größenparametern ab. Der nach unserer Einschätzung relevante Bereich der Größenparameter kann anhand der lidar-typischen Wellenlängen und der erwarteten Größenbereiche der Aerosole abgeschätzt werden. Im Fall der Vulkanasche wurde die Abruftabelle für einen Größenparameterbereich zwischen 0.157 ($\lambda = 4 \mu\text{m}$, Radius = 0.1 μm) und 1570 ($\lambda = 400 \text{ nm}$, Radius = 100 μm) ausgelegt.

Die relevanten Daten der Abruftabelle sind in Table 1 aufgelistet. Die Anzahl an numerischen Elementen beträgt $48 \cdot 10^6$, was bei der Verwendung von Fließkommazahlen doppelter Genauigkeit zu einem Datensatz mit einem Speicherbedarf von 384 MiB jeweils für Q_{ext} und Q_{bsc} führt.

Table 1: Properties of the Look-up Table for Mie scattering properties of volcanic ash particles

Parameter	Range	Increments	Element Number
Size parameter X_λ	1 to 601	0.5	1200
Real part m	1.49 to 1.69	0.001	200
Imaginary part m'	-0,001 to -0.011	0.00005	200

Die Auswahl der Real- und Imaginärteile erfolgt nach der in-situ Messung von Schumann et al. [2010]. Die Autoren führten Messungen des komplexen Brechungsindex bei einer Wellenlänge von 630 nm und 2000 nm durch und fanden Realteile zwischen 1.53 and 1.60 sowie Imaginärteile zwischen $7 \cdot 10^{-6}i$ und 0.004i. Aus diesen Werten schließen wir, dass der der Komplexe Brechungsindex bei der Wellenlänge der ACL Systeme (1064 nm) zwischen Realteilen von 1.57 bis 1.61 und Imaginärteilen zwischen 0.002i und 0.006i liegen muss. Der Brechungsindex, den wir als „wahren“ Referenzwert annehmen ist der Brechungsindex, den Schumann et al. [2010] für ihre "median (M)" Fallstudie ansetzen (1.59 - 0.004i).

Durch das Erstellen und Speichern der Abruftabelle können detaillierte Streuanalyseexperimente durchgeführt werden, ohne für jedes Experiment die Werte neu berechnen zu müssen. Der eigentliche Zweck ist aber die Berechnung der effektiven optischen Querschnitte, wie sie für den Vorwärtsoperator der Vulkanaschestudie benötigt werden (siehe Fig. 1).

Die eigens hierfür geschriebene Extraktionsroutine durchsucht die Abruftabelle nach gegebenen Größenklasseneinteilungen und Brechungsindizes. Nach dieser Abfrage werden die jeweiligen Werte extrahiert, gemittelt und als ASCII Wert in eine herkömmliche Textdatei oder als FORTRAN Namelist gespeichert. Dieser Schritt muss nur durchgeführt werden, wenn sich die Größenverteilung oder der zugrunde gelegte Brechungsindex ändert. .

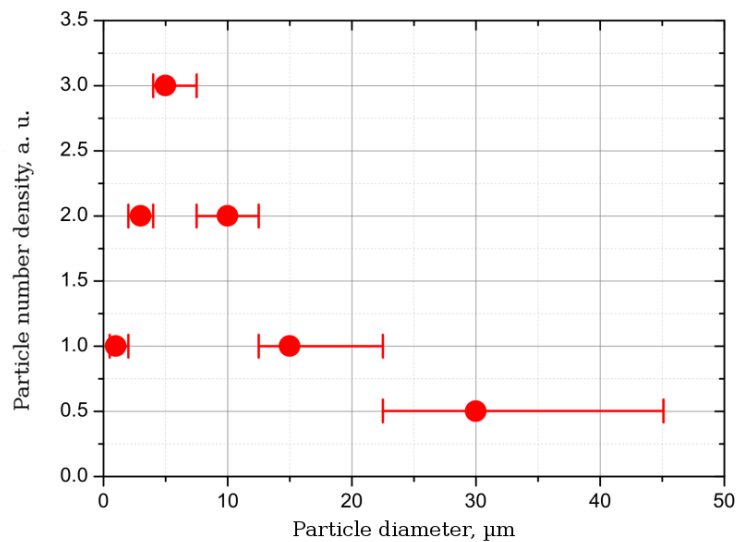


Fig. 1: Size classes of COSMO-ART for volcanic ash (red dots) and the size class ranges we defined for the calculation of the "effective" scattering properties of each size class. The ranges are the arithmetic mean between each size class. The lower margin of the first class is 0.5 times the smallest size class and the upper margin of the last size class is 1.5 times its size.

Das letztendliche Ergebnis dieser Vorgehensweise ist eine Liste der effektiven Extinktionsquerschnitte und Rückstreuquerschnitte für die Vulkanascheklassen von COSMO-ART. Diese Liste besteht schlussendlich aus 14 Zahlenwerten (6 Vulkanascheklassen und eine Luftmolekülklasse, jeweils für zwei Streuparameter). Nach der Ausführung unserer Prozeduren erhalten wir eine Liste wie in Table 2 aufgeführt.

Table 2: Scattering properties for the forward operator. The values were extracted from the large look-up tables we designed for both the extraction of effective scattering properties and for sensitivity studies. Refractive index: 1.59 - 0.004i

Parameter	Value	Unit
$\sigma_{\text{mol,ext}}$	$3.125 \cdot 10^{-32}$	m^2
$\sigma_{\text{mol,bsc}}$	$3.680 \cdot 10^{-33}$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$
$\sigma_{\text{par,1,ext}}$	$4.324 \cdot 10^{-12}$	m^2
$\sigma_{\text{par,2,ext}}$	$18.135 \cdot 10^{-12}$	m^2
$\sigma_{\text{par,3,ext}}$	$61.795 \cdot 10^{-12}$	m^2
$\sigma_{\text{par,4,ext}}$	$176.884 \cdot 10^{-12}$	m^2
$\sigma_{\text{par,5,ext}}$	$529.783 \cdot 10^{-12}$	m^2
$\sigma_{\text{par,6,ext}}$	$943.038 \cdot 10^{-12}$	m^2
$\sigma_{\text{par,1,bsc}}$	$0.369 \cdot 10^{-12}$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$
$\sigma_{\text{par,2,bsc}}$	$3.585 \cdot 10^{-12}$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$
$\sigma_{\text{par,3,bsc}}$	$5.803 \cdot 10^{-12}$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$
$\sigma_{\text{par,4,bsc}}$	$5.107 \cdot 10^{-12}$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$
$\sigma_{\text{par,5,bsc}}$	$18.654 \cdot 10^{-12}$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$
$\sigma_{\text{par,6,bsc}}$	$26.594 \cdot 10^{-12}$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$

Diese Liste kann nun in den Programmcode geschrieben werden um die Verarbeitungsgeschwindigkeit leicht zu erhöhen. Dieser Schritt ist allerdings aufgrund der eingeschränkten Anpassungsfähigkeit nicht zu empfehlen. Eine weitaus bessere Variante für die Übergabe externer Information an das Programm ist das Schreiben eines FORTRAN Namelist-Blocks. Dieser könnte für die Werte aus obiger Tabelle folgendermaßen aussehen:

```
&BALIFOP
  description = 'mol' 'par1' 'par2' 'par3' 'par4' 'par5' 'par6',
  sigma_ext = 3.125d-32 4.324d-12 18.135d-12 61.795d-12 176.884d-12 529.783d-12 943.038d-12,
  sigma_bsc = 3.680d-33 0.369d-12 3.585d-12 5.802d-12 5.107d-12 18.654d-12 26.594d-12,
/
```

Da diese Namelists typischerweise auch für die Einstellungsverwaltung der restlichen Modellkomponenten verwendet werden, bietet sich die Verwendung einer Namelist für die

Metainformationen des Vorwärtsoperators erst recht an. Das Modell-Setup kann dadurch geändert werden, ohne den Programmcode nach jeder Änderung der Parameter neu übersetzen zu müssen.

In Anbetracht der möglichen Output-Großen des Vorwärtsoperators (jegliche Variable des Atmosphärenteils der Lidargleichung) ist die Ausgabe aller Variablen nur in den seltensten Fällen nötig. Die wichtigsten Outputgrößen des Operators sind für ACL Systeme der abgeschwächte Rückstreuoeffizient $\gamma_{\lambda}(z)$. Sofern Vergleiche mit anderen Lidarsystemen vollzogen werden sollen, ist es beispielsweise bei einem Vergleich mit einem Raman Lidar sinnvoll, den Rückstreuoeffizient, den Extinktionskoeffizient sowie das Lidarverhältnis mit den (mit diesem Instrument direkt) messbaren Größen zu vergleichen. Das entsprechende FORTRAN90 Interface kann dementsprechend folgendermaßen strukturiert werden:

```
INTERFACE

  [ ... other definitions ]

  ! The BaLiFOp core
  SUBROUTINE BaLiFOp      (MinorLevels, n_dens_vec, sigma_ext, sigma_bsc, &
                          AlphaTotal, BetaTotal, Transmission, BetaAtten)

  IMPLICIT NONE
  DOUBLE PRECISION, INTENT(IN), DIMENSION(7)           :: sigma_ext, sigma_bsc
  DOUBLE PRECISION, INTENT(IN), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: MinorLevels
  DOUBLE PRECISION, INTENT(IN), DIMENSION(:,:), ALLOCATABLE :: n_dens_vec

  DOUBLE PRECISION, INTENT(OUT), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: AlphaTotal, BetaTotal, &
                                                              Transmission, BetaAtten

  END SUBROUTINE BaLiFOp

  [ ... more definitions ]

END INTERFACE
```

Die Variablennamen im Code entsprechen weitestgehend den Bezeichnungen in diesem Dokument. Der Operator benötigt vom Modell also alle Informationen mit denen er Rechnen soll. Das schließt mit ein, dass das Modell für das Einlesen der Streuquerschnitte sowie die Übergabe deren Werte an den Operator zuständig ist. Dasselbe gilt für die berechneten Ergebnisse des Operators, die zurück an das Modell übergeben werden. Diese Vorgehensweise ist wichtig um die Flexibilität des Operators zu gewährleisten. Dadurch kann auch im Modell selbst ausgewählt werden, welche Informationen wo, wann und wie gespeichert werden sollen.

Die notwendige Eingabevariablen sind die Vertikalprofile der 6 Vulkanasche-Anzahldichten `n_dens_vec`, die Streuparameter `sigma_ext` und `sigma_bsc` aus der Namelist sowie die Höhenangaben der minor height levels `MinorLevels`.

Weitere Optimierungen der Verarbeitungsgeschwindigkeit sind in Anbetracht der Reduzierung der Berechnungen kaum möglich. Einzig das Zwischenspeichern des

Höhenvektors und die Berechnung der Schichtdicken sind denkbar, allerdings muss dieser Schritt auf Modellseite ausgeführt werden.

Letztendlich ist sogar die Wellenlängenabhängigkeit des Operators in das Preprocessing eingeflossen und die Streueigenschaften müssen nicht während der Laufzeit aus der Abruftabelle extrahiert werden

3. Entwicklung der Grundlagen für Statistiken der Abweichung von Modell-Simulationen für Lidar-Daten

Die Grundlage für statistische Vergleiche zwischen COSMO-ART und Messungen des ACL Netzwerks sind Datensätze gleicher Zeit- und Höhenintervalle desselben Ortes und idealerweise gegeben in derselben Messgröße.

3.1. Datenaufbereitung

Der COSMO-ART Datensatz von Jochen Förstner (DWD, FE13) bestand aus fragmentierten Extrakten aus der Modell-Logdatei. Wir haben daher Programme geschrieben, die die einzelnen ASCII Dateien einlesen, sortieren, defragmentieren und als binäre NetCDF Daten im Archiv speichern. Dieser Schritt war nur für den provisorischen Datenaustausch nötig und ist für den direkten Aufruf des Operators aus dem Modell heraus nicht mehr nötig.

Nach der Konvertierung von ASCII zu Binärdaten verringerte sich der Speicheraufwand von 133 MB auf 37,4 MB und die Anzahl an Dateien von 2893 auf lediglich 61 NetCDF Dateien. Die Anzahl der NetCDF Dateien ist bedingt durch die Anzahl an angenommener ACL Station. Auch für die NetCDF Dateien wurden IDL Prozeduren für das Einlesen der Daten geschrieben, sodass lediglich eine Datei eingelesen werden muss um den gesamten Modell-Output einer Station zu erreichen.

Eine ähnliche Vorgehensweise betrifft die Output-Daten des Vorwärtsoperator: Nach erfolgreichem Durchlaufen des Operators werden die Daten ebenfalls als NetCDF Datei gespeichert. Dieser Schritt ermöglicht erstens eine bessere Nachvollziehbarkeit der durchgeführten Änderungen und zweitens erspart dieser Speichervorgang Zeit bei der Analyse, da der Operator nicht für jede Analysemethode erneut ausgeführt werden muss.

Die Zeit- und Höhenintervalle sowie die zeitliche und räumliche Auflösung sind bedingt durch die Einstellungen des Modells. Im gegebenen Fall der Eyjafjallajökull Simulation betrug der zeitliche Outputintervall 15 Minuten und die Anzahl an Höhenschichten wurde auf 40 festgesetzt. Die Vorhersage reichte bis zu 96 Stunden in die Zukunft, das vertikale Gitter bis zu einer Höhe von 24 km über dem Meeresspiegel.

Die Daten des ACL Netzwerks wurden von Ina Mattis (DWD, Hohenpeißenberg) ebenfalls als NetCDF Datei bereitgestellt. Die einzelnen Dateien haben eine Größe von etwa 24 MB und enthalten die Messdaten von 24 Stunden. Nach Angaben von Ina Mattis kann die empfangene Photonenzahl pro Schuss durch folgende Gleichung aus den Rohdaten berechnet werden:

$$N_{\text{rec}}(z, t) = \text{beta_raw}(z, t) \cdot \text{stddev}(t) + \text{base}(t)$$

Dabei ist `beta_raw` der gespeicherte Messwert, `stddev` ist die Standardabweichung des Profils und `base` ist ein Wert für das Hintergrundrauschen des Profils zur Zeit t . Für den Datenimport der Daten als auch für die Berechnung der Photonenzahl und anderer Größen wurde ebenfalls ein separates NetCDF Einlese-Programm geschrieben.

Im Laufe des Projekts wurde uns mitgeteilt, dass die ACL Geräte ihren Leistungsfaktor dynamisch anpassen, ohne diese Anpassung an irgendeiner Stelle im Datensatz zu vermerken. Da diese Selbstregulierung relativ spontan abläuft (profilbasiert) macht das eine nachträgliche Kalibrierung schwierig bis unmöglich. Die Berechnung des abgeschwächten Rückstreukoeffizienten aus diesen Daten ist daher nicht explizit möglich, da sowohl die Informationen zu den Kalibrierfaktoren fehlen als auch der Leistungsfaktor stark variiert. Diese Tatsache verringert die Vielfalt an möglichen sowie die Aussagekraft der durchgeführten quantitativen statistischen Auswertungen dramatisch.

3.2. Validierungsstudien

Der nächste Schritt in Richtung qualitativer und quantitativer Vergleiche besteht aus dem Sammeln und Abfragen von Daten. Zuerst müssen die Daten eingelesen und anschließend die Zeit- und Höhenintervalle extrahiert werden, in denen sowohl Simulationsergebnisse als auch Messwerte vorhanden sind.

In diesem Stadium können die Daten bereits verglichen werden (siehe fig. 2), weisen jedoch starke Unterschiede auf. Diese Unterschiede sind nicht zwingend auf Modellfehler zurückzuführen, sondern können rein visuell durch z.B. das Rauschverhalten des ACL Systems in Erscheinung treten. Aufgrund der großen Diskrepanz zwischen der Auflösung von Modell (15 min) und Beobachtung (15 s) müssen die höher aufgelösten Daten auf ein gröberes Gitter interpoliert werden. Für eine mathematische Auswertung des Vergleichs ist es äußerst empfehlenswert, die Ceilometerdaten auf das irreguläre Modellgitter zu interpolieren.

Ein praktischer Nebeneffekt der Mittelung ist, dass das Signal-zu-Rausch-Verhältnis (SNR) dadurch ebenfalls abnimmt. Das SNR ist proportional zu der Anzahl an Stichproben

N_{samples} :

$$\text{SNR} \propto \frac{N_{\text{samples}}}{\sqrt{N_{\text{samples}}}} = \sqrt{N_{\text{samples}}} \quad (32)$$

Wird der Datensatz zum Beispiel auf eine Gitterauflösung von 200 Meter und 30 Minuten interpoliert, verbessert sich das SNR des ACL Systems um Faktor

$$\sqrt{\frac{200\text{m}}{15\text{m}} \frac{1800\text{s}}{15\text{s}}} = 40 \quad (33)$$

sofern das Gerät bei einer vertikalen Auflösung von 15 m und einer zeitlichen Auflösung von 15 s arbeitet.

Aufgrund der variablen Höhenschichten von COSMO-ART ändert sich die SNR-Verbesserung durch Mittelung in Abhängigkeit der Höhe. Die Werte der SNR-Faktoren variieren dadurch zwischen Faktor 10.9 in bodennahen Schichten und Faktor 126 in den oberen Schichten (sofern die ACL Daten auch über die 15 Minuten Zeitauflösung gemittelt werden).

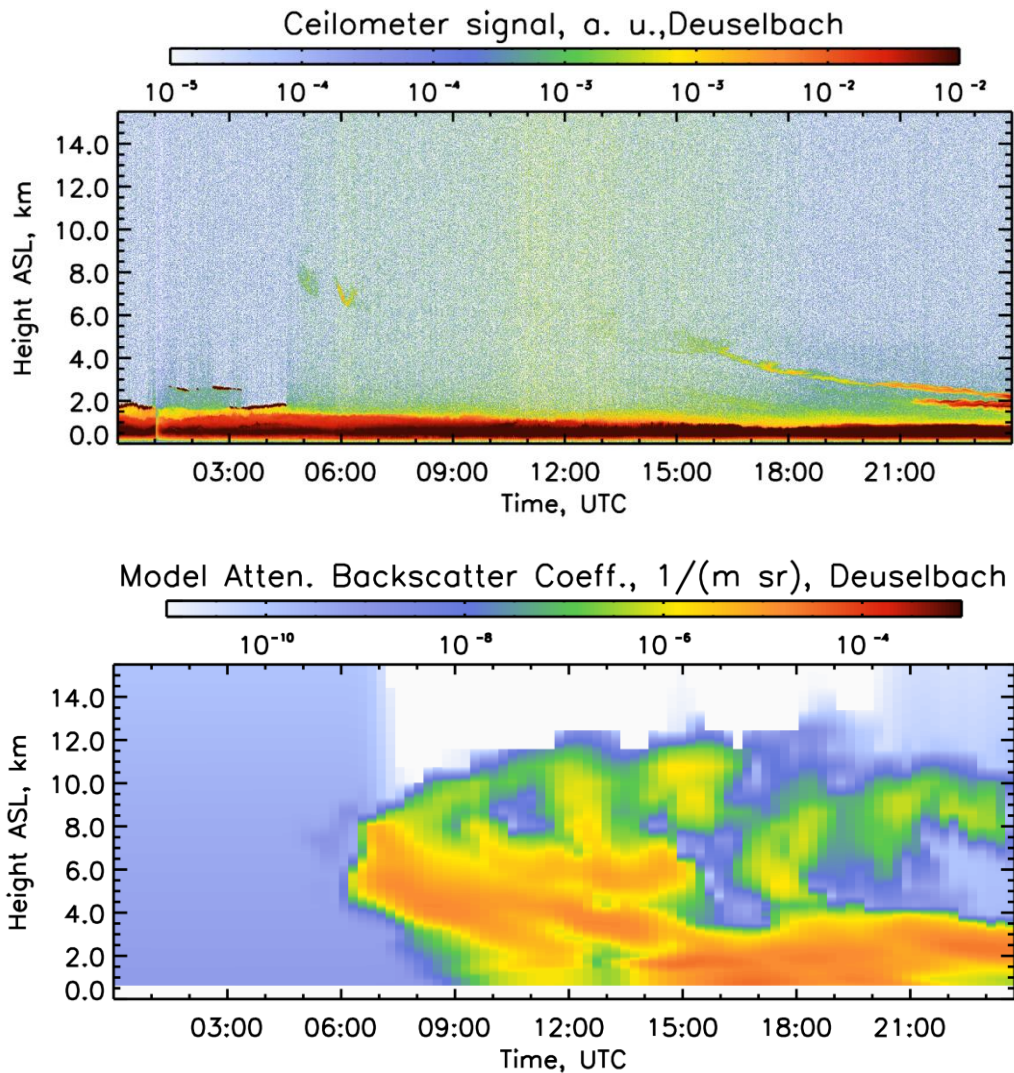


Fig. 2: Qualitative comparison between ACL (top) and forward model (bottom) at the station Deuselbach, Germany, at the 16th of April 2010.

Obwohl die problematische Firmware der ACL Systeme eine nachträgliche Kalibrierung und damit die Berechnung des abgeschwächten Rückstreukoeffizienten verhindert, wurden diese Schritte im Rahmen unserer Untersuchung dennoch durchgeführt. Diese Kalibrierung „von Hand“ soll die Methodik zeigen und einen quantitativen Vergleich ermöglichen.

Diese besteht aus der Berechnung der Photonenzahl aus den ACL Rohdaten und anschließend dem Entfernen der gerätespezifischen Größen aus der Lidargleichung. An Stelle der Berechnung des abgeschwächten Rückstreukoeffizienten aus den Atmosphäreneigenschaften wie es der Vorwärtsoperator macht, kann so aus dem Signal dieselbe Größe abgeleitet werden:

$$\gamma_{\lambda}^*(z) = \frac{I_{\text{rec},\lambda}(z) z^2}{I_{0,\lambda} \eta^* A_{\text{tel}} O(z) \Delta h(z)} \quad (34)$$

Dabei ist $I_{\text{rec},\lambda}$ die vom System gemessene Photonenzahl aus Entfernung z . Die ausgesendete Photonenzahl $I_{0,\lambda}$ wird berechnet aus der Pulsenergie pro Schuss (8 μJ), Δh ist die Höhenauflösung (15 m) und A_{tel} ist die Nettofläche des Empfangsteleskops (78.54 cm^2). Die Angaben basieren auf dem Datenblatt des Herstellers¹ und werden als repräsentativ und gültig angenommen.

Da wir keine Überlappfunktion vorliegen haben und die interessanten Bereiche oberhalb der planetaren Grenzschicht liegen, wurde die Überlappfunktion konstant auf einen Wert von 1 gesetzt (permanent full overlap).

Die Systemeffizienz η^* ist ein konstanter Faktor mit einem typischen Wert kleiner als 5 % bei hochleistungs-Lidargeräten. Da uns für die ACL Systeme keine Werte der Systemeffizienz vorliegen, wird diese Größe als lineare Kalibrierkonstante verwendet. In fig. 3 wird der Effekt der Entfernungskorrektur (Signal multipliziert mit z^2) gezeigt sowie ein unkalibriertes Profile des berechneten abgeschwächten Rückstreuoeffizienten zur Bestimmung eines passenden Kalibrierfaktors.

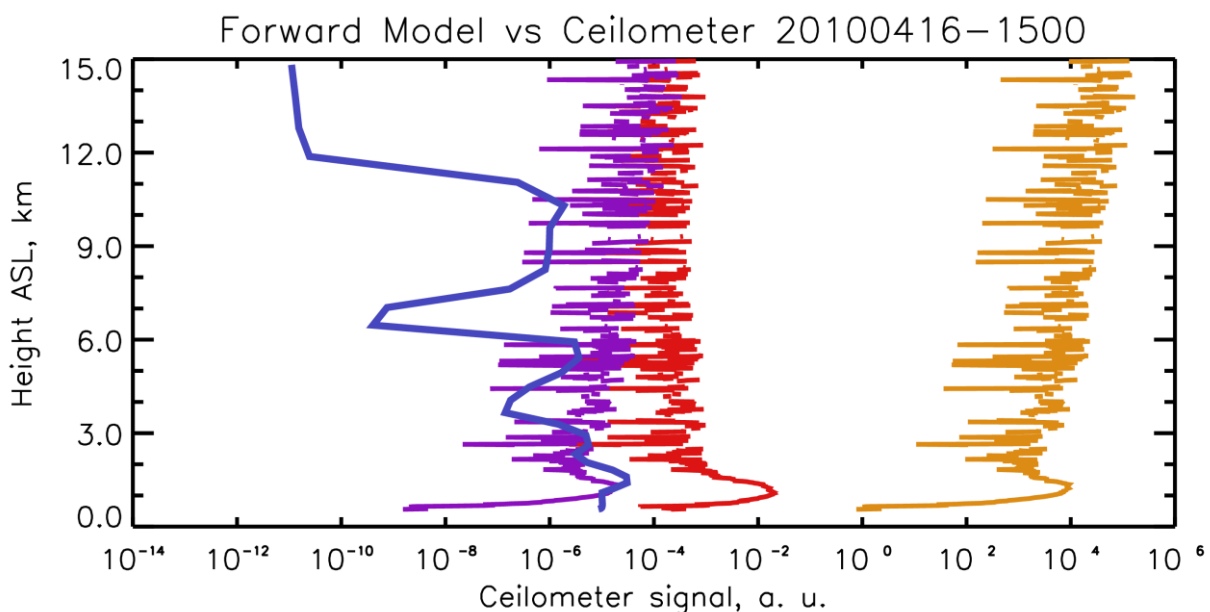


Fig. 3: Lidar profile of the ACL photon counts (red), the range resolved photon counts (purple), the offset-corrected ACL attenuated backscatter coefficient and the attenuated backscatter coefficient of the forward model at the station Deuselbach, the 16th of April 2010, 15:00 UTC. The assumed system efficiency is 0.0001

1 <http://www.lufft.com/de/produkte/optische-sensoren/ceilometer-chm-15k-nimbus-835000/>

Aus der Analyse mehrerer Profile konnte eine Kalibrierungseffizienz $\eta^* = 0.0001$ ermittelt werden, siehe fig. 4. Mit dieser Bias-Korrektur werden die Maximalwerte der Signale von Messung und Vorwärtsoperator ausreichend angeglichen. Die Durchführung der Kalibrierung anhand der Maximalwerte ist auch aufgrund des hohen Rauschniveaus sowie teils negativer Messwerte des ACL Systems nötig.

Ein qualitativer und quantitativer Vergleich zwischen Vorwärtsoperator und den mit $\eta^* = 0.0001$ kalibrierten ACL Messungen ist in Fig. 4 gezeigt. Aus dieser Darstellung wird deutlich, dass die Modellvorhersage relativ gut ist und die wesentlichen Strukturen der Messung in etwa wiedergibt. Die Maximalwerte der gezeigten Plots sind ebenfalls in derselben Größenordnung aufgrund der gewählten Kalibrierung. Was bei dieser Betrachtung jedoch auffällt, ist der wohl limitierte dynamische Wertebereich, den das Ceilometer darstellen kann. Während der Vorwärtsoperator auch feine, schwach rückstreuende Aschenschichten darstellt, können diese Bereiche bei der Messung nicht von Rauschen unterschieden werden.

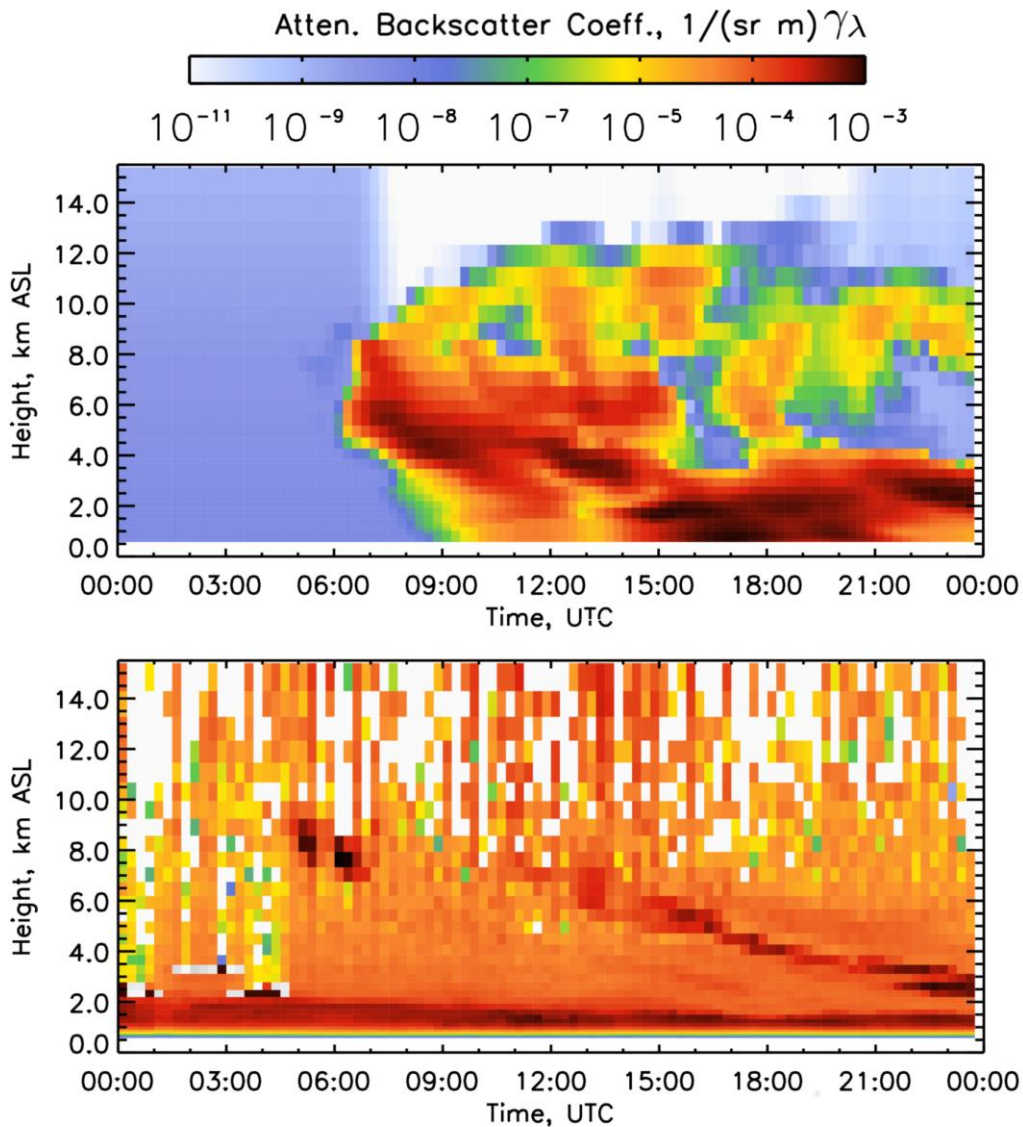


Fig. 4: Comparison of attenuated backscatter coefficient from the forward operator (top) and the calculated attenuated backscatter coefficient of the ACL with an assumed system efficiency of 0.0001 (bottom).

Eine Methode zur Auswertung der statistischen Zusammenhänge zwischen zweier Datensätze derselben Messgröße ist die Darstellung der Messpunkte als Scatterplot. Bei dieser Darstellung werden die Messwerte des einen Instruments auf der X-Achse gegen die Messwerte eines anderen Instruments auf der Y-Achse aufgetragen. Aus der Analyse der resultierenden Punktwolke können einige Grundlegende Zusammenhänge erkannt werden.

Im Idealfall messen die Instrumente denselben Wert an derselben Stelle, sodass die Punktwolke stets auf der 1:1 Geraden liegt. Ist die Mehrheit der Punkte über/unter oder links/rechts von der 1:1 Geraden repräsentieren diese Punkte Messungen bei denen ein Instrument einen Höheren oder niedrigeren Wert gemessen hat als das andere. Befinden

sich viele Punkte weit entfernt von der 1:1 Linie kann daraus auf streuende Messungen geschlossen werden, die sich jedoch in ihrer Gesamtheit herausmitteln.

In dieser Darstellung wird oft eine Regressionsanalyse zusätzlich durchgeführt. Dabei wird eine Gerade mit der Funktionsgleichung $f(x)=ax + b$ ermittelt, die die Punktwohle am besten repräsentiert. Im Falle perfekter Messungen würde die Regressionsgerade eine Steigung von $a=1$ und ein Bias von $b=0$ aufweisen. Misst ein Instrument systematisch zu hohe Werte, würde die Geradensteigung gleich 1 sein, der Versatz b jedoch dem zu korrigierenden Bias entsprechen. Ein praktisches Maß zur Bestimmung des mittleren Fehlers ist der root-mean squared error (RMSE). Sind die Punkte stark gestreut, ist der RMSE hoch; liegen die Werte auf der 1:1 Linie, beträgt der Wert null.

Ein Scatterplot des obigen Messintervalls ist in fig. 5 dargestellt. Aus dem Scatterplot ergibt sich eine Regressionsgeraden mit einer Steigung von 0,22 und die Punktwolke ist stark fragmentiert. Diese offenbar zusammenhangslosen Fragmente scheinen keine korrelierten Messungen zu sein und sind auf Objekte zurückzuführen, die die Messung von nur einem der beiden Instrumente beeinflusst. Im Fall der ACL Messung müssen die automatische Leistungsfaktorkorrektur, andere Aerosoltypen oder Wolken in Betracht gezogen werden, diese Fehler zu erzeugen.

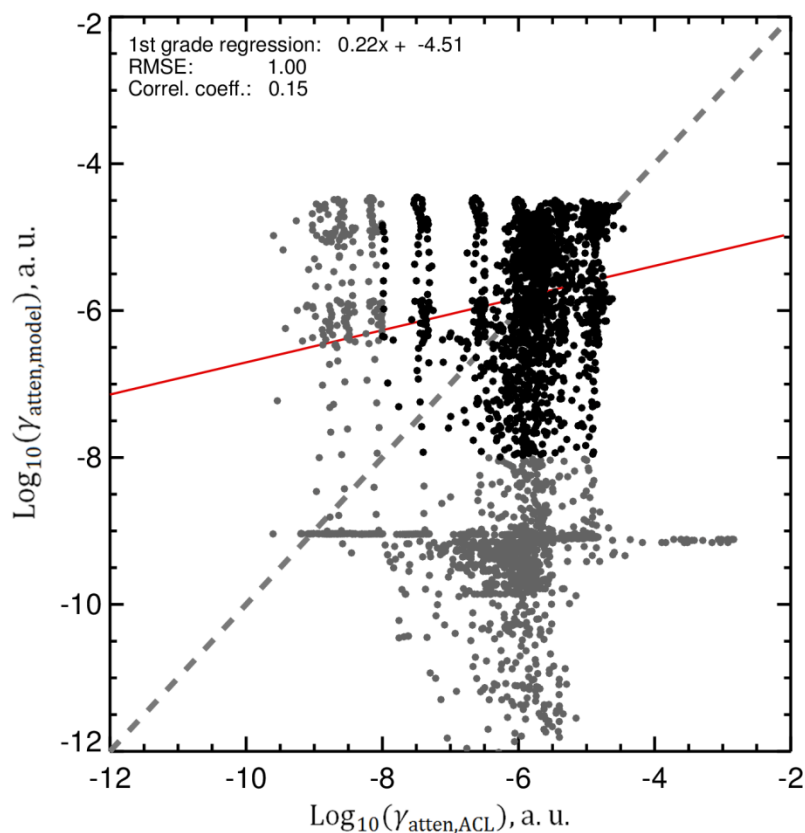


Fig. 5: Scatter plot of the attenuated backscatter coefficients of ceilometer (x-axis) versus forward operator (y-axis). Every dot represents one grid box as shown in the comparison above. Grey dots are below a threshold of $1.e-8$ and are not used for the regression analysis as the ceilometers dynamic range seems to be limited to this value of the attenuated backscatter coefficient.

Um diese Unsicherheiten aufgrund systematischer Unterschiede zu reduzieren, wurden alle Punkte innerhalb der PBL in ca. 2 km AGL entfernt, da hier viele Hintergrundaerosole vermutet werden. Das Ergebnis dieser Bereinigung ist in fig. 6 dargestellt. Auf diesem Plot zeigen sich weitaus weniger unkorrelierte Fragmente der Punktwolke und auch die Regressionsgerade hat eine Steigung von 0.71, was diese der Steigung der 1:1 Linie annähert. Der RMSE hat sich außerdem verringert und liegt anstatt bei einem Wert von 10 nun bei 7,2. Weitere Filter können das Ergebnis eventuell verbessern, allerdings leidet dann auch die Repräsentierbarkeit der Daten unter dieser Maßnahme.

Bei dieser Analyse erweist sich wieder die automatische Leistungskorrektur der ACL Systeme als besonders Problematisch. Die Regressionsanalyse geht von einer linearen Messung aus, sodass die Aussagekraft der Regressionsgeraden durch diese Leistungsschwankungen stark eingeschränkt ist. Die Mechanik der Leistungskorrektur scheint so programmiert zu sein, dass die Geräte einen bestimmten Wertebereich der Signalstärke nicht unter- bzw. überschreiten. In den dargestellten Daten ist dieser Wertebereich etwa auf einen abgeschwächten Rückstreuoeffizienten zwischen $10^{-7} \text{ m}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ and $10^{-5} \text{ m}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ festgelegt mit wenigen diese Werte überschreitenden Ausnahmen. Wird der Wertebereich unterschritten erhöht das Instrument den Leistungsfaktor und umgekehrt.

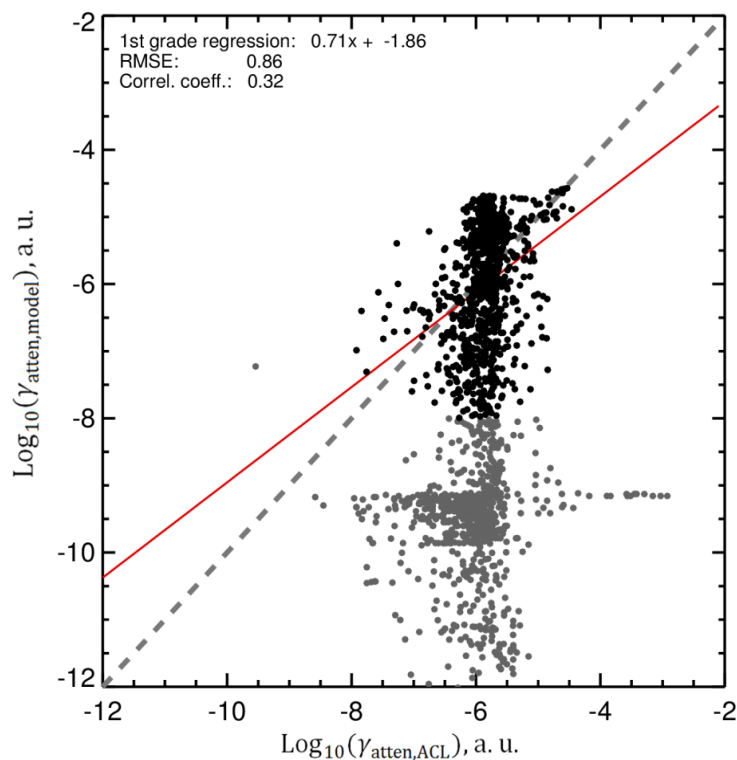


Fig. 6: The scatter plot where only the dots are shown which are above the planetary boundary layer (>2km). Again, for the regression analysis, the values below a value of $1.e-8$ are ignored.

Wird der relative Fehler zwischen den Messungen als Zeit-Höhen-Diagramm dargestellt, ergibt sich fig. 7. Dieser Darstellung kann eine relative gute Übereinstimmung der Beobachtungen und den Modellergebnissen entnommen werden. Der prozentuale Unterschied liegt unter 75 % in Bereichen der Aschewolke. Der Hintergrund ist jedoch unkorreliert, da der Operator das Messrauschen des Instruments nachvollziehbarerweise nicht nachbildet.

Vergleicht man diese Darstellung mit den Originaldaten tritt wieder die automatische Leistungsregulierung der Geräte in Erscheinung: Zu Beginn des dargestellten Zeitraums zwischen 00:00 UTC und 05:00 UTC befinden sich Wasserdampf Wolken über dem ACL System, welche sich durch starke Signale in einer Höhe von etwa 2 km AGL bemerkbar machen. In der Darstellung des relativen Fehlers kommen die Wolken allerdings nicht vor obwohl sie vom Operator nicht nachgebildet werden können und daher einen hohen Fehler erzeugen müssten. Scheinbar reguliert das ACL System die Leistung so weit herunter, dass die Wolke nicht sonderlich stärkere Signals liefert als feine Aschewolken.

Zusammenfassend zu diesem Arbeitspaket kann gesagt werden, dass durch die Verwendung des Vorwärtsoperators sowohl qualitative als auch quantitative Modell-Beobachtungs-Vergleiche möglich wurden. Wir haben die hierfür notwendigen Pre- und Postprocessing Schritte durchgeführt und die Ergebnisse visualisiert. Aufgrund der fehlenden Kalibrierungsinformationen und der automatischen Laserleistungsanpassung der ACL Systeme sind quantitative Vergleiche und deren statistische Auswertungen jedoch nur begrenzt aussagekräftig.

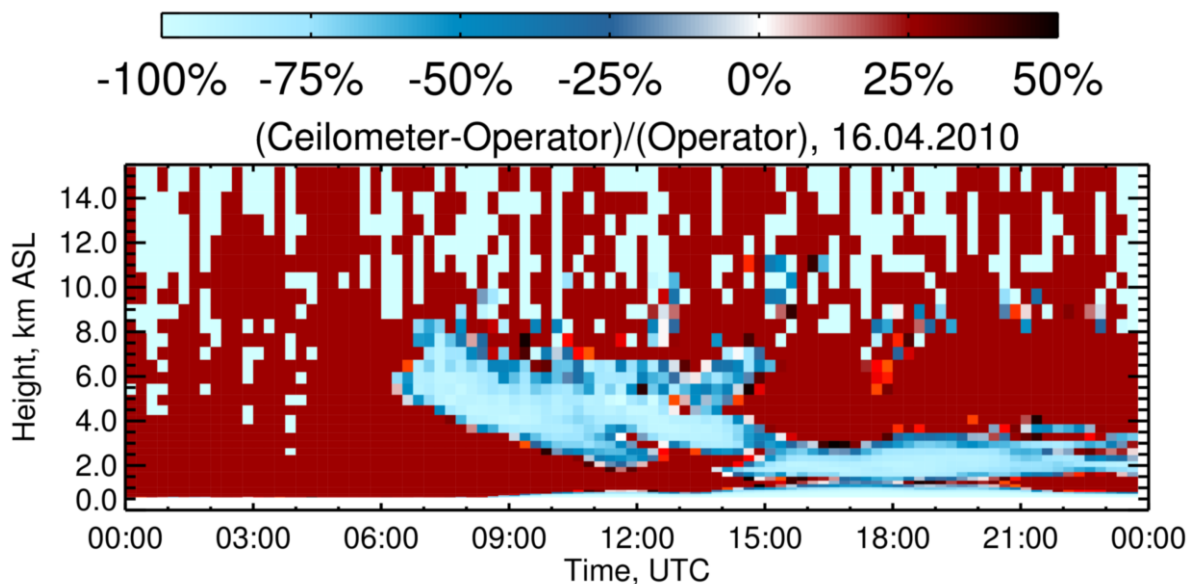


Fig. 7: Relative difference between calculated attenuated backscatter from the ACL system and the output of the forward operator. Negative values represent regions where the ceilometer measured less than the forward model predicted and vice versa. To reduce noise and invalid data, all values which are below an attenuated backscatter coefficient of $1.e-8$ were removed as shown in the scatter plots.

4. Entwicklung von Evaluierungsmethoden für Lidardaten und Vorbereitung der Assimilationsmethoden für Lidardaten (AP 3 und AP 4)

Die Analyse der Datensätze sowie die Auswahl von Beobachtungs- und Validierungsdatensätzen wurden bereits in der Dokumentation des AP 2 beschrieben und aufgrund der deutlichen Überlappung mit diesen Paketen nicht nochmals erläutert.

Für die Bewerkstelligung des dritten Arbeitspakets wurden umfangreiche Sensitivitätsstudien zu den Unsicherheiten der Lidarmodellierung durchgeführt. Diese Studien basieren auf Daten der Abruftabelle, welche schon in AP 1 für die Berechnung der effektiven optischen Querschnitte verwendet wurde. Die Studien sind dadurch konsistent zu den gezeigten Vorwärtsoperatorergebnissen.

4.1. Sensitivitätsstudien

Die Analyse der Variablenabhängigkeiten des Vorwärtsoperators haben sich folgende Unsicherheiten ergeben

- Unsicherheiten aus der Variation der Laserwellenlängen,
- Unsichere Annahmen zum komplexen Brechungsindex (sowohl Real- als auch Imaginärteil), sowie
- Unsicherheiten der Streueigenschaften realer Ascheteilchen und deren Form, die von Modell und Operator als sphärisch behandelt wird.

Im Folgenden zeigen wir Sensitivitätsstudien, die neben der Bestimmung der Unsicherheiten in erster Linie der Fehlerabschätzung des Vorwärtsoperators dienen

4.2. Erste Sensitivitätsstudie: Variationen der Wellenlänge

Die Streueigenschaften von Atmosphärenteilchen hängen unter anderem von der Wellenlänge des eintreffenden Lichts ab. Moderne Lidarsysteme werden daher mit

Techniken zur Stabilisierung der Versorgungselektronik sowie der Temperatur im Inneren des Gehäuses ausgestattet. Dadurch soll gewährleistet werden, dass die ausgesandten Laserpulse stets dieselbe Wellenlänge aufweisen. Bei kostengünstig hergestellten ACL Geräten ist diese Stabilisierung jedoch möglicherweise nicht immer optimal, manche Hersteller verzichten sogar komplett auf die Temperaturstabilität was zu Wellenlängenschwankungen von bis zu ± 10 nm führen kann. Die Auswirkung dieser Schwankung muss daher im Rahmen einer Studie abgeschätzt werden

Hierzu wurden die Extinktionseffizienz Q_{ext} und die Rückstreuungseffizienz Q_{bsc} für drei Wellenlängen bei einem konstanten komplexen Brechungsindex berechnet und gegen den Partikelradius aufgetragen (fig. 8).

Aus der Analyse ergibt sich eine Verschiebung der Kurven der Effizienzen entlang des Partikelradius. In Anbetracht der Abhängigkeit des Größenparameters vom Verhältnis der Wellenlänge zum Partikelradius, ist dies auch aus mathematischer Sicht zu erwarten.

Wir können daher Schwankungen der Wellenlänge vernachlässigen, sofern Geräte die ohnehin extremen Wellenlängenschwankungen unserer Studie von ± 20 nm nicht überschreiten. Durch die Berechnung der effektiven Effizienzen verringert die Sensitivität in Hinsicht auf die Wellenlänge nochmals.

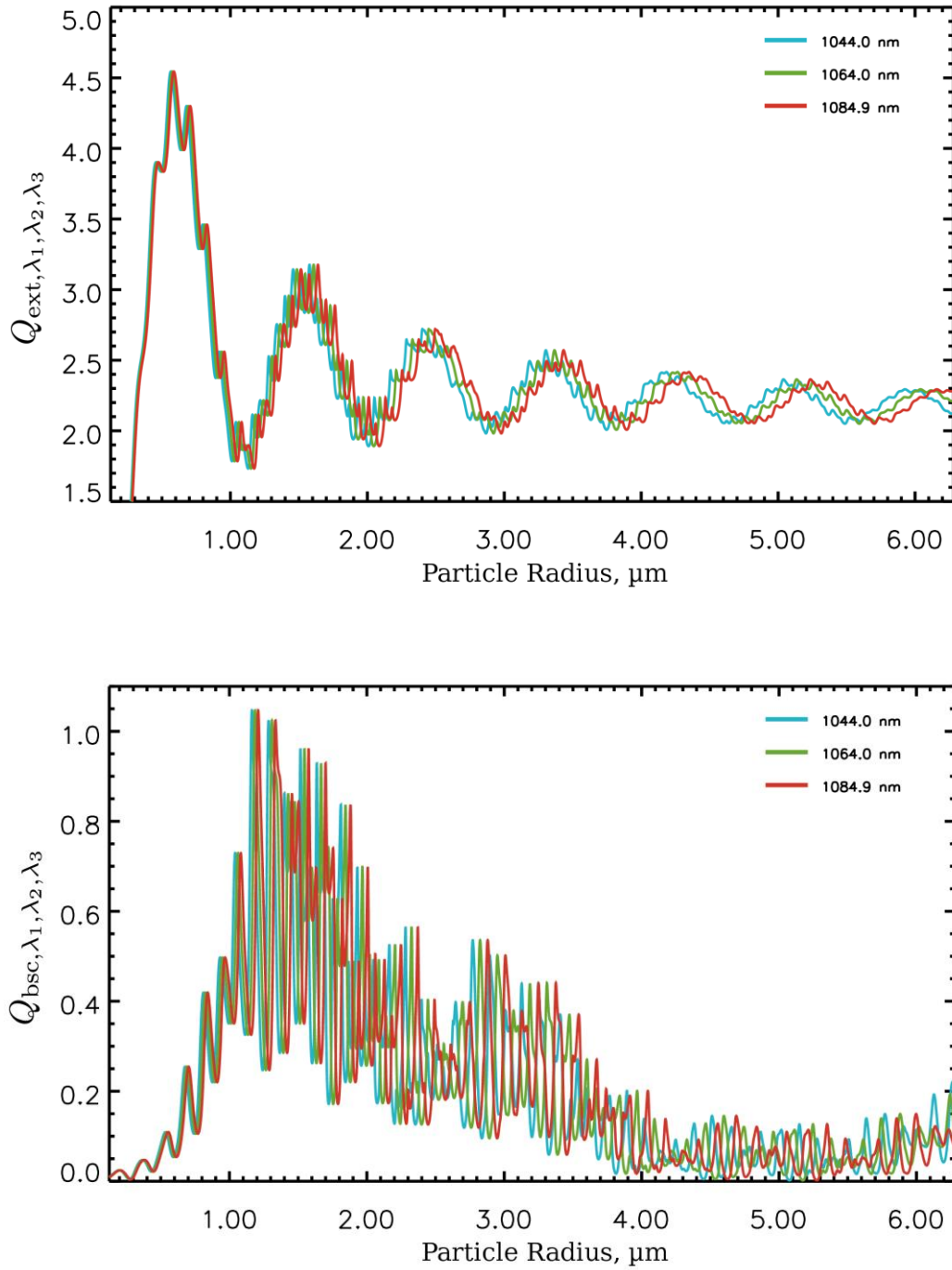


Fig. 8: Sensitivity study of the extinction efficiency (top) and the backscatter efficiency (bottom) to wavelength variations. The green line represents a wavelength of 1064 nm which is the wavelength of the ACL lasers used in the German network. The red and blue lines represent wavelengths ± 20 nm which is typically not reached by diode-laser driven ACL systems (variations of less than ± 1 nm)

4.3. Zweite Sensitivitätsstudie: Unsicherheiten des komplexen Brechungsindex

Der Komplexe Brechungsindex von den Vulkanascheaerosolen wurde mittels In-Situ Messung des Aschengemisches bestimmt. Da der komplexe Brechungsindex allerdings auch von der Wellenlänge, der hygroskopischen Eigenschaften der Partikel, der Partikelform und Stoffzusammensetzung abhängt, ist eine Schwankung des ermittelten Werts wahrscheinlich. Die Auswirkungen dieser Schwankungen auf die Streueigenschaften im Vorwärtsoperator müssen daher ebenfalls untersucht werden.

Trägt man Q_{ext} und Q_{bsc} gegen den Real- und Imaginärteil des Brechungsindex für einen konstanten Partikelradius auf, zeigt sich eine relativ starke Abhängigkeit der Streueffizienzen vom Brechungsindex, siehe fig. 9 und fig. 10. Während die Extinktionseffizienz eher auf variable Realteile reagiert als auf Änderungen des Imaginärteils, ist die Rückstreuungseffizienz hauptsächlich vom Imaginärteil des komplexen Brechungsindex abhängig.

Die relativen Änderungen der Extinktionseffizienz scheinen generell wesentlich geringer zu sein als die relative Änderung der Rückstreuungseffizienz im ausgewählten Bereich. Die starke Variation der Rückstreuungseffizienz ist von großer Bedeutung für das Vorwärtsmodell, da diese Schwankungen linear auf den Rückstreuungskoeffizienten und damit auch auf den abgeschwächten Rückstreuungskoeffizienten übergehen. Die relativen Unsicherheiten der Rückstreuungseffizienz betragen teils über 80 %.

Um diese Sensitivitäten zu verringern, wurden außerdem die Mittelungsverfahren angewendet, die wir im ersten AP beschrieben haben. Dazu wurden die entsprechenden Werte der jeweiligen Größenklasse aus der Abruftabelle extrahiert und mit der Anzahl an Werten $n_{samples}$ gemittelt. Ein Vergleich zwischen der Sensitivität bezüglich des komplexen Brechungsindex jeder Größenklasse ist in den Abbildungen 11 bis 14 dargestellt. Jeweils links positioniert sind die Plots der „scharfen“ Größenklasse, also für Partikel mit dem Radius der Größenklasse und rechts gegenübergestellt befinden sich die Plots nach durchgeführter Mittelung über die Größenklasse (mit „avg“ titulierte). Aus diesen Darstellungen wird ersichtlich, dass durch die Mittelung die Sensitivität der Effizienzen bezüglich des komplexen Brechungsindex stark reduziert wird.

Diese Analyse zeigt daher, dass – sofern möglich – eine Mittelung über Größenklassenintervalle sehr zu empfehlen ist. Je ungenauer die Informationen über den komplexen Brechungsindex, desto gröber müssen die Größenklasseneinteilungen sein. Feinere Größenklassen setzen umgekehrt auch genauere Informationen zum Komplexen Brechungsindex voraus. Dieser Zusammenhang ist vor allem für die Festlegung der Größenklassen und Aerosoldarstellungen zukünftiger Modellkonfigurationen wichtig.

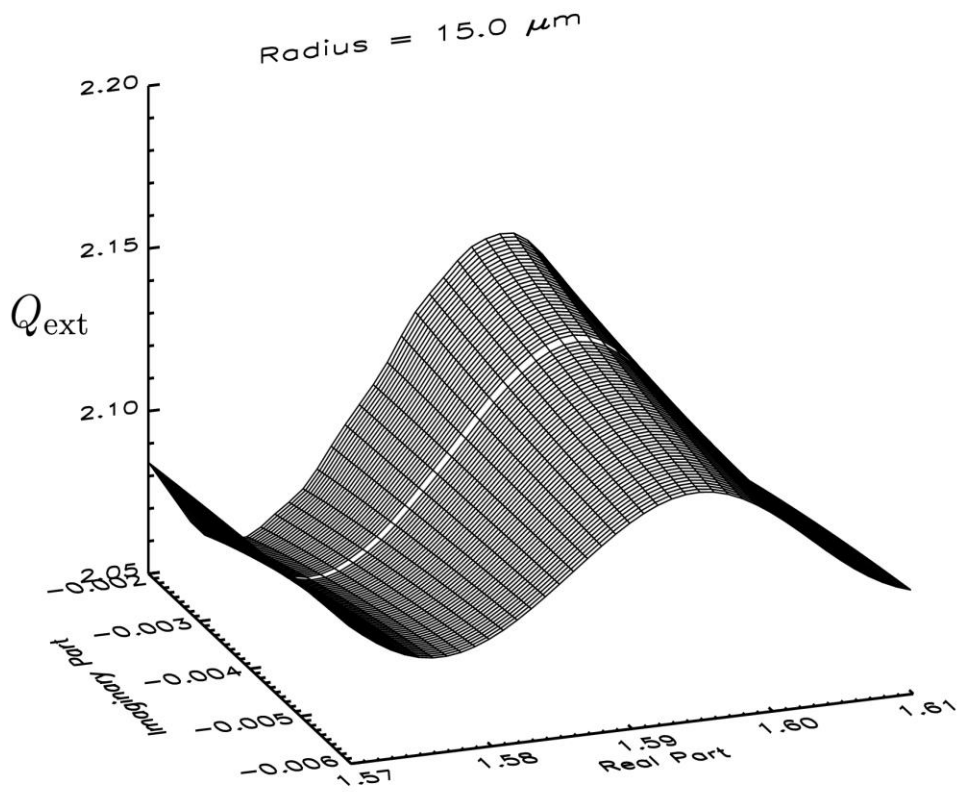


Fig. 10: Variations of the extinction efficiency depending on variable real and imaginary parts of the refractive index. This plot is created from the look-up table and for a fixed radius of 15 μm (6th ash size class).

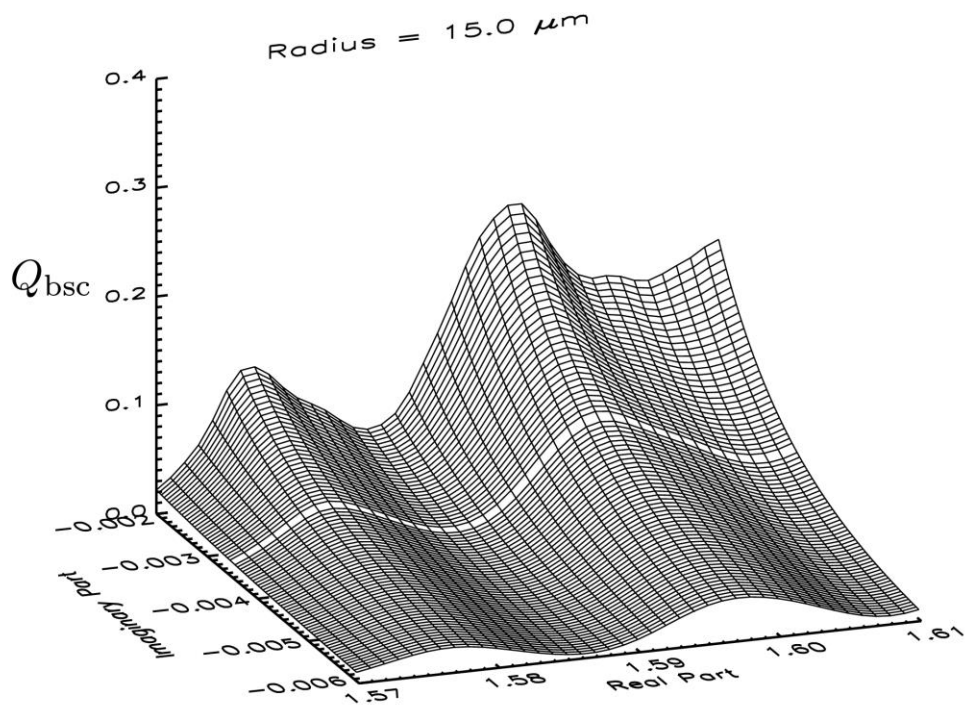


Fig. 9: The same plot but for the backscatter efficiency

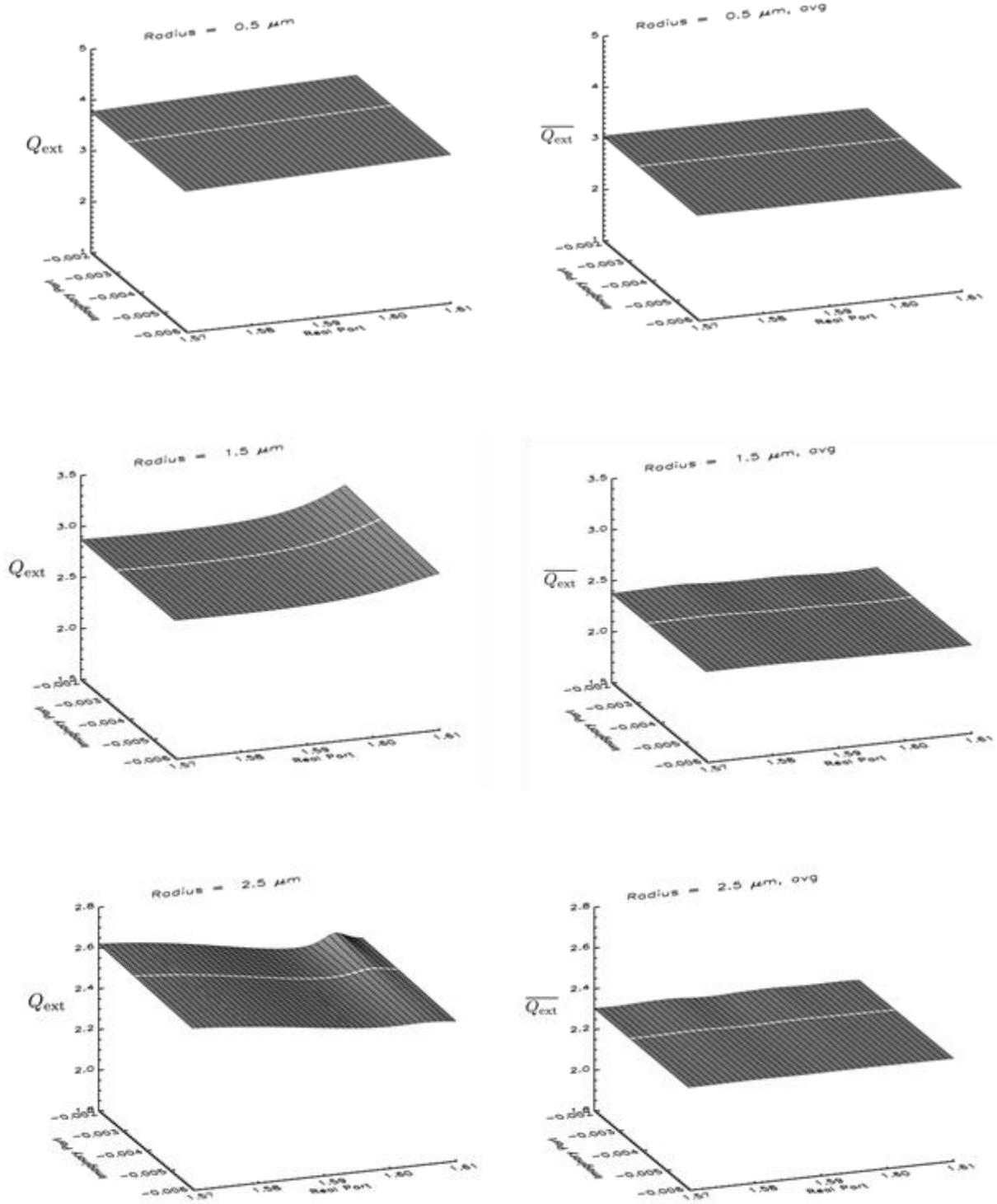


Fig 11: Refractive index sensitivity of the extinction efficiency of monodisperse size classes at 0.5 μm , 1.5 μm , and 2.5 μm (left column) against the refractive index sensitivity of the respective effective values of the size classes (right column).

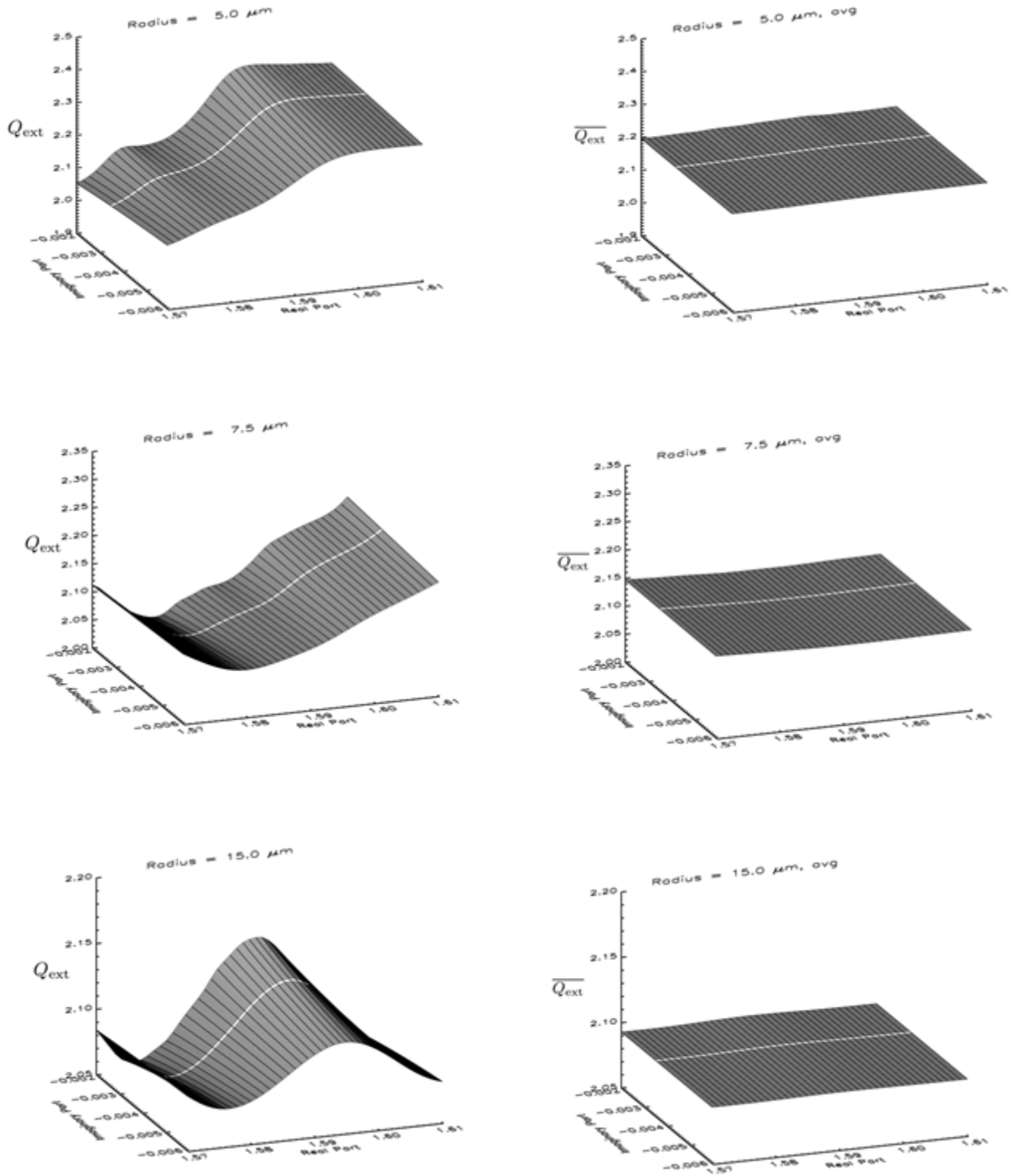


Fig 12: The same as fig.11 but for the size classes at 5.0 μm , 7.5 μm , and 15 μm in radius, respectively

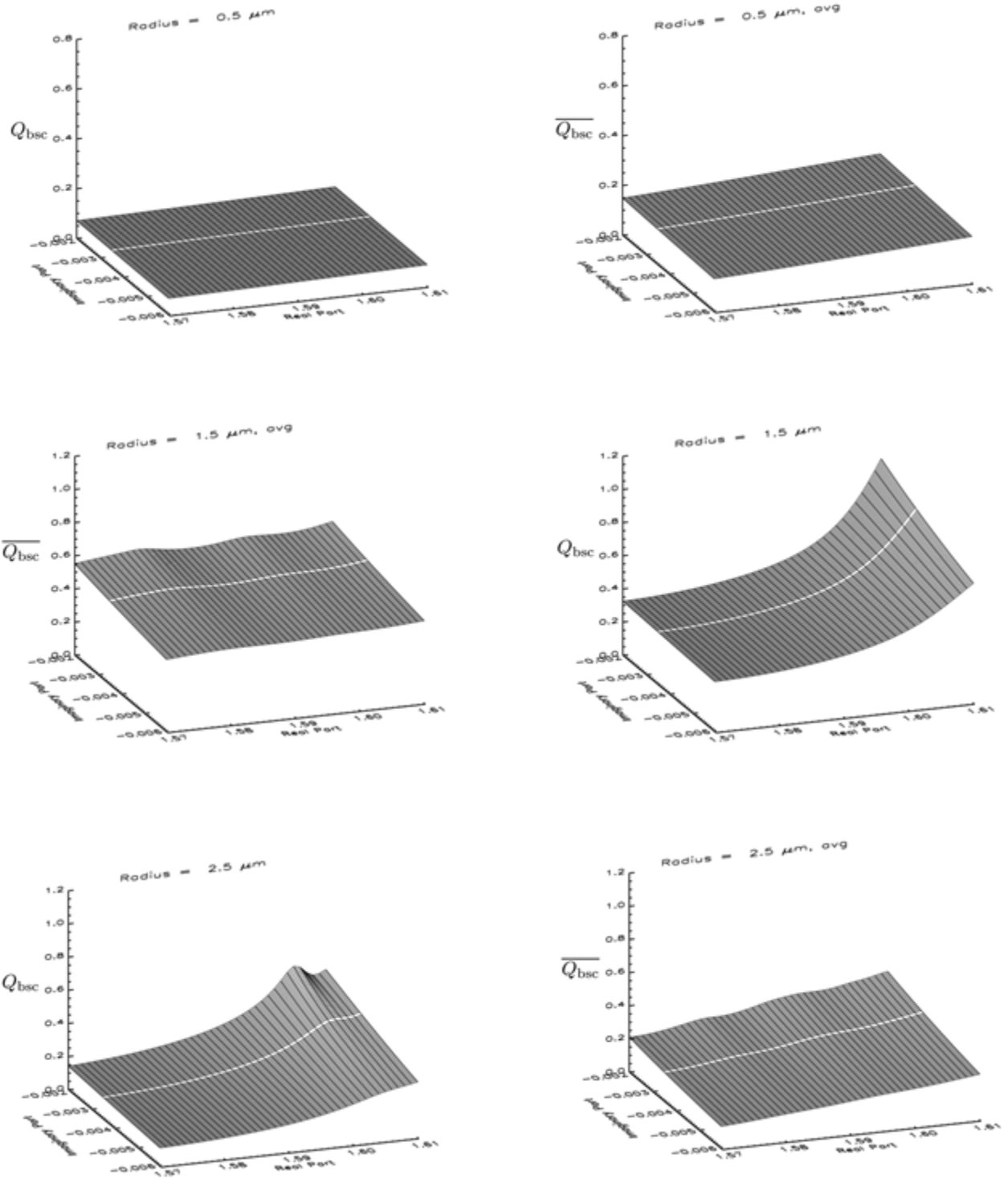


Fig 13: The same as fig. 11 but for the backscatter efficiency.

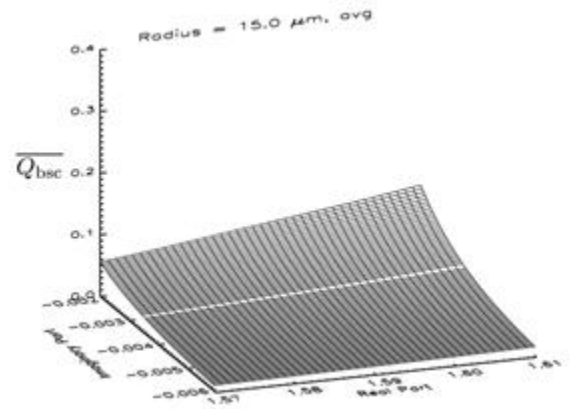
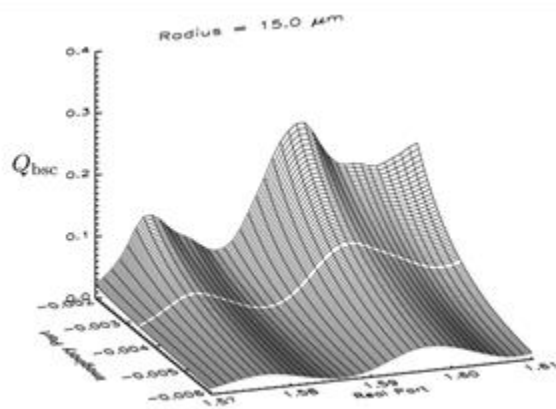
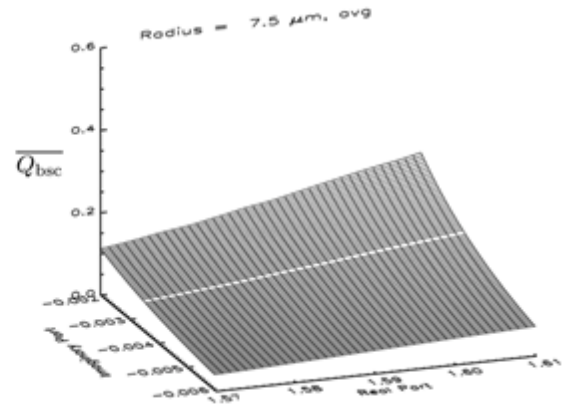
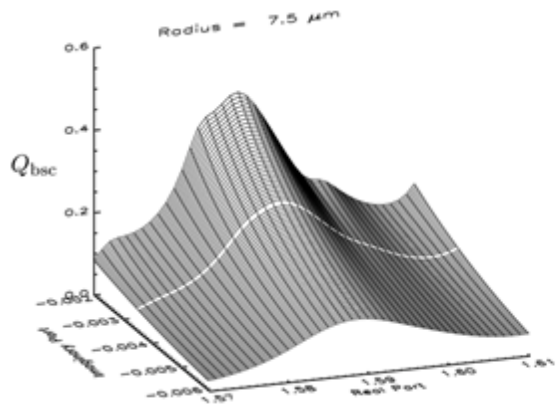
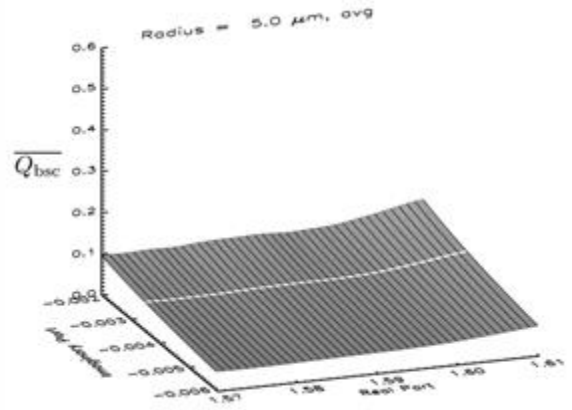
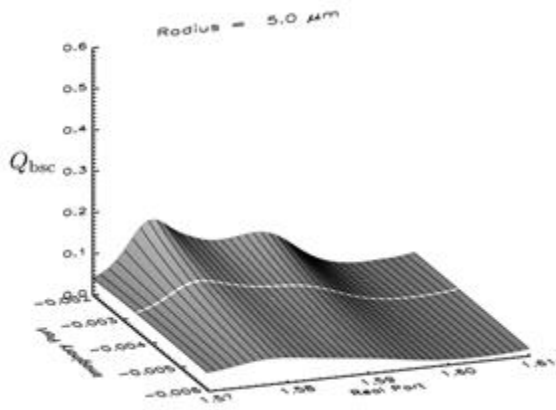


Fig 14: The same as fig. 13 but for the backscatter efficiency.

Um die absolute Variation der Effizienzen innerhalb des gegebenen Intervalls an Real- und Imaginärteilen des Brechungsindex' zu bewerten, wurden weitere Plots (fig. 15) angefertigt. Diese zeigen den Maximal-, Mittel- und Minimalwert der Extinktionseffizienz und Rückstreuungseffizienz in Abhängigkeit vom Radius.

Daraus werden die vorige Aussage der starken Sensitivität der Rückstreuungseffizienz sowie die schwache Sensitivität der Extinktionseffizienz gegenüber variablen Real- und Imaginärteilen bestätigt.

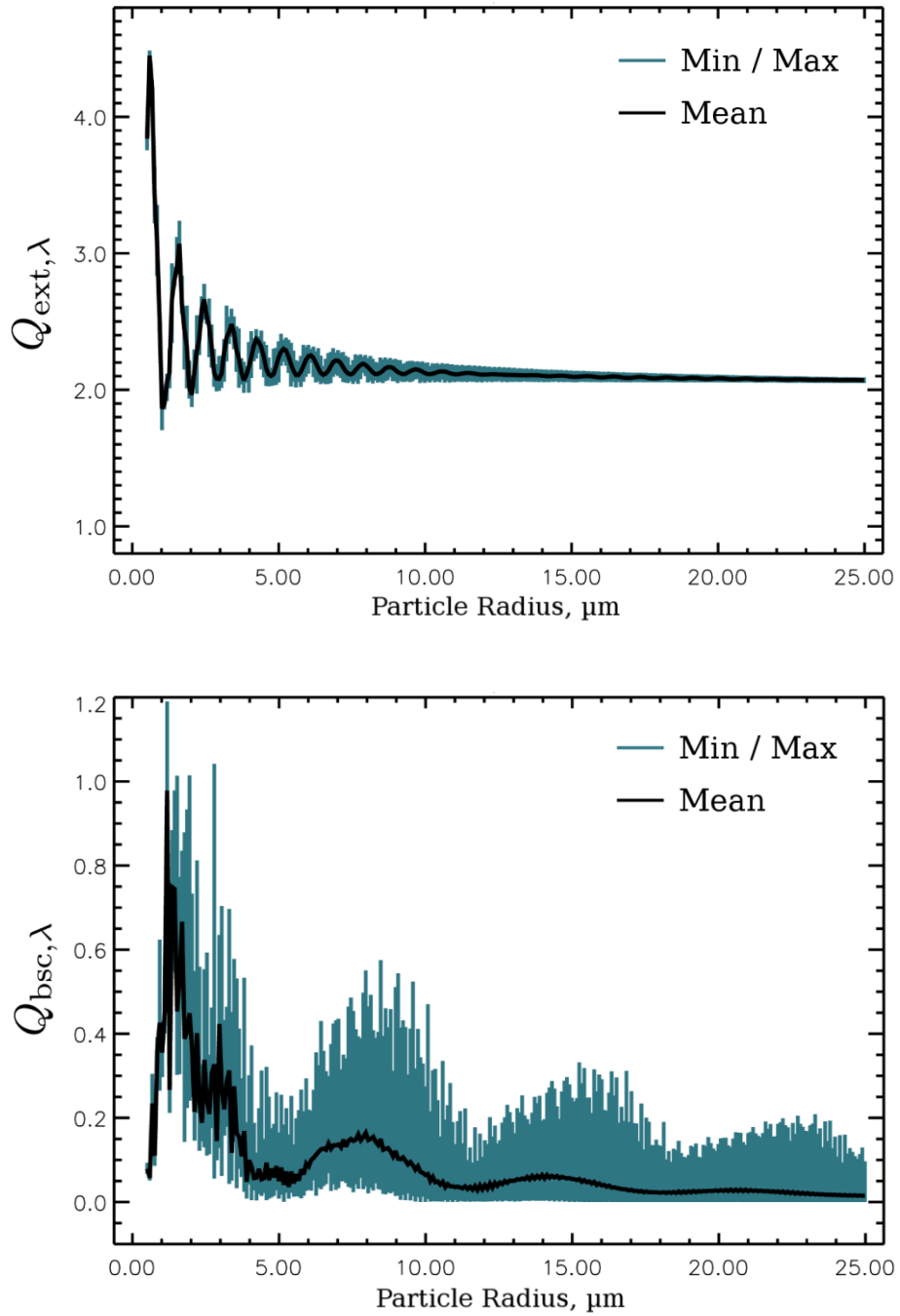


Fig. 15: Extinction efficiency (top) and backscatter efficiency (bottom) sensitivity analysis concerning uncertain refractive indices plotted against the particle radius. The black line indicates the mean value for the given range of refractive indices while the greygreen background represents the minimum and maximum value within the interval. While the extinction efficiency is relatively unaffected from the refractive index, the backscatter efficiency varies strongly within the given interval of refractive indices.

4.4. Dritte Sensitivitätsstudie: Einfluss der Partikelform auf die Streueigenschaften

Die komplexe Form von natürlich vorkommenden Aerosole sollte bei der Berechnung der Streueigenschaften berücksichtigt oder zumindest der Einfluss der Partikelform auf die Streueigenschaften bewertet werden. Mie Algorithmen ermöglichen viele Berechnungen pro Sekunde, können aber nur die Streueigenschaften sphärischer Teilchen bestimmen. Komplexere Methoden wie T-Matrix ermöglichen eine ähnlich schnelle Berechnungsgeschwindigkeit, können aber neben sphärischen Teilchen jegliche rotationssymmetrische Partikelform abbilden. Diese Sensitivitätsstudie sieht daher einen Vergleich vor zwischen den angenommenen sphärischen Teilchen (berechnet mit Mie oder t-Matrix Algorithmen) und einigen asymmetrischen Partikelformen vor.

Die von uns hierfür verwendeten t-Matrix Berechnungsprogramme stammen von Michael Mishchenko und Kollegen und können frei im Netz heruntergeladen werden². Eine Beschreibung des Ansatzes findet sich im Buch von Mishchenko et al. [2002] und die Dokumentation der Programmalgorithmen in der entsprechenden Veröffentlichung (Mishchenko and Travis [1998]).

Für die Durchführung der Studie wurde die „double-precision“ Version des FORTRAN Codes heruntergeladen und so modifiziert, dass das Programm als Funktion aufgerufen werden kann. Dieser Schritt ist notwendig, damit Radius-Intervalle innerhalb einer Schleife automatisch abgearbeitet werden können. Eine weitere Modifikation bestand im Auskommentieren der Text- und Dateiausgaben aus dem Programm, da dieses ursprünglich für die Analyse genau eines Partikeltyps gedacht war und eine Fülle an - für uns irrelevanten - Information exportiert. Die letzte Anpassung bestand in der Berechnung des Rückstreuquerschnitts im Code nach Mishchenko et al. [2002], eq. (9.10), Seite 267 und der Implementierung einer Übergabe an die Hauptroutine, sodass der berechnete Wert im Ausgabedatensatz gespeichert werden konnte. Die Funktion wurde anschließend in ein Hauptprogramm eingebettet, in der das Experiment konfiguriert und automatisiert ausgeführt werden konnte. Alle Einstellungen zur t-Matrix Funktion sowie zu den zu berechnenden Partikeleigenschaften waren so in der Hauptprozedur eindeutig definierbar.

Um die Methode zu validieren wurden sowohl der modifizierte t-Matrix Code als auch mie_single.pro für die Berechnung der Rückstreuquerschnitte und Extinktionsquerschnitte von Sphären gleicher Eigenschaften eingesetzt und das Ergebnis geplottet, siehe fig. 16.

2 http://www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko/t_matrix.html

Nachdem diese Untersuchung eine perfekte Übereinstimmung ergab, konnten nun die Streueigenschaften von sphärischen Partikeln mit den Streueigenschaften asphärischer Partikel verglichen werden. Eine Auflistung der während der Studie verwendeten Einstellparameter für den t-Matrix Teil ist in Table 1 zusammengefasst.

Die Einstellung zur Partikelbeschreibung erfolgt durch die Variable NP, die -1 für Kugelförmige Objekte, -2 für zylindrische Objekte und ein positiver Wert für sogenannte Chebyshev Objekte ist. Die Variable EPS steht für die Verzerrung des Objekts und entspricht dem Seitenverhältnis der kurzen zur langen Achse. Ein EPS Wert von 1 entspricht einer perfekten Kugel, ein Wert kleiner 1 definiert prolate und ein Wert größer eins definiert oblate Formen.

Table 1: Settings used within the t-matrix calculations for the particle shape sensitivity studies

Variable	Value	Effect
RAT	1	Use the equal-vol.-sphere radius
NPNAX	1	Mono disperse scatterer distribution
AXMAX	1	Mono disperse scatterer distribution
B	1D-1	Mono disperse scatterer distribution
NKMAX	-1	Mono disperse scatterer distribution
NDISTR	4	Mono disperse scatterer distribution
EPS	0.5 ... 1.5	Aspect ratio of the scatterer
NP	-1 or -2	Define spheres (-1) or cylinders (-2)
LAM	1064.e9	Wavelength
MRR	1.59	Real part of the refractive index
MRI	-0.004	Imaginary part of the refractive index
NPNA	19	Random angle number

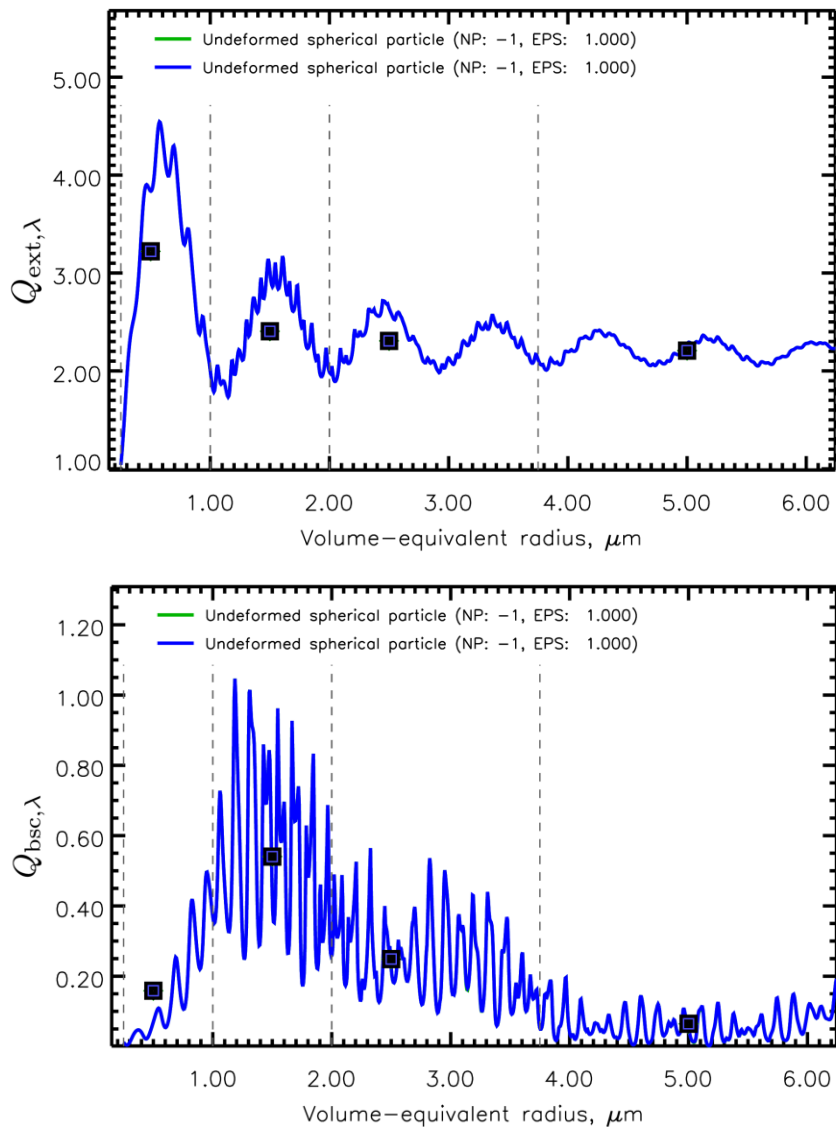


Fig. 16: Validation of t-matrix (blue line) and mie_single (green line) for a spherical particle. As the values of both routines are identical, the blue line covers the green line completely.

Der Vergleich der Extinktionseffizienz zwischen sphärischen und elliptischen Partikel ist in fig. 17 dargestellt. Die Extinktion von sphärischen und leicht elliptischen Teilchen scheint nur geringe Abweichungen voneinander zu zeigen. Mit zunehmender Streckung des Ellipsoids ergibt sich jedoch eine deutliche Frequenzverschiebung und eine - mit zunehmendem Radius - abgeschwächte Amplitude der Kurven. Wird auch hier der Effektivwert berechnet, verschwinden die Sensitivitäten allerdings nahezu.

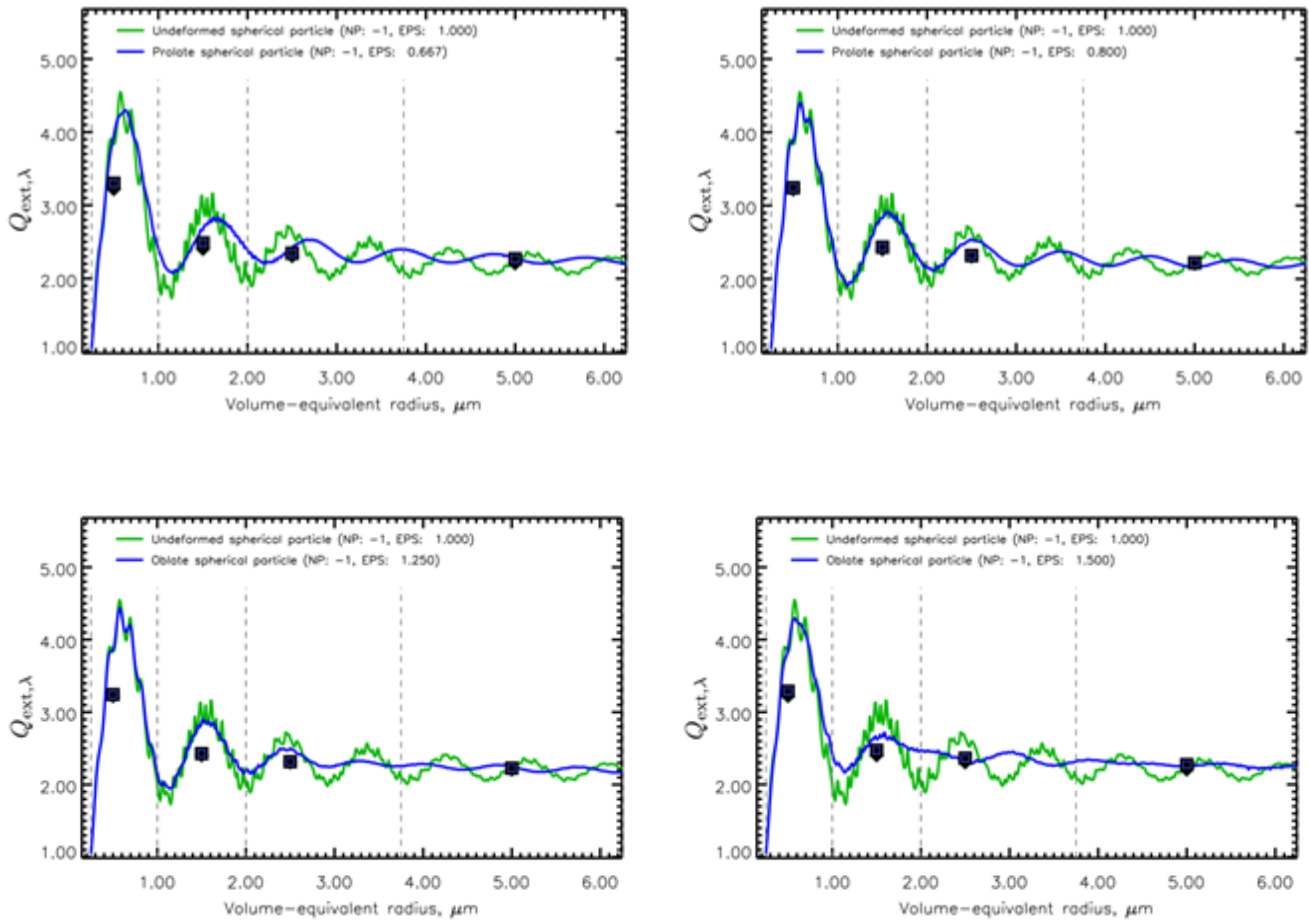


Fig 17: Extinction efficiency spectrum of a sphere (green line) compared to elliptical particles with the same equal volume radius (blue line). The green and blue symbols indicate the effective values of each size class; the dashed lines are the size class margins of each size class

Betrachtet man jedoch die Rückstreuungseffizienz (fig. 18), so zeigt sich eine starke Änderung des gesamten Spektrums, unabhängig vom Streckungsgrades des Ellipsoids. Je asymmetrischer das Ellipsoid ist, desto stärker glättet sich das Rückstreuungseffizienz-Spektrum. Damit scheint das Rückstreuungseffizienz-Spektrum der Ellipse fast unkorreliert zu dem der Kugel zu sein.

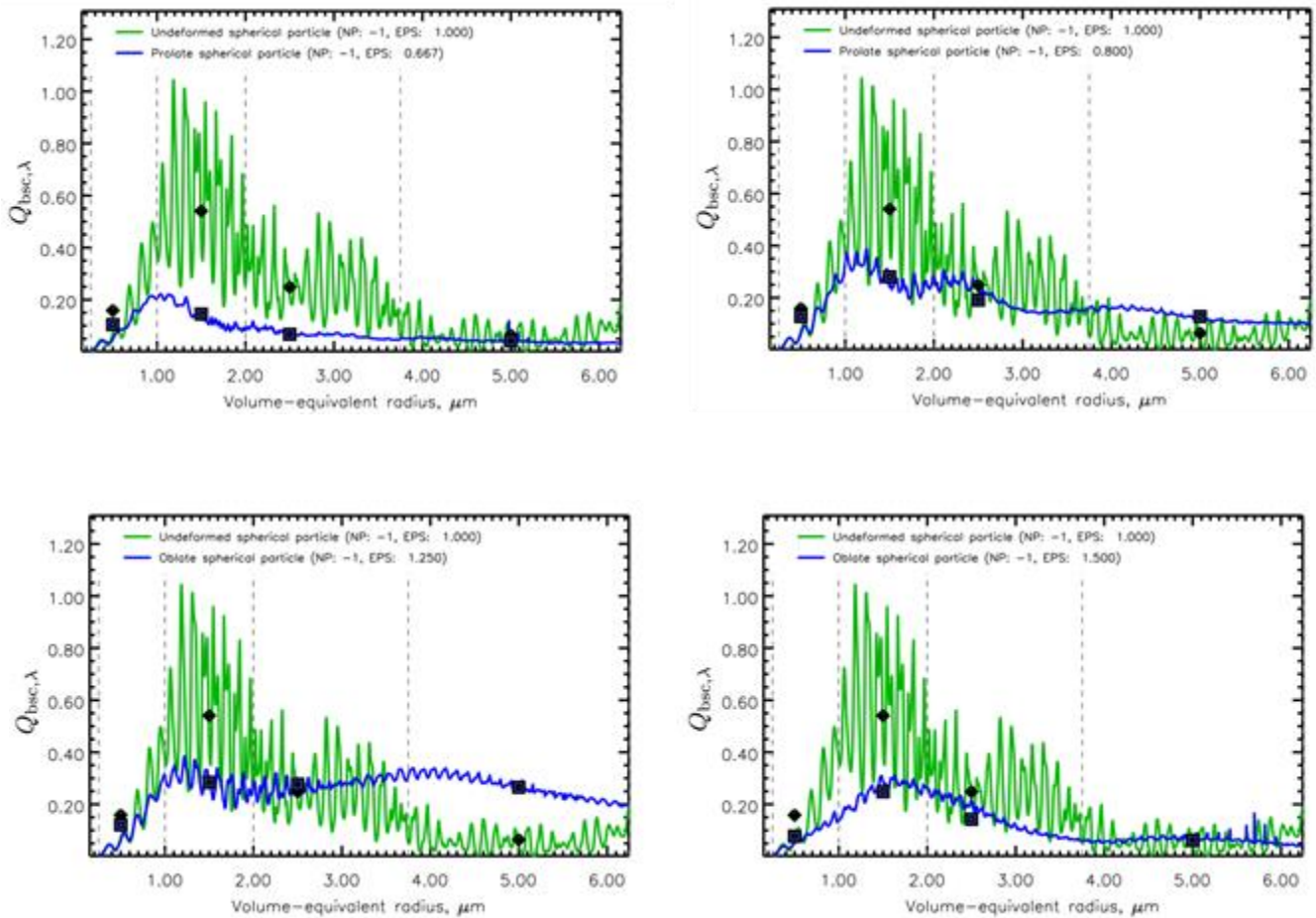


Fig 18: The same as the figure before but for the backscatter efficiency

Vergleicht man die Streueigenschaften von Kugeln und Zylindern (fig. 19) ergibt sich ein ähnliches Bild wie beim Vergleich zwischen Kugeln und Ellipsoiden. In Hinsicht auf die Extinktionseffizienz wird selbst beim undeformierten Zylinder der Phasenversatz zum Spektrum der Kugel deutlich sowie eine tendenziell höhere Extinktionseffizienz für größere Partikel. Dieser Trend macht sich sogar durch wahrnehmbar unterschiedliche Effektivwerte der Extinktionseffizienz bemerkbar und nimmt mit zunehmender Asymmetrie nochmals zu.

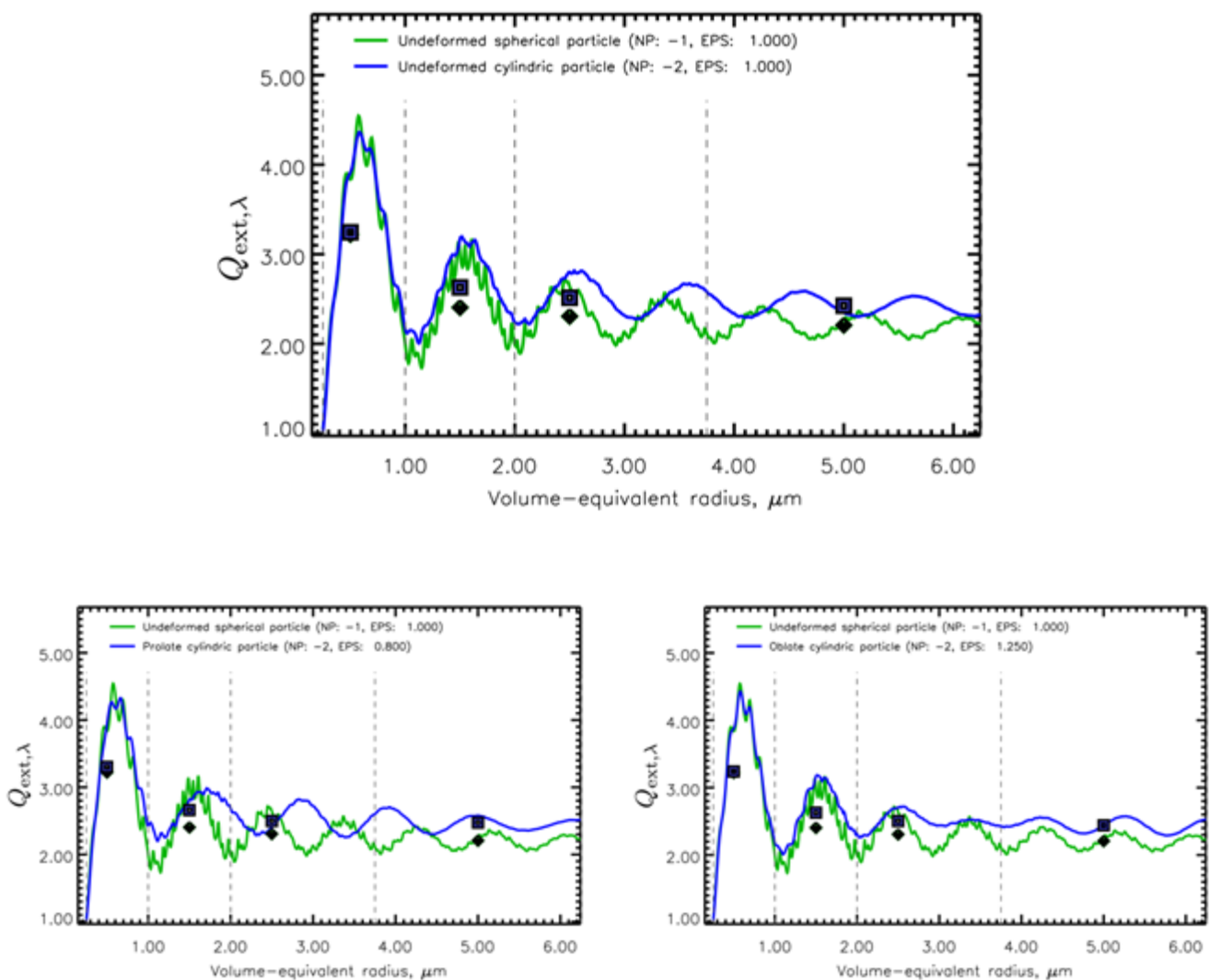


Fig19: Extinction efficiency spectrum of a sphere (green line) compared to cylindrical particles (blue line)

Betrachtet man beim selben Vergleich die Rückstreuungseffizienz zeigen sich zwei scheinbar völlig unabhängiges Rückstreuungseffizienz-Spektren. Der Verlauf der Rückstreuungseffizienz der zylindrischen Teilchen nimmt bis zu einem Radius von etwa $1\ \mu\text{m}$ zu und verbleibt dann bei einem konstanten Wert. Dieser Wert liegt etwa bei $0,2\ \text{m}^{-1}\ \text{sr}^{-1}$. Da das Spektrum der Sphäre Interferenzeffekten unterliegt resultiert aus der relativ konstanten Rückstreuungseffizienz der Zylinder auch eine entsprechend große Abweichung je nach Interferenzzustand der Sphäre. Der Unterschied zwischen den Rückstreuungseffizienzen von relativ kleinen Sphären und Zylindern (Radius $< 0,5\ \mu\text{m}$) ist vernachlässigbar, für größere Partikel ist der Unterschied zwischen den Formen so stark, dass der Unterschied auch durch eine Mittelung über die gesamte Größenklassen die Effektivwerte nicht ausreichend annähert.

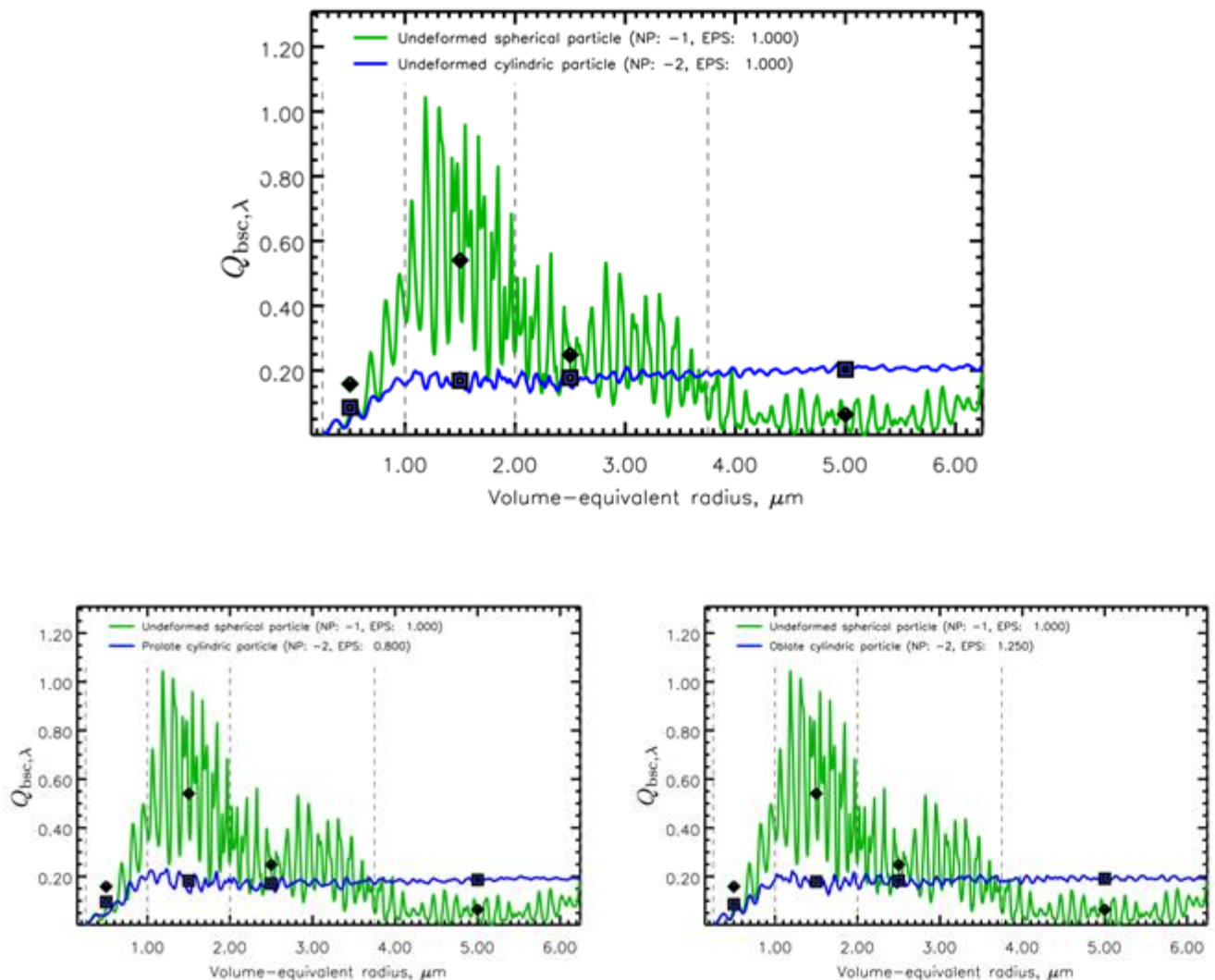


Fig 20: Backscatter efficiency spectrum of a sphere (green line) compared to cylindrical particles (blue line)

Als Ergebnis dieser Analyse müssen wir davon ausgehen, dass die Partikelform einen entscheidenden Einfluss auf die Streueigenschaften realer Aerosole hat. Während die Extinktion relativ unabhängig von der Partikelform ist, kann der immense Unterschied der Rückstreuungseffizienzen auch nicht durch das Berechnen der Effektivwerte angemessen reduziert werden. Der Rückstreuungskoeffizient von zylindrischen Teilchen scheint nahezu unkorreliert zu dem sphärischer Teilchen zu sein.

Die Rückstreuungseffizienz von kleinen Kugeln (Größenparameter zwischen 6,3 und 18,8) überschreiten die Rückstreuungseffizienzen von allen untersuchten Partikelformen und Deformationen. Der umgekehrte Fall gilt für Größenparameter zwischen 25 und 37, wo die Rückstreuungseffizienz von Kugeln nahe Null ist, während andere Partikelformen Werte zwischen 0,2 und 0,3 $\text{m}^{-1} \text{sr}^{-1}$ aufweisen. Wir müssen daher davon ausgehen, dass die Annahme kugelförmiger Teilchen einen Extremfall beschreibt und potentiell zu großen Unsicherheiten führt, sofern die realen Teilchen nicht sphärisch sind.

So lange keine Partikelformverteilung verfügbar ist, kann der letztendliche Effekt der Partikelform nicht explizit beziffert werden. In einem Fall vieler kleiner Teilchen würde der Vorwärtsoperator durch die extrem hohen Rückstreuungseffizienzwerte der Kugeln das Signal überschätzen. Wären viele große Partikel vorhanden, würde der Operator unter der Annahme von kugelförmigen Streumustern das Signal unterschätzen. Welcher Effekt letztendlich überwiegt hängt von den Gegebenheiten, sprich: der Anzahldichten- und Formverteilung ab.

4.5. Fehleranalyse

Die Einschätzung der absoluten Fehler von Extinktions- und Rückstreuungseffizienz aufgrund fehlender Informationen wurde durch die Berechnung der Abweichungen zum Referenzwert ermittelt. Wenn $\overline{Q_{\text{ext}}(m^*, m'^*)}$ die effektive Extinktionseffizienz des Referenzpartikels mit einem Realteil von $m^* = 1.59$ und einem Imaginärteil von $m'^* = -0.004i$ beschreibt und $Q_{\text{ext}}(m, m')$ die effektive Extinktionseffizienz eines Partikels mit Realteil m und Imaginärteil m' ist, berechnet sich der relative Fehler der Extinktionseffizienz $Q_{\text{ext, err}}(m, m')$ sowie entsprechend der relative Fehler der Rückstreuungseffizienz $Q_{\text{bsc, err}}(m, m')$ durch

$$Q_{\text{ext, err}}(m, m') = \frac{\overline{Q_{\text{ext}}(m, m')} - \overline{Q_{\text{ext}}(m^*, m'^*)}}{\overline{Q_{\text{ext}}(m^*, m'^*)}} \cdot 100\%, \quad (35)$$

$$Q_{\text{bsc, err}}(m, m') = \frac{\overline{Q_{\text{bsc}}(m, m')} - \overline{Q_{\text{bsc}}(m^*, m'^*)}}{\overline{Q_{\text{bsc}}(m^*, m'^*)}} \cdot 100\%. \quad (36)$$

Das Ergebnis dieser Berechnung ist der relative Fehler aufgrund unsicherer Informationen zum Brechungsindex, siehe fig. 21 und fig. 22. In diesen Abbildungen ist ebenfalls der relative Fehler zwischen dem Referenzwert und den Streueigenschaften der unterschiedlichen Partikelformen eingetragen. Betrachtet man den relativen Fehler der Extinktion ergibt sich eine maximale Abweichung von 15 % vom Referenzwert. Werden unterschiedliche Partikelformen außer Acht gelassen, beträgt der relative Fehler weniger als 1 %.

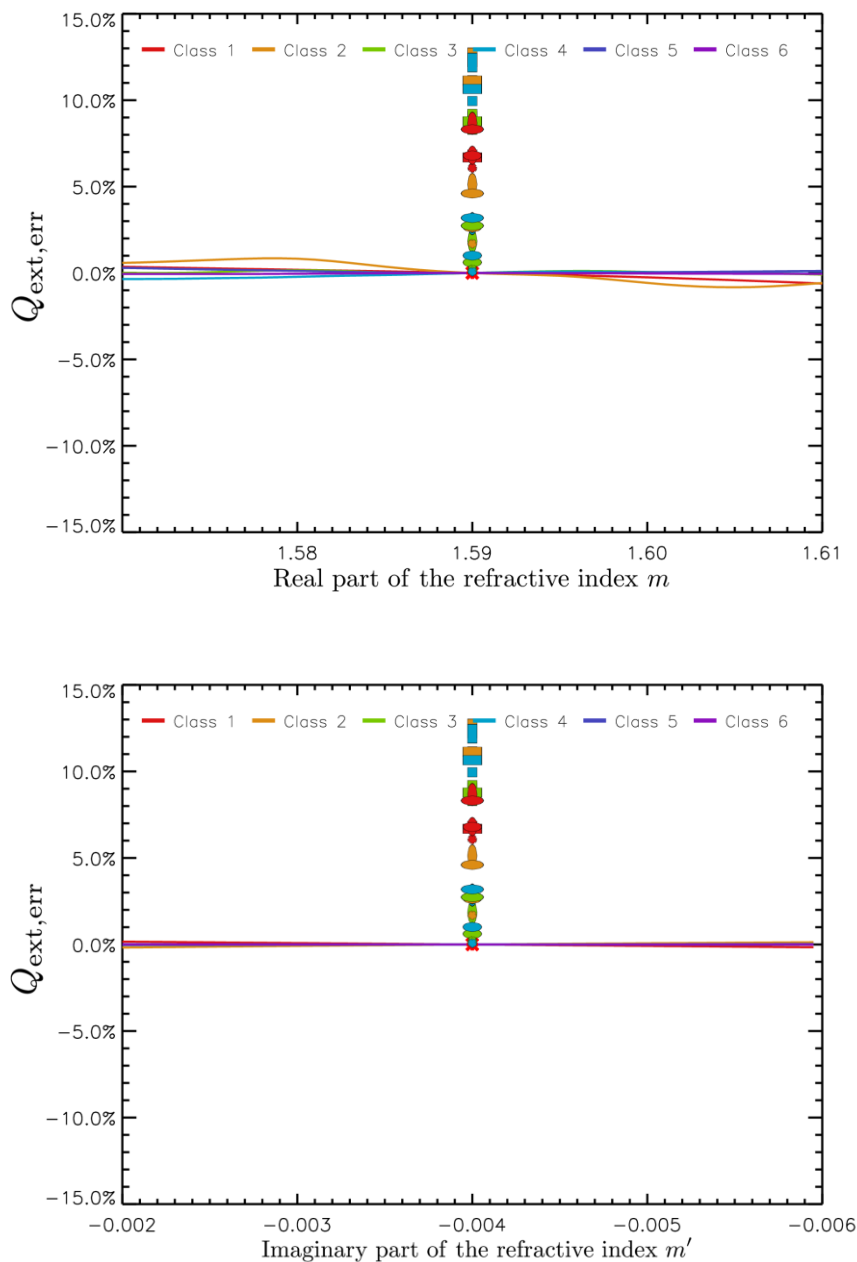


Fig. 21: Relative error of particle shape and refractive index if the forward operator assumes spherical particles and the reference refractive index but the real objects would be of a different shape or would have a different real part (top) or imaginary part (bottom) of the refractive index

Die Auswertung der Rückstreuungseffizienz hingegen zeigt auch unabhängig von der Partikelform starke Abweichungen zum Referenzwert. Dieser beträgt bei Abweichungen des Imaginärteils über 150 % und des Realteils über 50 %. Werden auch unterschiedliche Partikelformen betrachtet, erreicht die relative Abweichung einen Wert von über 200 %. Die höchsten Abweichungen treten auf bei großen oblaten Ellipsen (EPS=1.25, $Q_{\text{bsc, err}} = 282\%$) und Zylindern (EPS=0.80, 1.25 und 1.00; $Q_{\text{bsc, err}} = 168\%$, 175% und 192%). Dieses Ergebnis wird auch schon in den Rückstreuungseffizienzspektren deutlich, da in der vierten Größenklasse die Rückstreuungseffizienz der Kugel destruktiver Interferenz unterliegt und Werte nahe Null erreicht. Wir sind davon überzeugt, dass andere Partikelformen und Größen noch stärkere Abweichungen erreichen.

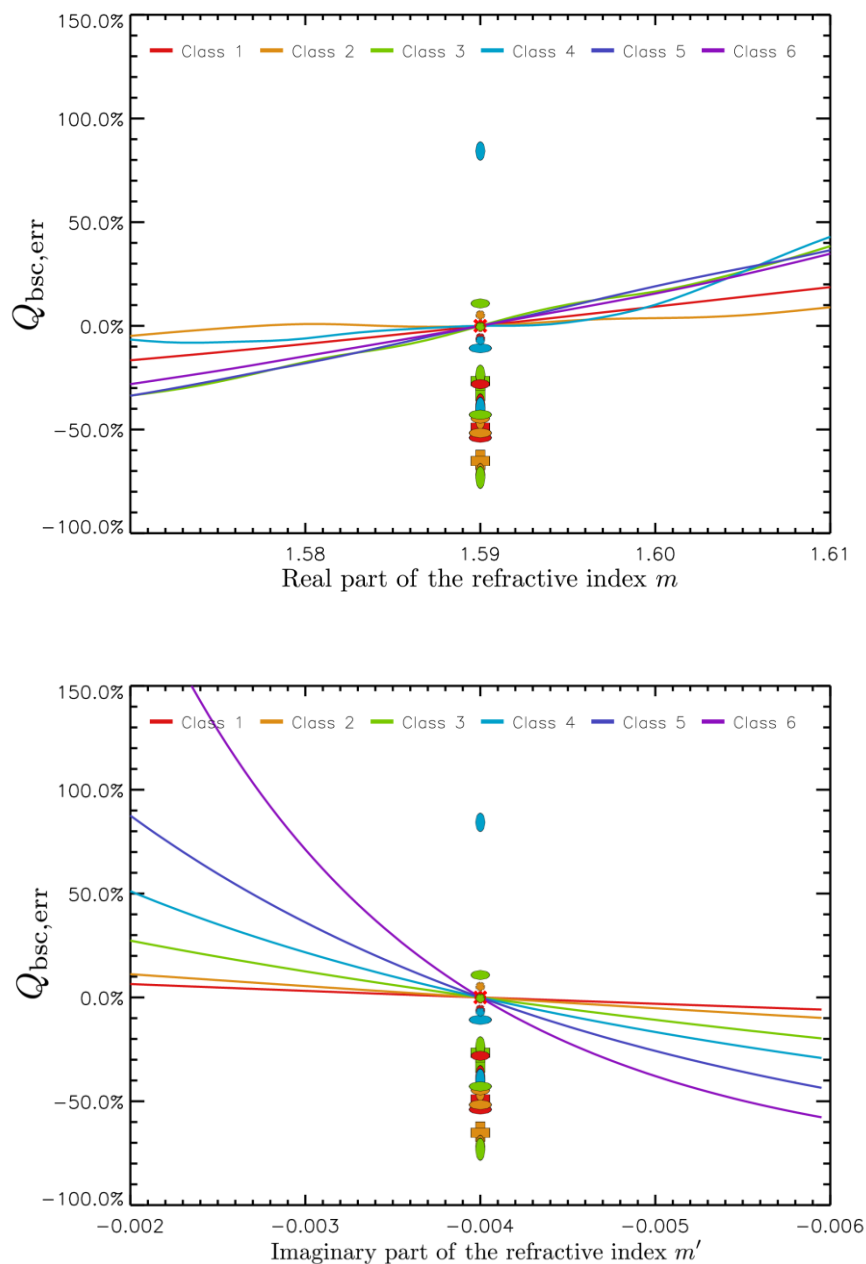


Fig. 22: The same as the figure before but for the backscatter efficiency

4.6. Diskussion der Ergebnisse der Sensitivitätsstudien

Mit Hilfe der Sensitivitätsstudien wurden die wesentlichen Unsicherheiten hinreichend umfangreich analysiert und qualifizierte Aussagen über die Auswirkungen der Unsicherheiten auf die Modellierung von Lidarprofilen können getroffen werden. Aus den Studien wissen wir, dass der relative Fehler durch Unsicherheiten der Partikeleigenschaften weniger als 15 % der Extinktionseffizienz beträgt. Sofern der Vorwärtsoperator analog zum Modell mit sphärischen Teilchen rechnen muss reduziert sich der Fehler auf weniger als 1 % zum gewählten Referenzwert.

Der relative Fehler der Rückstreuungseffizienz hingegen liegt bei über 282 % und kann potentiell noch höhere Werte erreichen, da bei weitem nicht alle Partikelformen verglichen wurden. Selbst wenn die Partikelform wie beim Modell nicht berücksichtigt werden soll besteht dennoch ein relativer Fehler von etwa 150 %, hauptsächlich dominiert durch das recht weit gewählte Fenster des Imaginärteils des Brechungsindex. Der relative Fehler beim Erreichen des Randbereichs des Realteil-Intervalls beträgt etwa 42 %. Aufgrund der Position des Rückstreuungskoeffizienten in der Lidargleichung ist dieser Fehler bedeutender als der - ohnehin geringe - relative Fehler der Extinktionseffizienz.

Da die meisten natürlich vorkommenden Aerosole nicht sphärisch sind, liegt es nahe, den Sonderfall „Sphäre“ durch eine andere Partikelform als Referenzform zu ersetzen. Denkbar wäre beispielsweise die Verwendung eines leicht gekrümmten Ellipsoids, um keine weiteren Extremfälle zu erzeugen. Die Analyse einer die Wirklichkeit am besten nachbildende Partikelform setzt jedoch intensive Forschungsarbeit in diesem Thema voraus.

Die Annahme von sphärischen Teilchen für die Streuberechnung von Aerosolen, wie es in der Literatur stets erwähnt wird, hat sich in unseren Studien letztendlich als kritischste Annahme herausgestellt.

4.7. Fehlerfortpflanzung von Modell und Vorwärtsoperator

Wie wir in den Sensitivitätsstudien gezeigt haben kann der relative Fehler des Vorwärtsoperators nicht durch die Standardmethoden der Messfehlerbehandlung bestimmt werden. Grund ist die Abhängigkeit vom verwendeten mathematischen Modell sowie der

Definition der Referenzwerte von Komplexem Brechungsindex sowie der Partikelform. In diesem Fall schreibt die Fehlerfortpflanzungsrechnung vor, den jeweils maximalen Bereich als relativen Fehler anzugeben. Dieser Bereich hängt jedoch wiederum von den getroffenen Annahmen zu den möglichen Brechungsindizes und den möglichen Partikelformen ab.

Wenn der maximale Fehler der Extinktionseffizienz ω_{ext} und der Rückstreuungseffizienz ω_{bsc} der Wahrheit entspricht, dann beträgt der relative Fehler des Extinktionskoeffizienten Δ_{ext} und des Rückstreuungskoeffizienten Δ_{bsc}

$$\Delta_{\text{ext}} = \omega_N + \omega_{\text{ext}} \quad (37)$$

$$\Delta_{\text{bsc}} = \omega_N + \omega_{\text{bsc}} \quad (38)$$

sofern der Fehler der Modellvorhersage der Anzahldichte ω_N ebenfalls bekannt ist. Der Fehler des abgeschwächten Rückstreuungskoeffizienten Δ_γ ist dann

$$\Delta_\gamma = \Delta_{\text{bsc}} + \exp(\Delta_{\text{ext}}) \quad (39)$$

Unabhängig vom Modellfehler beträgt der Fehler durch die Anwendung des Vorwärtsoperators mindestens 282 % (sofern von nichtsphärischen Teilen ausgegangen werden muss) bzw. 150 % (wenn die Annahme sphärischer Teilchen gerechtfertigt ist).

4.8. Fehlerfortpflanzung der Lidarmessung

Die Fehlerfortpflanzung der Messfehler beim Lidar hängt im Gegensatz zum Vorwärtsoperator nicht vom mathematischen Modell ab. Gemessen wird die empfangene Photonenzahl bzw. der am Detektor anliegende elektrische Strom. Dieser Wert ist nicht nur durch die eintreffenden Photonen des Messsignals abhängig, sondern wird auch von Photonen der Umwelt sowie von Strömen des Systems selbst beeinflusst. Der Eintrag von Hintergrundphotonen wird durch den Einsatz von optischen Filtern weitestgehend minimiert, jedoch nicht komplett unterbunden. Ähnliches gilt für das Mess-System, dessen Einfluss auf das Signal lediglich verringert werden kann.

Beschreibt $N_{\text{sig}}(R)$ das Signal der durch Streuung in der Atmosphäre zurückgeworfenen Photonen, $N_b(R)$ das Hintergrundrauschen und $N_{\text{dc}}(R)$ den Dunkelstrom, dann ist das gemessene Signal $N_{\text{tot}}(R)$ aus der Entfernung R (Wulfmeyer et al. AO 2001a,b) gleich

$$N_{tot}(R) = N_{sig}(R) + N_b(R) + N_{dc}(R) \quad (40)$$

Mit diesen Informationen lässt sich der systematische Fehler aus der Summe aller Signalbestandteile berechnen:

$$\Delta N_t(R) = \sum_i \left[\frac{\partial N_{sig}}{\partial f_i} \Delta f_i + \frac{\partial N_b}{\partial f_i} \Delta f_i + \frac{\partial N_{dc}}{\partial f_i} \Delta f_i \right] \quad (41)$$

Die Fortpflanzung des unabhängigen Fehlers ergibt:

$$\sigma_{sig}^2 = \sigma_t^2 + \sigma_b^2 + \sigma_{dc}^2 + \sigma_{det}^2 + \sigma_{dig}^2 + \sigma_{speckle}^2 \quad (42)$$

welches die Varianzen des Signals, des Hintergrunds, der Dunkelspannung, der Detektorspannung, der Digitalisierung der Signale sowie des Fleckenrauschens sind. Der sich letztendlich ergebende Rauschfehler nach Verstärkung des Signals ist

$$I_{tot} = (N_{sig} + N_b + N_{dc}) B e \eta G + I_{dc,0} \quad (43)$$

dabei ist B die Bandbreite des Empfängers, e ist die Elektronenladung, η ist die Quanteneffizienz, G ist der Leistungsfaktor der Photodiode und $I_{dc,0}$ ist der Dunkelstrom vor Verstärkung. Eine umfassende Beschreibung der Fehlerfortpflanzungsrechnung speziell für die Lidarmessung ist die Veröffentlichung von Wulfmeyer et al. AO 2001a, b.

Die Bestimmung des Messfehlers der ACL Messungen von 2010 können nun aus zwei Gründen nicht durchgeführt werden. Erstens ist die Systemeffizienz η weder bekannt, noch kann sie nachträglich ermittelt werden, da zweitens der Leistungsfaktor des Lasers G sich ständig ändert ohne dies in den Datensätzen zu dokumentieren. Mit diesen Daten können daher weder die Fehlerkovarianzmatrix noch sonstige relevante Fehlermaße berechnet werden.

Daraus folgt auch die Notwendigkeit einer verbesserten Firmware der ACL Instrumente, sodass diese Methoden entweder automatisch durchgeführt oder die Metadaten vom Instrument für eine nachträgliche Analyse bereitgestellt werden

4.9. Assimilation von ACL Daten

Den Veröffentlichungen zu COSMO-ART kann entnommen werden, dass die Änderung der Vulkanaschekonzentration im Modell durch die Terme von „Advektion, turbulenter Vermischung, Sedimentation, Deposition und Auswaschung“ vollständig beschrieben wird (Vogel et al. [2014]). Daraus folgt, dass dies die wesentlichen Terme (und deren Abhängigkeiten) sind, die das Datenassimilationssystem verändern kann um Modell und Beobachtung zu konvergieren. Sofern der Quellterm ebenfalls auf einer Modellvariablen basiert, ist dies ein zusätzlicher Parameter der korrigiert werden kann.

Die Assimilationsmethode hängt nun von der gemessenen Größe ab. Im Falle der Assimilation prognostischer Variablen wie der Temperatur kann eine recht einfache Anpassung der Werte direkt im Modell, zum Beispiel durch Nudging erfolgen. Im Falle der Assimilation der ACL Profile mit Hilfe des Vorwärtsoperators ist diese Methode nicht möglich, da durch die Anwendung des Operators der informationelle Bezug zu den prognostischen Variablen der Aschekonzentration verloren geht.

Für die Assimilation von ACL Rückstreuprofilen mit Hilfe des Vorwärtsoperators ist demnach zwingend ein Assimilationssystem nötig, das eine Variation des Modellzustands vor der Anwendung des Operators zulässt. Dies trifft in erster Linie auf den Ensemble Kalman Filter (EnKF) zu, bei dem von einem Modellzustand mehrere Versionen des nächsten Zustands berechnet werden und aus dem Vergleich der Ensembles zu Messdaten die beste Iterationsvariante ausgewählt wird. Dies beinhaltet beispielsweise die Berechnung einer Variante mit einer erhöhten Aschenkonzentration der dritten Vulkanascheklasse. Auf diese wie jede weitere Variante wird der Vorwärtsoperator angewandt und schließlich mit den Messdaten verglichen wird. Durch diese Methode ist keine Rückwärtsintegration des vorwärtsentwickelten Lidarprofils nötig.

Für die hier vorliegenden Daten ist die Anwendung des EnKF jedoch nicht möglich, da sowohl die Fehlerkovarianzen von Modell und Messung als auch „Bias-freie“, kalibrierten Messdaten zwingend notwendig sind. Für den Eyjafjallajökull-Fall fehlt daher die entsprechende Datengrundlage seitens der ACL Messungen.

5. Empfehlungen

Unsere Empfehlungen für die nächsten Schritte zur quantitativen Datenassimilation von ACL Messungen lauten daher:

- Weitere Aerosoltypen müssen den Transportsimulationen von COSMO-ART hinzugefügt werden, um die Unsicherheiten der Signalabschwächung durch momentan unbekannte Aerosole in der Grenzschicht zu vermindern
- Die optischen Eigenschaften von nichtsphärischen Aerosolen sollten in weiteren wissenschaftlichen Studien analysiert werden, damit die daran gebundenen Unsicherheiten des Vorwärtsoperators reduziert werden.
- Wir empfehlen das Erstellen einer Datenbank von Streueigenschaften typischer Aerosole, die in Atmosphärenchemiemodellen dargestellt werden. Diese Datenbank liefert dann die Streueigenschaften von weiteren Aerosoltypen, sodass gängige Modelle und Vorwärtsoperatoren nicht für jeden Aerosoltyp eigene Streuberechnungen durchführen müssen. Außerdem können Änderungen an den Aerosolklassen, z.B. wenn ein anderer Vulkan ausbricht und sich der Brechungsindex ändert oder die Klasseneinteilung geändert wird, rasch durchgeführt werden
- Die Hersteller der ACL Geräte müssen ihre Firmware ändern, damit entweder die Kalibrierkoeffizienten und die Anpassung des Leistungsfaktors oder direkt der abgeschwächte Rückstreukoeffizient berechnet bzw. im Datensatz gespeichert wird. Ohne diese Anpassung sind die Messdaten quantitative nutzlos und können weder für die Validierung noch zur quantitativen Datenassimilation sinnvoll eingesetzt werden.
- Für zukünftige Lidarnetzwerke wird wahrscheinlich die Anzahl an HSLR oder Raman Lidar Geräte zunehmen, nicht zuletzt durch den auf 2016 angesetzten Start des EarthCARE Satelliten der ESA. Diese Geräte können den Atmosphärenextinktions- und Rückstreukoeffizienten direkt messen. Da der Operator diese Werte ebenfalls direkt aus den Modelldaten berechnet, können diese Messungen mit Hilfe des Operators ebenfalls assimiliert werden.

Danksagung

Wir bedanken uns beim BMVI (vorher BMVBS), repräsentiert von Dr. Dirk Engelbart für die Finanzierung und Koordination des Projekts. Dr. Jochen Förstner unterstützte uns mit Outputdaten von COSMO-ART und der Hilfestellung beim Importieren und Interpretieren der Daten. Dr. Ina Mattis und Dr. Harald Flentje lieferten die Ceilometerdaten und standen uns jederzeit für Fragen zu den ACL Messungen, Eigenheiten und Fallstricke zur Verfügung. Prof. Dr. Roland Potthast, Dr. Frank Wagner, Dr. Werner Thomas und Dr. Cristina Charlton-Perez halfen uns durch anregende und konstruktive Diskussionen.

Referenzen

- Bangert, M., Nenes, A., Vogel, B., Vogel, H., Barahona, D., Karydis, V. A., et al. (2012). Saharan dust event impacts on cloud formation and radiation over Western Europe. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(9), 4045-4063.
- Banta, R. M., Brewer, W. A., Sandberg, S. P., & Hardesty, R. M. (2012). Doppler Lidar-Based Wind-Profile Measurement System for Offshore Wind-Energy and Other Marine Boundary Layer Applications. *American Meteorological Society*, 51(2), 327-349.
- Behrendt, A., Pal, S., Wulfmeyer, V., B., Á. M., & Lammel, G. (2011). A novel approach for the characterization of transport and optical properties of aerosol particles near sources – Part I: Measurement of particle backscatter coefficient maps with a scanning UV lidar. *Atmospheric Environment*, 45(16), 2795-2802.
- Benedetti, A. e. (2009). Aerosol analysis and forecast in the European Centre for Medium-Range Weather Forecasts Integrated Forecast System: 2. Data assimilation. *J. Geophys. Res.*, 114(D13205).
- Buchholtz, A. (1995). Rayleigh-scattering calculations for the terrestrial atmosphere. *Optical Society of America*, 34(15), 2765-2773.
- Charlton-Perez, C. L., Cox, O., Ballard, S. P., & Klugmann, D. (2013). A Forward model for atmospheric backscatter due to aerosols, clouds and rain. *EMS Annual Meeting Abstracts*, 10.
- Chen, S., Zhao, C., Qian, Y., Leung, L. R., Huang, J., Huang, Z., et al. (2014). Regional modeling of dust mass balance and radiative forcing over East Asia using WRF-Chem. *Aeolian Research*, 15, 15-30.
- Clerici, M., & Melin, F. (2005). *Representing Aerosol Optical Properties with Theoretical Modelling and Global Observations*. Tech. rep., European Commission, Directorate-General, Joint Research Centre.
- Draine, B. T., & Flatau, P. J. (Apr 1994). Discrete-Dipole Approximation For Scattering Calculations. *J. Opt. Soc. Am. A*, 11(4), 1491-1499.
- Emeis, S., Forkel, R., Junkermann, W., Schäfer, K., Flentje, H., Gilge, S., et al. (2011). Measurement and simulation of the 16/17 April 2010 Eyjafjallajökull volcanic ash layer dispersion in the northern Alpine region. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 11(6), 2689-2701.

- Flentje, H., Claude, H., Elste, T., Gilge, S., Köhler, U., Plass-Dülmer, C., et al. (2010). The Eyjafjallajökull eruption in April 2010 – detection of volcanic plume using in-situ measurements, ozone sondes and lidar-ceilometer profiles. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(20), 10085-10092.
- Fourie, G. (kein Datum). *AO15: The Refractive Index of Volcanic Ash Aerosols*. unpublished.
- Grell, G., Peckham, S., Schmitz, R., McKeen, S., Frost, G., Skamarock, W., et al. (kein Datum). Fully coupled 'online' chemistry within the WRF model.
- Hammann, E., Behrendt, A., Le Mounier, F., & Wulfmeyer, V. (2015). Temperature profiling of the atmospheric boundary layer with rotational Raman lidar during the HD(CP)² Observational Prototype Experiment. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 15(5), 2867-2881.
- Lange, A. C., & Elbern, H. (2014). Lidar data assimilation for improved analyses of volcanic aerosol events. *Geophysical Research Abstracts*, 16.
- Latham, T. L., Kumar, P., Nenes, A., Dufek, J., Sokolik, I. N., Trail, M., et al. (2011). *Hygroscopic Properties of Volcanic Ash*. unpublished.
- Lohmann, U., & Feichter, J. (2005). Global indirect aerosol effects: a review. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5(3), 715-737.
- Mie, G. (1908). Beiträge zur Optik trüber Median, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen der Physik*.
- Mishchenko, M. I., & Travis, L. D. (1998). Capabilities And Limitations Of A Current Fortran Implementation Of The T-matrix Method For Randomly Oriented, Rotationally Symmetric Scatterers. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 60(3), 309-324.
- Mishchenko, M. I., Travis, L. D., & Lacis, A. A. (2002). *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles*. Cambridge University Press.
- Pappalardo, G., Amodeo, A., Apituley, A., Comeron, A., Freudenthaler, V., Linne, H., et al. (2014). EARLINET: towards an advanced sustainable European aerosol lidar network. *Atmospheric Measurement Techniques*, 7(8), 2389-2409.
- Pöschl, U. (2005). Atmospheric Aerosols: Composition, Transformation, Climate and Health Effects. *Angewandte Chemie International Edition*, 44(46), 7520-7540.
- Radlach, M., Behrendt, A., & Wulfmeyer, V. (2008). Scanning rotational Raman lidar at 355 nm for the measurement of tropospheric temperature fields. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8(2), 159-169.
- Schumann, U., Weinzierl, B., Reitebuch, O., Schlager, H., Minikin, A., Forster, C., et al. (2010). Airborne observations of the Eyjafjalla volcano ash cloud over Europe during

air space closure in April and May 2010. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 10(9), 22131-22218.

- Shipley, S. T., Tracy, D. H., Eloranta, E. W., Trauger, J. T., Sroga, J. T., Roesler, F. L., et al. (Dec 1983). High spectral resolution lidar to measure optical scattering properties of atmospheric aerosols. 1: Theory and instrumentation. *Appl. Opt.*, 22(23), 3716-3724.
- SIČ, B. (2014). *Amélioration de la représentation des aérosols dans un modèle de chimie-transport : Modélisation et assimilation de données*. Ph.D. dissertation, Université Toulouse.
- Strohbach, J. (02 2015). *Ausbreitung der Eyjafjallajökull-Vulkanasche im April 2010 über Deutschland: Reanalyse der Ceilometermessungen des Deutschen Wetterdienstes*. unpublished.
- Sugimoto, N., Matsui, I., Shimizu, A., Nishizawa, T., Hara, Y., Xie, C., et al. (2008). Lidar network observations of tropospheric aerosols. *Lidar Remote Sensing for Environmental Monitoring IX*, 7153, S. 71530A-71530A-13.
- Vogel, B., Vogel, H., Bäumer, D., Bangert, M., Lundgren, K., Rinke, R., et al. (2009). The comprehensive model system COSMO-ART – Radiative impact of aerosol on the state of the atmosphere on the regional scale. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(22), 8661-8680.
- Vogel, H., Förstner, J., Vogel, B., Hanisch, T., Mühr, B., Schättler, U., et al. (2014). Time-lagged ensemble simulations of the dispersion of the Eyjafjallajökull plume over Europe with COSMO-ART. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14(15), 7837-7845.
- Wilkinson, J. M., Hogan, R. J., Illingworth, A. J., & Benedetti, A. (2008). Use of a Lidar Forward Model for Global Comparisons of Cloud Fraction between the ICESat Lidar and the ECMWF Model. *American Meteorological Society*, 136, 3742-3759.
- Wiscombe, W. J. (1980). Improved Mie scattering algorithms. *Optical Society of America*, 19.
- Wulfmeyer, V., Hardesty, R. M., Turner, D. D., Behrendt, A., Cadeddu, M. P., Di Girolamo, P., et al. (2015). A review of the remote sensing of lower tropospheric thermodynamic profiles and its indispensable role for the understanding and the simulation of water and energy cycles. *Reviews of Geophysics*, 53(3), 819-895.
- Young, A. T. (1981). Rayleigh scattering. *Optical Society of America*, 20(4), 533-535.