

Vergleich der Isotopenverhältnisse von Deuterium
im Wasserdampf der Atmosphäre zwischen
SCIAMACHY-Satellitendaten und Simulationen
des ECHAM5-Zirkulationsmodells

BACHELORARBEIT



FRIEDRICH-SCHILLER-UNIVERSITÄT JENA
PHYSIKALISCH-ASTRONOMISCHE FAKULTÄT

eingereicht von: Tim Carlsen
geboren am: 16. Oktober 1988 in Pößneck
Datum der Abgabe: 22. September 2010

1. Gutachter: Prof. Dr. Carsten Ronning
Friedrich-Schiller-Universität
Jena
2. Gutachter: Dr. Martin Werner
Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung
Bremerhaven

Tag der Verleihung:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	5
2	Stand der Forschung	7
2.1	Der Wasserkreislauf in der Atmosphäre	7
2.2	Hydrologie stabiler Isotope	9
2.2.1	Natürlich vorkommende Isotope und Referenzstandard SMOW	9
2.2.2	Definition der δ -Werte	10
2.2.3	Fraktionierung der Isotope bei Verdunstung und Kondensation	10
2.2.4	Einflussfaktoren auf die Isotopentrennung	11
2.2.5	„Global Meteoric Water Line“ und Deuterium-Exzess	14
2.2.6	Isotopentrennung im Wasserkreislauf	14
2.2.7	Bedeutung für die Klimatologie	16
3	Methodische Herangehensweise	19
3.1	Methodische Übersicht des Modell-Satelliten-Vergleichs	19
3.2	SCIAMACHY-Daten	20
3.2.1	Grundlagen des Spektrometers SCIAMACHY	20
3.2.2	Aufbereitung der SCIAMACHY-Daten	21
3.2.3	Kalkulation der aufbereiteten SCIAMACHY-Daten	22
3.3	ECHAM5-Daten	24
3.3.1	Das atmosphärische Zirkulationsmodell ECHAM5	24
3.3.2	Kalkulation der aufbereiteten ECHAM5-Modelldaten	26
4	Auswertung und Diskussion	29
4.1	ECHAM5-SCIAMACHY-Vergleich auf globaler Skala	29
4.1.1	Globale Verteilung von Deuterium im Wasserdampf	29
4.1.2	Messungenauigkeit von SCIAMACHY	32
4.1.3	Separate Betrachtung der Winter- und Sommermonate	33
4.2	Berücksichtigung der Wolkenbedeckung bei den ECHAM5-Daten	37
4.2.1	Grundsätzliche Bemerkungen	37
4.2.2	Untersuchungen in ausgewählten Regionen Afrikas und Nord-amerikas	38

4.3 Regionale Untersuchungen in Europa und Australien	42
4.3.1 Kontinentaleffekt über Europa	42
4.3.2 Saisonalität über Australien	45
5 Zusammenfassung und Ausblick	47
Quellen- und Literaturverzeichnis	50
Abbildungsverzeichnis	52
Tabellenverzeichnis	54
Anhang A: Skripte	I
Anhang B: Selbstständigkeitserklärung	XXXI
Anhang C: Danksagung	XXXII

1 Einleitung und Motivation

Es ist seit langem bekannt, dass das Klima der Erde nicht konstant ist, sondern es schon immer natürliche Klimaschwankungen gab. So wechselten sich zum Beispiel während der letzten 1 Million Jahre Kalt- und Warmzeiten in einem regelmäßigen 100.000-Jahre-Rhythmus ab. Bereits 1920 versuchte *Milankovitch* die Kalt- und Warmzeiten mithilfe von Unterschieden in der solaren Einstrahlung infolge sich ändernder Parameter der Erdbahn (Exzentrizität, Neigung und Kreisbewegung der Erdachse) zu erklären [1]. Erstmals konnten *Hays et al.* 1976 die den Änderungen der Erdbahnparameter entsprechenden Perioden bei einer Isotopenanalyse von Tiefseesedimenten identifizieren [2]. Dennoch ist bis heute nicht geklärt, wie die sehr kleinen Variationen der solaren Einstrahlung infolge der Änderung der Erdbahnparameter solche tiefgreifenden klimatischen Veränderungen bewirken können.

In das ohnehin sehr komplexe klimatische System der Erde greift der Mensch seit der Industrialisierung im 19. Jahrhundert in zunehmendem Maße ein. Durch zusätzliche Emission von Treibhausgasen wird der natürliche Treibhauseffekt anthropogen verstärkt [3]. Die konkreten Folgen des anthropogen verstärkten Klimawandels sind aufgrund der komplexen Vorgänge innerhalb der Atmosphäre nur schwer abzuschätzen. Bei den natürlichen Klimaschwankungen der Vergangenheit überstiegen die Amplituden in der mittleren Temperatur meist nicht einen Wert von $1,5 - 2 \text{ °C}$ [4]. Dennoch sind mit diesen relativ kleinen Temperaturunterschieden große klimatische Veränderungen einher gegangen. Ein zukünftiger anthropogen verstärkter Klimawandel kann nicht abzusehende Folgen auf alle Bereiche des menschlichen Lebens haben, ein genaueres Verständnis der klimatischen Prozesse in der Atmosphäre der Erde ist deshalb unbedingt erforderlich.

Für die Erforschung von vergangenen, heutigen und möglichen zukünftigen Änderungen in der Atmosphäre dienen unter anderem atmosphärische Zirkulationsmodelle, wie zum Beispiel das ECHAM5-Modell aus Hamburg. Das ECHAM5-Modell ist die fünfte Version des atmosphärischen Zirkulationsmodells ECHAM, welches ursprünglich aus einem Wettervorhersagemodell hervorging und dann speziell für Klimasimulationen angepasst wurde. Auf der Grundlage der Erhaltungssätze von Energie, Masse und Impuls löst das ECHAM5-Modell ein System von Differential-

gleichungen, um klimatische Prozesse innerhalb der Atmosphäre simulieren zu können. Damit man mit derartigen Zirkulationsmodellen verlässliche Klimaprognosen abgeben kann, müssen zunächst aktuelle klimatische Verhältnisse korrekt wiedergegeben werden. Dazu werden die Simulationsergebnisse mit aktuellen Messreihen verglichen.

Ein wesentlicher Bestandteil des atmosphärischen Klimageschehens ist der Wasserkreislauf der Erde. Die Prozesse der Verdunstung und Kondensation spielen dabei eine herausragende Rolle. Außerdem ist der Wasserdampf das wichtigste Treibhausgas in der Atmosphäre. Wasser kommt in der Natur nicht nur in der üblichen Form $^1\text{H}_2\text{ }^{16}\text{O}$ vor, sondern beispielsweise auch als deuteriertes Wasser der Form $^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}$. Während der Vorgänge der Verdunstung und Kondensation verändern sich auch die isotopischen Verhältnisse. So verdampfen beispielsweise leichtere Isotope schneller als schwerere. Die Isotopenhäufigkeit im Wasserdampf gibt somit Auskunft über den bereits durchlaufenen Wasserkreislauf.

Mithilfe des Spektrometers SCIAMACHY an Bord des Satelliten ENVISAT konnten erstmals Daten zur globalen Verteilung von Deuterium im Wasserdampf der Atmosphäre gemessen werden [5]. Da die aktuelle Generation des ECHAM5-Modells eine Komponente zur Simulation der isotopischen Fraktionierung im hydrologischen Kreislauf enthält, ist es nunmehr möglich, direkt gemessene Isotopenverhältnisse im Wasserdampf mit entsprechenden simulierten Modellwerten eines atmosphärischen Zirkulationsmodells auf globaler Skala zu vergleichen. Dieser ECHAM5-SCIAMACHY-Vergleich ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Sie soll damit einen Beitrag zum besseren Verständnis der komplexen klimatischen Prozesse in der Atmosphäre der Erde liefern, indem die Güte des im ECHAM5-Modell simulierten Wasserkreislaufs anhand aktueller Satellitenmessungen überprüft wird.

2 Stand der Forschung

2.1 Der Wasserkreislauf in der Atmosphäre

Die Atmosphäre der Erde enthält etwa $13 \cdot 10^{12} \text{ m}^3$ Wasser, welches größtenteils in Form von Wasserdampf vorkommt. Im Vergleich zum mit $1,35 \cdot 10^{18} \text{ m}^3$ bezifferten Gesamtvolumen der Weltmeere erscheint der Wasseranteil der Atmosphäre zunächst unbedeutend. Umso entscheidender ist jedoch die Rolle, die dieses Wasser in den atmosphärischen Vorgängen spielt. Bezogen auf die gesamte Erdoberfläche würde der Wasserdampf eine globale Flüssigkeitssäule von ca. 25 mm bilden. Geht man von einer mittleren Niederschlags- bzw. Verdunstungsrate von 1000 mm pro Jahr aus, so zeigt sich, dass der Wasserdampf in der Atmosphäre um die vierzigmal pro Jahr umgesetzt wird. Einzelne Wassermoleküle verweilen demnach im Mittel 10 Tage in der Atmosphäre. Dem gegenüber stehen Verweilzeiten im Bereich von Jahren bis Jahrtausenden auf den Kontinenten und in den Ozeanen bis hin zu Hunderttausenden von Jahren in der Antarktis (gespeichert in Form von Eis). Diese Zahlen verdeutlichen recht gut, auf welcher kurzen Zeitskala die mit Wasser verbundenen atmosphärischen Prozesse ablaufen.

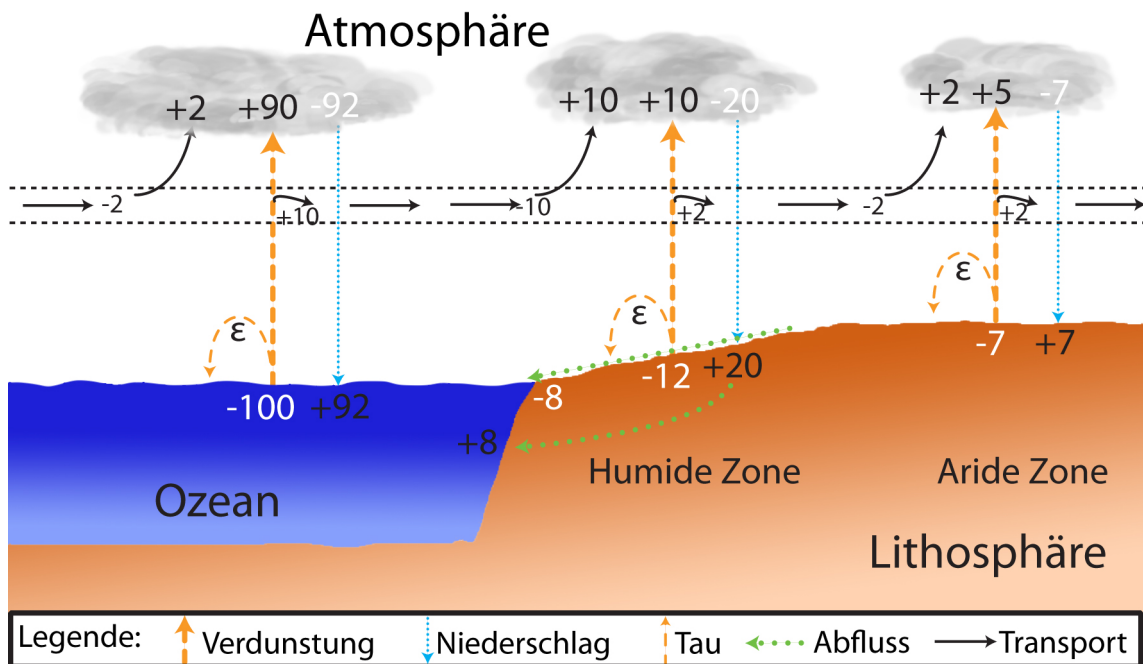


Abbildung 1: Wasserkreislauf in der Atmosphäre, Werte in relativen Einheiten [6]

Der Wasserkreislauf in der Atmosphäre ist in Abbildung 1 schematisch dargestellt. Dabei sind die Zahlenwerte in relativen Einheiten angegeben. Den Antrieb für den Wasserkreislauf bildet die Sonne, deren Strahlung für die Verdunstung und allgemein für die Ausbildung der atmosphärischen Zirkulation verantwortlich ist. Der Wasservorrat in der Atmosphäre wird hauptsächlich durch die Verdunstung über den Ozeanen gespeist. Die aus dem Ozean verdunstete Wassermenge sei für eine anschauliche Beispielrechnung mit 100 % angenommen. Zusammen mit dem bereits in der Atmosphäre vorhandenen Wasserdampf (2 %) regnen 92 % des verdunsteten Wassers über dem Ozean wieder ab. Die übrigen 10 % des Wasserdampfes werden in Richtung Festland transportiert. Hier ist die Verdunstungsrate im allgemeinen deutlich geringer als über den ozeanischen Gebieten. Neben der als Evaporation bezeichneten Verdunstung von Wasseroberflächen spielt über Landflächen die Transpiration von Pflanzen eine wichtige Rolle. Man spricht deshalb zusammenfassend von Evapotranspiration. Ist über dem Festland die Niederschlagsrate größer als die Verdunstungsrate, spricht man von einer humiden Zone, anderenfalls ist das Gebiet arid. In Abbildung 1 ist die humide Zone durch einen Niederschlagsüberschuss von 8 % gekennzeichnet (Verdunstung: 12 %, Niederschlag: 20 %), in der ariden Zone sind Verdunstungs- und Niederschlagsrate gleich groß (jeweils 7 %). Kleinste Wassermengen (ϵ), die durch Tau direkt wieder kondensieren, sind für die Bilanzierung vernachlässigbar. Durch Flüsse oder über das Grundwasser gelangen die fehlenden 8% des Wassers (Niederschlagsüberschuss aus humider Zone) zurück in die Ozeane. Damit ist der Wasserkreislauf geschlossen.

Abschließend seien zur besseren Vorstellung noch einige Zahlenwerte genannt: pro Jahr werden im Wasserkreislauf der Atmosphäre ungefähr $35 \cdot 10^{12} \text{ m}^3$ Wasser von den Ozeanen zu den Kontinenten transportiert. Diese ergeben sich aus der Differenz von $418 \cdot 10^{12} \text{ m}^3$ verdunstetem Wasser pro Jahr bei einem gleichzeitigen Niederschlag von $383 \cdot 10^{12} \text{ m}^3$ pro Jahr über den Ozeanen. Die Verdunstung über den Kontinenten ist mit $65 \cdot 10^{12} \text{ m}^3$ pro Jahr deutlich geringer. Jedes Jahr fallen über den Landflächen ca. $100 \cdot 10^{12} \text{ m}^3$ Niederschlag.

2.2 Hydrologie stabiler Isotope

2.2.1 Natürlich vorkommende Isotope und Referenzstandard SMOW

Wasser kommt in der Natur nicht nur in der üblichen Form ${}^1\text{H}_2{}^{16}\text{O}$, sondern auch in den stabilen Isotopen ${}^1\text{H}_2{}^{18}\text{O}$ und ${}^1\text{H}^2\text{H}{}^{16}\text{O}$ vor. Letzteres, auch als deuteriertes Wasser bekanntes Isotop, wird oft auch in der Kurzform HDO geschrieben. Genau genommen kommt nicht das Wasser als Isotop vor, sondern nur die Bestandteile Wasser- oder Sauerstoff. In der Klimaforschung hat sich dennoch der Begriff „Wasserisotope“ anstelle der korrekteren Bezeichnung „Wasserisotopologie“ durchgesetzt. Im Ozean kommen diese Isotope etwa im Verhältnis $[\text{H}_2{}^{16}\text{O}] : [\text{H}_2{}^{18}\text{O}] : [\text{HDO}] \approx 10^6 : 2000 : 320$ vor. Dieses Verhältnis wurde erstmals 1961 als Isotopenstandard vorgeschlagen (*Craig*) und 1968 von der Internationalen Atomenergiebehörde (IAEA) in Wien als Referenzwert V-SMOW (Vienna Standard Mean Ocean Water) festgelegt. Das Atomzahlverhältnis $[H] : [D]$ in V-SMOW ist dementsprechend ca. $10^6 : 160$. Die Angabe eines Referenzwertes ist notwendig, da sich die isotopische Zusammensetzung des Wassers durch verschiedene physikalische Vorgänge (z.B. Verdunstung, Kondensation) ändert. Weil die Angabe absoluter Atomzahlverhältnisse nicht praktikabel ist, verwendet man den Standardwert V-SMOW, um relative Veränderungen der Isotopenhäufigkeiten auszudrücken. Als Referenzwert wurde die isotopische Zusammensetzung des Ozeanwassers gewählt, da sich im Ozean (dem mit Abstand größten Wasserreservoir der Erde) die Isotopenzusammensetzung durch die Verdunstung einer relativ kleinen Wassermenge so gut wie überhaupt nicht ändert.

Die einzelnen Isotope haben bei gleicher Temperatur leicht unterschiedliche Dampfdruckwerte und Diffusionsgeschwindigkeiten, weshalb es bei der Verdunstung und Kondensation zu Veränderungen der Isotopenhäufigkeiten kommt. So verdampfen beispielsweise leichtere Isotope schneller als schwerere, der entstandene Wasserdampf ist isotopisch leichter als das Ausgangswasser. Man spricht auch von einer Abreicherung der schweren Isotope im Dampf. Bei der Kondensation ist es genau umgekehrt, da schwerere Isotope zuerst in den flüssigen Aggregatzustand übergehen. Der Vorgang der Ab- beziehungsweise Anreicherung bestimmter Isotope wird als Fraktionierung bezeichnet.

2.2.2 Definition der δ -Werte

Da die Veränderungen der Isotopenhäufigkeiten infolge der Fraktionierung sehr klein sind, verwendet man üblicherweise keine absoluten Zahlenwerte, sondern bezieht sich auf den oben definierten V-SMOW-Standard. Bezeichnet man die Isotopenverhältnisse innerhalb einer Wasserprobe beispielsweise mit $R_D = [\text{HDO}] : [\text{H}_2\text{O}]$ oder $R_{18-\text{O}} = [\text{H}_2^{18}\text{O}] : [\text{H}_2\text{O}]$, so kann man den δ -Wert als relative Abweichung definieren:

$$\delta = 1000 \cdot \left(\frac{R_{\text{Probe}}}{R_{\text{Standard}}} - 1 \right) \quad (1)$$

Durch den Faktor 1000 liefert δ einen Wert in Promille (‰). Anhand von Gleichung 1 lässt sich sofort erkennen, dass positive δ -Werte einem Wasser entsprechen, welches isotopisch schwerer ist als das Standardwasser. Negative δ -Werte stehen dagegen für eine isotopisch leichtere Wasserprobe.

2.2.3 Fraktionierung der Isotope bei Verdunstung und Kondensation

Für die Isotopentrennung bei der Verdunstung sorgen zwei verschiedene Prozesse. Das sind zum einen die Gleichgewichtsfractionierung, zum anderen die kinetische Fraktionierung. Der erste Prozess ist eine Folge der unterschiedlichen Dampfdruckwerte der einzelnen Isotope. Schwerere Isotope haben einen geringeren Dampfdruck als leichtere. Bei gleicher Temperatur befinden sich in einem abgeschlossenen System die schwereren Isotope in flüssigem Wasser eher im Gleichgewicht mit dem Wasserdampf als die leichteren Isotope. Es kommt deshalb zu einer Abreicherung der schweren Wasserisotope im entstehenden Dampf. Aufgrund der geringeren Diffusionsgeschwindigkeiten müssen schwerere Isotope einen höheren Transferwiderstand bei der Diffusion von der Wasseroberfläche durch die anliegende laminare Grenzschicht (wenige Millimeter dick) hindurch in die Atmosphäre überwinden. Auch hierdurch kommt es zu einer Anreicherung leichter Isotope im Wasserdampf. Dieser Vorgang wird als kinetische Fraktionierung bezeichnet. Sowohl die Gleichgewichtsfractionierung als auch die kinetische Fraktionierung sind für die Trennung der Isotope bei der Verdunstung verantwortlich. Eine genauere, auch quantitative Betrachtung der Fraktionierungsprozesse würde an dieser Stelle zu weit führen und ist für die vorliegende Arbeit auch nicht notwendig.

Gleiches gilt für die Isotopentrennung bei der Kondensation. Hier wäre eine quantitative Betrachtung noch komplexer, da die Annahme eines unbegrenzten Wasservorrats für diesen Fall im Allgemeinen nicht erfüllt ist. Das bedeutet, dass sich auch die isotopische Zusammensetzung des Wasserdampfs während der Kondensation verändert. Für das weitere Verständnis dieser Arbeit ist es ausreichend zu wissen, dass das kondensierte Wasser isotopisch schwerer ist als der Wasserdampf, in welchem die leichteren Isotope angereichert werden. Das kondensierende Wasser des fortschreitend leichter werdenden Dampfes wird damit isotopisch ebenfalls leichter.

2.2.4 Einflussfaktoren auf die Isotopentrennung

Temperatur: Aus klimatologischer Sicht ist die Bestimmung bodennaher Oberflächentemperaturen von großer Bedeutung. Die isotopische Zusammensetzung des Niederschlags hingegen wird vorrangig durch die Kondensationstemperatur bestimmt. Dansgaard erkannte im Jahr 1964 erstmals, dass sich die Oberflächen- und Kondensationstemperaturen gleichermaßen von Ort zu Ort verändern und es dadurch einen linearen Zusammenhang zwischen den Isotopenhäufigkeiten im Niederschlag und der bodennahen Oberflächentemperatur am Niederschlagsort gibt [7]. Auch *Yurtsever* und *Gat* konnten 1981 anhand von umfangreichen Datensätzen einen direkten Zusammenhang zwischen der Temperatur und den Isotopenhäufigkeiten feststellen [8]. Allerdings kann dieser bei lokalen Einzelereignissen durch andere Effekte stark überdeckt sein. Mittelt man jedoch beispielsweise über einen Monat, kann man solche Effekte herausheben. Hier wird dann der große Temperatureinfluss deutlich. Der genaue quantitative Zusammenhang ist jeweils von regionalen Gegebenheiten bestimmt, was bei der Angabe einer Eichung eines Isotopenthermometers unbedingt beachtet werden muss. Während *Yurtsever* und *Gat* mit Daten aus den gemäßigten und wärmeren Breiten der Erde für ^{18}O auf

$$\delta^{18}\text{O} = -12 \text{‰} + 0,34 \frac{\text{‰}}{\text{°C}} \cdot T(\text{°C}) \quad (2)$$

kommen [8], gelangte *Dansgaard* 1964 für grönländische und nordatlantische Isotopendaten zu folgendem Ergebnis [7]:

$$\delta^{18}\text{O} = -13,6 \text{‰} + 0,7 \frac{\text{‰}}{\text{°C}} \cdot T(\text{°C}) \quad (3)$$

Die deutlichen Abweichungen zeigen, dass es oftmals nur sinnvoll ist, eine Isotopen-Temperatur-Beziehung für ein geographisch eng begrenztes Gebiet anzugeben. Dennoch ist manchmal auch je nach wissenschaftlicher Fragestellung die Angabe einer globalen $\delta^{18}\text{O}$ - T -Beziehung hilfreich.

Niederschlagsmenge: Die eben erwähnte Korrelation zwischen Isotopenhäufigkeit und Temperatur trifft so nur auf die mittleren und höheren Breiten der Erde zu. In den Tropen ist der Temperatureffekt sehr klein, da die Temperaturen relativ konstant sind. Außerdem wird er durch den sogenannten „amount-effect“ überdeckt. *Dansgaard* formulierte 1964 verschiedene Erklärungen für den „amount-effect“, deren Zusammenwirken dazu führt, dass sehr ergiebige Niederschläge isotopisch leichter sind im Vergleich zu nicht so starken Niederschlägen [7]:

1. Die Luftmassen in den Tropen kühlen sich durch die sehr ausgeprägte Vertikalbewegung sehr weit ab. Schreitet diese Abkühlung weiter voran, verringert sich nicht nur der δ -Wert (siehe Temperatureffekt), sondern es kondensiert mehr Wasserdampf und der Niederschlag ist ergiebiger (und isotopisch leichter).
2. Der isotopische Austausch zwischen fallenden Wassertropfen und umgebendem Wasserdampf ist am stärksten bei leichten Niederschlägen ausgeprägt. Der Wasserdampf der tieferen Luftschichten hat sich noch nicht so stark abgekühlt, weshalb er isotopisch noch deutlich schwerer ist und für höhere δ -Werte bei leichten Niederschlägen sorgt.
3. Der Prozess der Verdunstung fraktioniert auch die fallenden Wassertropfen und führt zu einer Anreicherung der schwereren Isotope im Niederschlag. Durch die deutlich höhere Luftfeuchtigkeit bei langanhaltendem Regen ist die Verdunstungsrate kleiner als bei leichten Niederschlagsereignissen. Der Niederschlag ist deshalb isotopisch leichter.

Dansgaard gibt beispielsweise für Kinshasa (4°S , 15°O , Kongo) einen „amount-effect“ von $-2,2\text{‰}$ pro 100 mm Niederschlag an. In Cuiabá (16°S , 56°W , Brasilien) sind es sogar $-3,6\text{‰}$ je 100 mm Niederschlag [7].

Kontinentalität: Wenn Luftmassen landeinwärts ziehen, regnen sie sich in der Regel kontinuierlich weiter ab. Dadurch kommt es zur Abreicherung von schweren

Isotopen im zurückbleibenden Wasserdampf. Der folgende Niederschlag ist demzufolge isotopisch leichter als beim vorherigen Niederschlagsereignis (aber immer noch isotopisch schwerer als der zurückbleibende Dampf). Mit zunehmender Entfernung zur Küste nimmt der δ -Wert der Niederschläge also ab. Sehr gut erkennbar ist dies in Abbildung 2. Hier sind δ D-Werte des Niederschlags (bereitgestellt durch das „Global Network of Isotopes in Precipitation“ GNIP) für Europa dargestellt [9]. Die Zahlenwerte (in Promille) geben das niederschlagsgewichtete Mittel über den Zeitraum von 1959-2007 wieder, wobei nicht für jede GNIP-Station über die gesamte Zeit Messungen existieren. Da Europa unter dem Einfluss der Westwinddrift liegt, werden die Niederschläge nach Osten hin isotopisch leichter (Valencia: δ D = -32 ‰ \rightarrow Braunschweig: δ D = -55 ‰ \rightarrow Minsk: δ D = -80 ‰ \rightarrow Moskau: δ D = -88 ‰).



Abbildung 2: GNIP-Werte für δ D über Europa, zeitliches Mittel über 1959-2007 [9]

Wichtig im Zusammenhang mit dem Kontinental-Effekt ist der Einfluss der Evapotranspiration über den Landflächen. Dadurch gelangt „neuer“ Wasserdampf in die Atmosphäre und der Kontinental-Effekt kann abgeschwächt werden. Der kontinentale Gradient (δ D in Abhängigkeit von der Entfernung zur Küste) wird dadurch kleiner. Da die Verdunstung im Winter über den Landflächen Europas geringer ist als im Sommer, ist der Kontinental-Effekt besonders stark in den Wintermonaten ausgeprägt.

Höheneffekt: Steigen Luftmassen zum Beispiel an Gebirgsketten auf, kühlen sie dabei ab und regnen aus. Beim Ausregnen werden die leichten Isotope erneut im Wasserdampf angereichert. Auch hier haben regionale Gegebenheiten einen großen Einfluss auf die quantitative Anreicherung. Das „Global Network of Isotopes in Precipitation“ (GNIP) der IAEA gibt für den Höheneffekt in den mittleren Breiten Werte zwischen $-0,15\text{ ‰}$ und $-0,3\text{ ‰}$ pro 100 m Höhengewinn an. In den Anden Südamerikas werden, vermutlich durch erzwungenes Abregnen an den steilen Bergmassiven, ab einer Höhe von 3.000 Metern Werte von bis zu $-0,5\text{ ‰}$ pro 100 m gemessen.

2.2.5 „Global Meteoric Water Line“ und Deuterium-Exzess

Die δD - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte haben einen bemerkenswerten Zusammenhang. Da die δ -Werte jeweils annähernd linear von der Gleichgewichtsfractionierung abhängen, ist beim Auftragen der δD - über den $\delta^{18}\text{O}$ -Werten des Niederschlags theoretisch eine Gerade zu erwarten, deren Schnittpunkt mit der Ordinatenachse durch die kinetische Fraktionierung bei der Verdunstung bestimmt wird. In der Tat werden die experimentell ermittelten δ -Werte näherungsweise durch eine Gerade der Form

$$\delta\text{D} = 8 \cdot \delta^{18}\text{O} + d = 8 \cdot \delta^{18}\text{O} + 10\text{ ‰} \quad (4)$$

wiedergegeben. Die δ -Werte sind hierbei wieder in Promille einzusetzen. Diese Gerade wird seit einem Vorschlag von *Craig* im Jahr 1961 auch „Global Meteoric Water Line“ (GMWL) genannt [10]. Dabei wird die additive Konstante $d = +10\text{ ‰}$ als Deuterium-Exzess bezeichnet. Da in sehr feuchten Gebieten der Nettostrom an Molekülen bei der Verdunstung vergleichsweise gering ist, fällt auch der Unterschied bei der kinetischen Trennung geringer aus und es ist mit einem kleineren Deuterium-Exzess zu rechnen.

2.2.6 Isotopentrennung im Wasserkreislauf

Analog zu dem im Punkt 2.1 dargestellten Wasserkreislauf lässt sich schematisch ein Kreislauf der isotopischen Zusammensetzung der verschiedenen Wassermassen aufstellen. Ein solcher Wasserkreislauf mit Informationen zur Fraktionierung der Wasserisotope ist in Abbildung 3 dargestellt. Darin ist neben den Isotopentrennungen

bei Verdunstung und Kondensation beispielsweise auch der Kontinental-Effekt zu sehen.

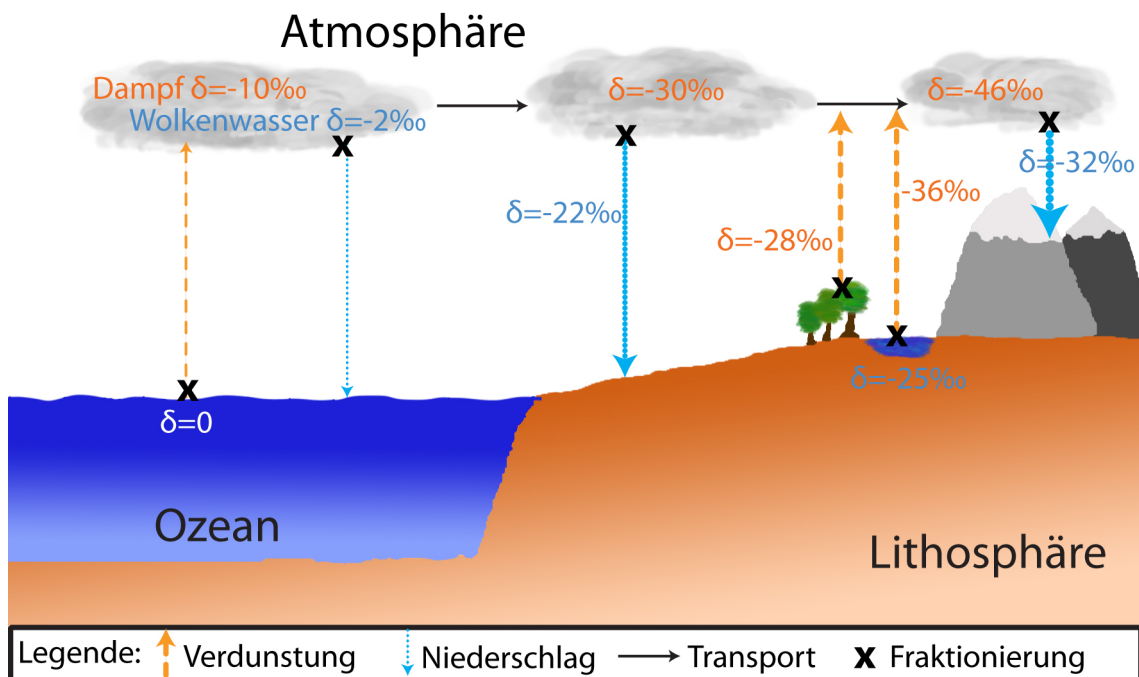


Abbildung 3: Wasserkreislauf und isotopische Fraktionierung

Der Vergleich der Isotopenfraktionierungen an verschiedenen Stellen im Wasserkreislauf sollte bei der Betrachtung der Grafik besonders beachtet werden. So ist das Wolkenwasser (und damit auch der Niederschlag) stets isotopisch schwerer als der zugehörige Wasserdampf. Mit zunehmender Entfernung zur Küste werden sowohl das Wasser als auch der Dampf isotopisch leichter. In stehenden Gewässern (zum Beispiel Seen) kann das Wasser durch Verdunstung und wenig nachfallenden Niederschlägen isotopisch deutlich schwerer sein als der Wasserdampf in der Atmosphäre (bei gleicher Entfernung zur Küste). Einzig bei der Transpiration der Pflanzen tritt keine Phasentrennung auf, die isotopische Zusammensetzung des abgegebenen Wasserdampfes entspricht der des über die Wurzeln aufgenommenen Wassers [11].

Man erkennt in Abbildung 3, dass die Isotopenhäufigkeit quasi die „Geschichte“ des Wassers widerspiegelt. Sie gibt Auskunft über den bereits durchlaufenen Wasserkreislauf. Durch Messungen der δ -Werte können beispielsweise regionale Effekte im Wasserkreislauf untersucht werden. Solche Messungen können am Grundwasser und in anderen Gewässern, am Niederschlag sowie Wasserdampf, an Epidermisschichten

von Pflanzen sowie an Eisbohrkernen von Gletschern und Eisschilden durchgeführt werden.

2.2.7 Bedeutung für die Klimatologie

Die Hydrologie stabiler Wasserisotope findet in vielen Gebieten der Klimatologie ihre Anwendung. Einige wenige seien im Folgenden aufgeführt:

Analyse von Eisbohrkernen: Die Untersuchung von Eisbohrkernen ist für die Paläoklimatologie von herausragender Bedeutung. Durch den Zusammenhang zwischen Isotopenhäufigkeit und Temperatur kann man klimageschichtliche Rekonstruktionen durchführen. Ein Beispiel dafür ist in Abbildung 4 zu sehen.

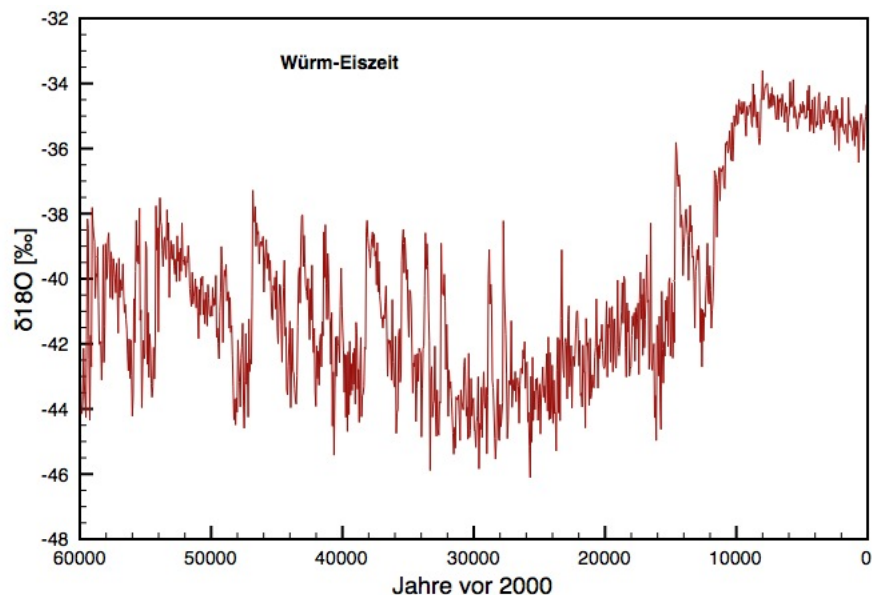


Abbildung 4: $\delta^{18}\text{O}$ -Werte für Eisbohrkern (Grönland, 2005) [12]

Hier sind die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte eines grönländischen Eisbohrkerns (North Greenland Ice Core Project, $75^{\circ}6'N, 42^{\circ}18'W$) gegen das rekonstruierte Alter des Eises aufgetragen. In dem Diagramm ist sehr gut die Abreicherung der schwereren Isotope während der jüngsten Kaltzeit (Würm-Eiszeit [ca. 115.000-10.000 Jahre vor heute]) zu sehen. Seit Beginn des Holozäns ist diese Abreicherung deutlich weniger ausgeprägt. Die sehr großen Schwankungen lassen auf die Möglichkeit relativ kurzfristiger Klimaveränderungen schließen. Für die Interpretation solcher Kurven muss eventuell der Höheneffekt berücksichtigt werden. Die Inlandeisschichten könnten während

der Eiszeiten deutlich mächtiger gewesen sein, sodass man quasi den Niederschlag in größerer Höhe messen würde. Unter den Klimaforschern ist dieser Punkt jedoch bis heute umstritten.

Fossile Grundwässer: Für die Paläoklimatologie ist von Vorteil, dass die isotopische Zusammensetzung des Grundwassers bis zu Temperaturen von $+60\text{ °C}$ bis $+80\text{ °C}$ in der grundwasserführenden Schicht konserviert wird. So lassen sich auch fossile Grundwasserwerte zur Untersuchung nutzen. Als ein Beispiel hierfür werden in Abbildung 5 fossile δD -Werte der nordafrikanischen Grundwässer unter der Sahara gezeigt [13].

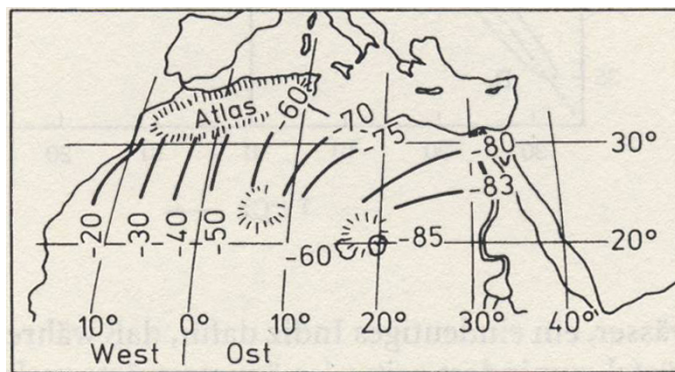


Abbildung 5: Fossile δD -Isolinien im nordafrikanischen Grundwasser [4]

Die fossilen Werte stammen dabei aus der Periode der letzten Kaltzeit (vor ca. 20.000 Jahren). Erstaunlicherweise zeigt sich bei den Messungen ein ähnlicher Kontinentaleffekt wie im heutigen Europa (vergleiche Abbildung 2). Da das Wettergeschehen in der Sahara von der Passatzirkulation beeinflusst wird, wäre ein solcher Kontinentaleffekt in longitudinaler Richtung unter heutigen Bedingungen nicht zu erwarten. Die fossilen δD -Werte deuten darauf hin, dass während der letzten Kaltzeit die atmosphärischen Zirkulationsgürtel in Richtung Äquator verlagert waren und die Sahara deshalb unter dem Einfluss der Westwinddrift lag.

Klimamodellierung: Die Isotopentrennung spielt auch eine Rolle in der Klimamodellierung. Wird ein Klimamodell durch eine Simulation der Isotopenfraktionierung ergänzt, so lässt sich die Güte der Simulation des Wasserkreislaufs anhand der δ -Werte abschätzen. Die atmosphärischen Prozesse sind äußerst komplex und auch heute noch Gegenstand aktueller Forschungen. Da die Isotopenverhältnisse

Aufschlüsse über den Weg des Wassers in der Atmosphäre geben können, lässt sich feststellen, wie gut der Wasserkreislauf im Klimamodell simuliert wird. Dazu kann man Messdaten mit den Klimasimulationen vergleichen, um zu sehen, ob das Modell die tatsächlichen Verhältnisse wiedergeben kann. Da der Wasserkreislauf viele andere meteorologische Größen beeinflusst, können kleine Fehler in dessen Simulation größere Auswirkungen auf das simulierte Klima zur Folge haben. Die Wasserisotope können somit als Test der Simulation verwendet werden. Solche Tests sollten sowohl mit aktuellen Daten als auch beispielsweise mit Messungen an Eisbohrkernen verglichen werden. Derartige Modell-Messdaten-Vergleiche sind ein wichtiger Bestandteil der Klimamodellierung und auch Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

3 Methodische Herangehensweise

3.1 Methodische Übersicht des Modell-Satelliten-Vergleichs

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, Simulationen des ECHAM5-Zirkulationsmodells zum Isotopenverhältnis von Deuterium im atmosphärischen Wasserdampf mit neuartigen Satellitendaten zu vergleichen. Mithilfe des Spektrometers SCIAMACHY, einem Instrument an Bord des Satelliten ENVISAT, konnten erstmals Daten zur globalen Verteilung von Deuterium im Wasserdampf der Atmosphäre gemessen werden. Diese im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Daten wurden bereits im Jahr 2009 durch *Frankenberg et al.* veröffentlicht [5]. Es ist damit erstmals möglich, direkt gemessene Isotopenverhältnisse im Wasserdampf mit entsprechenden simulierten Werten eines atmosphärischen Zirkulationsmodells auf globaler Skala zu vergleichen.

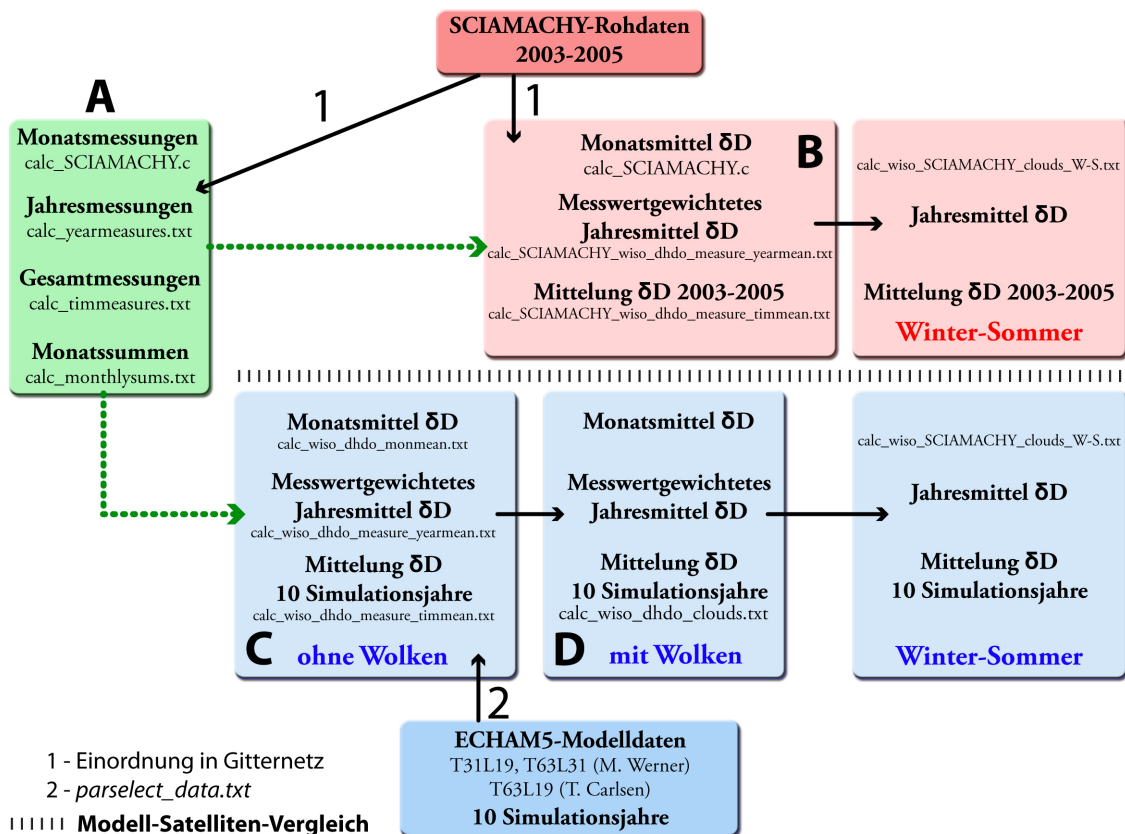


Abbildung 6: Übersicht zu den Schritten und Skripten der Auswertung

Für den angestrebten Modellvergleich wurden drei ECHAM5-Simulationen mit

unterschiedlichen räumlichen Auflösungen für die Modellatmosphäre gewählt. Eine höhere Modellauflösung hat unter anderem eine realistischere Modelltopographie zur Folge. Auf diese Weise kann überprüft werden, welchen Einfluss die räumliche Modellauflösung auf die Isotopensimulation hat. Auch lässt sich analysieren, ob eine Auflösungserhöhung eine deutliche Verbesserung im Modell-Satelliten-Vergleich bewirkt und damit den notwendigen höheren Rechenaufwand rechtfertigt.

Eine Übersicht über die im Rahmen dieser Arbeit erfolgten Auswertung ist in Abbildung 6 zu sehen. Die Arbeitsschritte wurden mithilfe verschiedener UNIX-Skripte realisiert. Während Abbildung 6 deren Namen enthält, sind die Skripte selbst als Anhang dieser Arbeit beigefügt. Die einzelnen Arbeitsschritte wurden den vier verschiedenen Abschnitten A bis D zugeordnet (vergleiche Abbildung 6) und werden im Folgenden erläutert.

3.2 SCIAMACHY-Daten

3.2.1 Grundlagen des Spektrometers SCIAMACHY

Am 1. März 2002 startete die ESA den Satelliten ENVISAT („Environmental Satellite“). An Bord von ENVISAT befindet sich unter anderem das „Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Cartography“ (kurz: SCIAMACHY), ein bildauflösendes Spektrometer zur weltweiten Konzentrationsbestimmung von verschiedenen Spurengasen in der Tropo- und Stratosphäre. Zu diesem Zweck misst SCIAMACHY die Reflektivität der Erdatmosphäre in einem Wellenlängenbereich von 240 bis 2400 nm. Aus den Absorptionsspektren kann man auf die chemische Zusammensetzung der untersuchten Luftsäule schließen.

Das emittierte Spektrum der Sonne entspricht dem eines schwarzen Strahlers einer Temperatur von ca. 5900 K (siehe rote Kurve in Abbildung 7). Beim Durchgang der Strahlung durch die Erdatmosphäre kommt es zu Absorption und Streuung. Bei der Absorption wird die Strahlungsleistung einer stoffspezifischen Wellenlänge durch Anregung von Atomen oder Molekülen abgeschwächt (siehe blaue Kurve in Abbildung 7). Dadurch entstehen Absorptionslinien. Durch die zusätzlichen Rotationsfreiheitsgrade von Molekülen entsteht beim Wasser beispielsweise eine Bandenstruktur. Durch den großen spektralen Abstand zwischen Rotations- und Vibrati-

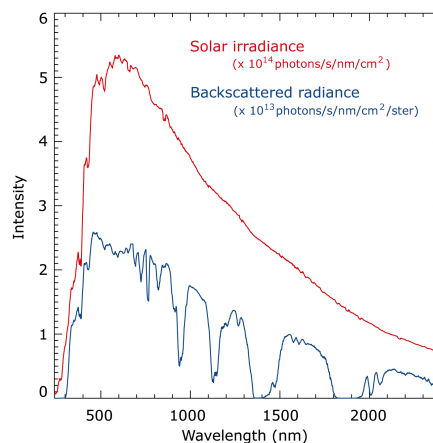


Abbildung 7: Spektrum der solaren Einstrahlung und rückgestreuten Strahlung [14]

onsübergängen von HDO besitzt deuteriertes Wasser andere Absorptionslinien als beispielsweise H_2^{16}O . Auf diese Weise lassen sich anhand der SCIAMACHY-Daten sowohl die Konzentrationen von H_2^{16}O als auch von HDO für die jeweilige vertikale Luftsäule bestimmen [5].

3.2.2 Aufbereitung der SCIAMACHY-Daten

Die SCIAMACHY-Rohdaten erstrecken sich über einen Zeitraum von 3 Jahren (2003-2005). Dabei existieren für jeden Tag mehrere Messungen an unterschiedlichen Orten der Erde (je nach Position des Satelliten ENVISAT).

Einordnung der Daten in ein Gitternetz

Um die Satellitendaten später mit den ECHAM5-Modellwerten vergleichen zu können, müssen sie zunächst in ein entsprechendes Gitternetz eingeordnet werden. Die Abmessungen einer Gitterzelle richten sich dabei nach den verschiedenen räumlichen ECHAM5-Auflösungen (siehe Punkt 3.3.1).

Aus den Rohdaten werden für die jeweils aktuelle Messung die geographische Länge und Breite sowie der zugehörige δD -Wert eingelesen. Mithilfe der geographischen Koordinaten lässt sich die Messung eindeutig einer Zelle im Gitternetz zuordnen. Eine Darstellung des ECHAM5-Modellgitternetzes für die Nordhalbkugel ist beispielhaft für eine T31-Modellauflösung in Abbildung 8 zu sehen. In diesem Fall besteht das Array aus 2304 Feldern, angeordnet in 24 Zeilen zu je 96 Spalten. Eine Messung von $\delta\text{D} = -220 \text{‰}$ bei 50°N und 150°O würde eine Einordnung in Zeile

11 und Spalte 40 zur Folge haben.

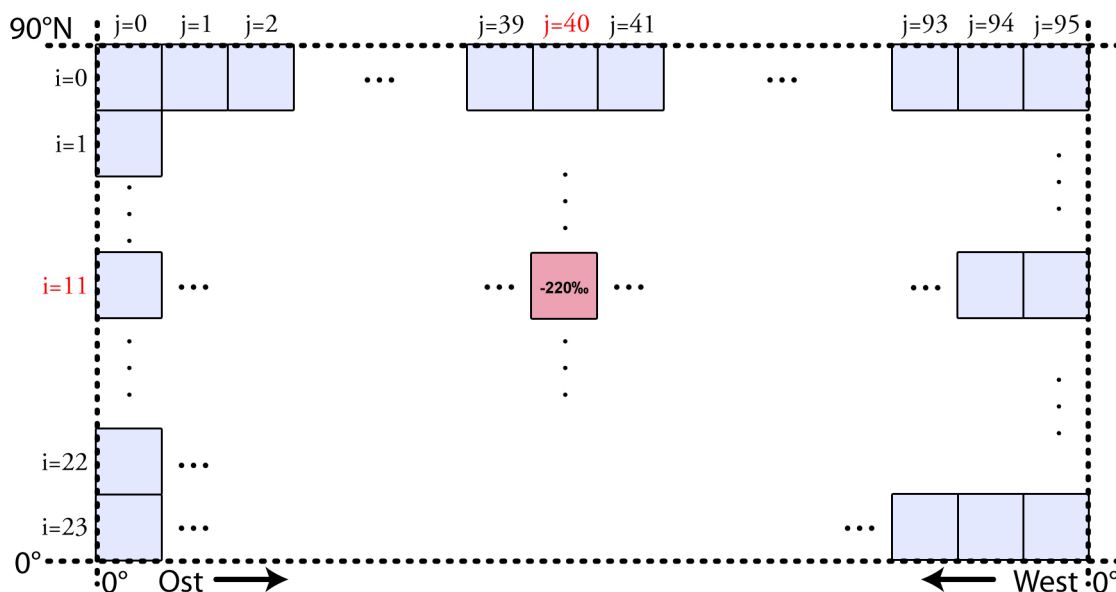


Abbildung 8: Graphische Darstellung des T31-Gitternetzes

A - Anzahl der SCIAMACHY-Messungen

Neben der Speicherung des δD -Wertes wird für jede Gitterzelle gleichzeitig die Anzahl der SCIAMACHY-Messungen für jeden Monat bestimmt. Daraus können für jede Gitterzelle die Anzahl an Messungen pro Jahr (=Summe der Messungen über 12 Monate), die gesamte Anzahl der Messungen im Zeitraum 2003-2005 und die Anzahl an Messungen in einem spezifischen Monat innerhalb des gesamten Untersuchungszeitraums bestimmt werden.

3.2.3 Kalkulation der aufbereiteten SCIAMACHY-Daten

Monatsmittel: Zunächst wird für jeden Monat des Untersuchungszeitraums 2003-2005 der jeweilige monatliche Mittelwert der Isotopenverhältnisse von Deuterium im atmosphärischen Wasserdampf arithmetisch berechnet.

Messwertgewichtetes Jahresmittel: Um Jahresmittelwerte von Deuterium im Wasserdampf von SCIAMACHY-Daten und ECHAM5-Modellwerten miteinander vergleichen zu können, muss eine einheitliche Berechnung erfolgen. Dies kann sowohl über eine gewichtete als auch über eine ungewichtete Mittelung von Monatswerten realisiert werden. SCIAMACHY hat im Untersuchungszeitraum hauptsächlich in

den Frühlings- und Sommermonaten gemessen (März bis August auf der Nordhalbkugel, September bis Februar auf der Südhalbkugel). Um dieses Ungleichgewicht in der Messverteilung zu berücksichtigen, erfolgt die Berechnung von Jahresmitteln im Rahmen dieser Arbeit über ein gewichtetes Mittel. Dabei gehen die einzelnen Monatsmittelwerte gewichtet nach der Anzahl der SCIAMACHY-Messungen im jeweiligen Monat in das entsprechende Jahresmittel ein (siehe Gleichung 5).

$$\delta D_{\text{Jahr}} = \frac{\sum_{i=01}^{12} [\delta D_i \cdot (\text{Anzahl an Messungen im Monat})_i]}{\sum_{i=01}^{12} (\text{Anzahl an Messungen im Monat})_i} \quad (5)$$

Tabelle 1 verdeutlicht den Einfluss einer Gewichtung nach der Anzahl der Messungen bei der Kalkulation des Jahresmittelwertes beispielhaft für Messungen in einer ausgewählten Gitterzelle (bei $31,545^\circ N$, $0^\circ O$) im Jahr 2003.

Monat	Anzahl an Messungen	δD [‰]	Anteil am Jahresmittel	
			ohne Gewichtung	mit Gewichtung
01	338	-230	8,3 %	7,4 %
02	342	-207	8,3 %	7,5 %
03	432	-204	8,3 %	9,4 %
04	378	-158	8,3 %	8,3 %
05	373	-205	8,3 %	8,2 %
06	431	-160	8,3 %	9,4 %
07	514	-167	8,3 %	11,2 %
08	469	-191	8,3 %	10,3 %
09	438	-192	8,3 %	9,6 %
10	341	-192	8,3 %	7,5 %
11	289	-219	8,3 %	6,3 %
12	227	-233	8,3 %	4,9 %
2003	4572	—	-197 ‰	-193 ‰

Tabelle 1: Beispiel für eine Berechnung von Jahresmittelwerten des δD -Signals im Wasserdampf mit und ohne Gewichtung nach der tatsächlichen Anzahl an SCIAMACHY-Messungen in jedem Monat

Der Jahresmittelwert 2003 würde für diese Gitterzelle ohne Gewichtung -197 ‰ betragen, mit Gewichtung erhält man einen Mittelwert von -193 ‰.

Mittlung über den gesamten Zeitraum 2003-2005: Bei der Mittlung über den gesamten Messzeitraum wird das arithmetische Mittel über die Jahre 2003 bis 2005 gebildet. Existieren für eine Gitterzelle im gesamten Zeitraum 2003-2005 weni-

ger als 15 SCIAMACHY-Messungen, so wird der berechnete mittlere δD -Wert als nicht ausreichend repräsentativ eingestuft und für die Auswertung nicht verwendet. Da dies außerhalb des Gebietes von $80^\circ N$ bis $65^\circ S$ überwiegend der Fall ist, werden diese Regionen komplett aus dem Vergleich ausgenommen.

3.3 ECHAM5-Daten

3.3.1 Das atmosphärische Zirkulationsmodell ECHAM5

Das ECHAM5-Modell ist die fünfte Version des atmosphärischen Zirkulationsmodells ECHAM, welches ursprünglich 1989 aus dem Wettervorhersagemodell des Europäischen Zentrums für mittelfristige Wetterprognosen („European Centre for Medium-Range Weather Forecasts“, kurz: **ECMWF**) hervorging und vom Max-Planck-Institut für Meteorologie in Hamburg (**HAM**) für Klimasimulationen angepasst wurde.

Das Zirkulationsmodell ECHAM5 löst numerisch ein System von Differentialgleichungen, welches sich aus grundlegenden Überlegungen zum physikalischen Zustand der Atmosphäre ergibt. Dies sind in erster Linie die Erhaltungssätze von Energie, Masse und Impuls. Weiterhin werden sowohl Teilchentransporte zwischen als auch physikalische Prozesse in den einzelnen Gitterzellen berücksichtigt. Die numerische Lösung dieser Differentialgleichungen erfolgt in diskreten Zeitschritten.

Horizontale Auflösung: Das ECHAM5-Modell bietet die Möglichkeit, verschiedene räumliche Auflösungen einzustellen. Dabei handelt es sich stets um rechteckige Gauß'sche Gitternetze („Gaussian Grid“), die dadurch gekennzeichnet sind, dass die Grid-Punkte entlang der Längengrade einen konstanten, entlang der Breitengrade einen nahezu konstanten Abstand zueinander haben. Typische, im ECHAM5-Modell verwendete horizontale Auflösungen werden mit T21, T31, T42, T63, T85, T106 oder T159 bezeichnet. Das „T“ steht für „triangular truncations“ und bezieht sich auf die Art der Erzeugung des Gitternetzes. Eine genauere Beschreibung führt an dieser Stelle jedoch zu weit. Allgemein gilt: je höher die Zahl, umso feiner ist die Auflösung (siehe Tabelle 2).

Vertikale Auflösung: Die Modellatmosphäre ist vertikal in mehrere Schichten eingeteilt. Die Dicke der Schichten richtet sich in Bodennähe nach der Topographie des Geländes, während sie im oberen Bereich der Troposphäre allein durch den dort herrschenden Luftdruck bestimmt wird. In der obersten vertikalen Schicht wird ein konstanter Druck von 10 hPa vorgeschrieben. Typischerweise werden für ECHAM5-Simulationen in der Troposphäre 19 oder 31 vertikale Schichten verwendet.

Zeitliche Auflösung: Die verschiedenen räumlichen Modellauflösungen bestimmen auch die zeitliche Modellauflösung, die für eine bestimmte Simulation notwendig ist. Die Länge der Zeitschritte wird dabei durch das Courant-Friedrichs-Levy-Kriterium für die numerische Lösung von Differentialgleichungen bestimmt. Dessen prinzipielle Aussage ist, dass ein Signal pro Zeitschritt nicht weiter als um einen Gitterpunkt Abstand transportiert werden darf, da sonst das numerische Integrationsverfahren instabil wird. Andererseits sollte man darauf achten, die Zeitschritte nicht zu klein zu wählen, um Rechenzeit zu sparen.

In Tabelle 2 sind die drei in der vorliegenden Arbeit verwendeten Auflösungen von ECHAM5 dargestellt.

Auflösung	Gitterzellengröße	Gitterspalten und -zeilen	Vertikale Schichten	Modellzeitschritt
<i>T31L19</i>	$\approx 3,75^\circ \times 3,75^\circ$	96 x 48	19	40 min
<i>T63L19</i>	$\approx 1,875^\circ \times 1,875^\circ$	192 x 96	19	20 min
<i>T63L31</i>	$\approx 1,875^\circ \times 1,875^\circ$	192 x 96	31	12 min

Tabelle 2: In dieser Arbeit verwendete ECHAM5-Auflösungen

Start- und Randbedingungen: Zu Beginn einer Simulation werden im ECHAM5-Modell Startwerte der verschiedenen atmosphärischen Variablen gesetzt. Für die Lösung der Differentialgleichungen werden weiterhin Randbedingungen vorgegeben. Die drei analysierten Simulationen verwendeten als Randbedingungen Daten über Wasseroberflächentemperaturen und Meereiskonzentrationen der zweiten Version des „Atmospheric Model Intercomparison Project“-Datensatzes (AMIP II) der Jahre 1979 bis 1996. Die Temperatur- und Meereis-Daten gingen in ECHAM5 als sich jährlich wiederholende untere Randbedingungen ein.

Simulationsdauer: Um den mittleren klimatologischen Zustand der Atmosphäre hinreichend gut im ECHAM5-Modell abzubilden, wurden alle ECHAM5-Simulationen in dieser Arbeit für jeweils 10 Modelljahre durchgeführt. Vor der eigentlichen Simulation wurde das Modell mit Hilfe einer Einschwingdauer von 2 Simulationen in einen Gleichgewichtszustand gebracht.

3.3.2 Kalkulation der aufbereiteten ECHAM5-Modelldaten

„Co-Location“

„Co-Location“ ist der Fachbegriff dafür, dass bei einem Modell-Satelliten-Vergleich nur die Modellwerte verwendet werden, die zeitlich und räumlich mit den Satellitendaten übereinstimmen. Angewandt auf den angestrebten Vergleich in dieser Arbeit bedeutet dies, dass nur die ECHAM5-Modellwerte einbezogen werden, die zeitlich mit den SCIAMACHY-Messungen identisch sind. Da die ECHAM5-Modellwerte als monatliche Mittelwerte vorliegen und keine realen Kalenderdaten repräsentieren, wird der genaue Tag und die genaue Tageszeit der SCIAMACHY-Messungen vernachlässigt. Stattdessen werden bei der Berechnung von Jahresmittelwerten die ECHAM5-Monatsmittelwerte nach der Anzahl der SCIAMACHY-Messungen im jeweiligen Monat gewichtet. Die räumliche Übereinstimmung wird durch die Einordnung der SCIAMACHY-Messwerte in die entsprechenden ECHAM5-Gitterzellen gewährleistet (siehe Punkt 3.2.2).

C - Bestimmung des δD -Monatsmittels

Für den Modell-Satelliten-Vergleich muss bei der Berechnung der ECHAM5-Monatsmittelwerte berücksichtigt werden, dass die jeweiligen SCIAMACHY-Daten ein integriertes δD -Signal im Wasserdampf über die gesamte vertikale Luftsäule darstellen. Deshalb wird zunächst für jede vertikale Modellschicht einer Gitterzelle der jeweilige δD -Wert aus den monatlichen ECHAM5-Mittelwerten der spezifischen Feuchten q_{H_2O} und q_{HDO} bestimmt. Bei der anschließenden Ermittlung des über alle vertikalen Modellschichten integrierten δD -Signals werden die unterschiedlichen Anteile der spezifischen Feuchten an der Gesamtfeuchte der vertikalen Luftsäule berücksichtigt. Eine beispielhafte Berechnung des δD -Signals ist für 19 vertikale Modellschichten in Gleichung 6 dargestellt.

$$\delta D = \frac{\sum_{i=1}^{19} [\delta D_i \cdot q_i]}{\sum_{i=1}^{19} q_i} \quad (6)$$

C - Messwertgewichtetes Jahresmittel

Zur Berücksichtigung der „Co-Location“ gehen zur Berechnung der ECHAM5- δD -Jahresmittelwerte die monatlichen ECHAM5-Mittelwerte gewichtet nach der Anzahl der SCIAMACHY-Messungen im jeweiligen Monat ein.

C - Mittelung über alle 10 Simulationsjahre

Die Mittelung über den gesamten Simulationszeitraum von 10 Modelljahren erfolgt durch Bildung des arithmetischen Mittels. Existiert für eine Gitterzelle kein repräsentativer SCIAMACHY- δD -Wert (siehe Punkt 3.2.3), so wird auch der entsprechende ECHAM5- δD -Wert für die Auswertung nicht verwendet.

D - Berücksichtigung der Wolkenbedeckung

SCIAMACHY benötigt zur Aufnahme der Spektren eine reflektierende Oberfläche. Über den Ozeanen reicht die Reflektivität der dunklen Wasseroberfläche im Allgemeinen jedoch nicht aus, um Messungen durchführen zu können. SCIAMACHY kann deshalb über Ozeanen nur dann Isotopendaten messen, wenn Wolken vorhanden sind, die das Lichtsignal reflektieren. In diesem Fall wird die Isotopenzusammensetzung im Wasserdampf jedoch nicht über die gesamte atmosphärische Säule, sondern nur vom oberen Rand der Atmosphäre bis zur Wolkenhöhe bestimmt. Die Wasserdampfschichten unter der Wolkendecke werden bei der Messung dagegen nicht mehr erfasst. Da anhand der von SCIAMACHY gemessenen Feuchtwerte die Höhe der jeweiligen Wolken nur sehr schwer und mit großer Unsicherheit zu bestimmen ist, werden in der vorliegenden Arbeit nur SCIAMACHY-Messdaten über denjenigen Landflächen in den Vergleich mit einbezogen, welche zum Zeitpunkt der Messung wolkenfrei waren (siehe [5]). Die hierfür benötigte Einteilung der Gitterzellen in Land- und Ozeanflächen erfolgt mit Hilfe der Land-See-Maske des ECHAM5-Modells.

In den Abbildungen 9 und 10 sind die Unterschiede in den jeweiligen Land-See-

Masken der beiden verwendeten Modellauflösungen $T31$ (Abbildung 9) und $T63$ (Abbildung 10) zu sehen.

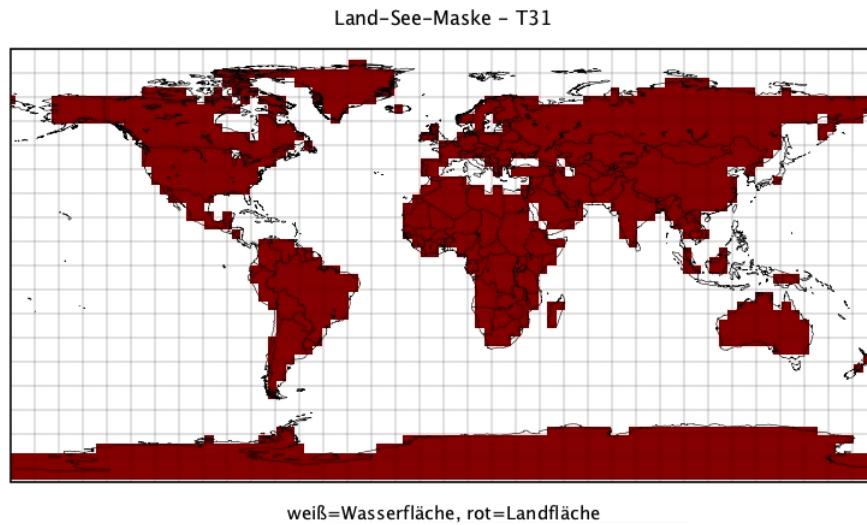


Abbildung 9: Land-See-Maske, $T31$

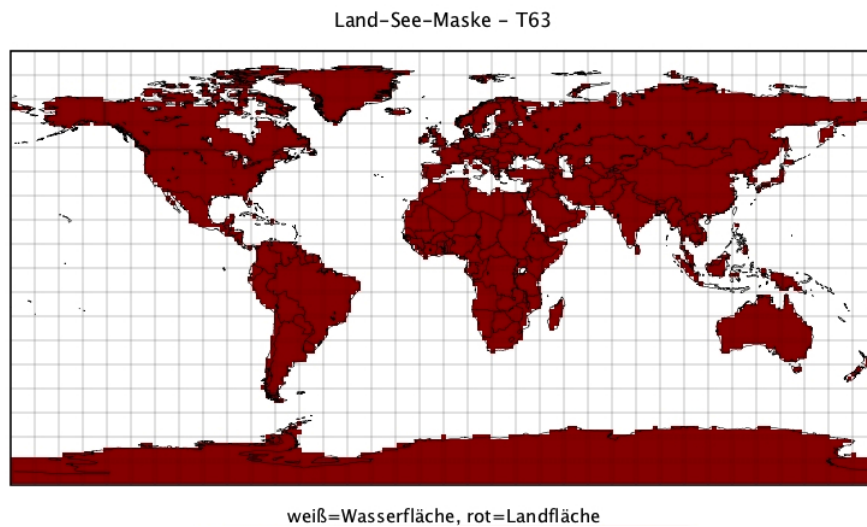


Abbildung 10: Land-See-Maske, $T63$

Um die Wolkenbedeckung auch bei den ECHAM5-Daten zu berücksichtigen, wird die Analyse des Monatsmittels um einen weiteren Schritt ergänzt. Dabei werden nur diejenigen ECHAM5-Gitterpunkte für den Modell-Satelliten-Vergleich verwendet, bei denen die simulierte totale Wolkenbedeckung innerhalb der atmosphärischen Säule einen bestimmten relativen Grenzwert nicht überschreitet.

4 Auswertung und Diskussion

Die Analyse von Modell- und Satellitendaten erfolgt zunächst auf globaler Skala. Dabei werden sowohl mittlere Jahreswerte als auch die Durchschnittswerte von Sommer- und Wintermonaten von ECHAM5-Daten und SCIAMACHY-Satellitendaten miteinander verglichen. Nach einer ausführlichen Betrachtung zur Berücksichtigung der Wolkenbedeckung bei den ECHAM5-Daten anhand zweier Regionen in Afrika und Nordamerika schließen zwei weitere regionale Untersuchungen dieses Kapitel ab. Dabei wird zum einen der Kontinentaleffekt über Europa betrachtet, zum anderen werden die saisonalen Schwankungen des δD -Werts über einer Region in Australien von Modell- und Satellitendaten gegenübergestellt.

4.1 ECHAM5-SCIAMACHY-Vergleich auf globaler Skala

4.1.1 Globale Verteilung von Deuterium im Wasserdampf

In den Abbildungen 11 und 12 sind die mittleren Jahreswerte der Isotopenverhältnisse von Deuterium im Wasserdampf der Atmosphäre sowohl für die SCIAMACHY-Daten als auch für die ECHAM5-*T31L19*-Simulationswerte zu sehen.

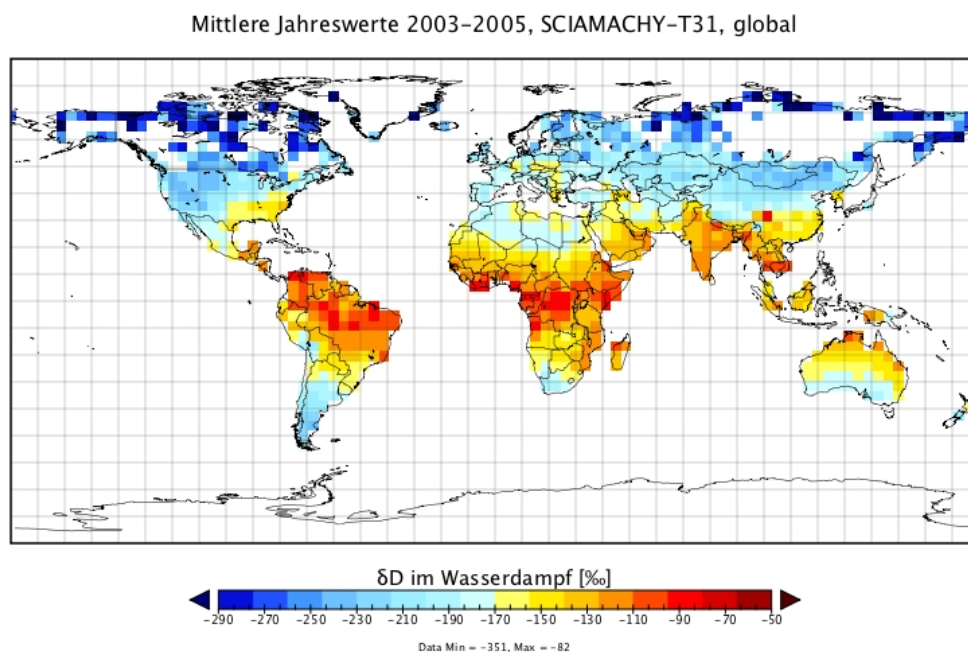


Abbildung 11: Globale δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auflösung: *T31*

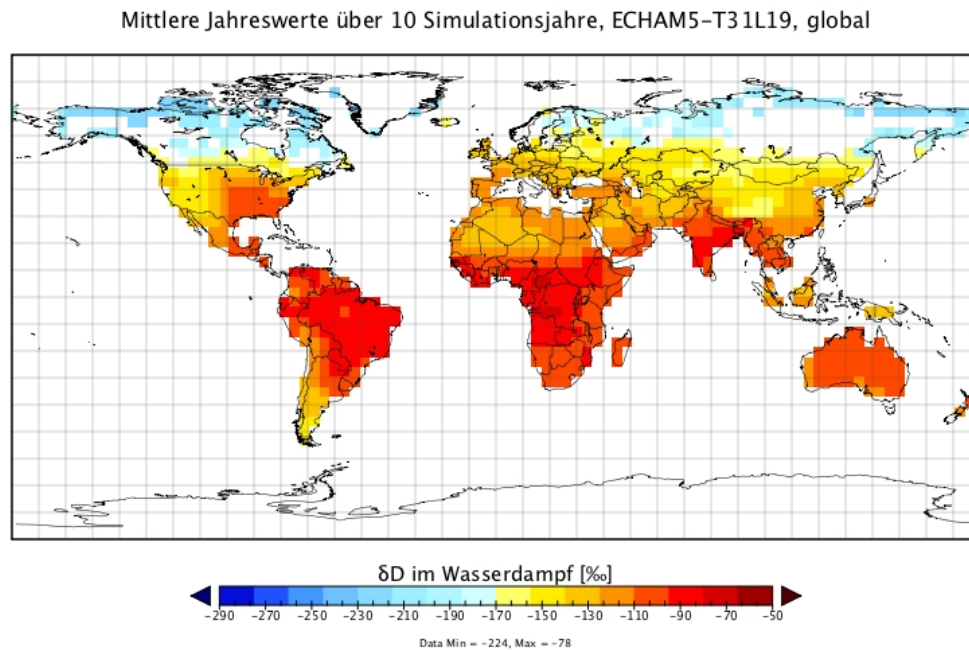


Abbildung 12: Globale δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf, nach ECHAM5-Daten (10 Simulationsjahre), Auflösung: $T31L19$

Zunächst lassen sich grundlegende Gemeinsamkeiten zwischen den Modell- und Satellitendaten feststellen. In den Tropen ist der Wasserdampf isotopisch am schwersten. Beim polwärtigen Transport der Luftmassen reichert sich Deuterium im Wasserdampf durch fortwährendes Ausregnen immer weiter ab. Die daraus folgende, theoretisch zu erwartende Symmetrie zwischen Nord- und Südhalbkugel wird unter anderem durch die unterschiedliche Verteilung der Landmassen gestört. Je nach vorherrschender Windrichtung wird diese grundsätzlich breitengrad-abhängige Isotopenverteilung von zusätzlichen Kontinental- und Höheneffekten (z.B. an den Anden Südamerikas) überlagert.

Generell gibt das ECHAM5-Modell die mit SCIAMACHY gemessenen räumlichen Gradienten gut wieder. Auffällig ist jedoch, dass die absoluten ECHAM5-Modellwerte die von SCIAMACHY gemessenen δD -Werte teilweise stark übersteigen. Dies ist beispielsweise deutlich über Nordafrika und Australien zu erkennen. Zur genaueren Analyse der Abweichungen ist in Abbildung 13 die Differenz aus ECHAM5- und SCIAMACHY-Werten gezeigt. In nahezu sämtlichen Regionen der Erde, die durch Messungen erfasst worden sind, unterschätzt ECHAM5 die Abreicherung des Deuteriums im Wasserdampf um ca. 20 – 80 ‰.

In Abbildung 14 sind die zonalen Durchschnittswerte (Mittelwert aus allen Git-

Differenz von mittleren Jahreswerten: ECHAM5 – SCIAMACHY, T31L19

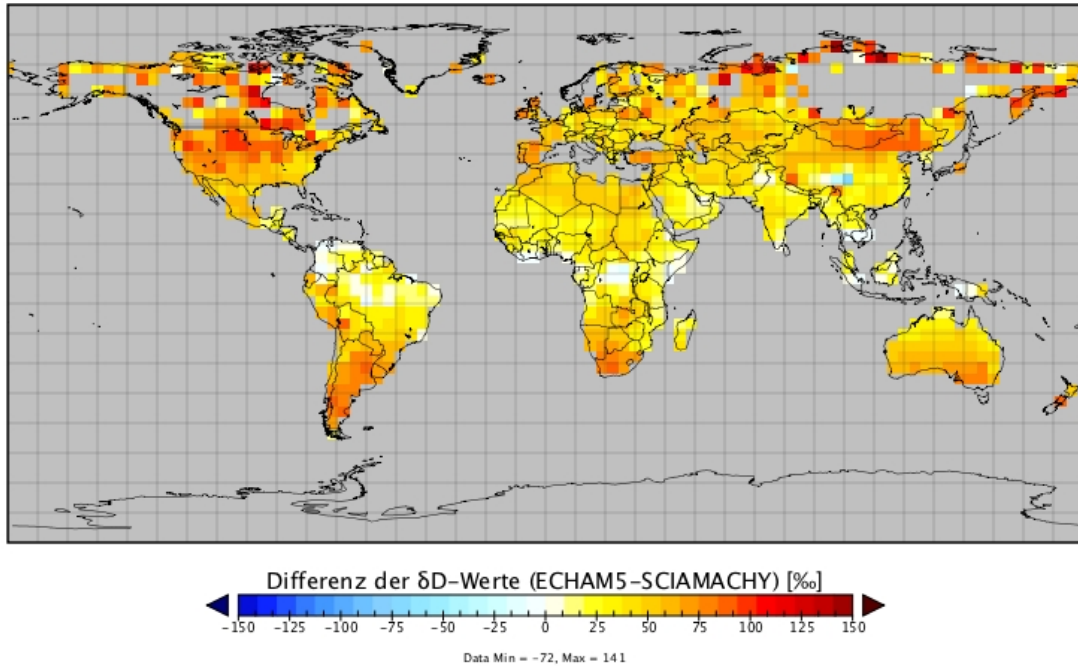
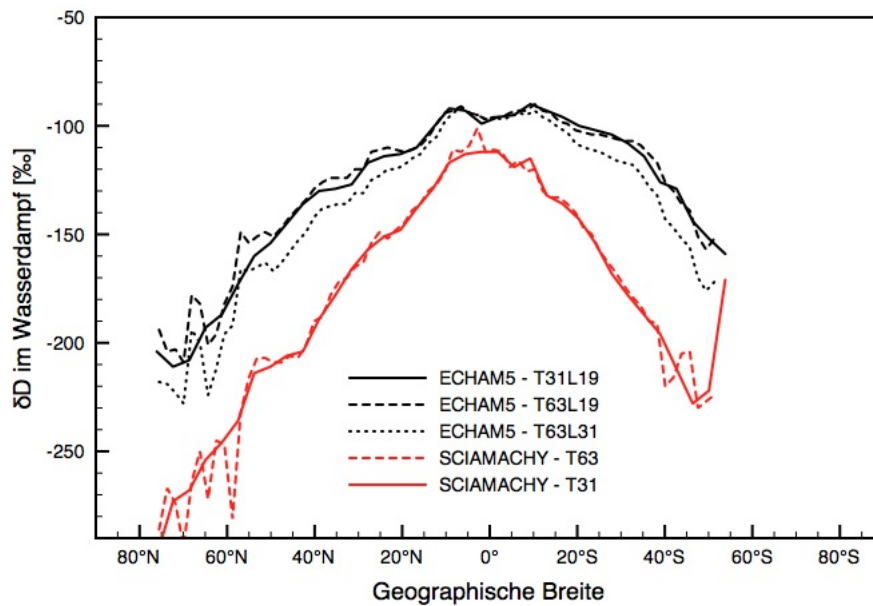


Abbildung 13: Anomalie-Darstellung, Differenz zwischen Modell- und Messwerten (T31L19)

terzellen einer bestimmten geographischen Breite) der verschiedenen ECHAM5-Simulationen mit unterschiedlicher Modellauflösung den zonalen Mittelwerten der SCIAMACHY-Messungen gegenübergestellt. Analog zu Abbildung 13 sind auch in Abbildung 14 die generell zu hohen ECHAM5- δD -Werte klar zu erkennen.

Durch die höhere Auflösung zeigt die SCIAMACHY-Messkurve bei T63 einen leicht anderen Verlauf als bei der T31-Auflösung. Dies ist hauptsächlich darauf zurückzuführen, dass es in diesen Breiten häufig sehr wenige Messungen gibt und bei kleineren Gitterzellen die vorausgesetzten 15 Messungen nicht erreicht werden. Dadurch fallen bei der höheren Auflösung einige Messwerte heraus, wodurch der Verlauf der Kurve leicht beeinflusst wird.

Außerdem sind die isotopischen Gradienten zwischen tropischen und polaren Breiten in ECHAM5 im Gegensatz zu den SCIAMACHY-Daten etwas flacher. Im Vergleich zur groben T31L19-Modellauflösung wird eine Verbesserung dieses Gradienten in der T63L31-Auflösung, jedoch nicht in der T63L19-Auflösung erreicht. Eine feinere Unterteilung der vertikalen Luftsäule scheint hier einen wichtigeren Einfluss auf die Simulationsergebnisse zu haben als eine höhere horizontale Gitterauflösung.

Abbildung 14: Zonale δD -Durchschnittswerte

Die Unterschätzung der Abreicherung seitens ECHAM5 scheint jedoch nicht nur darauf zurückzuführen zu sein, dass der Gradient von den Tropen zu den Polen im Vergleich zu den SCIAMACHY-Daten etwas unterschritten wird. Denn es ist in Abbildung 14 weiterhin zu sehen, dass bereits in den Tropen, dem Ausgangspunkt eines Großteils des Wasserdampfes, der δD -Wert unabhängig von der Modellauflösung ca. 20 ‰ zu hoch ist. Möglicherweise unterschätzt ECHAM5 also etwas die Abreicherung des Deuteriums beim Verdunstungsvorgang selbst. Allein anhand der vorliegenden Daten über Landflächen lässt sich diese Vermutung jedoch nicht weiter überprüfen.

Alternativ dazu kann die Abweichung von 20 ‰ auch auf systematische Messungenauigkeiten von SCIAMACHY zurückzuführen sein, welche im folgenden Abschnitt näher betrachtet werden sollen.

4.1.2 Messungenauigkeit von SCIAMACHY

Ein Fehler in der Größenordnung von 1 ‰ im „Data-Retrieval-Algorithmus“ (zum Auslesen der Daten aus den Spektren) von SCIAMACHY kann zu einer Verschiebung der ermittelten δD -Werte um 10 – 15 ‰ führen (*Christian Frankenberg*, persönliche Mitteilung). Zwar sind die SCIAMACHY-Rohdaten von *Frankenberg et*

al. bereits um 20 ‰ korrigiert worden [5], jedoch ist eine weitere Verschiebung der δD -Werte in einer Größenordnung von 20 ‰ im Rahmen der Ungenauigkeit des Retrieval-Algorithmus durchaus denkbar (ebenfalls *Christian Frankenberg*, persönliche Mitteilung). Geht man daher von einem konstanten Fehler in den SCIAMACHY-Daten von 20 ‰ aus, liegen die zonalen Durchschnittswerte von ECHAM5 folgerichtig deutlich näher an den Satellitendaten (siehe Abbildung 15).

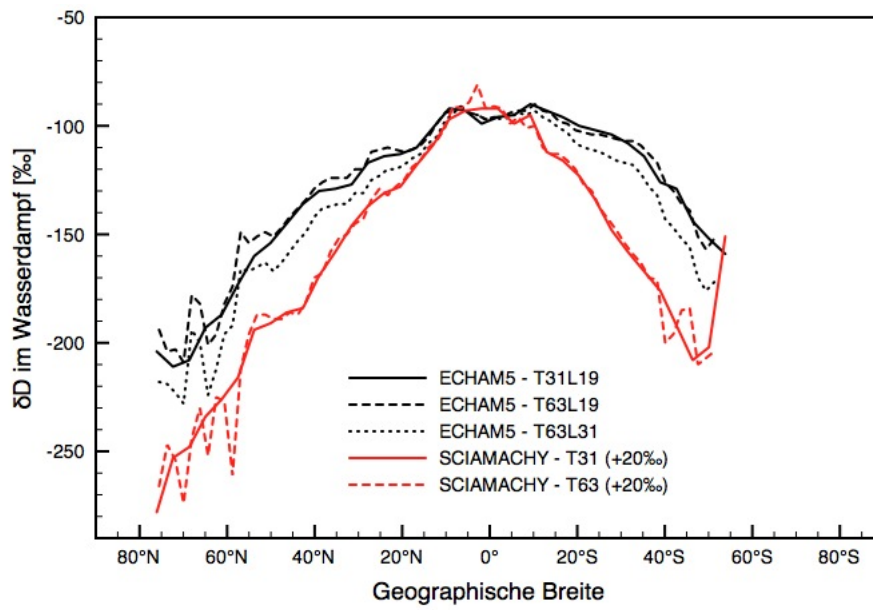


Abbildung 15: Zonale δD -Durchschnittswerte, SCIAMACHY um 20 ‰ korrigiert

In Abbildung 15 ist im Vergleich zu Abbildung 14 noch etwas deutlicher zu sehen, wie ECHAM5 den jeweiligen hemisphärischen Gradienten unterschätzt und dass die Ergebnisse der Modellauflösung *T63L31* am besten mit den SCIAMACHY-Werten übereinstimmen.

4.1.3 Separate Betrachtung der Winter- und Sommermonate

Eine Möglichkeit, die Unsicherheit im Data-Retrieval-Algorithmus von SCIAMACHY zu umgehen, ist die Analyse der δD -Werte verschiedener Jahreszeiten. Dabei erhält man nämlich nicht nur eine Aussage über saisonale Veränderungen der Isotopenverhältnisse von Deuterium im atmosphärischen Wasserdampf, sondern kann durch die Betrachtung der Isotopendifferenzen zwischen zwei verschiedenen Jahreszeiten gleichzeitig einen möglichen systematischen Fehler in den SCIAMACHY-

Daten eliminieren.

In den Abbildungen 16 und 17 sind sowohl für die SCIAMACHY-Daten (Abbildung 16) als auch die ECHAM5-Werte (Abbildung 17) die jahreszeitlichen Differenzen zwischen den Monaten Dezember bis Februar (DJF) und Juni bis August (JJA) dargestellt.

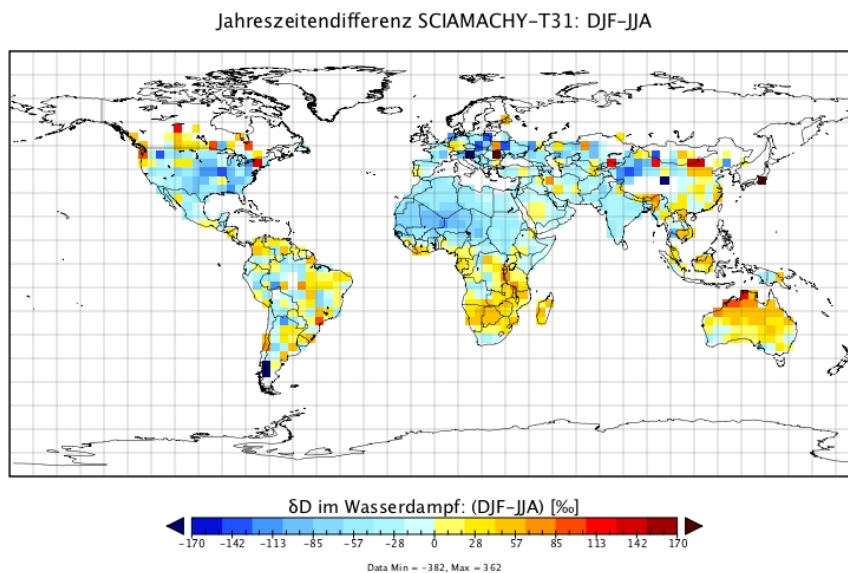


Abbildung 16: Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auflösung: $T31$

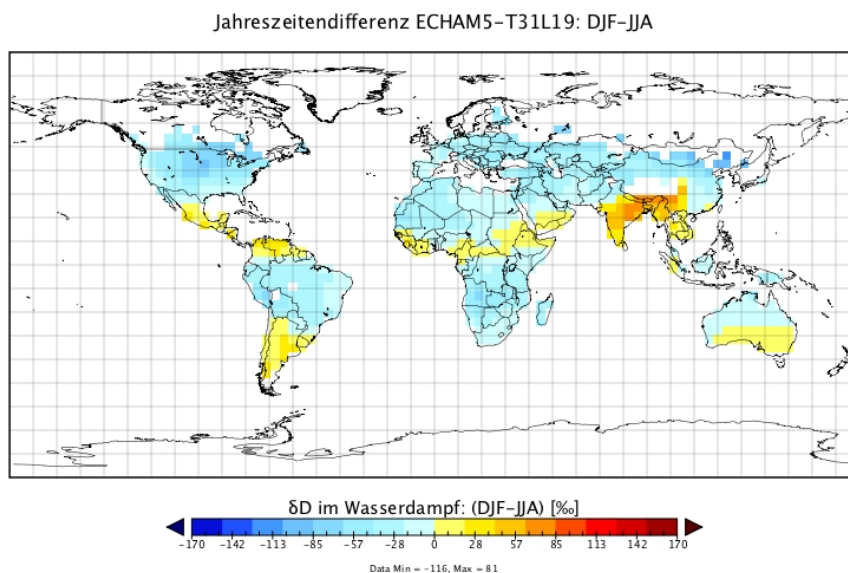


Abbildung 17: Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach ECHAM5 (10 Simulationsjahre), Auflösung: $T31L19$

Auf der Südhalbkugel ist infolge der im Vergleich zur nördlichen Hemisphäre umgedrehten Jahreszeiten eine Umkehrung im Vorzeichen der Differenz zu erwarten.

Die SCIAMACHY-Messdaten zeigen diese Umkehrung in weiten Teilen Australiens und des südlichen Afrikas (siehe Abbildung 16). Auffällig sind zudem die sich auf engem Raum ständig abwechselnden positiven und negativen Anomalien in Südamerika. Allgemein sind die Muster der ECHAM5-Daten (Abbildung 17) im Unterschied zu den SCIAMACHY-Messwerten deutlich homogener. Ein Vergleich zwischen den *T31L19*- (Abbildungen 16 und 17) und den *T63L31*-Modellwerten (Abbildungen 18 und 19) zeigt, dass diese Homogenität auflösungsunabhängig ist.

Sowohl in den Abbildungen 16 und 17 als auch in den Abbildungen 18 und 19 ist zu sehen, dass die Umkehrung des Vorzeichens der Isotopendifferenz auf der Südhalbkugel durch ECHAM5 scheinbar nicht simuliert wird. Dieses Problem wird auch durch eine höhere räumliche Auflösung nicht deutlich verbessert (*T63L31* in Abbildungen 18 und 19 im Vergleich zu *T31L19* in Abbildungen 16 und 17). Einzig über Australien kann die Umkehrung in einem etwas größeren Gebiet festgestellt werden.

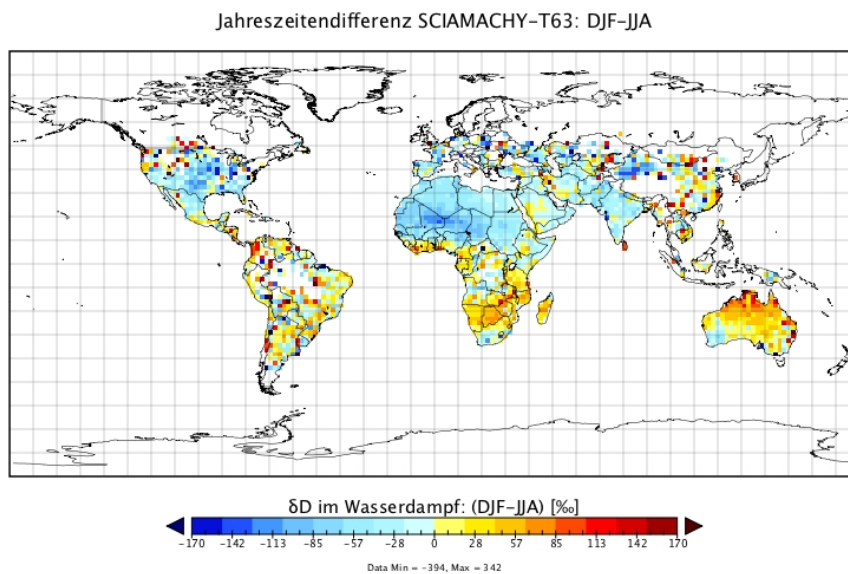


Abbildung 18: Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auflösung: *T63*

Eine mögliche Erklärung für dieses deutliche Modelldefizit ist die in ECHAM5 zur Zeit fehlende Implementierung der isotopischen Fraktionierung bei Evaporationsprozessen über Landflächen. Die komplexen Vorgänge bei der Verdunstung des Bodenwassers oder dessen Transport in tiefere Schichten der Erdoberfläche werden im ECHAM5-Modell aktuell noch nicht erfasst (siehe [15] für eine ausführliche Be-

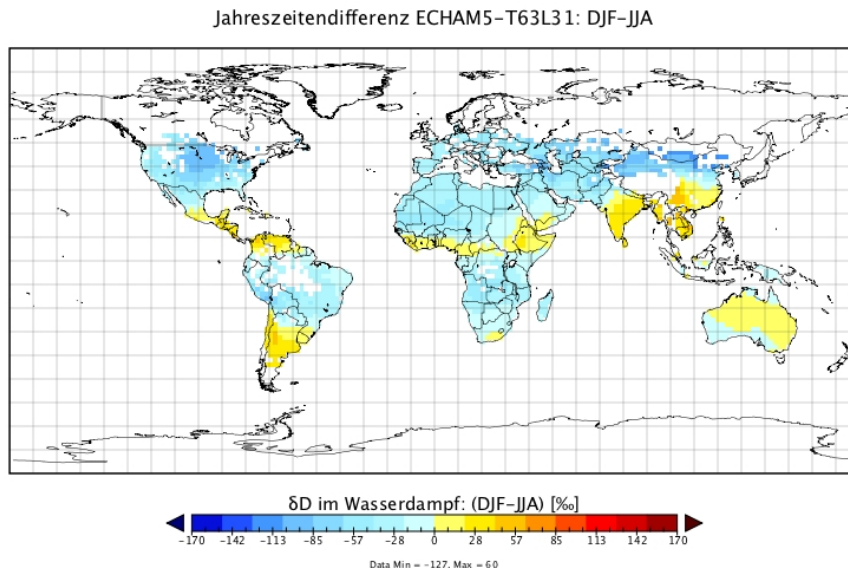


Abbildung 19: Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach ECHAM5 (10 Simulationsjahre), Auflösung: *T63L31*

gründung der fehlenden Fraktionierung). Gerade in den von stärkerer Verdunstung geprägten Sommermonaten könnte dieser Sachverhalt eine große Fehlerquelle darstellen.

Vergleicht man die Mittelwerte der Sommer- und Wintermonate separat, so ist die bereits bei der Betrachtung des Jahresmittels festgestellte Unterschätzung der Anreicherung von Deuterium durch ECHAM5 auch in diesen beiden Jahreszeiten jeweils klar zu erkennen (Abbildungen 20 und 21).

Allerdings zeigt sich außerdem, dass die Unterschiede zwischen ECHAM5 und SCIAMACHY hierbei im Winter auf der Südhalbkugel und im Sommer auf der Nordhalbkugel geringer als auf der jeweils anderen Hemisphäre sind. Diese Unterschiede in der Simulation der einzelnen Jahreszeiten zwischen Modell- und Satellitendaten lassen sich nicht allein mit der in ECHAM5 bisher nicht berücksichtigten Fraktionierung bei der Evaporation über Landflächen erklären, da diese eigentlich eine schlechtere Sommer- als Wintersimulation in ECHAM5 zur Folge haben müsste. Auch eine feinere Modellauflösung verändert dieses Ergebnis nicht wesentlich.

Zum Abschluss dieser Betrachtung sei auf eine Anomalie über dem indischen Subkontinent hingewiesen (siehe Abbildungen 20 und 21). Hier besitzt die Differenz zwischen ECHAM5 und SCIAMACHY im Winter ein umgekehrtes Vorzeichen als

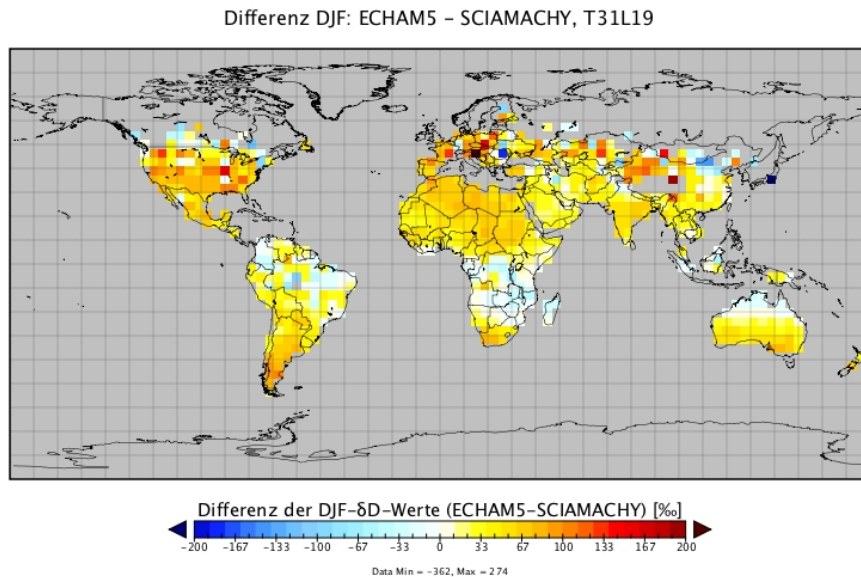


Abbildung 20: Globale δ D-Werte im atmosphärischen Wasserdampf, Anomalie-Darstellung für T31L19, Monate DJF

in den Sommermonaten. Man kann vermuten, dass diese Abweichungen mit der Simulation des Indischen Monsuns im ECHAM5-Modell zusammenhängen. Eine genauere Analyse der komplexen Zirkulations- und Niederschlagsmuster in dieser Region ist im Rahmen dieser Arbeit aber nicht möglich.

4.2 Berücksichtigung der Wolkenbedeckung bei den ECHAM5-Daten

4.2.1 Grundsätzliche Bemerkungen

Die generelle Problematik der Wolken bei den SCIAMACHY-Messungen und der damit verbundenen, notwendigen Berücksichtigung der Wolkenbedeckung beim Modell-Messdaten-Vergleich wurde bereits ausführlich im Punkt 3.3.2 dargelegt. Hieraus wurde ersichtlich, dass für die jeweilige SCIAMACHY-Messung die Wolkenbedeckung zum jeweiligen Messzeitpunkt eine wichtige Rolle spielt.

Bei den drei im Rahmen dieser Arbeit verwendeten ECHAM5-Simulationen stehen jedoch nur Monatsmittel der Wolkenbedeckung für die Analyse zur Verfügung. Daher ist eine genaue Berücksichtigung der simulierten Wolkenbedeckung bei den δ D-Modellwerten analog zu den SCIAMACHY-Daten nicht realisierbar, sondern es kann der Wolkeneffekt nur prinzipiell abgeschätzt werden. In Abbildung 22 sind

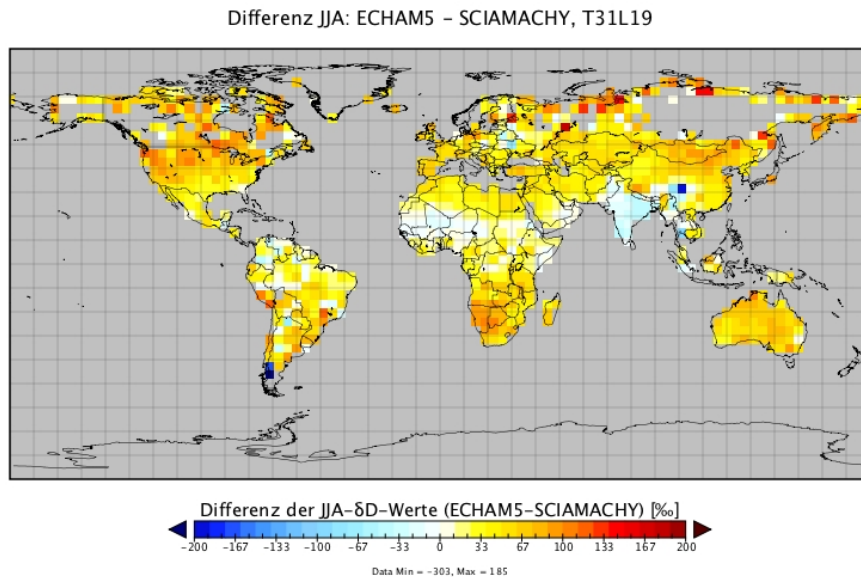


Abbildung 21: Globale δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf, Anomalie-Darstellung für T31L19, Monate JJA

zwei Beispielregionen in Afrika und Nordamerika gezeigt, anhand derer diese weitere prinzipielle Analyse durchgeführt werden soll.

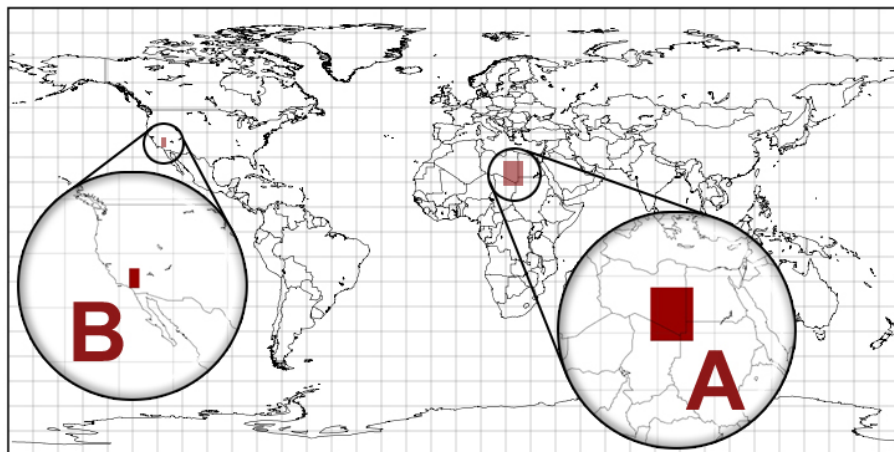


Abbildung 22: Globale Einordnung der Untersuchungsgebiete
A: Afrika, B: Nordamerika

4.2.2 Untersuchungen in ausgewählten Regionen Afrikas und Nordamerikas

Das Untersuchungsgebiet A liegt hauptsächlich im Südosten Libyens sowie Teilen Ägyptens, des Sudans und Tschads. Gebiet B liegt überwiegend im US-Bundesstaat Kalifornien, reicht jedoch in den südlichen Teil Nevadas hinein. Die geographischen Daten der beiden Gebiete sind in Tabelle 3 zu sehen.

Gebiet	A - Afrika	B - Nordamerika
Auflösung T31		
Feld	3x3 Gitterzellen	1 Gitterzelle
Nord-Süd-Ausdehnung	27,8°N – 20,4°N	35,3°N
West-Ost-Ausdehnung	18,8°O – 26,3°O	116,3°W
Auflösung T63		
Feld	5x5 Gitterzellen	2x2 Gitterzellen
Nord-Süd-Ausdehnung	27,0°N – 19,6°N	36,4°N – 34,5°N
West-Ost-Ausdehnung	18,8°O – 26,3°O	118,1°W – 116,3°W

Tabelle 3: Geographische Daten der Untersuchungsgebiete und Erfassung in den verschiedenen horizontalen Modellauflösungen *T31* und *T63*

In Abbildung 23 sind für beide Untersuchungsgebiete die δD -Mittelwerte des gesamten Mess- bzw. Simulationszeitraums für unterschiedliche Grenzen der totalen Wolkenbedeckung für die drei verwendeten Modellauflösungen dargestellt. Die Grenze der Wolkenbedeckung gibt dabei an, bis zu welchem monatlichen Wolkenbedeckungsgrad einer Gitterzelle die ECHAM5-Daten des jeweiligen Monats für die Auswertung verwendet worden sind. Auf diese Weise gewährleistet eine niedrige Grenze der totalen Wolkenbedeckung, dass nur Modellwerte aus denjenigen Gitterzellen verwendet werden, die im jeweiligen Monat nahezu wolkenfrei waren. Dabei wird räumlich über alle Gitterzellen der jeweiligen Region gemittelt.

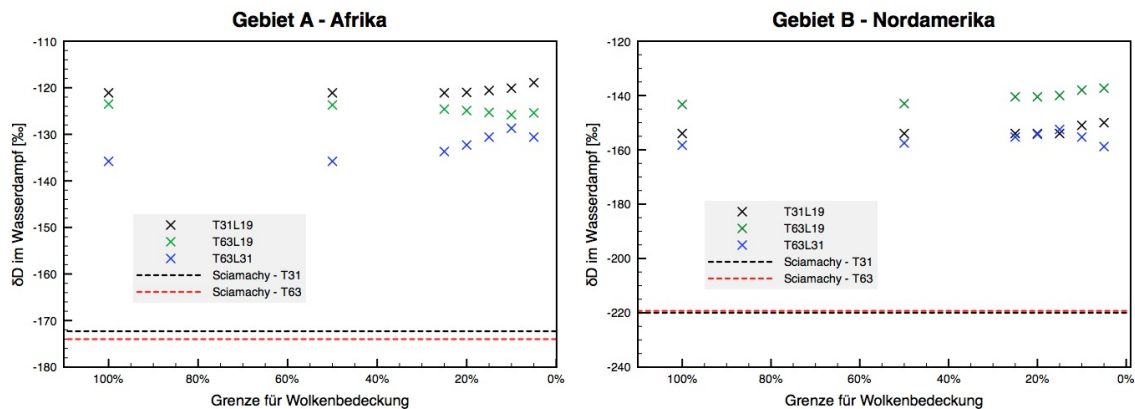


Abbildung 23: Regionale δD -Durchschnittswerte für verschiedene Modellauflösungen und Grenzen der monatlichen totalen Wolkenbedeckung

Wie aufgrund der vorangegangenen globalen Analyse erwartet, gibt es einen sehr hohen Unterschied zwischen absoluten Modell- und Satellitendaten (ca. 35 – 80 ‰). Des Weiteren kann in keinem der beiden Untersuchungsgebiete die erwartete Tendenz zunehmend geringerer Unterschiede zwischen Modell- und Satellitendaten mit

kleiner werdender Grenze für die in ECHAM5 simulierte monatliche Wolkenbedeckung gefunden werden. Die Unterschiede bewegen sich bei Berücksichtigung verschiedener Wolkenbedeckungsgrade stets in der gleichen Größenordnung und werden bei kleineren Wolkenbedeckungsgrenzen eher noch leicht höher. Letzteres ist unter anderem auf die immer geringer werdende Anzahl von verwendeten Modelldaten zurückzuführen. Des Weiteren wird anhand von Gebiet A die Verbesserung des simulierten Wertes infolge einer Erhöhung der räumlichen Auflösung sehr gut deutlich. Dabei führt auch in dieser Analyse eine Erhöhung der Anzahl der vertikalen Schichten zu einer deutlicheren Verbesserung der Modellwerte als eine ausschließliche Erhöhung der horizontalen Auflösung.

Dass die erwartete Verbesserung bei geringerer Grenze der Wolkenbedeckung in Abbildung 23 nicht zu beobachten ist, liegt hauptsächlich daran, dass in diesen sehr trockenen Gebieten (Sahara und Libysche Wüste in Afrika, Mojavewüste in Nordamerika) die durchschnittliche Wolkenbedeckung ohnehin sehr niedrig ist. Aussagekräftigere Untersuchungsgebiete mit einer höheren durchschnittlichen Wolkenbedeckung lassen sich jedoch nur schwer finden, da für die niedrigste in der Auswertung verwendeten Grenze der Wolkenbedeckung von 5 % nur noch ECHAM5-Werte aus sehr wenigen Gebieten verwendet werden, welche allesamt überwiegend in trockenen, subtropischen Regionen liegen.

Eine wirkliche Verbesserung der ECHAM5-Modellwerte durch die Berücksichtigung der monatlichen Wolkenbedeckung konnte im Rahmen dieser Arbeit somit nicht erzielt werden. Es sollten daher bei einem zukünftigen Vergleich keine monatlichen, sondern tägliche Werte für die Wolkenbedeckung einer Gitterzelle verwendet werden. Dadurch könnten deutlich mehr ECHAM5-Werte für den Modell-Satelliten-Vergleich benutzt werden. Dies wird beispielhaft in den Abbildungen 24 und 25 gezeigt, in denen für eine europäische Gitterzelle ($50, 6^{\circ}N, 17, 7^{\circ}O$) monatliche und tägliche Mittelwerte der simulierten ECHAM5-Wolkenbedeckung für die Monate Januar und Juli miteinander verglichen werden. (Die in den Abbildungen 24 und 25 gezeigten Daten stammen aus einem ECHAM5-T63L31-Lauf ohne explizite Simulation von Wasserisotopen; Martin Werner, persönliche Mitteilung).

Es ist in Abbildung 25 deutlich zu erkennen, welchen großen Schwankungen die tägliche Wolkenbedeckung innerhalb eines Monats unterliegt. Setzt man beispiels-

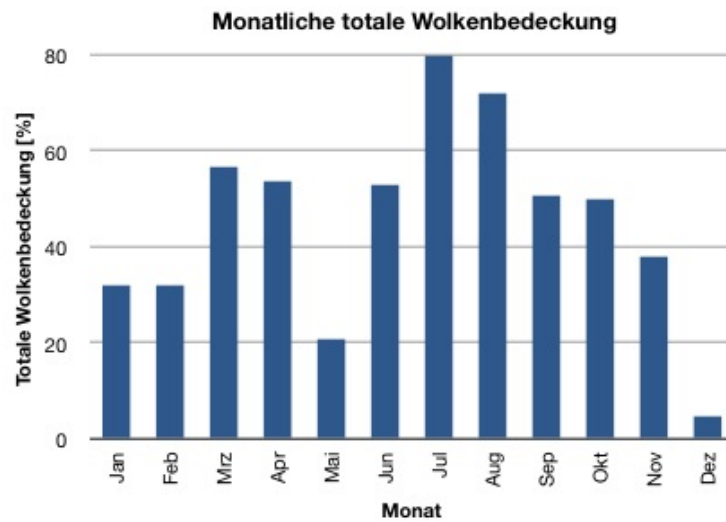


Abbildung 24: Monatliche totale Wolkenbedeckung für ein ECHAM5-Simulationsjahr, untersuchte Gitterzelle: $50, 6^{\circ}N, 17, 7^{\circ}O$

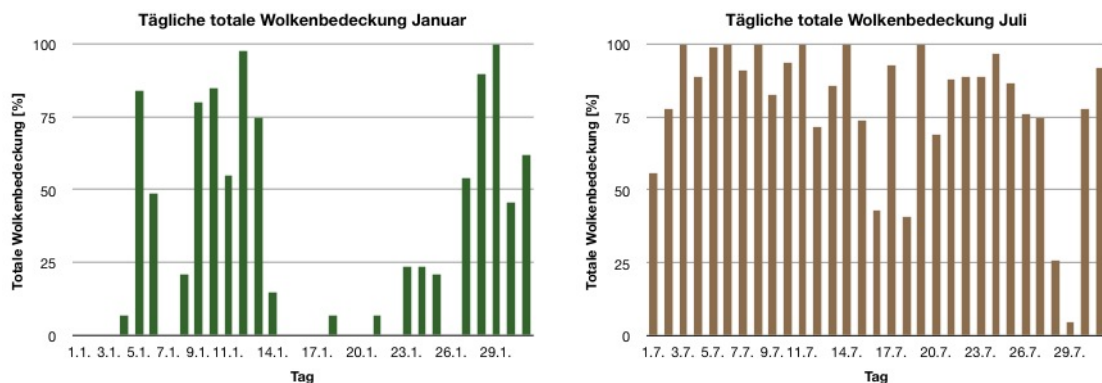


Abbildung 25: Tägliche totale Wolkenbedeckung der simulierten Monate Januar und Juli, untersuchte Gitterzelle: $50, 6^{\circ}N, 17, 7^{\circ}O$

weise eine Grenze für die totale Wolkenbedeckung von 25 % an, würden im Rahmen dieser Arbeit bei Betrachtung der monatlichen Mittelwerte nur die Monate Mai und Dezember mit in die Auswertung einfließen. Würde man sich hingegen direkt auf die täglichen simulierten Werte für die Wolkenbedeckung beziehen, könnten beispielsweise im Januar die ECHAM5- δD -Werte von 19 Tagen mit einer Wolkenbedeckung $< 25\%$ zur Berechnung eines Monatsmittelwertes verwendet werden. Auch im Monat Juli hätte man zumindest einen Tag mit einer Wolkenbedeckung $< 25\%$ für die weitere Analyse zur Verfügung. Die dadurch mögliche Verwendung von wesentlich mehr Monatsmittelwerten bei der Berechnung des Jahresmittels könnte sich positiv auf die Abweichungen zwischen ECHAM5 und SCIAMACHY auswirken.

Eine Berücksichtigung der simulierten monatlichen Wolkenbedeckung wird auf-

grund dieser Ergebnisse als nicht sinnvoll eingestuft. Daher wurde die Wolkenbedeckung im folgenden Teil der Auswertung nicht weiter berücksichtigt.

4.3 Regionale Untersuchungen in Europa und Australien

Nachdem bereits in Afrika und Nordamerika regionale Untersuchungen durchgeführt wurden, sollen einige Betrachtungen zu Europa (Kontinentaleffekt) und Australien (Saisonalität der δD -Werte) den Abschluss dieser Auswertung bilden.

4.3.1 Kontinentaleffekt über Europa

Für eine Analyse des europäischen Kontinentaleffekts werden zunächst die mittleren Jahreswerte der Isotopenverhältnisse von Deuterium im Wasserdampf der Atmosphäre von SCIAMACHY-Daten und ECHAM5-*T63L31*-Simulationswerten über Europa miteinander verglichen (Abbildungen 26 und 27).

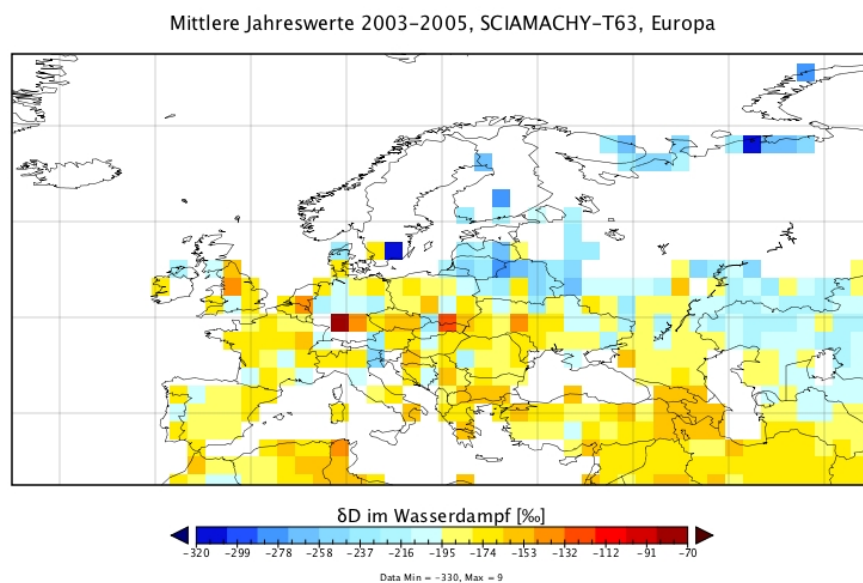


Abbildung 26: δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf über Europa, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auflösung: *T63*

Sowohl bei den SCIAMACHY-Daten (Abbildung 26) als auch den ECHAM5-Werten (Abbildung 27) ist der Kontinentaleffekt über Europa stark ausgeprägt, bei den Modell- sogar etwas stärker als bei den Satellitendaten. Analog zu den vorherigen Analysen wird auch in dieser Abbildung deutlich, dass das ECHAM5-Modell die Abreicherung des Deuteriums im atmosphärischen Wasserdampf generell unterschätzt.

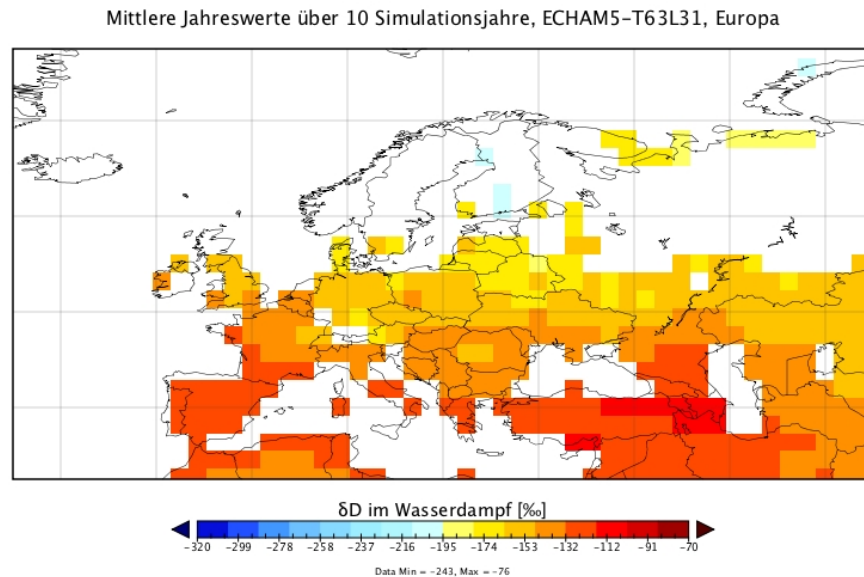


Abbildung 27: δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf über Europa, nach ECHAM5 (10 Simulationsjahre), Auflösung: T63L31

Um auch die verschiedenen Modellauflösungen untereinander vergleichen zu können, wurden die mittleren Jahreswerte einiger Gitterzellen selektiert und über der geographischen Breite aufgetragen (Abbildung 28). Zur besseren Orientierung wurden den einzelnen Gitterzellen darin liegende europäische Städte zugeordnet. Die Gitterzellen wurden nach dem theoretisch zu erwartenden Gradienten des Kontinentaleffektes (in nordöstlicher Richtung) ausgewählt.

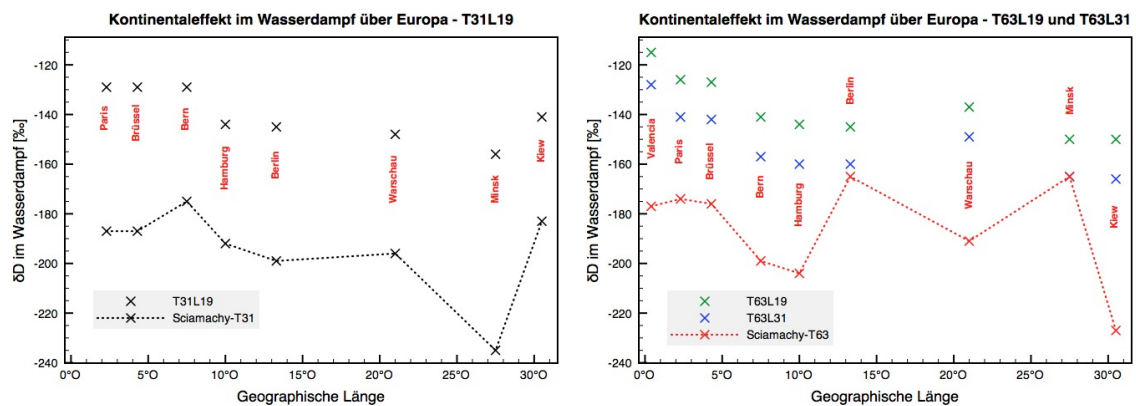


Abbildung 28: Kontinentaleffekt von Deuterium im Wasserdampf über Europa
links: ECHAM5-T31L19, SCIAMACHY-T31
rechts: ECHAM5-T63L19, ECHAM5-T63L31, SCIAMACHY-T63

Grundsätzlich geben die Simulationen aller drei Modellauflösungen einen Kontinentaleffekt wieder. Hierbei weisen ECHAM5 und SCIAMACHY ähnlich star-

ke räumliche Gradienten von der Küste ins Landesinnere auf. Dies ist besonders gut in den noch relativ küstennahen Gebieten von Valencia bis Hamburg zu sehen. Der West-Ost-Gradient ist bei den höheren räumlichen Modellauflösungen *T63L19* und *T63L31* etwas stärker ausgeprägt als bei der Modellauflösung *T31L19*. Diese Auflösungsunterschiede spiegeln sich jedoch auch in den SCIAMACHY-Messungen (bezogen auf die jeweilige Modellauflösung) wider. Abgesehen von den in Kapitel 4.1 bereits beschriebenen systematischen Abweichungen simuliert das ECHAM5-Modell den Kontinentaleffekt über Europa vor allem in west- und mitteleuropäischen Regionen sehr zufriedenstellend.

In der rechten Grafik von Abbildung 28 fällt auf, dass die SCIAMACHY-Messungen (bezogen auf eine *T63*-Modellauflösung) in den Gitterzellen Berlin, Warschau und Minsk die theoretischen Erwartungen nicht ganz widerspiegeln. Möglicherweise spielen hier regionale Effekte eine größere Rolle als an den anderen Orten. Analog dazu zeigen auch die ECHAM5-Daten in der Gitterzelle Warschau einen höheren δD -Wert.

Des Weiteren ist der in Abbildung 28 erkennbare große Unterschied der auf eine *T31*- und *T63*-Modellauflösung bezogenen SCIAMACHY-Daten über Osteuropa bemerkenswert. Dies lässt darauf schließen, dass in den untersuchten Gitterzellen die Messwerte eine große Streuung um den Mittelwert aufweisen, sodass sich bei einer Erhöhung der räumlichen Auflösung der Durchschnittswert einer vergleichbaren Gitterzelle stark verändern kann. In der Tat zeigt sich dies beispielsweise anhand der Gitterzelle Minsk. Bezogen auf eine *T31*-Modellauflösung erhält man einen δD -Wert von -235‰ . Bezieht man die SCIAMACHY-Messungen jedoch auf eine *T63*-Modellauflösung, so liefert eine Gitterzelle A, die den geographischen Koordinaten von Minsk am nächsten kommt, ein δD von -165‰ . Deren Nachbarzelle B liegt zwar vollständig innerhalb der gedachten *T31*-Gitterzelle und liefert einen zur *T31*-Auflösung ähnlichen δD -Wert von -236‰ , ist jedoch weiter von der Stadt Minsk entfernt. Deshalb wurde für die *T63*-Modellauflösung die Gitterzelle A als Referenz verwendet, was einen Unterschied im δD -Wert im Vergleich zur *T31*-Modellauflösung von 70‰ nach sich zieht. Da es jedoch über Osteuropa eine relativ geringe Anzahl an SCIAMACHY-Messungen gibt, sollte der etwas überraschende Verlauf der SCIAMACHY-Daten in diesen kontinentalen Gebieten nicht

überbewertet werden.

4.3.2 Saisonalität über Australien

Für einen Vergleich der Saisonalität der δD -Werte zwischen ECHAM5- und SCIAMACHY-Daten wurde eine Region in Australien gewählt, in welcher eine gleichmäßig über das Jahr verteilte hohe Anzahl an SCIAMACHY-Messungen existiert (siehe Abbildung 29).

In Abbildung 30 wird der mittlere Jahresgang des δD -Signals im Wasserdampf von SCIAMACHY-Messwerten (2003-2005) mit ECHAM5-Daten (10 Simulationsjahre) verglichen. Dabei wird stets das räumliche Mittel über alle Gitterzellen des Untersuchungsgebietes in Nord- und Mittelastralien gebildet (Region: $16^{\circ}S - 28^{\circ}S$, $133^{\circ}O - 143^{\circ}O$, siehe Abbildung 29).

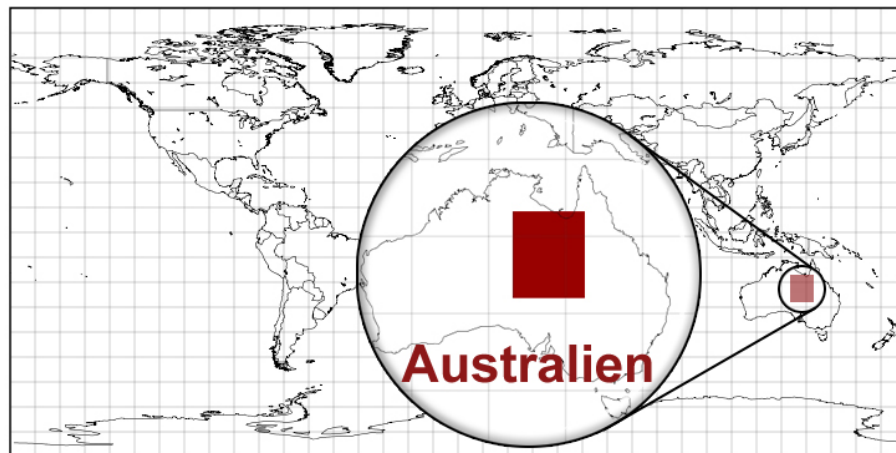


Abbildung 29: Das Untersuchungsgebiet in Australien, $T31$: 3×4 -Feld, $T63$: 6×6 -Feld

Aufgrund des allgemeinen Temperatureinflusses auf das δD -Signal im Wasserdampf (siehe Punkt 2.2.4) ist für die ausgewählte Region eine jährliche Schwankung des δD -Wertes mit niedrigen Werten im Südhemisphären-Winter (JJA) und höheren Werten im Südhemisphären-Sommer (DJF) zu erwarten. Ein derartiger Jahresgang ist in den SCIAMACHY-Messungen auch deutlich zu erkennen. Erstaunlicherweise sind hingegen in den ECHAM5-Simulationswerten nahezu keine saisonalen Schwankungen zu sehen. Bei allen unterschiedlichen Modellauflösungen bleiben die δD -Werte nahezu konstant. Vor allem in den Wintermonaten liegen ECHAM5-Simulationen und SCIAMACHY-Messungen sehr weit auseinander. Diese Abwei-

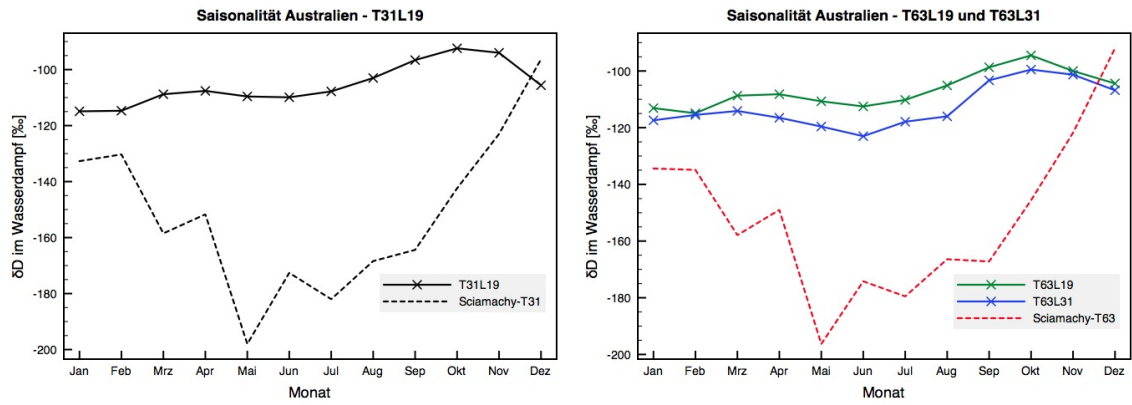


Abbildung 30: Monatliche Schwankungen des δD -Wertes im Wasserdampf über Australien

links: ECHAM5-T31L19, SCIAMACHY-T31

rechts: ECHAM5-T63L19, ECHAM5-T63L31, SCIAMACHY-T63

chungen sind mit dem in Abschnitt 4.1.3 bereits festgestellten Modelldefizit konsistent.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Der in dieser Arbeit durchgeführte ECHAM5-SCIAMACHY-Vergleich hat ein differenziertes Bild zur Güte der analysierten ECHAM5-Isotopensimulationen ergeben. So werden beispielsweise die isotopischen Gradienten von den Tropen zu den Polen oder aber auch beim Kontinentaleffekt in Europa teilweise sehr gut wiedergegeben. Dem stehen auf der anderen Seite große Unterschiede etwa im Jahresgang der δD -Werte in Australien gegenüber. Im Folgenden seien noch einmal die wichtigsten Ergebnisse und Erkenntnisse dieser Arbeit zusammengefasst.

Die von SCIAMACHY gemessene globale Verteilung von Deuterium im atmosphärischen Wasserdampf wird durch das ECHAM5-Modell im Prinzip gut wiedergegeben. Aber auch an dieser Stelle ist eine Differenzierung unbedingt erforderlich: während der isotopische Gradient zwischen tropischen und polaren Breiten, wie bereits erwähnt, relativ gut wiedergegeben wird (bei ECHAM5-Werten nur etwas flacher als bei SCIAMACHY-Messdaten), sind die absoluten ECHAM5- δD -Modellwerte in nahezu sämtlichen Regionen der Erde deutlich höher als die entsprechenden SCIAMACHY-Messwerte. Der zonale Mittelwert ist bei ECHAM5 in den Tropen ungefähr 20 ‰ höher als bei den SCIAMACHY-Messungen. Die Unterschätzung der Abreicherung des Deuteriums im atmosphärischen Wasserdampf auf globaler Skala durch das ECHAM5-Modell könnte zum einen daran liegen, dass die Abreicherung beim Verdunstungsvorgang selbst unterschätzt wird. Es können aber auch systematische Messungenauigkeiten des SCIAMACHY-Spektroskops dafür verantwortlich sein.

Um diese Messungenauigkeiten zu kompensieren, wurde die Differenz aus zwei Jahreszeiten betrachtet (DJF-JJA). Die auf der südlichen Hemisphäre im Vergleich zur Nordhalbkugel theoretisch zu erwartende Umkehrung im Vorzeichen der Differenz ist bei den ECHAM5-Modellwerten kaum zu beobachten. Eine Ausnahme stellen einzig zwei Regionen in Australien und Südamerika dar. Die SCIAMACHY-Messdaten dagegen spiegeln diese Umkehrung sehr gut wider. Bei der anschließenden separaten Betrachtung der Sommer- und Wintermonate hat sich gezeigt, dass die bereits beim Jahresmittel festgestellte Unterschätzung der Abreicherung von Deuterium durch ECHAM5 auch in diesen beiden Jahreszeiten zu erkennen ist. Allerdings

zeigt sich weiterhin, dass die Unterschiede zwischen ECHAM5 und SCIAMACHY im Sommer auf der Südhalbkugel und im Winter auf der Nordhalbkugel größer als auf der jeweils anderen Hemisphäre sind.

Die Berücksichtigung der Wolkenbedeckung in den ECHAM5-Daten für einen genaueren Vergleich mit den SCIAMACHY-Messungen lieferte keine verbesserten ECHAM5-Modellwerte. Anhand der Analyseergebnisse zweier Regionen in Nordamerika und Afrika wurde deutlich, dass anstatt der monatlichen besser die täglichen Werte der simulierten Wolkenbedeckung verwendet werden sollten. Da diese für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten ECHAM5-Simulationen jedoch nicht zur Verfügung standen, wurde die Wolkenbedeckung in den übrigen Teilen der Auswertung nicht weiter berücksichtigt.

Den Abschluss der Auswertung bildeten regionale Untersuchungen zum Kontinentaleffekt über Europa und zur Saisonalität der δD -Werte über Australien. Während der Kontinentaleffekt über Europa abgesehen von den bereits beschriebenen systematischen Abweichungen durch das ECHAM5-Modell vor allem in west- und mitteleuropäischen Regionen sehr zufriedenstellend simuliert wird, zeigen sich im Jahresgang der δD -Werte über Australien sehr große Unterschiede zwischen Modell- und Satellitendaten. Die aufgrund des allgemeinen Temperatureinflusses auf das δD -Signal im Wasserdampf zu erwartende jährliche Schwankung des δD -Wertes zeigt sich nur in den SCIAMACHY-Messungen. Erstaunlicherweise zeigen die ECHAM5-Simulationenwerte dagegen kaum saisonale Schwankungen. Das führt besonders in den Wintermonaten des Untersuchungsgebietes in Australien zu sehr großen Abweichungen von den Satellitenmessungen. An dieser Stelle sind unbedingt weitere Untersuchungen anzuknüpfen, da die ECHAM5-Simulationenwerte den Jahresgang der Isotopenhäufigkeiten zumindest näherungsweise wiedergeben sollten.

Abgesehen von den Saisonalitätsbetrachtungen über Australien zeigt sich an vielen Stellen der Auswertung, dass eine feinere Unterteilung der vertikalen Luftsäule einen wichtigeren Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat als eine höhere horizontale Auflösung. So ähneln sich die ECHAM5-Simulationenwerte der Modellauflösungen *T31L19* und *T63L19* sehr stark, während mit der *T63L31*-Modellauflösung teilweise deutlich bessere Ergebnisse in Bezug auf die SCIAMACHY-Messdaten erzielt werden konnten.

Alles in allem hat der ECHAM5-SCIAMACHY-Vergleich in dieser Arbeit wichtige Erkenntnisse geliefert. An vielen Stellen sollten jedoch weitere Untersuchungen anknüpfen, um die Ursachen für die Abweichungen der Modell- von den Satellitendaten genauer klären zu können. Nur so ist eine nachhaltige Verbesserung bei der Simulation des Wasserkreislaufs in ECHAM5 gewährleistet.

Quellen- und Literaturverzeichnis

- [1] M. Milankovitch. *Théorie mathématique des phénomènes thermiques produits par la radiation solaire*. Gauthier-Villars, Paris, 1920.
- [2] Hays, J.D., Imbrie, J. und Shackleton, N.J. Variations in the Earth's Orbit: Pacemaker of the Ice Ages. *Science*, 194:1121–1132, 1976.
- [3] Core Writing Team, Pachauri, R.K. und Reisinger, A. *IPCC, 2007: Climate Change 2007: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. IPCC, Geneva, Switzerland, 2007, 104 pp.
- [4] W. Roedel. *Physik unserer Umwelt, Die Atmosphäre*. Springer Verlag, 2000 (3. Auflage).
- [5] Frankenberg, C. et al. Dynamic processes governing lower-tropospheric hdo/h2o ratios as observed from space and ground. *Science*, 325:1374–1377, 2009.
- [6] Gat, J.R. Oxygen and hydrogen isotopes in the hydrologic cycle. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 24:225–262, 1996.
- [7] Dansgaard W. Stable isotopes in precipitation. *Tellus*, 16:436–468, 1964.
- [8] Yurtsever, Y. und Gat, J.R. Atmospheric waters. In *Stable Isotope Hydrology*, pages 103–142. IAEA, Wien, 1981.
- [9] IAEA/WMO. Global Network of Isotopes in Precipitation. The GNIP Database. Accessible at: <http://www.iaea.org/water>, 2006.
- [10] H. Craig. Isotopic variations in meteoric waters. *Science*, 133:1702–1703, 1961.
- [11] Zimmermann, U., Ehhalt, D. und Münnich, K.O. Soil water movement and evapotranspiration change in the isotopic composition of the water. In *Isotopes in Hydrology*, pages 567–585. IAEA, Wien, 1967.
- [12] NGRIP dating group, 2008. IGBP PAGES/World Data Center for Paleoclimatology. Data Contribution Series 2008-034, NOAA/NCDC Paleoclimatology Program, Boulder CO, USA.

- [13] Sonntag, Ch., Klitzsch, E., Löhnert, E.P., El Shazly, E.M., Münnich, K.O., Junghans, Ch., Thorweihe, U., Weistroffer, K. und Swailem, F.M., 1979. Paleoclimatic information from deuterium and oxygen-18 in c-14 dated north saharian groundwaters. groundwater formation in the past. In *Isotope Hydrology*, volume II, pages 569–581. IAEA, Wien, 1979.
- [14] Gottwald, M., Bovensmann, H., Lichtenberg, G., Noel, S., von Bargaen, A., Slijkhuis, S., Piters, A., Hoogeveen, R., van Savigny, C., Buchwitz, M., Kokhanovsky, A., Richter, A., Rozanov, A., Holzer-Popp, T., Bramstedt, K., Lamberg, J.-C., Skupin, J., Wittrock, F., Schrijver, H., Burrows, J.P. *SCIAMACHY, Monitoring the Changing Earth's Atmosphere*. DLR, 2006.
- [15] Hoffmann, G., Werner, M. und Heimann, M. Water isotope module of the echam atmospheric general circulation model: A study on timescales from days to several years. *Journal of Geophysical Research*, 103:16,871–16,896, 1998.
- [16] Schotterer, U., Oldfield, F. und Fröhlich, K. GNIP, Global Network for Isotopes in Precipitation, 1996.
- [17] Worden, J., Noone, D., Bowman, K., et al. Importance of rain evaporation and continental convection in the tropical water cycle. *Nature*, 445:528–532, 2007.
- [18] Steinwagner, J., Fueglistaler, S., Stiller, G., von Clarmann, T., Kiefer, M., Borsboom, P.-P., van Delden, A. und Röckmann, T. Tropical dehydration processes constrained by the seasonality of stratospheric deuterated water. *Nature Geoscience*, 3:262–266, 2010.
- [19] Lee, J.-E. und Fung, I. „Amount effect“ of water isotopes and quantitative analysis of post-condensation processes. *Hydrological Processes*, 22:1–8, 2008.
- [20] Roeckner, E., et al. The atmospheric general circulation model ECHAM5. PART I: Model description. *MPI-Report*, 349, 2003.
- [21] Rast, S. *Using and Programming ECHAM5 - a first introduction*.
- [22] Schulzweida, U., Kornblueh, L. und Quast, R. *CDO User's Guide*, 2009.
- [23] *Climate Data Operators*. <https://code.zmaw.de/projects/cdo>, 21.09.2010.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Wasserkreislauf in der Atmosphäre	7
Abbildung 2:	GNIP-Werte für δD über Europa, zeitliches Mittel über 1959-2007	13
Abbildung 3:	Wasserkreislauf und isotopische Fraktionierung	15
Abbildung 4:	$\delta^{18}O$ -Werte für Eisbohrkern (Grönland, 2005)	16
Abbildung 5:	Fossile δD -Isolinien im nordafrikanischen Grundwasser . .	17
Abbildung 6:	Übersicht zu den Schritten und Skripten der Auswertung .	19
Abbildung 7:	Spektrum der solaren Einstrahlung und rückgestreuten Strahlung	21
Abbildung 8:	Graphische Darstellung des $T31$ -Gitternetzes	22
Abbildung 9:	Land-See-Maske, $T31$	28
Abbildung 10:	Land-See-Maske, $T63$	28
Abbildung 11:	Globale δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auflösung: $T31$	29
Abbildung 12:	Globale δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf, nach ECHAM5-Daten (10 Simulationsjahre), Auflösung: $T31L19$	30
Abbildung 13:	Anomalie-Darstellung, Differenz zwischen Modell- und Mess- werten ($T31L19$)	31
Abbildung 14:	Zonale δD -Durchschnittswerte	32
Abbildung 15:	Zonale δD -Durchschnittswerte, SCIAMACHY um 20 ‰ korrigiert	33
Abbildung 16:	Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auf- lösung: $T31$	34
Abbildung 17:	Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach ECHAM5 (10 Simulationsjahre), Auf- lösung: $T31L19$	34
Abbildung 18:	Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auf- lösung: $T63$	35

Abbildung 19:	Jahreszeitliche Differenz (DJF-JJA) globaler δD -Werte im Wasserdampf, nach ECHAM5 (10 Simulationsjahre), Auflösung: $T63L31$	36
Abbildung 20:	Globale δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf, Anomalie-Darstellung für $T31L19$, Monate DJF	37
Abbildung 21:	Globale δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf, Anomalie-Darstellung für $T31L19$, Monate JJA	38
Abbildung 22:	Globale Einordnung der Untersuchungsgebiete A: Afrika, B: Nordamerika	38
Abbildung 23:	Regionale δD -Durchschnittswerte für verschiedene Modellauflösungen und Grenzen der monatlichen totalen Wolkenbedeckung	39
Abbildung 24:	Monatliche totale Wolkenbedeckung für ein ECHAM5-Simulationsjahr, untersuchte Gitterzelle: $50, 6^\circ N, 17, 7^\circ O$.	41
Abbildung 25:	Tägliche totale Wolkenbedeckung der simulierten Monate Januar und Juli, untersuchte Gitterzelle: $50, 6^\circ N, 17, 7^\circ O$.	41
Abbildung 26:	δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf über Europa, nach SCIAMACHY-Daten (2003-2005), Auflösung: $T63$.	42
Abbildung 27:	δD -Werte im atmosphärischen Wasserdampf über Europa, nach ECHAM5 (10 Simulationsjahre), Auflösung: $T63L31$	43
Abbildung 28:	Kontinentaleffekt von Deuterium im Wasserdampf über Europa	43
Abbildung 29:	Das Untersuchungsgebiet in Australien, $T31$: 3×4 -Feld, $T63$: 6×6 -Feld	45
Abbildung 30:	Monatliche Schwankungen des δD -Wertes im Wasserdampf über Australien	46

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Beispiel für eine Berechnung von Jahresmittelwerten des δD -Signals im Wasserdampf mit und ohne Gewichtung nach der tatsächlichen Anzahl an SCIAMACHY-Messungen in jedem Monat	23
Tabelle 2:	In dieser Arbeit verwendete ECHAM5-Auflösungen	25
Tabelle 3:	Geographische Daten der Untersuchungsgebiete und Erfassung in den verschiedenen horizontalen Modellauflösungen $T31$ und $T63$	39

Anhang A: Skripte

Es folgen ein C-Programm sowie einige UNIX-Skripte, die in Abbildung 6 im Punkt 3.1 aufgeführt sind. Beispielhaft beziehen sich diese Skripte auf die Modellauflösung *T31L19*. Die Skripte verwenden in vielen Schritten das Softwarepaket der „Climate Data Operators“ (CDO). Dieses wurde am Max-Planck-Institut für Meteorologie in Hamburg entwickelt und besteht aus mehreren Operatoren zur Verarbeitung von Klimamodell-Datensätzen. Sie enthalten statistische und arithmetische Funktionen, Operatoren zur Selektion und Aufteilung von Daten sowie für räumliche Interpolationen. Weiterhin unterstützen die CDO-Routinen direkt das maschinenunabhängige Dateiformat netCDF für auf Arrays basierende wissenschaftliche Daten. Für nähere Informationen: [23].

Monatsmittel δD - B

Skript 1: calc_SCIAMACHY.c

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <math.h>
3 #include <string.h>
4 #define XSIZE 96
5 #define YSIZE 48
6 #define XINC 3.75
7
8 main(int argc, char *argv[])
9 { // start of program: parameter passing of input-file-name, stored
10   in argv[1]
11 // parameter passing of input-year and input-month, stored in argv[2]
12   and argv[3]
13 FILE *ifile, *ofile1, *ofile2;
14 float lat, lon, dD;
15 float dummy;
16 int check, count;
17 int i, j;
18 char filename1[100], filename2[100];
19 float a, b, c;
20 int k, l, m;
21 int measurements[YSIZE][XSIZE] = {0};
22 float deltaD[YSIZE][XSIZE] = {0};
23 float yvals[YSIZE/2] = {87.1590946, 83.4789367, 79.7770457, 76.0702445,
24   72.361581, 68.6520168, 64.9419495, 61.2315732, 57.5209938,
25   53.810274, 50.0994534, 46.3885581, 42.6776062, 38.9666105,
26   35.2555805, 31.5445233, 27.8334445, 24.1223483, 20.4112384,
27   16.7001177, 12.9889886, 9.27785325, 5.556671363, 1.85557149};
28
29 // Open files
30 char dummystring1[13] = "measurements.";
31 char dummystring2[7] = "deltaD.";
```

```

26 char dummystring3[4]=".txt";
27 strcat(filename1,dummystring1);
28 strcat(filename1,argv[2]);
29 strcat(filename1,argv[3]);
30 strcat(filename1,dummystring3);
31 strcat(filename2,dummystring2);
32 strcat(filename2,argv[2]);
33 strcat(filename2,argv[3]);
34 strcat(filename2,dummystring3);
35
36 ifile=fopen(argv[1],"r");
37 ofile1=fopen(filename1,"w");
38 ofile2=fopen(filename2,"w");
39
40 if (ifile==NULL || ofile1==NULL || ofile2==NULL)
41 {
42     printf("Error opening files\n");
43     return;
44 }
45
46 // read file
47 while(!feof(ifile))
48 { lat=1000; lon=1000; // so empty row in the last row of the file
    doesn't go into account
49
50     fscanf(ifile, "%*i %*i %*i %*f %*f %f %f %f %*f %*e %*e %*e %*e
        %*e %*f %*f %*e %*e %*e %*e %*f %*f %*f %*f %*f %*f %*f %*f
        %*f %*f %*i %*i %*i %*f %*f %*f %*f %*f %*f %*f %*f", &lat, &
        lon, &dD);
51
52     // calculate j
53     dummy=lon/XINC;
54     if (dummy>0) {dummy+=0.5; j=((int)dummy);}
55     else {dummy-=0.5;
56     j=((int)dummy)+XSIZE;}
57
58     // calculate i
59     check=0;
60     for(k=0;k<(YSIZE/2-1);k++)
61     {
62         a=yvals[k];
63         b=yvals[k+1];
64         c=yvals[k+2];
65
66         if((fabs(lat)<=(b+(a-b)/2))&&(fabs(lat)>(c+(b-c)/2)))
67         {
68             if(lat>=0){i=k+1;}
69             else {i=YSIZE-1-(k+1);}
70             check=1;
71         }
72     }
73
74     if(check==0)
75     { if(fabs(lat)>(yvals[1]+(yvals[0]-yvals[1])/2))
76     {
77         if(lat>=0) {i=0;}
78         else {i=YSIZE-1;}
79     }

```



```
80     else
81     {
82         if (lat > 0) {i=YSIZE/2-1;}
83         else {i=YSIZE/2;}
84     }
85     check=1;
86 }
87
88 // save data to arrays measurement and deltaD,
89 // condition: row isn't empty
90 if (lat < 1000 && lon < 1000)
91 {
92     deltaD[i][j]=(deltaD[i][j]*measurements[i][j]+dD)/(measurements[i
93         ][j]+1);
94     measurements[i][j]+=1;
95 }
96
97 // Ausgabe der Arrays in Datei
98 count=1;
99 for (m=0;m<YSIZE;m++)
100 { for (l=0;l<XSIZE;l++)
101     { if (count > 6)
102         {
103             fprintf(ofile1 , "\n");
104             fprintf(ofile2 , "\n");
105             count -= 6;
106         }
107         fprintf(ofile1 , "%i\t", measurements[m][l]);
108         fprintf(ofile2 , "%13.6f\t", deltaD[m][l]);
109         count += 1;
110     }
111 }
112 fclose (ifile);
113 fclose (ofile1);
114 fclose (ofile2);
115 return 0;
116 }
```

Anzahl der SCIAMACHY-Messungen - A

Skript 2: calc_yearmeasures_T31L19.txt

```
1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate absolute year-measurements
5 # input: monthly measurements
6 #
7 #
8 #
9 for YEAR in 2003 2004 2005; do
10 #
11 cp monmeasures/T31L19.measurements.${YEAR}01.mon.nc dummyfile
12 #
13 for MONTH in 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12; do
14 #
15 FILE=monmeasures/T31L19.measurements.${YEAR}${MONTH}.mon.nc
16 #
17 cdo -s -f nc add ${FILE} dummyfile dummysum
18 mv dummysum dummyfile
19 #
20 #
21 done
22 #
23 OUT=yearmeasures/T31L19.measurements.${YEAR}.year.nc
24 #
25 mv dummyfile ${OUT}
26 #
27 done
```

Skript 3: calc_timmeasures_T31L19.txt

```
1
2 # Script task:
3 # calculate timmeasures for absolute measurements
4 # input: year-measures
5 #
6 #
7 #
8 cp yearmeasures/T31L19.measurements.2003.year.nc dummyfile
9 #
10 for YEAR in 2004 2005; do
11 #
12 FILE=yearmeasures/T31L19.measurements.${YEAR}.year.nc
13 #
14 cdo -s -f nc add ${FILE} dummyfile dummysum
15 #
16 mv dummysum dummyfile
17 #
18 done
19 #
20 #
21 #
22 OUT=timmeasures/T31L19.measurements.2003_2005.time.nc
```

```
23 #
24 mv dummyfile ${OUT}
25 #
```

Skript 4: calc_monthlysums_T31L19.txt

```
1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate sums over all years for each month
5 #
6 #
7 #
8 for MONTH in 01 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12; do
9 #
10 FILE=monmeasures/*.2003${MONTH}.mon.nc
11 FILE2=monmeasures/*.2004${MONTH}.mon.nc
12 FILE3=monmeasures/*.2005${MONTH}.mon.nc
13 OUT=monthlysums/T31L19.measurements.${MONTH}.timsum.nc
14 #
15 cdo -s -f nc -add ${FILE3} -add ${FILE} ${FILE2} ${OUT}
16 #
17 #
18 #
19 done
```

Messwertgewichtetes Jahresmittel δD und Mittelung δD 2003-2005 - B

Skript 5: calc_SCIAMACHY_wiso_dhdo_measure_yearmean.txt

```

1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate measurement-weighted deltaD-yearmean for SCIAMACHY-data
5 #
6 #
7 FILE=SCIAMACHY-measurements/T31L19/timmeasures/T31L19.measurements
   .2003_2005.time.nc
8 #
9 for YEAR in 2003 2004 2005; do
10 #
11 cp ${FILE} measurements.time.corrected
12 #
13 OUT=SCIAMACHY-yearmean/T31L19/T31L19_SCIAMACHY_${YEAR}.yearmean_d.nc
14 #
15 for MONTH in 01 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12; do
16 #
17 FILE1=SCIAMACHY-monmean/T31L19/*${YEAR}${MONTH}*.nc
18 FILE2=SCIAMACHY-measurements/T31L19/monthlysums/*${MONTH}.timsum.nc
19 #
20 # create mask with value 0 where measurements and value 1 where
   missing values
21 #
22 cdo -s -f nc setmisstoc,1000 ${FILE1} ${FILE1}${YEAR}${MONTH}.newmiss
23 #
24 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE1}${YEAR}${MONTH}.newmiss ${FILE1}${YEAR}
   ${MONTH}.mask
25 #
26 cdo -s -f nc -sub measurements.time.corrected -mul ${FILE1}${YEAR}${
   MONTH}.mask ${FILE2} measurements.time.dummy
27 mv measurements.time.dummy measurements.time.corrected
28 #
29 # create mask: 1 - every month-value is missing, 0 - measurements
   existing
30 if [ ${MONTH} -eq 01 ]
31 then
32   cp ${FILE1}${YEAR}${MONTH}.mask yearmiss.mask
33 else
34   cdo -s -f nc mul ${FILE1}${YEAR}${MONTH}.mask yearmiss.mask
   yearmiss.dummy
35   mv yearmiss.dummy yearmiss.mask
36 fi
37 rm ${FILE1}${YEAR}${MONTH}.mask ${FILE1}${YEAR}${MONTH}.newmiss
38 #
39 done
40 #
41 #
42 #
43 for MONTH in 01 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12; do
44 #
45 FILE1=SCIAMACHY-monmean/T31L19/*${YEAR}${MONTH}*.nc
46 FILE2=SCIAMACHY-measurements/T31L19/monthlysums/*${MONTH}.timsum.nc
47 #
48 # set missing value to 0, excluding grid-cells where every value of
   the year is missing, set this value back to miss

```

```

49 cdo -s -f nc setmisstoc ,1000 ${FILE1} deltaD.${YEAR}${MONTH}.mon.
    miss1000.nc
50 cdo -s -f nc setctomiss ,1 yearmiss.mask yearmiss.dummy
51 cdo -s -f nc eqc ,0 yearmiss.dummy yearmiss
52 cdo -s -f nc mul deltaD.${YEAR}${MONTH}.mon.miss1000.nc yearmiss
    missdummy1
53 cdo -s -f nc setmisstoc ,2000 missdummy1 missdummy2
54 cdo -s -f nc setctomiss ,1000 missdummy2 missdummy3
55 cdo -s -f nc setmisstoc ,0 missdummy3 missdummy4
56 cdo -s -f nc setctomiss ,2000 missdummy4 deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited
    .nc
57 #
58 cdo -s -f nc -mul deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc -div ${FILE2}
    measurements.time.corrected dummy${YEAR}${MONTH}
59 #
60 if [ ${MONTH} -eq 01 ]
61 then
62   cp dummy${YEAR}${MONTH} dummy
63 else
64   cdo -s -f nc add dummy dummy${YEAR}${MONTH} dummiesum
65   mv dummiesum dummy
66 fi
67 #
68 rm dummy${YEAR}${MONTH} deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc missdummy1
    missdummy2 missdummy3 missdummy4 deltaD.${YEAR}${MONTH}.mon.
    miss1000.nc
69 #
70 done
71 #
72 mv dummy ${OUT}
73 #
74 rm measurements.time.corrected yearmiss yearmiss.dummy yearmiss.mask
75 #
76 done
77 #
78 #
79 #

```

Skript 6: calc_SCIAMACHY_wiso_dhdo_measure_timmean.txt

```

1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate deltaD-timemean for SCIAMACHY-data
5 #
6 #
7 #
8 OUT=SCIAMACHY-timmean/T31L19/T31L19_SCIAMACHY_2003_2005.timmean.
    measure_d.nc
9 #
10 #
11 for YEAR in 2003 2004 2005; do
12 #
13 FILE=SCIAMACHY-yearmean/T31L19/*${YEAR}*.nc
14 #
15 cp ${FILE} rundummy

```

```
16 cdo -s -f nc setmisstoc,1000 rundummy rundummy2
17 cdo -s -f nc ltc,1000 rundummy2 rundummy3
18 cdo -s -f nc setctomiss,1000 rundummy3 rundummy
19 #
20 if [ ${YEAR} -eq 2003 ]
21 then
22   cp rundummy run
23   cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy
24 else
25   cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummiesum
26   cdo -s -f nc add rundummy run run2
27   mv dummiesum dummy
28   mv run2 run
29 fi
30 #
31 done
32 #
33 cdo -s -f nc -div dummy run ${OUT}
34 #
35 rm dummy run rundummy rundummy2 rundummy3
36 #
37 #
38 #
```

Kalkulation der ECHAM5-Daten mit und ohne Wolken - C und D

Skript 7: calc_wiso_dhdo_clouds.txt

```
1
2 # Script tasks: calculate wiso-data for different resolutions and
  # different cloud-limits (monmean, yearmean and timemean)
3 #
4 #
5 #
6 # T31L19
7 #   cloud-limit: ${1}
8 IN=${1}
9 sh calc_wiso_dhdo_monmean_clouds_T31L19.txt test_01_198001 test_01_ $
  {IN}
10 sh calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_T31L19.txt ${IN}
11 sh calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_T31L19.txt ${IN}
12 echo T31L19, cloud-limit: ${IN}, erfolgreich kalkuliert!
13 #
14 #   cloud-limit: ${2}
15 #IN2=${2}
16 #sh calc_wiso_dhdo_monmean_clouds_T31L19.txt test_01_198001 test_01_
  ${IN2}
17 #sh calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_T31L19.txt ${IN2}
18 #sh calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_T31L19.txt ${IN2}
19 #echo T31L19, cloud-limit: ${IN2}, erfolgreich kalkuliert!
20 #
21 #   cloud-limit: ${3}
22 #IN3=${3}
23 #sh calc_wiso_dhdo_monmean_clouds_T31L19.txt test_01_198001 test_01_
  ${IN3}
24 #sh calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_T31L19.txt ${IN3}
25 #sh calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_T31L19.txt ${IN3}
26 #echo T31L19, cloud-limit: ${IN3}, erfolgreich kalkuliert!
27 #
28 #   cloud-limit: ${4}
29 #IN4=${4}
30 #sh calc_wiso_dhdo_monmean_clouds_T31L19.txt test_01_198001 test_01_
  ${IN4}
31 #sh calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_T31L19.txt ${IN4}
32 #sh calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_T31L19.txt ${IN4}
33 #echo T31L19, cloud-limit: ${IN4}, erfolgreich kalkuliert!
34 #
35 #   cloud-limit: ${5}
36 #IN5=${5}
37 #sh calc_wiso_dhdo_monmean_clouds_T31L19.txt test_01_198001 test_01_
  ${IN5}
38 #sh calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_T31L19.txt ${IN5}
39 #sh calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_T31L19.txt ${IN5}
40 #echo T31L19, cloud-limit: ${IN5}, erfolgreich kalkuliert!
41 #
42 #   cloud-limit: ${6}
43 #IN6=${6}
44 #sh calc_wiso_dhdo_monmean_clouds_T31L19.txt test_01_198001 test_01_
  ${IN6}
45 #sh calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_T31L19.txt ${IN6}
46 #sh calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_T31L19.txt ${IN6}
47 #echo T31L19, cloud-limit: ${IN6}, erfolgreich kalkuliert!
48 #
```

```

49 #
50 #
51 #echo T31L19 abgeschlossen!
52 #
53 #
54 #

```

Skript 8: calc_wiso_dhdo_monmean_clouds_T31L19.txt

```

1
2 # Script tasks:
3 # calculate monthly means
4 # calculate delta values dD_i in all vertical layers i for specific
  humidity Q
5 # calculate average of dD_i, weighted with the concentration of H2O
  at the respective height layer (Q_i)
6 # calculate dD-average
7 #
8 #
9 #
10 FIRSTIN=${1}
11 #
12 #
13 #
14 FIRSTFILE=seldata/clouds/T31L19/${FIRSTIN}.sel.nc
15 FIRSTOUT=${FIRSTIN}.monmean.nc
16 #
17 #
18 # create mask for SMOW-values in each level
19 #
20 # mask0:
21         cdo -s monmean ${FIRSTFILE} ${FIRSTOUT}
22         FILE2=${FIRSTOUT}
23         cdo -s -f nc selname ,q ${FILE2} q
24         cdo -s -f nc sub q q mask.0
25 #
26 cdo -s -f nc sellevel ,3 SMOW.FAC.T31.nwiso_3.nc SMOW_hdo
27 #
28 for LEVEL in 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19; do
29 cp SMOW_hdo SMOW_hdo.${LEVEL}
30 cdo -s -f nc setlevel ,${LEVEL} SMOW_hdo.${LEVEL} SMOW_hdo.level${
  LEVEL}
31 cdo -s -f nc add mask.0 SMOW_hdo.level${LEVEL} mask.SMOW.FAC.T31.
  nwiso_hdo.nc
32 rm SMOW_hdo.${LEVEL}
33 rm SMOW_hdo.level${LEVEL}
34 done
35 rm SMOW_hdo
36 #
37 #
38 for YEAR in 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987 1988 1989; do
39 #
40 for MONTH in 01 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12; do
41 #
42 #
43 # calculate monthly means

```



```

44 #
45 IN=${2}
46 FILE=seldata/clouds/T31L19/${IN}${YEAR}${MONTH}.sel.nc
47 OUT=${IN}${YEAR}${MONTH}.monmean.nc
48 #
49 cdo -s monmean ${FILE} ${OUT}
50 #
51 FILE2=${OUT}
52 #     FILE2=${IN}${YEAR}${MONTH}.monmean.nc
53 #
54 #         calculate deltas for vertical layers
55 #
56 # split in different fields
57 cdo -s selname,q16o ${FILE2} q16o
58 cdo -s selname,qhdo ${FILE2} qhdo
59 cdo -s selname,q ${FILE2} q
60 # calc delta-values, reference standard: SMOV (in SMOV.FAC.T31.
    nviso_3.nc -> mask.SMOV.FAC.T31.nviso_hdo.nc)
61 #
62 #
63 cdo -s -f nc -chname,qhdo,qhdo_d -chcode,247,20 -mulc,1000. -subc,1.
    -div -div qhdo q16o mask.SMOV.FAC.T31.nviso_hdo.nc qhdo_d
64 #
65 #
66 IN2=${3}
67 #
68 OUT2=ECHAM5/clouds/${IN2}/monmean-dhdo/T31L19/${IN}${YEAR}${MONTH}.
    cloud${IN2}.monmean_d.nc
69 #
70 #         calculate average of deltas of vertical layers,
    weighted with H2O-concentration
71 # create mask: in every layer write sum of q_i, do this for every
    grid-cell
72 #
73 cdo -s -f nc vertsum q q.vertsum
74 #
75 for LEVEL in 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19; do
76 cp q.vertsum q.${LEVEL}
77 cdo -s -f nc setlevel,${LEVEL} q.${LEVEL} q.vertsum${LEVEL}
78 cdo -s -f nc add mask.0 q.vertsum${LEVEL} mask.q.vertsum
79 # clean up
80 rm q.${LEVEL} q.vertsum${LEVEL}
81 done
82 #
83 # calculate average
84 cdo -s -f nc -vertsum -div -mul qhdo_d q mask.q.vertsum ${OUT2}
85 #
86 #
87 #
88 # if total cloud cover is higher than 5% -> dhdo=miss (important for
    comparison with SCIAMACHY)
89 #
90 cdo -s -f nc selname,aclcov ${FILE} aclcov
91 cdo -s -f nc gtc,${IN2} aclcov clouddummy
92 cdo -s -f nc setctomiss,1 clouddummy cloudmask
93 cdo -s -f nc add ${OUT2} cloudmask clouddummy2
94 mv clouddummy2 ${OUT2}
95 #

```

```

96 #
97 #
98 # clean up
99 rm ${OUT} q q16o qhdo qhdo_d q.vertsum mask.q.vertsum cloudmask
    clouddummy aclcov
100 #
101 echo ${OUT2} erfolgreich erstellt , cloud-limit: ${IN2}
102 #
103 done
104 #
105 done
106 #
107 # clean up
108 rm mask.SMOW.FAC.T31.nwiso_hdo.nc mask.0

```

Skript 9: calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_T31L19.txt

```

1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate measurement-weighted deltaD-yearmean for ECHAM5-data
5 # under consideration of the total cloud cover!
6 #
7 IN=${1}
8 #
9 FILE=SCIAMACHY-measurements/T31L19/timmeasures/T31L19.measurements
    .2003_2005.time.nc
10 #
11 for YEAR in 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987 1988 1989; do
12 #
13 OUT=ECHAM5/clouds/${IN}/yearmean-dhdo-measure/T31L19/T31L19_${YEAR}.
    cloud${IN}.yearmean_d.nc
14 #
15 for MONTH in 01 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12; do
16 #
17 FILE1=ECHAM5/clouds/${IN}/monmean-dhdo/T31L19/*${YEAR}${MONTH}.*.nc
18 FILE2=SCIAMACHY-measurements/T31L19/monthlysums/*.${MONTH}.timsum.nc
19 #
20 #
21 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE1} missmask
22 cdo -s -f nc eqc,0 ${FILE2} monthlysummask
23 cdo -s -f nc setctomiss,1 monthlysummask maskmonsum
24 cdo -s -f nc add maskmonsum missmask dummymask
25 cdo -s -f nc setmisstoc,1 dummymask maskmiss1
26 cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE1} monmean-dhdo-${YEAR}${MONTH}
27 #
28 cdo -s -f nc mul monmean-dhdo-${YEAR}${MONTH} ${FILE2} dummy${MONTH}
29 #
30 cdo -s -f nc mul maskmiss1 ${FILE2} dummycorrection
31 #
32 if [ ${MONTH} -eq 01 ]
33 then
34   cp dummy${MONTH} dummy
35   cp dummycorrection maskcorrection
36 else
37   cdo -s -f nc add dummy dummy${MONTH} dummiesum

```

```

38 mv dummiesum dummy
39 cdo -s -f nc add maskcorrection dummycorrection maskcorrectionsum
40 mv maskcorrectionsum maskcorrection
41 fi
42 #
43 rm dummy${MONTH} dummycorrection missmask maskmiss1 monmean-dhdo-${
    YEAR}${MONTH} monthlysummask maskmonsum dummymask
44 #
45 done
46 #
47 cdo -s -f nc div dummy ${FILE} dummydiv
48 mv dummydiv dummy
49 cdo -s -f nc div maskcorrection ${FILE} maskcorrectiondiv
50 mv maskcorrectiondiv maskcorrection
51 #
52 cdo -s -f nc eqc,1000 maskcorrection dummy3
53 cdo -s -f nc setctomiss,0 dummy3 dummy4
54 cdo -s -f nc setmisstoc,1 dummy4 dummy5
55 cdo -s -f nc sub dummy5 maskcorrection maskcorrection2
56 cdo -s -f nc div dummy maskcorrection2 dummy2
57 rm dummy maskcorrection maskcorrection2 dummy3 dummy4 dummy5
58 mv dummy2 ${OUT}
59 #
60 echo ${OUT} erfolgreich erstellt , cloud-limit: ${IN}
61 #
62 done
63 #
64 #
65 #

```

Skript 10: calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_T31L19.txt

```

1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate deltaD-timemean for ECHAM5-data
5 # under consideration of total cloud cover!
6 #
7 #
8 IN=${1}
9 #
10 OUT=ECHAM5/clouds/${IN}/timmean-dhdo-measure/T31L19/T31L19_1980_1989.
    cloud${IN}.timmean.measure_d.nc
11 #
12 RUN=1
13 #
14 for YEAR in 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987 1988 1989; do
15 #
16 FILE=ECHAM5/clouds/${IN}/yearmean-dhdo-measure/T31L19/*${YEAR}*.nc
17 #
18 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
19 cdo -s -f nc setmisstoc,1 missmask maskmiss1
20 #
21 if [ ${YEAR} -eq 1980 ]
22 then
23 cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy

```

```
24 cp maskmiss1 runmask
25 rm maskmiss1
26 else
27 cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummysum
28 mv dummysum dummy
29 cdo -s -f nc add runmask maskmiss1 rundummy
30 mv rundummy runmask
31 RUN='expr $RUN + 1'
32 rm maskmiss1
33 fi
34 #
35 done
36 #
37 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
38 cdo -s -f nc setctomiss,0 missmask completemiss
39 cdo -s -f nc setmisstoc,${RUN} completemiss rundummy2
40 cdo -s -f nc sub rundummy2 runmask divrun
41 cdo -s -f nc div dummy divrun ${OUT}
42 #
43 echo ${RUN}, ${OUT} erfolgreich erstellt , cloud-limit: ${IN}
44 #
45 rm dummy divrun runmask rundummy2 completemiss missmask
46 #
47 #
48 #
```

Separate Betrachtung von Winter- und Sommermonaten

Skript 11: calc_wiso_SCIAMACHY_clouds_W-S_T31L19.txt

```

1
2 # Script tasks:
3 # calculate summer-winter (yearmean and timmean) for wiso-ECHAM5-data
  and SCIAMACHY-data
4 #
5 #
6 #
7 # T31L19, cloud-limit: ${1}
8 IN=${1}
9 sh calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_W-S_T31L19.txt ${IN}
10 sh calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_W-S_T31L19.txt ${IN}
11 sh calc_SCIAMACHY_wiso_dhdo_measure_yearmean_W-S_T31L19.txt
12 sh calc_SCIAMACHY_wiso_dhdo_measure_timmean_W-S_T31L19.txt
13 echo T31L19, cloud-limit: ${IN}, winter-summer, erfolgreich
  kalkuliert!
14 #
15 #
16 #

```

Skript 12: calc_wiso_dhdo_measure_yearmean_clouds_W-S_T31L19.txt

```

1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate measurement-weighted deltaD-yearmean for ECHAM5-data
5 # under consideration of the total cloud cover!
6 # winter-summer
7 #
8 IN=${1}
9 #
10 #
11 for YEAR in 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987 1988 1989; do
12 #
13 OUT=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/yearmean-dhdo-measure/T31L19/
  T31L19_${YEAR}.cloud${IN}.W-S.yearmean_d.nc
14 #
15 OUT2=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/T31L19_${YEAR}.cloud${IN}.
  winter.nc
16 #
17 OUT3=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/T31L19_${YEAR}.cloud${IN}.
  summer.nc
18 #
19 # december to february
20 for MONTH in 12 01 02; do
21 #
22 FILE1=ECHAM5/clouds/${IN}/monmean-dhdo/T31L19/*${YEAR}${MONTH}.*.nc
23 FILE2=SCIAMACHY-measurements/T31L19/monthlysums/*${MONTH}.timsun.nc
24 #
25 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE1} missmask
26 cdo -s -f nc eqc,0 ${FILE2} monthlysummask
27 cdo -s -f nc setctomiss,1 monthlysummask maskmonsum
28 cdo -s -f nc add maskmonsum missmask dummymask

```

```
29 cdo -s -f nc setmisstoc ,1 dummymask maskmiss1
30 cdo -s -f nc setmisstoc ,0 ${FILE1} monmean-dhdo-${YEAR}${MONTH}
31 #
32 cdo -s -f nc mul monmean-dhdo-${YEAR}${MONTH} ${FILE2} dummy${MONTH}
33 #
34 cdo -s -f nc mul maskmiss1 ${FILE2} dummycorrection
35 #
36 if [ ${MONTH} -eq 12 ]
37 then
38   cp dummy${MONTH} dummy-winter
39   cp dummycorrection maskcorrection
40   cp ${FILE2} measurements-wintersum
41 else
42   cdo -s -f nc add dummy-winter dummy${MONTH} dummiesum
43   mv dummiesum dummy-winter
44   cdo -s -f nc add maskcorrection dummycorrection maskcorrectionsum
45   mv maskcorrectionsum maskcorrection
46   cdo -s -f nc add measurements-wintersum ${FILE2} measurements-dummy
47   mv measurements-dummy measurements-wintersum
48 fi
49 #
50 rm dummy${MONTH} dummycorrection missmask maskmiss1 monmean-dhdo-${
    YEAR}${MONTH} monthlysummask maskmonsum dummymask
51 #
52 done
53 #
54 cdo -s -f nc sub measurements-wintersum maskcorrection measurements-
    winter-corrected
55 cdo -s -f nc div dummy-winter measurements-winter-corrected winter-
    mean
56 rm maskcorrection measurements-winter-corrected
57 #
58 # june to august
59 for MONTH in 06 07 08; do
60 #
61 FILE1=ECHAM5/clouds/${IN}/monmean-dhdo/T31L19/*${YEAR}${MONTH}.*.nc
62 FILE2=SCIAMACHY-measurements/T31L19/monthlysums/*${MONTH}.timsun.nc
63 #
64 cdo -s -f nc eqc ,1000 ${FILE1} missmask
65 cdo -s -f nc eqc ,0 ${FILE2} monthlysummask
66 cdo -s -f nc setctomiss ,1 monthlysummask maskmonsum
67 cdo -s -f nc add maskmonsum missmask dummymask
68 cdo -s -f nc setmisstoc ,1 dummymask maskmiss1
69 cdo -s -f nc setmisstoc ,0 ${FILE1} monmean-dhdo-${YEAR}${MONTH}
70 #
71 cdo -s -f nc mul monmean-dhdo-${YEAR}${MONTH} ${FILE2} dummy${MONTH}
72 #
73 cdo -s -f nc mul maskmiss1 ${FILE2} dummycorrection
74 #
75 if [ ${MONTH} -eq 06 ]
76 then
77   cp dummy${MONTH} dummy-summer
78   cp dummycorrection maskcorrection
79   cp ${FILE2} measurements-summer
80 else
81   cdo -s -f nc add dummy-summer dummy${MONTH} dummiesum
82   mv dummiesum dummy-summer
83   cdo -s -f nc add maskcorrection dummycorrection maskcorrectionsum
```

```

84 mv maskcorrectionsum maskcorrection
85 cdo -s -f nc add measurements-summersum ${FILE2} measurements-dummy
86 mv measurements-dummy measurements-summersum
87 fi
88 #
89 rm dummy${MONTH} dummycorrection missmask maskmiss1 monmean-dhdo-${
    YEAR}${MONTH} monthsummask maskmonsum dummymask
90 #
91 done
92 #
93 cdo -s -f nc sub measurements-summersum maskcorrection measurements-
    summer-corrected
94 cdo -s -f nc div dummy-summer measurements-summer-corrected summer-
    mean
95 rm measurements-summer-corrected
96 #
97 # winter minus summer
98 cdo -s -f nc sub winter-mean summer-mean ${OUT}
99 mv winter-mean ${OUT2}
100 mv summer-mean ${OUT3}
101 #
102 rm maskcorrection dummy-winter dummy-summer measurements-summersum
    measurements-wintersum
103 #
104 echo ${OUT} erfolgreich erstellt , cloud-limit: ${IN}
105 #
106 done
107 #
108 #
109 #

```

Skript 13: calc_wiso_dhdo_measure_timmean_clouds_W-S_T31L19.txt

```

1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate deltaD-timemean for ECHAM5-data
5 # under consideration of total cloud cover!
6 # winter-summer
7 #
8 IN=${1}
9 #
10 OUT=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/timmean-dhdo-measure/T31L19/
    T31L19_1980_1989.cloud${IN}.W-S.timmean.measure_d.nc
11 #
12 RUN=1
13 #
14 for YEAR in 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987 1988 1989; do
15 #
16 FILE=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/yearmean-dhdo-measure/T31L19/*
    ${YEAR}*.nc
17 #
18 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
19 cdo -s -f nc setmisstoc,1 missmask maskmiss1
20 #
21 if [ ${YEAR} -eq 1980 ]

```

```

22 then
23   cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy
24   cp maskmiss1 runmask
25   rm maskmiss1
26 else
27   cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummiesum
28   mv dummiesum dummy
29   cdo -s -f nc add runmask maskmiss1 rundummy
30   mv rundummy runmask
31   RUN='expr $RUN + 1'
32   rm maskmiss1
33 fi
34 #
35 done
36 #
37 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
38 cdo -s -f nc setctomiss,0 missmask completemiss
39 cdo -s -f nc setmisstoc,${RUN} completemiss rundummy2
40 cdo -s -f nc sub rundummy2 runmask divrun
41 cdo -s -f nc div dummy divrun ${OUT}
42 #
43 #
44 #
45 OUT2=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/T31L19_1980_1989.cloud${IN}.
    winter.timmean.nc
46 #
47 RUN=1
48 #
49 for YEAR in 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987 1988 1989; do
50 #
51 FILE=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/T31L19_${YEAR}.cloud${IN}.
    winter.nc
52 #
53 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
54 cdo -s -f nc setmisstoc,1 missmask maskmiss1
55 #
56 if [ ${YEAR} -eq 1980 ]
57 then
58   cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy
59   cp maskmiss1 runmask
60   rm maskmiss1
61 else
62   cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummiesum
63   mv dummiesum dummy
64   cdo -s -f nc add runmask maskmiss1 rundummy
65   mv rundummy runmask
66   RUN='expr $RUN + 1'
67   rm maskmiss1
68 fi
69 #
70 done
71 #
72 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
73 cdo -s -f nc setctomiss,0 missmask completemiss
74 cdo -s -f nc setmisstoc,${RUN} completemiss rundummy2
75 cdo -s -f nc sub rundummy2 runmask divrun
76 cdo -s -f nc div dummy divrun ${OUT2}
77 #

```



```

78 #
79 #
80 OUT3=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/T31L19_1980_1989.cloud${IN}.
    summer.timmean.nc
81 #
82 RUN=1
83 #
84 for YEAR in 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987 1988 1989; do
85 #
86 FILE=ECHAM5/clouds/${IN}/winter-summer/T31L19_${YEAR}.cloud${IN}.
    summer.nc
87 #
88 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
89 cdo -s -f nc setmisstoc,1 missmask maskmiss1
90 #
91 if [ ${YEAR} -eq 1980 ]
92 then
93   cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy
94   cp maskmiss1 runmask
95   rm maskmiss1
96 else
97   cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummysum
98   mv dummysum dummy
99   cdo -s -f nc add runmask maskmiss1 rundummy
100  mv rundummy runmask
101  RUN='expr $RUN + 1'
102  rm maskmiss1
103 fi
104 #
105 done
106 #
107 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE} missmask
108 cdo -s -f nc setctomiss,0 missmask completemiss
109 cdo -s -f nc setmisstoc,${RUN} completemiss rundummy2
110 cdo -s -f nc sub rundummy2 runmask divrun
111 cdo -s -f nc div dummy divrun ${OUT3}
112 #
113 #
114 #
115 echo ${RUN}, ${OUT} erfolgreich erstellt , cloud-limit: ${IN}
116 #
117 rm dummy divrun runmask rundummy2 completemiss missmask
118 #
119 #
120 #

```

Skript 14: calc_SCIAMACHY_wiso_dhdo_measure_yearmean_W-
S_T31L19.txt

```

1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate measurement-weighted deltaD-yearmean for SCIAMACHY-data
5 # winter-summer
6 #
7 #

```

```

8  for YEAR in 2003 2004 2005; do
9  #
10 OUT=SCIAMACHY-yearmean/winter-summer/T31L19/T31L19_SCIAMACHY_${YEAR}.
    W-S.yearmean_d.nc
11 OUT2=SCIAMACHY-yearmean/winter-summer/T31L19_SCIAMACHY_${YEAR}.winter
    .nc
12 OUT3=SCIAMACHY-yearmean/winter-summer/T31L19_SCIAMACHY_${YEAR}.summer
    .nc
13 #
14 # december to february
15 for MONTH in 12 01 02; do
16 #
17 FILE1=SCIAMACHY-monmean/T31L19/*${YEAR}${MONTH}.*.nc
18 FILE2=SCIAMACHY-measurements/T31L19/monthlysums/*.${MONTH}.timsun.nc
19 #
20 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE1} missmask
21 cdo -s -f nc eqc,0 ${FILE2} monthlysummask
22 cdo -s -f nc setctomiss,1 monthlysummask maskmonsum
23 cdo -s -f nc add maskmonsum missmask dummymask
24 cdo -s -f nc setmisstoc,1 dummymask maskmiss1
25 cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE1} deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc
26 #
27 cdo -s -f nc mul deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc ${FILE2} dummy${
    YEAR}${MONTH}
28 #
29 cdo -s -f nc mul maskmiss1 ${FILE2} dummycorrection
30 #
31 if [ ${MONTH} -eq 12 ]
32 then
33   cp dummy${YEAR}${MONTH} dummy-winter
34   cp dummycorrection maskcorrection
35   cp ${FILE2} measurements-wintersum
36 else
37   cdo -s -f nc add dummy-winter dummy${YEAR}${MONTH} dummiesum
38   mv dummiesum dummy-winter
39   cdo -s -f nc add maskcorrection dummycorrection maskcorrectionsum
40   mv maskcorrectionsum maskcorrection
41   cdo -s -f nc add measurements-wintersum ${FILE2} measurements-dummy
42   mv measurements-dummy measurements-wintersum
43 fi
44 #
45 rm dummy${YEAR}${MONTH} deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc maskmiss1
    missmask monthlysummask maskmonsum dummymask
46 #
47 done
48 #
49 cdo -s -f nc sub measurements-wintersum maskcorrection measurements-
    winter-corrected
50 cdo -s -f nc div dummy-winter measurements-winter-corrected winter-
    mean
51 rm maskcorrection measurements-winter-corrected
52 #
53 #
54 # june to august
55 for MONTH in 06 07 08; do
56 #
57 FILE1=SCIAMACHY-monmean/T31L19/*${YEAR}${MONTH}.*.nc
58 FILE2=SCIAMACHY-measurements/T31L19/monthlysums/*.${MONTH}.timsun.nc

```

```
59 #
60 #
61 cdo -s -f nc eqc,1000 ${FILE1} missmask
62 cdo -s -f nc eqc,0 ${FILE2} monthlysummask
63 cdo -s -f nc setctomiss,1 monthlysummask maskmonsum
64 cdo -s -f nc add maskmonsum missmask dummymask
65 cdo -s -f nc setmisstoc,1 dummymask maskmiss1
66 cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE1} deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc
67 #
68 cdo -s -f nc mul deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc ${FILE2} dummy${
    YEAR}${MONTH}
69 #
70 cdo -s -f nc mul maskmiss1 ${FILE2} dummycorrection
71 #
72 if [ ${MONTH} -eq 06 ]
73 then
74   cp dummy${YEAR}${MONTH} dummy-summer
75   cp dummycorrection maskcorrection
76   cp ${FILE2} measurements-summertime
77 else
78   cdo -s -f nc add dummy-summer dummy${YEAR}${MONTH} dummysum
79   mv dummysum dummy-summer
80   cdo -s -f nc add maskcorrection dummycorrection maskcorrectionsum
81   mv maskcorrectionsum maskcorrection
82   cdo -s -f nc add measurements-summertime ${FILE2} measurements-dummy
83   mv measurements-dummy measurements-summertime
84 fi
85 #
86 rm dummy${YEAR}${MONTH} deltaD.${YEAR}${MONTH}.edited.nc maskmiss1
    missmask monthlysummask maskmonsum dummymask
87 #
88 done
89 #
90 cdo -s -f nc sub measurements-summertime maskcorrection measurements-
    summer-corrected
91 cdo -s -f nc div dummy-summer measurements-summer-corrected summer-
    mean
92 rm measurements-summer-corrected
93 #
94 # winter-summer
95 cdo -s -f nc sub winter-mean summer-mean ${OUT}
96 mv winter-mean ${OUT2}
97 mv summer-mean ${OUT3}
98 #
99 rm dummy-winter dummy-summer maskcorrection measurements-summertime
    measurements-winter
100 #
101 echo ${OUT} erfolgreich erstellt!
102 #
103 done
104 #
105 #
106 #
```

Skript 15: calc_SCIAMACHY_wiso_dhdo_measure_timmean_W-S_T31L19.txt

```
1
2 # Script task:
3 #
4 # calculate deltaD-timemean for SCIAMACHY data
5 # winter-summer
6 #
7 #
8 OUT=SCIAMACHY-timmean/winter-summer/T31L19/T31L19_SCIAMACHY_2003_2005
   .W-S.timmean.measure_d.nc
9 OUT2=SCIAMACHY-timmean/winter-summer/T31L19_SCIAMACHY_2003_2005.
   winter.timmean.nc
10 OUT3=SCIAMACHY-timmean/winter-summer/T31L19_SCIAMACHY_2003_2005.
   summer.timmean.nc
11 #
12 #
13 for YEAR in 2003 2004 2005; do
14 #
15 FILE=SCIAMACHY-yearmean/winter-summer/T31L19/*${YEAR}*.nc
16 #
17 cp ${FILE} rundummy
18 cdo -s -f nc setmisstoc,1000 rundummy rundummy2
19 cdo -s -f nc ltc,1000 rundummy2 rundummy3
20 cdo -s -f nc setctomiss,1000 rundummy3 rundummy
21 #
22 if [ ${YEAR} -eq 2003 ]
23 then
24   cp rundummy run
25   cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy
26 else
27   cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummiesum
28   cdo -s -f nc add rundummy run run2
29   mv dummiesum dummy
30   mv run2 run
31 fi
32 #
33 done
34 #
35 cdo -s -f nc -div dummy run ${OUT}
36 #
37 for YEAR in 2003 2004 2005; do
38 #
39 FILE=SCIAMACHY-yearmean/winter-summer/T31L19_SCIAMACHY_${YEAR}.winter
   .nc
40 #
41 cp ${FILE} rundummy
42 cdo -s -f nc setmisstoc,1000 rundummy rundummy2
43 cdo -s -f nc ltc,1000 rundummy2 rundummy3
44 cdo -s -f nc setctomiss,1000 rundummy3 rundummy
45 #
46 if [ ${YEAR} -eq 2003 ]
47 then
48   cp rundummy run
49   cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy
50 else
51   cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummiesum
52   cdo -s -f nc add rundummy run run2
53   mv dummiesum dummy
```

```
54 mv run2 run
55 fi
56 #
57 done
58 #
59 cdo -s -f nc -div dummy run ${OUT2}
60 #
61 for YEAR in 2003 2004 2005; do
62 #
63 FILE=SCIAMACHY-yearmean/winter-summer/T31L19_SCIAMACHY_${YEAR}.summer
64 . nc
65 #
66 cp ${FILE} rundummy
67 cdo -s -f nc setmisstoc,1000 rundummy rundummy2
68 cdo -s -f nc ltc,1000 rundummy2 rundummy3
69 cdo -s -f nc setctomiss,1000 rundummy3 rundummy
70 #
71 if [ ${YEAR} -eq 2003 ]
72 then
73 cp rundummy run
74 cdo -s -f nc setmisstoc,0 ${FILE} dummy
75 else
76 cdo -s -f nc -add dummy -setmisstoc,0 ${FILE} dummiesum
77 cdo -s -f nc add rundummy run run2
78 mv dummiesum dummy
79 mv run2 run
80 fi
81 #
82 done
83 #
84 cdo -s -f nc -div dummy run ${OUT3}
85 #
86 rm dummy run rundummy rundummy2 rundummy3
87 #
88 echo ${OUT} erfolgreich erstellt!
89 #
```

Skripte der ECHAM5-T63L19-Simulation

Skript 16: runjob.necsx8.T63L19.start

```
1
2 #!/bin/ksh
3 #PBS -b 1 # number of nodes
4 #PBS -l cpunum_job=1 # cpus per node
5 #PBS -l cputim_prc=01:00:00 # max accumulated cputime per process
6 #PBS -l memsz_job=10gb # max accumulated memory
7 #PBS -j o # join err and out to out
8 #PBS -N T63L19 # job name
9 #PBS -S /bin/ksh # NQSII Syntax to set the shell
10 #PBS -M tim.carlsen@awi.de
11 #PBS -A tcarlsen
12 #
13 #
14 # VERSION FOR NEC-SX8 (AWI), T. Carlsen, 05/2010
15 #
16 set -ex
17 #
18 # Job file to run echam model on NEC-SX8 (AWI)
19 #=====
20 #
21 #
22 EXP=T63L19 # experiment identifier
23 #
24 DPATH=/sx8/scr/tcarlsen/echam5wiso/T63L19/
25 #
26 NCPUS=1
27 NPROCA=${NCPUS}
28 NPROCB=1
29 NTHREADS=1
30 #
31 RES=63
32 LEV=19
33 #
34 NFILE=2 # Output file type: 1= GRIB, 2= NETCDF
35 #
36 RERUN=.false. # Rerun switch; .false. for initial run, .
   true. for
37 #
38 #
39 #
40 cd $DPATH # output and rerun files are
   written into $DPATH
41 #
42 MODEL=./echam5_wiso.v1.0.a2
43 #
44 INI=/sx8/user2/paleo/data/ECHAM5/PresentDay/T${RES}
45 INIAMIP=${INI}/amip2
46 #
47 #
48 #
49 # set some runtime environment variables
50 #
51 # stop execution after the first run time error
52 F_ERRCNT=0; export F_ERRCNT
53 #
```

```

54 # print detailed program execution statistics
55 export MPIPROGINF=ALL_DETAIL
56 export F_PROGINF=DETAIL
57 #
58 #
59 #
60 rm -f unit.?? fort.99 sst* rrtadata *.codes atmout
61 #
62 ln -s  ${INI}/T${RES}L${LEV}_jan_spec.nc          unit.23
63 ln -s  ${INI}/T${RES}_jan_surf.nc                unit.24
64 #
65 #
66 #
67 ln -s  ${INI}/T${RES}_O3clim2.nc                 unit.21
68 ln -s  ${INI}/T${RES}_VLTCLIM.nc                 unit.90
69 ln -s  ${INI}/T${RES}_VGRATCLIM.nc               unit.91
70 ln -s  ${INI}/T${RES}_TSLCLIM2.nc                unit.92
71 ln -s  ${INI}/surrta_data                         rrtadata
72 #
73 #
74 #
75 # for climatological sst and ice (LAMP=F) use:
76 #
77 ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sst_clim.nc        unit.20
78 ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sic_clim.nc        unit.96
79 #
80 # for AMIP (variable) sst and ice (LAMP=T) use:
81 #for yrs in 1977 1978 1979 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987
      1988
82 #
83 #do
84 #ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sst_${yrs}.nc    sst${yrs}
85 #ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sic_${yrs}.nc    ice${yrs}
86 #done
87 #
88 #
89 #
90 # namelist control variables and output control for grid variables
91 # spectral variables are written out by default except liq. water
92 # for production runs set LABORT=FALSE.
93 #
94 #DT_START = 1978,01,01,12,0,0
95 #DT_STOP  = 1979,01,01,14,0,0
96 #
97 # TRIGJOB(1)= 6,'months','last',0
98 # TRIGJOB(2)= 6,'months','last',0
99 # PUIDATA   = 6,'hours','first',0
100 # PUIRERUN = 10,'days','first',0
101 #
102 # DT_STOP   = 1978,01,02,12,0,0
103 # PUIDATA   = 12,'hours','first',0
104 # PUIRERUN  = 1,'days','first',0
105 #
106 # DT_STOP   = 1978,01,01,15,0,0
107 # PUIDATA   = 40,'minutes','first',0
108 #
109 # NPROMA=512,
110 #

```

```
111 # Cosmos:
112 # NPROCA=1536
113 #
114 # NSUB=1,
115 # TRIGJOB(1)= 1,'months','last',0
116 # LSUB=F,
117 #
118 cat > namelist.echam << EOF
119 &RUNCTL
120   LRESUME=$RERUN,
121   out_datapath = "$DPATH"
122   out_expname  = "$EXP"
123   out_filetype = "${NFILE}",
124   DT_START    = 1979,01,01,12,0,0
125   DT_STOP     = 1979,01,05,12,0,0
126   PUTRERUN   = 1,'days','first',0
127   NSUB=1,
128   TRIGJOB(1)= 1,'months','last',0
129   LAMP=F,
130   LABORT=T,
131   NPROCA=${NPROCA},
132   NPROCB=${NPROCB},
133   iadvec=1,
134 /
135 &PHYSCTL
136   LPHYS=T,
137   LVDIFF=T,
138   LSURF=T,
139   LCONV=T,
140   LCOND=T,
141   LRAD=T,
142 /
143 &WISOCTL
144   NWISO=3,
145 /
146 EOF
147 #
148 #
149 #
150 #cp $DPATH/job1 .
151 #cp $DPATH/job2 .
152 #
153 export ECHAM5_THREADS=$NTHREADS
154 #
155 mpirun -np $NCPUS $MODEL
156 #
157 #/usr/bin/nqsII/qsub subjob1
158 #
159 #/usr/bin/nqsII/qsub runjob.necsx8.T63L19
160 #
161 #
162 #
163 exit
```


Skript 17: runjob.necsx8.T63L19.part2

```
1
2 #! /bin/ksh
3 #PBS -b 1 # number of nodes
4 #PBS -l cpunum_job=8 # cpus per node
5 #PBS -l cputim_prc=02:00:00 # max accumulated cputime per process
6 #PBS -l memsz_job=10gb # max accumulated memory
7 #PBS -j o # join err and out to out
8 #PBS -N T63L19part2 # job name
9 #PBS -S /bin/ksh # NQSII Syntax to set the shell
10 #PBS -M tim.carlsen@awi.de
11 #PBS -A tcarlsen
12 #
13 #
14 # VERSION FOR NEC-SX8 (AWI), T. Carlsen, 05/2010
15 #
16 set -ex
17 #
18 # Job file to run echam model on NEC-SX8 (AWI)
19 # =====
20 #
21 #
22 EXP=T63L19 # experiment identifier
23 #
24 DPATH=/sx8/scr/tcarlsen/echam5wiso/T63L19/
25 #
26 NCPUS=8
27 NPROCA=${NCPUS}
28 NPROCB=1
29 NTHREADS=1
30 #
31 RES=63
32 LEV=19
33 #
34 NFILE=2 # Output file type: 1= GRIB, 2= NETCDF
35 #
36 RERUN=.true. # Rerun switch; .false. for initial run, .true
   . for
37 #
38 #
39 #
40 cd $DPATH # output and rerun files are
   written into $DPATH
41 #
42 MODEL=./echam5_wiso.v1.0.a2
43 #
44 INI=/sx8/user2/paleo/data/ECHAM5/PresentDay/T${RES}
45 INIAMIP=${INI}/amip2
46 #
47 #
48 #
49 # set some runtime environment variables
50 #
51 # stop execution after the first run time error
52 F_ERRCNT=0; export F_ERRCNT
53 #
54 # print detailed program execution statistics
55 export MPIPROGINF=ALL_DETAIL
```

```

56 export F_PROGINF=DETAIL
57 #
58 #
59 #
60 rm -f unit.?? fort.99 sst* rrtadata *.codes atmout
61 #
62 ln -s  ${INI}/T${RES}L${LEV}_jan_spec.nc          unit.23
63 ln -s  ${INI}/T${RES}_jan_surf.nc                unit.24
64 #
65 #
66 #
67 ln -s  ${INI}/T${RES}_O3clim2.nc                 unit.21
68 ln -s  ${INI}/T${RES}_VLTCLIM.nc                 unit.90
69 ln -s  ${INI}/T${RES}_VGRATCLIM.nc               unit.91
70 ln -s  ${INI}/T${RES}_TSLCLIM2.nc                unit.92
71 ln -s  ${INI}/surta_data                          rrtadata
72 #
73 #
74 #
75 # for climatological sst and ice (LAMP=F) use:
76 #
77 ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sst_clim.nc        unit.20
78 ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sic_clim.nc        unit.96
79 #
80 # for AMP (variable) sst and ice (LAMP=T) use:
81 #for yrs in 1977 1978 1979 1980 1981 1982 1983 1984 1985 1986 1987
      1988
82 #
83 #do
84 #ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sst_${yrs}.nc    sst${yrs}
85 #ln -s  ${INIAMIP}/T${RES}_amip2sic_${yrs}.nc    ice${yrs}
86 #done
87 #
88 #
89 #
90 # namelist control variables and output control for grid variables
91 # spectral variables are written out by default except liq. water
92 # for production runs set LABORT=FALSE.
93 #
94 #DT_START = 1978,01,01,12,0,0
95 #DT_STOP  = 1979,01,01,14,0,0
96 #
97 # TRIGJOB(1)= 6,'months','last',0
98 # TRIGJOB(2)= 6,'months','last',0
99 # PUIDATA   = 6,'hours','first',0
100 # PUIRERUN  = 10,'days','first',0
101 #
102 # DT_STOP   = 1978,01,02,12,0,0
103 # PUIDATA   = 12,'hours','first',0
104 # PUIRERUN  = 1,'days','first',0
105 #
106 # DT_STOP   = 1978,01,01,15,0,0
107 # PUIDATA   = 40,'minutes','first',0
108 #
109 # NPROMA=512,
110 #
111 # Cosmos:
112 # NPROMA=1536

```

```
113 #
114 # NSUB=1,
115 # TRIGJOB(1)= 1,'months','last',0
116 # LSUB=F,
117 #
118 cat > namelist.echam << EOF
119 &RUNCTL
120   LRESUME=$RERUN,
121   out_datapath = "$DPATH"
122   out_expname  = "$EXP"
123   out_filetype = "${NFILE}",
124   DT_START    = 1979,01,01,12,0,0
125   DT_STOP     = 1990,01,01,12,0,0
126   NSUB=1,
127   TRIGJOB(1)= 1,'months','last',0
128   LAMIP=F,
129   LABORT=T,
130   NPROCA=${NPROCA},
131   NPROCB=${NPROCB},
132   iadvec=1,
133 /
134 &PHYSCTL
135   LPHYS=T,
136   LVDIFF=T,
137   LSURF=T,
138   LCONV=T,
139   LCOND=T,
140   LRAD=T,
141 /
142 &WISOCTL
143   NWISO=3,
144 /
145 EOF
146 #
147 #
148 #
149 #cp $DPATH/job1 .
150 #cp $DPATH/job2 .
151 #
152 export ECHAM5_THREADS=$NTHREADS
153 #
154 mpirun -np $NCPUS $MODEL
155 #
156 /usr/bin/nqsII/qsub subjob1
157 #
158 /usr/bin/nqsII/qsub runjob.necsx8.T63L19.part2
159 #
160 #
161 #
162 exit
```

Skript 18: job1.T63L19

```
1
2 #!/bin/ksh
3
4 #PBS -l cputim_job=3600           # run time
5 #PBS -l memsz_job=2000mb        # Memory per node
6 #PBS -l cpunum_prc=1            # number of processors
7 #PBS -j o                         # join err and out to out
8 #PBS -S /bin/ksh                 # NQSII Syntax to set the shell
9 #PBS -M tim.carlsen@awi.de       # email address
10 #PBS -q asama2                   # queue for postprocessing
11 #
12 #
13 #DPATH
14 #EXP
15 #DAY
16 #MONTH
17 #YEAR
18 #
19 F_PROGINF=detail
20 export F_PROGINF
21 #
22 cd $DPATH
23 #
24 #
25 # tar rerun files
26 #
27 if [ "$MONTH" = "03" -o "$MONTH" = "06" -o "$MONTH" = "09" -o "$MONTH"
    " = "12" ]
28 then
29 #
30 RFILE=rerun_ ${EXP}_echam. ${YEAR} ${MONTH}. ${DAY}
31 cp rerun_ ${EXP}_echam $RFILE
32 #
33 echo ' rerun files copied '
34 #
35 fi
36 #
37 #
38 # calculate monthly mean delta values
39 #
40 ./calc_wiso_monmean_d.sh ${EXP}_ ${YEAR} ${MONTH} ${DAY}
41 #
42 #
43 # calculate monthly mean values of all variables
44 #
45 /sx8/user2/paleo/Utils.tx7/after/bin/after ${EXP}_ ${YEAR} ${MONTH}. ${
    DAY}.nc ${EXP}_ ${YEAR} ${MONTH}.mean.nc <<EOF
46 type=20
47 mean=1
48 format=2
49 EOF
50 #
51 #
52 # clean up
53 #
54 rm ${EXP}_ ${YEAR} ${MONTH}. ${DAY}.nc
55 #
```

Anhang B: Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe. Auf wörtliche und dem Sinne nach aus der Literatur oder aus Quellen entnommene Gedanken und Ergebnisse habe ich stets an den jeweiligen Textstellen verwiesen.

Ort, Datum der Abgabe

Unterschrift

Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände, die vorliegende Bachelorarbeit für die öffentliche Nutzung in der Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek zur Verfügung zu stellen.

Ort, Datum der Abgabe

Unterschrift

Anhang C: Danksagung

Abschließend möchte ich mich bei einigen Personen bedanken, die mir bei der Erstellung der vorliegenden Arbeit eine große Hilfe waren.

Da wäre als erstes Dr. Martin Werner vom Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung in Bremerhaven zu nennen, der mir stets geduldig mit Rat und Tat zur Seite stand und meine gesamte Arbeit nicht nur fachlich betreut hat. Besonders hat mich dabei die immer nette und freundliche Atmosphäre beeindruckt.

An dieser Stelle gilt mein Dank auch Prof. Dr. Carsten Ronning von der Friedrich-Schiller-Universität in Jena für die Betreuung dieser Arbeit und das unkomplizierte und freundliche Gesprächsklima.

Für die Bereitstellung der SCIAMACHY-Daten und einige Hinweise zur Auswertung möchte ich außerdem Christian Frankenberg vom SRON („Netherlands Institute for Space Research“) Danke sagen.

Zu guter Letzt möchte ich mich bei meiner Familie bedanken, die mich nicht nur im Hintergrund unterstützte, sondern diese Arbeit auch mehrfach Korrektur gelesen hat.