Berichtsblatt

1. ISBN oder ISSN	2. Berichtsart (Schlussbericht oder Veröffentlichung) Schlussbericht			
3. Titel SMOS Cal Val II – Soil and Moisture Ocean Salinity – Calibration and Validation				
4. Autor(en) [Name(n), Vorname(n)] Prof. Dr. Detlef Stammer Meike Sena Martins		5. Abschlussdatum des Vorhabens 30.11.2015		
		6. Veröffentlichungsdatum		
	7. Form der Publikation Schlussbericht			
8. Durchführende Institution(en) (Name, Adresse) Universität Hamburg		9. Ber. Nr. Durchführende Institution		
Edmund-Siemers-Allee 1 20148 Hamburg		10. Förderkennzeichen FKZ: 50 EE 1245		
		11a. Seitenzahl Bericht 25		
		11b. Seitenzahl Publikation		
		12. Literaturangaben 17		
13. Fördernde Institution (Name, Adresse) Raumfahrtmanagement des Deutsch für Luft- und Raumfahrt e.V.	nen Zentrums	14. Tabellen 1		
Königswinterer Str. 522-524, 53227 Bonn		15. Abbildungen 14		
16. Zusätzliche Angaben				
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum) Projektträger DLR				
18. Kurzfassung Gesamtziel des Projektes war die Abschätzung des Fehlers der vorhandenen Oberflächensalzgehaltsprodukte, die durch die SMOS Mission der ESA bereit gestellt werden, der Verbesserung der SMOS Salzgehaltsdaten, dem Zusammenfügen der verbesserten Produkte mit Feldern der NASA Aquarius SAC-D Mission und der ersten wissenschaftlichen Auswertung der resultierenden Salzgehaltsvariationen über dem Weltozean.				
Nachdem die Datenqualität der ESA SMOS Datenprodukte bisher unzureichend für eine wissenschaftliche Auswertung war, wurde eine iterative und kontinuierliche Verbesserung der SMOS Produkte über dem Weltozean durchgeführt. Die Arbeiten bezogen verschiedene in situ Daten-Produkte ein (Argo, Underway-SSS Daten, Zeitserienstationen), ebenso wie Modellsimulationen. Differenzen im Salzgehalt zwischen SMOS-Retrieval und in situ Messungen wurden hinsichtlich Algorithmen-Unsicherheiten ausgewertet, um Fehler in existierenden Produkten zu korrigieren. Gleichzeitig wurden mit diesen Aktivitäten die SMOS-Daten mit denen der NASA Aquarius-Mission verglichen und Produkte auf ähnliche Fehlerursachen untersucht. Im Anschluss wurde für das Produkt Fehlerkovarianzen der Daten abgeschätzt, die für eine weiterführende Analyse und die Assimilation der Daten in Ozeanmodelle unerlässlich sind. Zur Sicherstellung der Qualität der resultierenden Salzgehaltsfelder wurden diese hinsichtlich des Einflusses von atmosphärischen oder geophysikalischen Effekten auf die Retrievalgenauigkeit ausgewertet.				
19. Schlagwörter SMOS, Salzgehalt, Satellitenmessur	ng, Oberflächenrückstreuung, in situ	Messungen, Salzgehaltsdrifter, Argo		
20. Verlag	21. Preis			

^{*)} Auf das Förderkennzeichen des BMBF soll auch in der Veröffentlichung hingewiesen werden.

Document Control Sheet

1. ISBN or ISSN	2. type of document (e.g. report, publication) Final Report		
3. title			
SMOS Cal Val – Soil and Moisture O	cean Salinity – Calibration and Validat	10N	
4. author(s) (family name, first name(s)) Prof. Dr. Detlef Stammer Meike Sena Martins		5.end of project 30.11.2015	
		6. publication date	
	7. form of publication Final report		
8. performing organization(s) (name, address)		9. originator's report no.	
Universität Hamburg			
Edmund-Siemers-Allee 1 20148 Hamburg		10. reference no. FKZ: 50 EE 1245	
		11a. no. of pages Report 25	
	11b. no. of pages Publication		
13. sponsoring agency (name, address) Raumfahrtmanagement des Deutschen Zentrums		12. no. of references 17	
für Luft- und Raumfahrt e.V.		14. no. of tables	
Königswinterer Str. 522-524	15. no. of figures		
53227 Bonn 14			
16. supplementary notes			
17. presented at (title, place, date) Projektträger DLR			
^{18. abstract} Overall aim of the project was to assess the residual error of the existing surface salinity products provided by the SMOS mission of ESA, to improve the SMOS salinity data, to merge them with similar fields available from the NASA Aquarius SAC - D mission, and to perform first scientific analyses of the resulting salinity variations above the world ocean.			
After the data quality of the ESA SMOS data products remained unsatisfactory for a scientific evaluation, an iterative and continuous improvement of the SMOS products on the world ocean has been implemented. The works involved and was built in various in situ data (Argo, Underway SSS data, time series stations), as well as model simulations. Differences in salinity between SMOS retrieval and in situ measurements were evaluated in terms of algorithms uncertainties, with the purpose to correct errors in existing products. Simultaneously the data were compared to the corresponding ones from the Aquarius Mission and similar error sources were identified. Product error covariances were estimated and were used in further analyses and during assimilation approaches assimilating SMOS data in the GECCO ocean model. The quality of the resulting salinity fields were evaluated on the retrieval accuracy of the influence of atmospheric or geophysical effects.			
19. keywords SMOS, Salinity, Satellite measurement, remote sensing, surface scattering, in situ measurements, salinity drifter. Argo profiler			
20. publisher		21. price	

I. Kurze Darstellung

1. Aufgabenstellung

Gesamtziel des Vorhabens war die Abschätzung des Restfehlers der vorhandenen Oberflächensalzgehaltsprodukte, die durch die SMOS Mission der ESA bereit gestellt werden, und der Verbesserung der SMOS Salzgehaltsdaten, dem Zusammenfügen der verbesserten Produkte mit Feldern der NASA Aquarius SAC-D Mission und der ersten wissenschaftlichen Auswertung der resultierenden Salzgehaltsvariationen über dem Weltozean. Die vorgeschlagenen Arbeiten bauen auf den vorherigen SMOS Cal/Val Aktivitäten auf, die vom BMBF bis Ende Juli 2012 finanziert wurden.

2. Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Die Satellitendaten wurden von der ESA aus den SMOS L-Band Strahlungsmessungen abgeleitet und via Brockmann Consult bereitgestellt. Hardwarekapazitäten dafür wurden von dem Rechenzentrum des Instituts für Meereskunde an der Uni Hamburg genutzt. Dabei liegt seit November 2014 ein nahezu konsistenter Datensatz zur Verfügung der mit einem einheitlichen Prozessor (Version 550) berechnet wurde. Allerdings sind die Daten bis Ende 2013 reprozessiert, die Daten für 2014 ein operativer Retrieval. (In WP1 wird gezeigt, dass dieser Umstand Auswirkungen auf die zeitliche Struktur des Bias hat.) Die verwendeten in situ (ftp://ftp.ifremer.fr/ifremer/argo/, http://www.legos.obs-Daten sind online verfügbar mip.fr/observations/sss: http://www.metoffice.gov.uk/hadobs/en4/; http://www.pangaea.de.), die Aquarius Daten sind in den verschiedenen Prozessierungsstufen verfügbar unter ftp://podaac-ftp.jpl.nasa.gov/allData/aquarius/.

Der Antragsteller besitzt weitreichende Erfahrungen in der Auswertung und Interpretation ozeanographischer Fernerkundungsdaten sowie das "know-how" zur Durchführung von Studien mit numerischen Zirkulationsmodellen. Insbesondere ist in diesem Projekt der Output eines hochauflösenden Modells untersucht worden, welches nur mit großen Rechnerkapazitäten berechnet werden kann. Das deutsche Klimarechenzentrum (DKRZ), bei dem die Universität Hamburg als Gesellschafterin beteiligt ist, bietet diese Voraussetzungen.

3. Planung und Ablauf des Vorhabens

Aufgrund notwendiger Reprozessierungen des Salzgehaltsretrievals, den SMOS L2 Daten sowie den zugrundeliegenden L1 Daten von Seiten der ESA, richtete sich der Fortschritt der Arbeiten in gewisser Weise nach dem Bereitstellen dieser Daten. Auch die Daten der anderen Satellitenmission Aquarius wurden von Seiten der NASA reprozessiert und waren dementsprechend verzögert verfügbar. Das hat allerdings nicht den Erfolg des Projektes beeinträchtigt.

4. Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Dieses Projekt war eine Verlängerung der ersten deutschen SMOS Cal/Val Aktivität, sodass auf fundierte Kenntnisse der Datenspezifikationen und dem technischen Vorwissen über die Daten und den Salzgehaltsretrieval angeknüpft werden konnte. Ein weiterer Vorteil des Projektes lag in der langjährigen Mitgliedschaft des Pls in der SMOS Science Advisory Group, und danach in der COST Aktion. In der Abteilung Fernerkundung und Datenassimilation des IfM werden ferner seit vielen Jahren globale wie auch regionale

Ozeandatensynthesen betrieben, in denen dynamische Modelle der Ozeanzirkulation mit Hilfe der adjungierten Methode in Übereinstimmung mit Messdaten aus Feldmessungen wie auch von satellitengestützten Messverfahren gebracht werden können.

5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Bei der umfangreichen Arbeit zur Analyse und Interpretation der SMOS Daten konnte auf die langjährige erfolgreiche Zusammenarbeit mit anderen europäischen Instituten zurückgegriffen werden, insbesondere mit dem IFREMER in Brest und dem Institut LOCEAN an der Universität Paris. Die Arbeiten profitierten ebenfalls von der Teilnahme des PIs in der COST Action SMOS.

Die Zusammenarbeit innerhalb der DFG Forschergruppe hat sich als sehr fruchtbar erwiesen, das vorliegende Projekt liefert als eine Komponente die Salzgehaltsfelder mit Fehlerschätzungen, sodass die Daten in einer Ozeansynthese (GECCO) benutzt werden konnten, mit dessen Hilfe das Ozeanmodell durch Datenassimilation in Übereinstimmung mit gemessenen Daten gebracht werden konnte.

II. Eingehende Darstellung

1. Verwendung der Zuwendung und des erzielten Ergebnisses im Einzelnen, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele:

Im Laufe dieser Studie wurden verschiedene Arbeitspakete durchgeführt, welche darauf abzielten, die SMOS-Daten hinsichtlich ihrer Genauigkeit zu testen und Unsicherheiten in den Daten zu reduzieren. Resultierende Differenzen im Salzgehalt zwischen SMOS-Retrievals und in situ Messungen – einschließlich ARGO Salzgehaltsmessungen - werden hinsichtlich des Einflusses von atmosphärischen oder geophysikalischen Effekten auf die Retrievalgenauigkeit ausgewertet, um in einem nächsten Schritt die Retrievalalgorithmen zu verbessern. Gleichzeitig wurde begonnen, die SMOS-Daten mit denen der NASA Aquarius-Mission zu vergleichen und SMOS Daten in einer Pilotstudie in ein Ozeanmodel zu assimilieren, um den Wert der neuartigen Beobachtungen zur Bestimmung des Oberflächenflusses von Frischwasser (netto Niederschlag) zu belegen. Alle durchgeführten Arbeiten entsprechen der Aufgabenstellung im Antrag.

Im Einzelnen ergaben sich dabei folgende Ergebnisse, die alle mit den vorgegebenen Zielen im Einklang stehen.

WP 1: Vergleich von SMOS Daten mit in situ Daten und Modellen:

Die Validierung der satellitengestützten Salzgehaltsdaten wurde mit in situ Daten, einem globalen Datensatz zusammengestellt mit Qualitätskriterien von Good et al. (2013), verfügbar auf <u>http://www.metoffice.gov.uk/hadobs/en4</u>, aber auch individuellen Argo floats und alle verfügbaren Thermosalinographen durchgeführt. Dabei wurden die Daten der einzelnen Überflüge des SMOS Satelliten auf einer halben Erdumlaufbahn (im Weiteren "Half-orbit") mit den einzelnen in situ Daten genutzt, um die Differenzen aus Datenpaaren zu erhalten, die in Raum und Zeit möglichst dicht zueinander liegen. Mit den konsistenten SMOS Daten der Version 5.50, die für den Zeitraum 2010 bis Ende 2013 als reprozessierte Daten und für 2014 bis Anfang 2015 in Echtzeit (operativ) vorliegen, konnten die Fehler in dem bestehenden Produkt räumlich und zeitlich identifiziert werden. Abbildung 1 zeigt die zeitlich gemittelten

globalen Differenzen für die auf- und absteigenden Half-orbits. Beide Half-orbits weisen negative Differenzen in der Nähe zu Kontinenten auf, und positive in den südlichen hohen Breiten. Während die aufsteigenden Half-orbits (ASC) insgesamt negative Differenzen zeigen, sind die absteigenden Half-orbits (DES) an den Küsten negativ und im offenen Ozean positiv. Beide Half-orbits zeigen deutliche positive Differenzen entlang der südlichen Polarfront. Inwiefern der Abstand zur Küste, die geographische Breite und Wind sowie die Temperatur in der Ausprägung dieser Differenzen eine Rolle spielen, wird im Folgenden WP2 untersucht.



Abbildung 1: Differenzen der aufsteigenden (oben, ASC) und absteigenden (unten, DES) SMOS L2 Half-orbits Version 5.50 Salzgehaltsdaten zu in situ Daten (SSS_SMOS – SSS_insitu) gemittelt für den Zeitraum 2010 bis 2014. Die als dünne Rechtecke gezeichneten Regionen wurden regional genauer auf den zeitlichen Verlauf der Salzgehaltsanomalien untersucht.

Der mittlere Fehler in den tropischen und subtropischen offenen Ozeanregionen, die in Abbildung 1 markiert sind, stellt die Tabelle 1 dar. Die Region im westlichen tropischen Pazifik ist benannt nach der "Ocean Target Transformation" (OTT), eine Korrektur, die aus den dortigen Daten berechnet und auf die globalen Daten angewandt wurde. Die OTT Region weist konsequenterweise den geringsten Fehler auf. Auch die anderen tropischen Regionen zeigen geringe mittlere Fehler, jedoch sind in diesen Regionen die Standardabweichungen (STD) der Fehler auch ohne Landkontamination groß (>0.5 g/kg). Die größten mittleren Fehler, wie auch die größten STD der Fehler liegen in der Nordatlantischen Region, welche neben der Landkontamination auch durch die Radio Frequency Interference (RFI) beeinflusst wird. Damit sind illegale Emissionen im Frequenzbereich des SMOS Satelliten (etwa 1.4 GHz) gemeint, die die natürliche elektromagnetische Strahlung der Erdoberfläche überdecken. Diese Signale

stören wegen des interferometrischen Prinzips die Daten im gesamten Blickfeld des Satelliten (field of view, im Folgenden FOV). Die ESA ist erfolgreich mit der Verfolgung dieser illegalen Emissionsquellen; viele konnten bereits abgeschaltet werden (Oliva et al., 2014), und erlaubten so die Validierung der Daten im Nordatlantik (Köhler et al., 2015).

ASC	Mean Bia	Mean Bias		RMS Diff	RMS Differences	
Region	S1	S2	S3	S1	S2	S3
OTT	0.023	0.013	0.038	0.461	0.467	0.458
NA	-0.869	-0.843	-0.900	1.113	1.138	1.162
TA	-0.247	-0.240	-0.250	0.625	0.629	0.623
TP	-0.012	-0.021	-0.031	0.545	0.552	0.541
ΤI	-0.319	-0.361	-0.363	0.712	0.720	0.722

DES	Mean Bias		RMS Differences			
Region	S1	S2	S3	S1	S2	S3
OTT	-0.078	-0.067	-0.056	0.578	0.583	0.564
NA	-0.539	-0.452	-0.630	1.203	1.225	1.231
TA	-0.008	-0.027	-0.038	0.666	0.662	0.647
TP	-0.112	-0.120	-0.143	0.629	0.629	0.610
TI	0.014	-0.084	-0.081	0.766	0.752	0.751

Tabelle 1: Mittlerer Bias und mittlere quadratische Differenzen (RMS) der L2 SMOS Salzgehalte von beiden Half-Orbits verglichen zu den in situ Salzgehalten aus den Jahren 2010 bis 2014, in den Regionen dargestellt in Abbildung 1 und gegeben durch ihre Längen- und Breitenkoordinaten: OTT:45°S–5°S/140°W–105°W;NA:40°N–75°N/60°W–20°E, TA:30°W–0°W/0°S–4°S,TI:60°E–100°E/30°S–0°S; TP:180°W–100°W/30°S–0°S.

Abbildung 2 zeigt den zeitlichen Verlauf der globalen, täglich gemittelten Differenzen der SMOS Salzgehaltsdaten zu in situ Daten. Der Verlauf der Fehler zeigt die Notwendigkeit der Reprozessierung: Während der Jahre 2010 bis 2013 liegen die Schwankungen im Bereich bis zu 0.5 g/kg, allerdings 2014, wenn "nur" operative Daten vorliegen, sind die Schwankungen des mittleren Fehlers größer (> 0.5 g/kg), vor allem erkennbar in den absteigenden Half-Orbits. Saisonale Schwankungen sind in diesem Verlauf bereits zu vermuten. Eine harmonische Analyse mit dem least squared fit einer Jahresschwankung (nicht dargestellt) ergab, dass vor allem die Kontinentalrandbereiche sowie die polaren Gebiete signifikante Jahresamplituden aufweisen. Diese sind dem Messprinzip geschuldet, und weniger den ozeanographischen Prozessen. Einige der Differenzen im Salzgehalt können natürlichen Ursprungs sein. Die Analyse des Jahresgangs hat aber keine Amplituden und Phasen ergeben, die atmosphärische Flüsse als Erklärung für die Differenzen erkennen lassen.

Die Analyse der Salzgehaltsdifferenzen im Nordatlantik konnte erst nach Abschaltung der RFI Quellen im Nordatlantik (nach Mai 2012) begonnen werden. Die Analyse beinhaltet Vergleiche zu einem hochauflösenden Zirkulationsmodell, den in situ Daten und den Aquarius Daten. Sie ist veröffentlicht in Köhler et al. 2015. Allerdings wurden die Analysen mit monatlich gemittelten Salzgehaltsfeldern durchgeführt. In WP2 wird darauf nochmals eingegangen.



Abbildung 2: Global und täglich gemittelte Differenzen (+) und Standardabweichungen (Punkte) der L2 SMOS Salzgehalte von den aufsteigenden Half-Orbits (oben) und den absteigenden Half Orbits (unten) zu den in situ Salzgehalten aus den Jahren 2010 bis 2014. Die drei Rauigkeitsmodelle S1, S2 und S3 sind farblich unterschieden.

Einige der Differenzen in den SMOS Daten zu in situ Daten können dem "sampling" Fehler geschuldet werden. Die genauere Untersuchung der Variabilität des SSS auf den zeitlichen und regionalen Mittelungsskalen, die auch in der Erstellung der monatlichen SMOS SSS Felder Anwendung finden, ist in Sena Martins et al. (2015) veröffentlicht. Die Analyse basiert auf Daten eines hochauflösenden Zirkulationsmodells, welches im IfM Hamburg betrieben wird (Serra et al., 2010), und auf in situ Daten der letzten 30 Jahre. Die Ergebnisse sind im Wesentlichen ein bislang unterschätzter Messfehler von deutlich über 0.2 g/kg in Küstennähe und in Wassermassenfronten, und von etwa 0.2 g/kg im offenen Ozean. Dieser Wert stellt für die Validierung der monatlichen SMOS SSS Felder eine Genauigkeitsgrenze dar. Die Skalen der Dekorrelation, d.h. wo die Autokorrelation des SSS auf unter 1/e abfällt, sind oft gleich den Skalen der Mittelungsintervalle, sodass die Anzahl der unabhängigen Daten kritisch ist.

WP 2: Verbesserung der SMOS Daten

Die Berechnung der Veränderung der Helligkeitstemperatur durch die Rauigkeit der Meeresoberfläche stellte seit Anfang eine Herausforderung dar. Da man sich nicht sicher war, welches Rauigkeitsmodell das optimale ist, hat ESA drei verschiedene Modelle parallel laufen lassen. Zwei Modelle basieren darauf, dass sich die Rauigkeit aus den Winddaten berechnen lassen, Modell 2 hat zusätzlich ein Modell für Schaum implementiert. Modell 3 ist ein empirisches Modell, das auch Wellenhöhe, Windrichtung und -dauer mitbeachtet.

In Abbildung 3 ist die global gemittelte Salzgehaltsabweichung der Satellitendaten zu den in situ Daten für alle 3 Modelle gegen die Windstärke dargestellt. Dabei sind Daten dichter als 600 km an den Kontinenten oder in zu kalten Gewässern (SST < 4 $^{\circ}$ C) ausgeschlossen. Es wird deutlich, dass die Empfehlung der ESA (beruhend auf der Studie von Boutin et al., 2013) sinnvoll ist, alle Daten außerhalb des Windstärkenbereiches von 3 bis 12 m/s für weitere Berechnungen auszuschließen. Innerhalb dieses Windstärkenbereiches zeigen die Modelle keinen großen Unterschied, und der Verlauf für beide Half-orbits ist sehr ähnlich. Allerdings weisen die aufsteigenden Half-orbits einen negativen, über alle Windstärken konstanten Offset auf. Bei Windgeschwindigkeiten über 12 m/s zeigt Modell 1 einen starken negativen Abfall, auch Modell 2 zeigt negative wenn auch im Betrag geringere Differenzen. Das empirische Modell 3 hingegen zeigt stark positive Differenzen bei hohen Windgeschwindigkeiten. Die Unsicherheit der Analyse zeigt sich in den großen STD, die bei hohen Windgeschwindigkeiten deutlich über 1 g/kg liegen.



Abbildung 3: Salzgehaltsdifferenzen (in g/kg) der aufsteigenden (links) und absteigenden (rechts) SMOS L2 Half-orbits zu in situ Daten (SSS_SMOS – SSS_insitu), in Windklassen von 2 m/s, gemittelt für alle globalen Daten im Zeitraum 2010 bis Ende 2014. Gemittelte Differenzen (Standardabweichungen) sind als durchgezogene (gestrichelte) Linien in den verschiedenen Farben für die 3 Rauigkeitsmodelle (S1, S2 und S3) dargestellt. Die Datenpaare weisen Temperaturen von > 4°C und eine Distanz zur Küste von > 600 km auf.

Wenn Land oder Eis in das FOV des Satelliten gerät, wird die Helligkeitstemperatur über dem Ozean stark kontaminiert. Das lieat an der komplexen Berechnung des Helligkeitstemperaturfeldes auf der Basis der Korrelation aller auf die 69 Antennenmodule eintreffenden Signale. Abbildung 4 zeigt die Differenzen in Abhängigkeit von der Distanz zur Küste: Die Kontamination wirkt auf einer Distanz zur Küste von etwa 1000 km, wobei die aufsteigenden Half-orbits einen zusätzlichen negativen Bias aufweisen, der Verlauf der beiden Half-orbits ist ansonsten aber ähnlich und zeigt hohe Unsicherheit in der Nähe von Land.

Die dünnen Linien in diesen Abbildungen 4 stellen die Differenzen dar, die in einem Bereich der Windgeschwindigkeiten von 6 bis 10 m/s und mit Temperaturen oberhalb von 4°C gemessen wurden. Der Einfluss der Temperatur ist hier sehr deutlich, bei kalten Temperaturen wird der negative Bias durch die Landkontamination vermindert.



Abbildung 4: Salzgehaltsdifferenzen der auf- (links) und absteigenden (rechts) SMOS L2 Half-orbits zu in situ Daten (SSS_SMOS – SSS_insitu) in g/kg, in Entfernungsstufen von 50 km, gemittelt für alle Daten im Zeitraum 2010 bis Ende 2014. Global gemittelte Abweichungen (negative Standardabweichungen) sind als durchgezogene (gestrichelte) Linien in den verschiedenen Farben für die 3 Rauigkeitsmodelle dargestellt. Die Datenpaare sind reduziert auf diejenigen im Windgeschwindigkeitsbereich von 6 m/s bis 10 m/s und einer Temperatur von > 4℃.

Die geringe Empfindlichkeit des Messprinzips besonders bei niedrigen Oberflächentemperaturen (SST) war seit Beginn der SMOS-Mission ein Anlass zur Sorge (Font et al., Salzgehaltsdifferenzen 2010). Abbildung 5 zeigt die in Abhängigkeit zur Oberflächentemperatur (SST). Zur Herstellung von Abbildung 5 sind nur Datenpaare in den gemäßigten Windgeschwindigkeitsbereich und mit einem Abstand von mehr als 600 km zur Küste genutzt worden, um die Abhängigkeit von der Windgeschwindigkeit und der Landkontamination auszuschließen. Die Auswahl verringert die Anzahl der Datenpaare und reduziert die durchschnittlichen Differenzen zu in situ Salzgehaltswerten für die beiden Halforbits um etwa 0.1-0.15 g/kg. Abbildung 5 bestätigt, dass das Salzgehaltsretrieval umso besser ist, je höher die SST ist. In den aufsteigenden Half-orbits beträgt die Differenz zwischen -0.1 und -0.3 g/kg für alle Modelle bei SST > 10° C, während in den absteigenden half-orbits die Differenzen zwischen 15° bis 25° C leicht positiv sind. Bei den Temperaturen über 25° C scheint sich die Qualität des satellitengestützten Salzgehaltes wieder zu verschlechtern, was sich durch negative Differenzen in beiden Half-orbits für alle Modelle und durch eine höhere STD ausdrückt. Allerdings kommen die wärmsten SST in der Nähe der westlichen tropischen Gebiete und in der Nähe von Küsten vor, das heißt auch in der Nähe von hoch frequentierten Schifffahrtslinien, wo RFI diese Daten zusätzlich beeinflussen können.



Abbildung 5: Salzgehaltsdifferenzen (in g/kg) der aufsteigenden (links) und absteigenden (rechts) SMOS L2 Half-orbits zu in situ Daten (SSS_SMOS – SSS_insitu), in Temperaturklassen von 2 ℃, gemittelt für die globalen Daten im Zeitraum 2010 bis Ende 2014, reduziert auf diejenigen im Windgeschwindigkeitsbereich von 4 m/s bis 10 m/s und einer Distanz zur Küste von > 600 km. Gemittelte Abweichungen (Standardabweichungen) sind als durchgezogene (gestrichelte) Linien in den verschiedenen Farben für die 3 Rauigkeitsmodelle dargestellt.

Während Messungen bei SST > 4 ° C kleine Differenzen, und Messungen bei SST >15 ° C eine STD < 1 zeigen, steigen die Differenzen bei SST < 4 ° C für alle Rauigkeitkeitsmodelle stark an, und die STD der Differenzen steigen auf 1.3 g/kg. Wenn Datenpaare mit einer höheren Windgeschwindigkeit und geringeren Distanzen zur Küste (nicht dargestellt) mit eingeschlossen werden, nimmt die Differenz wiederum um 0.1 bis 0.15 g/kg ab. Auffällig ist, dass sich die Temperaturabhängigkeit bei T < 10 ° C für die drei Rauigkeitsmodelle unterscheidet. Ob dies mit den Rauigkeitsmodellen selbst, oder mit anderen Einflüssen zu tun hat, ist nicht klar. Sobald die SST in den Rauigkeitsmodellen berücksichtigt wird, können Unterschiede in dem berechneten Salzgehalt in der Größenordnung von 0.5 g/kg erzeugt werden (siehe Abbildung 7 in Dinnat et al., 2003). Allerdings ist die Interpretation dieser Ergebnisse schwierig, berücksichtigt man ihre hohe Unsicherheit.

Das Ergebnis einer positiven Salzgehaltsanomalie bei niedrigen Temperaturen ist ein Widerspruch zu den Ergebnissen, die in Köhler et al. (2015) und im Zwischenbericht des SMOS Cal/Val II Projektes vom Juli-Dezember 2013 aus gegriddeten, extrapolierten und gemittelten Feldern errechnet wurde. Bei diesen Analysen überwog eine negative Anomalie, die allerdings eher auf der sogenannten Landkontamination begründet ist. Für die Begründung der hier gefundenen positiven Anomalie werden weitere Analysen durchgeführt:

Die kältesten Temperaturen (SST<4°C), die in den Datenpaaren gefunden werden, stammen aus den hohen Breiten, genauer (siehe Abbildung 6, magenta Punkte) aus dem Nordpazifik, der Labrador See, der Grönland- und Barents See, und 80% der Datenpaare sind aus dem geographischen Breitengürtel um die Antarktis, entlang der Polarfront, die durch einen starken Temperaturabfall von 5°C auf 2°C charakterisiert ist (Dong, 2006). Die positiven Salzgehaltsanomalien in Abbildung 1 scheinen mit den geringen Temperaturen in der Polarfront in Beziehung zu stehen. Andererseits vermuten Boutin et al. (2013), dass diese positiven Differenzen in Beziehung zu den hohen Windgeschwindigkeiten im antarktischen Gürtel stehen. Das kann hier kaum überprüft werden, da hohe Windgeschwindigkeiten in den L2 Daten in diesen Breiten für die Modelle 1 und 2 nicht gespeichert worden sind, weil die Datenqualität des Salzgehaltsretrievals zu schlecht war.



Abbildung 6: Orte, an denen SST < 4 ° C (magenta Punkte), wo SMOS L2 Daten Windgeschwindigkeiten >11 m/s zeigen (cyan Kreuze). Die Eisgrenze im März (September) ist als blaue (schwarze) dicke Linie angegeben. Orte, an denen der monatliche Multisatelliten Datensatz von HOAPS Windgeschwindigkeiten >11 m/s zeigt sind grau markiert.

Abbildung 6 zeigt die Orte, wo die einzelnen SMOS L2 Daten hohe Windgeschwindigkeiten (> 11 m/s) gespeichert haben. Zum Vergleich ist die Position des Windgürtels aus einem Jahresmittel der HOAPS Daten (ein gegittertes Multi-Satellitenprodukt) angegeben. Dieser Windgürtel liegt polwärts der hohen Windgeschwindigkeiten, wie sie von SMOS gespeichert wurden. Das zeigt, dass die SMOS L2 Daten die hohen Windgeschwindigkeiten in den hohen südlichen Breiten schlecht repräsentieren. Wie aber bereits oben gezeigt, würden hohe Windgeschwindigkeiten bei dem Modell 1 und 2 zu negativen Differenzen führen. Eine detailliertere Untersuchung ist mit diesen Daten aufgrund von wenigen in situ Daten und schlechter SMOS L2 Datenqualität nicht möglich.

Um die Abhängigkeit von SST und der Windgeschwindigkeit zu trennen, sind die Differenzen für die Datenpaare des Rauigkeitsmodells S3 in Abbildung 7 aufgetragen. Für dieses Rauigkeitsmodell werden die SMOS- Daten aus Qualitätsgründen nicht verworfen, sodass mehr Daten bei hohen Windgeschwindigkeiten zur Verfügung stehen als bei den anderen zwei Rauigkeitsmodellen. Die Salzgehaltsdifferenzen bei starkem Wind und SST >10°C sind negativ, wie in Abbildung3 gezeigt, werden aber positiv, sobald die Temperatur kleiner ist. Allerdings gibt es immer noch negative Differenzen (gelb gefärbte Punkte in Abbildung 7), die aufgrund von RFI, Land- oder Eiskontamination herrühren können. Die Unsicherheit ist groβ, und die verschiedenen Einflüsse vermischen sich.

Wie Land im FOV die Helligkeitstemperaturen verunreinigen können, hat der Übergang zu Eis den gleichen störenden Effekt. Um die Möglichkeit der Eis-Kontamination zu überprüfen, ist seine Lage aus den SMOS Daten selbst berechnet. Ein gerasterter Datensatz wurde von Tian-Kunze et al. (2013) zur Verfügung gestellt. Die Erhöhung der Helligkeitstemperatur von 90 °K auf 120 °K zeigt das Vorhandensein von Eis. Die Helligkeitstemperaturkontur von 100 °K in Abbildung 6 zeigt die gemittelte Position der Eiskante im März und September. Vor allem im September ist die Eiskante sehr nahe an den Datenpaaren. Die Eiskanten-Kontamination der SMOS Daten sollte zu einer negativen Differenz führen, und sollte eine unterschiedliche Reaktion für absteigende und aufsteigende Orbits zeigen, was nicht der Fall ist.

Zusammengefasst kann der positive Bias im Salzgehalt weder von der Rauigkeits-Modellierung, noch von der Eiskanten - Kontamination, noch vom starken galaktischen Rauschen oder der RFI erklärt werden. Die bisherigen Ergebnisse führen auf die einzige Erklärung, dass das Modell der Dielektrizitätskonstanten oder der Permittivität von Klein et al. (1977), welches zur Berechnung der Fresnel-Emissivität der Meeresoberfläche verwendet wird, für die positive Tendenz bei kalten SST verantwortlich sein könnte.



Abbildung 7: Salzgehaltsdifferenzen [in g/kg] der absteigenden half-orbits des Rauigkeitsmodells 3 (Farbskala) zu in situ Daten bei hohen Wind-geschwindigkeiten. Datenpaare dichter als 600 km an der Küste sind hier ausgeschlossen.

Dinnat et al. (2014) verglichen die Auswirkungen des Permittivitätsmodell, welches in SMOS verwendet wird, mit demjenigen Modell, welches in Aquarius verwendet, durch Meissner et al. (2004) entwickelt und in Meissner et al. (2012) aktualisiert wurde. Die Unterschiede zwischen den beiden verschiedenen Helligkeitstemperaturen zeigen eine sehr starke Abhängigkeit von der SST unter 5 °C (Abbildung 2 in Dinnat et al., 2014). Die Berechnung des Salzgehalts mit dem Permittivitätsmodell von Klein et al. (1977) aus den von Aquarius gemessenen Helligkeitstemperaturen führte im Vergleich zu einzelnen Argo Profildaten ebenfalls zu einem positiven Bias bei sehr niedrigen Temperaturen, bei SST <4 °C (Abbildung 3 in Dinnat et al., 2014), allerdings mit einer hohen Variabilität aufgrund des zeitlich begrenzten Datensatzes von Aquarius. Die Ergebnisse der vorliegenden Studie bestätigen die Idee von Dinnat et al. (2014). Während bei moderaten Temperaturen das Permittivitätsmodell von Klein et al (1977) eine bessere Übereinstimmung der Salzgehalte mit in situ Daten als das Meissner Modell schafft, zeigt es bei sehr niedrigen Temperaturen eine Verschlechterung der Salzgehaltswerte. Eine aktuelle Studie von Lang et al. (2016) zeigt eine Unterschätzung der Permittivität durch das Modell von Klein et al. (1977) bei niedrigen Temperaturen um 1 bis 1.5 %, so dass eine Überarbeitung des Modells für diesen Temperaturbereich notwendig zu sein scheint.

Die Anstrengungen, funktionale Abhängigkeiten von Wind oder der Temperatur zu erkennen, stellen sich als schwierig heraus, da zum Einen das Rauschen für alle Parameter zu hoch ist, obwohl die L2 Daten bereits räumlich gemittelt wurden; zum anderen da die Datenverfügbarkeit der Kollokationspaare klein ist.

Um einen systematischen Ansatz für die Biaskorrektur zu finden, wurde die jährliche Amplitude der Unterschiede berechnet. Die Motivation dafür beruht auf der Annahme, dass viele Mängel in der Salzgehaltsberechnung einen jährlichen Zyklus zeigen, wie z.B. galaktische Rauschen mit einem Maximum im September in der südlichen Hemisphäre, das "Glitzern der Sonne" (sunglint) in das FOV hinein, das während bestimmter Monate in der nördlichen oder südlichen Hemisphäre auftritt, oder die Landkontamination (Tenerelli et al., 2008). Letztere sollte nur vom Winkel zwischen den Landkonturen und der Flugrichtung des Satelliten abhängen. Obwohl die genaue Wiederholungszeit für die Spur des Satelliten 149 Tage ist, kann es einige ähnliche sich wiederholende Muster in der Bias- Verteilung während des Jahres geben. Die Szene einschließlich der Landteile im FOV ändert sich mit dem Winkel Sonnenstand zu SMOS Antenne, die einen jährlichen Zyklus hat.

Die ursprüngliche Idee, einen funktionalen Zusammenhang der Abhängigkeiten des Bias von den einzelnen geowissenschaftlichen Parameter wie Windstärke, Rauigkeit, Temperatur und geographische Breite herzustellen, ist zwar gelungen, jedoch um diesen für die Biaskorrektur zu nutzen, sind die Ergebnissen sehr ungenau, zudem überlagern sich die einzelnen Effekte regional unterschiedlich, sodass eine Biaskorrektur der SMOS SSS Daten empirisch unternommen wurde.

Hierzu wurden wöchentliche Matrizen der Unterschiede zwischen SMOS L2 SSS und individuellen in situ Messungen berechnet. Innerhalb dieser Woche ist die globale Erfassung durch den SMOS Satelliten pro Half-Orbit vollständig, und die Zeitskala von 5 Tagen, der Zeit innerhalb welcher die Autokorrelation des Salzgehaltes unter 1/e abfällt (berechnet in Sena Martins et al., 2015), einigermaßen eingehalten. Diese Differenzen wurden einem laufenden Monatsmittel und einem räumlichen Mittel von einer geographischen 7°x7° Region, gewichtet nach Distanz, unterzogen, sofern die Wurzel der mittleren quadratischen (im Folgenden RMS) Differenzen 1.1 g/kg, einem empirisch bestimmten Wert, nicht überstiegen. Ein zusätzlicher, zeitlicher Filter für die so entstandenen Zeitserien pro Gitterpunkt eliminierte eventuelle Ausreißer. Im Falle der RMS Differenze > 1.1 g/kg, wurde die Region zur Mittelung der Korrektur verkleinert, und Daten aus den entsprechenden Monaten der anderen Jahre mit hinzugezogen. Das sind vor allem die Regionen um die Küste herum, die einen starken Jahresgang aufweisen.

Die Korrektur wurde auf die Half-Orbit weisen Daten angewandt, und danach mit den verbleibenden Fehlern invers gewichtet zu monatlich Feldern gemittelt. Diese können mit monatlichen in situ Datenfeldern validiert werden, was mit den EN4 Feldern durchgeführt wurde. Das Ergebnis ist ein biaskorrigiertes Produkt, mit abgeschätzten Restfehlern. Der mittlere Bias und die RMS Differenz ist dabei nicht so stark abgesunken, da die Daten in der Nähe der Kontinente und hohen geographischen Breiten wegen der dünnen Datenlage nicht sehr befriedigend korrigiert werden (siehe Abbildung 8).



Abbildung 8: Histogramm der globalen monatlichen Salzgehaltsdifferenzen der SMOS SSS, Rauigkeitsmodells 3 zu EN4 in situ Daten. Der mittlere Bias ist von -0.13 g/kg auf nahe Null reduziert, die RMS Differenzen des bias-behafteten und -korrigierten Produktes sind angegeben.

WP 3: Zusammenführen der SMOS Daten mit Aquarius SAC-D Daten

Die Annahmen in 2012 zur Bearbeitung dieses Arbeitspaketes waren, dass sich die SMOS L2 Daten seitens der ESA in ihrer Beeinträchtigung durch Landkontamination und RFI erheblich verbessern. Das ist bislang nicht so eingetreten wie erwartet. Sowohl die SMOS Daten wie auch die Aquarius Daten sind mit Fehlern behaftet, die ein sinnvolles gemeinsames Produkt noch nicht erlauben. Beide Datensätze werden dementsprechend von den Datenzentren auf Basis von Differenzen zu in situ Daten Bias-korrigiert. Diese Maßnahme ist nur ein Hilfsmittel, und muss nach jeder Reprozessierung erneut berechnet werden. Die grundlegenden Änderungen sollten jedoch in den Retrievals vorgenommen werden, was nicht Gegenstand dieses Projektes ist. Das Hauptziel des vorliegenden Projektes ist es, die Fehler zu charakterisieren und eventuelle Gründe dafür darzulegen.

Teilweise ergeben die Analysen der Salzgehaltsdifferenzen ähnliche Aussagen, welche Gründe für diese Differenzen verantwortlich sind. Zum Beispiel sind die Modelle für die atmosphärische Korrektur gleich und ergeben dann auch ähnliche Fehlerstrukturen. Unterschiede in den Modellen erlauben wiederum, ein Modell zu favorisieren, wie in WP1 für das Permittivitätsmodell geschehen.

WP 4: Abschätzung der Genauigkeit des resultierende SSS Datenproduktes

Die Analyse der Differenzen zwischen SMOS und in situ Salzgehaltsdaten hat ergeben, dass der Hauptfehler nicht in den angewandten Rauhigkeitsmodellen, sondern eher in den Modellen zur Korrektur der atmosphärischen und kosmischen Beeinflussung der Helligkeitstemperatur am oberen Rand der Atmosphäre liegen. Selbst die reflektierte Sonneneinstrahlung (sunglint) ist nicht hinreichend genug herauskorrigiert, um die SMOS Salzgehaltsdaten nicht zu stören. Eine weitere sehr dominante Fehlerquelle ist die Landkontamination, die 1000 km weit in den Ozean hinein die Salzgehaltsfelder stören.

Daher ist die Einschätzung der Güte der Rauhigkeitsmodelle noch nicht definitiv abgeschlossen. Das jeweilige Rauigkeitsmodell geht in der Salzgehaltsberechnung mehrfach ein, nicht nur in der Inversion aller Helligkeitstemperaturen, sondern auch bei der Korrektur der kosmischen und atmosphärischen Beeinflussung der Helligkeitstemperatur. Eine erneute Reprozessierung der L2 Daten ist von Seiten der ESL (expert salinity laboratories) bereits erfolgt, allerdings sind die Daten erst in 2016 verfügbar, sodass die neuesten Daten hier nicht einfließen konnten. Die Abschätzung der Fehlermatrix und die Synthese der Ergebnisse sind dementsprechend mit den Daten der Version 550 erfolgt.

Letztendlich ist für den veröffentlichten fehlerkorrigierten Datensatz das Modell S3 mit den geringsten verbleibenden Fehlern ausgewählt worden. Diese berechnen sich aus dem theoretischen Fehler der einzelnen SMOS L2 SSS retrievals auf dem ISEA Gitter, der sich als gewichteter Fehler in der Mittelung auf die 1 Grad Felder fortpflanzt ε , plus dem Bias-Korrektur Fehler, der sich aus der STD der Differenzen zwischen SMOS und in situ Salzgehalt berechnet σ .

$$Err = \sqrt{(\varepsilon^2 + \sigma^2)}$$

Die einzelnen Daten werden mit diesem Fehler invers gewichtet und auf monatliche 1°x1° Felder gemittelt. Der mittlere verbleibende Fehler der monatlichen Felder ist in Abbildung 9 dargestellt. Er ist an den Kontinentalrändern und in den hohen Breiten noch beträchtlich, allerdings werden die Unsicherheiten der EN4 in situ Daten als mindestens genauso groß erachtet (nicht dargestellt).



Abbildung 9: Der verbleibende mittlere Fehler der Bias-korrigierten monatlichen SMOS Daten (Version 550), vom Rauigkeitsmodell S3 [in g/kg].

Der Vergleich zu anderen in situ Salzgehaltsdaten, wie zu denjenigen der Thermosalinographen (Abbildung 10) und der SVP Drifter (Abbildung 11) zeigen Verbesserungen im mittleren Bias auf nahezu Null, während die RMS Werte besonders bei den Thermosalinographendaten verringert sind, weil viele der Daten nahe der Küste gewonnen werden, und dort die Verbesserung am deutlichsten ist.



Abbildung 10: Histogramm der Salzgehaltsdifferenzen der monatlichen SMOS SSS, Rauigkeitsmodells 3 vor (blau) und nach (rot) der Bias Korrektur zu Thermosalinographen Daten. Die RMS Differenzen des Bias-behafteten und -korrigierten Produktes sind angegeben.



Abbildung 11: Histogramm der Salzgehaltsdifferenzen der monatlichen SMOS SSS, Rauigkeitsmodells 3, vor (blau) und nach (rot) der Bias Korrektur, interpoliert auf den Tageswert zu täglichen Drifter Daten. Die RMS Differenzen des Bias-behafteten und -korrigierten Produktes sind angegeben.

WP 5: Umfassende Auswertung der Oberflächendrifterdaten zusammen mit SMOS und Aquarius SSS und Argo Daten hinsichtlich Niederschlag, Run-Off und Ozeanprozessen

Die Salzgehaltsvariabilität im südlichen tropisch/subtropischen Pazifik in der Aussetzregion der Drifter weist eine zwischenjährliche Komponente auf, die auch in Hasson et al. (2014) basierend auf den SMOS SSS und in situ Daten dargestellt wurde. Die Salzgehalte der Drifter zeigen diese Salzgehaltsvariabilität ebenfalls, jedoch sind die Anzahl und Lebensdauer der Drifter nicht geeignet, diese zwischenjährliche Strukturen zu erfassen. Dem gegenüber sind

die SMOS Daten in der Region um die Drifter herum auch nach der Reprozessierung (V550) durch den Einfluss der zahlreichen Inseln stark kontaminiert, sodass der direkte Vergleich zwischen den Driftersalzgehaltsdaten und den SMOS SSS immer noch erschwert ist. Weiterhin ist die Salzgehaltsvariabilität innerhalb des Mittelungsintervalls von SMOS (100 km) so groß, dass der Vergleich zwischen den Drifter- und SMOS SSS nicht genau genug gelingt (siehe Abbildung 12). Der lokale Niederschlag in der Nähe des Drifters verursacht eine Salzgehaltsanomalie von etwa 0.1 bis zu 0.4 g/kg innerhalb weniger Stunden, die sich im besten Fall einen Tag hält, diese Anomalie mittelt sich in einem Gitterpunkt von 100 km und einem Monat schnell heraus (Reverdin et al., 2012). Ein Beispiel, wie Regen durch Drifter erfasst wird, zeigt Abbildung 12. Die Regendaten stammen aus einem täglichen Datensatz des "Global Precipitation Climatology Project" (GPCP), das Daten von verschiedenen Satelliten in einem Datensatz zusammenfügt. Die Genauigkeit der Regendaten ist allerdings mit 10 bis 15 % angegeben. In dieser Region ist der Niederschlag meist nur sporadisch und hält nicht lange an, sodass ein nachhaltiger Effekt auf den SSS nicht abzulesen ist. Eine Korrelation zwischen den täglichen Regendaten und den Salzgehaltsabnahmen ist gering und nicht signifikant. Zu häufig ist dabei eine Salzgehaltsabnahme ohne Angabe von Niederschlag in den kombinierten Satelliten-messungen des GPCP. Ein Grund dafür mag die Qualität der Drifterdaten sein. In Abbildung 12 ist als Beispiel eine Zeitserie von Drifter No. 92798 gezeigt: die Salzgehaltsschwankungen ohne entsprechende Temperaturschwankungen oder ohne entsprechenden Niederschlag sind grün markiert, und rot diejenigen, die aufgrund von vertikalen Temperaturgradienten oder starker Tageserhitzung auftreten.



Abbildung 12: Salzgehalt (blau) gemessen von Drifter ID 92798 in den Jahren 2010 bis 2011, dabei werden unsichere Salzgehaltswerte rot und grün markiert. Gleichzeitige Niederschlagswerte von mehr als 1 mm/Stunde sind als schwarze Kreise markiert.

Bei Temperaturgradienten zwischen der obersten Messung der Drifter in 15 cm und der unteren Messung in 45 cm Tiefe, ist die Salzgehaltsberechnung aus der Leitfähigkeitszelle in 38 cm Tiefe schwierig. Die um einige Zehntel falsche Temperaturangabe kann den Salzgehalt um ähnliche Zehntel verfälschen. Da man den Temperaturgradienten aus 2 Angaben nur schätzen kann, sind Ableitungen auf den Salzgehaltsgradienten ohne weitere Prozessstudien nicht möglich. Andere Unsicherheiten in den Salzgehaltsdaten der Drifter treten auf, wenn sich biologischer Besatz oder Bewuchs in der Leitfähigkeitszelle befindet. Die Validierung der Drifterdaten wurde hier mit unabhängigen Salzgehaltsmessungen von Thermosalinographen auf Handelsschiffen (Voluntary operating Ships) und Argo Floats unternommen, wobei die Kollokation in Zeit und Raum auf +/- 5 Tage und +/- 100 km gesetzt wurde. Die Ergebnisse sind in Abbildung 13 dargestellt. Die mittleren Differenzen sind klein, aber die Variationen innerhalb der Kollokationsintervalle sind groß, sie drücken sich in der RMS Differenz als mittlere Unsicherheit aus. Sie beträgt in beiden Vergleichen 0.15 g/kg. Der zeitliche Verlauf der Differenzen (nicht dargestellt) zeigt keinen signifikanten Trend, sodass die RMS Differenz hier als maßgeblich für den Messfehler angesehen wird.



Abbildung 13: Vergleich der Salzgehaltsdaten von Oberflächendriftern zu denjenigen von Argo Profilern (links) und von Thermosalinographen auf Handelsschiffen (rechts) in einem Umkreis von +/- 100 km und einer Zeitspanne +/- 5 Tagen. Die Standardabweichungen während dieser Tage sind als Fehlerbalken angegeben. Die Argo Daten aus einer Distanz zu den Driftern von mehr als 80 km sind pink markiert. Mittlere Differenzen und RMS Differenzen sind angegeben.

Die Validierungsergebnisse dieser Drifteranalyse sind in Reverdin et al. (2014) enthalten. In letztgenannter Studie wurde ein Salzgehaltsversatz in den Drifterdaten teilweise nachträglich korrigiert, wenn es genügend unabhängige Salzgehaltsdaten in der Nähe gab. Im vorliegenden Datensatz ist keine Korrektur unternommen worden.

In Gegenden mit ausgeprägten Regenzeiten ist der Vergleich von SSS Schwankungen und Niederschlag deutlicher. Der direkte Vergleich zwischen monatlichen Regendaten des GPCP und den monatlichen Schwankungen im SSS von SMOS, gezeigt in Abbildung 14, ergab eine hohe Korrelation, nicht unbedingt an den Orten, an denen es am meisten regnet, wie z.B. im Westen des tropischen Pazifiks. Die ozeanischen Prozesse wie Advektion und Vermischung der atmosphärischen Frischwasserflüsse in eine unterschiedlich mächtige Oberflächenschicht bestimmen den lokalen Versatz und den Grad der Korrelation. Bei dieser Studie ist das Gebiet zwischen 5° S und 10 °S aufgefallen, welches wenig Regen, aber eine hohe Korrelation zeigt.

Die Untersuchungen der Region haben allerdings ein Phänomen gezeigt, welches das Zusammenspiel von atmosphärischen und Ozeanprozessen darlegt. In diesem Gebiet tritt jeden Februar bis Mai ein schmales Regenband in der sogenannten südlichen oder doppelten Intertropischen Konvergenzzone auf, welches den Salzgehalt lokal vermindert. Diese Frischwasseranomalie ist in den objektiv analysierten in situ Monatsfeldern nicht aufgefallen,

weil die Mittelungsskalen zu groß sind. Die Untersuchung der verantwortlichen Prozesse für die Entstehung und Auflösung der Anomalie ist in Sena Martins und Stammer (2015) veröffentlicht. Obwohl in diesem Gebiet die Oberflächenschicht dünn ist und nur schwache Strömungen und Winde vorherrschen, ist die Aufstellung eines Frischwasserbudgets mit großen Unsicherheiten verbunden. Es konnte trotzdem nachgewiesen werden, dass die Nettosumme aus Niederschlag und Verdunstung nur zum Teil für die Anomalie verantwortlich ist, zum gleichen Teil trägt der Frischwasserzustrom aus dem nordäquatorialen Frischwasserpool bei.



Abbildung 14: Korrelationskoeffizient zwischen den monatlichen Zeitserien des GPCP Niederschlags und SMOS SSS Anomalie von Januar 2010 bis Dezember 2013. Rote Konturen zeigen den mittleren monatlichen Niederschlag [cm/Monat] während der 4 Jahre.

Um die Auswirkungen von SMOS SSS Beobachtungen auf Modellschätzungen von SSS und Frischwasserflüsse zu untersuchen, wurde in einem Pilotversuch das GECCO2 Synthesesystem verwendet, um die SMOS SSS Beobachtungen zu assimilieren. Gleichzeitig assimiliert das Modell auch andere Beobachtungswerte, wie z.B. Argo Profildaten. Das SMOS SSS Fehlerfeld zeigt große Werte in der Nähe von Kontinenten und im Südlichen Ozean. Diese Fehlerabschätzung führt in dem Assimilationsverfahren nur zu einem unwesentlichen Einfluss von SMOS SSS auf den geschätzten Ozeanzustand. Wenn jedoch die Fehler künstlich um einen Faktor 10 verringert werden, können die SMOS SSS Werte im inneren Ozean gut reproduziert und der Modellbias reduziert werden. Der höhere Frischwassergehalt im Modell kann auf den Einfluss der SMOS Daten zurückzuführen. Die damit verbundene Erhöhung der Frischwassereintrags in den tropischen Ozeanen verbessert leicht die geschätzten Flüsse im Vergleich zu den unabhängigen satellitengestützten Schätzungen von HOAPS mit Ausnahme des Südpazifik und Südatlantik. Auf kurzen Zeitskalen sind die Änderungen in der geschätzten SSS vor allem das Ergebnis aus Veränderungen der Oberflächenfrischwasserflüsse, während über längere Zeiträume die Ozeandynamik für Änderungen im SSS zunehmend wichtiger ist. Dies sind Ergebnisse, die in Köhl et al. (2014) veröffentlicht wurden.

Literaturangaben

- Dinnat, E., J. Boutin, X. Yin, and D. Le Vine (2014), Inter-comparison of SMOS and Aquariussea surface salinity: Effects of the dielectric constant and vicarious calibration, in Microwave Radiometry and Remote Sensing of the Environment (MicroRad), 2014 13th Specialist Meeting on, pp. 55–60, doi:10.1109/MicroRad.2014.6878907.
- Dinnat, E. P., J. Boutin, G. Caudal, and J. Etcheto (2003), Issues concerning the sea emissivity modeling at L band for retrieving surface salinity, Radio Science, 38 (4), doi: 10.1029/2002RS002637, 8060.
- Dong, S., J. Sprintall, and S. T. Gille (2006), Location of the Antarctic polar front from AMSR-E satellite sea surface temperature measurements, J. Phys. Oceanogr., 36 (11), 2075– 2089,doi:http://dx.doi.org/10.1175/JPO2973.1, doi: 10.1175/JPO2973.1.
- Font, J., A. Camps, A. Borges, M. Martin-Neira, J. Boutin, N. Reul, Y. Kerr, A. Hahne, and S. Mecklenburg (2010), SMOS: The challenging sea surface salinity measurement from space, Proc. IEEE, 98 (5), 649–665, doi:10.1109/JPROC.2009.2033096.
- Good, S. A., M. J. Martin, and N. A. Rayner (2013), EN4: Quality controlled ocean temperature and salinity profiles and monthly objective analyses with uncertainty estimates, J. Geophys. Res. Oceans, 118 (12), 6704–6716, doi:10.1002/2013JC009067.
- Hasson, A., T. Delcroix, J. Boutin, R. Dussin, and J. Ballabrera-Poy (2014), Analyzing the 2010–2011 La Nina signature in the tropical Pacific sea surface salinity using in situ data, SMOS observations, and a numerical simulation, 119 (6), 3855–3867, doi: 10.1002/2013JC009388.
- Klein, L., and C. Swift (1977), An improved model for the dielectric constant of sea water at microwave frequencies, IEEE Trans. Antennas Propag., 25 (1), 104–111, doi:10.1109/TAP.1977.1141539.
- Köhl, A., M. Sena Martins, and D. Stammer (2014), Impact of assimilating surface salinity from SMOS on ocean circulation estimates, J. Geophys. Res. Oceans, 119 (8), 5449–5464, doi:10.1002/2014JC010040.
- Köhler, J., M. Sena Martins, N. Serra, and D. Stammer (2015), Quality assessment of spaceborne sea surface salinity observations over the northern North Atlantic, J. Geophys. Res.Oceans, 120 (1), 94–112, doi:10.1002/2014JC010067.
- Meissner, T., and F. Wentz (2004), The complex dielectric constant of pure and sea water frommicrowave satellite observations, IEEE Trans. Geosci. Remote Sens., 42 (9), 1836–1849, doi:10.1109/TGRS.2004.831888.
- Meissner, T., and F. Wentz (2012), The emissivity of the ocean surface between 6 and 90 GHzover a large range of wind speeds and earth incidence angles, IEEE Trans. Geosci. RemoteSens., 50 (8), 3004–3026, doi:10.1109/TGRS.2011.2179662.
- Reverdin, G., S. Morisset, J. Boutin, N. Martin, M. Sena-Martins, F. Gaillard, P. Blouch, J. Rolland, and J. Font (2014), Validation of salinity data from surface drifters, J. Atmos. Ocean Tech., 31 (4), 967–983, doi:10.1175/JTECH-D-13-00158.1.
- Oliva, R., et al. (2014), Status of RFI in the 1400–1427 MHz passive band: The SMOS perspective, in General Assembly and Scientific Symposium (URSI GASS), 2014 XXXIth URSI, pp. 1–4, doi:10.1109/URSIGASS.2014.6929667.
- Sena Martins, M., and D. Stammer (2015), Pacific Ocean surface freshwater variability underneath the double ITCZ as seen by satellite sea surface salinity retrievals, J. Geophys. Res.Oceans, 120 (8), 5870–5885, doi:10.1002/2015JC010895.
- Sena Martins, M., N. Serra, and D. Stammer (2015), Spatial and temporal scales of sea surface salinity variability in the Atlantic ocean, J. Geophys. Res. Oceans, 120 (6), 4306–4323, doi:10.1002/2014JC010649.

- Soldo, Y., A. Khazaal, F. Cabot, and Y. Kerr (2015), An RFI Index to quantify the contamination of SMOS data by radio-frequency interference, IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ., PP (99), 1–13, doi:10.1109/JSTARS.2015.2425542.
- Tian-Kunze, X., L. Kaleschke, and N. Maass (2013), SMOS daily sea ice thickness, Tech. rep., Uni-versity of Hamburg, Hamburg, Germany.

2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises,

Die für Personalausgaben beantragten und bewilligten Mittel wurden wie vorgesehen ausgegeben, und zwar zum größten Teil für die Beschäftigung der wissenschaftlichen Mitarbeiterin Frau M. Sena Martins, zum kleineren Teil für die Beschäftigung von studentischen Hilfskräften. Studentische Hilfskräfte sind nicht zahlreich verfügbar, sodass es zeitweise anderer Lösungen gab: Für 2 Monate wurde eine diplomierte Wissenschaftlerin halbtags angestellt und zeitweise gab es keine Unterstützung. Daher konnte das Projekt um 4 Monate kostenneutral verlängert werden. Dazu wurden die Gelder in den einzelnen Positionen umgewidmet. Die bewilligten Reisemittel wurden überwiegend zur Bekanntgabe der Ergebnisse auf wissenschaftlichen Konferenzen verwendet. Die wissenschaftliche Angestellte besuchte die regelmäßig stattfindende europäische internationale Geophysikalische Konferenz der EGU in 2013. Ein weiterer geplanter Besuch dieser Konferenz in 2014 musste aus Krankheitsgründen abgesagt werden. Auf dem von der ESA organisierten SMOS Scientific Workshop in Brest, Frankreich, präsentierte sie ihre eigenen Validierungsergebnisse und L3 Produkte und tauschte sich über die Ergebnisse aus. Auf diesen Treffen entstand z.B. die Zusammenarbeit zu einer der Publikationen (Reverdin et al., 2015) über die Validierung des Oberflächendriftersalzgehaltes mit der Arbeitsgruppe von Gilles Reverdin (LOCEAN, Univ. Paris).

Position	Ausgaben
0812	177.378,22€
0822	4.532,24 €
0831	0,00€
0843	0,00€
0846	2.385,87 €
0850	0,00€
Gesamt	184.296,33 €

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit,

Wie beantragt war eine wissenschaftliche, selbstständig arbeitende Kraft notwendig, um die beantragten Arbeiten zu bewerkstelligen. Aufgrund der 30 Stunden Teilzeitbeschäftigung wurde sie teilweise durch studentische Hilfswissenschaftlertätigkeiten ergänzt, welche Routine- und Programmierarbeiten umfassten. Insgesamt entsprach die geleistete Arbeit dem in dem Antrag angegebenen Arbeitsplan, um die Ziele des Forschungsvorhabens zu erlangen.

4. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere die Verwertbarkeit des Ergebnisses im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans

Ein Bias-korrigiertes L3 SMOS Salzgehaltsprodukt mit Angaben über die verbleibenden Fehler wurde erstellt und über den ICDC Server des Exzellenzclusters CLISAP der Allgemeinheit zugänglich gemacht (http://icdc.zmaw.de/ozean). Auch die Salzgehaltsdaten der Oberflächendrifter sind mit Angabe der Unsicherheiten und anderen geophysikalischen Parametern wie Niederschlag und Temperatur auf diesem Weg veröffentlicht.

Der Salzgehalt ist eine Grundlage zur Bestimmung der Dichte des Meerwassers, deren Verteilung für sämtliche physikalische Prozesse im Ozean die Basis darstellt. Bislang gibt es nur punktuelle Salzgehaltsmessungen: in Verankerungen über eine gewisse Zeitspanne mit hoher zeitlicher Auflösung, oder als Vermessungsschnitt in hoher räumlicher Auflösung. Das

Argo Float Programm mit den täglichen 3000 Profilen weltweit stellt bereits ein Erhöhung der Datendichte dar, liefert nur etwa 1-2 Salzgehaltsprofile monatlich in einem 1°x1° Gitter. Dieses ist unzureichend, um räumliche Strukturen im Oberflächensalzgehalt auf diesen Mittelungsskalen aufzulösen. Mit dem auf Satellitendaten gestützten Salzgehalt ergibt sich bei hinreichend kleiner Unsicherheit ein enormer Gewinn, was die räumliche und zeitliche Auflösung betrifft; insbesondere lassen sich im Zusammenhang mit ARGO Daten die SMOS Daten nutzen um raum-zeitlich zwischen den ARGO Messungen zu interpolieren. Diese innovativen Daten können daher in sämtliche Echtzeitsimulierungen der Ozeanzirkulation als Randbedingungen eingehen (bislang wird dazu auf klimatologische Daten zurückgegriffen), in Prozessstudien über den Austausch an der Grenzfläche Ozean/ Atmosphäre die Basis bilden (das ist ein Ziel der Satellite & In Situ Salinity (SISS) Working Group: Understanding Stratification and Sub-Footprint Processes, aufgestellt in dem letzten ESA Workshop, April 2013), und Daten liefern, die zur Analyse des ozeanweiten Frischwasserhaushaltes beitragen, wie es in einem von der DFG geförderten Forschungsgruppenvorhaben (FOR1740) geplant ist. Z.B. ist das erste im Vorgängerprojekt erstellte Salzgehaltsprodukt in die Synthese der miteingeflossen, um den Wert dieser zusätzlichen Information für die Schätzung des Ozeanzustandes zu bestimmen (Köhl et al., 2014).

5. Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Durch die Mitgliedschaft in der COST Action SMOS besteht ein reger Austausch von Ergebnissen auf internationaler Ebene. Bei diesem werden die Ergebnisse aus der Validierung der Satellitengestützten Daten mit Hilfe der in situ Daten miteinander verglichen und Verbesserungen für die Retrievalalgorithmen diskutiert. Hierbei besonders wichtige Fortschritte sind die Reprozessierungen der Daten und Veränderungen der Salzgehaltsprozessoren durch die Firma Argans. Die einzelnen Schritte der Verbesserung der Algorithmen sind in den Technical Notes und Veröffentlichungen und Präsentationen auf der SMOS Projektseite von Argans (http://www.argans.co.uk/smos/) einsehbar und werden auf den Konferenzen bekannt gemacht.

- 6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse
- Köhl, A., M. Sena Martins, and D. Stammer (2014), Impact of assimilating surface salinity from SMOS on ocean circulation estimates, J. Geophys. Res. Oceans, 119 (8), 5449– 5464,doi:10.1002/2014JC010040.
- Köhler, J., M. Sena Martins, N. Serra, and D. Stammer (2015), Quality assessment of spaceborne sea surface salinity observations over the northern North Atlantic, J. Geophys. Res.Oceans, 120 (1), 94–112, doi:10.1002/2014JC010067.
- Reverdin, G., S. Morisset, J. Boutin, N. Martin, M. Sena-Martins, F. Gaillard, P. Blouch, J. Rolland, and J. Font (2014), Validation of salinity data from surface drifters, J. Atmos. Ocean Tech., 31 (4), 967–983, doi:10.1175/JTECH-D-13-00158.1.
- Sena Martins, M., and D. Stammer (2015), Pacific Ocean surface freshwater variability underneath the double ITCZ as seen by satellite sea surface salinity retrievals, J. Geophys. Res.Oceans, 120 (8), 5870–5885, doi:10.1002/2015JC010895.
- Sena Martins, M., N. Serra, and D. Stammer (2015), Spatial and temporal scales of sea surface salinity variability in the Atlantic Ocean, J. Geophys. Res. Oceans, 120 (6), 4306–4323, doi:10.1002/2014JC010649.

III. SMOS Erfolgskontrollbericht

1 Beitrag zu förderpolitischen Zielen

Keine Angaben

2 Ergebnisse

In diesem Projekt wurden die reprozessierten Salzgehaltsbestimmungen aus Satellitenmessungen benutzt und auf der Grundlage von in situ Daten validiert. Diese Arbeiten waren Grundvoraussetzungen dafür, dass die weiterhin mit großen Unsicherheiten versehenen regulären ESA SMOS Produkte nach Verbesserung für wissenschaftliche Arbeiten genutzt werden konnten. Der Einfluss von atmosphärischen oder geophysikalischen Effekten auf die resultierende Differenzen im Salzgehalt zwischen SMOS-Retrievals und in situ Messungen wurden untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass das zugrunde liegende Permittivitätsmodell, um aus der Emissivität die Helligkeitstemperatur zu berechnen im Temperaturbereich unter 4° C nachgebessert werden muss. Die Abhängigkeiten der Fehler von Wind, Temperatur und Distanz zur Küste sind unterschiedlich für die auf- und absteigenden Half Orbits, und mischen sich in ihren Effekten, sodass eine funktionale Korrektur nicht angewandt wurde, sondern ein empirische Korrektur zu einem Bias-korrigierten Produkt geführt hat.

Der Vergleich mit Monatsfeldern von SMOS und in situ SSS Daten zeigt global eine RMS Differenz von 0.5, aber regional bessere Werte von 0.3 g/kg. Die Studie der Salzgehaltsvariabilität innerhalb der Mittelungsradien zeigt einen regional unterschiedlichen "sampling" Fehler von etwa 0.2, sodass dieser als untere Genauigkeitsgrenze angegeben werden kann, bis zu der die Validation der SMOS SSS Werte möglich ist.

Außerdem wurden SMOS Daten in einer Pilotstudie in ein Ozeanmodel assimiliert, um den Wert der neuartigen Beobachtungen zur Bestimmung des Oberflächenflusses von Frischwasser (netto Niederschlag) zu belegen. Der Gewinn der SMOS Daten für die Genauigkeit der Ozeansimulation ist insbesondere dort groß, wo große Frischwassereinträge existieren (z. B. durch Flüsse). Die Genauigkeit der SMOS Salzgehalte entspricht noch nicht den ursprünglich vorhergesagten Genauigkeiten aufgrund von Unzulänglichkeiten der Modelle hauptsächlich im Level 1. Einige davon sind während der ersten beiden Jahre verbessert worden. Trotz der Unsicherheiten von etwa 0.35 im offenen Ozean sind die Salzgehalte bereits -wenn auch eingeschränkt- nutzbar, da die Variabilität der Salzgehalte in einigen Regionen de facto höher ist, und man dort bereits Aussagen über die Variabilität sagen kann.

Ein neues, bislang noch wenig beschriebenes Phänomen einer Salzgehaltsanomalie im südöstlichen tropischen Pazifik wurde mit Hilfe der SMOS SSS Felder entdeckt und die Prozesse zur ihrer Entstehung identifiziert.

3 Verwertung

Ergebnis des Projektes ist ein Bias korrigiertes L3 Produkt mit Angaben von Fehlergrößen der monatlichen Salzgehaltsfelder, ein weiterer Salzgehaltsdatensatz auf Basis der Oberflächendrifter wurde veröffentlicht. Außerdem sind 5 Studien in renommierten begutachteten Fachzeitschriften veröffentlicht worden.

Ein Anschlussprojekt mit wissenschaftlichen Arbeiten basierend auf den neuen Bias korrigierten Daten wurde beantragt und positiv bewertet. Des Weiteren arbeitet die DFG Forschergruppe mit den SMOS SSS Daten mit dem Ziel, Salzgehaltsänderungen im Atlantik zu analysieren.

Erfindungen/Schutzrechtsanmeldungen

Wir reichen keine Schutzrechtsanmeldung ein.

• Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende (mit Zeithorizont) - u.a. wie die geplanten Ergebnisse in anderer Weise (z.B. für öffentliche Aufgaben, Datenbanken, Netzwerke, Transferstellen etc.) genutzt werden können. Dabei ist auch eine etwaige Zusammenarbeit mit anderen Einrichtungen, Firmen, Netzwerken, Forschungsstellen u.a. einzubeziehen,

Die auf dem ICDC Datenserver veröffentlichten Daten können von anderen Stellen, insbesondere der DFG Forschergruppe und der HOAPS Gruppe in dem Max Planck Institut für Meteorologie (MPI Met) Hamburg genutzt werden.

4 Arbeiten, die zu keiner Lösung geführt haben

Die satellitengestützten Salzgehaltsdaten von SMOS wie auch von Aquarius sind beide mit Fehlern behaftet, deren Gründe unterschiedlich sind, daher muss ein aus den beiden Datenquellen kombiniertes Produkt noch auf die überwiegend fehlerfreien L2 Daten warten.

5 Präsentationsmöglichkeiten für mögliche Nutzer

Keine Angaben.

6 Einhaltung des Finanzierungsplans und des Zeitplans

Die für Personalausgaben bewilligten Mittel wurden wie vorgesehen ausgegeben, und zwar zum größten Teil für die Beschäftigung der wissenschaftlichen Mitarbeiterin Frau M. Sena Martins, zum kleineren Teil für die Beschäftigung von studentischen Hilfskräften. Studentische Hilfskräfte sind nicht zahlreich verfügbar, sodass es zeitweise andere Lösungen gab: Für 2 Monate wurde eine diplomierte Wissenschaftlerin halbtags angestellt und zeitweise gab es keine Unterstützung. Daher konnte das Projekt um 4 Monate kostenneutral verlängert werden. Dazu wurden die Gelder in den einzelnen Positionen umgewidmet.