

Förderkennzeichen 01 LA 9808/9

Entwicklung eines inversen, hochauflösenden globalen numerischen Simulationsmodells zur Überprüfung der Reduktion nationaler Emissionen von klimarelevanten Spurenstoffen

Martin Heimann, Thomas Kaminski, Sander Houweling

Max-Planck-Institut für Meteorologie, Bundesstr.55, D-20146 Hamburg

Max-Planck-Institut für Biogeochemie, Carl-Zeiss-Promenade 10, Postfach 100164, D-07701 Jena

Projektlaufzeit: 1.7.1998- 31.3.2001

Schlussbericht
Oktober 2001

1 Inhalt

1	Inhalt.....	2
2	Kurzdarstellung.....	3
2.1	Aufgabenstellung.....	3
2.2	Voraussetzungen.....	3
2.3	Planung und Ablauf des Vorhabens	4
2.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand.....	4
2.5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	5
3	Erzielte Ergebnisse.....	6
3.1	Zur Methodik.....	6
3.1.1	Allgemeines.....	6
3.1.2	Berechnung der Basisfunktionen mit Hilfe des adjungierten Modells von TM2.....	7
3.1.3	Lösung des Inversionsproblems, Bayes'scher Ansatz.....	8
3.2	Fallstudien.....	8
3.2.1	Ermittlung der globalen raumzeitlichen Quellenstärken des CO ₂	8
3.2.2	Ermittlung der globalen raumzeitlichen CH ₄ Emissionen	13
3.2.3	Ermittlung der globalen raumzeitlichen CO Emissionen.....	13
3.3	Theoretische Untersuchungen zum Inversionsproblem.....	13
3.3.1	Das Problem der <i>a priori</i> Kovarianz der Quellenunsicherheiten	13
3.3.2	Verwendung eines prozessorientierten Quellenmodells mit unbekannten Parametern	14
3.3.3	Vorteil der hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung.....	15
3.3.4	Atmosphärische Beobachtungsdaten	16
3.3.5	TRANSCOM3: Ein Vergleich verschiedener Inversionsmodelle und Verfahren.....	17
4	Ausblick.....	18
5	Im Rahmen des Projektes erstellte Publikationen (Anlagen)	19
6	Zitierte Literatur	21

2 Kurzdarstellung

2.1 Aufgabenstellung

1. Entwicklung eines inversen, hochauflösenden globalen numerischen Simulationsmodells des atmosphärischen Transportes.
2. Bestimmung von raum-zeitlichen Quellenmuster einiger klimarelevanter Spurengase aus atmosphärischen Konzentrationsmessungen mit Hilfe des inversen Modells (Kohlendioxid, Methan, Kohlenmonoxid).
3. Theoretische Untersuchungen zum Inversionsproblem in Hinblick auf den Einsatz des Modells zur Bestimmung und Überprüfung nationaler Reduktionsziele für den Ausstoß von langlebigen, klimarelevanten Spurenstoffen (Kohlendioxid, Methan, Kohlenmonoxid, Distickoxid oder FCKW).

2.2 Voraussetzungen

Unter dem Protokoll von Kyoto und den nachfolgenden Klimakonferenzen sind Reduktionsziele über nationale und supranationale Emissionen klimarelevanter Spurenstoffe (CO₂, CH₄, N₂O, FCKW, u.a.) vereinbart worden. Insbesondere die Möglichkeit, natürliche Kohlenstoffsenken in terrestrischen Ökosystemen unter gewissen Voraussetzungen mit den nationalen Emissionsbilanzen von CO₂ zu verrechnen, erfordert von der Wissenschaft die Bereitstellung von Verfahren zur unabhängigen Überprüfung der aus nationalen Statistiken ermittelten „bottom-up“ Emissionswerte.

Ein unabhängiges Verfahren zur quantitativen Bestimmung der raumzeitlichen Emissionsmuster an der Erdoberfläche besteht darin, diese aus präzisen atmosphärischen Konzentrationsmessungen unter Beizug eines Modells des atmosphärischen Transportes mit Hilfe von mathematischen Inversionsmethoden zu ermitteln („top-down“ Ansatz). Zum Zeitpunkt der Antragstellung des Projektes existierten nur wenige Untersuchungen mit dieser Methode. Ein wesentlicher Nachteil dieser Studien war deren sehr grobe räumliche Auflösung der Quellenverteilung (z.B. Enting et al., 1995, Fan et al. 1998). Das Potential dieses Verfahrens war an sich schon länger erkannt; allein die geringe Anzahl der global verteilten Stationen mit genügend genauen Messungen erlaubte nur sehr summarische Inversionsrechnungen (z.B. für das CO₂: Heimann et al., 1986, Keeling et al., 1989, Tans et al., 1990). Erst in den 1990'er Jahren entwickelte sich der Aufbau der globalen Messnetze in einer Weise, die regionale Inversionsrechnungen in die Möglichkeit rückten.

Ziel des Projektes bestand darin, dieses top-down Verfahren wesentlich zu erweitern:

- (1) durch Verbesserung der Darstellung des atmosphärischen Transportes,
- (2) durch Entwicklung einer hocheffizienten numerischen Ermittlung der für Inversionsrechnungen notwendigen Basisfunktionen und
- (3) durch exemplarische Untersuchungen zur mathematischen Natur des Inversionsproblems.

2.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Vorhaben wurde vom Hamburger Max-Planck-Institut für Meteorologie 1997 beantragt und, durch den Umzug des Hauptantragstellers an das neu gegründete Max-Planck-Institut für Biogeochemie in Jena, anschließend in Zusammenarbeit an den beiden Instituten im Zeitraum 1.7.1998-31.3.2001 durchgeführt. Auf dem Projekt wurden 2 Postdoktoranden beschäftigt: Dr. Thomas Kaminski (bis 30.6.2000) und anschließend bis zum Ende des Projekts Dr. Sander Houweling.

Im Rahmen des Projektzeitraums wurden der Reihe nach die folgenden Arbeitsschritte und Untersuchungen durchgeführt:

1. Verbesserung des 3-dimensionalen atmosphärischen Transportmodells TM2/TM3 mit neuen aufbereiteten meteorologischen Antriebsdaten.
2. Entwicklung des adjungierten Modells zu TM2 zur effizienten Berechnung der Basisfunktionen.
3. Berechnung der Basisfunktionen für eine globale räumliche Auflösung von $8^{\circ} \times 10^{\circ}$ und $4^{\circ} \times 5^{\circ}$ (geogr. Breite x geogr. Länge) und eine zeitliche Auflösung von 1 Monat.
4. Bereitstellung und Aufbereitung der atmosphärischen Messdaten der Konzentration von CO_2 , CH_4 , und CO von weltweit verteilten Reinluftstationen.
5. Bereitstellung der „*a priori*“ Quellen- und Senkeninformation (Quellstärken und Unsicherheiten) für die verschiedenen Spurenstoffe auf dem globalen Modellraster mit monatlicher Auflösung.
6. Exemplarische Inversionsstudien CO_2 , CH_4 , und CO.
7. Theoretische Untersuchungen zum Inversionsproblem.

2.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

1. Transportmodell, meteorologische Antriebsdaten.

Für die Arbeiten konnte auf das am MPI für Meteorologie entwickelte Transportmodell TM2 (Heimann, 1995) und dessen Nachfolger TM3 mit verbessertem Konvektions- und numerischem Schema zurückgegriffen werden. Der modellierte atmosphärische Transport wurde Beizug von neuen meteorologischen Antriebsdaten (Reanalysen) vom Europäischen Zentrum für Mittelfrist-Wettervorhersage (ECMWF) und vom amerikanischen Wetterdienst (NCEP-Reanalysen) für die Jahre 1979-1993 (ECMWF) und 1955-2000 (NCEP) verbessert.

2. Adjungiertes Modell zu TM3.

Zur Entwicklung des adjungierten Modells zu TM3 konnte auf den am Hamburger MPI entwickelte Tangent and Adjoint Model Compiler (TAMC, Giering, 1996) zurückgegriffen werden.

3. Atmosphärische Beobachtungsdaten

Für die atmosphärischen Beobachtungen konnten Messungen der amerikanischen des amerikanischen Climate Monitoring and Diagnostic Laboratory der National Oceanographic and Atmospheric Administration (NOAA-CMDL) in Boulder, Colorado, verwendet werden.

4. *A priori* Quelleninformation

Die für die Inversionsrechnungen notwendigen Informationen über die *a priori* Quellen und Senken an der Erdoberfläche wurden aus Emissionsstatistiken und aus Simulationsmodellrechnungen des MPI für Meteorologie (u.a. Ozeanische Austauschflüsse) auf dem Modellgitter bereitgestellt.

Die Simulationsrechnungen wurden auf den Rechenanlagen des Deutschen Klimarechenzentrums (DKRZ) in Hamburg, auf dem Hausrechner des MPI für Biogeochemie in Jena und auf den Rechenanlagen der GWDG in Göttingen durchgeführt.

2.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Das Projekt wurde in Zusammenarbeit zwischen den Max-Planck-Instituten für Biogeochemie in Jena und für Meteorologie in Hamburg durchgeführt.

Eine enge thematische Zusammenarbeit ergab sich mit:

Universität Utrecht/NL (IMAU, Prof. J. Lelieveld): Inverse Modellierung des Methans (Houweling et al., 1999).

CSIRO Dep. of Atmospheric Research, Aspendale, Australia (Dr. P. Rayner): Theoretische Untersuchungen zum Inversionsproblem (Kaminski et al., 2001, Rayner et al., 2001).

3 Erzielte Ergebnisse

Die Ergebnisse der einzelnen Arbeitsschritte und Untersuchungen im Rahmen dieses Projektes sind in den beigefügten 14 Veröffentlichungen ausführlich dargestellt. An dieser Stelle findet sich eine Übersicht über die durchgeführten Untersuchungen und eine kurze Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse.

3.1 Zur Methodik

3.1.1 Allgemeines (Anlage 1)

Das Prinzip der inversen Modellierung zur Ermittlung von Quellstärken an der Erdoberfläche aus Beobachtungen der atmosphärischen Konzentration von Spurenstoffen ist in Heimann und Kaminski (1999, Anlage 1) ausführlich beschrieben. In der folgenden Darstellung wird der Begriff „Quelle“ stellvertretend für Quellen und Senken eines Spurenstoffes benutzt: Eine positive Quelle bezeichnet dabei eine Emission in die Atmosphäre, eine negative Quelle bezeichnet eine Spurenstoffsenke.

Da der atmosphärische Transport von chemisch inerten Spurenstoffen linear ist (oder, im Falle langlebiger Spurenstoffe wie CH_4 und CO linearisiert werden kann), lassen sich die an den Stationen beobachteten Konzentrationssignale mathematisch als eine lineare Superposition von verschiedenen Basisfunktionen darstellen, welche den Raum der Quellen räumlich und zeitlich aufspannen. In dem hier benutzten Verfahren der inversen Modellierung wird dieser Umstand benutzt indem die numerischen Skalierungsfaktoren der Basisfunktionen bestimmt werden, mit welchen die atmosphärischen Beobachtungsdaten optimal dargestellt werden.

Dieser Ansatz lässt sich formal als ein lineares Gleichungssystem darstellen, in welchem als Unbekannte die Quellstärken $\mathbf{q}|$ erscheinen:

$$(1) \quad \mathbf{c}| = \mathbf{M} \cdot \mathbf{q}|$$

Hier bezeichne $\mathbf{c}|$ den Vektor der Beobachtungen (an allen Stationen und zu allen Zeitpunkten). Die Spalten der Matrix \mathbf{M} enthalten die Information wie die Basisfunktionen auf die Beobachtungen abgebildet werden.

In einem ersten Schritt wird daher der Quellenraum in Basisfunktionen zerlegt. Im zweiten Schritt werden mit Hilfe eines atmosphärischen Transportmodells die einzelnen Basisfunktionen durch Simulation der Ausbreitung einer Einheitsquelle für jede Basisfunktion berechnet (i.e. Berechnung der Matrix \mathbf{M}). Im dritten Schritt werden die Gewichte der Basisfunktionen (d.h. die Quellstärken der einzelnen raumzeitlichen Quellenregionen) durch Vergleich mit den Beobachtungsdaten ermittelt. Mathematisch gesehen handelt es sich hierbei um ein lineares Regressionsproblem.

Da in den meisten Fällen das Inversionsproblem hoch unterbestimmt ist (s. unten), existieren im allgemeinen sehr viele Lösungen, welche die atmosphärischen Daten vergleichbar gut wiedergeben. Es müssen daher weitere Informationen (z.B. Annahmen über *a priori* Quellstärken und deren Unsicherheiten) über die Quellen beigezogen werden, um eine sinnvolle Lösung zu erhalten. Alternativ kann das Inversionsproblem durch Restriktion auf wenige, grobe Basisfunktionen regularisiert werden.

Im vorliegenden Projekt wurde der Raum der Basisfunktionen bewusst sehr groß gewählt, um potentiell eine sehr hohe räumliche und zeitliche Auflösung der zu schätzenden Quellen zu erreichen. Um dabei die Unterbestimmtheit des Problems zu umgehen wurde ein Bayes'scher Ansatz verfolgt. Dabei wurde aus Emissionsstatistiken und unter Beizug von Simulationsergebnissen mit prozessorientierten Modellen *a priori* Quellenfelder und deren geschätzten Unsicherheiten auf dem Modellgitter bereitgestellt. Diese *a priori* Felder werden dann in der Inversionsrechnung derart modifiziert so dass sie gleichzeitig sowohl die atmosphärischen Beobachtungsdaten als auch die *a priori* Quellenfelder innerhalb der vorgegebenen Unsicherheiten optimal wiedergeben. Formal wird \mathbf{q} und \mathbf{c} so bestimmt, dass die Kostenfunktion S^2 minimiert wird:

$$(2) \quad S^2 = (\mathbf{c} - \mathbf{c}_0)^T \mathbf{C}_{\text{obs}} (\mathbf{c} - \mathbf{c}_0) + (\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)^T \mathbf{C}_q (\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)$$

\mathbf{C}_{obs} und \mathbf{C}_q bezeichnen die *a priori* Kovarianzmatrizen der Beobachtungen (d.h. im wesentlichen die Messfehler) und der Quellen (d.h. die Unsicherheiten der *a priori* Quellstärken).

Das Verfahren liefert neben der optimalen *a posteriori* Quellstärkenverteilung ebenfalls die *a posteriori* Kovarianzmatrix der Unsicherheiten der ermittelten Quellen. Diese enthält die entscheidenden Informationen über die Unsicherheiten der ermittelten Lösung. Durch Vergleich mit den vorgegebenen *a priori* Unsicherheiten der Quellstärken lässt sich daraus direkt der Informationsgehalt der atmosphärischen Daten bestimmen.

3.1.2 Berechnung der Basisfunktionen mit Hilfe des adjungierten Modells von TM2

Grundsätzlich lassen sich die einzelnen Basisfunktionen direkt mit dem TM2 Modell durch Vorwärtssimulation ermitteln. Dies ist das normalerweise benutzte Verfahren (z.B. Enting et al., 1995). Der Rechenaufwand ist in diesem Falle proportional der spezifizierten Anzahl Basisfunktionen. Bei der immer noch relativ groben räumlichen Auflösung von einem globalen Raster von 8° Breite x 10° Länge und einer zeitlichen Auflösung von einem Monat sind ergeben sich für die Inversion der Quellen eines einzelnen Jahres bereits $36 \times 24 \times 12 \approx 10^5$ Basisfunktionen. Für die Inversion der Beobachtungen mehrere Jahre, sowie für die mit dem Transportmodell angestrebte räumliche Auflösung von $4^\circ \times 5^\circ$ ergeben sich prohibitive Rechenzeiten. In den hier interessierenden Spurenstoffen existieren jedoch nur eine begrenzte Anzahl von ~ 100 weltweit verteilten Messstationen. Da nur die Response der Basisfunktionen an den Messstationen in die Inversionsrechnung einfließt, lässt sich die Basisfunktionsberechnung wesentlich effizienter gestalten, indem das zu TM3 adjungierte Modell verwendet wird. In diesem wird gleichsam von den Messpunkten rückwärts zu den Quellen gerechnet. Dabei ist der Rechenaufwand nur ungefähr proportional der Anzahl Messwerte. Bei 100 Stationen mit monatlichen Daten ergeben sich damit nur 1200 Simulationen mit dem adjungierten Modell, unabhängig von der Auflösung der Quellen; im Vergleich zu den $1-5 \cdot 10^5$ Basisfunktionsberechnungen die durch direkte Vorwärtssimulation notwendig wären.

Um mit dem adjungierten Verfahren die Basisfunktionen zu berechnen, musste zuerst der zu TM2 adjungierte Modellcode entwickelt werden. Hier konnte auf den am MPI für Meteorologie in Hamburg entwickelte Tangent Linear and Adjoint Model Compiler (TAMC) zurückgegriffen werden (Giering und Kaminski, 1998). Dieses Softwaretool erzeugt den adjungierten Code zu einem vorgegebenen FORTRAN-Modellcode weitgehend automatisch. Der FORTRAN-Modellcode wird dabei formal als eine mehrdimensionale Funktion angesehen, für welche die partiellen Ableitungen nach Eingangsparametern berechnet werden sollen. Diese Jacobimatrix enthält im linearen Fall als Matrixelemente die gesuchten Werte der Basisfunktionen zu Ort und Zeit der Beobachtungen. Konzeptuell wird im TAMC jede

FORTRAN-Zeile als eine einzelne Abbildung zwischen den Modellvariablen betrachtet, welche durch den Modellcode verkettet sind. Durch die Anwendung der Kettenregel der Differenzialrechnung lässt sich die Jacobimatrix dann aus den elementaren Ableitungsmatrizen der einzelnen FORTRAN-Zeilen durch Multiplikation berechnen. Die Rechnungsrichtung kann dabei je nach Problem vorwärts oder rückwärts gewählt werden. In vorliegenden Falle von mehr Modellparameter (d.h. unbekanntem Quellenstärken) als Raumzeitpunkte der Beobachtungen wurde die Rückwärtsrechnung gewählt. Details des TAMC und dessen Anwendung auf das TM2 Transportmodell finden sich in Vossbeck et al., 2001 (Anlage 12).

3.1.3 Lösung des Inversionsproblems, Bayes'scher Ansatz

Wie oben bereits erwähnt, wurde im verfolgten Ansatz eine sehr große Anzahl der zu bestimmenden raumzeitlichen Quellenkomponenten gewählt um eine hohe räumliche und zeitliche Auflösung der zu bestimmenden Quellenfeldern zu erzielen. Im Standardfall wurde das globale TM2 Modellraster von 8° Breite x 10° Länge und eine zeitliche Auflösung von einem Monat für die Quellen gewählt. Dies entspricht einer Auflösung von 24x36 Elementen pro Monat. Für quasistationäre Inversionen (s. unten) sind 12 Monate zu berechnen, entsprechend einer totalen Anzahl von $\sim 10^5$ unbekanntem Quellenstärken. Im interannual zeitabhängigen Fall entspricht die Anzahl Unbekannte der Länge des Zeitraums, der invertiert wird (bei 10 Jahren $\sim 10^6$). Eine höhere Auflösung konnte wegen der zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten am DKRZ und bei der GWDG in Göttingen erst zu Ende des Projektzeitraums für einzelne Testläufe erzielt werden. Andererseits existieren auf der Beobachtungsseite für die hier betrachteten atmosphärischen Gase nur Beobachtungen an bis zu 100 weltweit verteilten Stationen. Eine höhere Auflösung ließe sich daher nur unter Beizug weiterer *a priori* Daten (z.B. von Satelliten) erzielen.

Auch im Standardfall ist das zu lösende Gleichungssystem hoch unterbestimmt. Der verfolgte Bayes'sche Ansatz (s.oben) verlangt die Bereitstellung von *a priori* Quellenfeldern und deren Unsicherheiten um eine sinnvolle Lösung zu erhalten. Diese wird durch Minimierung der Kostenfunktion (s. Gleichung (2)) ermittelt. Die gewählte quadratische Form der Kostenfunktion bedeutet, dass die optimalen Quellstärken durch relativ einfache Matrizenoperationen ermittelt werden können (s. Anlage 13). Die Größe der Matrizen ist jedoch enorm: im Standardfall enthalten sie $\sim 10^5 \times 10^5$ Elemente.

3.2 Fallstudien

3.2.1 Ermittlung der globalen raumzeitlichen Quellenstärken des CO₂

In einer Fallstudie (Anlagen 4, 5) wurde das inverse Modellsystem benutzt, um die Quellstärken des atmosphärischen CO₂ für mehrere Beobachtungszeiträume zu ermitteln. Dabei wurde der quasistationäre Ansatz gewählt, d.h. es wurde angenommen, dass die Quellstärken zwar innerhalb des Jahres variieren, jedoch von Jahr zu Jahr sich nicht verändern. Dieser Ansatz ist in der Literatur weit verbreitet, da er die raumzeitliche „Geschichte“ der Quellen vernachlässigt und damit wesentlich kleinere Inversionsmatrizen benötigt. Da die charakteristische Durchmischungszeit der globalen Troposphäre etwa ein Jahr beträgt, sind die Konzentrationenmuster eines bestimmten Beobachtungsjahres vorwiegend durch die Quellen aus den vergangenen 12 Monaten bestimmt. Weiter zurückliegende Quellenpulse haben sich nach 12 Monaten weitgehend ausgeglichen und werden im quasistationären Ansatz nur durch einen globalen Konzentrationsoffset berücksichtigt.

Die in der Inversion benutzten *a priori* Quellenfelder und deren Unsicherheiten sind in Tabelle 1 dargestellt. Als atmosphärische Daten konnten die CO₂ Messungen von NOAA-CMDL (Climate Monitoring and Diagnostic Laboratory der amerikanischen National Oceanographic and Atmospheric Administration in Boulder, Conway und Tans, 1999) verwendet werden.

Tabelle 1. *A priori* Quelleninformation für die CO₂-Inversionsstudie von Kaminski et al., 1999 (Anlage 5).

CO ₂ - Quelle	<i>A priori</i> Quelleninformation	Angenommene Unsicherheiten und Kovarianzstruktur
Verbrennung fossiler Brennstoffe	Aus Energieverbrauch (Kohle, Öl und Gas) abgeleitete Emissionsstatistiken aus (Andres et al., 1999)	6%; global korreliert. unter der Annahme, dass die Fehler vorwiegend systematischer Natur sind (z.B. Unsicherheiten der spezifischen Emissionsfaktoren)
Austausch mit dem Ozean	Monatliche globale Felder aus Modellsimulation mit HAMOCC3 (Six und Maier-Reimer, 1996)	Uniform: 100% des maximalen Wertes; unkorreliert.
Emissionen durch Änderungen der Landnutzung (z.B. Brandrodungen in den Tropen)	Statistiken der Landnutzung, Abschätzung der Emissionen (Houghton et al., 1987)	100%; global korreliert
Austausch mit der natürlichen Landbiosphäre	Monatliche Felder der Nettoprimärproduktion und der heterotrophen Respiration aus der SDBM Modellsimulation (Knorr und Heimann, 1995)	50%; unkorreliert.

Die Rechnung ergibt für die natürlichen Ökosysteme Eurasiens für den Zeitraum 1988-1992 eine größere CO₂-Senkenstärke ($-0.71 \pm 0.26 \text{ GtC a}^{-1}$) als für Nordamerika ($-0.12 \pm 0.20 \text{ GtC a}^{-1}$) (s. Tabelle 2) und widerlegt damit eine publizierte Arbeit einer amerikanischen Arbeitsgruppe (Fan et al. 1998). Dieses Ergebnis beruht essenziell auf dem hier verwendeten, wesentlich verbesserten mathematischen Verfahren mit höherer räumlicher und zeitlicher Auflösung als in der amerikanischen Studie.

Abbildung 1 zeigt das ermittelte, jahreszeitlich gemittelte Muster der nicht-fossilen CO₂ Quellen für 2 verschiedene Zeiträume, sowie die Differenz. Der Zeitraum 1990-93 war durch relativ kühle Sommer in den gemäßigten Breiten der Nordhemisphäre geprägt. Dies widerspiegelte sich in einem relativ geringen atmosphärischen Anstieg der CO₂ Konzentration in diesem Zeitraum. Die Inversionsrechnung zeigt, dass 1990-93 besonders im Osten Nordamerikas, aber auch in Europa und Sibirien eine anomale CO₂-Senke bestand, während die arktischen Regionen (vor allem Alaska) eine CO₂-Quelle darstellten.

Der Ansatz der Quasistationarität erlaubt es nicht, interannuale Variationen der Quellen zu ermitteln. Da diese jedoch von besonderem Interesse sind (z.B. klimainduzierte Variationen durch El Niño Anomalien), wurde das inverse Modellsystem im letzten Teil des Projektes erweitert um interannuale zeitabhängige Quellstärken zu ermitteln. Der Aufwand der Inversionsrechnung bezüglich Speicherplatz und Rechnerleistung nimmt dabei mit der Anzahl der invertierten Beobachtungsjahre und der Anzahl betrachteter Stationen zu. Gegen Ende des

Projektes konnten erstmals Inversionen über den gesamten Zeitraum 1988-1998 zeitabhängig durchgeführt werden; gleichzeitig wurde auch der zeitlich variierende atmosphärische Transport mitberücksichtigt (Rödenbeck et al., 2001, Houweling et al., 2001, Anlagen 10 und 11). Abbildung 2 zeigt als Beispiel die zeitliche Entwicklung der nicht-fossilen CO₂-Quellen in Nordamerika und Eurasien.

Tabelle 2: CO₂-Bilanz ausgewählter Länder und Regionen 1988-1992 in 10¹²kgC a⁻¹.

Berechnet mit dem adjungierten Transportmodell aus den atmosphärischen CO₂ Konzentrationsdaten des NOAA-CMDL-Meßnetzes. Positive Werte: CO₂-Nettoquelle, negative Werte: CO₂-Senke.

Land/Region	Natürliche Quellen/Senken	Fossile CO ₂ Emissionen ¹
U.S.A.	-0,48±0,19	1,09
Australien	-0,05±0,09	0,06
China	0,15±0,19	0,58
Europa	-0,97±0,14	1,13
GUS	0,26±0,26	0,99
Indien	-0,10±0,12	0,12
U.S.A. + Kanada	-0,12±0,20	1,28
Europa + GUS	-0,71±0,26	2,11

¹ Ermittelt aus Statistiken der Energienutzung

Annual Mean Non-Fossil Fuel CO₂ Source

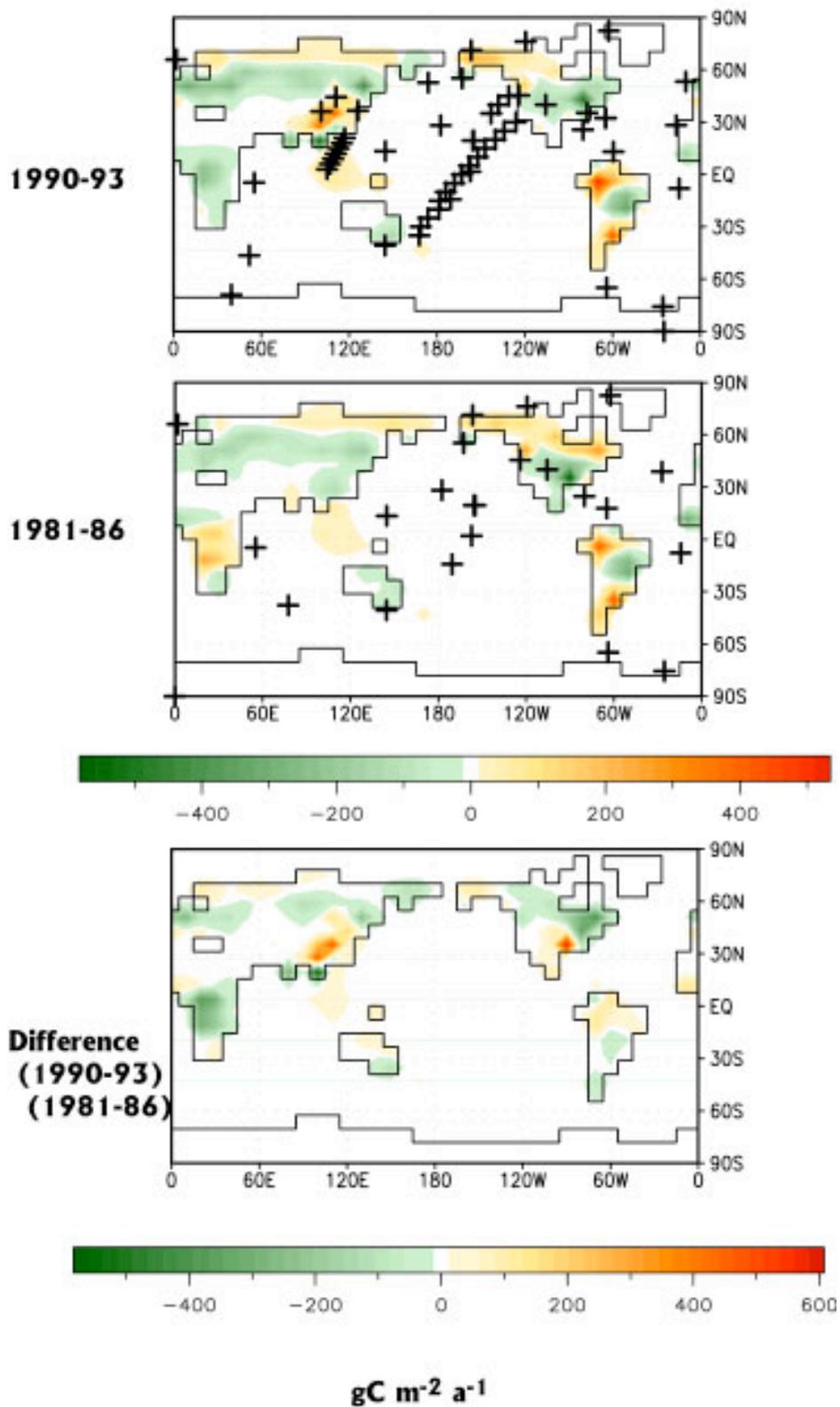


Abbildung 1: Nicht-fossile CO₂ Quellen ermittelt mit dem Inversionssystem für 2 verschiedene Zeiträume: 1990-93 (oben) und 1981-86 (mitte). Unten ist die Differenz dargestellt.

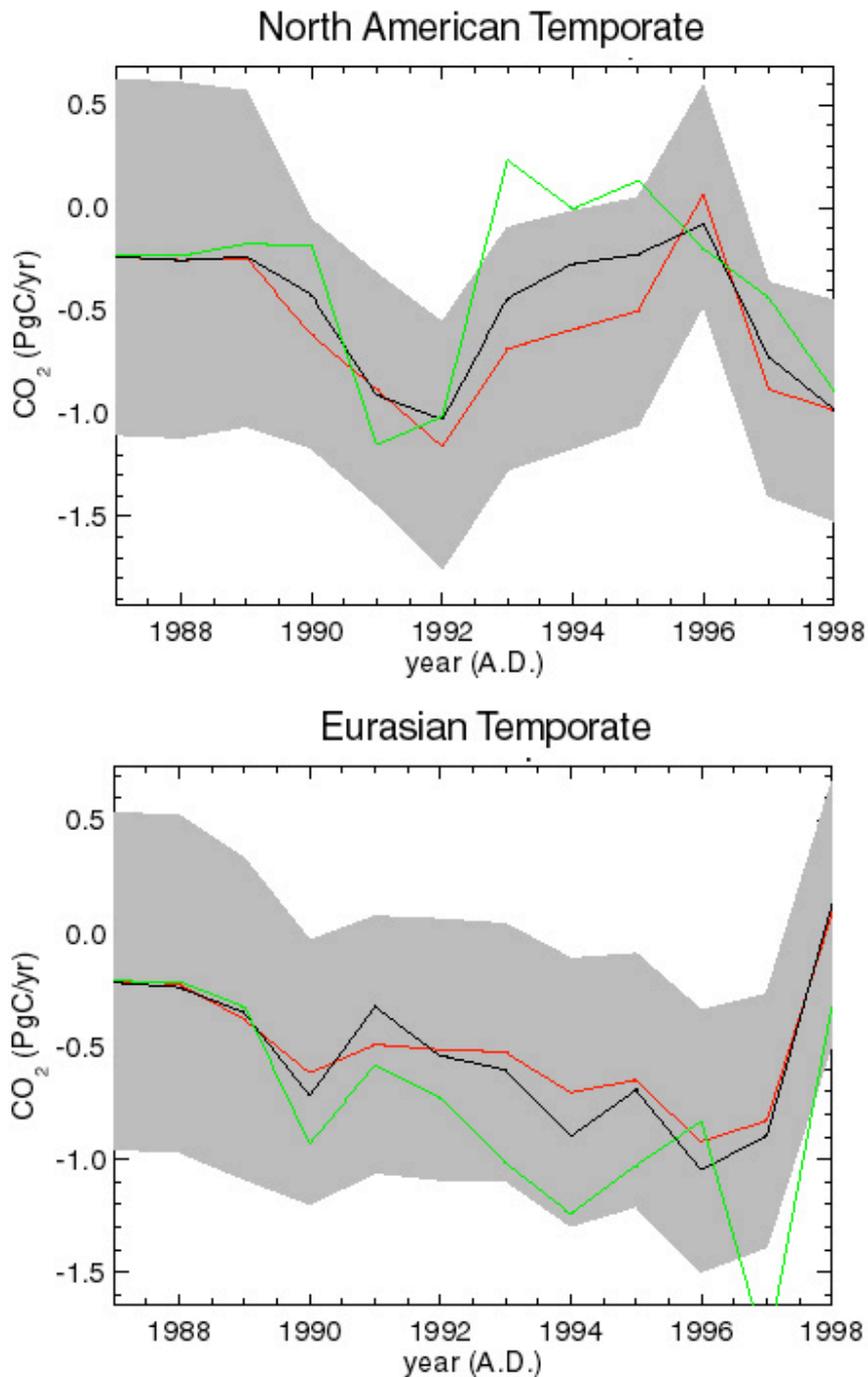


Abbildung 2. Zeitliche Entwicklung der nicht-fossilen CO₂ Quellen in Nordamerika und Eurasien ermittelt mit dem Inversionsmodellssystem (Houweling et al., 2001, Anlage 10). Linien: Schwarz: hochauflösende Inversion, korrelierte a priori Unsicherheiten, rot: hochauflösende Inversion unkorrelierte a priori Unsicherheiten, grün: grobauflösende Inversion. Grau: Unsicherheit der hochauflösenden Lösung (1-Sigma).

3.2.2 Ermittlung der globalen raumzeitlichen CH₄ Emissionen

In einer weiteren Fallstudie wurden mit dem inversen Modellsystem die Quellen und Senken des Methan bestimmt (Anlage 3). Auch hier wurde der quasistationäre Ansatz benutzt und die CH₄ Quellen gemittelt über den Zeitraum 1993-1995 ermittelt. Da der Abbau des Methans durch Reaktion mit OH in der Troposphäre nicht linear ist, musste das Problem linearisiert werden und die Lösung mit einem iterativen Verfahren berechnet werden. Die aus einem 3dimensionalen Chemiemodell ermittelten OH Felder (Hein et al, 1995) wurden durch Simulation des Methylchloroform und Vergleich mit den ALE-GAGE Messungen in einem ersten Schritt optimiert. Anschließend wurden im zweiten Schritt die CH₄ Quellen mit dem inversen Modellsystem ermittelt.

Als *a priori* Quellen des CH₄ wurden statistische Daten der verschiedenen natürlichen und anthropogenen Quellenprozesse aufbereitet und auf das Modellgitter abgebildet (s. Tabelle 3). Die atmosphärischen CH₄ Beobachtungsdaten von 34 festen Stationen sowie von Schiffsmessungen ermittelt von NOAA-CMDL (Dlugokencky et al., 1994b) wurden für die Inversion verwendet.

Als Ergebnis der Inversionsrechnung wird die globale Summe der CH₄ Emissionen von *a priori* 528 auf 505 Tg(CH₄) a⁻¹ reduziert. Da die Inversion die Netto-Emissionen jeder Modellgitterzelle optimiert, lassen sich die Resultate leider nicht mehr den einzelnen teilweise räumlich und zeitlich überlappenden CH₄-Quellenprozesse zuordnen.

In zwei Sensitivitätsinversionen wurde zudem der Effekt von zeitlichen und räumlichen Kovarianzen in den *a priori* Unsicherheiten der Quellen untersucht (s. hierzu Abschnitt 2.3.1).

3.2.3 Ermittlung der globalen raumzeitlichen CO Emissionen

In einer ersten Vorstudie wurde in Zusammenarbeit mit dem Max-Planck-Institut für Chemie in Mainz eine Inversionsstudie zum Kohlenmonoxid durchgeführt (Bergamaschi et al., 2000, Anlage 2). In diesem Falle wurde bewusst auf eine hochauflösende Inversion verzichtet, da die zur Verfügung stehende *a priori* Information der CO-Quellen dafür noch zu unsicher erschien. Hingegen wurden 9 verschiedene Quellen und 3 Senkenprozesse des CO durch Vergleich mit den atmosphärischen Beobachtungsdaten optimiert.

3.3 Theoretische Untersuchungen zum Inversionsproblem

3.3.1 Das Problem der *a priori* Kovarianz der Quellenunsicherheiten

Durch den gewählten Ansatz einer sehr hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung der Quellen werden sehr viele Unbekannte in das zu lösende Gleichungssystem eingeführt, welches dadurch hoch unterbestimmt wird. Durch den oben skizzierten Bayes'schen Ansatz wird aus der Vielzahl von möglichen Lösungen diejenige gesucht, welche möglichst nah bei den vorgegebenen *a priori* Quellenfeldern liegt. Die Abweichung wird dabei mit Hilfe der vorzuziehenden *a priori* Kovarianzmatrix der Quellenfelder gewichtet (s. Gl. (2)). Dieser Matrix kommt daher eine wichtige Rolle für die Lösung zu. Je nach Art der Information (Statistische Daten, Modellsimulation) welche den *a priori* Quellenfelder zu Grunde liegt, muss die dazu gehörende Kovarianzmatrix entsprechend konstruiert werden.

In den durchgeführten Inversionsrechnungen wurde zunächst von vollständig korrelierten oder völlig unkorrelierten Unsicherheiten ausgegangen. Die Annahme unkorrelierter Unsi-

cherheiten bedeutet, dass die *a priori* Abschätzung der Quellstärke in jedem Gitterpunkt unabhängig vom Nachbarpunkt ist (die entsprechende Kovarianzmatrix ist in diesem Fall eine Diagonalmatrix). Dies ist in Wirklichkeit nicht der Fall, da in den meisten Fällen ein *a priori* Prozesswissen vorliegt, welches räumlich (oder auch zeitlich) getrennte Emissionen von verschiedenen Gitterpunkten verknüpft: im Falle des CO₂ werden z.B. ein Nadelwaldökosystem in Asien und in Amerika unter vergleichbaren Umweltbedingungen (z.B. Klima, Stickstoffdeposition) ein ähnliches Senkenverhalten aufweisen, da ihnen dieselben biogeochemischen Gesetze zu Grunde liegen. Unterschätzt daher die *a priori* Schätzung die Quellstärke an einen Standort, dann wird sie dies auch am anderen Standort tun. Die Kovarianzmatrix besitzt in diesem Falle nicht verschwindende Elemente ausserhalb der Diagonale. Es ist jedoch sehr schwierig, dieses *a priori* Wissen über die einzelnen Quellenprozesse in der Kovarianzmatrix korrekt zu quantifizieren.

In 2 Sensitivitätsstudien wurde das Problem der *a priori* Kovarianz untersucht (Anlagen 3 und 10). In einer Inversionsrechnung zum Methan (Anlage 3) wurden unterschiedliche Annahmen zur zeitlichen Korrelation der Unsicherheiten in den vorgegebenen monatlichen Emissionen spezifiziert. Es konnte gezeigt werden, dass die ermittelten Jahressgänge der CH₄ Emissionen wesentlich plausibler erscheinen wenn eine zeitliche Korrelationslänge von einigen wenigen Monaten angenommen wird. Für das CO₂ wurde eine ähnliche Studie durchgeführt (Anlage 10), in welcher für die terrestrische Biosphäre neben der zeitlichen auch eine räumliche Korrelationsstruktur vorgegeben wurde. Diese wurde dabei aus Simulationsexperimenten mit globalen Kohlenstoffmodellen der Landbiosphäre ermittelt (McGuire et al., 2001), welche durch raumzeitlich vorgegebene Störfaktoren wie CO₂ Anstieg, Änderungen der Landnutzung und Wetter/Klimaanomalien angetrieben wurden. Ursache der Kovarianzstruktur der Quellen in der Landbiosphäre sind dabei einerseits vergleichbare Ökosysteme als auch grossskalige Wetteranomalien, welche alle Ökosysteme einer Region in vergleichbarer Weise beeinflussen (z.B. ein kalter Frühling in Westeuropa welcher die Photosynthese kontinentweit reduziert).

3.3.2 Verwendung eines prozessorientierten Quellenmodells mit unbekanntem Parametern

Ein möglicher Ausweg aus der schwierigen Spezifizierung einer expliziten *a priori* Kovarianzmatrix besteht in der Verwendung eines diagnostischen Modells der Quellen mit unbekanntem Modellparametern. In diesem wird nicht nach den unbekanntem Quellen invertiert, sondern die Quellenmodellparameter werden mit Hilfe der atmosphärischen Beobachtungen optimiert. Die Struktur des diagnostischen Modells verkörpert dabei das *a priori* „Wissen“ über die Quellen und es wird angenommen, dass die Modellparameter für ein ganzes Ökosystem und nicht nur für eine Gitterzelle gelten. Damit fließen auch wesentlich weniger Unbekannte in die Inversionsrechnung. Die schließlich zu ermittelnden Oberflächenquellfelder werden nach der Inversion mit dem Quellenmodell unter Verwendung der optimierten Modellparameter berechnet.

Der Nachteil dieses Verfahrens besteht darin, dass das Quellenmodell im allgemeinen nicht-linear ist und damit die Optimierung iterativ vorgenommen werden muss. Ein zweiter, fundamentaler Nachteil ergibt sich daraus, dass mit diesem Ansatz nur von vornherein im Quellenmodell explizit parametrisierte Quellenprozesse erfasst werden können.

In einer ersten Studie wurde dieser Ansatz für das CO₂ mit einem einfachen diagnostischen Modell (Knorr und Heimann, 1995) für die Landbiosphäre verfolgt (Anlage 8). Dabei wurde

die Landbiosphäre durch 12 verschiedene Ökosysteme dargestellt und für jedes dieser Systeme 2 Modellparameter bestimmt. Als zusätzliche Eingangsdaten wurden Satellitendaten der Reflektanz im sichtbaren und nahen Infrarotbereich (NDVI), sowie globale Klimadaten (Temperatur und Niederschlag) beigezogen. In einer Fortsetzungsstudie (Anlage 9) wurde dann begonnen, ein wesentlich komplexeres, prozessorientiertes globales terrestrisches Ökosystem mit wesentlich mehr Parametern zu optimieren. In beiden Fällen wurde die Kombination aus atmosphärischem Transportmodell und Quellenmodell mit Hilfe des TAMC adjungiert um damit die Ableitung der Kostenfunktion nach den Modellparametern effizient zu berechnen.

Diese Vorstudien zeigen, dass in Zukunft dieser Ansatz wohl die einzige Möglichkeit bildet, dem Problem der *a priori* Kovarianzmatrizen zu entgehen. Es ist zu erwarten, dass er in zukünftigen Assimilationsmodellen für biogeochemische Spurenstoffe einen zentralen Baustein bilden wird.

3.3.3 Vorteil der hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung

Der im Projekt verfolgte Ansatz einer sehr hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung wurde motiviert durch die in der Wirklichkeit sehr große raumzeitliche Heterogenität der Quellen der betrachteten atmosphärischen Spurenstoffe. Da in jedem Fall atmosphärische Beobachtungen nur von einigen 100 global verteilten Messstationen vorliegen, impliziert dies eine hoch unterbestimmtes mathematisches Problem. Die Messungen allein reichen nicht aus, um die raumzeitlichen Muster der Quellen zu ermitteln. Wie oben dargestellt, wurde im Projekt dieses Problem mit einem Bayes'schen Ansatz durch Beizug von *a priori* Information über die Quellenprozesse angegangen. Alternativ hätte man sich auf einige wenige unbekannte grobe Quellenmuster beschränken können. Diese Beschränkung widerspiegelte den Stand der Inversionsrechnungen zu Beginn des Projektes, und wird nach wie vor von vielen Arbeitsgruppen verfolgt (Enting et al., 1995, Fan et al, 1998, Gurney et al., 2001).

In einer speziellen Prinzipstudie wurde der Effekt der Auflösung am Beispiel des CO₂ untersucht (Anlage 7). Ausgehend von einer „konsistenten“, hochauflösenden Lösung des Inversionsproblems wurden sukzessive die Basisfunktionen durch Agglomeration reduziert und das dadurch entstehende Inversionsproblem mit geringerer Auflösung gelöst und anschließend mit der hochauflösenden Lösung verglichen. Es konnte gezeigt werden, dass durch die Reduktion des Problems auf weniger Basisfunktionen ein systematischer Fehler auftritt, der 100% und mehr der ermittelten Quellstärken betragen kann. Dieser Fehler (der „Agglomeration Error“) wird erzeugt durch Quellenstrukturen, welche in den groben Basisfunktionen nicht enthalten sind. Der Effekt dieser nicht aufgelösten Quellenstrukturen kann teilweise aus der Analyse der Beobachtungen an den Messstationen abgeschätzt werden. Daraus lässt sich ein heuristisches Rezept ableiten, um den Effekt des „Agglomeration Errors“ in niedrig auflösenden Inversionen zu minimieren; eliminiert werden kann er jedoch nicht.

Die echte Größe des „Agglomeration Errors“ ist jedoch in einer niedrig auflösenden Inversion nicht ermittelbar. Es muss vermutet werden, dass er in allen vorliegenden, niedrig auflösenden Inversionsstudien vorhanden ist. Die in diesen Studien angegebenen Fehlerabschätzungen über die ermittelten großskaligen Quellstärken sind daher mit Sicherheit als zu optimistisch anzusehen. Z.B. wurde in der Studie von Fan et al., (1998) die gesamte Erde in nur 3 Regionen aufgeteilt und in der Inversionsrechnung aus den atmosphärischen CO₂ Messungen eine Kohlenstoffsénke von $1.8 \pm 0.4 \cdot 10^{12} \text{ kgC a}^{-1}$ für die Landbiosphäre in den USA gemittelt über den Zeitraum 1988-1992 ermittelt. Dieser politisch brisante Befund und insbe-

sondere der viel zu optimistische Fehler lässt sich aus den oben dargestellten Gründen nicht bestätigen. Mit dem im Projekt entwickelten hochauflösenden Inversionsystem ergibt sich für den selben Zeitraum eine US-Senke von nur $0.12 \pm 0.2 \cdot 10^{12} \text{ kg C a}^{-1}$ (s. Kaminski et al., 1999, Anlage 5).

Das Dilemma der ungenügenden Anzahl der Beobachtungen und des sich daraus ergebenden hoch unterbestimmten Inversionsproblem wurde in einem „Technical Comment“ in der amerikanischen Zeitschrift „Science“ veröffentlicht (Anlage 6): Vorgestellt wurde eine exemplarische Lösung des Inversionsproblem für das CO_2 mit einer *a priori* vorgeschriebenen, festen Senke von $2 \cdot 10^{12} \text{ kg C a}^{-1}$ in den Ökosystemen Europas. Es konnte gezeigt werden, dass diese Lösung in jedem Monat vollständig übereinstimmt mit allen atmosphärischen CO_2 Messdaten von 68 Stationen! Es ist klar, dass diese „Lösung“ nicht als realistisch angesehen werden kann, da sie unserem Wissen über die Quellenstärken im europäischen Raum widerspricht. Sie illustriert jedoch auf drastische Weise, dass die atmosphärischen Daten allein nicht ausreichen, um die Quellstärken zu ermitteln. Vielmehr ist in jedem Fall die *a priori* Information über die raumzeitliche Struktur der Quellen ebenso wichtig wie die zur Verfügung stehenden atmosphärischen Konzentrationsmessungen. Dieses *a priori* Wissen über die Quellen fließt im Falle einer niedrig auflösenden Inversionsrechnung unkontrolliert in die Lösung ein oder, wie im hier gewählten Ansatz, wird es explizit zusammen mit seiner Unsicherheit (s. Abschnitt über die Kovarianzmatrix) in der Inversionsrechnung berücksichtigt.

3.3.4 Atmosphärische Beobachtungsdaten

Herkömmliche Inversionsstudien (Enting et al., 1995, Fan et al., 1998, Bousquet et al., 2000) benutzen in der Regel monatliche oder jährliche Mittel der beobachteten Konzentration als Eingangsgröße in die Inversionsrechnung. Entsprechend werden auch bei der Berechnung der Basisfunktionen monatliche oder jährliche Mittel verwendet. Durch diese Praxis können allerdings signifikante Verfälschungen in der Inversionsrechnung entstehen. An den meisten Messstationen existieren Vorschriften, unter welchen meteorologischen Bedingungen Luftproben zu entnehmen sind. Meistens werden diese nur bei gut durchmischter Luft, z.B. Nachmittags genommen. Dieses Messprotokoll sollte beim Abgleich mit der Modellsimulation berücksichtigt werden.

In einer Prinzipstudie wurde der Effekt des Samplings im Transportmodell berücksichtigt (Rödenbeck et al., 2001, Anlage 11). In dieser Inversionsrechnung wurden die Monatsmittel der Modellsimulation in der selben Weise aus einzelnen Punktmessungen ermittelt, wie bei den Beobachtungen. D.h. das Modell wurde zu den gleichen Zeitpunkten wie die Beobachtungen „beprobte“. Auf diese Weise kann die Verfälschung durch das Sampling minimiert werden. Dies funktioniert allerdings nur, wenn die den Messungen entsprechende korrekte Meteorologie beim Transport benutzt wird. In der Prinzipstudie wurden die mehrjährigen Daten von NCEP hierzu verwendet. Es ist allerdings festzuhalten, dass dieses Verfahren nicht perfekt ist, da das Transportmodell mit seiner in jedem Falle beschränkten Auflösung die lokalen Bedingungen einer Beobachtungsstation nicht korrekt wiedergeben kann. Im Idealfall müssten Messungen eines weiteren Spurenstoffes mit bekannten Quellen und Senken vorliegen, so dass mögliche Modellfehler analysiert und in der Inversion berücksichtigt werden können.

3.3.5 TRANSCOM3: Ein Vergleich verschiedener Inversionsmodelle und -Verfahren

Unterstützt von der Global Analysis, Interpretation and Modelling (GAIM) Task Force des International Geosphere-Biosphere Program (IGBP) wurde ein internationales Modellvergleichsprojekt TRANSCOM3 initiiert. In einer ersten Phase von TRANSCOM3 wurden Standardinversionsrechnungen zum atmosphärischen CO₂ durchgeführt (Gurney et al., 2001). TRANSCOM3 enthält auch ein theoretisches Unterprogramm, in welchem methodische Aspekte der Inversionsrechnung untersucht werden. Die in diesem Projekt durchgeführten Untersuchungen wurden vorgestellt und stießen auf reges Interesse bei den Teilnehmern.

4 Ausblick

Die im Bericht beschriebenen Studien dokumentieren, dass das im Rahmen des Projektes entwickelte, hochauflösende Inversionssystem als flexibles, robustes Instrument für eine Vielzahl von möglichen Anwendungen zur Bestimmung von Quellen und Senken langlebiger Spurenstoffe eingesetzt werden kann. In Fallstudien für das CO₂, CH₄ und CO konnten realistische raumzeitliche Quellenmuster und -Stärken ermittelt werden. Die Ergebnisse flossen in den „Third Assessment Report“ des Intergovernmental Panel for Climate Change ein (Houghton et al., 2001). Entsprechend groß ist die internationale Nachfrage nach dem im Projekt entwickelten Modellcode und den Transportmodelldaten.

Die theoretischen Prinzipstudien haben jedoch die Grenzen des heute vorliegenden, globalen Beobachtungssystem aufgezeigt. Die Unterbestimmtheit des mathematischen Inversionsproblem lässt sich nicht umgehen. Um realistische Lösungen zu erhalten, sind weitere *a priori* Annahmen über die Spurenstoffquellen unabdingbar und beeinflussen die Lösung in entscheidender Weise. Die Fallstudien zeigen, dass die heute vorliegenden globalen atmosphärischen Daten zwar die Quellenmuster auf der kontinentalen Skala erfassen, dass jedoch Aussagen über regionale Emissionen nur mit zusätzlichen Beobachtungsdaten getroffen werden können. Eine zukünftige Hauptentwicklungsrichtung besteht daher darin, ein ähnliches System für eine Region von z.B. Europa zu entwickeln. Dies erfordert ein realistisches Mesoskalenmodell des atmosphärischen Transports, sowie ein kontinental verdichtetes Messstationsnetz (z.B. hohe Türme, regelmässige Flugzeugmessungen in der unteren Troposphäre). Im Rahmen eine Europäischen Projektes (TCOS-Siberia, Heimann et al., 2001) soll ein Prototyp für den Europa und Sibirien entwickelt werden. Die in diesem Projekt geleisteten Vorarbeiten werden dabei die Grundlage bilden.

Das hier eingesetzte Inversionsverfahren erlaubt es ohne weiteres, unterschiedliche Arten von Information in die Inversionsrechnung einfließen zu lassen. Eine attraktive Möglichkeit bilden Messungen der vertikal gemittelten Spurenstoffkonzentration in der Luftsäule, wie sie von einem satellitengestützten Sensor ermittelt werden könnten. Sensoren für CO₂ und CH₄ sind zur Zeit in Entwicklung und dürften rechtzeitig für die erste Kyoto-Erfassungsperiode (2008-12) im Einsatz sein. Bei genügend genauen Messungen könnte sich in diesem Falle die Unterbestimmtheit des mathematischen Inversionsproblems wesentlich verringern. Eine entsprechende Prinzipstudie zur Ermittlung der Genauigkeitsanforderungen an den Sensor ist zur Zeit in Bearbeitung.

Letztlich wird man jedoch nicht darum herum kommen, den „top-down“ mit dem „bottom-up“ Zugang zu kombinieren. Die in diesem Projekt durchgeführte Pilotstudie (Rayner et al., 2001, Anlage 9) weist in diese Richtung. Ziel dieses Bestrebens wird es sein, ein Datenassimilationssystem für biogeochemische Spurenstoffe zu entwickeln, welches ähnlich der Datenassimilation bei der Wettervorhersage aufgebaut ist. Die Bereitstellung eines derartigen Werkzeugs stellt eine große Herausforderung an die Wissenschaft dar, welche in Anbetracht der politischen Relevanz der Problemstellung in den nächsten Jahren ein hohe Priorität erfahren wird. Die in diesem Projekt durchgeführten Studien werden hierzu eine wertvolle Grundlage bilden.

5 Im Rahmen des Projektes erstellte Publikationen (Anlagen)

Begutachtete Publikationen in wissenschaftliche Zeitschriften

1. Heimann, M. and Kaminski, T., 1999. Inverse modelling approaches to infer surface trace gas fluxes from observed atmospheric mixing ratios. In: A.F. Bowman (Editor), Approaches to scaling of trace gas fluxes in ecosystems. Elsevier, Amsterdam, pp. 277-295.
2. Bergamaschi, P., Hein, R., Heimann, M. and Crutzen, P.J., 2000. Inverse modeling of the global CO cycle 1. Inversion of CO mixing ratios. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 105(D2), 1909-1927.
3. Houweling, S., Kaminski, T., Dentener, F., Lelieveld, J. and Heimann, M., 1999. Inverse modeling of methane sources and sinks using the adjoint of a global transport model. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 104(D21), 26137-26160.
4. Kaminski, T., Heimann, M. and Giering, R., 1999. A coarse grid three-dimensional global inverse model of the atmospheric transport - 1. Adjoint model and Jacobian matrix. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 104(D15), 18535-18553.
5. Kaminski, T., Heimann, M. and Giering, R., 1999. A coarse grid three-dimensional global inverse model of the atmospheric transport - 2. Inversion of the transport of CO₂ in the 1980s. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 104(D15), 18555-18581.
6. Kaminski, T., Heimann, M., Peylin, P., Bousquet, P. and Ciais, P., 2001. Inverse modeling of atmospheric carbon dioxide fluxes. Science, 294(5541), 259a-.
7. Kaminski, T., Rayner, P.J., Heimann, M. and Enting, I.G., 2001. On aggregation errors in atmospheric transport inversions. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 106(D5), 4703-4715.
8. Kaminski T., W. Knorr, M. Heimann, and P. Rayner, 2001. Assimilating atmospheric data into a terrestrial biosphere model: A case study of the seasonal cycle", Global Biogeochemical Cycles, submitted.

Konferenzbeiträge und Technical Reports

9. Rayner, P., W. Knorr, M. Scholze, R. Giering, T. Kaminski, M. Heimann, C. LeQue-re, 2001. Inferring terrestrial biosphere carbon fluxes from combined inversions of atmospheric transport and process-based terrestrial ecosystem models", Extended abstract for the 6th Carbon dioxide conference at Sendai.
10. Houweling, S., C. Rödenbeck, M. Gloor, and M. Heimann, 2001. A sensitivity study of the impact of *a priori* prescribed space and time correlations on the results of a time-dependent CO₂ inversion.
11. C. Rödenbeck, S. Houweling, G. Churkina, C. Quéré, S. Körner, M. Gloor, D. Schimel and M. Heimann 2001. The sensitivity of time-dependent CO₂ inversions to the inter-annual variability of atmospheric transport: A preliminary study.
12. Vossbeck, M., T. Kaminski, R. Giering, and M. Heimann. 2001. The Adjoint of TM2 – System Description and User Manual. Technical Report, Max-Planck-Institute for Meteorology, Hamburg, in press.

13. Houweling, S. 2001. A short mathematical description of the source/sink optimization routines. Unpublished.

6 Zitierte Literatur

- Andres, R.J., Marland, G., Boden, T. and Bischof, S., 2000. Carbon dioxide emissions from fossil fuel consumption and cement manufacture, 1751-1991, and an estimate of their isotopic composition and latitudinal distribution. In: T.M.L. Wigley and D.S. Schimel (Editors), *The carbon cycle*. Cambridge University Press, Cambridge, pp. 53-62.
- Bousquet, P. et al., 2000. Regional changes in carbon dioxide fluxes of land and oceans since 1980. *Science*, 290(5495): 1342-1346.
- Conway, T.J. and Tans, P.P., 1999. Development of the CO₂ latitude gradient in recent decades. *Global Biogeochemical Cycles*, 13(4): 821-826.
- Dlugokencky, E.J. et al., 1994. A Dramatic Decrease in the Growth-Rate of Atmospheric Methane in the Northern-Hemisphere During 1992 (Vol 21, Pg 45, 1994). *Geophysical Research Letters*, 21(6): 507-507.
- Enting, I.G., Trudinger, C.M. and Francey, R.J., 1995. A Synthesis Inversion of the Concentration and Delta-C-13 of Atmospheric CO₂. *Tellus Series B-Chemical and Physical Meteorology*, 47(1-2): 35-52.
- Fan, S., M. Gloor, J. Mahlman, S. Pacala, J. Sarmiento, T. Takahashi, P. Tans, A large terrestrial carbon sink in north America implied by atmospheric and oceanic carbon dioxide data and models, *Science*, 282, pp 442-446, 1998.
- Giering, R. and Kaminski, T., 1998. Recipes for Adjoint Code Construction. *ACM Trans. Math. Software*, 24: 437-474.
- Giering, R. and T. Kaminski, Using TAMC to generate efficient adjoint code: Comparison of automatically generated code for evaluation of first and second order derivatives to hand written code from the Minpack-2 collection, in *Automatic Differentiation for Adjoint Code Generation*, edited by Christèle Faure, pp. 31-37, INRIA research report no 3555, 1998.
- Kevin Robert Gurney, Rachel Law, A. Scott Denning, Peter Rayner, Philippe Bousquet, Lori Bruhwiler, Yu-Han Chen, Philippe Ciais, Songmiao Fan, Inez Y. Fung, Martin Heimann, Kaz Higuchi, Jasmin John, Shamil Maksyutov, Ken Masarie, Philippe Peylin, Michael Prather, Bernard Pak, James Randerson, Jorge Sarmiento, Shoichi Taguchi, Taro Takahashi, Maki Takashi, Pieter Tans, Ken Yuen, 2001. Towards more robust estimates of CO₂ fluxes: initial control results from the TransCom3 experiment. *Nature*, submitted.
- Heimann, M., Keeling, C.D. and Fung, I.Y., 1986. Simulating the atmospheric carbon dioxide distribution with a three-dimensional tracer model. In: J. Trabalka and D.E. Reichle (Editors), *The Changing Carbon Cycle: A Global Analysis*. Springer Verlag, New York, pp. 16-49.
- Heimann, M., G. Esser, A. Haxeltine, J. Kaduk, D. W. Kicklighter, W. Knorr, G. H. Kohlmaier, A. D. McGuire, J. Melillo, B. Moore III, R. D. Otto, I. C. Prentice, W. Sauf, A. Schloss, S. Sitch, U. Wittenberg and G. Würth. Evaluation of terrestrial carbon cycle models through simulations of the seasonal cycle of atmospheric CO₂: First results of a model inter-comparison study, *Global Biogeochemical Cycles*, 12, pp. 1-24, 1998.

- Heimann, M. et al., 2001. Terrestrial Carbon Observing System – Siberia (TCOS-Siberia). Proposal to the 5th Framework Programme of the European Union.
- Hein, R., Crutzen, P.J. and Heimann, M., 1997. An Inverse Modeling Approach to Investigate the Global Atmospheric Methane Cycle. *Global Biogeochemical Cycles*, 11(1): 43-76.
- Houghton, J.T. et al. (Editors), 2001. *Climate Change 2001: The Scientific Basis*. Cambridge University Press, Cambridge, 881 pp.
- Houghton, R.A., 1999. The annual net flux of carbon to the atmosphere from changes in land use 1850-1990. *Tellus Series B-Chemical and Physical Meteorology*, 51(2): 298-313.
- Kasibhatla, P., Heimann, M., Rayner, P.J., Mahowald, N., Prinn, R.G. and Hartley, D.E. (Editors), 2000. Inverse methods in global biogeochemical cycles. *Geophysical monograph series*, 114. American Geophysical Union, Washington D.C., 324 pp.
- Keeling, C.D., Piper, S.C. and Heimann, M., 1989. A three dimensional model of atmospheric CO₂ transport based on observed winds: 4. Mean annual gradients and interannual variations. In: D.H. Peterson (Editor), *Aspects of Climate Variability in the Pacific and the Western Americas*. Geophysical Monograph. American Geophysical Union, Washington D.C., pp. 305-363.
- Knorr, W. and Heimann, M., 1995. Impact of Drought Stress and Other Factors On Seasonal Land Biosphere Co₂ Exchange Studied Through an Atmospheric Tracer Transport Model. *Tellus Series B-Chemical & Physical Meteorology*, 47(4): 471-489.
- Six, K.D., and E. Maier-Reimer, Effects of Plankton Dynamics On Seasonal Carbon Fluxes in an Ocean General Circulation Model, *Global Biogeochemical Cycles*, 10 (4), 559-583, 1996.
- Tans, P.P., Fung, I.Y. and Takahashi, T., 1990. Observational Constraints on the Global Atmospheric CO₂ Budget. *Science*, 247(4949): 1431-1438.