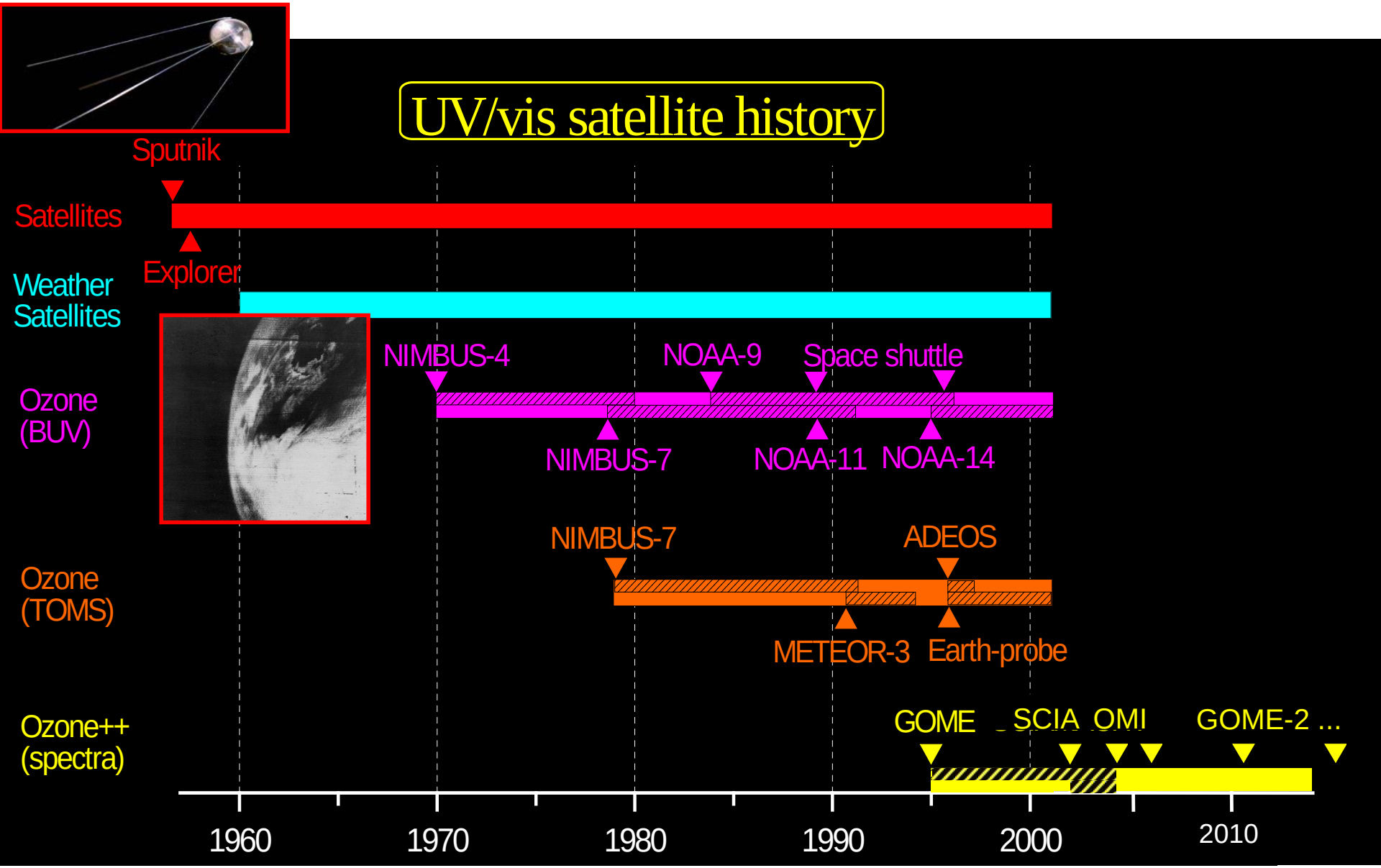
Optimale Informationsgewinnung aus hyperspektralen UV/Vis/NIR Satellitenbildern

Thomas Wagner

Max-Planck-Institut für Chemie (MPI-C), Mainz

- Spektrale Satellitenmessungen im UV/vis
- Kompromiss zwischen räumlicher und zeitlicher Auflösung / Überdeckung
- Optimierungsmöglichkeiten
- Neuronale Netze und Datenassimilation

Wunsch, alles überall und immer zu messen – Satelliten kommen diesem Ideal am nächsten



Wunsch, alles überall und immer zu messen – Satelliten kommen diesem Ideal am näc

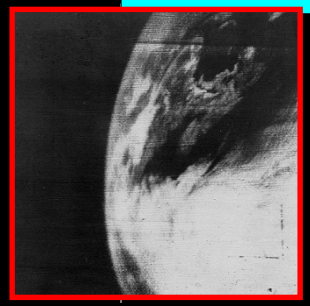
UV/vis sat

Sputnik

Satellites

Explorer

Weather Satellites



NIMBUS-4

Ozone (BUV)

NIMBU

NIMB

Ozone (TOMS)

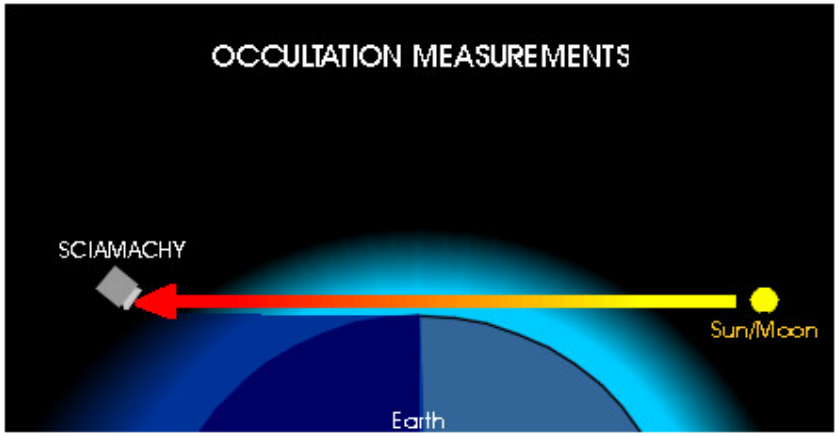
Ozone++ (spectra)

1960 1970 1980 1990 2000 2010

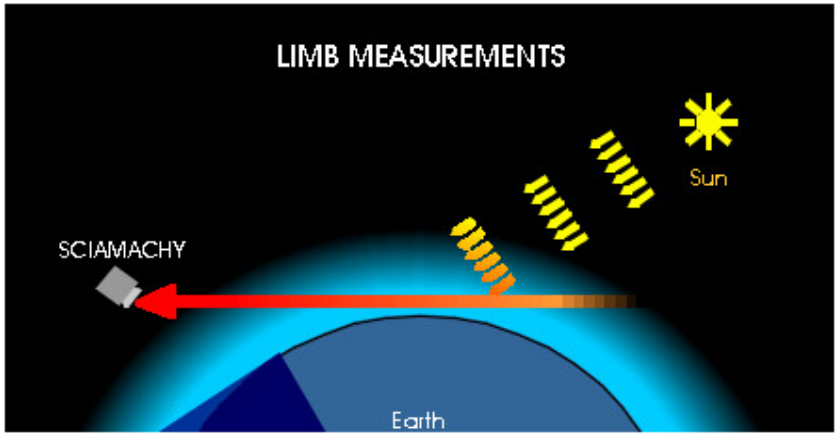
13. October 2017:

Sentinel-5P wurde vom Plesetsk Kosmodrom in eine polare Umlaufbahn gebracht.

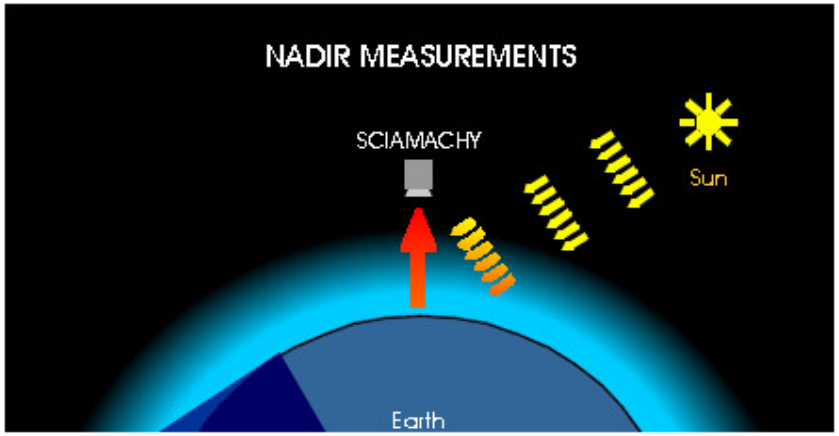
Verschiedene Beobachtungsgeometrien:



‚Okkultation‘



‚Limb‘

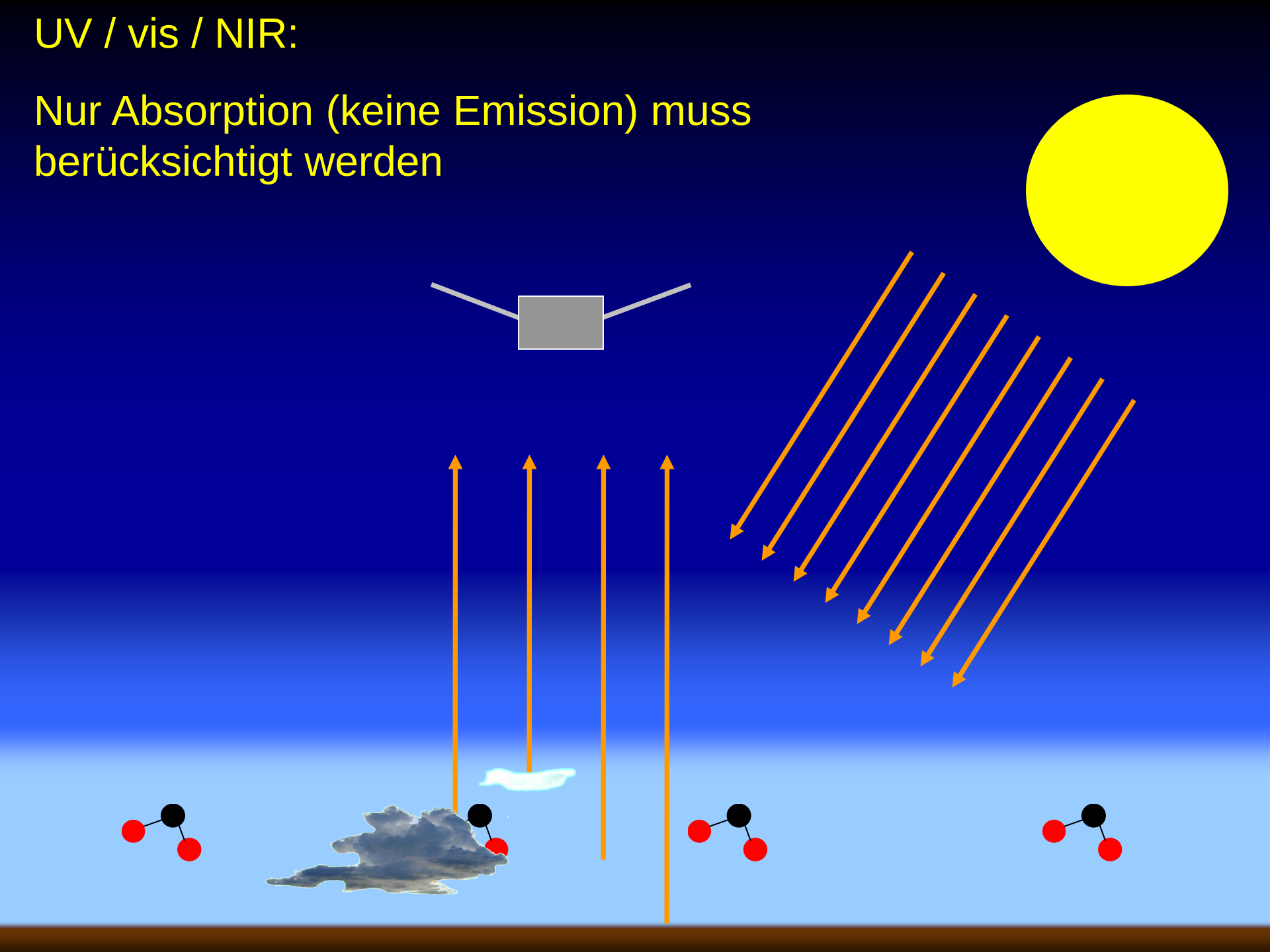


‚Nadir‘

- Blick bis zum Boden
- um diese Messungen geht es im Folgenden

UV / vis / NIR:

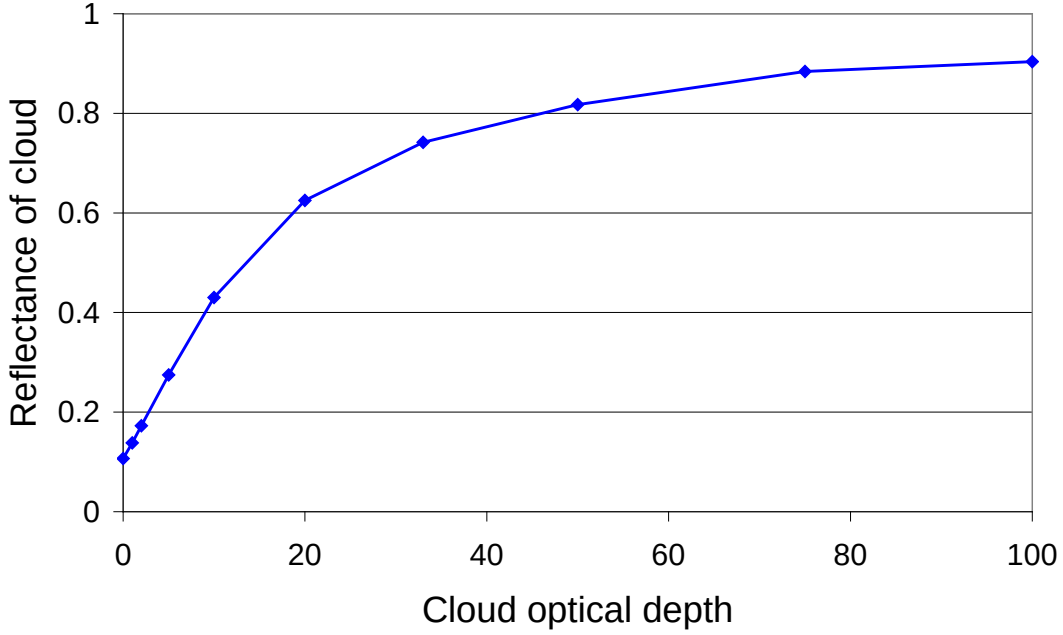
Nur Absorption (keine Emission) muss berücksichtigt werden



Frühe (und immer noch erfolgreiche) Nadir-Messungen: Wettersatelliten (Bilder)

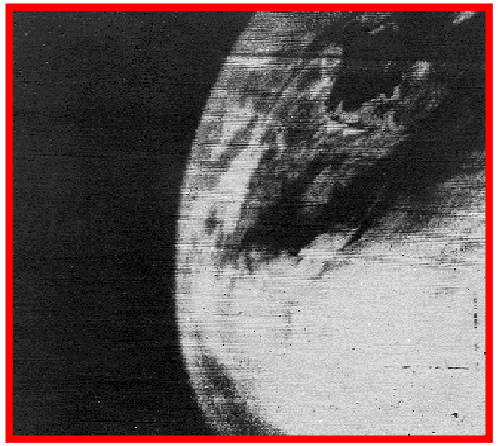
=> Wolken sind hell

Beziehung zwischem Helligkeit und Optscher Dichte (proportinal zur Anzahl von Wolkenteilchen in einer Säule)

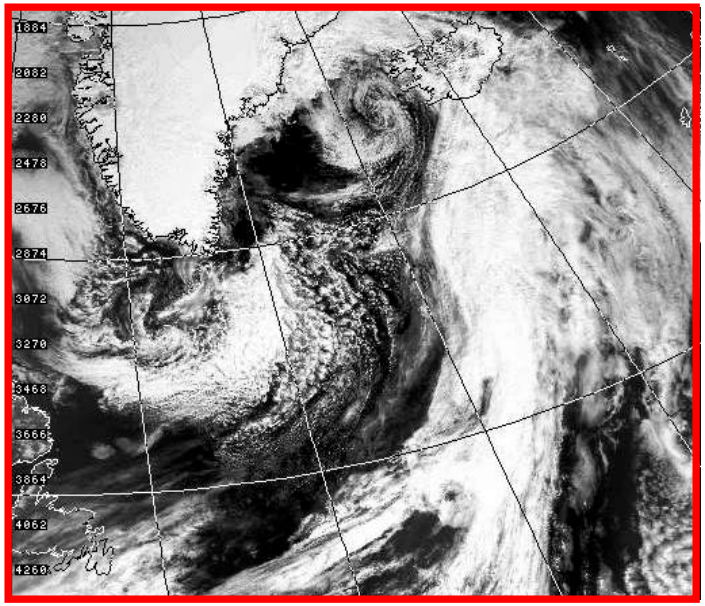


Sättigung für hohe optische Dichten

First image of the earth
Tiros 1, 1960



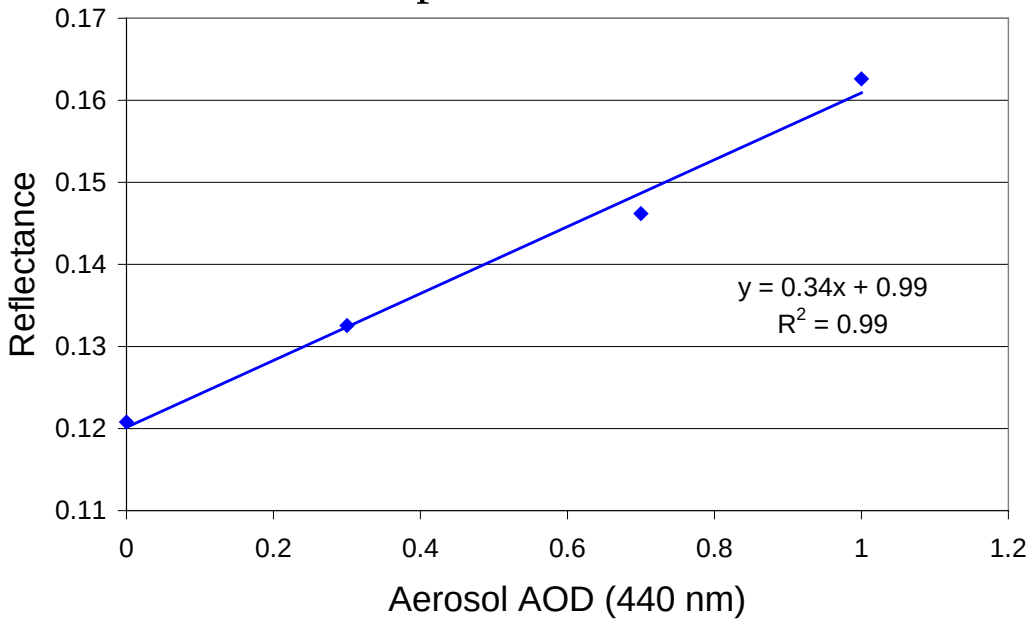
Modern satellite image



29 Apr 2006 at 1330 UTC
http://www.sat.dundee.ac.uk

Auch Aerosole erhöhen die Helligkeit des zurückgestreuten Lichts (aber der Effekt ist schwächer)

Lineare Beziehung zwischen Helligkeit und Optischer Dichte

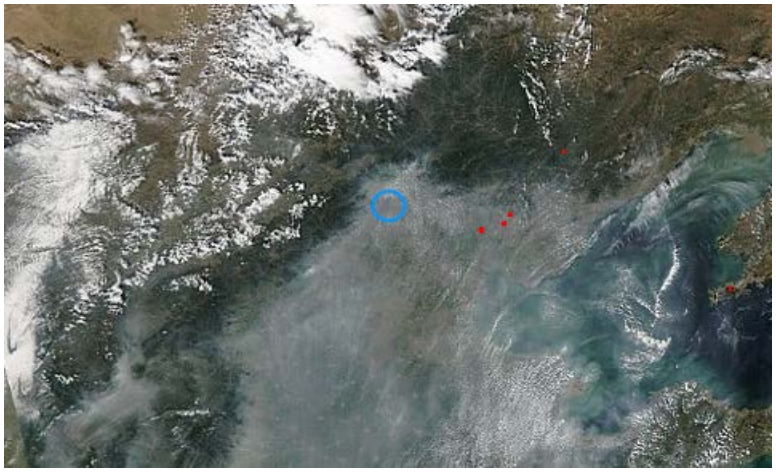


Anforderung an die Genauigkeit für AOD-Messung: ~0.05

=> Relative Genauigkeit der Intensitätsmessung: ~2%

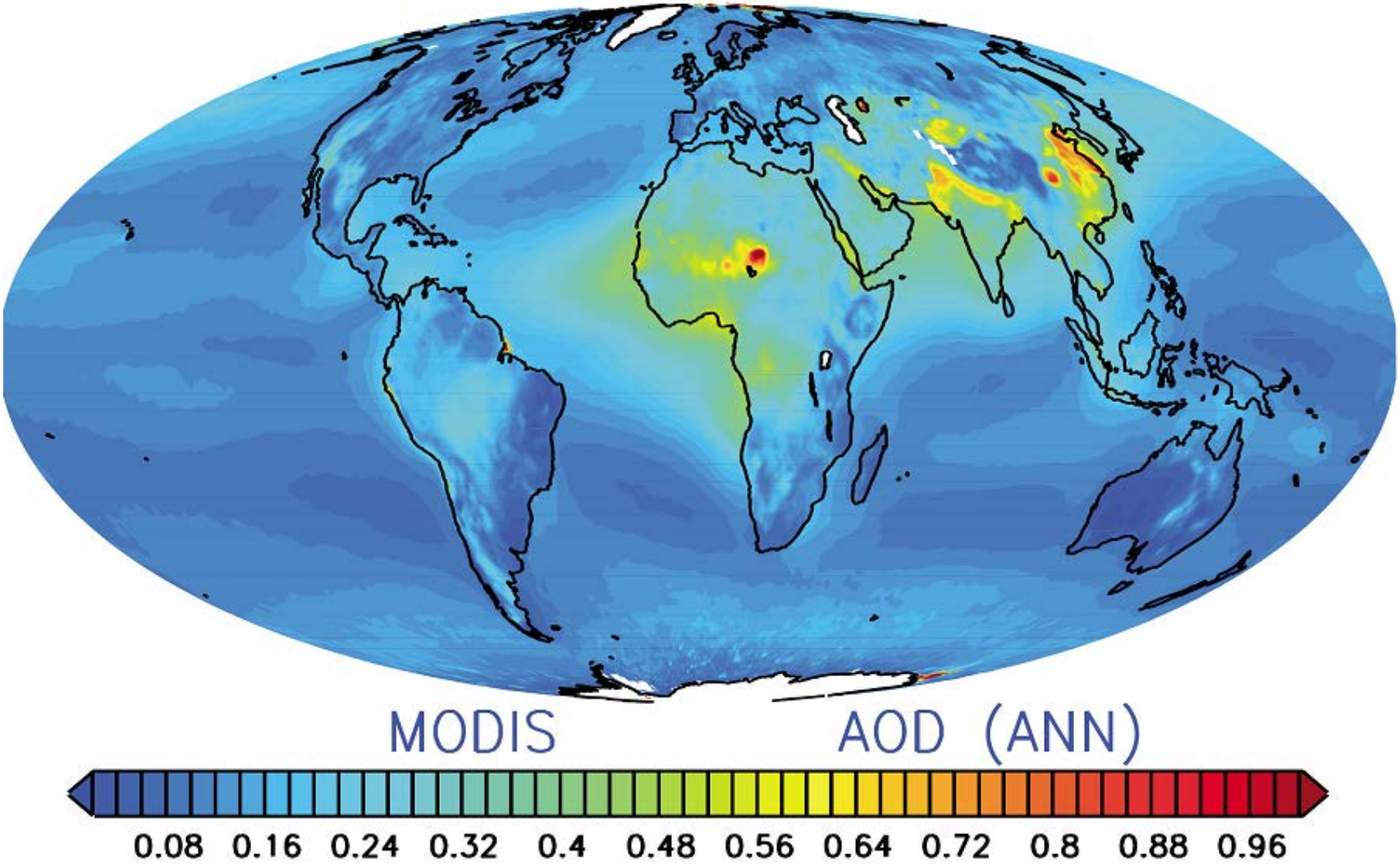
=> SNR: ~50 - 100

large aerosol amount above China, 19.09.2014



clear sky, 23.10.2008

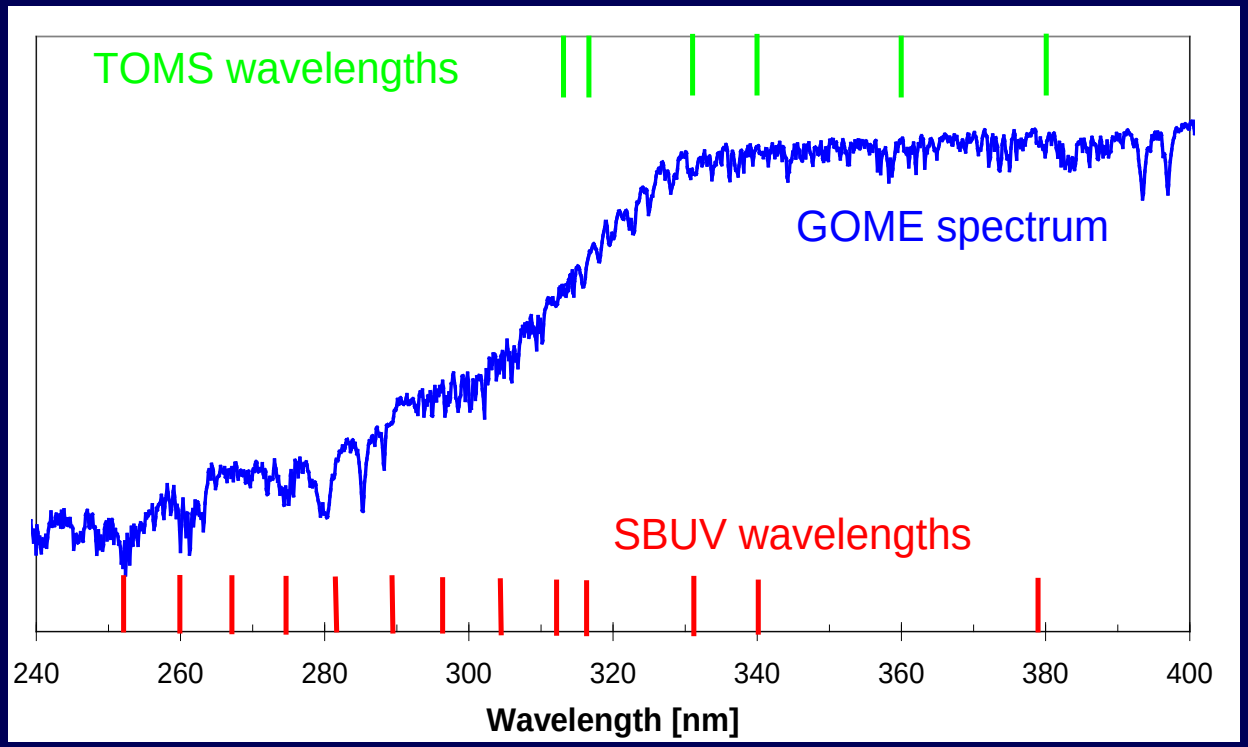
Mittlere Aerosol optische Dichte (MODIS 2003 – 2011)



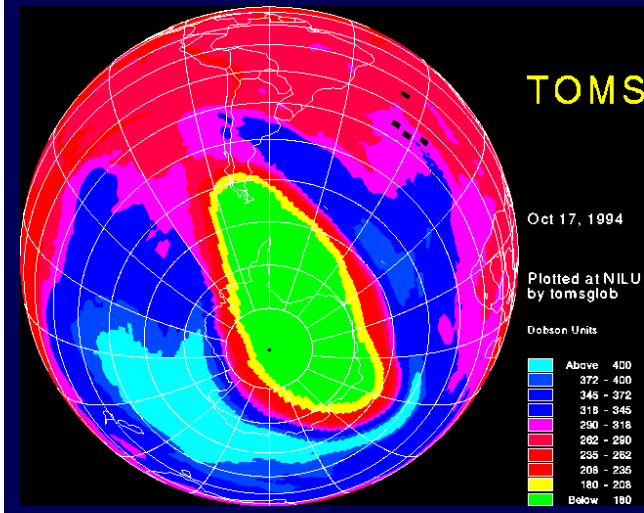
Lau and Kim [2014].

Spurenstoffmessungen

Die SBUV and TOMS Instrumente messen Licht
in ausgewählten Wellenlängenintervallen



Ozone hole (17.10. 1994)
measured by TOMS

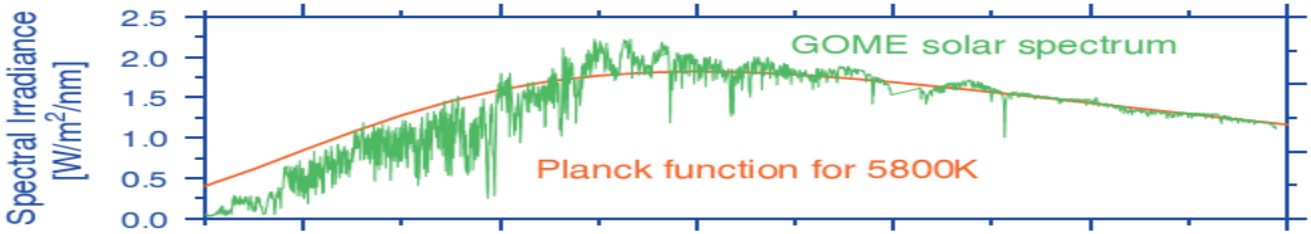


SBUV => O_3 Profile

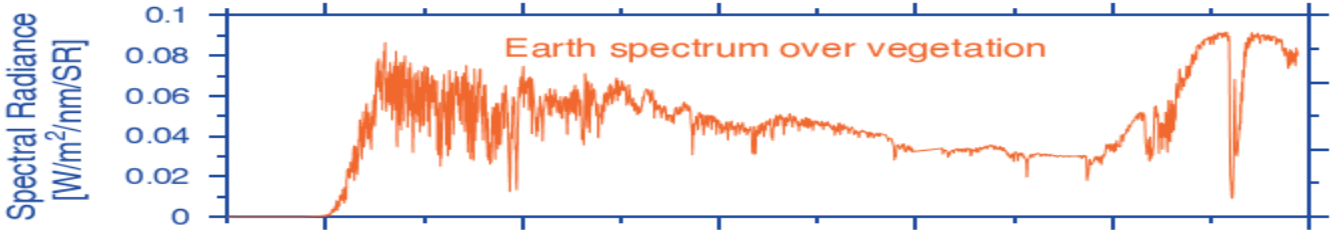
TOMS => O_3 Gesamtsäule

Satellitenmessungen von kontinuierlichen Spektren (seit 1995: GOME)

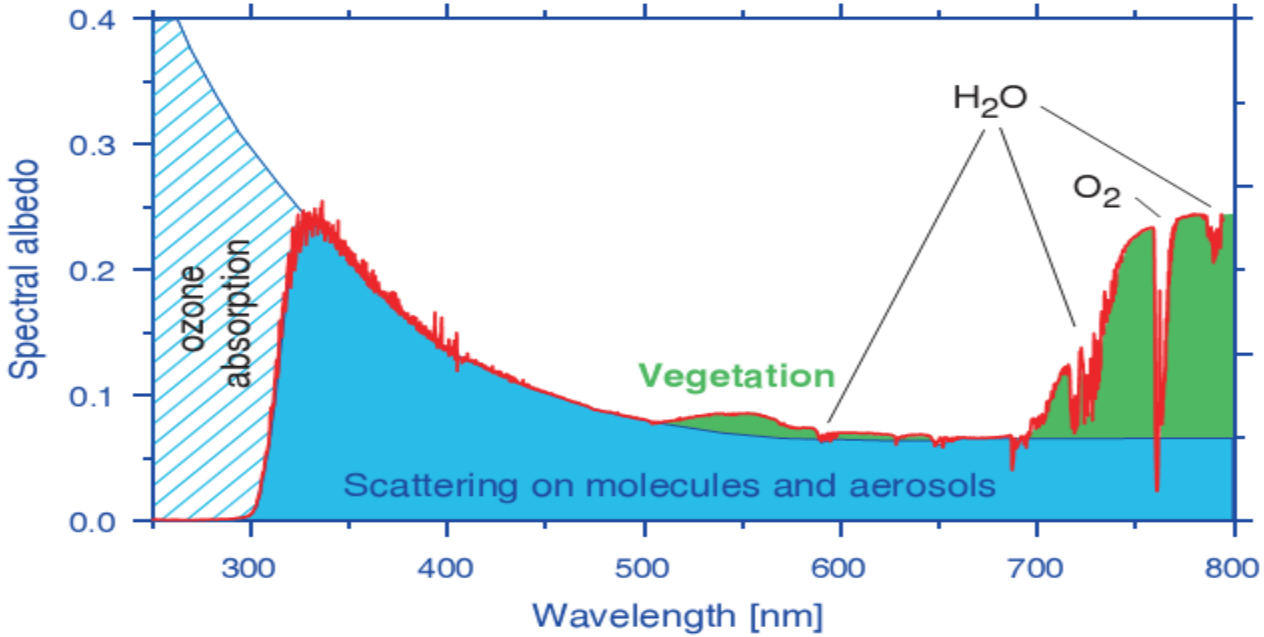
Sonnenspektrum



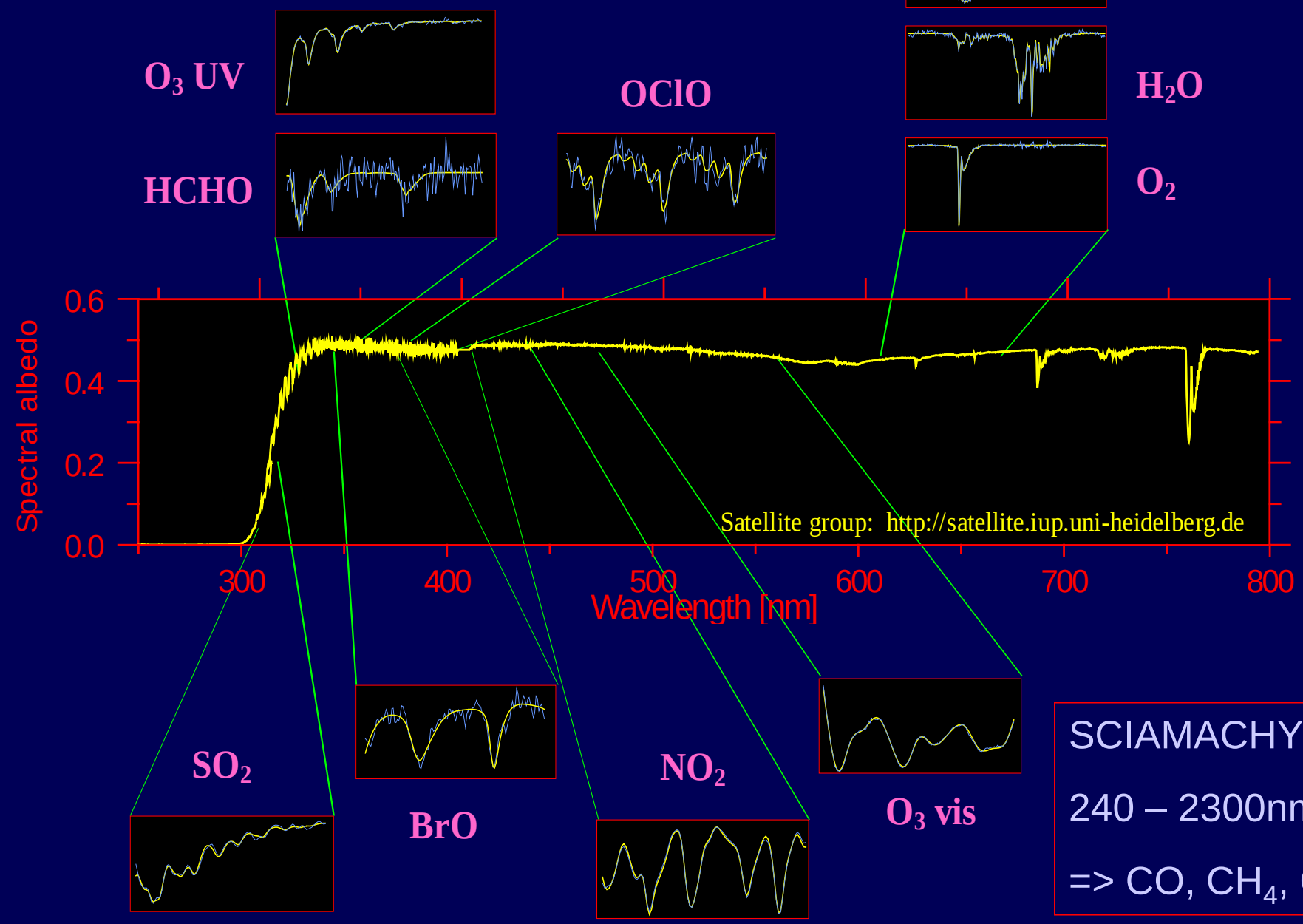
Nadirspektrum



=> Quotienten-spektrum



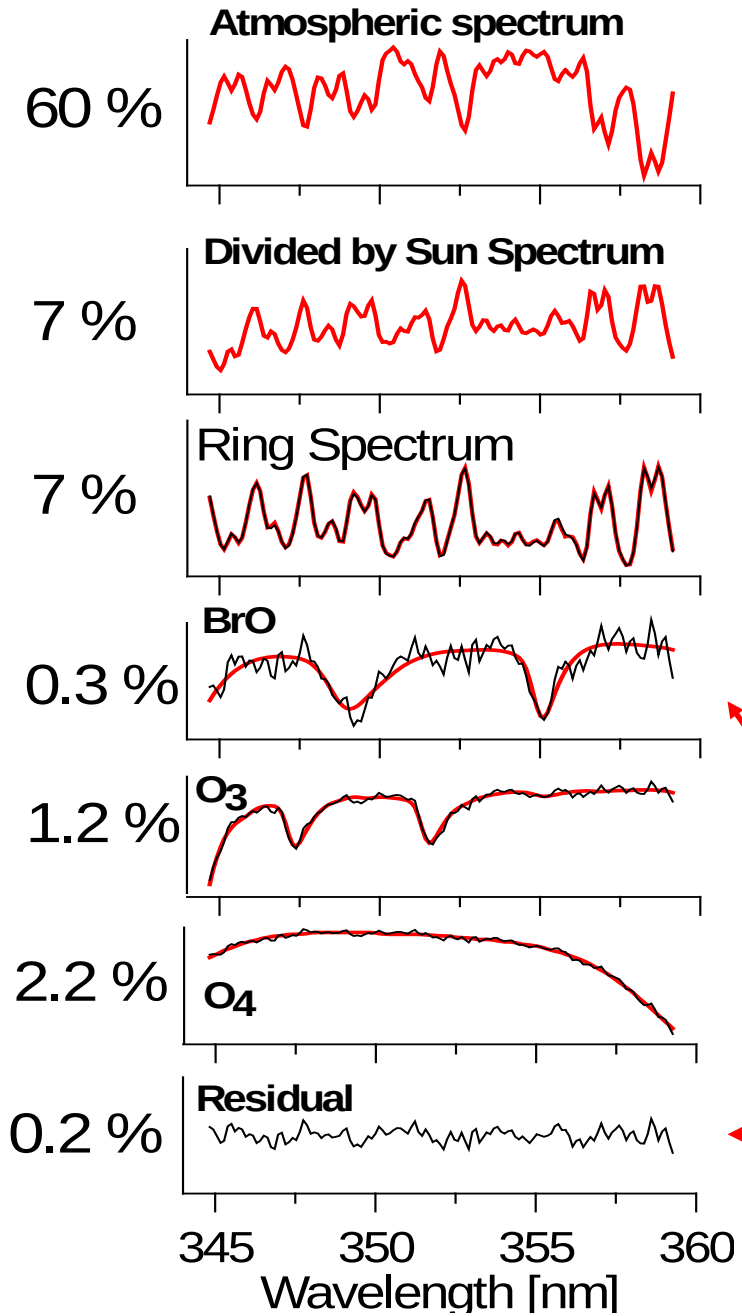
DOAS satellite algorithms developed by Uni Heidelberg during the last 10 years



SCIAMACHY:

240 – 2300nm

=> CO, CH_4, CO_2



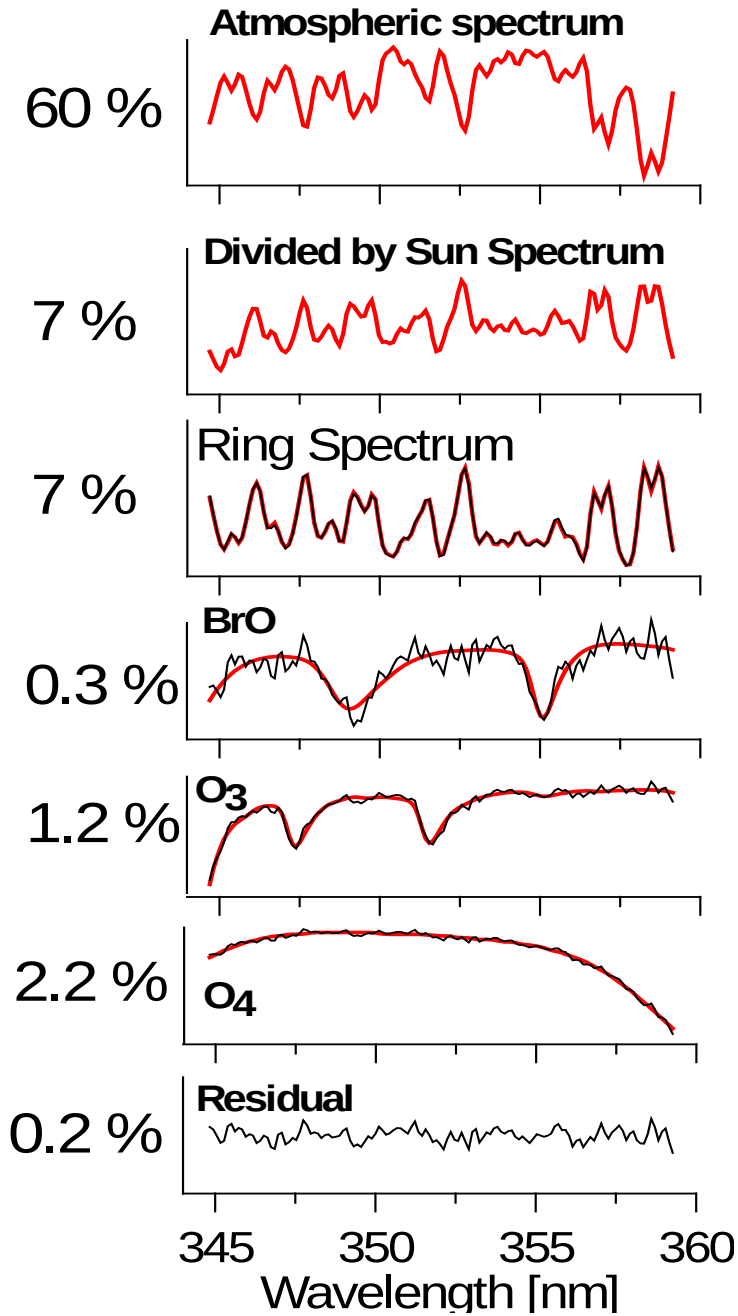
Beispiel einer spektralen Analyse eines Nadirspektrums: verschiedene Referenzspektren werden simultan an das Messspektrum angefittet.

Meist: Minimum least squares fit
z.B. DOAS (Platt & Stutz, 2008, Wagner et al., 2008)

Alternativ: Optimal Estimation, Neuronale Netzwerke

BrO soll ausgewertet werden (sehr kleine Absorption: < 1%)

Reststruktur



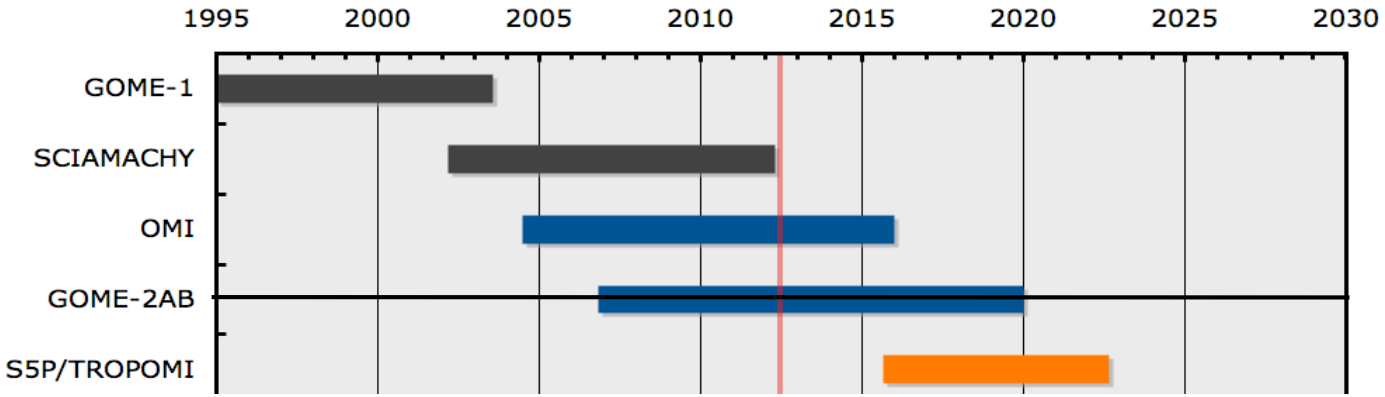
Schwache Absorber (OD<0.001) können nur in kontinuierlichen Spektren nachgewiesen werden

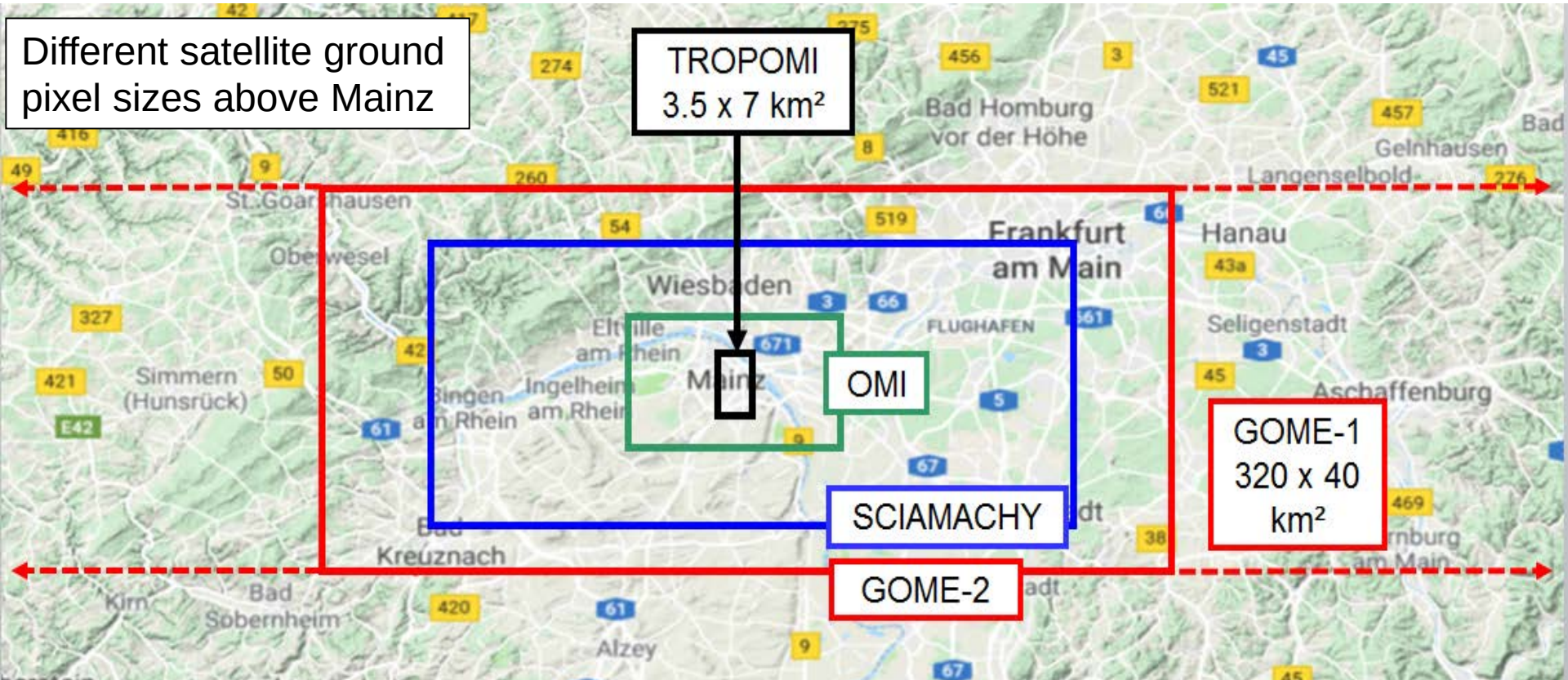
Beispiele: BrO, HCHO, OClO, NO_2, IO, CHOCHO
=> wichtig für Luftqualität, Klima, grundsätzliche atmosphärische Fragestellungen

Die Analysen benötigen hohes Signal-zu-Rausch-Verhältnis (signal to noise ratio):

SNR > 500

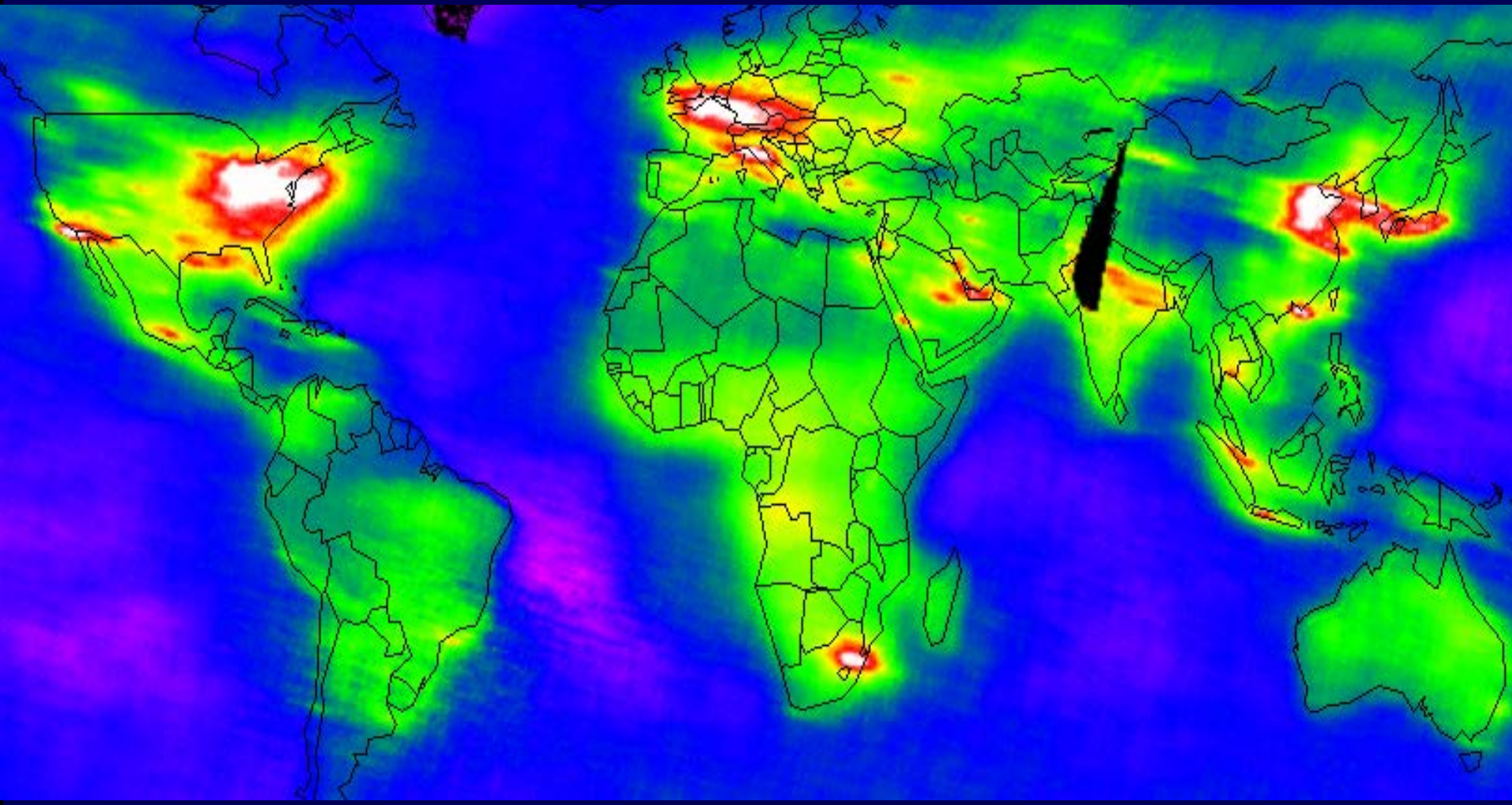
13 October 2017: **TROPOMI** on Sentinel-5P was launched from Plesetsk / northern Russia





One of our first GOME tropospheric NO_2 maps

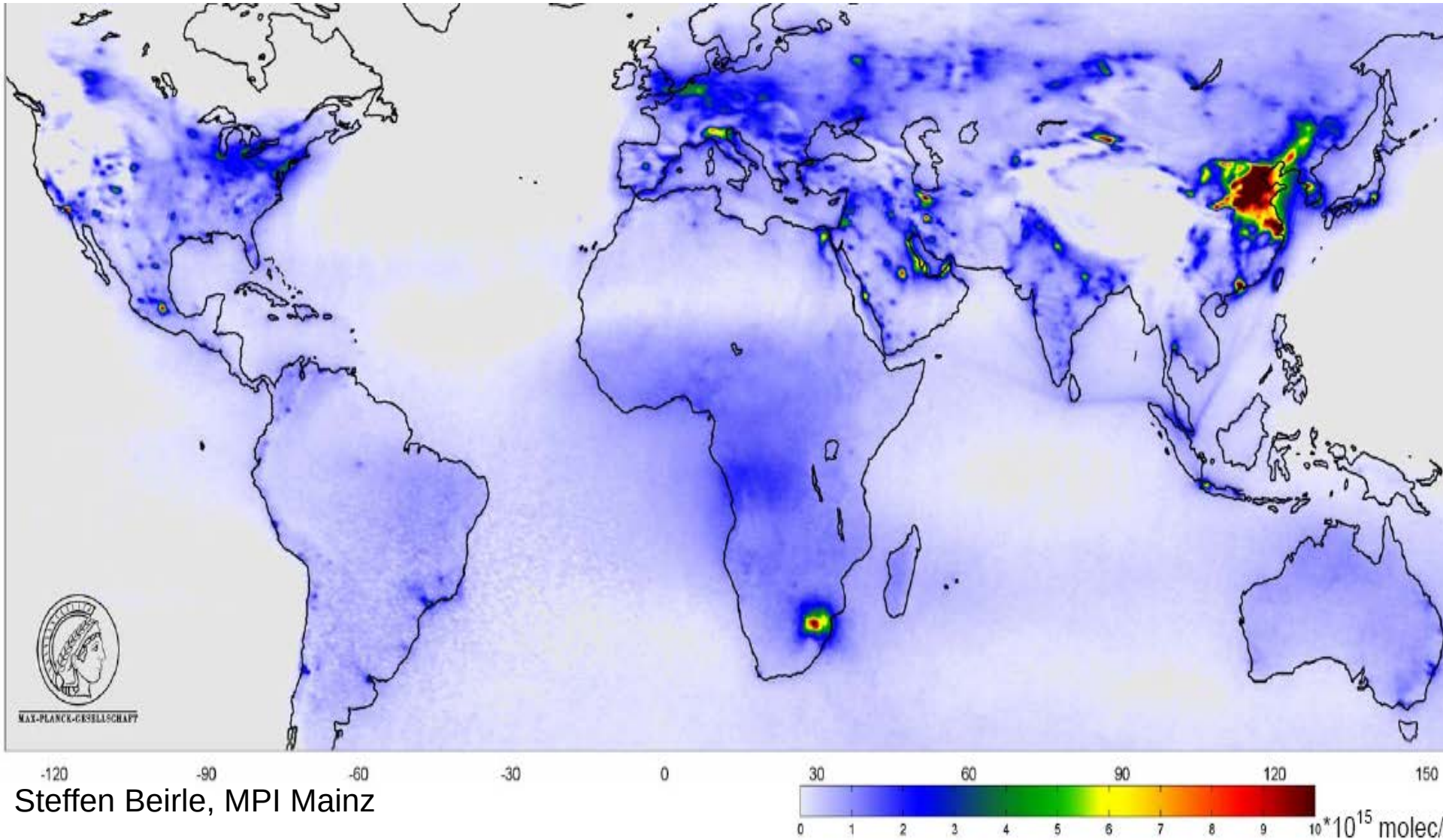
GOME 1996 – 1998 (320 x 40 km²)



Carsten Leue, 1998

Tropospheric NO2 VCD

GOME-2 2007 – 2008 (80 x 40 km²)



Steffen Beirle, MPI Mainz

gure 1: Mean tropospheric NO_2 column density (Sep 2007-Aug 2008) derived from GOME-2 spectra.

TROPOMI – a new era of satellite measurements

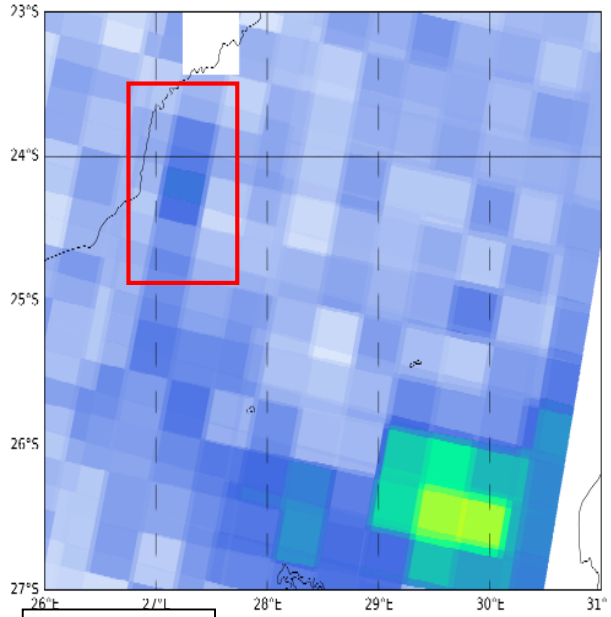
Effect of improved spatial resolution

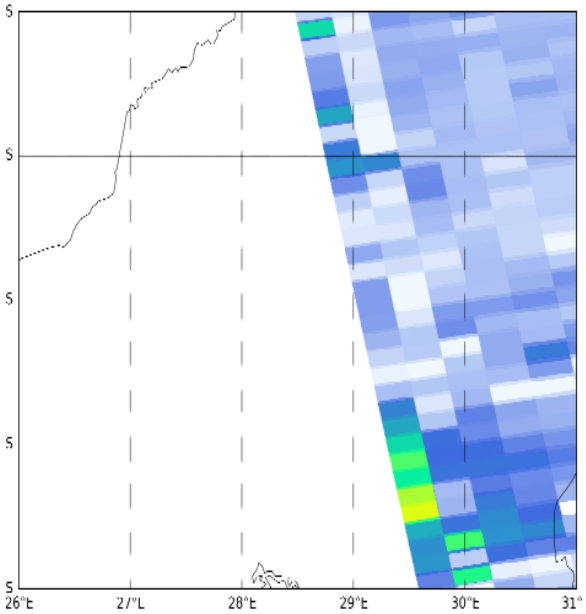
Tropospheric NO_2 over the Highveld, 29.11.2017

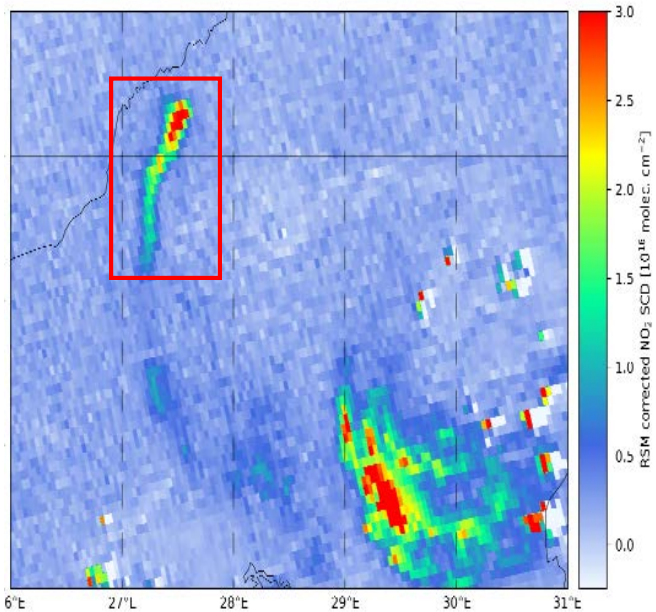
GOME-2
40 x 40 km²

OMI
26 x 13 km²

TROPOMI
3.5 x 7 km²

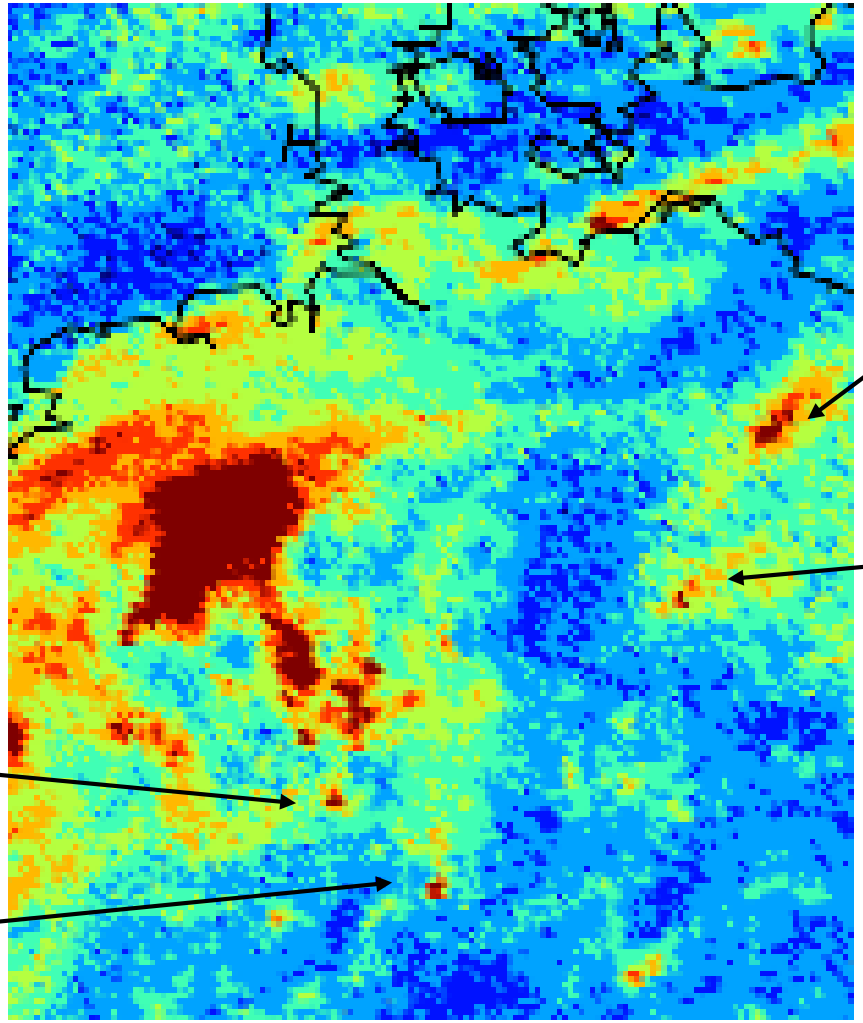






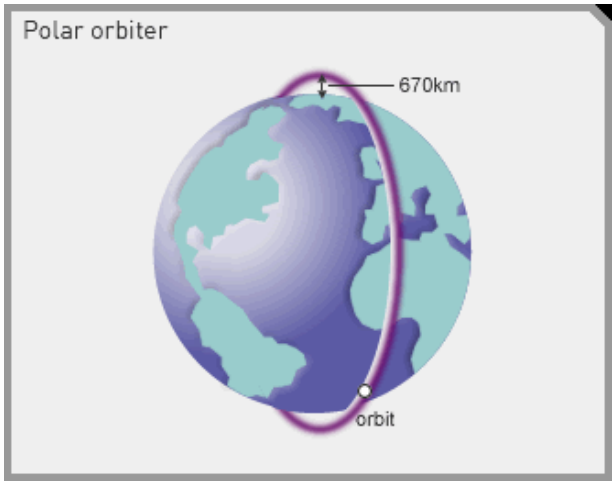
C. Borger
S. Beirle

TROPOMI NO_2 SCD, 28.11.2017



© Christian Borger, MPIC

Satellitenorbits:

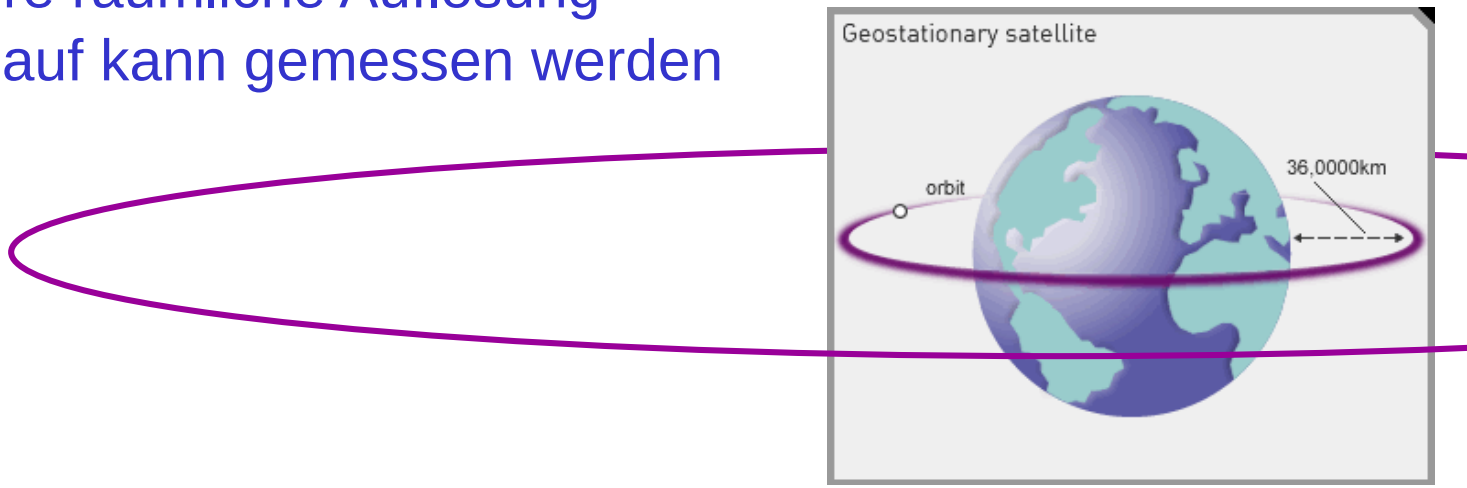


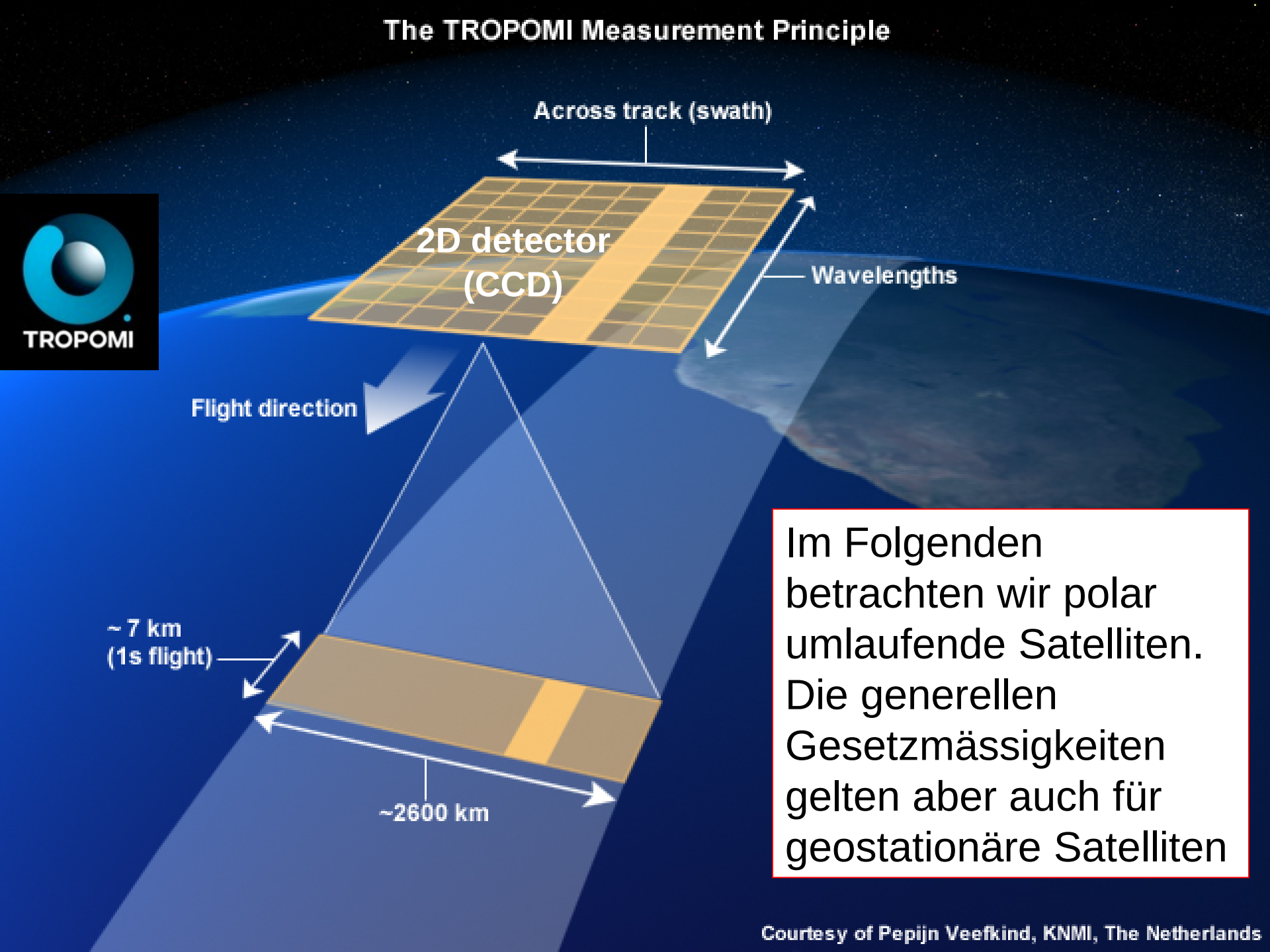
Meist werden niedrige polare Orbits (~800km) verwendet

- 14-15 Orbits pro Tag
- die gesamte Erde kann vermessen werden
- meist Sonnen-synchron
- typische Zeit für globale Abdeckung: 1-6 Tage

Geostationäre Orbits (~36000 km)

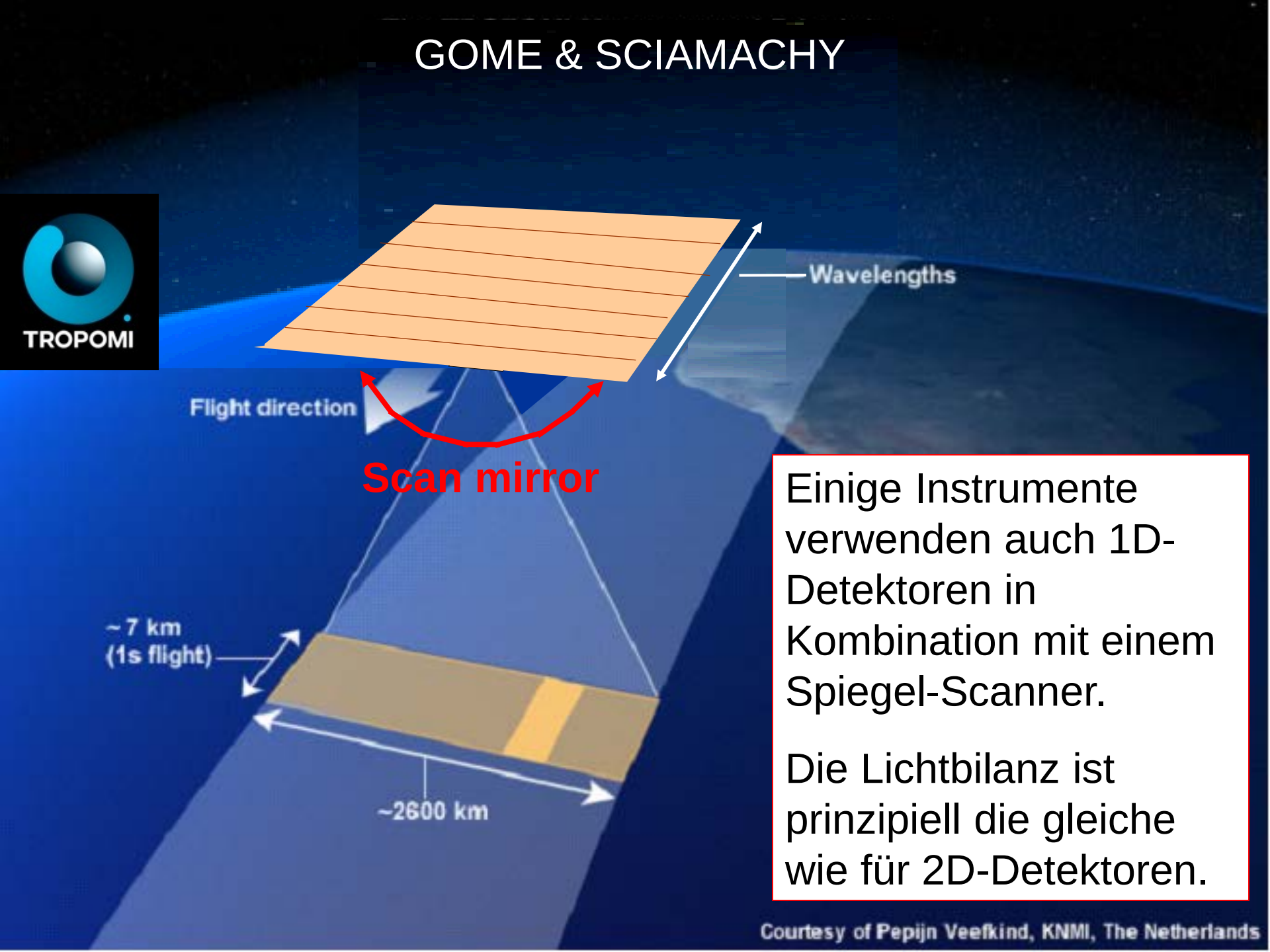
- nur ein Teil der Erde kann vermessen werden
- meist geringere räumliche Auflösung
- der Tagesverlauf kann gemessen werden





Im Folgenden betrachten wir polar umlaufende Satelliten. Die generellen Gesetzmässigkeiten gelten aber auch für geostationäre Satelliten

GOME & SCIAMACHY



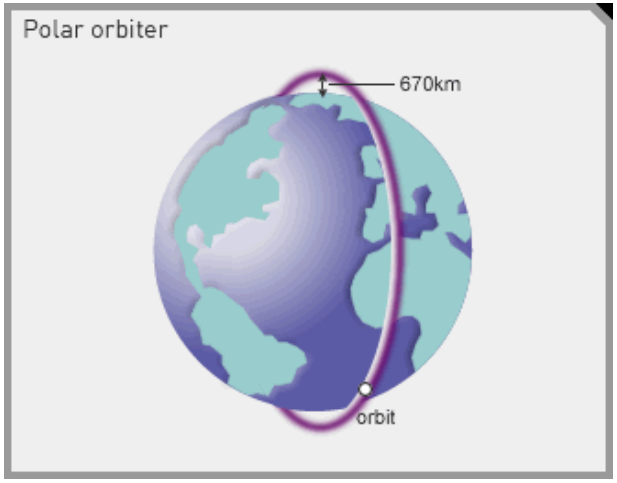
Einige Instrumente verwenden auch 1D-Detektoren in Kombination mit einem Spiegel-Scanner.

Die Lichtbilanz ist prinzipiell die gleiche wie für 2D-Detektoren.

Wichtige Aspekte:

A) räumliche Auflösung in Flugrichtung wird durch Integrationszeit (IT) und Bahngeschwindigkeit (v) bestimmt

-kleinere IT => höhere räumliche Auflösung, aber auch keineres SNR



Für polar umlaufende Satelliten: v = 6.7 km / s

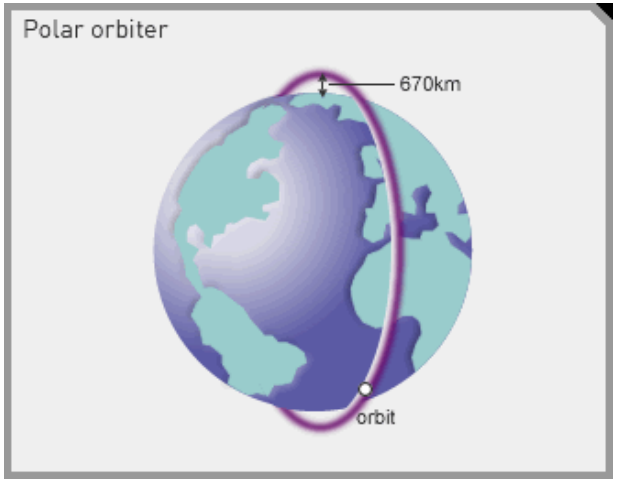
Wichtige Aspekte:

A) räumliche Auflösung in Flugrichtung wird durch Integrationszeit (IT) und Bahngeschwindigkeit (v) bestimmt

-kleinere IT => höhere räumliche Auflösung, aber auch keineres SNR

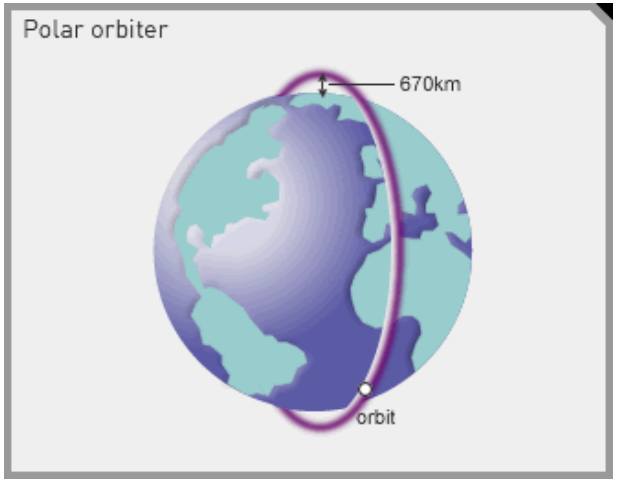
B) räumliche Auflösung quer zur Flugrichtung steht in Konkurrenz zu räumlicher Abdeckung

-um globale Abdeckung pro Tag zu erreichen muss die Breite eines Orbits 2700 km betragen.



Für polar umlaufende Satelliten: v = 6.7 km / s

Wichtige Aspekte:



A) räumliche Auflösung in Flugrichtung wird durch Integrationszeit (IT) und Bahngeschwindigkeit (v) bestimmt

-kleinere IT => höhere räumliche Auflösung, aber auch keineres SNR

Für polar umlaufende Satelliten: v = 6.7 km / s

B) räumliche Auflösung quer zur Flugrichtung steht in Konkurrenz zu räumlicher Abdeckung

-um globale Abdeckung pro Tag zu erreichen muss die Breite eines Orbits 2700 km betragen (=> räumliche Auflösung: ~2x2km²)

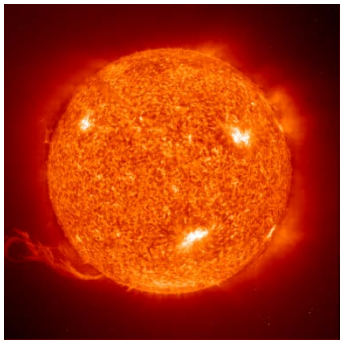
Die Stärke der solaren Einstrahlung stellt für das SNR eine feste Randbedingung dar.

=> Die zeitliche und räumliche Auflösung und Abdeckung können nicht gleichzeitig beliebig optimiert werden

Wie groß ist die solare Einstrahlung auf der Erde?

5800 K

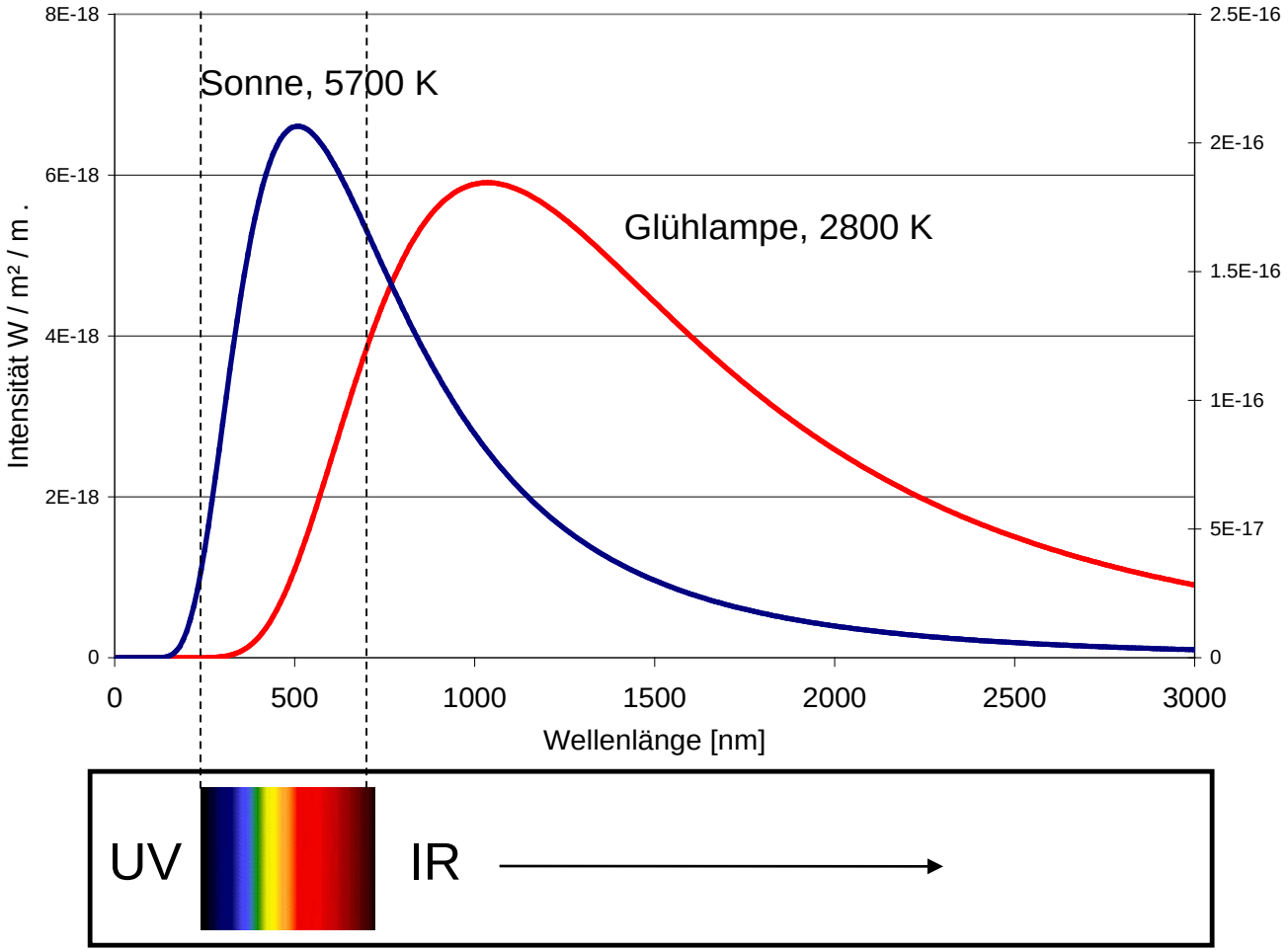
(ca. 5530°C)



2800 K

(ca. 2530°C)

Schwarzkörperstrahlung (Max Planck, 1900)



Wie viele solare Photonen erreichen das Instrument?

Solarkonstante: 1367 W /m²

-an klaren Tagen erreichen etwa 75% die Erdoberfläche: ~1000 W / m²
-an bewölkten Tagen viel weniger: ~500 W / m² oder weniger

Die Energie eines Photons hängt von der Wellenlänge λ ab: $$E = \frac{hc}{\lambda}$$

mit $h = 6.626 \cdot 10^{-34}\ J/s$

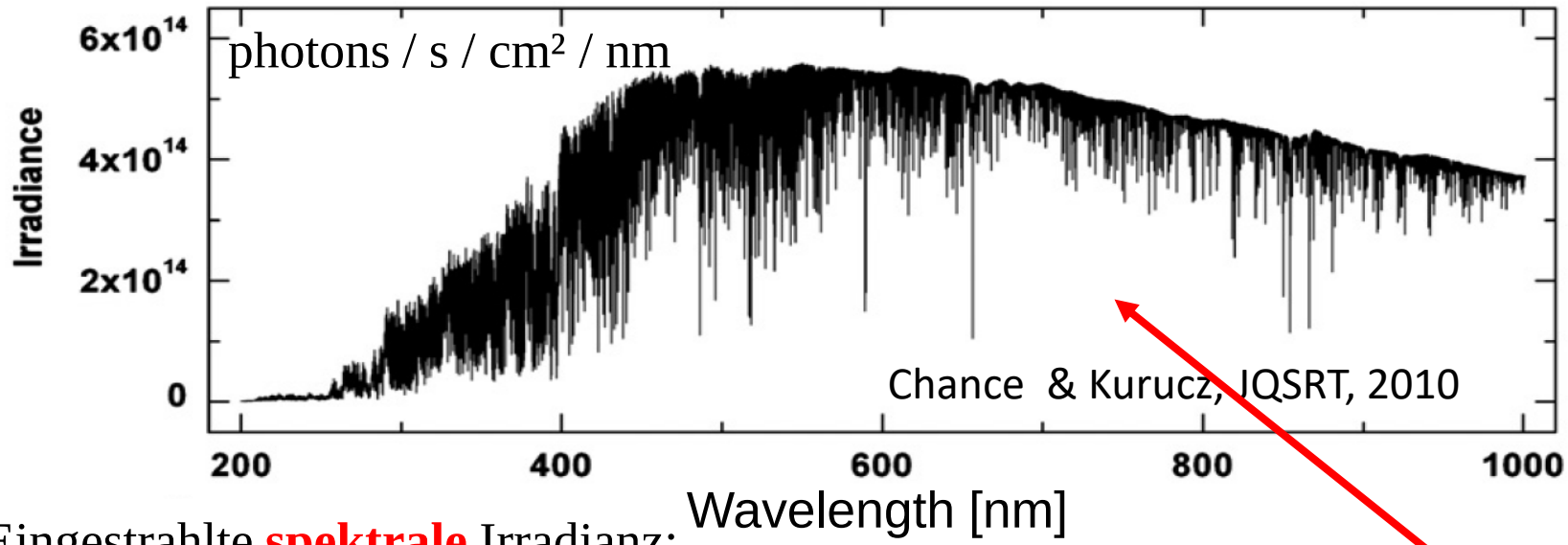
$c = 299\,792\ km / s$

Der Einfachheit halber rechnen wir mit grünen Photonen (λ = 500 nm):

=> 1000 W / m² entsprechen **$2.5 \cdot 10^{21}$ Photonen / s / m²**

(sehr große Zahl!)

Wie viele solare Photonen erreichen das Instrument?



Eingestrahlte **spektrale** Irradianz:

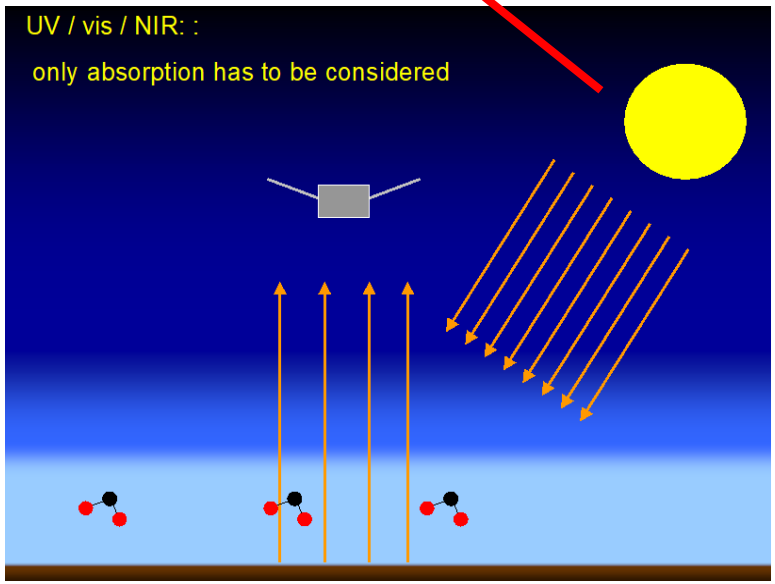
UV (350 nm): ~$1.5*10^{18}$ Photonen / s / m² / nm

Vis (550 nm): ~$5*10^{18}$ Photonen / s / m² / nm

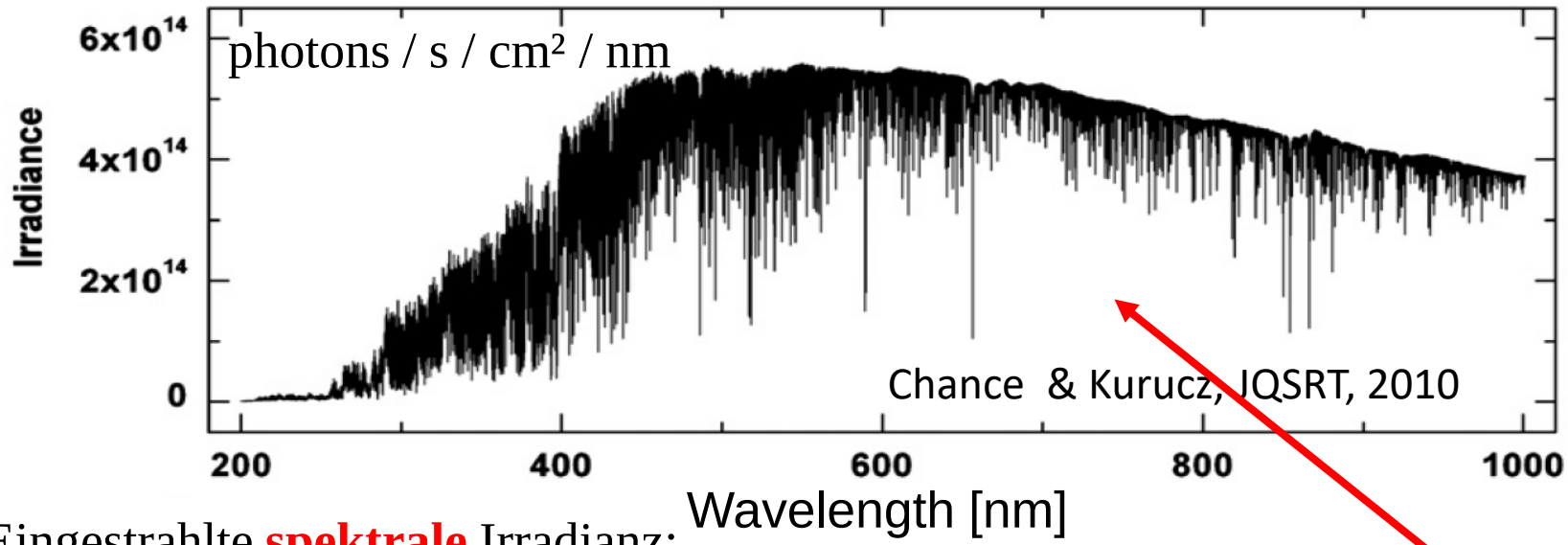
oder:

UV (350 nm): ~$1.5*10^{14}$ Photonen / s / cm² / nm

Vis (550 nm): ~$5*10^{14}$ Photonen / s / cm² / nm



Wie viele solare Photonen erreichen das Instrument?

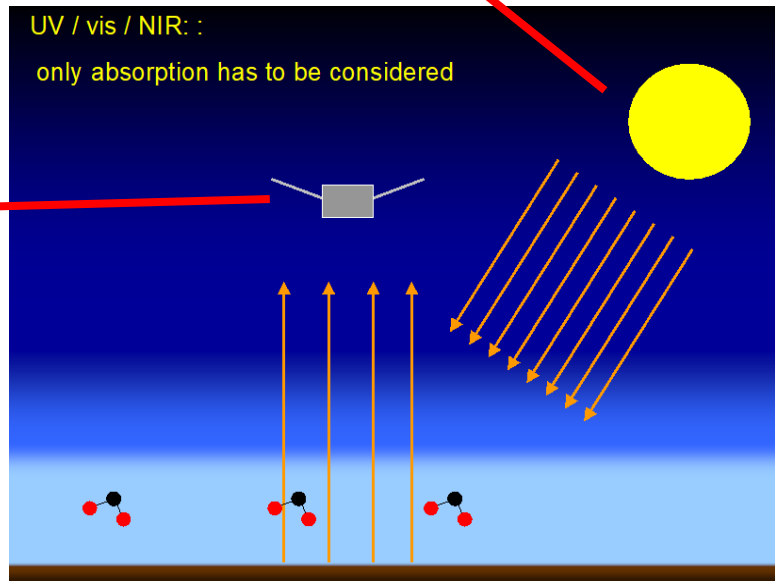


Eingestrahlte **spektrale** Irradianz:

UV (350 nm): ~$1.5*10^{14}$ Photonen / s / cm² / nm

Vis (550 nm): ~$5*10^{14}$ Photonen / s / cm² / nm

Radianz (R): $$R = I * \frac{A}{3.14}$$



A: Bodenalbedo (typischer Wert: 0.1)

UV (350 nm): ~$5*10^{12}$ Photonen/s / cm² / nm / **sr**

Vis (550 nm): ~$1.5*10^{13}$ Photonen/s / cm² / nm /**sr**

=> Wieviele davon erreichen das Instrument?

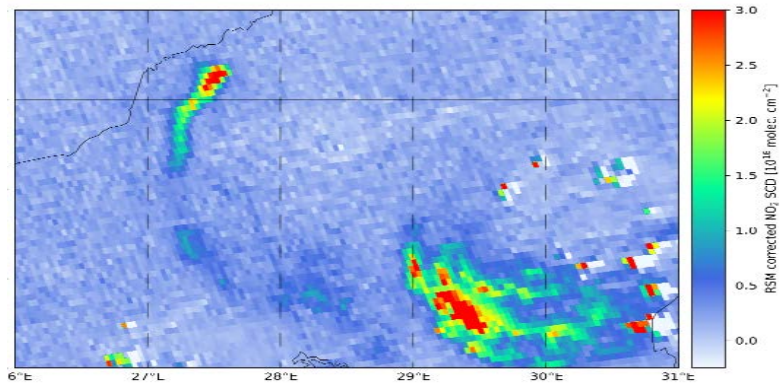
Examples: MODIS and TROPOMI

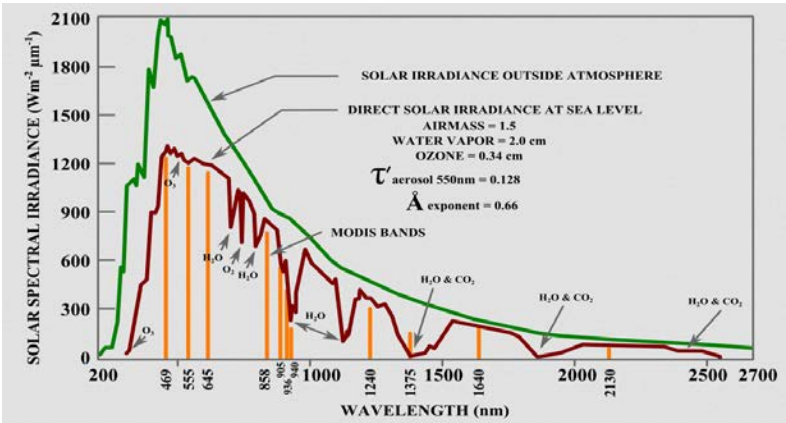
-2000 to present
-36 spectral bands
-spatial resolution (∅): 0.25-1 km
-swath: 2330 km
-global coverage: 1-2 days

~ factor 100

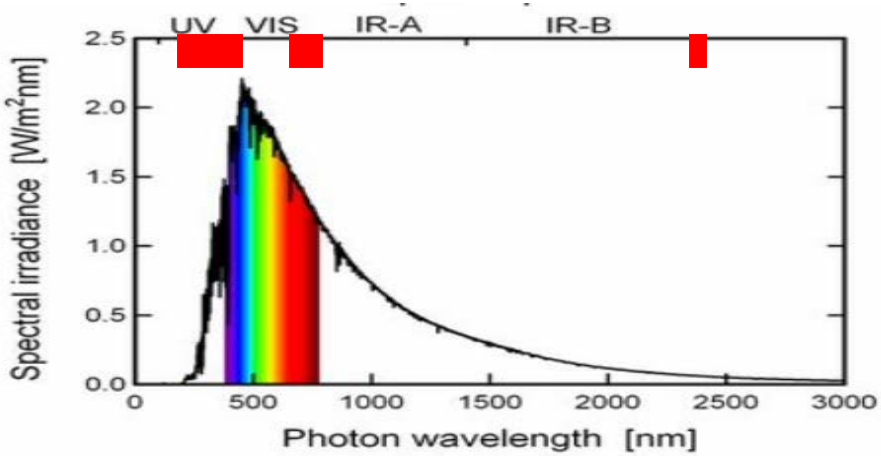
~ factor 100

2018 to present
-3000 spectral pixels
-spatial resolution: 3.5 x 7 km²
-swath: 2600 km
-global coverage: 1 day





© Wikipedia



Wie viele solare Photonen erreichen das Instrument?

Berechnung für die Eigenschaften des **TROPOMI** instruments:

$$R_{SAT} = R \cdot t \cdot a \cdot \alpha \cdot \Delta\lambda \cdot T$$

t: Integrationszeit: 0.53s
a: Öffnung des Teleskops: 0.24 cm²
α: Öffnungswinkel des Teleskops: 3.8e-5 *sr* (3.5*7 km² am Boden)
$\Delta\lambda$: Wellenlängenintervall eines Detektorpixels (UV: 0.07, vis: 0.2nm)
T: Gesamttransmission des Instruments: ~0.2

=> R_{SAT}:

UV (350 nm): ~$3.5*10^5$ Photonen
Vis (550 nm): ~$3*10^6$ Photonen

Signal to noise ratio (SNR) = $\sqrt{R_{SAT}}$

UV (350 nm): ~ **600**
Vis (550 nm): ~**1700**

Mindestanforderung für die Analyse schwacher Absorber: ~500

Wie viele solare Photonen erreichen das Instrument?

Berechnung für die Eigenschaften des **MODIS** instruments:

$$R_{SAT} = R \cdot t \cdot a \cdot \alpha \cdot \Delta\lambda \cdot T$$

In den roten Kästen:
Werte für TROPOMI

t: Integrationszeit: 0.00033s 0.53s

a: Öffnung des Teleskops : 55.9 cm² 0.24 cm²

α: Öffnungswinkel des Teleskops: 3.9 *10^{-7} *sr* (0.5*0.5km² am Boden)

$\Delta\lambda$: Wellenlängenintervall eines Detektorpixels: 20 nm 3.8e-5 sr

T: Gesamttransmission des Instruments: ~0.2 0.07 – 0.2 nm

=> R_{SAT}:

Vis (550 nm): ~4.3*10^4 Photonen

Signal to noise ratio (SNR) = $\sqrt{R_{SAT}}$

Vis (550 nm): ~**200**

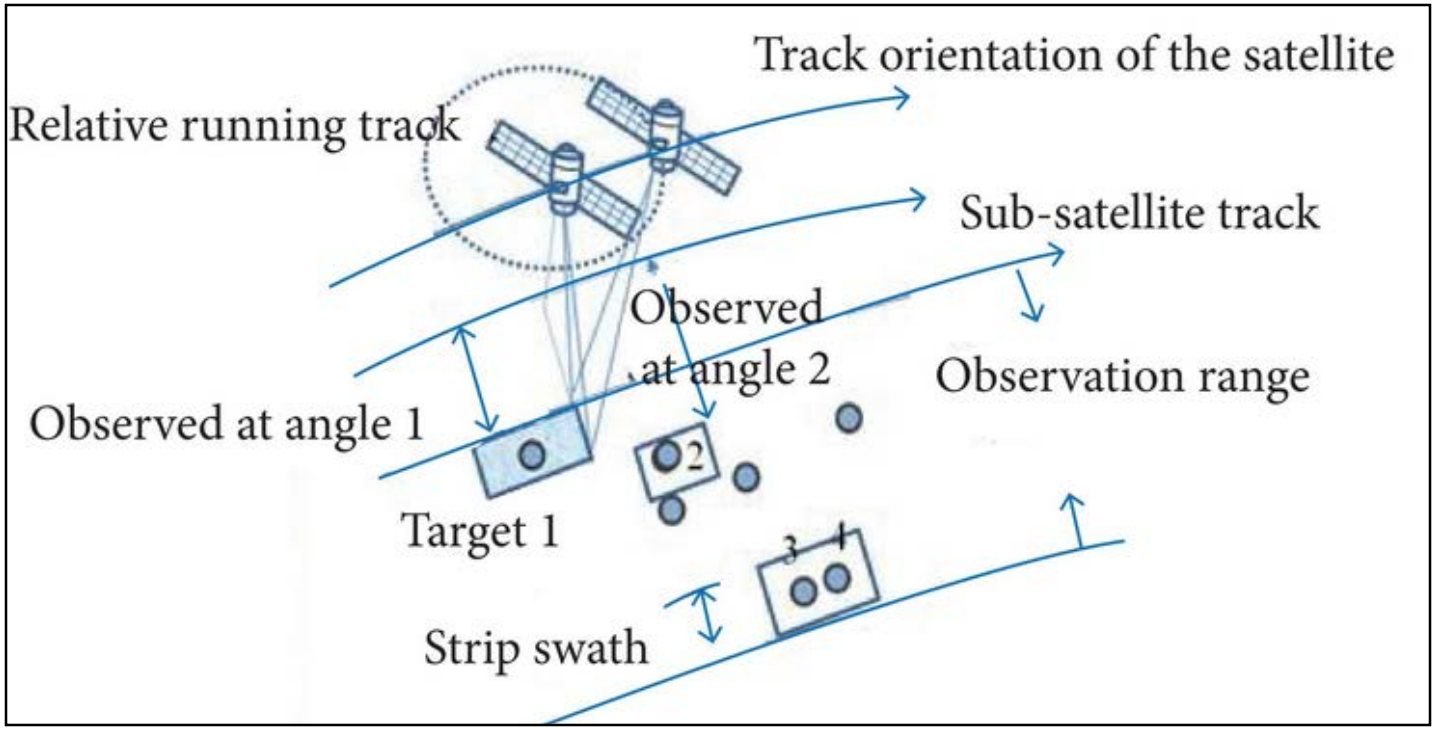
Mindestanforderung für die Analyse von Aerosolen: ~50

Wie kann die räumliche Auflösung und/oder Überdeckung für spektral auflösende Instrumente verbessert werden?

-Verkleinerung der räumlichen Abdeckung
-Vergrößerung der Detektorfläche (oder mehr Instrumente)
-Begrenzung auf ausgewählte Regionen

Begrenzung auf ausgewählte Regionen

- geostationäre Satelliten
- flexibles Pointing (z.B. mit 2D-scanning mirror)
- hohe Aufösung über Städten, Kraftwerken, etc.
- Auswahl von unbewölkten Szenen



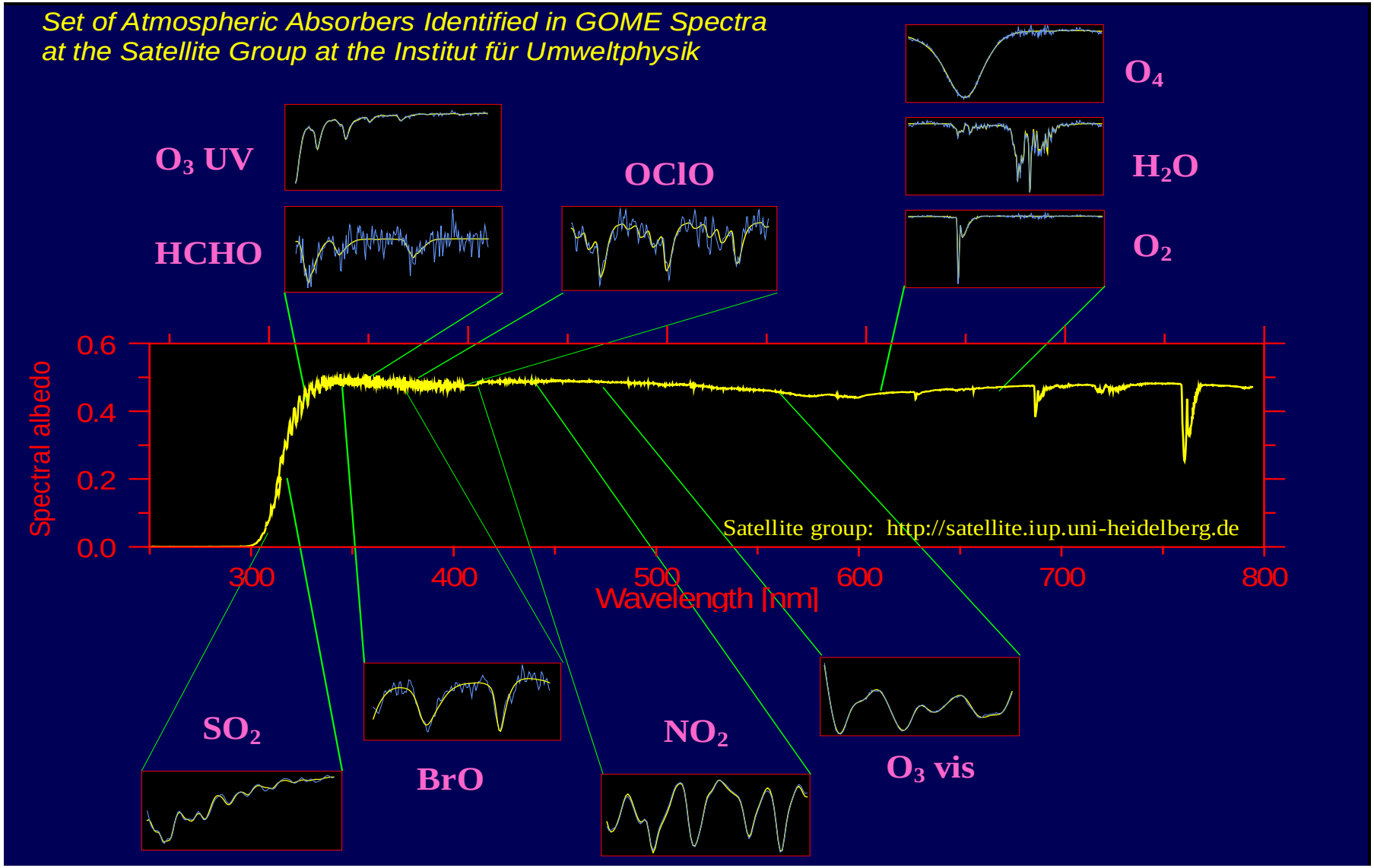
http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2175-91462016000400451

Wie kann die räumliche Auflösung und/oder Überdeckung für spektral auflösende Instrumente verbessert werden?

-Verkleinerung der räumlichen Abdeckung
-Vergrößerung der Detektorfläche (oder mehr Instrumente)
-Begrenzung auf ausgewählte Regionen

- Verkleinerung des Spektralbereichs (optimiert für ausgewählte Spurengase)

=> Spezielle Instrumente für verschiedene Spurenstoffe



Wie kann die räumliche Auflösung und/oder Überdeckung für spektral auflösende Instrumente verbessert werden?

-Verkleinerung der räumlichen Abdeckung
-Vergrößerung der Detektorfläche (oder mehr Instrumente)
-Begrenzung auf ausgewählte Regionen

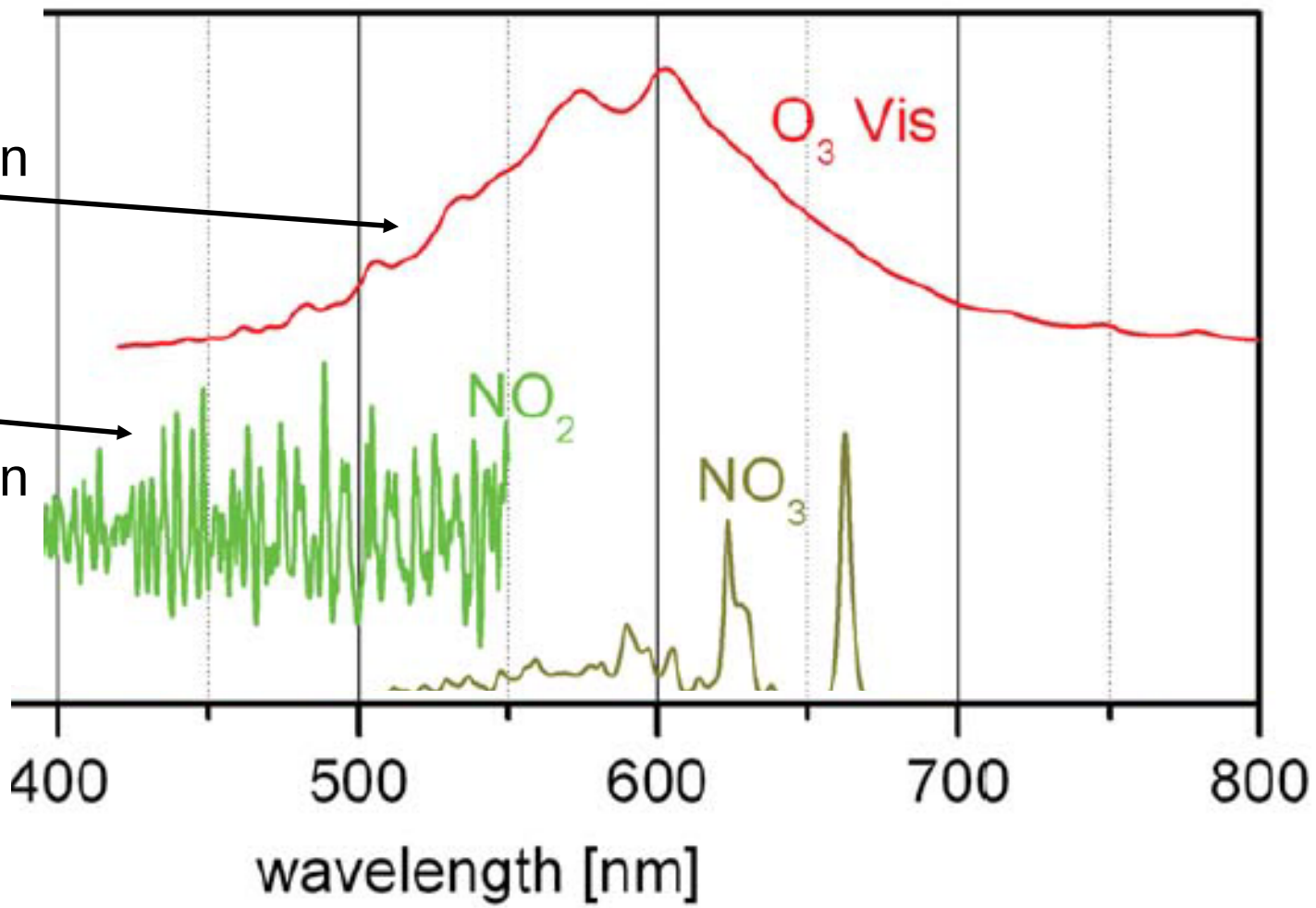
- Verkleinerung des Spektralbereichs (optimiert für ausgewählte Spurengase)

-Verminderung der spektralen Auflösung (je nach Spurengas)

Für Ozon wird eine sehr viel geringere spektrale Auflösung benötigt als für NO_2.

For O_3 low spectral resolution is sufficient

For NO_2 high spectral resolution is required



Wie kann die räumliche Auflösung und/oder Überdeckung für spektral auflösende Instrumente verbessert werden?

-Verkleinerung der räumlichen Abdeckung
-Vergrößerung der Detektorfläche (oder mehr Instrumente)
-Begrenzung auf ausgewählte Regionen

- Verkleinerung des Spektralbereichs (optimiert für ausgewählte Spurengase)

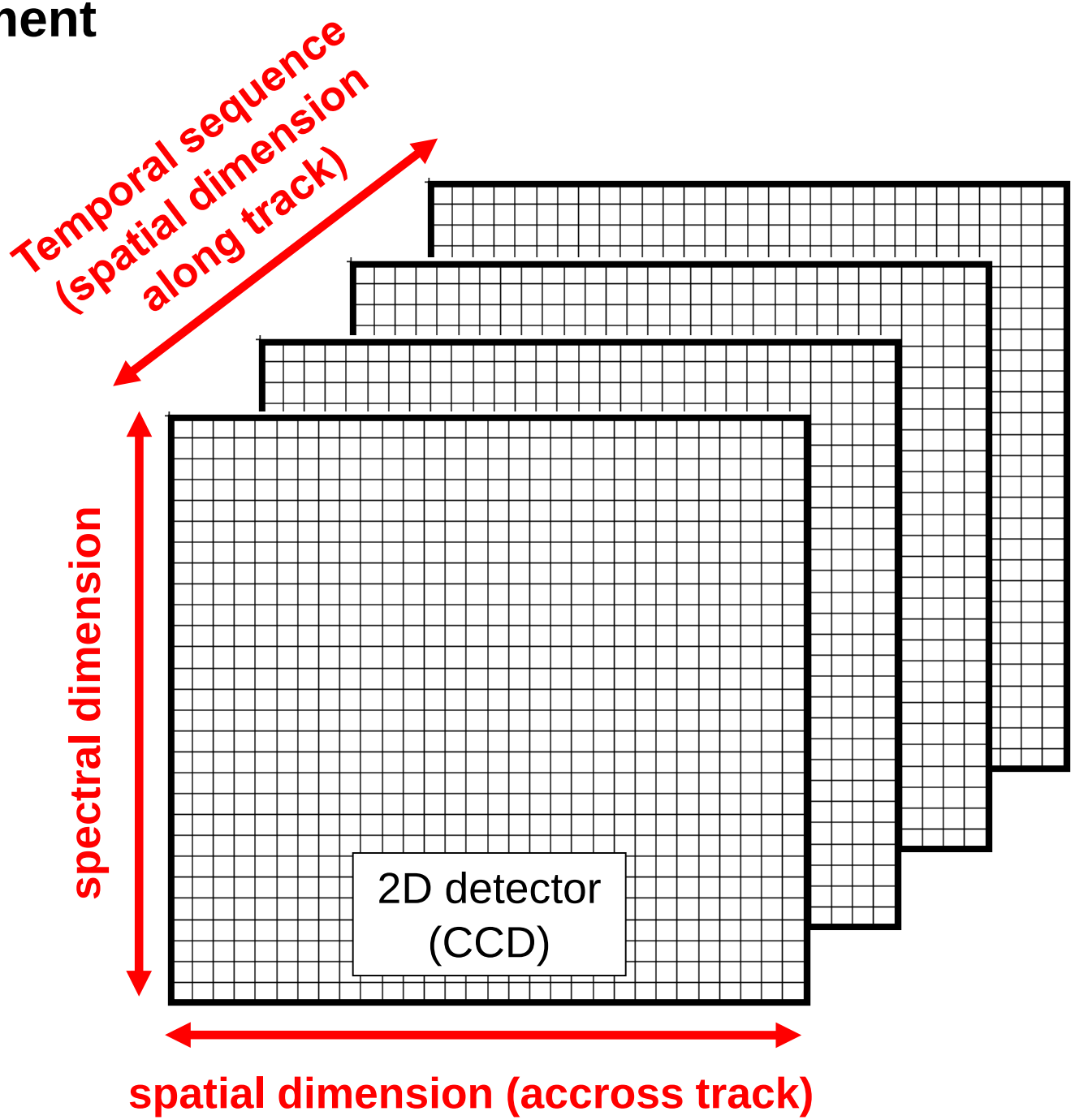
-Verminderung der spektralen Auflösung (je nach Spurengas)

Oder einfach das ‚**Ideale Instrument**‘:
Detektorpixel (2D) beliebig klein und Auslesezeit => 0

=> Photonen werden zunächst mit hoher spektraler, räumlicher und zeitlicher Auflösung gemessen.
=> Je nach Spurenstoff (benötigtes SNR und atmosphärische Variabilität) wird entsprechende spektrale, räumliche und zeitliche Auflösung gewählt.

Das ideale Instrument

Hohe spektrale, räumliche und zeitliche Auflösung

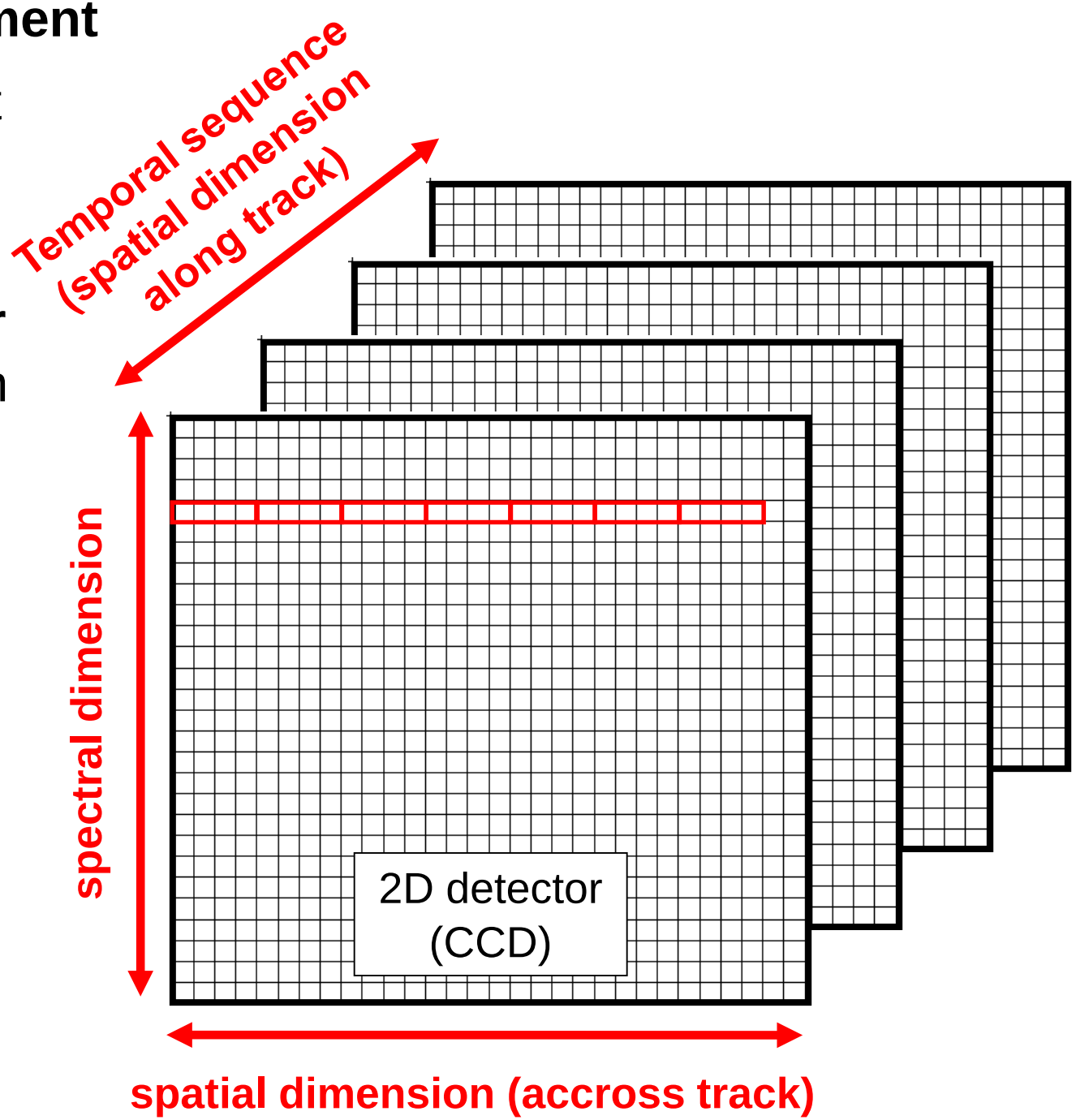


Das ideale Instrument

A) Spurenstoffe mit kleinen räumlichen Gradienten:

Pixel in **räumlicher Dimension** können aufaddiert werden

=> höheres SNR, aber schlechetere räumliche Auflösung



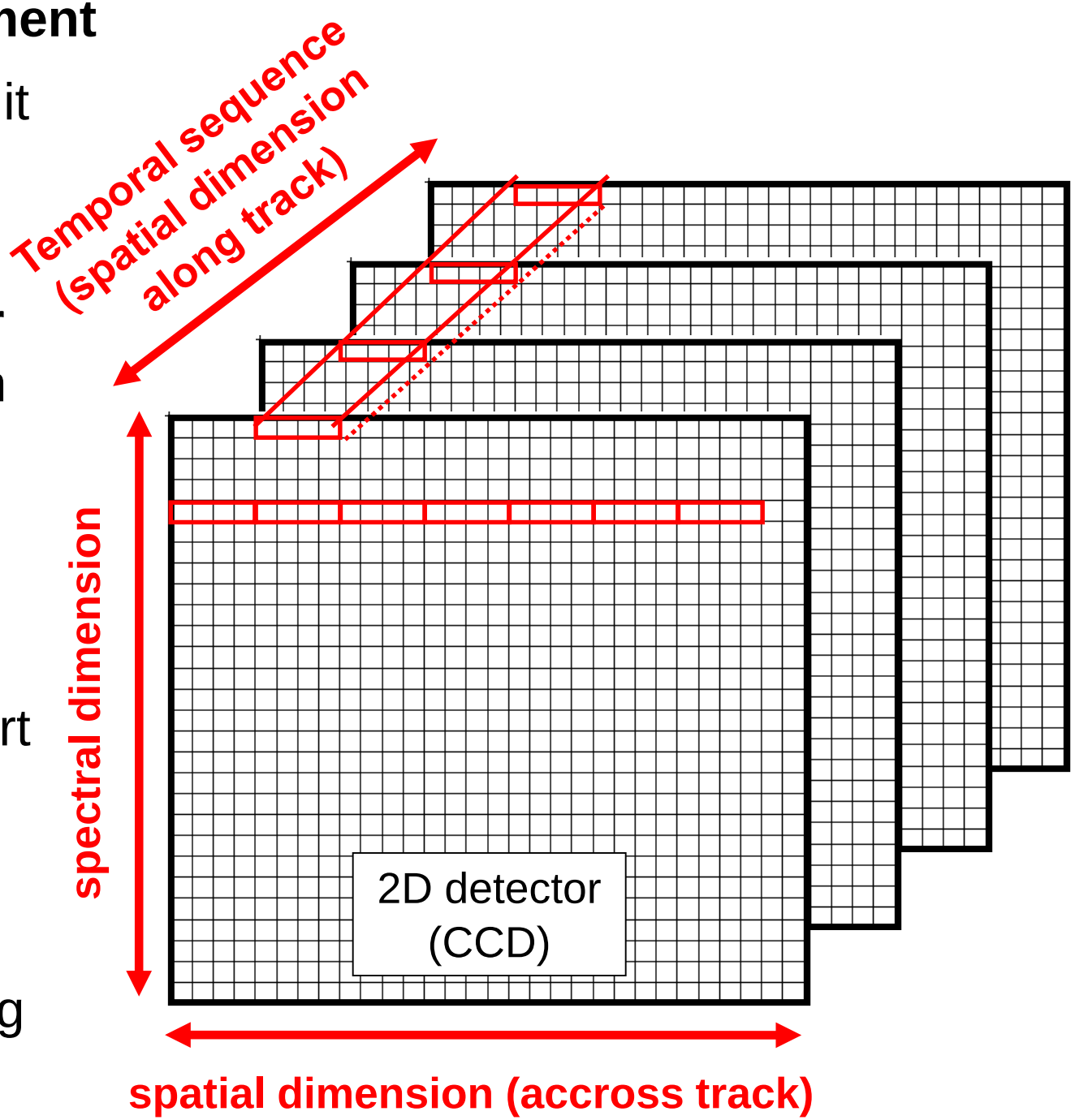
Das ideale Instrument

A2) Spurenstoffe mit kleinen räumlichen Gradienten:

Pixel in **räumlicher Dimension** können aufaddiert werden

Zusätzlich können auch aufeinander-folgende Belichtungen addiert werden

=> höheres SNR, aber schlechetere räumliche Auflösung

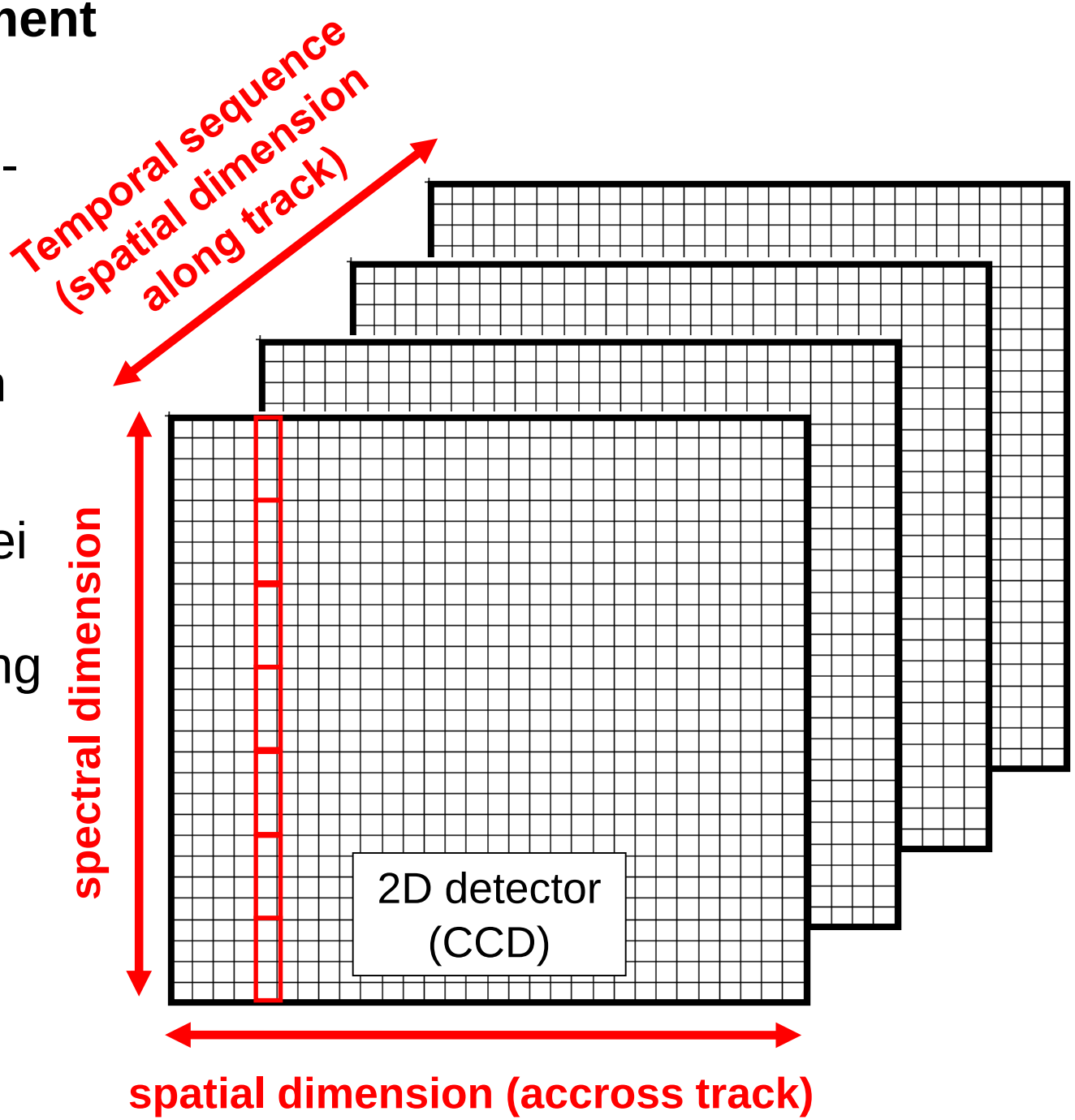


Das ideale Instrument

B) Spurenstoffe mit breiten Absorptions-strukturen:

Pixel in **spektraler Dimension** können aufaddiert werden

=> höheres SNR bei gleichbleibender räumlicher Auflösung



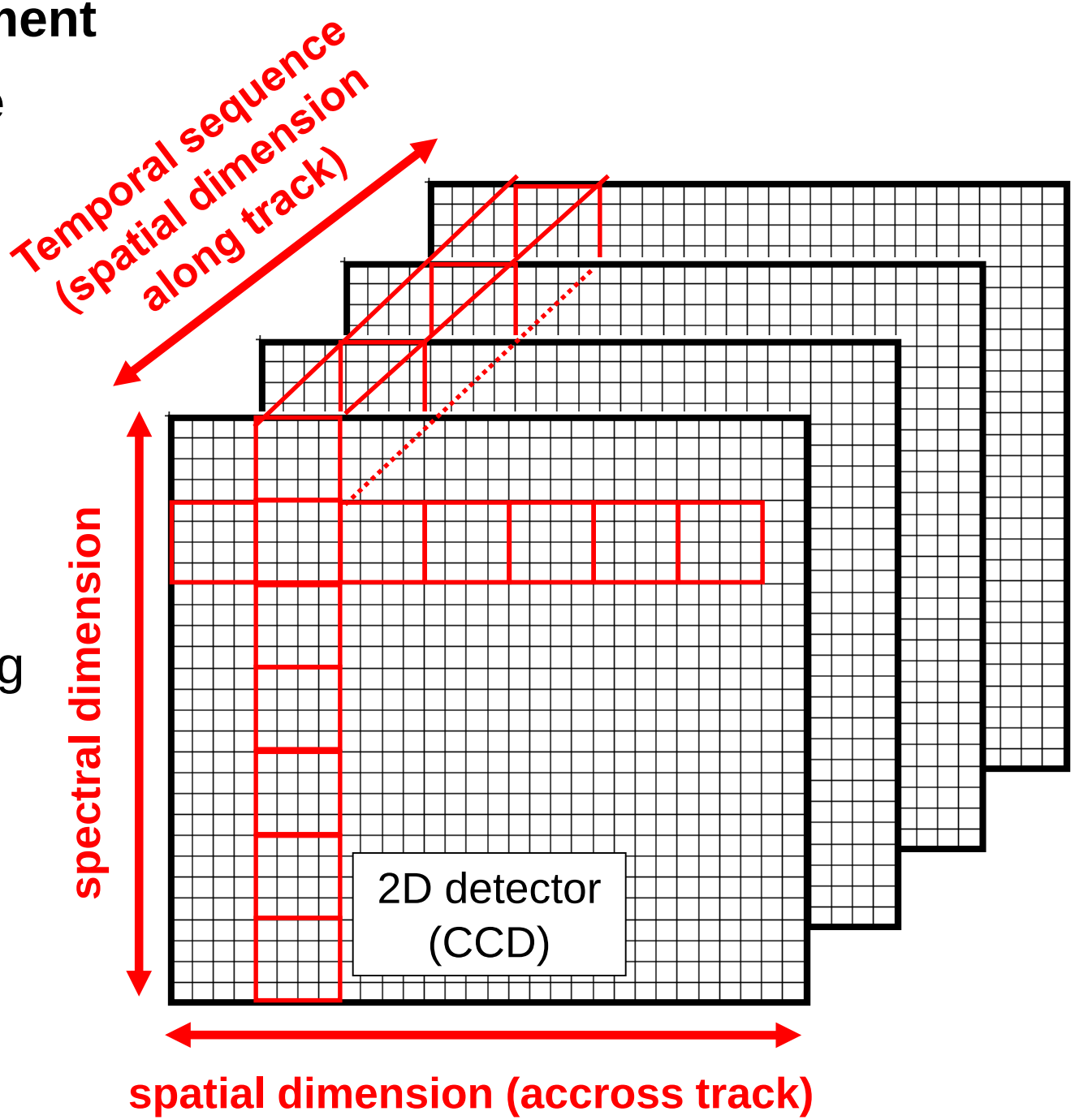
Das ideale Instrument

C) **Sehr schwache Absorber:**

Pixel in **allen 3 Dimensionen** können aufaddiert werden

=> höheres SNR aber schlechtere räumliche Auflösung

Die gleichen Messdaten können je nach Absorber und Fragestellung unterschiedlich aufaddiert werden.



Welche weiteren Möglichkeiten gibt es, um die räumliche und zeitliche Auflösung und / oder Überdeckung für spektral auflösende Instrumente zu verbessern?

z.B.

- Neuronale Netzwerke
- Datenassimilation

- was noch?

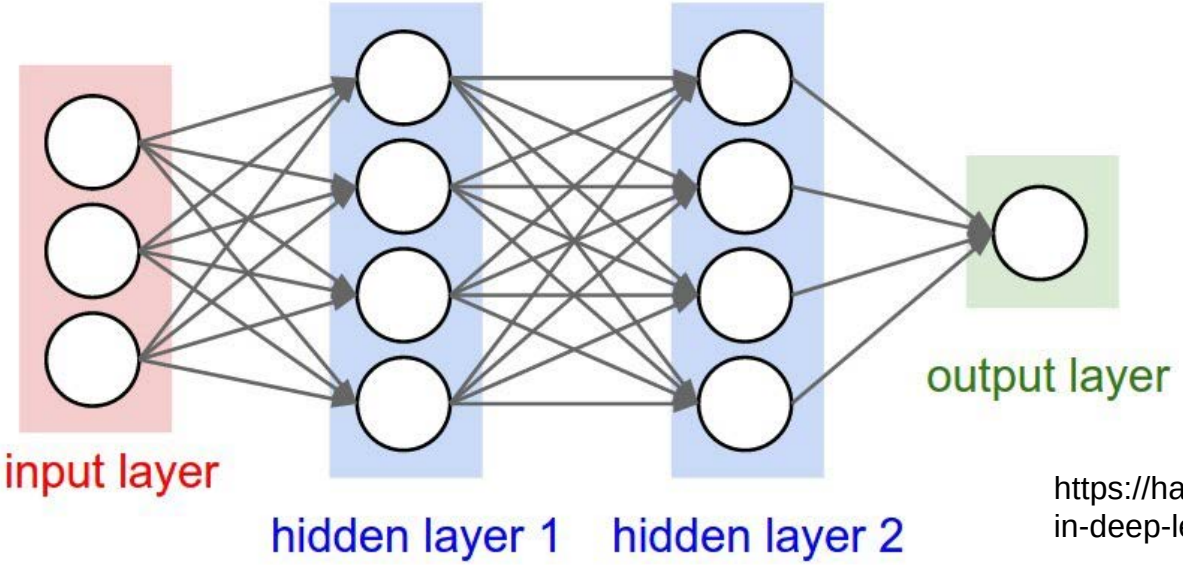
Neuronale Netzwerke

- müssen trainiert werden (z.B. mit geophysikalischen Daten oder aufwendigen Simulationen)

- können sehr gute Ergebnisse erzielen, wenn ‚voll physikalische Auswertungen' nicht möglich sind, z.B. bei unzureichendem Verständnis eines physikalischen Prozesses.

- können die Analysegeschwindigkeit erhöhen

- versagen bei Signalen ausserhalb der Abdeckung des Trainings (z.B. Instrumentedegradierung)



https://hackernoon.com/challenges-in-deep-learning-57bbf6e73bb

A) Fälle, bei denen ‚voll physikalische' Auswertungen' nicht möglich sind: Auswertung von troposphärischem Ozon

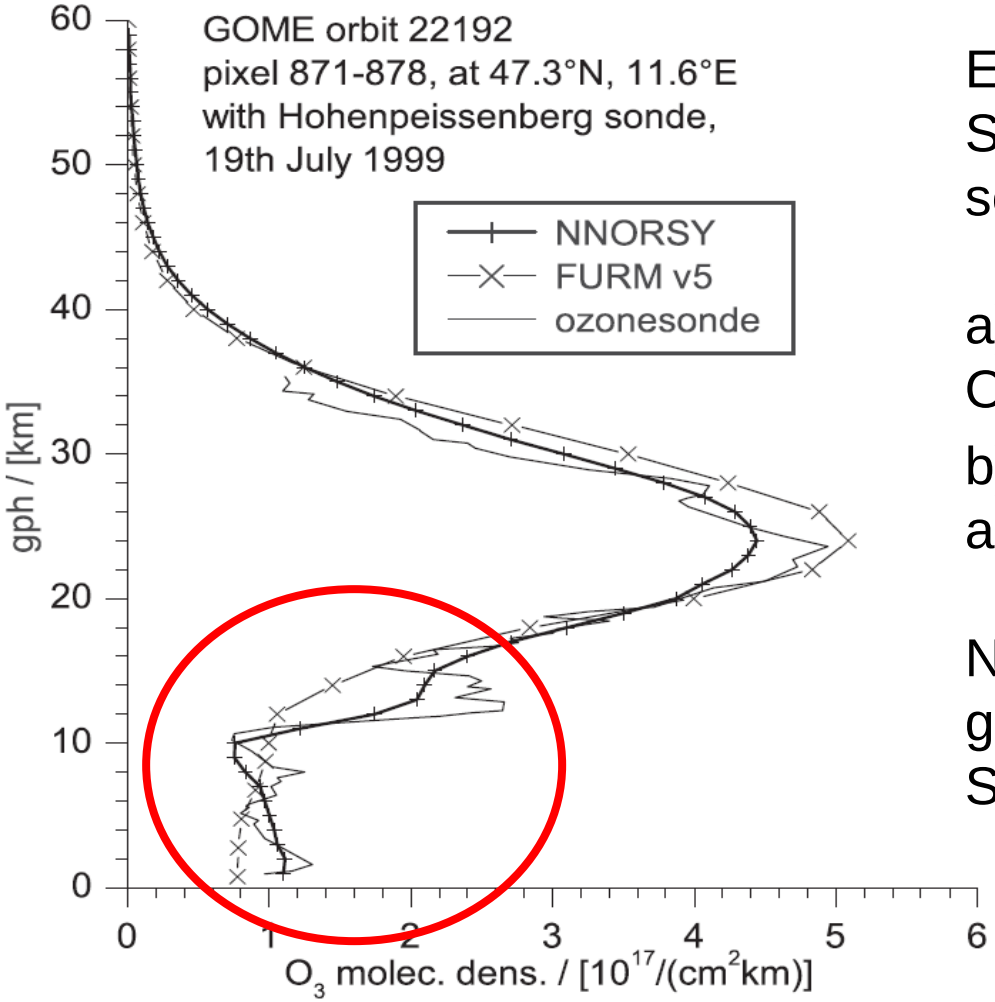


Figure 4. Example profile comparison with FURM retrieval and ozonesonde.

Müller et al., J. Geophys. Res., 2003.

Eine solche Auswertung aus Satelliten-Nadir-Messungen ist sehr schwierig, da:

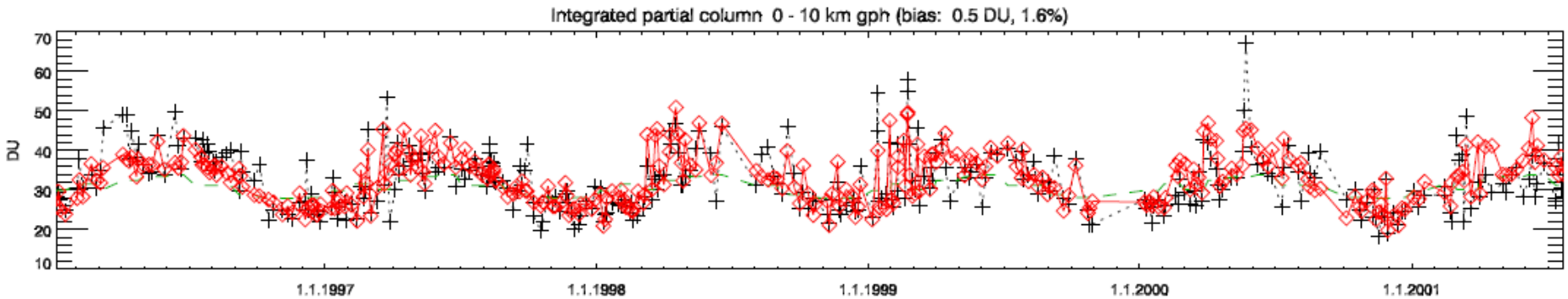
a) 90% des atmosphärischen Ozons in der Stratosphäre ist

b) Wolken das Ozon darunter abschirmt

Neuronale Netzwerke werden mit geophysikalischen Daten (Ozon-Sonden) trainiert

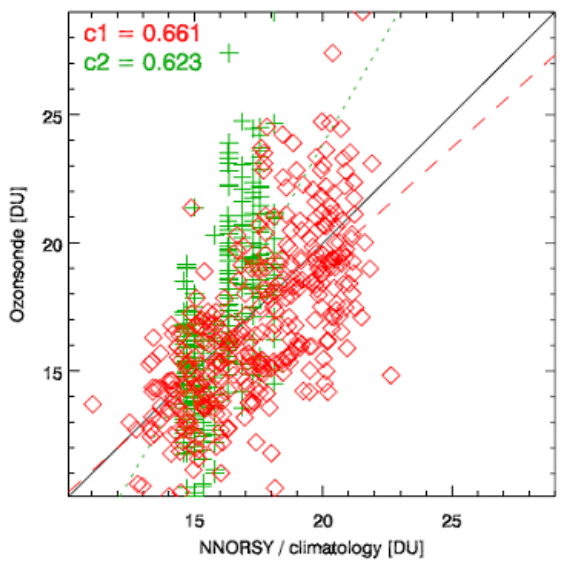
Bestimmung der troposphärischen Ozonsäule (0 – 10 km, rote Rauten) aus GOME Nadir-Messungen am Observatorium for Hohenpeissenberg (Deutschland)

Vergleich mit Ozonsonden (schwarze Plus-Symbole).

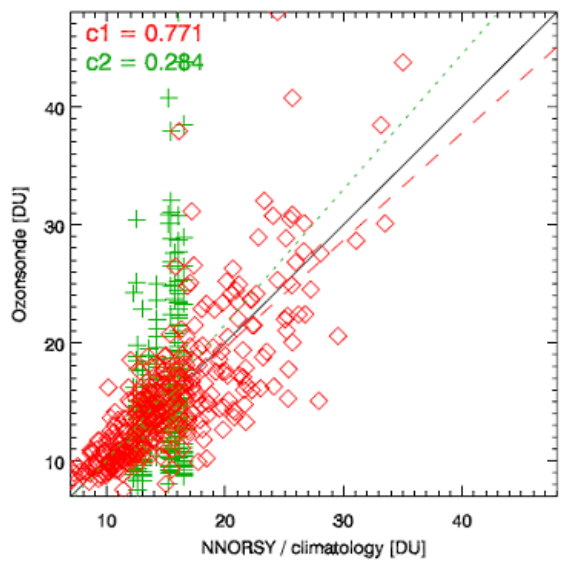


Müller et al., J. Geophys. Res., 2003.

0 – 5 km



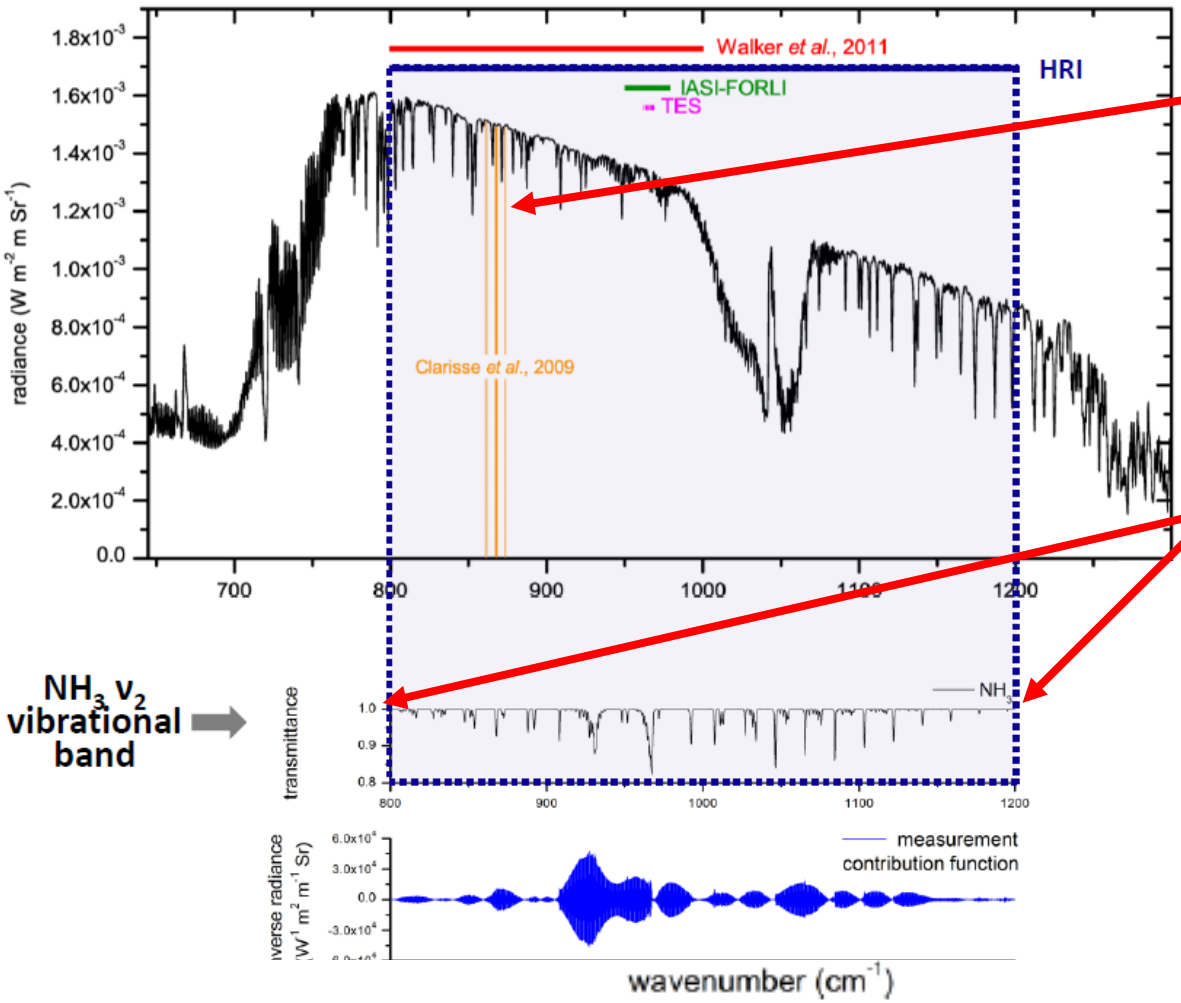
5 – 10 km



Korrelation der Teilsäulen gegen Ozonsonden-Daten (rot)

Zum Vergleich: grüne Punkte: Klimatologie

B) Fälle, bei denen eine volle physikalische Auswertung viel zu langsam ist: Auswertung von troposphärischem Ammoniak aus Nadir-IR Messungen (Training anhand von voll physikalischen Simulationen)



(Van Damme *et al.*, ACP 2014)

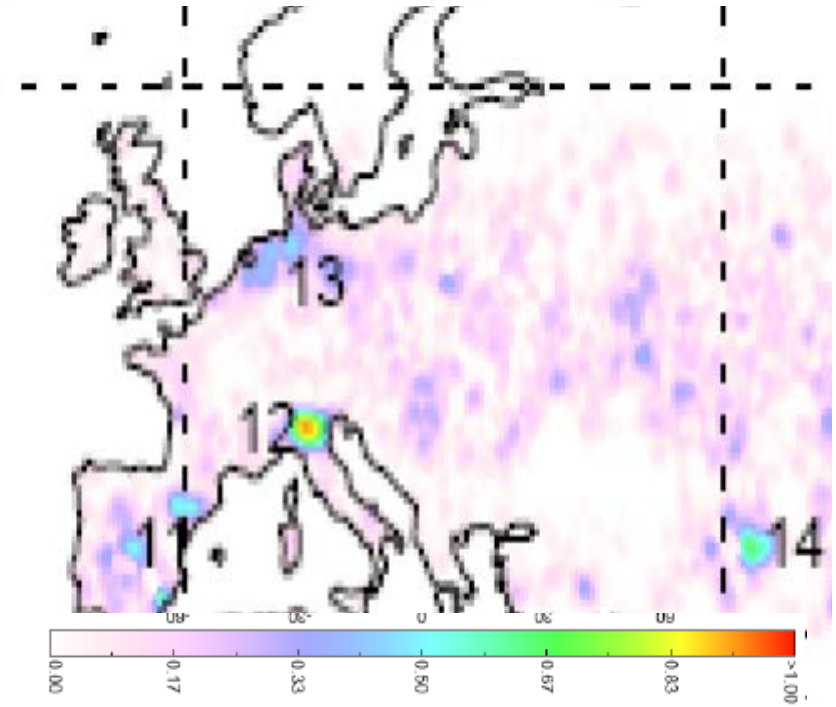
Frühe (voll physikalische) Algorithmen konnten aus Effizienzgründen nur einen sehr kleinen Spektralbereich nutzen.

Neue Algorithmen nutzen (schnelle) neuronale Netzwerke und können den gesamten Bereich des NH_3 Absorptions-spektrums nutzen.

=> sehr viel geringeres Rauschen der Ergebnisse, auch Wolkeninformation wird besser ‚verwertet'.

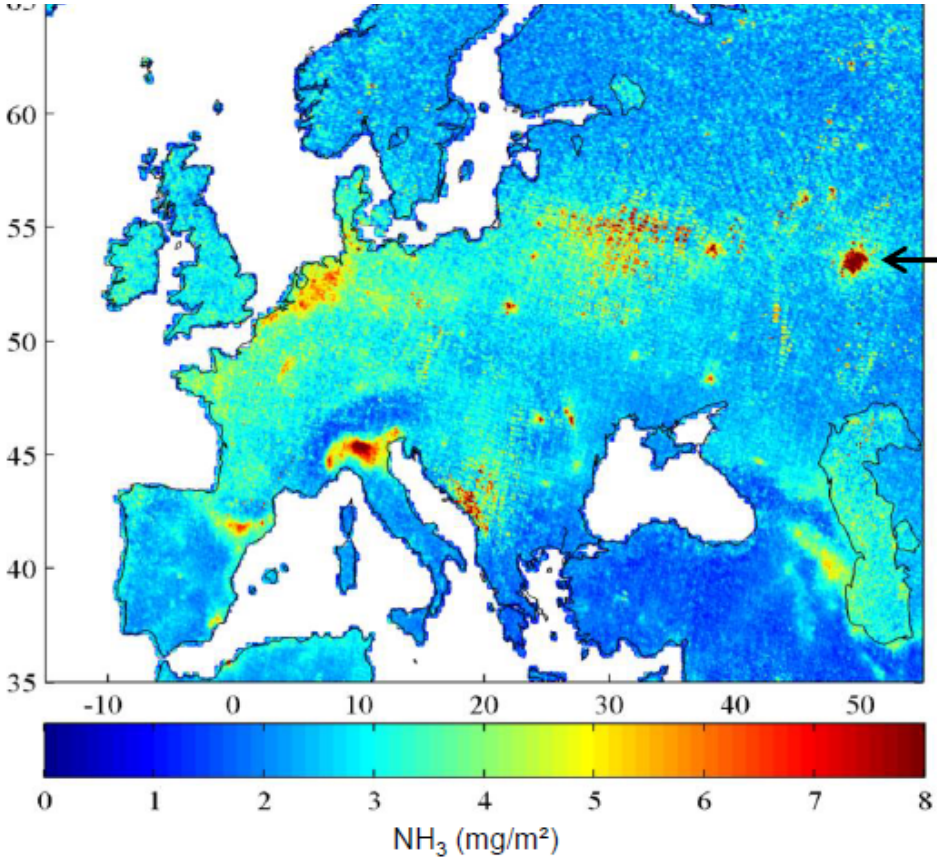
Ammoniak-Verteilung über Europa aus IASI-Messungen (IR)

Alte ‚voll physikalische‘ Algorithmen



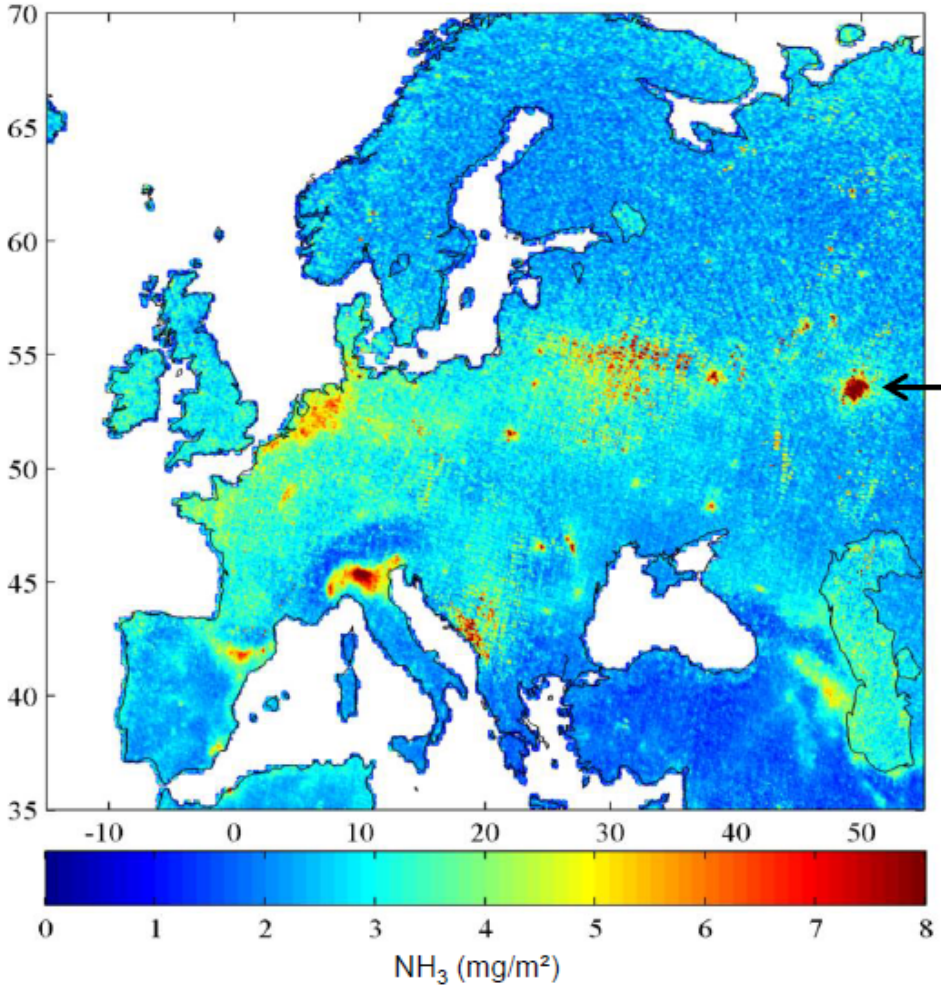
Clarisse et al., 2009

Neue Algorithmen mit neuronalen Netzwerken



M. Van Damme et al., 2016

Neue Ergebnisse sind sehr viel genauer und zeigen feinere Strukturen



2008→2012 AM & PM weighted average
(excluding RU 2010 fire event period)

World's largest NH_3 producer in Togliatti, Samara Oblast, Russia

- 3 500*1000 metric NH_3 tons.yr^{-1}
- 85% exported
- World's longest NH_3 pipeline to Odessa, Black-sea

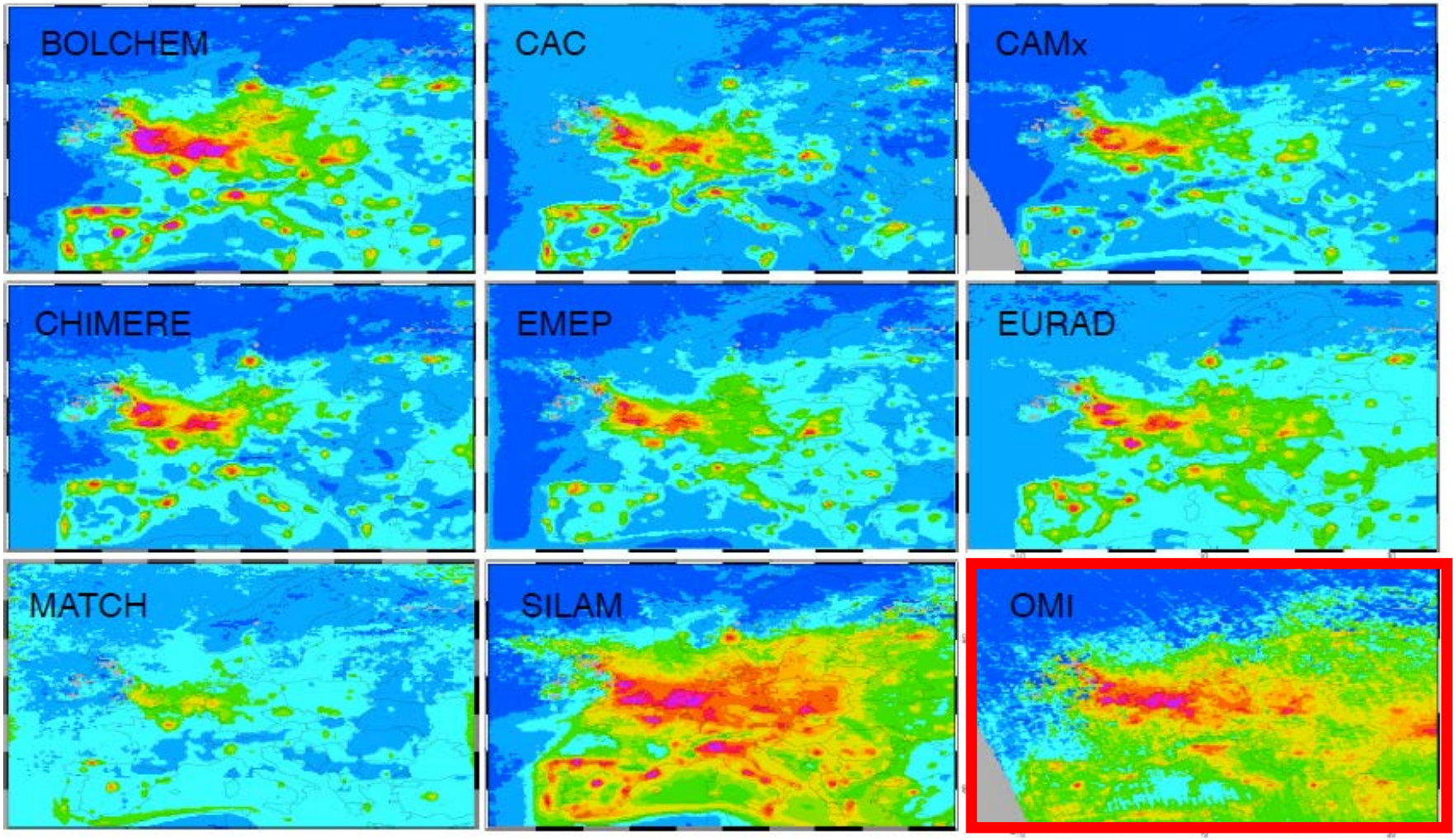
➢ **First time that industrial NH_3 sources are observed so clearly suggesting strong underestimation of emission in the inventories**

M. Van Damme et al., 2016

Data assimilation: adjustment of model simulations using measurement data, e.g. satellite observations

OMI NO2 versus AQ models

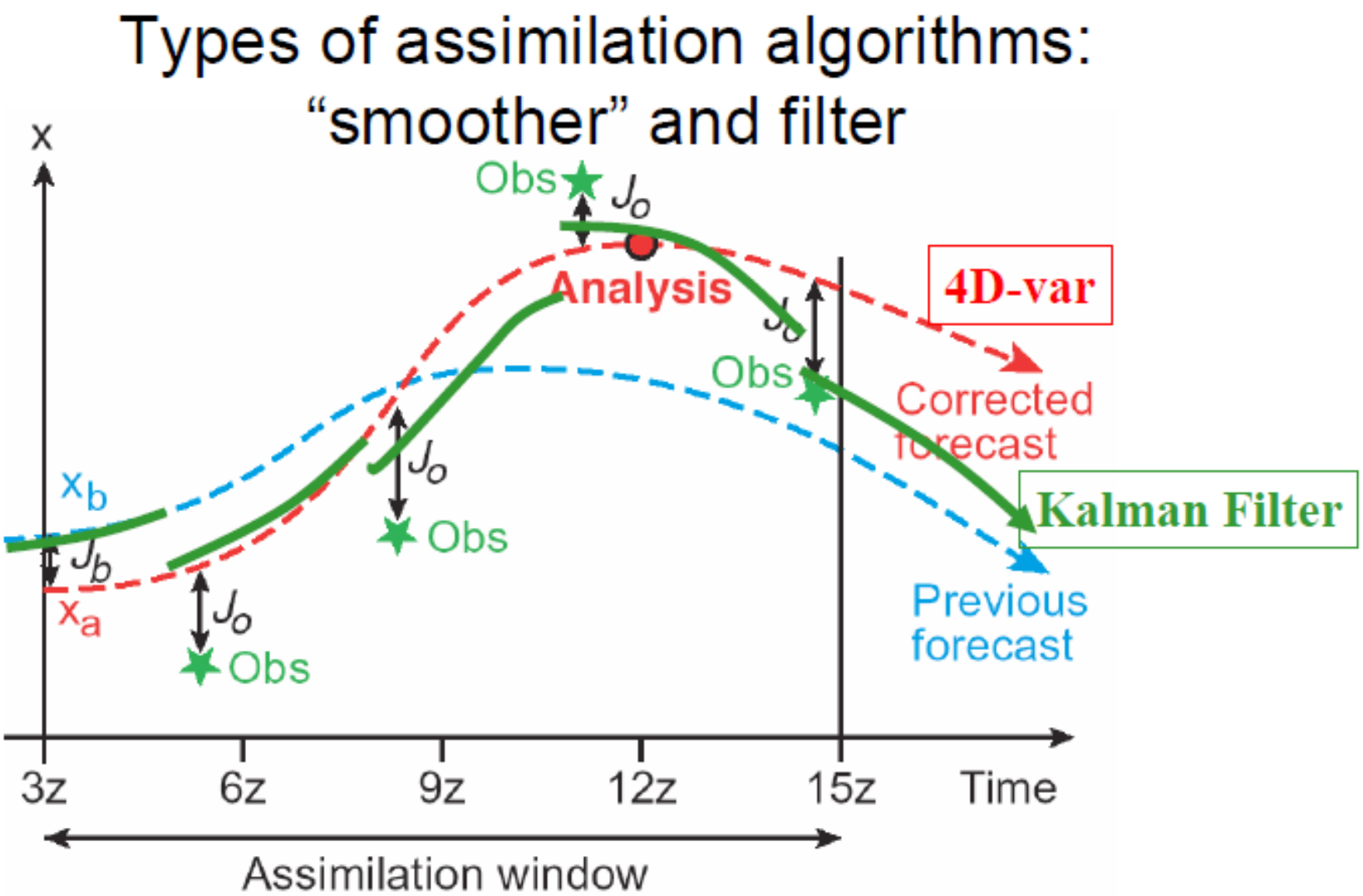
Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut
Ministerie van Verkeer en Waterstaat



Henk Eskes et al.

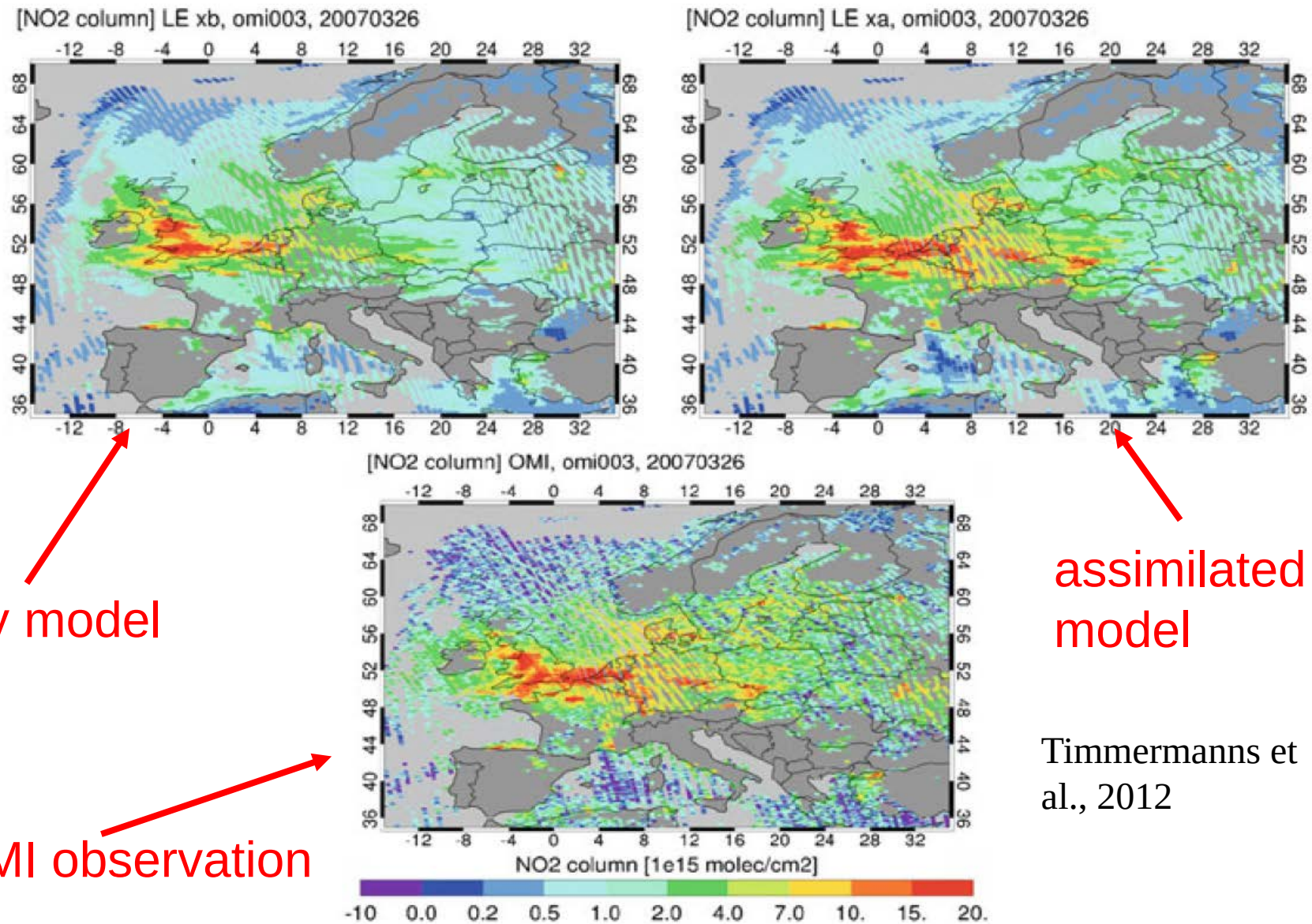
Eskes, OMI Science, June 2010

There are two main types of data assimilation in atmospheric models



Lecture on Data Assimilation Basics
Elbern et al., 2008

Using model data can help to fill the gaps between observations. But the quality of the resulting data depends on the ability of the quality of the model and the input data



only model

assimilated model

OMI observation

Timmermanns et al., 2012

Zusammenfassung

- Was bestimmt die räumliche Auflösung und Überdeckung von spektral auflösenden Satellitenmessungen?
  - frühe Instrumente: Datenrate & technische Limitierungen
  - aktuelle Instrumente: Solare Einstrahlung und Detektorgröße

=> beste erreichbare Auflösung bei täglicher globaler Abdeckung:
ca. 2 x 2 km²

- Für ausgewählte Spurenstoffe und Anwendungen könnte die räumliche Auflösung optimiert werden auf Kosten der räumlichen Überdeckung sowie der spektralen Auflösung / Abdeckung

- Neuronale Netzwerke können helfen, Algorithmen zu beschleunigen und / oder zu verbessern (Geschwindigkeit, Auswahl und Ausnutzung der spektralen Information, etc.)

- Datenassimilation kann raumzeitliche Lücken füllen (aber letzlich nicht fehlende Messdaten ersetzen).

Danke für Ihre Aufmerksamkeit!

Satellitengruppe, MPI-C Mainz, Herbst 2017

Referenzen

Clarisse, L., Clerbaux, C., Dentener, F., Hurtmans, D., and Coheur, P.-F.: Global ammonia distribution derived from infrared satellite observations, Nat. Geosci., 2, 479–483, doi:10.1038/ngeo551, 2009.

Elbern, H., Lecture 1, Data Assimilation Basics, University of Cologne, 2008, https://earth.esa.int/dragon/D5_L1_Elbern.pdf

Eskes, Henk,, Vincent Huijnen, et al., Use of Satellite data for Air Quality Modeling and Data Assimilation in Europe: OMI NO2 compared to Regional Air Quality models, presentation at OMI Science Team meeting, 2010, http://projects.knmi.nl/omi/documents/presentations/2010/ostm15/OSTM15_AQS_Eskes_Modeling_Europe.pdf

Lau, W. K. M., and K. M. Kim (2014), Impacts of aerosols on the Asian Monsoon—An interim assessment, in Climate Variability and Change, edited by C. P. Chang and J. M. Wallace, World Scientific Publication Company.

Müller, M. D., A. K. Kaifel, M. Weber, S. Tellmann, J. P. Burrows, and D. Loyola, “Ozone profile retrieval from GOME data using a neural network approach (NNORSY)”, J. Geophys. Res., 108:4497, 2003.

Platt, U., & Stutz, J. (2008). Differential absorption spectroscopy. In Differential Optical Absorption Spectroscopy (pp. 135-174). Springer, Berlin, Heidelberg.

Referenzen

Timmermanns et al., 2012, Chapter 59 in LOTOS-EUROS Air Quality Forecasts by Assimilation of OMI Tropospheric NO2 Columns, D.G. Steyn and S. Trini Castelli (eds.), Air Pollution Modeling and its Application XXI, NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security 4, DOI 10.1007/978-94-007-1359-8_59, # Springer Science+Business Media B.V. 2012

Van Damme, M., Clarisse, L., Heald, C. L., Hurtmans, D., Ngadi, Y., Clerbaux, C., Dolman, A. J., Erisman, J. W., and Coheur, P. F.: Global distributions, time series and error characterization of atmospheric ammonia (NH3) from IASI satellite observations, Atmos. Chem. Phys., 14, 2905-2922, https://doi.org/10.5194/acp-14-2905-2014, 2014.

Van Damme, M., L. Clarisse, S. Whitburn, C. Clerbaux, P.-F. Coheur, Worldwide spatial and temporal ammonia (NH3) variability revealed by IASI, 4th IASI conference, 2016, https://iasi.cnes.fr/sites/default/files/drupal/201612/default/bpc_iasi-conference4-4_02_nh3_vandamme.pdf

Wagner, T., S. Beirle, T. Deutschmann, E. Eigemeier, C. Frankenberg, M. Grzegorski, C. Liu, T. Marbach, U. Platt and M. Penning de Vries, Monitoring of atmospheric trace gases, clouds, aerosols and surface properties from UV/vis/NIR satellite instruments, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 10, 104019,doi: 10.1088/1464-4258/10/10/104019, 2008.*