



Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 7072

Validierung von ENVISAT-Daten mit Hilfe von bodengebundenen FTIR-Messungen

A. Griesfeller

Institut für Meteorologie und Klimaforschung

November 2004

Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7072

**Validierung von ENVISAT-Daten mit Hilfe
von bodengebundenen FTIR-Messungen***

Alexandra Griesfeller

Institut für Meteorologie und Klimaforschung

*Von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2004

Impressum der Print-Ausgabe:

**Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

**Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren (HGF)**

ISSN 0947-8620

urn:nbn:de:0005-070722

Zusammenfassung

Der polarumlaufende Umweltsatellit ENVISAT (ENVISAT = **ENV**ironmental **SAT**ellite) ist mit zehn Messgeräten an Bord, mit denen u. a. Landoberflächen, Ozeane, Eiskappen an den Polen und die Atmosphäre beobachtet werden, um Einflüsse auf das System der Erde zu untersuchen, der größte Satellit, der von der ESA (**E**uropean **S**pace **A**gency) bisher entwickelt wurde. Drei dieser zehn Messgeräte sind Fernerkundungsgeräte für atmosphärische Chemie: MIPAS (**M**ichelson **I**nterferometer für **P**assiv **A**tmosphärische **S**ondierung), SCIAMACHY (**S**canning **I**maging **A**bsorption **S**pectro**M**eter for **A**tmospheric **C**hartograph**Y**) und GOMOS (**G**lobal **O**zone **M**onitoring by **O**ccultation of **S**tars), die mit unterschiedlicher Messtechnik Informationen über den Gehalt verschiedener atmosphärischer Spurengase liefern.

Gegenstand dieser Arbeit ist die Validierung dieser ENVISAT-Daten mit Hilfe von bodengebundenen FTIR-Messungen (FTIR = **F**ourier **T**ransform **I**nfra**R**ed). Für diese bodengebundenen Messungen betreibt das Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) seit 1996 in Kooperation mit dem Institutet för Rymdfysik (IRF) in Schweden und der Universität Nagoya (Japan) in Kiruna (Nordschweden) und seit 1999 zusammen mit dem Instituto Nacional de Meteorología (INM) in Izaña (Teneriffa) zwei bodengebundene Fourier-Spektrometer. Aus diesen Messungen werden Profile bzw. Säulengehalte, u. a. von O₃, HCl, HF, HNO₃, ClONO₂, N₂O, CH₄, NO₂, CO, NO und ClO, bestimmt.

Beide Messstationen in Kiruna und Izaña sind Teil des NDSC (**N**etwork for the **D**etection of **S**tratospheric **C**hange). Als Teil dieses Netzwerks werden mit den bodengebundenen Fourier-Spektrometern Messungen regelmäßig durchgeführt. Dadurch ist man nicht auf einzelne Messkampagnen, wie z. B. bei Ballon- oder Flugzeugmessungen, beschränkt. Deswegen eignen sie sich besonders gut für Trendbestimmungen und für die langfristige Validierung der Satellitendaten, wie z. B. der Daten von ENVISAT.

Bei den MIPAS-ESA-Messungen wurden die Vertikalprofile und Säulengehalte von O₃, HNO₃, CH₄ und N₂O verglichen, bei den SCIAMACHY-Messungen die Säulengehalte von O₃ und NO₂.

Die Ergebnisse zeigen, dass sowohl die O₃- als auch die HNO₃-Messungen von MIPAS-ESA den Erwartungen entsprechen. So liegen die mittleren Abweichungen der Säulengehalte im Bereich von ±5 %, die der Vertikalprofile bei etwa ±10 %. Die Abweichungen für die troposphärischen Gase CH₄ und N₂O dagegen sind erwartungsgemäß recht groß.

Für SCIAMACHY betragen die mittleren Abweichungen von O₃ etwa ±20 %, für NO₂ etwa +20 % bis -40 %. Allerdings ist die Streuung für die Gesamtsäulengehalte unrealistisch groß.

Zusätzlich zu den Produkten, die vom ESA-Prozessor ausgewertet wurden, liegen für einige Datenprodukte von MIPAS und SCIAMACHY die Auswertungen von anderen Prozessoren, die von wissenschaftlichen Gruppen betrieben werden, vor. Diese werden ebenfalls in diese Arbeit einbezogen. Die Ergebnisse von MIPAS, die von einem Prozessor, der am IMK entwickelt wurde und dort betrieben wird, zeigen, dass die Übereinstimmung dieser Daten mit den bodengebundenen Messungen noch besser ist, als die mit dem ESA-Prozessor.

Vor allem in niedrigen Höhen bis etwa 25 km liegen die Differenzen innerhalb des 1σ -Rausch-Fehlerbalkens der bodengebundenen Messung. Doch auch oberhalb dieser 25 km sind die Abweichungen geringer als die des ESA-Prozessors.

Abstract

The polar-orbiting environmental satellite ENVISAT (ENVISAT = **ENV**ironmental **SAT**ellite), which has been launched in the night of February 28 to March 1, 2002 in Kourou (French Guayana) on board of an Ariane 5, carries ten instruments on board. These instruments observe land surfaces, oceans, polar ice caps and the atmosphere, in order to examine anthropogene environmental influences on the earth system. ENVISAT is the largest satellite, developed by ESA (**E**uropean **S**pace **A**gency) up to now. Three of these ten instruments are remote sensing instruments for atmospheric chemistry: MIPAS (**M**ichelson **I**nterferometer for **P**assive **A**tmospheric **S**ounding), SCIAMACHY (**S**canning **I**maging **A**bsorption **S**pectro**M**eter for **A**tmospheric **C**hartograph**Y**) and GOMOS (**G**lobal **O**zone **M**onitoring by **O**ccultation of **S**tars), which use different measurement techniques and geometry and which provide information about the content of different atmospheric trace gases.

The subject of this thesis is the validation of these ENVISAT data by groundbased FTIR measurements (FTIR = **F**ourier **T**ransform **I**nfra **R**ed). The Institute for Meteorology and Climate Research (IMK) operates two groundbased Fourier spectrometers in international cooperation with the Institutet för Rymdfysik (IRF) in Sweden and the University of Nagoya (Japan) in Kiruna (north Sweden) since 1996 and together with the Instituto Nacional de Meteorología (INM) in Izaña (Tenerife Island) since 1999. From these measurements profiles and column amounts of O₃, HCl, HF, HNO₃, ClONO₂, N₂O, CH₄, NO₂, CO, NO and ClO are derived.

Both stations in Kiruna and Izaña are part of the NDSC (**N**etwork for the **D**etection of **S**tratospheric **C**hange). As part of this network continuous ground-based measurements are performed, and are not limited by campaigns, as for example by balloonborne or airborne measurements. Therefore the ground-based measurements are particularly suitable for the long-term validation of satellite data.

With the MIPAS-ESA measurements the vertical profiles and column amounts of O₃, HNO₃, CH₄ and N₂O were compared, with the SCIAMACHY measurements the column amounts of O₃ and NO₂.

The results indicate that both the O₃- and the HNO₃-measurements of MIPAS-ESA are within the expectations. Thus the middle deviations of the column amounts are around ± 5 %, those of the vertical profiles around ± 10 %. The differences for the tropospheric gases CH₄ and N₂O are as expected very large.

For SCIAMACHY the middle deviations of O₃ are around ± 20 %, for NO₂ from $+20$ % to -40 %. The variability of the total column amounts are unrealistically large in comparison to atmospheric variability.

In addition to the products, which were generated by the ESA processor, there are scientific evaluations for MIPAS and SCIAMACHY. These are included into this work. The results of MIPAS from a processor, which was developed at the IMK and is operated there, shows that the concistence of these data with the ground-based measurements is still better than from the ESA processor. Particularly in heights up to about 25 km the differences for the ground-based measurements are within the 1σ -noise-error. But also above these 25 km the deviations are smaller than those of the ESA processor.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die Erdatmosphäre	3
2.1	Aufbau der Erdatmosphäre	3
2.2	Grundgleichungen der atmosphärischen Dynamik	4
2.3	Atmosphärische Zirkulation	6
2.4	Stratosphärische Chemie	7
3	Das Fourierspektrometer	13
3.1	Funktionsweise des Fourierspektrometers	13
3.2	Mathematische Hintergründe	14
3.2.1	Die Fouriertransformation	14
3.2.2	Die Phasenkorrektur	15
3.2.3	Das Apparateprofil	16
3.2.4	Die diskrete Fouriertransformation	17
3.3	Instrumentelle Fehlereinflüsse	18
3.3.1	Interferenzen an Grenzflächen	18
3.3.2	Nichtlinearität	18
4	Statistik	19
4.1	Fortpflanzung von Unsicherheiten	19
4.2	Statistische Definitionen	20
4.3	Statistische Verteilungen	20
4.3.1	Die Normalverteilung	20
4.3.2	Die χ^2 -Verteilung	21
4.4	Kovarianz und Korrelation	21
5	ENVISAT	23
5.1	MIPAS	23
5.1.1	Instrumentenbeschreibung und Funktionsweise	23
5.1.2	Datenprodukte	27
5.2	SCIAMACHY	28
5.2.1	Instrumentenbeschreibung und Funktionsweise	28
5.2.2	Datenprodukte	30
5.3	GOMOS	31
5.3.1	Instrumentenbeschreibung und Funktionsweise	31
5.3.2	Datenprodukte	32

6	Auswertemethodik der bodengebundenen solaren Absorptionsmessungen	33
6.1	Strahlungsübertragungsgleichung	33
6.2	Inversionsrechnung	35
6.3	Fehleranalyse	37
6.3.1	Spektrales Rauschen	37
6.3.2	Modell- und Parameterfehler	38
6.3.3	Glättungsfehler	42
7	Messergebnisse	45
7.1	Säulengehalte	46
7.1.1	O ₃	46
7.1.2	HCl, ClONO ₂ und ClO	48
7.1.3	N ₂ O und CH ₄	52
7.2	Vertikalprofile	55
7.2.1	N ₂ O	55
7.2.2	HCl	58
7.2.3	O ₃	61
7.2.4	HNO ₃	65
8	Vergleiche mit verschiedenen Messungen	69
8.1	Vergleich mit Ozonsonden	69
8.2	Vergleich mit MIPAS-B2 Ballonmessungen	72
8.3	Vergleich mit einem Millimeterwellenradiometer	77
8.4	Vergleich von simulierten FTIR-Profilen mit simulierten MIPAS- ENVISAT-Profilen	78
8.4.1	Szenario 1	79
8.4.2	Szenario 2	79
9	Vergleiche mit ENVISAT-Daten	81
9.1	Koinzidenzkriterien	81
9.2	Ergebnisse für MIPAS	83
9.2.1	Vergleiche mit MIPAS-Säulengehalten	83
9.2.2	Vergleiche mit MIPAS-Profilen	102
9.2.3	Zusammenfassung des Vergleichs mit MIPAS-Daten	118
9.3	Ergebnisse für SCIAMACHY	120
9.3.1	Vergleiche mit SCIAMACHY-Säulengehalten	120
9.3.2	Zusammenfassung des Vergleichs mit SCIAMACHY-Daten	132
10	Zusammenfassung und Ausblick	133
	Literaturverzeichnis	137
A	Koinzidenzen von FTIR-Messungen und MIPAS-B2-Messungen	145
B	Koinzidenzen von FTIR-Messungen und MIPAS-ENVISAT-Messungen	146
	Liste der verwendeten Abkürzungen und Symbole	151

Abbildungsverzeichnis	155
Tabellenverzeichnis	159

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die Fernerkundung ermöglicht Informationen über den Zustand eines Mediums an einem entfernten Ort zu erlangen. Eine Anwendung der Fernerkundung ist beispielsweise, die Konzentration von Spurengasen in der Atmosphäre zu messen. So wurde auch das antarktische Ozonloch mittels Fernerkundung entdeckt (Chubachi, 1984, 1988; Farman et al., 1985). Aber auch die Verteilung und Konzentration anderer Spurengase, die in der Ozonchemie eine wichtige Rolle spielen, können mit Hilfe der Fernerkundung beobachtet werden.

Es gibt verschiedene Messinstrumente und -plattformen, mit deren Hilfe Fernerkundung betrieben werden kann. Eine dieser Plattformen ist ein Satellit, wie z. B. ENVISAT (**E**nvironmental **s**atellite): Am 1. März 2002 startete der von der europäischen Weltraumbehörde ESA (**E**uropean **S**pace **A**gency) entwickelte Umweltsatellit ENVISAT erfolgreich. Mit MIPAS (**M**ichelson **I**nterferometer für **P**assiv **A**tmosphärische **S**ondierung), SCIAMACHY (**S**canning **I**maging **A**bsorption **S**pectro**M**eter for **A**tmospheric **C**Hartograph**Y**) und GOMOS (**G**lobal **O**zone **M**onitoring by **O**ccultation of **S**tars) hat er drei atmosphärische Fernerkundungssensoren an Bord, mit denen die globale Konzentration vieler Spurengase bestimmt werden kann. MIPAS misst u. a. die vertikalen Profile von O_3 , N_2O , CH_4 und HNO_3 , SCIAMACHY die Säulengehalte von O_3 und NO_2 .

Ziel dieser Arbeit ist die Validierung von ENVISAT Daten mit Hilfe von bodengebundenen FTIR-Messungen (FTIR = **F**ourier **T**ransform **I**nfra**R**ed, Fouriertransformationspektroskopie im infraroten Spektralbereich). Das Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) betreibt seit 1996 zusammen mit dem Institutet för Rymdfysik (IRF) in Schweden und der Universität Nagoya (Japan) in Kiruna in Nordschweden (Blumenstock et al., 1998, 2000) und seit 1999 zusammen mit dem Instituto Nacional de Meteorología (INM) in Izaña auf Teneriffa (Schneider, 2002) zwei bodengebundene Fourier-Spektrometer. Mit diesen werden die Konzentration von an der Ozonchemie in der Stratosphäre beteiligten Spurengasen gemessen. Aus diesen Messungen werden Profile bzw. Säulengehalte u. a. von O_3 , HCl , HF , HNO_3 , $ClONO_2$, N_2O , CH_4 , NO_2 , CO , NO und ClO bestimmt.

Beide Messstationen in Kiruna und Izaña sind Teil des NDSC (**N**etwork for the **D**etection of **S**tratospheric **C**hange). Als Teil dieses Netzwerks können mit den bodengebundenen Fourier-Spektrometern kontinuierlich Messungen durchgeführt werden, und man ist nicht auf einzelne Messkampagnen, wie z. B. bei Ballon- oder Flugzeugmessungen, beschränkt. Deswegen eignen sie sich besonders gut für die langfristige Validierung der Satellitendaten.

Zur Darstellung der Validierung werden in dieser Arbeit zunächst einige Grundlagen, wie z. B. die Erdatmosphäre, die Funktionsweise der beiden Fourierspektrometer und die drei Fernerkundungssensoren auf ENVISAT, beschrieben.

1 Einleitung

Danach wird die Auswertestrategie im infraroten Spektralbereich erklärt und die Messergebnisse in Kiruna der Jahre 2001 bis 2003 vorgestellt.

Zur Vorbereitung auf die Satellitendaten werden die bodengebundenen Messungen mit Hilfe von verschiedenen anderen Messungen, die von Ozonsonden, vom Ballon und von einem Mikrowellenradiometer gemacht wurden, selbst validiert.

Daran schließt sich ein Vergleich mit synthetisch erzeugten O₃-Profilen für MIPAS-ENVISAT an.

Zum Schluss folgt schließlich der Vergleich mit den ENVISAT-Daten: Für MIPAS werden Säulengehalte und Profile von O₃, N₂O, CH₄ und HNO₃ mit den bodengebundenen Daten verglichen, für SCIAMACHY folgt der Vergleich mit den Säulengehalten von O₃ und NO₂.

Eine Zusammenfassung und ein Ausblick, wie die Validierung der ENVISAT-Daten fortgeführt werden soll, folgen.

2 Die Erdatmosphäre

2.1 Aufbau der Erdatmosphäre

Die Erde wird von der Atmosphäre (griech.: atmós = Dunst, Dampf; sphaïra = Kugel) umgeben. Diese lässt sich anhand der vertikalen Temperaturverteilung, wie in Abbildung 2.1 ersichtlich, in verschiedene Bereiche unterteilen. Die unterste Schicht ist die sogenannte Troposphäre (griech.: trope = Kehre, Wende). In ihr spielt sich das Wettergeschehen ab. Sie zeichnet sich durch einen negativen Temperaturgradienten aus, und ist vertikal gut durchmischt. Die Tropopause, die sich in polaren Breiten in etwa 9 km und in tropischen Breiten in bis zu 17 km Höhe befindet, begrenzt die Troposphäre nach oben. Oberhalb schließt sich die Stratosphäre (lat.: stratum = Schicht) an. In ihr ist vor allem durch die Absorption der kurzwelligen ultravioletten Sonnenstrahlung durch Ozon ein positiver Temperaturgradient vorhanden. Aufgrund des starken Temperaturanstiegs ist die Stratosphäre stabil geschichtet, wodurch es zu einer längeren Verweildauer der chemisch langlebigen Komponenten kommt. In etwa 50 km Höhe wird die Stratosphäre durch die Stratopause begrenzt, an die sich die Mesosphäre anschließt. Diese ist wieder durch eine Temperaturabnahme mit der Höhe gekennzeichnet. Nach oben hin wird sie durch die Mesopause in etwa 85 km begrenzt und es folgt die Thermosphäre, in der die Temperatur stark zunimmt.

Die Atmosphäre besteht aus einer Mischung von vielen Gasen, wobei molekularer Stickstoff (N_2) mit ca. 78% und molekularer Sauerstoff (O_2) mit ca. 21% am häufigsten vorkommen. Neben diesen beiden existieren aber noch andere Gase in der Atmosphäre, wie z. B. Wasserdampf, Kohlendioxid, Ozon etc., die trotz ihrer geringen Konzentrationen eine große Bedeutung haben. Vor allem die Bedeutung des Wasserdampfes ist für atmosphärische Prozesse entscheidend, sowohl für Niederschlag und Regenbildung als auch für den Strahlungshaushalt der Atmosphäre. Auch das stratosphärische Ozon ist klimarelevant: Durch seine Absorption von UV-Strahlung ist es zum einen dafür verantwortlich, dass die Erdatmosphäre im Gegensatz zu anderen Planetenatmosphären in unserem Sonnensystem eine Temperaturzunahme in diesen Höhen besitzt, und dadurch die Stratosphäre bildet, die den anderen Planeten fehlt. Auf der anderen Seite dient die Absorption wie eine Art Schutzschild für die Biosphäre vor der UV-Strahlung der Sonne. Spurengase werden in bestimmten Regionen der Atmosphäre gebildet, durch die großräumige atmosphärische Zirkulation transportiert und schließlich photolytisch oder chemisch zerstört. Dies führt in Abhängigkeit ihrer Lebensdauer zu einer räumlichen und zeitlichen Variabilität ihrer Konzentrationen. Um die Verteilung der Spurengase besser verstehen zu können, muss deshalb sowohl die Chemie als auch die Dynamik der Atmosphäre berücksichtigt werden. Neben den Gasen enthält die Atmosphäre zusätzlich kleine Partikel, die Aerosole (griech.: aer = Luft und lat.: solutio = Lösung) genannt werden. Sie besitzen Radien zwischen $10^{-4} \mu m$ und $10 \mu m$. Die Aerosole dienen als Kondensationskeime für Wassertröpfchen

2 Die Erdatmosphäre

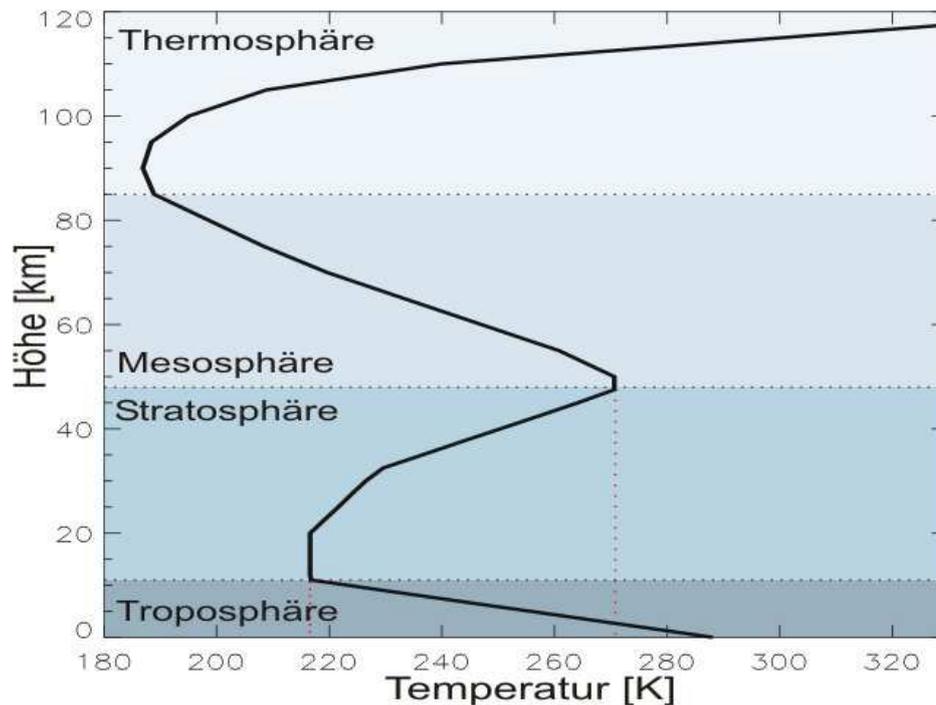


Abb. 2.1: Temperaturverlauf in der Erdatmosphäre

oder Eiskristalle und tragen so zur Wolkenbildung bei. Außerdem sind sie für die Strahlungsbilanz der Erde wichtig und sie dienen als Medium für heterogene Reaktionen, die in der Gasphase nicht oder nur sehr langsam ablaufen. In der Troposphäre entstehen die Aerosole zum einen auf natürlichem Weg in der Wüste durch Aufwirbelung von Staub, an Meeresoberflächen (Seesalz) und bei Vulkanausbrüchen, aber auch anthropogen bei Verbrennungen oder durch die Industrie.

2.2 Grundgleichungen der atmosphärischen Dynamik

Zur Beschreibung der Strömungsvorgänge in der Atmosphäre, die einen wesentlichen Anteil am Transport von Energie haben und die Ausbreitung von Spurenstoffen bestimmen, müssen die Windgeschwindigkeit $\vec{v} = (u, v, w)$, die Temperatur T , der Druck p sowie die Dichte ρ bestimmt werden. Zur Bestimmung dieser sechs Unbekannten werden sechs Gleichungen benötigt, die im Folgenden beschrieben werden.

Das Gasmisch in der Atmosphäre verhält sich in guter Näherung wie ein ideales Gas. Deshalb kann zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Druck, Temperatur und Volumen (oder Dichte) die Zustandsgleichung für ein ideales Gas verwendet werden:

$$pv = RT. \quad (2.1)$$

Hier ist p der Druck, v das spezifische Volumen (das Volumen der Masse 1 kg des Gases), T ist die absolute Temperatur in K und R ist die sogenannte individuelle Gaskonstante,

2.2 Grundgleichungen der atmosphärischen Dynamik

deren Wert von dem betrachteten Gas abhängt. Ersetzt man v mit $1 / \rho$, wobei ρ die Dichte ist, so wird aus Gleichung (2.1):

$$p = \rho RT. \quad (2.2)$$

Den Einfluss der Schwerkraft (hier in Form der Schwerebeschleunigung g) auf den vertikalen Aufbau der Atmosphäre beschreibt die hydrostatische Grundgleichung:

$$\frac{dp}{dz} = -\rho g. \quad (2.3)$$

$\frac{dp}{dz}$ beschreibt die Änderung des Luftdrucks p mit der Höhe z .

Berücksichtigt man die Abnahme der Dichte mit zunehmender Höhe, so kann man Gleichung (2.2) nach ρ auflösen, in Gleichung (2.3) einsetzen, nach p auflösen und integrieren. Dann erhält man die barometrische Höhenformel:

$$p = p_0 e^{-\frac{g}{RT}z}. \quad (2.4)$$

Der Luftdruck nimmt also exponentiell mit zunehmender Höhe ab und nähert sich asymptotisch dem Wert Null. Auflösen von Gleichung (2.4) nach z ergibt:

$$z = \frac{RT}{g} \ln \frac{p_0}{p}. \quad (2.5)$$

Die Kontinuitätsgleichung für die Dichte ρ lautet:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}. \quad (2.6)$$

mit \vec{j} als Massenstrom und $\vec{j} = \vec{v}\rho$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot (\vec{v}\rho). \quad (2.7)$$

Als weitere Gleichung zur Beschreibung der Strömungsvorgänge in der Atmosphäre dient die differentielle Form der Impulsbilanzgleichung, auch Navier-Stokes- oder Bewegungsgleichung genannt:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\vec{v}}{dt} &= -\rho \vec{\nabla} \phi_G - \vec{\nabla} p + \eta \Delta \vec{v} + \frac{\eta}{3} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \\ &= -\rho \vec{\nabla} \phi_G - \vec{\nabla} p + \eta \left[\Delta \vec{v} + \frac{1}{3} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

2 Die Erdatmosphäre

mit ϕ_G als Gravitationspotential der Erde und η als dynamische Viskosität. Sieht man die Erdatmosphäre als inkompressibel ($\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$) und als ideale Flüssigkeit ($\eta = 0$) an, d. h. werden die Reibungsflüsse vernachlässigt, folgt die Euler-Gleichung, die als grundlegende Gleichung der großräumigen Dynamik verwendet wird:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \phi_G - \vec{\nabla} p \quad (2.9)$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen kann man die Strömungsvorgänge in der Atmosphäre näherungsweise (unter Vernachlässigung der Reibung etc.) beschreiben.

2.3 Atmosphärische Zirkulation

Die atmosphärische Zirkulation wird auch allgemeine Zirkulation der Atmosphäre, planetarische oder globale Zirkulation genannt. Sie beschreibt den gesamten Luftmassenaustausch in der Atmosphäre, ausgelöst durch die unterschiedliche Energiezufuhr von der Sonne. Abbildung 2.2 beschreibt die planetarische Zirkulation.

Am Äquator gibt es einen Energieüberschuss, d. h. die Strahlungsbilanz ist positiv. Damit ist auch die Erwärmung der Luft und des Bodens hoch. An den Polen dagegen ist die Strahlungsbilanz negativ, und somit ist die Abkühlung der Luft und des Bodens groß. Aufgrund dieses Energie- und Temperaturogensatzes entsteht die globale Zirkulation der Atmosphäre.

Die globale Zirkulation erklärt, wie überschüssige Energie vom Äquator zu den Polen gelangt. Aufgrund der starken Erwärmung am Äquator steigt dort die warme Luft auf und der Luftdruck fällt. Dieses thermische Tiefdruckgebiet wird als äquatoriale Tiefdruckrinne oder innertropische Konvergenzzone bezeichnet. Am Pol dagegen zieht sich die kalte Luft zusammen und sinkt ab, so dass dort ein Hochdruckgebiet, das Polarhoch, entsteht. Zwischen diesen beiden thermischen Druckgebieten am Äquator und an den Polen existieren Zirkulationssysteme, die aus der Drehbewegung der Erde um die eigene Achse (Rotation) und der daraus resultierenden Corioliskraft entstehen. Aufgrund dieser Corioliskraft werden alle Luftpakete auf der Nordhalbkugel nach rechts, auf der Südhalbkugel nach links abgelenkt. Somit drehen sich Tiefdruckgebiete auf der Nordhalbkugel entgegengesetzt dem Uhrzeigersinn, die Hochdruckgebiete im Uhrzeigersinn. Auf der Südhalbkugel ist es entsprechend umgekehrt.

Der mittlere Luftmassen- und Spurenstofftransport in der Stratosphäre wird durch die Brewer-Dobson-Zirkulation beschrieben (Abbildung 2.3). Diese besteht aus aufsteigender Luft in niederen Breiten, die durch die hochreichende tropische Konvektion entsteht, und aus absteigender Luft in mittleren und hohen Breiten durch die Strahlungsabkühlung der aus mittleren Breiten herangeführten wärmeren Luftmassen in der mittleren und oberen Stratosphäre. Holton et al. (1995) sehen in diesem Abkühlungsvorgang den eigentlichen Motor der Brewer-Dobson-Zirkulation und damit des Stratosphären-Troposphären-Austauschs, der in diesen Breiten die Rückführung stratosphärischer Luft in die Troposphäre bewirkt. Dieser Prozess beeinflusst die Höhe der Tropopause sowie die globale

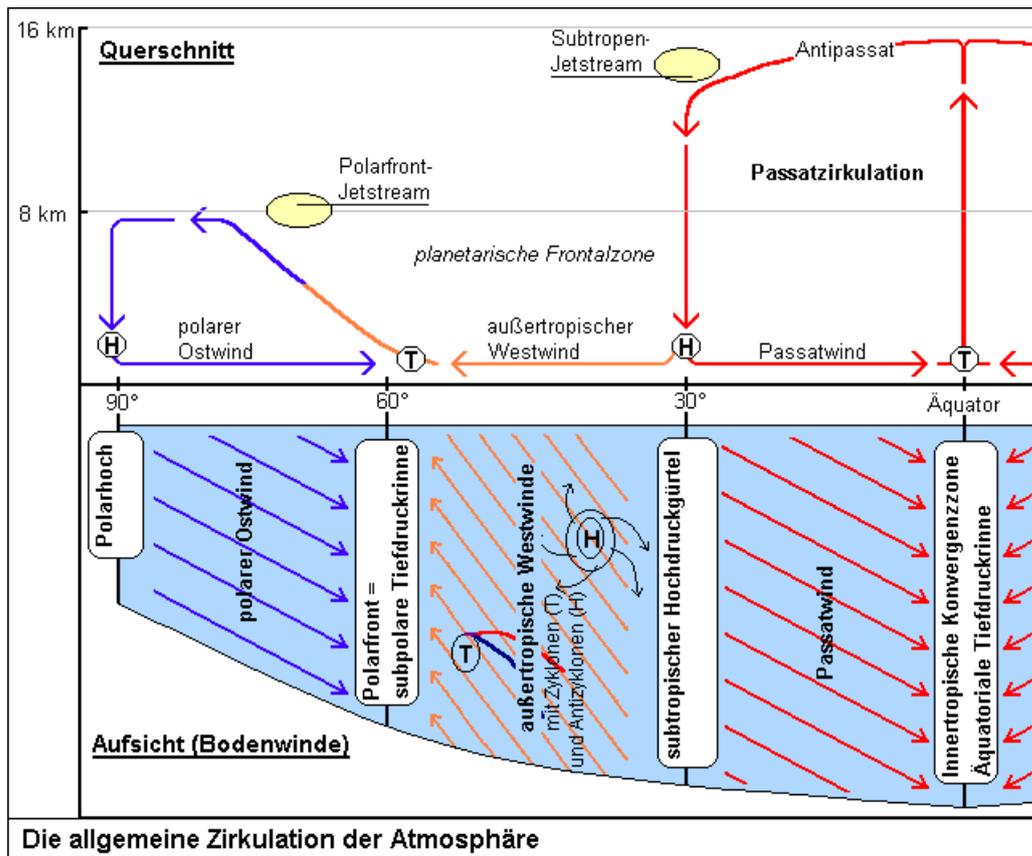


Abb. 2.2: Allgemeine Zirkulation der Atmosphäre (Freie Universität Berlin)

Ozonverteilung, bei der das stratosphärische Maximum vom äquatorialen Bildungsbereich polwärts verschoben ist.

Die hochreichenden konvektiven Prozesse in den Tropen können dazu führen, dass troposphärische Luftmassen die Tropopause durchdringen und damit in die Stratosphäre gelangen. Abbildung 2.3 zeigt ein vereinfachtes zweidimensionales Bild davon. Die Luftströmung teilt sich in zwei Zweige auf, wobei sich der eine Zweig in der Sommerhemisphäre in Richtung höhere Breiten bewegt und dabei weiter aufsteigt. Diese Konvektion entsteht im Wesentlichen durch die Erwärmung der Sommerhemisphäre durch die Absorption der Sonnenstrahlung durch das Ozon. Dabei steigen die Luftmassen in hohen Breiten bis in die Mesosphäre auf und strömen in die Winterhemisphäre bis zum Winterpol. Der zweite Zweig der Luft aus der Troposphäre strömt in der unteren Stratosphäre in die Winterhemisphäre. Über dem Winterpol herrscht großräumiges Absinken der Luftmassen, so dass die Luftmassen der Stratosphäre wieder zurück in die Troposphäre gelangen.

2.4 Stratosphärische Chemie

Eine einfache Theorie zur Bildung einer stratosphärischen Ozonschicht wurde von Chapman 1930 entwickelt (Chapman, 1930). Sie entsteht durch photolytische Sauerstoffchemie:

2 Die Erdatmosphäre

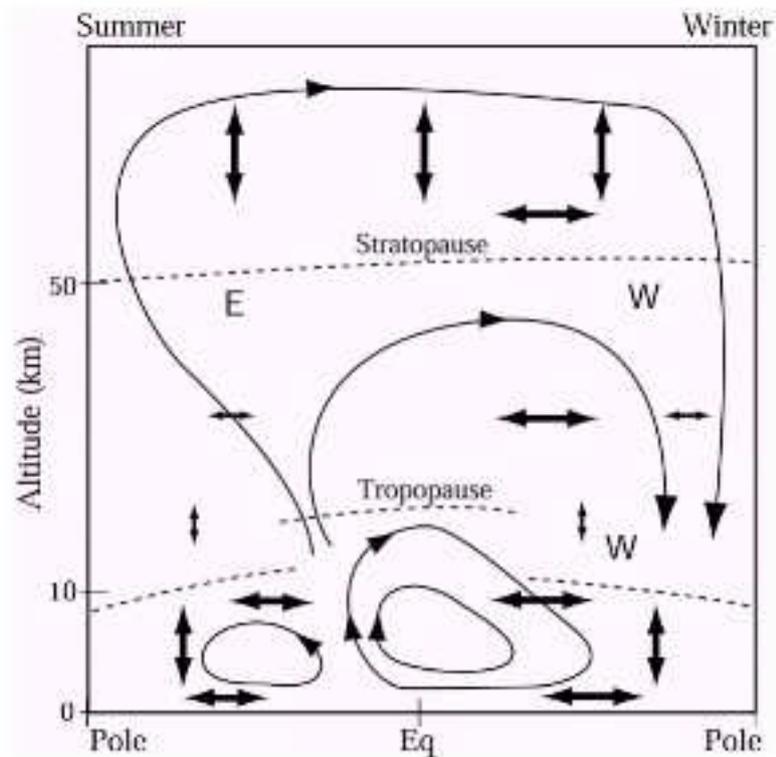
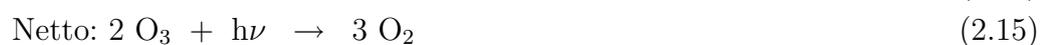


Abb. 2.3: Grundströmung der Brewer-Dobson-Zirkulation vom Äquator (Mitte) zu den Polen.



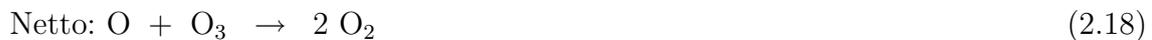
Dabei ist M ein neutraler Stoßparameter, meist N_2 oder O_2 , der aus Gründen der Impulserhaltung notwendig ist.

Auch der Abbau von Ozon erfolgt teilweise durch Photolyse, allerdings bei sehr viel größerer Wellenlänge:



Betrachtet man Bilanzgleichungen und Reaktionsraten, kann man ein Mischungsverhältnis von etwa 30 ppmv ableiten, so dass sich in 1. Näherung zutreffende stratosphärische

Ozonkonzentrationen ergeben. Der Chapman-Zyklus wurde 40 Jahre lang für ausreichend gehalten, um die beobachtete Konzentration von Ozon in der Stratosphäre erklären zu können. Neuere Modellrechnungen mit Chemie-Transport-Modellen zeigten aber, dass der Chapman-Zyklus etwa doppelt so hohe Ozonkonzentrationen liefert als in der Atmosphäre anzutreffen sind. So fand man weitere Mechanismen, die das Ozon abbauen. In diesen Abbau-Zyklen zerstören freie Radikale Ozon katalytisch, d. h. sie zerstören Ozon, ohne selbst dabei zerstört zu werden. In den folgenden Gleichungen ist der Katalyse-Zyklus dargestellt:



X steht hier für den Katalysator. Die wichtigsten Katalysatoren sind OH, NO, Cl und Br. Weitere katalytische Abbau-Zyklen sind bei Lary (1997) zu finden.

Beim anthropogenen Ozonabbau gelangen FCKWs¹ durch anthropogene Emission in die Stratosphäre. Dort werden sie photolysiert und setzen Chlor-Radikale frei, die das Ozon wie in (2.16) bis (2.18) katalytisch zerstören.

Normalerweise werden die Radikale in Chlorreservoirgasen, wie z. B. ClONO₂ oder HCl, gebunden. Die Entstehung solcher Reservoirgase, in denen die bei der Ozonzerstörung wirksamen Katalysatoren gebunden werden können, zeigen die Reaktionen (2.19) bis (2.25):



Besonders durch Reaktion (2.19) wird die Ozonzerstörungsrate verlangsamt, da ClO aus der Stratosphäre entfernt wird.

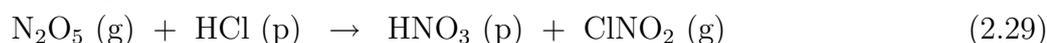
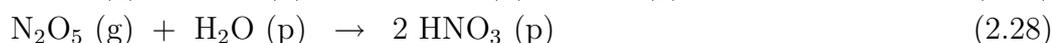
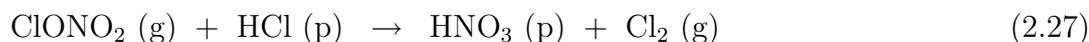
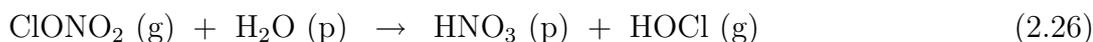
Ab Anfang des Winters bildet sich in Polargebieten ein stratosphärischer Luftwirbel aus, der sog. Polarwirbel, der horizontale Transporte zwischen mittleren Breiten und dem Polargebiet stark unterdrückt. Dadurch findet fast keine Durchmischung mit wärmeren Luftmassen außerhalb des Polarwirbels statt, und die Luft innerhalb dieses Wirbels kühlt

¹FCKW = Fluor-Chlor-Kohlen-Wasserstoff

2 Die Erdatmosphäre

sich stark ab. Unter diesen Bedingungen der winterlichen polaren Stratosphäre können sich polare stratosphärische Wolken (engl.: PSC = **p**olar **s**tratospheric **c**loud) bilden. Zur Wolkenbildung werden Kondensationskeime benötigt. Diese stammen aus der Junge-Schicht, einer Aerosolschicht in etwa 20 km Höhe, die aus Schwefelsäuretröpfchen und Sulfatteilchen besteht. Es gibt 2 Arten von PSCs, deren Entstehung noch nicht zweifelsfrei geklärt ist. Der momentane Stand sieht folgendermaßen aus: Typ I bildet sich abhängig von der Konzentration bei Temperaturen unterhalb von etwa 193 K. PSCs vom Typ Ia bestehen aus festen Salpetersäureteilchen, die als Kondensationskeime von Salpetersäuretrihydrat (NAT = **n**itric **a**cid **t**rihydrate: $\text{HNO}_3 \times 3 \text{H}_2\text{O}$) genutzt werden. Bei Wolken vom Typ Ib bilden sich aus Schwefelsäuretröpfchen und Salpetersäure unterkühlte ternäre Lösungströpfchen (STS = **s**upercooled **t**ernary **s**olution). Sinkt die Temperatur noch weiter auf unter 188 K, so bilden sich PSCs vom Typ II, die hauptsächlich aus Wassereis bestehen.

Am Ende der Polarnacht laufen an den Oberflächen der Wolken Reaktionen ab, die ohne diese Oberflächen nur sehr langsam ablaufen würden. Bei diesen Reaktionen wird das Chlor aus den Reservoirgasen in die reaktiven Verbindungen Cl und ClO überführt. Das Chlor wird also aktiviert. Die dabei ablaufenden Reaktionen sind in 2.26 bis 2.33 beschrieben, wobei (g) ein Molekül aus der Gasphase bezeichnet und (p) ein Molekül, das im Teilchen gebunden ist.



Das in diesen Reaktionen aktivierte Chlor durchläuft dann den Katalysezyklus der Reaktionen (2.16) bis (2.18) mit $\text{X} = \text{Cl}$. Ein weiterer wichtiger Reaktionszyklus, der vor allem für die Zerstörung des polaren Ozons verantwortlich ist, ist der Dimerzyklus, der besonders schnell abläuft, da er ohne atomaren Sauerstoff auskommt:



Beim Auflösen der PSCs können die Reservoirgase wieder zurückgebildet werden (Reaktion (2.19) und Reaktion (2.20)). Wichtig hierbei ist, dass in der Arktis die HCl-Entstehung wesentlich langsamer abläuft als die ClONO₂-Entstehung, somit kommt es am Ende des Winters bzw. Anfang des Frühlings zu einem ClONO₂-Überschuss im Vergleich zu HCl.

Es können aber nicht immer die Reservoirgase zurückgebildet werden. Bei ausreichender Lebensdauer und Größe der PSC-Teilchen werden Stickoxidmoleküle durch Sedimentation irreversibel aus der Stratosphäre entfernt. Diesen Vorgang nennt man Denitrifizierung. Danach können die katalytischen Reaktionen zur Zerstörung des Ozons auch nach dem Ende der heterogenen Reaktionen weiterlaufen, was zu einer stärkeren Ozonabnahme führt.

Ein Ziel sowohl der bodengebundenen Messungen als auch der Messungen vom Satelliten aus ist es u. a., diese gestörte Ozonchemie und deren Auswirkungen zu messen. So wurden beispielsweise schon PSCs mit den bodengebundenen Messungen gemessen (Höpfner et al., 2001).

2 Die Erdatmosphäre

3 Das Fourierspektrometer

Mit Hilfe der Fourierspektrometrie kann die Konzentration vieler atmosphärischer Bestandteile gleichzeitig bestimmt werden. Dabei kann sich das Messgerät am Boden, an einem Ballon, an Bord eines Flugzeugs oder eines Schiffs oder auf einem Satelliten befinden. Durch das IMK wurden bereits viele solcher Messungen durchgeführt (Blom et al., 1999; Blumenstock et al., 1998, 2000; Fischer, 1992; Gulde et al., 1994; Oelhaf et al., 1996a,b).

Die Bodenmessungen werden vom IMK in Kiruna und Izaña durchgeführt. Dabei werden FTIR-Spektrometer der Firma Bruker Optik GmbH benutzt. In Izaña wurde ein IFS 120M eingesetzt, in Kiruna ein IFS 120HR.

In diesem Kapitel wird zunächst die Funktionsweise und Aufbau eines Fourierspektrometers beschrieben. Außerdem werden die mathematischen Grundlagen eingeführt.

3.1 Funktionsweise des Fourierspektrometers

Abbildung 3.1 zeigt den Aufbau eines FTIR-Spektrometers schematisch. Bei den bodengebundenen Messungen wird zunächst über einen Sonnensucher der Lichtstrahl der Sonne über drehbare Spiegel in das Instrument gelenkt. Dort trifft er auf das Kernstück des FTIR-Spektrometers: ein Michelson-Interferometer. Dieses besteht aus einem Strahlteiler und zwei Spiegeln: Das einfallende Licht trifft parallel auf eine Blende und von dort auf einen Strahlteiler. An dem Strahlteiler wird es in zwei (idealerweise gleich intensive) Teilstrahlen aufgeteilt. Einer dieser beiden Teilstrahlen trifft auf einen feststehenden, der andere auf einen beweglichen Spiegel, die jeweils senkrecht zum Strahlengang stehen. An diesen beiden Spiegeln werden die Teilstrahlen zum Strahlteiler zurückreflektiert und überlagert auf den Detektor geleitet. Die Position des beweglichen Spiegels bestimmt die Laufzeit- bzw. Wegdifferenz zwischen den Teilstrahlen bei der Überlagerung. Am Detektor wird die Intensität des interferierenden Strahlbündels als Funktion des Wegunterschieds erfasst. Dies ergibt das Interferogramm $I(x)$.

Die beiden Spektrometer in Kiruna und in Izaña besitzen jeweils zwei Detektoren: einen MCT- (Mercury-Cadmium-Telluride) und einen InSb-Detektor (Indium-Antimonide). Die verwendeten Filter entsprechen den Empfehlungen des NDSC.

Zusätzlich zur analysierten Infrarot-Strahlung wird monochromatisches Licht eines He-Ne-Lasers in das Interferometer eingekoppelt. Dieses monochromatische Licht ist frequenzstabilisiert. Der Laserstrahl ist parallel zu dem IR-Strahl orientiert und wird gemeinsam mit dem IR-Strahl im Interferometer transmittiert. Dadurch entstehen simultan die Interferenzen des Laserstrahls. Durch die hohe Genauigkeit des Laserstrahls bezüglich der Wellenlänge kann dieser sehr gut zur Kalibrierung des Wegunterschieds der beiden Teilstrahlen verwendet werden.

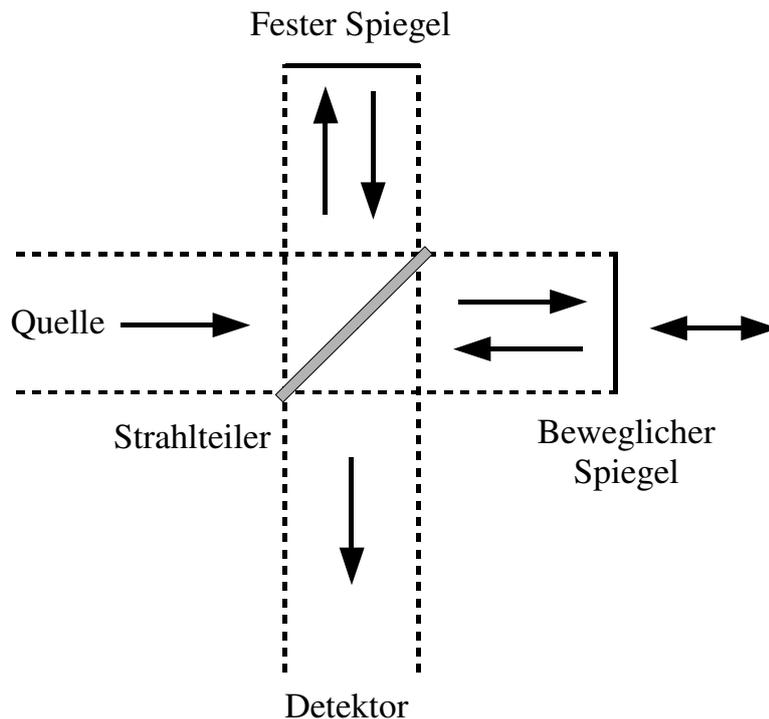


Abb. 3.1: Aufbau eines FTIR-Spektrometers

3.2 Mathematische Hintergründe

3.2.1 Die Fouriertransformation

Das Interferogramm $I(x)$, das die Überlagerung von mehreren harmonischen Schwingungen darstellt, kann mittels einer Fouriertransformation in ein Spektrum umgewandelt werden. Zur Vereinfachung wird zuerst der Fall einer monochromatischen Lichtquelle, wie z. B. eines Lasers, als gestrichene Größen dargestellt.

Das Interferometer erzeugt und überlagert zwei Wellenzüge mit relativer Phasendifferenz, die abhängig ist von der Verschiebung des Spiegels x und damit des Wegs, den der Lichtstrahl zurückgelegt hat. Diese Teilwellen interferieren konstruktiv, d. h. sie liefern ein maximales Detektorsignal, falls ihre optische Weglängendifferenz ein exaktes Vielfaches der Wellenlänge λ ist:

$$2x = n\lambda \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.1)$$

Ein minimales Detektorsignal tritt auf, wenn die Interferenz destruktiv ist, d. h. wenn $2x$ ein ungerades Vielfaches von $\lambda/2$ ist.

Die komplette Abhängigkeit der Intensität $I'(x)$ der monochromatischen Lichtquelle vom Weg x wird durch eine Cosinusfunktion bestimmt:

$$I'(x) = S'(k) \cos(2\pi kx) \quad (3.2)$$

Hier wurde, wie in der Fourier-Transform-Spektroskopie üblich, die Wellenzahl $k = \lambda^{-1}$ gesetzt. Dabei ist $S'(k)$ die Intensität der monochromatischen Linie bei Wellenzahl k .

Für eine polychromatische Lichtquelle muss über alle monochromatischen Beiträge integriert werden, wobei zur Vereinfachung ein zum Ursprung symmetrisches Spektrum vorausgesetzt wird, so dass auch über negative Wellenzahlen integriert werden kann:

$$I(x) = \int_{k=-\infty}^{\infty} S(k) \cos(2\pi kx) dk \quad (3.3)$$

Diese Gleichung zeigt, dass das Interferogramm $I(x)$ nichts anderes als die Fouriertransformation des Spektrums ist. Somit kann das Spektrum $S(k)$ über eine Fouriertransformation aus dem Interferogramm berechnet werden:

$$S(k) = \int_{x=-\infty}^{\infty} I(x) \cos(2\pi kx) dx \quad (3.4)$$

Die Gleichungen (3.3) und (3.4) geben zwar eine anschauliche Darstellung der mathematischen Operationen, gelten aber nur für kontinuierlich aufgenommene Interferogramme. Da das Interferogramm aber diskret ist, also nur auf einzelnen äquidistanten Stützstellen aufgenommen wird, muss die diskrete Fouriertransformation aus Kapitel 3.2.4 angewandt werden.

3.2.2 Die Phasenkorrektur

Wie bereits beschrieben, geben die Gleichungen (3.3) und (3.4) zwar eine anschauliche Darstellung der mathematischen Operationen, für unsere Anwendungen müssen aber Korrekturen zum Phasenwinkel $2\pi kx$ hinzugefügt werden, die u. a. durch unterschiedliche optische Eigenschaften des Strahlteilers für das Infrarotlicht des Messstrahls und das sichtbare Licht des Lasers oder auch durch die Frequenzabhängigkeit der Elektronik entstehen. Deswegen muss bei Gleichung (3.3) das wellenzahlabhängige Phasenspektrum $\Phi(k)$ berücksichtigt werden:

$$I(x) = \int_{k=-\infty}^{\infty} S(k) \cos(2\pi kx + \Phi(k)) dk \quad (3.5)$$

Wir definieren, dass das Phasenspektrum punktförmig ist, d. h. $\Phi(k) = -\Phi(-k)$, und in imaginärer Schreibweise:

$$I(x) = \int_{k=-\infty}^{\infty} S(k) e^{i(2\pi kx + \Phi(k))} dk \quad (3.6)$$

3 Das Fourierspektrometer

Durch Inversion von Gleichung (3.6) erhält man:

$$C(k) = \int_{x=-\infty}^{\infty} I(x) e^{-i(2\pi kx)} dx \quad (3.7)$$

$C(k)$ ist ein komplexes Spektrum, das aus dem Realteil $S_{RE}(k)$ und dem Imaginärteil $S_{IM}(k)$ besteht. Es lässt sich auch als Produkt des gesuchten Amplitudenspektrums $S(k)$ mit dem komplexen Anteil $e^{i\Phi(k)}$ schreiben:

$$\begin{aligned} C(k) &= S_{RE}(k) + i S_{IM}(k) \\ &= S(k) e^{i\Phi(k)} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Aus Gleichung (3.7) und (3.8) erhält man das reale Spektrum $S(k)$. Dieser Schritt wird Phasenkorrektur genannt.

$$S(k) = e^{-i\Phi(k)} \int_{x=-\infty}^{\infty} I(x) e^{-i(2\pi kx)} dx \quad (3.9)$$

Die Phase ist nach Gleichung (3.8) festgelegt.

3.2.3 Das Apparateprofil

Ein FTIR-Spektrometer kann das Interferogramm nicht wie in den Gleichungen (3.6) und (3.7) von $-\infty$ bis $+\infty$ aufzeichnen, sondern nur in einem bestimmten Intervall, da die Wegdifferenz begrenzt ist und somit der Spiegelweg endlich ist. Dadurch endet das Interferogramm bei einer endlichen optischen Wegdifferenz. Deshalb wird das aufgenommene endliche Interferogramm I_{mess} mit der sogenannten Apodisierungsfunktion $A(x)$ multipliziert:

$$I_{mess}(x) = I(x) A(x) \quad (3.10)$$

Für die im Rahmen dieser Arbeit ausgewerteten Spektren wurde für $A(x)$ die Rechteckapodisierung gewählt, wobei OPD_{max} (engl.: $OPD = \mathbf{O}$ ptical \mathbf{P} ath \mathbf{D} ifference) den größtmöglichen Gangunterschied bezeichnet.

$$A(x) = \begin{cases} 1 & : 0 \leq x \leq OPD_{max} \\ 0 & : sonst \end{cases}$$

In der Regel wurde er beim IFS 120M in Izaña zu $OPD_{max} = 250$ cm und beim IFS 120HR in Kiruna zu $OPD_{max} = 180$ cm gewählt.

Das gemessene Interferogramm I_{mess} ist das Produkt aus dem endlichen Interferogramm und der Rechteckapodisierung. Dies entspricht einer Faltung des Spektrums. Ein Nachteil der Apodisierung ist, dass die Linienbreite zunimmt und damit die spektrale Auflösung, die proportional zu OPD_{max} ist, geringer wird.

Um das reale Apparateprofil zu bestimmen und zu kontrollieren, werden regelmäßig Gaszellenmessungen durchgeführt. Dafür wird eine Gaszelle, die standardmäßig mit 0,1 hPa N_2O gefüllt wird, in den Strahlengang einer Laborquelle gebracht. Diese Laborquelle ist im Fall von Kiruna und Izaña ein Schwarzkörperstrahler, der eine Temperatur von 1000 °C hat. Mit der Software LINEFIT (Hase et al., 1999) wird die gemessene mit der theoretischen Linienform verglichen und dadurch die instrumentelle Linienform¹ berechnet. Abweichungen zwischen der tatsächlichen und der idealen Linienform entstehen vor allem durch eine nicht perfekte Justierung des Messgerätes.

3.2.4 Die diskrete Fouriertransformation

Wie in Kapitel 3.2.1 beschrieben, wird das Interferogramm nicht kontinuierlich, sondern an N diskreten äquidistanten Stützstellen aufgenommen. Somit müssen die Gleichungen (3.6) und (3.7) durch Gleichungen der diskreten Fouriertransformation ersetzt werden, wie dies z. B. bei Beer (1992) gezeigt wird:

$$I(n\Delta x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} S(m\Delta k) e^{-i2\pi \frac{nm}{N}} \quad (3.11)$$

$$S(m\Delta k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} I(n\Delta x) e^{i2\pi \frac{nm}{N}} \quad (3.12)$$

Dabei werden die kontinuierlichen Variablen x und k durch $n\Delta x$ bzw. $m\Delta k$ ersetzt. Der spektrale Abstand Δk ist mit der Wegdifferenz Δx folgendermaßen verknüpft:

$$\Delta k = \frac{1}{N\Delta x} \quad (3.13)$$

Die spektrale Auflösung eines FTIR-Spektrometers ist also umgekehrt proportional zur maximal erreichbaren optischen Wegdifferenz der interferierenden Strahlen.

Die diskrete Abtastung bestimmt das Spektrum aus dem Interferogramm nur dann eindeutig, wenn die Bandbreite des Signals beschränkt ist. Somit dürfen nur Interferogramme aus dem Frequenzintervall $\nu = 0$ bis ν_N enthalten sein, damit die Funktion eindeutig bestimmt werden kann. ν_N , die Nyquist-Frequenz, ist hierbei die maximale Frequenz:

$$\nu_N = \frac{1}{2\Delta x} \quad (3.14)$$

Anteile des Signals aus höheren Frequenzen werden in das Intervall 0 bis ν_N eingespiegelt, so dass dann die Funktion aufgrund der Überlagerung nicht mehr eindeutig ist.

¹engl.: instrumental line shape (ILS)

3.3 Instrumentelle Fehlereinflüsse

In diesem Kapitel werden verschiedene Fehlerquellen, die durch das Instrument selbst verursacht werden, beschrieben.

3.3.1 Interferenzen an Grenzflächen

Bevor die zu untersuchende Strahlung auf den Detektor trifft, dessen Oberfläche eine Grenzfläche darstellt, durchläuft sie im Spektrometer viele weitere Grenzflächen. An jeder dieser Grenzflächen ändert sich der Brechungsindex sprunghaft. Dadurch kommt es zu Reflexionen, die zu Vielstrahlinterferenzen und zu Variationen der effektiven instrumentellen Transmission führen. Um die dadurch entstehenden Interferenzeffekte zu minimieren, werden optische Fenster und Filter gekeilt und geneigt in den Strahlengang eingesetzt.

3.3.2 Nichtlinearität

Zur Messung des Filterbereiches von 700 cm^{-1} bis 1350 cm^{-1} , in dem u. a. die Signaturen von Ozon und HNO_3 liegen, wird ein photoleitender MCT-Detektor verwendet, der sich nichtlinear verhält, d. h. die Intensitätsverhältnisse der einzelnen spektralen Komponenten des Spektrums werden verzerrt wiedergegeben. So treten aufgrund von nichtlinearen Verzerrungen des Interferogramms Grundlinienartefakte im Spektrum auf, die entfernt werden müssen. Diese Korrektur kann mit der Mess- und Auswertesoftware OPUS der Firma Bruker vorgenommen werden. Für die Nichtlinearitätskorrektur sind im Filterbereich einige gesättigte Signaturen notwendig. Durch diese wird eine Kurve gelegt und der entsprechende Versatz wird dann abgezogen und die Grundlinie korrigiert (Hase, 1995).

4 Statistik

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Messergebnisse zweier Geräte miteinander verglichen. Da beide Messungen fehlerhaft sind, braucht man statistische Verfahren, um diese miteinander vergleichen zu können und um zu prüfen, ob sie konsistent sind.

Allgemein kann man ein Messergebnis der Größe x angeben als:

$$(\text{gemessener Wert von } x) = x_{Best} \pm \delta x \quad (4.1)$$

mit

$$\begin{aligned} x_{Best} &= \text{Bestwert (bester Schätzwert) von } x \\ \delta x &= \text{Unsicherheit oder Fehler der Messung.} \end{aligned}$$

Gleichung (4.1) bedeutet, dass die Messgröße mit „vernünftiger Sicherheit“ zwischen $x_{Best} + \delta x$ und $x_{Best} - \delta x$ liegt (Taylor, 1988).

Die Messunsicherheit alleine stellt noch keine Aussage bzgl. der Unsicherheit dar, da diese je nach Größenordnung von x sehr genau oder sehr ungenau sein kann. Deshalb wird die sogenannte relative Unsicherheit, die auch Präzision genannt wird, eingeführt:

$$\text{Relative Unsicherheit: } = \frac{\delta x}{|x_{mess}|} \quad (4.2)$$

4.1 Fortpflanzung von Unsicherheiten

Die Größen x, \dots, z mit den Unsicherheiten $\delta x, \dots, \delta z$ wurden gemessen und die Messwerte wurden dazu verwendet, die Funktion $q(x, \dots, z)$ zu berechnen. Wenn die Unsicherheiten von x, \dots, z unabhängig und zufällig sind, dann gilt für die Unsicherheit von q

$$\delta q = \sqrt{\left(\frac{\delta q}{\delta x} \delta x\right)^2 + \dots + \left(\frac{\delta q}{\delta z} \delta z\right)^2}. \quad (4.3)$$

Für diese Unsicherheit gilt auch, dass sie auf keinen Fall größer als die Summe ist:

$$\delta q \leq \left|\frac{dq}{dx}\right| \delta x + \dots + \left|\frac{dq}{dz}\right| \delta z. \quad (4.4)$$

Dies gilt sogar für korrelierte Daten.

4.2 Statistische Definitionen

Stehen x_1, \dots, x_N für N getrennte Messungen einer Größe x , so ist der arithmetische Mittelwert:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (4.5)$$

Die Standardabweichung (Schätzwert für die mittlere Unsicherheit der Messwerte x_1, \dots, x_N) ist:

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad (4.6)$$

Die Standardabweichung des Mittelwerts ist:

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma_x}{\sqrt{N}} \quad (4.7)$$

4.3 Statistische Verteilungen

4.3.1 Die Normalverteilung

Eine Funktion, die die Häufigkeit angibt, mit der wiederholte Messungen die verschiedenen möglichen Werte liefern, heißt Verteilung. Eine Grenzverteilung ist die Verteilung, die man im Grenzfall einer sehr großen Anzahl N von Messungen erhielte. Sie gibt also die Wahrscheinlichkeit an, mit der eine Messung irgendeinen der möglichen Werte liefert. Deshalb wird die Grenzverteilung auch oft Wahrscheinlichkeitsverteilung genannt.

Die Gauß- oder Normalverteilung ist eine solche Grenzverteilung. Sie beschreibt die Verteilung der Ergebnisse aller Messungen, bei denen viele Fehlerquellen auftreten, die alle zufällig und klein sind.

Die Gauß-Verteilung ist eine Glockenkurve, die um den Punkt $x = X$ zentriert ist. Mathematisch läßt sie sich folgendermaßen beschreiben:

$$f(x) = e^{-\frac{(x-X)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.8)$$

mit σ als Breiteparameter. Für große Werte von σ ist die Glockenform breit, für kleine Werte von σ schmal.

Nach einigen Umformungen (z. B. Taylor 1988) ergibt sich schließlich die normierte Gauß- oder Normalverteilungsform:

$$f_{X,\sigma}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-X)^2}{2\sigma^2}}. \quad (4.9)$$

Wenn die Messwerte gemäß Gleichung (4.9) verteilt sind, dann wäre nach unendlich vielen Versuchen der Mittelwert \bar{x} gleich dem wahren Wert X , um den die Gauß-Funktion zentriert ist. Bei einer großen, endlichen Zahl von Versuchen erhält man einen Mittelwert, der nahe an X liegt. Ähnlich ist es mit der Standardabweichung: Nach unendlich vielen Messungen ist der Breiteparameter σ gleich der Standardabweichung. Bei endlich vielen Messungen liegt die Standardabweichung in der Nähe von σ .

4.3.2 Die χ^2 -Verteilung

Als Test, ob die Ergebnisse zusammenpassen, wird ein sogenannter χ^2 -Test durchgeführt: Der χ^2 -Test ist ein statistisches Testverfahren, um zu prüfen, ob ein Ergebnis mit den hypothetisch getroffenen Annahmen überhaupt verträglich ist. Allgemein kann man χ^2 normiert folgendermaßen definieren:

$$\chi_n^2 = \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \quad (4.10)$$

Hier ist x_i die gaußverteilte Zustandsvariable. Für die χ^2 -Verteilung ist die mehrfache Wiederholung der Messungen notwendig.

Merkmale der χ^2 -Verteilung sind (mit d als Anzahl der Freiheitsgrade):

- Der Mittelwert für χ^2 liegt bei d .
- Die Varianz oder Streuung von χ ist $2d$.

Bei einem Messgerät kann mit dem χ^2 -Test überprüft werden, ob die a-priori-Annahmen bzw. die Statistik verträglich mit der Messung sind.

Wie der χ^2 -Test bei einem Vergleich von zwei Fernerkundungsinstrumenten verwendet wird, ist in Kapitel 8.4 beschrieben.

4.4 Kovarianz und Korrelation

Kovarianzmatrizen sind ein Maß für die Streuung der Profile.

Die Kovarianz \mathbf{S}_{xy} von N Paaren $(x_1 \ y_1), \dots, (x_N \ y_N)$ ist

$$\mathbf{S}_{xy} = \frac{1}{N} \sum (x_i - \bar{x}) (y_i - \bar{y}). \quad (4.11)$$

Weitere Literatur zur Statistik findet sich z. B. bei Taylor (1988).

5 ENVISAT

ENVISAT, der in der Nacht vom 28. Februar auf den 1. März 2002 in Kourou (Französisch Guayana) an Bord einer Ariane 5 Trägerrakete gestartet ist, ist der größte Satellit, der von der ESA (**E**uropean **S**pace **A**gency) jemals entwickelt wurde. Er hatte ein Abfluggewicht von 8,2 t, ist etwa 10 m lang und fliegt in 800 km Höhe auf einer sonnensynchronen polaren Umlaufbahn mit einer Inklination von 98° . Ein Orbit dauert etwa 100 Minuten. So kommt es zu 14 Umläufen pro Tag. Alle 35 Tage wird ein Orbit wiederholt. Die Missionsdauer ist auf fünf Jahre ausgelegt.

Aufgrund der Tatsache, dass ENVISAT ein so komplexes Projekt ist, das es in solch einer Größe vorher noch nicht gab, kam es vor dem Start und auch später bei der Bereitstellung der Daten zu Verzögerungen.

ENVISAT hat zehn Messgeräte an Bord, mit denen u. a. Landoberflächen, Ozeane, Eiskappen an den Polen und die Atmosphäre beobachtet werden, um anthropogene Umwelteinflüsse auf der Erde und Atmosphäre zu untersuchen. Drei dieser Messgeräte sind Fernerkundungsgeräte für atmosphärische Chemie. Diese drei Messgeräte, die mit unterschiedlicher Messtechnik und -geometrie Informationen über den Gehalt verschiedener atmosphärischer Spurengase liefern, sind MIPAS (**M**ichelson **I**nterferometer für **P**assiv **A**tmosphärische **S**ondierung), SCIAMACHY (**S**Canning **I**maging **A**bsorption **S**pectro**M**eter for **A**tmospheric **C**Hartograph**Y**) und GOMOS (**G**lobal **O**zone **M**onitoring by **O**ccultation of **S**tars). Diese Sensoren werden in den folgenden Kapiteln genauer vorgestellt.

Abbildung 5.1 zeigt eine schematische Darstellung von ENVISAT, auf der die drei atmosphärischen Fernerkundungssensoren MIPAS, SCIAMACHY und GOMOS gut zu erkennen sind.

5.1 MIPAS

5.1.1 Instrumentenbeschreibung und Funktionsweise

MIPAS ist ein Fouriertransformations-Spektrometer zur Messung von hochaufgelösten Emissionsspektren in Horizontsondierung in der mittleren und oberen Atmosphäre. Es ist eine Weiterentwicklung bodengebundener (Adrian et al., 1991, 1993), ballon- (Fischer und Oelhaf, 1996) und flugzeuggetragener (Blom et al., 1999) Versionen.

Da der MIPAS-Sensor nicht auf direktes oder reflektiertes Sonnenlicht oder auf Sterne angewiesen ist, kann er, im Gegensatz zu SCIAMACHY und GOMOS, die Erdatmosphäre während des gesamten Umlaufs von ENVISAT sondieren, so auch während der

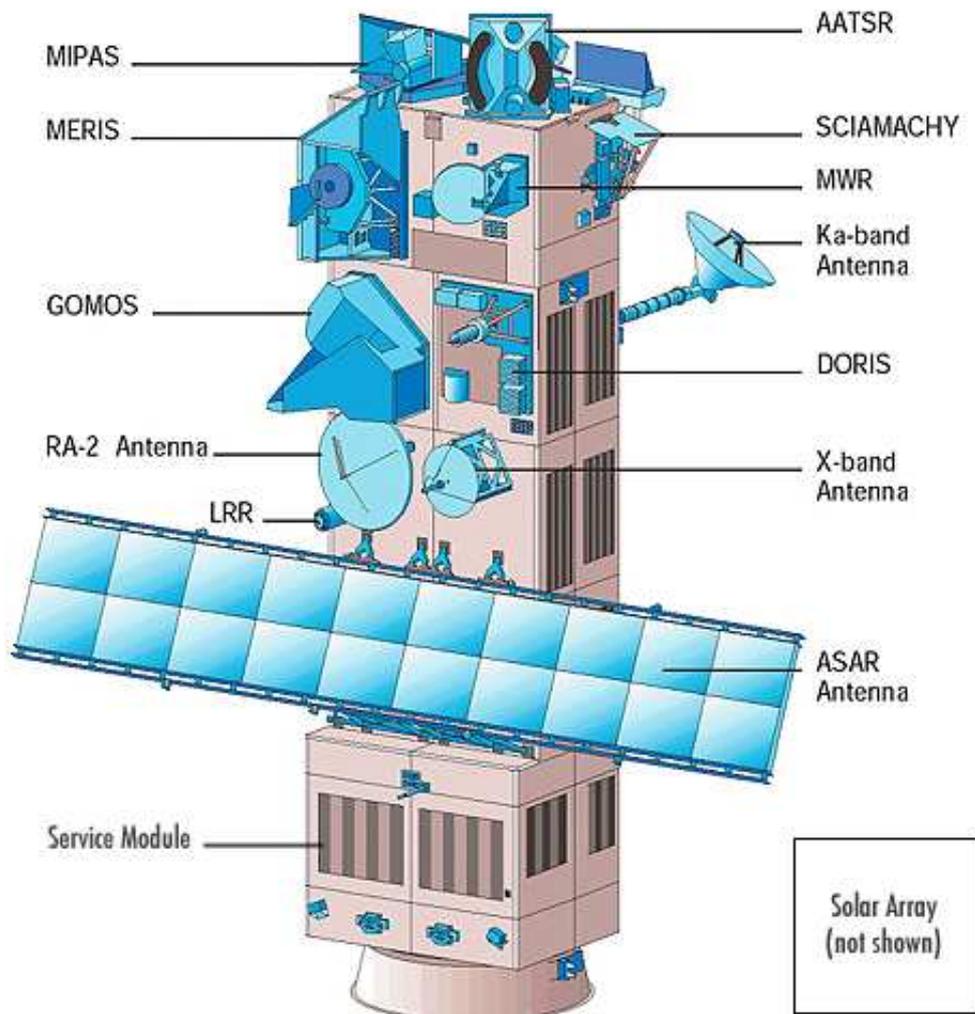


Abb. 5.1: Schematische Darstellung von ENVISAT mit den drei atmosphärischen Fernerkundungssensoren MIPAS, SCIAMACHY und GOMOS (ESA)

Nacht. Damit ist MIPAS ideal geeignet, die Zusammensetzung der winterlichen polaren Stratosphäre zu untersuchen (Fischer, 1992, 1993; Fischer und Oelhaf, 1996).

MIPAS basiert messtechnisch auf einem Michelson-Interferometer, wie in Kapitel 3 dargestellt. Mit Hilfe von zwei beweglichen Spiegeln wird der Azimut- und Elevationswinkel eingestellt, so dass, wie in Abbildung 5.2 dargestellt, Sequenzen von vertikal übereinander liegenden Interferogrammen gemessen werden können.

Im Standardmessmodus werden durch Horizontsondierungen im infraroten Spektralbereich zwischen ca. $4 \mu\text{m}$ und $15 \mu\text{m}$, der mit fünf Kanälen überdeckt wird, aus Emissionsmessungen Profile von 25 atmosphärischen Spurenstoffen in einem Höhenbereich zwischen 12 km und 68 km bestimmt. In Nicht-Standard-Moden wird auch der Höhenbereich oberhalb von 68 km bis zur Thermosphäre abgedeckt. In diesem Spektralbereich emittieren viele Spurengase, die für die atmosphärische Chemie und die dortigen Emissionseigenschaften wichtig sind. Die spektrale Auflösung beträgt $0,035 \text{ cm}^{-1}$, so dass einzelne Linien erfasst werden können.

Aus MIPAS-Messungen werden Profile von Druck und Temperatur und Spurengasen, u. a. von Ozon (O_3), Wasserdampf (H_2O), Stickstoffdioxid (NO_2), Distickstoffoxid (N_2O), Methan (CH_4), Chlornitrat ($ClONO_2$) und Salpetersäure (HNO_3) bestimmt. Darüber hinaus können mit MIPAS Wolken erkannt und vertikale Aerosolprofile bestimmt werden.

Aufgrund der tangentialen Beobachtungsgeometrie der Horizontsondierung (Abbildung 5.2) stammt die Strahlung aus Höhenschichten zwischen dem Tangentenpunkt und den Schichten darüber. Die Emission von Spurengasen wird in erster Linie in atmosphärischen Schichten nahe des Tangentenpunktes gemessen.

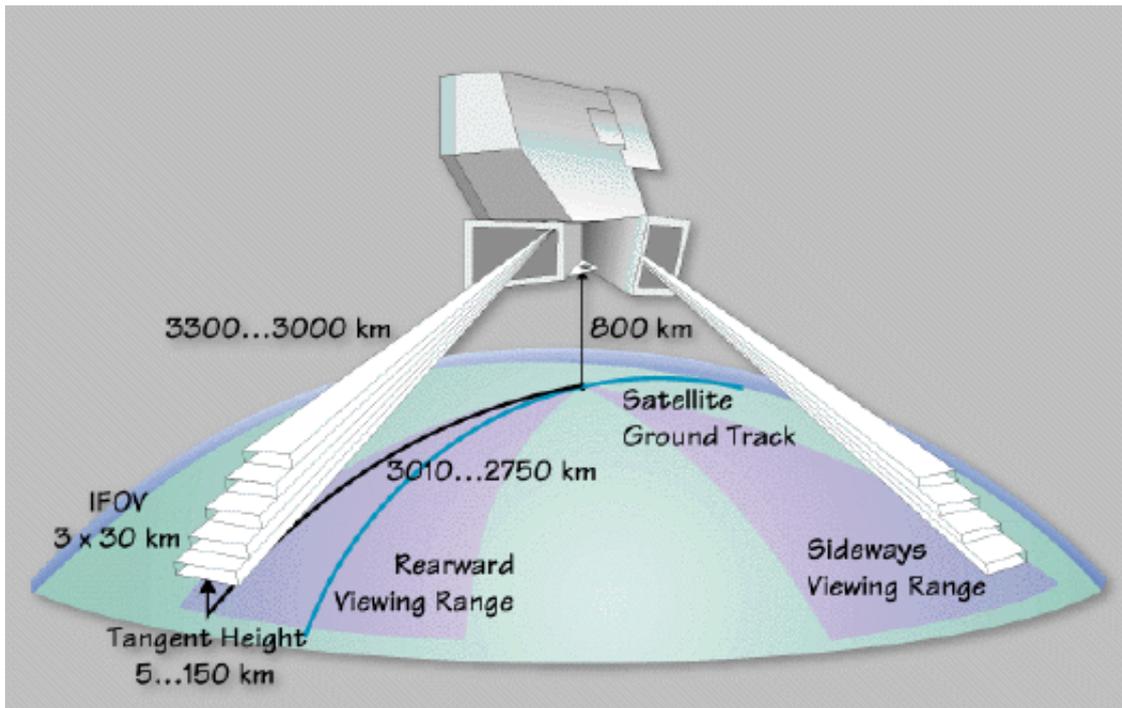


Abb. 5.2: Messgeometrie von MIPAS (ESA)

Die horizontale Auflösung beträgt bei der üblicherweise verwendeten rückwärts gerichteten Sondierung am Tangentenpunkt etwa $3\text{ km} \times 30\text{ km}$, d. h. das Sichtfeld¹ ist nur 3 km hoch, um eine gute vertikale Auflösung zu erreichen, aber 30 km breit, um genügend Strahlung zu sammeln. Dies ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Eine Höhenabtastung dauert typischerweise 75 Sekunden und beinhaltet etwa 16 Interferometerdurchläufe. Bei jedem vierten Höhenscan wird eine Kalibrierung gegen die kalte Weltraumstrahlung durchgeführt. Dabei ist der Eingangsspiegel von MIPAS auf eine Tangentenhöhe von etwa 200 km gerichtet. Danach folgen wieder atmosphärische Messungen.

Abbildung 5.3 zeigt das Messprinzip von MIPAS schematisch. Die Besonderheit von MIPAS ist, dass es ein gekühltes Interferometer ist. Bisher existierten auf Satelliten lediglich ungekühlte Interferometer für die Sondierung der Strato- und der Troposphäre.

Das Instrument ermöglicht Messungen in zwei Richtungen: rückwärts innerhalb eines 35° breiten Bereiches entgegen der Flugrichtung, und seitwärts innerhalb eines 30° breiten Bereiches entgegengesetzt zur Sonnenrichtung. Der rückwärts gerichtete Bildbereich

¹engl.: FOV = field of view

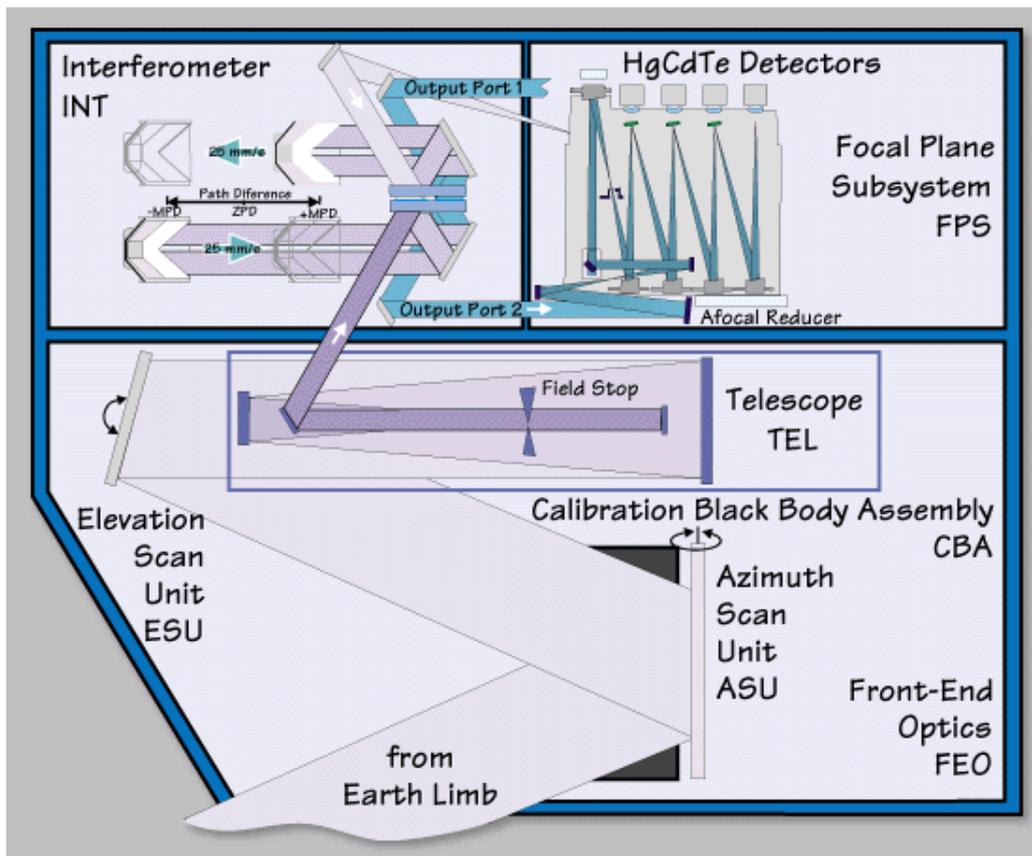


Abb. 5.3: Messprinzip von MIPAS schematisch (ESA)

wird für die meisten Messungen benutzt, da er gute Erdüberdeckung bietet, inklusive der Polregionen. Der zur Seite gerichtete Strahl soll für die Beobachtung von speziellen Ereignissen verwendet werden, wie z. B. Vulkanausbrüche, Spurengaskonzentrationen entlang von Hauptflugkorridoren oder Konzentrationsgradienten senkrecht zu Dämmerungslinien.

Die Absorptions- und Emissionseigenschaften der Spurengase hängen stark von der Umgebungstemperatur und dem Druck ab. Deshalb werden beim Spurengasretrieval zuerst die Druck- und Temperaturprofile bestimmt. Danach folgt die Bestimmung der Spurengasprofile. Die vertikale Auflösung der Profile beträgt etwa 3 km. Für die Bestimmung der Profile werden, wie bei den bodengebundenen FTIR-Messungen, eng begrenzte Spektralintervalle, sogenannte Auswertefenster oder Microwindows, benutzt, in denen sich entsprechende Emissionslinien befinden.

Es existieren operationelle und wissenschaftliche Auswerteverfahren: die ESA wertet die oben genannten Standardprodukte operationell aus (ESA, 2000). Zusätzlich gibt es noch wissenschaftliche Auswertung, die z. B. am FZK vorgenommen wird. Detaillierte Beschreibungen dieses Auswerteverfahrens finden sich u. a. bei Clarmann et al. (1999a,b, 2000, 2001, 2003a,b,d,e,f), Ridolfi et al. (2000) und Stiller et al. (2002).

MIPAS entspricht weitgehend den Erwartungen. Doch es traten auch einige kleine Probleme auf, wie beispielsweise Eis auf den Detektoren, das durch regelmäßiges Aufwärmen aber beseitigt werden kann. Außerdem kamen über kleine Vibrationen Störungen auf die

Messungen und es gab Probleme beim Vor- und Zurückfahren des Spiegels. Ein größeres Problem gibt es bei der Datenbereitstellung von Seiten der ESA und durch häufige Abschaltungen des Messgerätes. Diese Probleme betreffen aber nicht nur MIPAS, sondern auch die anderen Messinstrumente.

5.1.2 Datenprodukte

MIPAS liefert verschiedene Datenprodukte, die in verschiedene Bereiche aufgeteilt sind: Sogenannte Level 1b Daten beinhalten kalibrierte Emissionsspektren aus Horizontgeometrie mit Angaben über die geographische Lage.

Level 2 Daten sind vertikale Profile von Atmosphärenparametern, wie Druck und Temperatur und Spurengasprofile von O_3 , H_2O , CH_4 , N_2O und HNO_3 . Diese werden global beobachtet, d. h. die Stratosphäre und die Mesosphäre der Erde werden an allen Längen- und Breitengraden untersucht. Die vertikale Auflösung beträgt 3 bis 4 km, die horizontale Auflösung 300 bis 500 km, abhängig vom Tangentenhöhenbereich und den optischen Eigenschaften der Atmosphäre. Dabei wurden verschiedene Versionen der ESA-Daten untersucht. Zusätzlich zu diesen offiziellen ESA-Daten gibt es Daten aus der wissenschaftlichen Auswertung. Hierfür wurden zunächst Spurengasprofile von O_3 betrachtet.

Eine genauere Analyse der Profile und der Vergleich mit bodengebundenen FTIR-Messungen war Ziel dieser Arbeit und wird in Kapitel 9 ausführlich dargestellt.

5.2 SCIAMACHY

5.2.1 Instrumentenbeschreibung und Funktionsweise

SCIAMACHY ist messtechnisch die Weiterentwicklung des GOME-Sensors (GOME = **G**lobal **O**zone **M**onitoring **E**xperiment), der seit April 1995 an Bord des ERS-2 Satelliten fliegt (Bovensmann et al., 1999; Burrows et al., 1999). Viele Software-Programme, Algorithmen und Datenbanken von GOME konnten mit nur kleinen Änderungen für SCIAMACHY übernommen werden. SCIAMACHY wurde entwickelt, um globale Messungen von Spurengasen in der Troposphäre und der Stratosphäre durchzuführen. Dabei sollen die Säulengehalte der Spurengase O_3 , NO_2 , SO_2 , $OCIO$, BrO und H_2CO sowie Spurengasprofile von O_3 bestimmt werden. Die Kanäle der beiden Messinstrumente SCIAMACHY und GOME überdecken die gleichen Wellenzahlen im UV/Vis Bereich: 12500 cm^{-1} bis 41667 cm^{-1} . Zusätzlich dazu besitzt SCIAMACHY einen Kanal im IR, so dass dort weitere Spurengase (N_2O , CH_4 , CO , H_2O und CO_2) untersucht werden können. Besonderes Gewicht fällt auf die Detektion von Wolken, da diese sich störend auf untere Atmosphärenschichten auswirken können.

Die direkte Sonnenstrahlung und die von Erde und Atmosphäre zurückgestreute Sonnenstrahlung werden mit einem Gitterspektrometer analysiert und mittels einer Inversionsrechnung die Menge und die Verteilung der absorbierenden Gase bestimmt.

SCIAMACHY hat drei unterschiedliche Beobachtungsgeometrien: Horizontgeometrie (Limb), Vertikalsondierung (Nadir) und Sonnen- oder Mond-Okkultationsmessungen. Die beiden zuerst genannten sind in der Abbildung 5.4 dargestellt. Dabei stellen die gelben Strahlen die Horizontgeometrie dar, die roten die Vertikalsondierung. Durch die verschiedenen Beobachtungsmöglichkeiten kann man sowohl Säulengehalte als auch Profile von Spurengasen bestimmen.

In Horizontsondierung betrachtet das Instrument den Rand der Atmosphäre. Die Geometrie ist die gleiche wie bei MIPAS, allerdings schaut SCIAMACHY zur Seite in Bezug auf die Flugrichtung, nicht wie MIPAS nach hinten. Die vertikale Auflösung beträgt 3 km, die horizontale Auflösung zwischen 240 km und 960 km, abhängig von Abtastweite, Abtastgeschwindigkeit, Tangentenhöhe und optischen Eigenschaften der Atmosphäre.

Bei der Vertikalsondierung liegt das Luftpaket, das untersucht wird, genau unterhalb des Satelliten. Jede Abtastung überdeckt ein Gebiet auf dem Boden von bis zu 960 km mit einer maximalen Auflösung von 26 km x 15 km. Die räumliche Auflösung ist abhängig von Abtastgeschwindigkeit und Integrationszeit. Typische Werte sind 30 km x 30 km x 240 km.

Die typische horizontale Auflösung am Erdboden beträgt je nach Spektralbereich und Sonnenstand zwischen 40 km x 40 km und 240 km x 40 km. Dabei wird die konstante Kantenlänge in Flugrichtung durch die Fluggeschwindigkeit des Satelliten von etwa 7 km/s relativ zur Erdoberfläche gegeben.

Eine der wichtigsten Eigenschaften von SCIAMACHY ist die Möglichkeit, die gleiche Luftmasse erst in Horizontgeometrie und dann, sieben Minuten später, mit Vertikalsondierung zu beobachten, und so kann die Erde innerhalb von sechs Tagen vollständig abgetastet



Abb. 5.4: Alternierende Nadir/Horizontgeometriemessungen von SCIAMACHY zur Ableitung des troposphärischen Spurengasanteils (Universität Bremen, Institut für Umweltphysik)

werden. Die Kombination von Nadir- und Horizontmessungen ist in Abbildung 5.4 dargestellt.

Für die Okkultationsmessungen wird die Horizontgeometrie verwendet, nun aber mit der Sonne oder dem Mond im Sichtfeld des Satelliten. Die Dichte der Atmosphäre ergibt sich aus dem Vergleich der transmittierten Strahlung von Sonne oder Mond mit einer ungeschwächten Strahlungsquelle. Die Sonnenmessungen werden regelmäßig bei Sonnenaufgang zwischen 90°N und 65°N durchgeführt. Mondokkultationsmessungen (durchgeführt bei Mondaufgang zwischen 30°S und 90°S , was nur etwa eine Woche pro Monat möglich ist) werden lediglich für Prozessstudien genutzt.

SCIAMACHY soll als einziger der drei Chemiesensoren an Bord von ENVISAT durch die Kombination der alternierenden Horizont- und Vertikalsondierungen in der Lage sein, bei wolkenarmer bzw. wolkenloser Atmosphäre Spurengaskonzentrationen, wie z. B. NO_2 , H_2CO und SO_2 , in der unteren Troposphäre zu messen, indem man den aus den Messungen der Horizontsondierung erhaltenen Säulengehalt von dem aus den Vertikalmessungen abzieht. Ein Nachweis, dass dies wirklich funktioniert, konnte bisher allerdings nicht erbracht werden.

Die Bestimmung von Vertikalprofilen von Spurenstoffen soll mit Hilfe von Horizontsondierungen (Limbmessung) und Okkultationsmessungen (Transmissionsmessungen gegen Sonne und Mond) in den genannten Spektralbereichen möglich sein. Von der ESA wurden bei den kürzlich reprozessierten Daten auch vertikale Ozonprofile geliefert. Auch bei wissenschaftlichen Auswertungen der Universitäten Heidelberg und Bremen konnten solche Profile bereits abgeleitet werden. Diese konnten aber im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr berücksichtigt werden, da die Daten erst im April reprozessiert wurden.

5.2.2 Datenprodukte

Aus den SCIAMACHY-Daten werden folgende Datenprodukte abgeleitet: Sogenannte Level 1b Daten beinhalten nur kalibrierte Messungen (Horizontgeometrie-, Nadir-, und Sonnen-/Mond-Okkultationsmessungen).

Level 2 Daten beinhalten die vertikalen Säulengehalte von O_3 , NO_2 , H_2O , CO , N_2O und CH_4 . Unter speziellen Bedingungen, wie z. B. Vulkanausbrüche, Ozonloch-Bedingungen o. ä. können die vertikalen Säulengehalte von SO_2 , $OCIO$ und H_2CO bestimmt werden. Die Säulengehalte werden im UV/Vis und im NIR-Bereich bestimmt.

Zusätzlich zu den Säulengehalten werden auch Wolkenhöhen und -bedeckung beobachtet. Die Wolkenbeobachtungen basieren auf einem Algorithmus, der schon bei GOME benutzt wurde. Im NIR dagegen sollen die Daten mit einem neuen Algorithmus, genannt BIAS, bestimmt werden.

5.3 GOMOS

5.3.1 Instrumentenbeschreibung und Funktionsweise

GOMOS (**G**lobal **O**zone **M**onitoring by **O**ccultation of **S**tars) ist eine französisch-finnische Entwicklung (Bertaux et al., 1991). Der Sensor soll aus Okkultationsmessungen sehr genaue Profile von Spurengasen bestimmen. Diese Spurengase sind hauptsächlich Ozon (O_3), aber auch Wasserdampf (H_2O), Stickstoffdioxid (NO_2) und Stickstofftrioxid (NO_3).

GOMOS besteht aus einem UV-VIS-Spektrometer, das im Spektralbereich von 14815 cm^{-1} bis 40000 cm^{-1} misst, und einem IR-Spektrometer mit Spektralbereichen zwischen 12937 cm^{-1} und 13228 cm^{-1} sowie 10504 cm^{-1} und 10799 cm^{-1} . Zusätzlich besitzt GOMOS einen sogenannten „star tracker“ zur Positionsbestimmung und zwei weitere Photometer im Spektralbereich zwischen 19231 cm^{-1} und 21277 cm^{-1} bzw. 14286 cm^{-1} und 15385 cm^{-1} .

GOMOS ist wie SCIAMACHY ein abbildendes Spektrometer, das Lichtspektren aufzeichnet. Die Hauptlichtquelle von GOMOS sind Sterne. Durch die Position der ausgewählten Fixsterne ergeben sich etwa 40 Okkultationsmessungen pro Orbit, also 400 bis 600 Messungen pro Tag. Stellare Okkultationsmessungen sind Transmissionsmessungen der emittierten Strahlung von Fixsternen durch verschiedene Höhenbereiche der Erdatmosphäre. Bei bekannter Strahlungsquelle erlaubt die stellare Okkultationsmessung die Ableitung von Spurengasprofilen. Das Instrument benötigt Sterne 4. Größe oder heller und einen Temperaturbereich von 3000 K bis 30000 K. Probleme ergeben sich durch Szintillation bei hellem Hintergrund.

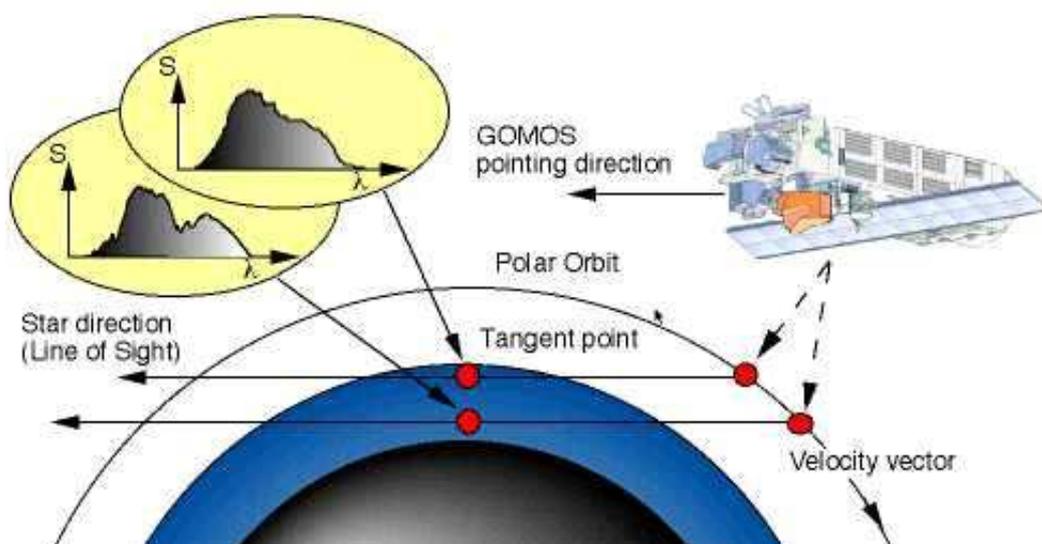


Abb. 5.5: Messprinzip von GOMOS (ESA)

In Abbildung 5.5 ist das Messprinzip von GOMOS dargestellt. Die Blickrichtung (LOS) des Instrumentes kann nacheinander in Richtung zu einem vorausgewählten Stern orientiert und beibehalten werden, während der Stern hinter der Atmosphäre der Erde am

Horizont beobachtet wird. Während der Sternenokkultation werden Spektren im UV-, VIS- und IR-Bereich kontinuierlich aufgezeichnet.

GOMOS kombiniert Selbstkalibrierung, hohe vertikale Auflösung und gute globale Überdeckung, indem es die Stern-Okkultationstechnik benutzt. Wegen der hohen Sensibilität selbst bei hohen Wellenzahlbereichen von 40000 cm^{-1} ist geplant, Ozonprofile zwischen etwa 15 km und etwa 90 km mit einer angestrebten vertikalen Auflösung von 1,7 km zu messen. Der große Höhenbereich, die Genauigkeit und die globale Überdeckung sind optimal auf der Nachtseite. Während der Beobachtungen auf der Tagesseite überlagert die in der Atmosphäre gestreute Sonnenstrahlung das Signal des Sterns, so dass zu diesem Zeitpunkt Messungen nur eingeschränkt möglich sind.

Wenn sich ein Stern dem Horizont nähert, wird sein Spektrum durch die Absorption der verschiedenen Gase in der Atmosphäre mehr und mehr abgeschwächt. Die verschiedenen Gase sind alle gekennzeichnet durch eine bekannte, eindeutig definierte spektrale Signatur. Zurück am Boden werden diese abgeschwächten und von GOMOS aufgezeichneten Spektren mit ungeschwächten Stern-Spektren, die einige Zehntelsekunden vorher, außerhalb der Atmosphäre aufgezeichnet wurden, verglichen. So können die Transmissionsspektren sehr genau bestimmt werden. Diese radiometrische Selbstkalibrierungsmethode ist sicher vor Empfindlichkeitsdrifts und ist deshalb imstande, die schwierigen Anforderungen einer verlässlichen Ermittlung von sehr kleinen Trends von Ozon und anderen Gasen zu erfüllen.

Zusätzlich zu den Spurengasprofilen kann aus den Rohdaten ein Temperaturprofil erstellt werden. Die Profile der übrigen oben genannten Spurengase und möglicherweise weiteren Spurengasen wie Brommonoxid (BrO) oder Chlordioxid (OCIO) werden zwischen 20 km und 40 km berechnet.

5.3.2 Datenprodukte

Aus GOMOS-Daten werden verschiedene Datenprodukte abgeleitet: Sogenannte Level 1b Daten beinhalten kalibrierte Horizontgeometrie-Messungen, deren geographische Lage bestimmt wurde.

Level 2 Daten beinhalten Profile der atmosphärischen Bestandteile von Ozon, NO_2 , NO_3 , O_2 , H_2O und Temperatur in einem Höhenbereich von 15 km bis 100 km.

Die Nachtprofile sind von guter Qualität, die bodengebundenen FTIR-Messungen können allerdings nur tagsüber gemessen werden. Die Tagesprofile dagegen sind noch von schlechter Qualität. Dies ist ein Grund, warum bislang kein Vergleich mit den bodengebundenen FTIR-Messungen, für die das Sonnenlicht notwendig ist, durchgeführt wurde.

6 Auswertemethodik der bodengebundenen solaren Absorptionsmessungen

Dieses Kapitel beschreibt, wie die Spurengasprofile aus den am Boden gemessenen Spektren abgeleitet werden. Dafür werden sowohl die Grundlagen als auch die durchgeführte Auswerteprozedur für die einzelnen Gase beschrieben. Zunächst wird als mathematische Grundlage die Strahlungsübertragungsgleichung (SÜG) vorgestellt, dann wird beschrieben, wie man aus den gemessenen Spektren Vertikalprofile erhält. Daran schließt sich eine kurze Fehlerbeschreibung an.

6.1 Strahlungsübertragungsgleichung

Beim Durchgang durch die Atmosphäre ändert sich die Strahlungsintensität durch Absorption, Emission und Streuung. Da im infraroten Spektralbereich die Wellenlängen viel größer sind als die streuenden Teilchen, kann die Streuung an Molekülen und Aerosolen vernachlässigt werden. Unter dieser Randbedingung und der Annahme von lokalem thermodynamischem Gleichgewicht¹, besitzt die integrierte Strahlungsübertragungsgleichung (SÜG), die den Zusammenhang zwischen Strahlungsfeld, Verteilung der Spurengase, Temperatur- und Druckprofil beschreibt, folgende Form:

$$S(\nu, z_o) = \underbrace{B(\nu, T_s) e^{-\tau(\nu, z_o, \infty)}}_{\text{solare Strahlung}} + \underbrace{\int_{z=z_o}^{\infty} \frac{1}{\mu} \kappa(\nu, z) B(\nu, T(z)) e^{-\tau(\nu, z_o, z)} dz}_{\text{atmosph. Emission}} \quad (6.1)$$

mit

¹engl.: LTE = Local Thermodynamic Equilibrium

6 Auswertemethodik der bodengebundenen solaren Absorptionsmessungen

$S(\nu, z_o)$	Strahldichte (Strahlungsenergie pro Zeit-, Flächen- und Raumwinkeleinheit) bei ν
$B(\nu, T_s)$	solare Planckfunktion
T_s	Temperatur der Sonnenoberfläche
ν	Frequenz
$\tau(\nu, z_o, \infty)$	optische Dicke der Atmosphäre bei ν zwischen Beobachter und dem oberen Rand der Atmosphäre
$\mu = \frac{dz}{ds}$	schräger Weg durch die Atmosphäre
$\kappa(\nu, z)$	Absorptionskoeffizient
$B(\nu, T(z))$	atmosphärische Planckfunktion
$T(z)$	Temperatur der Atmosphäre
$\tau(\nu, z_o, z)$	optische Dicke der Atmosphäre bei ν zwischen Beobachter und der Höhe z
z	Höhe
z_o	Höhe des Messgeräts

Hierbei ist die Planck-Funktion $B(k, T)$ die Quellfunktion für einen Schwarzkörper der Temperatur T :

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\left[\frac{h\nu}{k_B T}\right]} - 1} \quad (6.2)$$

Ferner ist $\tau(\nu, z_o, z)$ die optische Dicke der Atmosphäre bei der Frequenz ν zwischen dem Beobachter und der Höhe z :

$$\tau(\nu, z_o, z) = \int_{z'=z_o}^z \kappa(z') dz' \quad (6.3)$$

Der erste Term in Gleichung (6.1) beschreibt die beim Atmosphärendurchgang geschwächte Solarstrahlung. Die Planckfunktion dieses Terms ist um ein Vielfaches größer als die des zweiten Terms, der den Emissionsbeitrag der Erdatmosphäre beschreibt. Im mittleren Infrarot beträgt er relativ zur dazugehörigen Sonnenstrahlung nur etwa 1 %. Somit vereinfacht sich Gleichung (6.1) zu:

$$S(\nu, z_o) = B(\nu, T_s) e^{-\tau(\nu, z_o, \infty)} \quad (6.4)$$

Da u. a. das Spektrum nur an einigen Stellen und nicht kontinuierlich gemessen wird, muss für numerische Berechnungen die diskrete Version von Gleichung (6.4) verwendet werden. Dafür muss das eingestrahlte Spektrum mit der ILS gefaltet werden.

Mit Hilfe des Strahlungsübertragungsmodells KOPRA² werden die synthetischen Strahldichtespektren berechnet (Höpfner et al., 1998; Stiller et al., 1998; Stiller, 2000). Für diese Berechnung werden als Eingabedaten die geographische Lage der Messstation, der Sonnenelevationswinkel, Vertikalprofile von Temperatur und Druck, spektroskopische Daten der absorbierenden Gase und Instrumentenparameter berücksichtigt. Eine Strahlungsübertragungsrechnung, bei der alle eingehenden Parameter als bekannt vorausgesetzt werden, wird Vorwärtsrechnung genannt.

²KOPRA = **K**arlsruhe **O**ptimized and **P**recise **R**adiative transfer **A**lgorithm

6.2 Inversionsrechnung

Mit Hilfe der Inversionsrechnung werden ganz allgemein aus indirekten Messungen Informationen über die Zielgrößen, die von Interesse sind, bestimmt. Im Falle der Fernerkundung der Atmosphäre werden dafür Vertikalprofile atmosphärischer Zustandsparameter aus den gemessenen Spektren abgeleitet. Die Auswertung erfolgt in kleinen Wellenzahlbereichen, den sogenannten Microwindows, in denen Linien der gesuchten Gase vorhanden sind. Vorteil dieser kleinen Auswertefenster ist, dass die Rechenzeit verkürzt wird, aber auch, dass die Zahl der beitragenden relevanten Gase in diesem Fenster reduziert wird und die Fehler der Inversion bezüglich des Zielgases durch unbekannte Konzentrationen der anderen Gase bei der Auswertung verringert werden. Für die Auswertung der Bodenmessungen wird die Software PROFFIT (PROFile FIT) verwendet (Hase, 2000; Hase et al., 2004).

Eine Inversionsrechnung beginnt mit einer Vorwärtsrechnung, bei der die Vertikalprofile der betreffenden Gase als bekannt angenommen werden. Diese Anfangsprofile werden Start-Profile genannt. Aus der Vorwärtsrechnung erhält man ein synthetisches Spektrum \vec{y} , das von \vec{x} abhängt. In \vec{x} sind die Modellvariablen enthalten, welche bei der Inversionsrechnung aus der Messung bestimmt werden sollen. Dabei ist jede Komponente eine Variable des Vorwärtsmodells.

Modellrechnung und Messung hängen folgendermaßen zusammen:

$$\vec{y}_{mess} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{\epsilon} \quad (6.5)$$

Hier ist \vec{y}_{mess} der m -dimensionale Messvektor bzw. die Messung (in diesem Fall das gemessene Spektrum), \vec{x} die n -dimensionale gesuchte Variable, also i. a. ein atmosphärischer Zustandsvektor, in unserem Fall das Profil als Funktion der Höhe. $\vec{F}(\vec{x})$ ist das nichtlineare Vorwärtsmodell zur Beschreibung der Strahlungsübertragung und $\vec{\epsilon}$ das Rauschen in der Messung.

In \vec{x} sind die Parameter enthalten, die das Spektrum beeinflussen, wie Temperatur, Druck und die Mischungsverhältnisse der absorbierenden Gase in allen Schichten. Diese Variablen sind eigentlich kontinuierliche Funktionen des Ortes, die mittels eines diskreten Satzes von Variablen angenähert werden.

Die Ableitung des Spektrums \vec{y} nach den Modellvariablen \vec{x} ergibt im linearen Fall die $m \times n$ Jacobimatrix \mathbf{K} , deren einzelne Komponenten folgendermaßen lauten:

$$\frac{\partial y_i}{\partial x_j} = K_{ij} \quad (6.6)$$

Zwischen der Messung \vec{y}_{mess} und \vec{x} besteht folgender linearer Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \vec{y}_{mess} &= \vec{y}_0 + \frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} (\vec{x} - \vec{x}_0) + \vec{\epsilon} \\ &= \vec{y}_0 + \mathbf{K} (\vec{x} - \vec{x}_0) + \vec{\epsilon} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Zur Ableitung der Ergebnisse der Messungen, also zur Bestimmung von \vec{x} , werden die Spektren aus der Vorwärtsrechnung (\vec{y}) mit den gemessenen (\vec{y}_{mess}) verglichen. Dafür wird das Quadrat der Differenz $\vec{y}_{mess} - \vec{y}$ minimiert, gewichtet mit der Inversen der Kovarianzmatrix der Messung \mathbf{S}_y , deren Diagonale die Varianzen jedes einzelnen Messwertes (spektrale Stützstellen) enthält:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \left[\left[\vec{y}_{mess} - \vec{F}(\vec{x}) \right]^T \mathbf{S}_y^{-1} \left[\vec{y}_{mess} - \vec{F}(\vec{x}) \right] \right]}{\partial \vec{x}} \\ &= \frac{\partial \left[\left[\vec{y}_{mess} - (\vec{y}_0 + \mathbf{K} (\vec{x} - \vec{x}_0)) \right]^T \mathbf{S}_y^{-1} \left[\vec{y}_{mess} - (\vec{y}_0 + \mathbf{K} (\vec{x} - \vec{x}_0)) \right] \right]}{\partial \vec{x}} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (6.8)$$

Die wellenzahlabhängigen Differenzen der Spektren werden durch die Jacobimatrix \mathbf{K} den einzelnen Gasen, deren spektrale Linien in diesem Auswertefenster liegen, zugeordnet. Daraufhin werden die Start-Profile abgeändert und die nächste Vorwärtsrechnung wird durchgeführt. Für eine möglichst gute Übereinstimmung der Spektren müssen je nach Konvergenz mehrere Iterationsschritte zur Bestimmung von \vec{x} durchgeführt werden. Daraus folgt die nichtlineare Formulierung.

Für die (i+1)-te Iteration ergibt sich folgendes:

$$\vec{x}^{i+1} = \vec{x}^i + \left(\mathbf{K}^{iT} \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}^i \right)^{-1} \mathbf{K}^{iT} \mathbf{S}_y^{-1} \left(\vec{y}_{mess} - \vec{F}(\vec{x}^i) \right) \quad (6.9)$$

Ist $(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})^{-1}$ singulär oder nahezu singulär, so werden Nebenbedingungen benötigt, da sonst die Lösung oszilliert. Dabei kann man im Inversionsprogramm PROFFIT zwischen zwei Regularisierungsmethoden wählen: die Optimal Estimation Methode, bei der die Nebenbedingung aus der a priori Information bestimmt wird, oder die Tikhonov-Phillips Regularisierung (Tikhonov, 1963; Phillips, 1962), die eine ad hoc Nebenbedingung verwendet und in dieser Arbeit angewendet wird.

Ist beispielsweise die Lösung aufgrund von großem Rauschen instabil, wird eine Nebenbedingung gestellt, damit Gleichung (6.9) lösbar ist. Die Nebenbedingung für die Tikhonov-Phillips Regularisierung lautet $\gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B}$.

Hier ist γ^2 der Regularisierungsparameter, der quadratisch geschrieben wird, da er immer positiv ist. γ^2 kann Werte zwischen 0 und ∞ annehmen. Dabei würde $\gamma^2 = 0$ zu einer reinen Minimierung nach der Methode der kleinsten Quadrate führen. Die Nebenbedingung \mathbf{B} ist im einfachsten Fall eine diagonale Matrix. Bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung wird \mathbf{B} oft als glättende Nebenbedingung verwendet, d. h. \mathbf{B} wird so gewählt, dass die Glattheit von Profilen atmosphärischer Zustandsparameter erzwungen wird, indem die Differenzen benachbarter Profilstützpunkte klein gehalten werden.

Für Optimal Estimation sieht die Regularisierungsfunktion formal gleich aus, nur wird hier der Term $\gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B}$ durch die a priori Kovarianzmatrix \mathbf{S}_a^{-1} ersetzt.

Nach der Minimierung und Auflösung nach \vec{x} ergibt sich für die Tikhonov-Phillips-Regularisierung folgende Gleichung:

$$\vec{x}^{i+1} = \vec{x}^i + \left(\mathbf{K}^{iT} \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}^i + \gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B} \right)^{-1} \left[\mathbf{K}^{iT} \mathbf{S}_y^{-1} \left(\vec{y}_{mess} - \vec{F}(\vec{x}^i) + \gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B} (\vec{x}_a - \vec{x}^i) \right) \right] \quad (6.10)$$

mit \vec{x}_a als a priori Information.

Wendet man in PROFFIT die Tikhonov-Phillips-Regularisierung an, kann die Inversion auf einer logarithmischen oder linearen Skala durchgeführt werden. Beim Anwenden der logarithmischen Skala können keine negativen Volumenmischungsverhältnisse entstehen.

Außerdem ist die gleichzeitige Inversion mehrerer Gase möglich. Zusätzlich kann ein vorgegebenes Startprofil, meist ein klimatologisches Profil, einfach skaliert werden. Eine genauere Beschreibung von PROFFIT ist bei Hase (2000) zu finden.

6.3 Fehleranalyse

Zusätzlich zu den in Kapitel 3.3 erwähnten instrumentellen Fehlereinflüssen müssen weitere, nicht durch das Messinstrument verursachte, sich aber ebenfalls auf die Profile der Gase auswirkende Fehlerquellen berücksichtigt werden.

Allgemein setzt sich der Fehler \mathbf{S}_x , in dessen Diagonale die Varianzen der abgeleiteten atmosphärischen Größen stehen, aus dem durch das Rauschen der Messwerte verursachten Fehler $\mathbf{S}_{x,Rauschen}$, dem Modell- und Parameterfehler $\mathbf{S}_{x,u}$ und dem so genannten Glättungsfehler $\mathbf{S}_{x,glatt}$, der Differenz zwischen der wahren Zustandsgröße an einem Ort in der Atmosphäre und der wegen der Nebenbedingung räumlich verschmierten Darstellung, zusammen:

$$\mathbf{S}_x = \mathbf{S}_{x,Rauschen} + \mathbf{S}_{x,u} + \mathbf{S}_{x,glatt} \quad (6.11)$$

Der Parameter u steht für Variablen des Vorwärtsmodells, die unsicher sind aber bei der Inversion als bekannt angenommen und damit konstant gehalten werden, beispielsweise für Fehler im Temperaturprofil oder in den Störgasen. Diese werden in Abschnitt 6.3.2 diskutiert.

6.3.1 Spektrales Rauschen

Bei den bodengebundenen FTIR-Messungen, deren Ergebnisse in Kapitel 7 gezeigt werden, wird nur der Rauschfehler als Fehlerbalken dargestellt. Dieser Rauschfehler ist die Gesamtheit der Messfehler σ_y der verschiedenen Messpunkte y_m .

Die Kovarianzmatrix $\mathbf{S}_{x,Rauschen}$ erlaubt die Darstellung im mehrdimensionalen Fall

$$\mathbf{S}_{x,Rauschen} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \right)^{-1} \quad (6.12)$$

bzw. mit Regularisierung nach Tikhonov-Phillips

$$\mathbf{S}_{x,Rauschen} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}^T \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B} \right)^{-1}. \quad (6.13)$$

Die bei der Auswertung angezeigten Fehlerbalken in den Volumenmischungsverhältnissen zeigen den Einfluss des Rauschens auf das invertierte Profil.

Tabelle 6.1 zeigt den Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch das spektrale Rauschen.

Spurengas	Fehler (gesamt)	Fehler (Stratosphäre)
O ₃	1,2 %	1 %
HCl	1,2 %	0,7 %
HF	0,6 %	0,6 %
N ₂ O	0,2 %	0,5 %
CH ₄	0,3 %	0,6 %

Tabelle 6.1: Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch das spektrale Rauschen (Hase, 2000; Schneider et al., 2004)

6.3.2 Modell- und Parameterfehler

Die Kovarianzmatrix \mathbf{S}_{x,u_j} für Modell- und Parameterfehler lässt sich folgendermaßen beschreiben:

$$\mathbf{S}_{x,u_j} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_u \mathbf{S}_u \mathbf{K}_u^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \right)^{-1} \quad (6.14)$$

bzw. mit Regularisierung nach Tikhonov-Phillips

$$\mathbf{S}_{x,u_j} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_u \mathbf{S}_u \mathbf{K}_u^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B} \right)^{-1} \quad (6.15)$$

wobei $\mathbf{K}_u = \frac{\partial y}{\partial u}$ die Jacobimatrix der Dimension $m \times j$ ist, mit m als Anzahl der spektralen Stützstellen, und die partiellen Ableitungen des Spektrums nach den j unsicheren Parametern enthält. \mathbf{S}_u ist die Kovarianzmatrix der Parameter u_j .

In den folgenden Abschnitten werden einige Parameterfehler diskutiert.

6.3.2.1 Versatz der Nulllinie

Die Nichtlinearität des Detektors (in Kapitel 3.3.2 beschrieben) führt zu einem Versatz der Nulllinie (engl.: Offset) des Spektrums. Der entsprechende Fehler kann für eine einfache Skalierung des Startprofils berechnet werden durch (Hase, 2000):

$$err_{Versatz} = \frac{1}{1 - \frac{\Delta S}{S}} \quad (6.16)$$

$\frac{\Delta S}{S}$ ist der relative Versatz der Nulllinie in Einheiten des Kontinuums.

Gemäß Abschnitt 3.3.2 tritt diese Nichtlinearität nur beim MCT-Detektor auf, nicht jedoch beim InSb-Detektor. Der typische Fehler durch die Nichtlinearität liegt bei etwa 1 bis 2 %. Da die Nichtlinearitäten jedoch regelmäßig gemessen und korrigiert werden, liegt der resultierende Fehler bei unter 1 % und ist somit vernachlässigbar klein.

Tabelle 6.2 zeigt den Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch die Nichtlinearität des MCT-Detektors vor der Korrektur.

Spurengas	Fehler
O ₃	2 %
HNO ₃	1 %
N ₂ O	1 %
CH ₄	2 %
ClO	1 %
ClONO ₂	1 %

Tabelle 6.2: Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch die Nichtlinearität des MCT-Detektors (Hase, 2000)

6.3.2.2 Fehler im Sonnenzenitwinkel

Der Sonnenzenitwinkel (engl.: SZA = solar zenith angle) geht in die Strahlungsübertragungsgleichung mit ein und beeinflusst so das simulierte Spektrum. Deshalb muss er mit großer Genauigkeit bestimmt werden. Er muss mit dem Winkel der vom Spektrometer untersuchten Strahlung übereinstimmen. Vor allem durch zwei Ursachen kann es zu einer Differenz dieser beiden Winkel kommen: Zum einen wenn der Sonnensucher nicht exakt die Sonnenscheibenmitte trifft, oder wenn fehlerhafte Eingangsdaten vorliegen also der angenommene Zeitpunkt oder Ort der Messung von den wirklichen Daten abweichen.

Wird nicht genau die Sonnenscheibenmitte beobachtet, sondern zeigt der Sonnensucher (relativ zum Interferometer) oberhalb des Zentrums auf die Sonne, ist der in der Strahlungsübertragungsgleichung eingesetzte Weg der Sonnenstrahlung kürzer als der wirkliche Weg des Sonnenstrahls. Dies führt zu einer schwächeren Absorption der simulierten im

Vergleich zu den gemessenen Spektren, was letztendlich zu einer Überschätzung der Gesamtsäule führt. Umgekehrt werden zu geringe Säulengehalte gemessen, wenn die Blickrichtung bezüglich des Sonnenzentrums nach unten verschoben ist.

Bei bodengebundenen Messungen kann eine fehlerhafte Eingabe der geographischen Position ausgeschlossen werden. Die genaue Messzeit kann allerdings ein Problem darstellen, da eine Messung bis zu zwölf Minuten dauern kann. Bei den Messungen in Kiruna ist dies aufgrund der höheren geographische Breite im Vergleich zu Izaña aber vernachlässigbar. Hier ändert sich der Sonnenzenitwinkel mit weniger als $0,1^\circ$ pro Minute nur sehr langsam und der resultierende Fehler ist kleiner als 1 %. Für niedere Breiten wie Izaña ändert sich der Sonnenwinkel tagsüber um etwa $0,2^\circ$ pro Minute, so dass er sich bei einer Messung von zwölf Minuten um etwa $2,5^\circ$ ändert. Dieser Wert ist aber nicht konstant, sondern ändert sich je nach Tageszeit. Die zeitliche Änderung der Luftmasse hängt dabei von der Sonnenhöhe ab.

Vor allem für große Zenitwinkel, also für tiefstehende Sonne, sind die Fehler relevant. Dabei kann der Fehler für troposphärische Gase bis zu 8 % betragen, für stratosphärische Gase dagegen weniger als 1 % (Schneider et al., 2004). Damit dies nicht zu Apodisierungseffekten führt, wenn sich die Sonnenhöhe während der Messung ändert, werden Vorwärts- und Rückwärtsabtastungen durchgeführt.

Für die Fehlerbetrachtung wurde die Annahme getroffen, dass die Zentriergenauigkeit des Sonnenbildes auf der Eintrittsblende besser als $0,1^\circ$ sei. Der Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch Fehler im Sonnenzenitwinkel beträgt damit für fast alle Gase weniger als 1 %, sowohl in der Troposphäre als auch in der Stratosphäre.

6.3.2.3 Das Apparateprofil

Auch das Apparateprofil kann wie in Kapitel 3.2.3 beschrieben zu Fehlern führen, vor allem in Bezug auf die Höhenzuordnung der Profile. Da dies regelmäßig überprüft wird und für das Messgerät Bruker 120 HR, welches in Kiruna betrieben wird, von einem idealen Apparateprofil ausgegangen werden kann, kann der Fehler hier vernachlässigt werden. Beim Bruker 120 M in Izaña existieren allerdings messbare Abweichungen. Durch Korrektur mit den Ergebnissen der Gaszellenmessungen (wie in Kapitel 3.2.3 erläutert) vor der Auswertung kann der Fehler unter 1 % gehalten werden (Hase, 2000; Schneider, 2002).

Der Fehler in den Profilen der einzelnen Spurengase durch Fehler in der Höhenzuordnung beträgt für alle Gase etwa 1 km.

6.3.2.4 Das Temperaturprofil

Die Temperaturprofile für Kiruna stammen vom Goddard Automailersystem, das auf Analysen des NCEP (National Centers for Environmental Prediction) basiert. Diese Daten reichen bis zu einer Höhe von 45 km. Darüber wird das Temperaturprofil der US-Standardatmosphäre (US-76) angehängt. Der Fehler für die NCEP-Daten liegt bei etwa 2 K bis ca. 20 km, darüber wird ein linearer Anstieg mit der Höhe auf etwa 15 K bei 70 km angenommen.

Auf Teneriffa werden die Temperaturprofile vom Meteorologischen Zentrum in der Inselhauptstadt Santa Cruz zweimal täglich (um 00 UT und um 12 UT) mit Radiosonden aufstiegen gemessen. Diese Sonden messen i. a. bis etwa 34 km Höhe. Darüber werden wie bei der Messstation in Kiruna bis in 45 km die NCEP-Daten und daran die Daten der US-Standardatmosphäre angeschlossen. Das Temperaturprofil entlang des Sehstrahls zum Zeitpunkt der Messung wird dadurch aber nur näherungsweise beschrieben. Die Sensoren der Radiosonden haben eine Genauigkeit von 0,5 K, da sie vor ihrem Start kalibriert werden (Schneider, 2002).

Das Temperaturprofil hat Einfluss auf die Zuordnung von Druck und Höhe und somit auf das Volumenmischungsverhältnisses des Profils des Gases. Aufgrund der geringen vertikalen Auflösung kann die daraus entstehende Verschiebung jedoch vernachlässigt werden. Entsprechend der Temperaturabhängigkeit der untersuchten Signatur ergibt ein Temperaturfehler einen Fehler im Mischungsprofil. Für die meisten Gase kann dieser Fehler aber vernachlässigt werden, da die Temperaturabhängigkeit sehr gering ist. Außerdem werden nach Möglichkeit temperaturunempfindliche Linien ausgewählt. Der Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch die Temperatur beträgt für die meisten Gase 1 % (Tabelle 6.3). Für die Bestimmung diese Fehlers wurden die Fehlergrenzen vom Boden bis in 20 km Höhe auf 2 K abgeschätzt, darüber wurde ein linearer Anstieg mit der Höhe auf 15 K in 70 km angenommen.

Spurengas	Fehler (gesamt)	Fehler (Stratosphäre)
O ₃	0,7 %	0,8 %
HCl	1 %	1 %
HNO ₃	1 %	1 %
HF	1,6 %	1,6 %
N ₂ O	0,4 %	0,5 %
CH ₄	0,5 %	0,5 %

Tabelle 6.3: Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch Fehler im verwendeten Temperaturprofil (Hase, 2000; Schneider et al., 2004)

6.3.2.5 Störgase

Der Einfluss der Störgase ist nur sehr schwer abzuschätzen, da deren Mischungsverhältnisse teilweise nicht genau bekannt sind und ihre spektroskopischen Daten ungenau sein können. Nimmt man korrekte spektroskopische Daten der überlagernden Signatur an, kann der Fehler jedoch meist vernachlässigt werden. Außerdem kann man die Störgase mitberechnen, so dass sich dieser Fehler zusätzlich noch verringert. Da dies jedoch nicht immer möglich ist, können im Residuum noch Signaturen der Störgase vorhanden sein. Der abgeschätzte Fehler durch Störgase liegt je nach Gas zwischen 0,02 % für O₃ und 10 % für ClO.

Tabelle 6.4 zeigt den Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch den Einfluss der Störgase.

Spurengas	Fehler
O ₃	0,02 % (Karbstein, 1994)
HCl	1 %
HNO ₃	0,04 % (Karbstein, 1994)
HF	0,5 %
N ₂ O	0,5 %
CH ₄	0,1 %
NO ₂	1 %
ClO	10 %
ClONO ₂	0,5 % (Karbstein, 1994)

Tabelle 6.4: Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch den Einfluss der Störgase (Hase, 2000)

6.3.2.6 Spektroskopische Daten

Aus Labormessungen, die ebenfalls fehlerhaft sein können, erhält man die Absorptionskoeffizienten und ihre Druck- und Temperaturabhängigkeit. Für die vorliegende Auswertung der bodengebundenen Daten wurden für die meisten Gase die spektroskopischen Daten der HITRAN 2000 Datenbank verwendet (Rothman et al., 1998, 2003). Davon abweichend stammen die spektroskopischen Daten für O₃ und ClONO₂ von Wagner et al. (2002) bzw. Birk und Wagner (2000).

Der im Mischungsverhältnis resultierende Fehler entspricht dem Inversen des relativen Fehlers in der Linienstärke. Dieser Fehler, der abhängig vom Spurengas und der betrachteten Bande ist, liegt für die meisten Gase bei 5 %, nur für HNO₃ beträgt er 15 %. Die Unsicherheiten in der Spektroskopie, die aus fehlerbehafteten Labormessungen abgeleitet sind, führen zu einem systematischen Fehler, der bei der Fehleranalyse getrennt von den übrigen Fehlern betrachtet wird.

6.3.3 Glättungsfehler

Zur Beschreibung der räumlichen Auflösung verwendet man die Auflösungsmatrix **A**:

$$\mathbf{A} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \gamma^2 \mathbf{B}^T \mathbf{B} \right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \quad (6.17)$$

Erfolgt keine Regularisierung, ist **A** gleich der Einheitsmatrix **E**.

Kennt man die typische Variabilität eines Profils (klimatologische Kovarianzmatrix $\mathbf{S}_{x,klimat.}$), kann mit Hilfe von **A** der Glättungsfehler abgeschätzt werden:

$$\mathbf{S}_{glatt} = (\mathbf{A} - \mathbf{E}) \mathbf{S}_{x,klimat.} (\mathbf{A} - \mathbf{E})^T \quad (6.18)$$

Wird nicht regularisiert, ist \mathbf{S}_{glatt} offensichtlich Null.

Tabelle 6.5 zeigt den Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch den Einfluss der Glättung.

Spurengas	Fehler (gesamt)	Fehler (Stratosphäre)
O ₃	1,5 %	1,9 %
HCl	1,1 %	1,3 %
HF	1,8 %	1,7 %
N ₂ O	0,3 %	1,4 %
CH ₄	0,2 %	1,3 %

Tabelle 6.5: Fehler in den Säulengehalten der einzelnen Spurengase durch Fehler in der Glättung (Schneider et al., 2004)

6 Auswertemethodik der bodengebundenen solaren Absorptionmessungen

7 Messergebnisse

In Kiruna und Izaña werden Säulengehalte und Konzentrationen von vielen verschiedenen Spurengasen gemessen, u. a. H_2O , O_3 , HNO_3 , ClONO_2 , N_2O , CH_4 , COF_2 , NO_2 , NO , CO , ClO , HCl und HF .

Einige der oben genannten Spurengase sind für die ENVISAT-Validierung wichtig. Dafür werden das ganze Jahr über an beiden Stationen Messungen durchgeführt. In Kiruna finden zusätzlich intensive Messkampagnen des IMK (jedes Jahr von Januar bis März) statt. Diese Messkampagnen finden im Winter dort statt, da Kiruna dann zum Teil unter dem arktischen Polarwirbel liegt und so die Chloraktivierung und der Ozonabbau gut beobachtet werden können, wie in Kapitel 2.4 beschrieben.

Als Kriterium für den Polarwirbel wird die isentrope potentielle Vorticity (IPV) verwendet. Diese ist ein Maß für die Stärke und Ausdehnung des Polarwirbels und hat die Dimension Km^2/kgs . Ist der Wert in einer Höhe von etwa 20 km (475 K) größer als $36 \text{ Km}^2/\text{kgs}$, gilt dies als Maß für den Polarwirbel. Zur weiteren Beschreibung der Vorticity siehe z. B. Etling (2002) oder Pichler (1997).

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Messungen von Kiruna ausgewertet. Auswertungen der Messungen in Izaña sind bei Schneider (2002) zu finden. Die Daten von Izaña, die für den Vergleich mit den ENVISAT-Daten in Kapitel 9 verwendet wurden, wurden mit der gleichen Methodik gewonnen.

Die Säulengehalte bzw. Profile wurden mit Hilfe der Auswertesoftware PROFFIT 9.1 bestimmt. Mit dieser Software, die auf einem PC läuft, konnten die gemessenen Spektren erstmals direkt nach der Messung bzw. nach Vorhandensein der benötigten Temperatur- und Druckprofile am Ort ausgewertet werden. Die Ergebnisse dieser Messungen sind in den Abbildungen 7.3 bis 7.10 dargestellt. Die Fehlerbalken in den Abbildungen zeigen den Rauschfehler. Systematische Fehler sind nicht enthalten.

In diesem Kapitel werden sehr viele Daten gezeigt, die in Kiruna gemessen wurden. Auf der Grundlage dieser Daten können Zeitreihen gebildet werden und im Rahmen des NDSC Trends verschiedener Gase abgeleitet werden. Diese vielen Daten bilden aber auch die Grundlage für die Validierung der ENVISAT-Daten. Es wird gezeigt, dass die Prozesse im arktischen Polarwirbel sogar vom Boden aus beobachtet werden können, was ein Grund für die Auswahl dieser Station für die Validierung ist.

7.1 Säulengehalte

7.1.1 O₃

O₃ wird in zwei spektralen Fenstern simultan ausgewertet, und zwar von 782,56 cm⁻¹ bis 782,86 cm⁻¹ und von 788,85 cm⁻¹ bis 789,37 cm⁻¹ (Abbildungen 7.1 und 7.2). In diesen Bereichen gibt es nur schwache Signaturen von den Störgasen H₂O und CO₂.

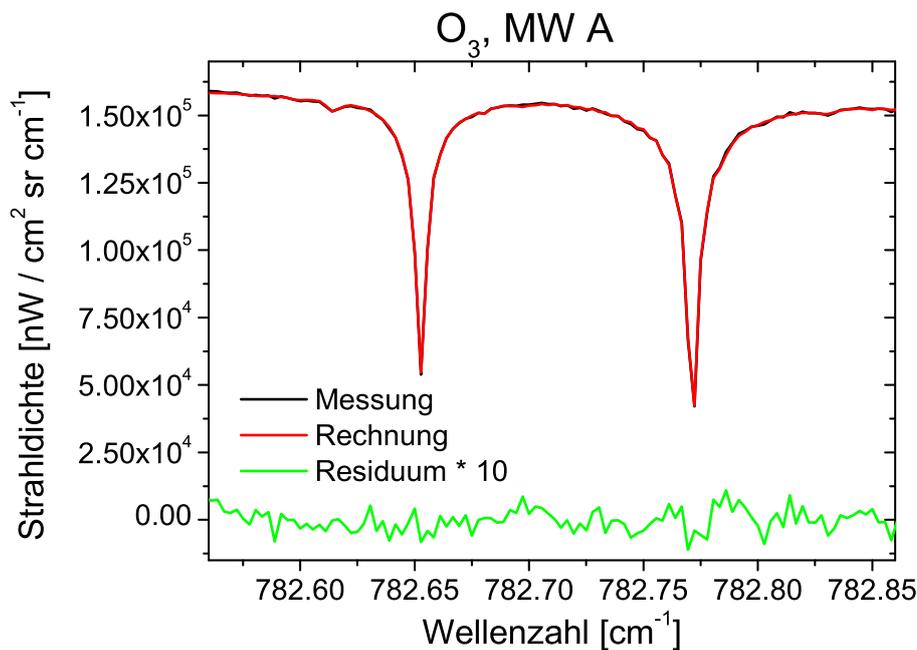


Abb. 7.1: Spektrum von O₃ am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt ist das erste Auswertefenster. Das gemessene Spektrum ist durch die schwarze Kurve dargestellt, das angepasste synthetische Spektrum durch die rote Kurve und das Residuum, das zur Verdeutlichung mit zehn multipliziert wurde, durch die grüne Kurve. Die O₃-Signaturen liegen bei 782,653 cm⁻¹ und 782,772 cm⁻¹.

In Abbildung 7.3 ist der Säulengehalt von O₃ für den Zeitraum von Januar 2001 bis Juli 2003 dargestellt. Die dargestellten Fehlerbalken, die den Rauschfehler zeigen, sind sehr klein. Deutlich ist der Jahresgang mit hohem Werten im Winter und niedrigen Werten im Sommer zu erkennen. Im Winter beträgt der Säulengehalt bis zu $1,6 \cdot 10^{19}$ cm⁻², im Sommer nur ca. $6 - 9 \cdot 10^{18}$ cm⁻².

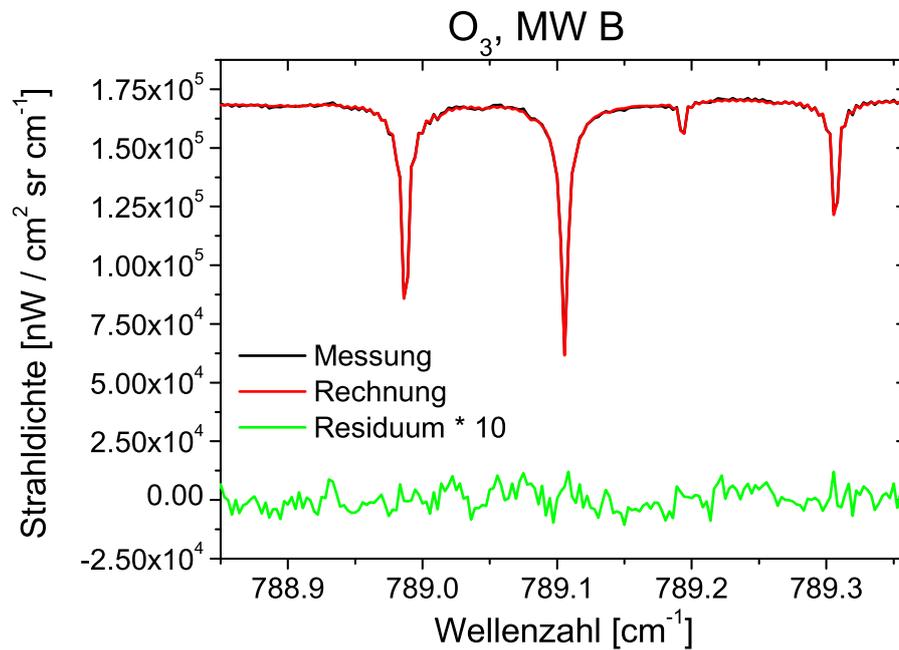


Abb. 7.2: Spektrum von O_3 am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt ist das zweite Auswertefenster. Das gemessene Spektrum ist durch die schwarze Kurve dargestellt, das angepasste synthetische Spektrum durch die rote Kurve und das Residuum, das zur Verdeutlichung mit zehn multipliziert wurde, durch die grüne Kurve.

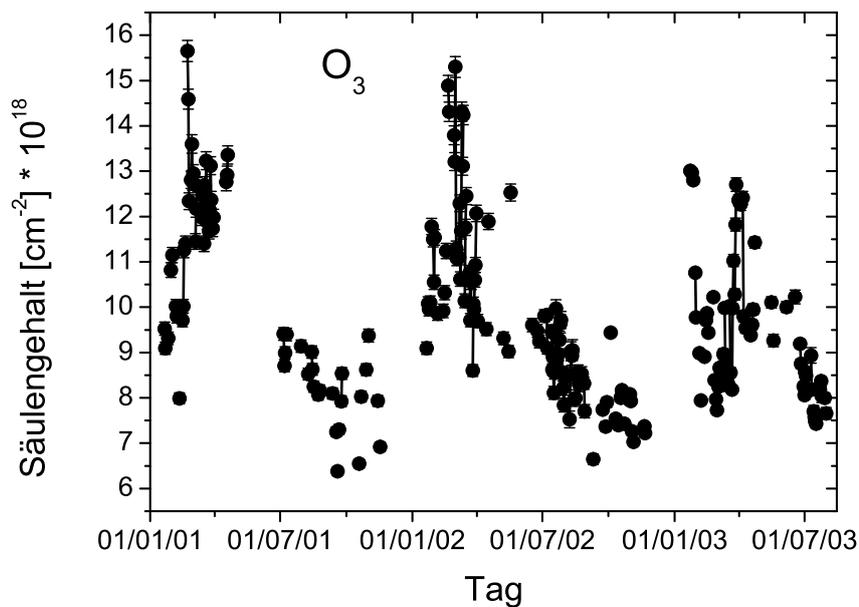


Abb. 7.3: O_3 -Säulengehalte mit Fehlerbalken von Januar 2001 bis Juli 2003 in Kiruna

7.1.2 HCl, ClONO₂ und ClO

Die für die Ozonchemie relevanten Gase sind HCl, ClONO₂ und ClO.

Im Fall von HCl werden gleichzeitig zwei spektrale Auswertefenster berücksichtigt. Das eine liegt bei 2775,96 cm⁻¹ bis 2776,84 cm⁻¹ und das andere zwischen 2925,76 cm⁻¹ und 2926,04 cm⁻¹ (Abbildung 7.4). Im ersten Fenster, in dem O₃ das dominierende Störgas ist, ist die HCl-Signatur schwächer als im zweiten. Es wird jedoch herangezogen, weil das erste Fenster im Wesentlichen durch eine CH₄-Flanke gestört wird, welche zu Problemen bei der Anpassung führt.

Das Auswertefenster von ClONO₂ liegt zwischen 779,9 cm⁻¹ und 780,66 cm⁻¹ (Abbildung 7.5). Neben H₂O, HNO₃ und C₂H₂ treten vor allem CO₂ und O₃ als Störgase auf.

Die Signaturen von ClO sind so schwach, dass sie sich kaum aus dem Rauschen der Messung hervorheben. Deshalb werden vier Auswertefenster für die Auswertung verwendet, in denen sich eine ClO-Signatur befindet: 829,2 cm⁻¹ bis 829,3 cm⁻¹, 830,56 cm⁻¹ bis 830,66 cm⁻¹, 831,91 cm⁻¹ bis 832,01 cm⁻¹ und 833,25 cm⁻¹ bis 833,35 cm⁻¹. Das vierte Fenster ist in Abbildung 7.6 dargestellt.

Abbildung 7.7 zeigt die für den Ozonabbau relevanten Gase: die Chlorreservoirgase ClONO₂ und HCl, sowie ClO. ClONO₂ hat im Februar und März seinen größten Säulengehalt mit Werten von etwa $4 \cdot 10^{15}$ cm⁻². HCl hingegen erreicht seinen maximalen Wert im Säulengehalt etwa im April, also etwas später als ClONO₂. Wie schon in Kapitel 2.4 beschrieben, können sich beim Auflösen der PSCs die Reservoirgase wieder zurückbilden. Dabei ist wichtig, dass die HCl-Rückbildung wesentlich langsamer abläuft als die ClONO₂-Entstehung, so dass es zu Anfang des Frühlings zu einem ClONO₂-Überschuss im Vergleich zu HCl kommt. Bei den Säulengehalten von ClO sind die sehr großen Fehlerbalken zu beachten, die nur den Einfluss des Rauschens beinhalten. Von Oktober 2001 bis Februar 2002 sind geringe Säulengehalte von etwa $1 \cdot 10^{15}$ cm⁻² vorhanden. Im Januar und Februar 2001 sind schon höhere Werte von etwa $3 \cdot 10^{15}$ cm⁻² zu beobachten, woraus man schließen kann, dass hier Chloraktivierung stattgefunden hat. Und auch im Winter 2002/2003 fand schon früh Chloraktivierung statt. So sind sowohl im Oktober 2002 als auch im Januar 2010 hohe Werte von etwa $3 \cdot 10^{15}$ cm⁻² erkennbar. Die hohen Werte in den Sommermonaten sowohl 2001 als auch 2002 zeigen, dass ClO im Sommer nicht auswertbar ist, sondern nur im Winter bei Chloraktivierung. Ab Sommer 2002 ist die Streuung viel größer als in der Zeit davor. Die Werte streuen zum Teil sehr stark mit bis zu $7 \cdot 10^{15}$ cm⁻² bzw. $-3 \cdot 10^{15}$ cm⁻², aber auch die 1 σ -Fehlerbalken sind an diesen Tagen sehr groß. Die zum Teil unrealistischen hohen Werte im ClO-Säulengehalt sind noch zu untersuchen.

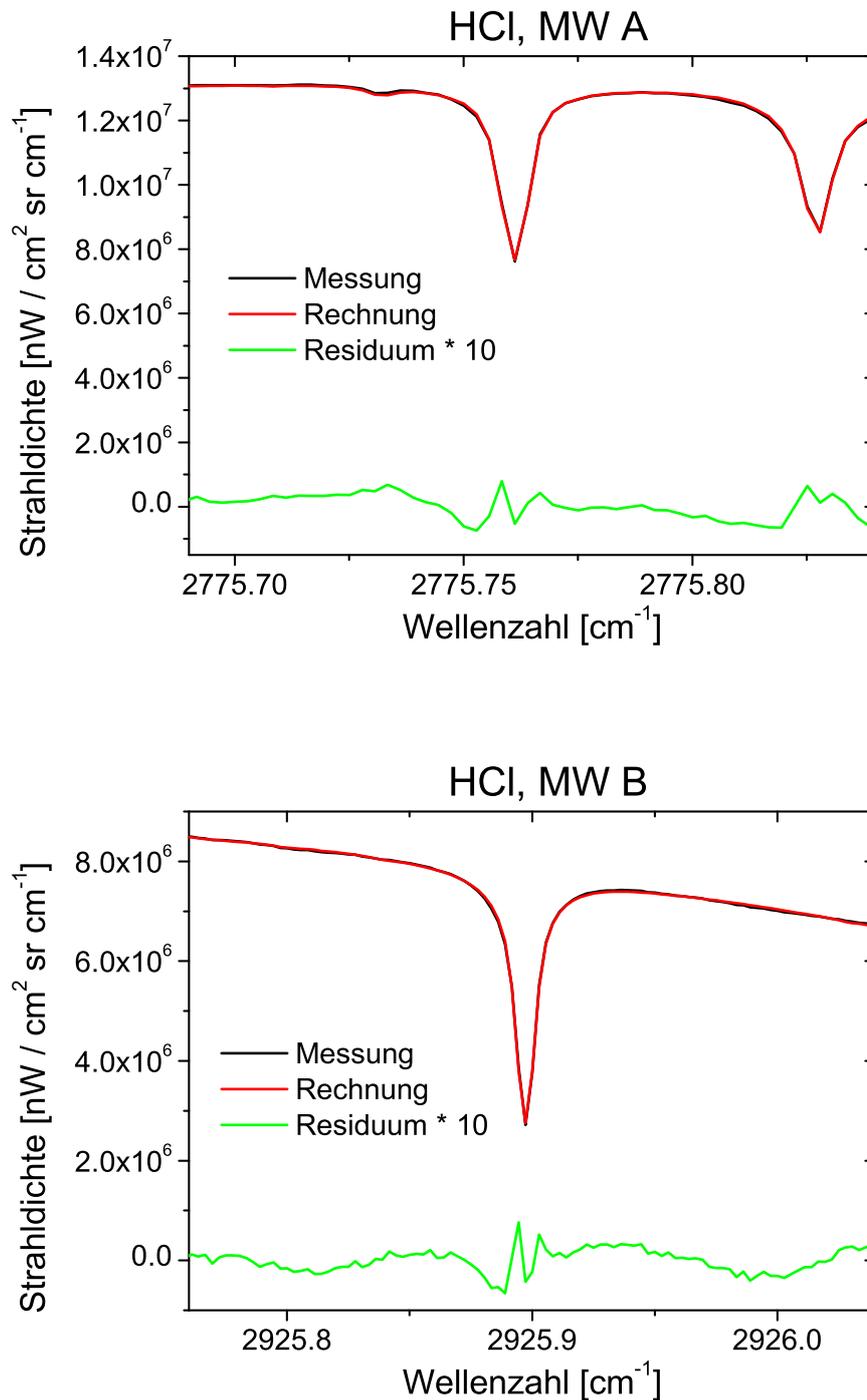


Abb. 7.4: Spektrum von HCl am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt sind beide Auswertefenster. Das gemessene Spektrum ist durch die schwarze Kurve dargestellt, das angepasste synthetische Spektrum durch die rote Kurve und das Residuum, das zur Verdeutlichung mit zehn multipliziert wurde, durch die grüne Kurve. Die HCl-Signaturen liegen bei $2775,761 \text{ cm}^{-1}$ (MW A) und $2925,897 \text{ cm}^{-1}$ (MW B).

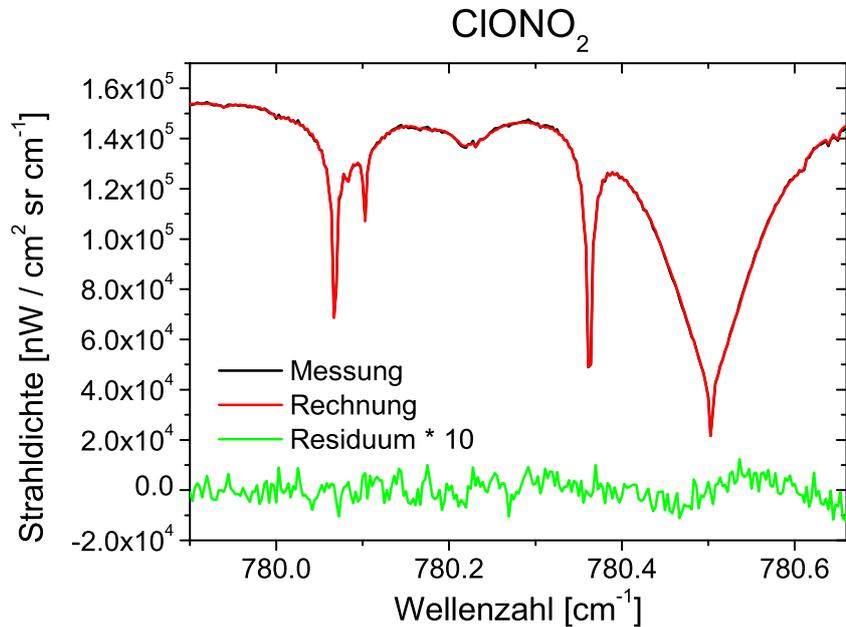


Abb. 7.5: Spektrum von ClONO₂ am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt sind das gemessene Spektrum (schwarz), das angepasste synthetische Spektrum (rot) und das Residuum (grün), das zur Verdeutlichung mit zehn multipliziert wurde. Die ClONO₂-Signatur liegt bei 780,220 cm⁻¹.

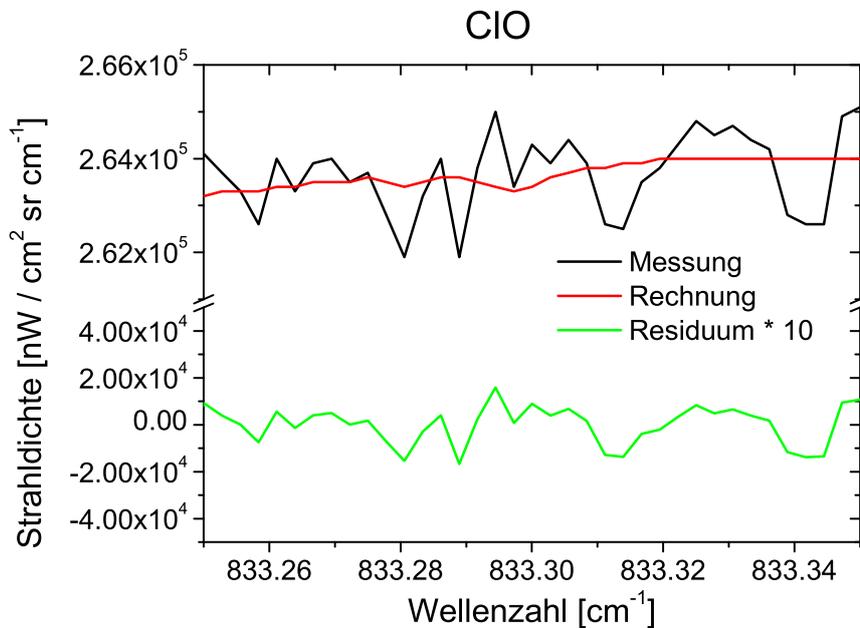


Abb. 7.6: Spektrum von ClO am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt sind das gemessene Spektrum (schwarz), das angepasste synthetische Spektrum (rot) und das Residuum (grün), das zur Verdeutlichung mit zehn multipliziert wurde. Die ClO-Signatur liegt bei 833,297 cm⁻¹.

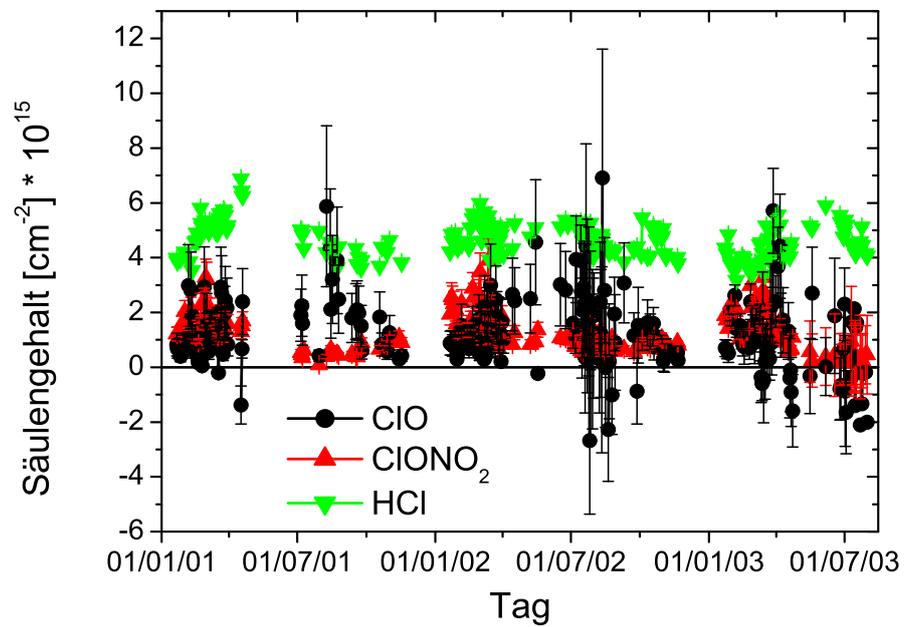


Abb. 7.7: ClONO₂- (rote Dreiecke), HCl- (grüne Dreiecke) und ClO-Säulengehalte (schwarze Kreise) mit Fehlerbalken von Januar 2001 bis Juli 2003 in Kiruna

7.1.3 N₂O und CH₄

Die Signaturen von N₂O und CH₄ sind unmittelbar benachbart. Die Auswertung von CH₄ erfolgt im Auswertefenster von 1202,4 cm⁻¹ bis 1202,8 cm⁻¹ (Abbildung 7.8). N₂O wird gleichzeitig in zwei spektralen Auswertefenstern berechnet: von 1200,1 cm⁻¹ bis 1200,4 cm⁻¹ und von 1201,88 cm⁻¹ bis 1202,16 cm⁻¹ (Abbildung 7.9).

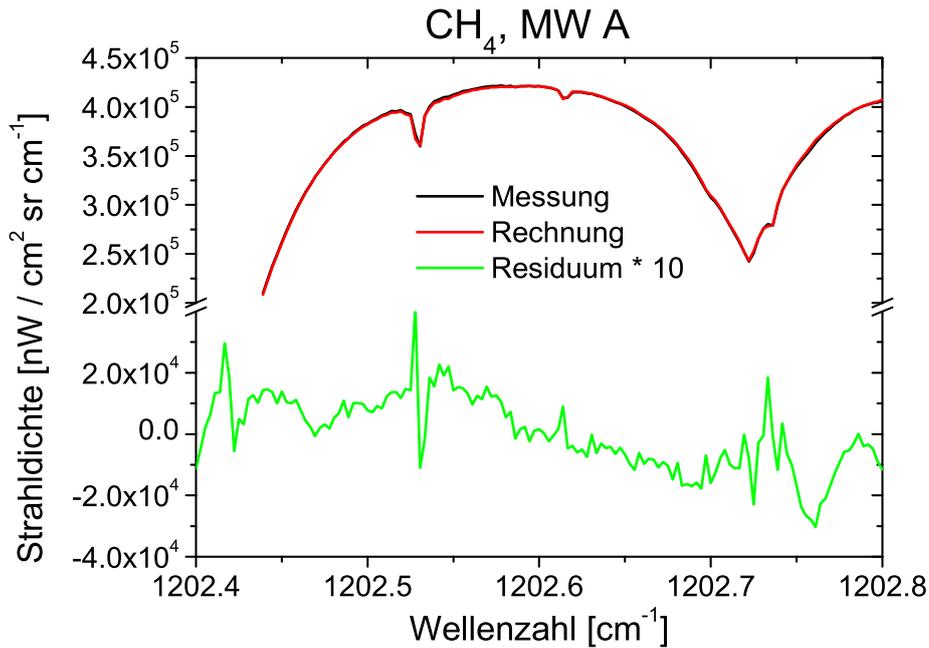


Abb. 7.8: Spektrum von CH₄ am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt sind das gemessene Spektrum (schwarz), das angepasste synthetische Spektrum (rot) und das Residuum (grün), das zur Verdeutlichung mit zehn multipliziert wurde.

Abbildung 7.10 und 7.11 zeigen die Säulengehalte der langlebigen Spurengase N₂O und CH₄. Beide Gase zeigen keine großen Schwankungen und keinen ausgeprägten Jahresgang. CH₄ hat etwa einen Wert von 3,5 bis 3,6 · 10¹⁹ cm⁻² und N₂O von 5,9 bis 6,15 · 10¹⁸ cm⁻². Auffällig sind bei beiden die hohen Werte im Januar 2001, sowie die niedrigen Werte im März 2002.

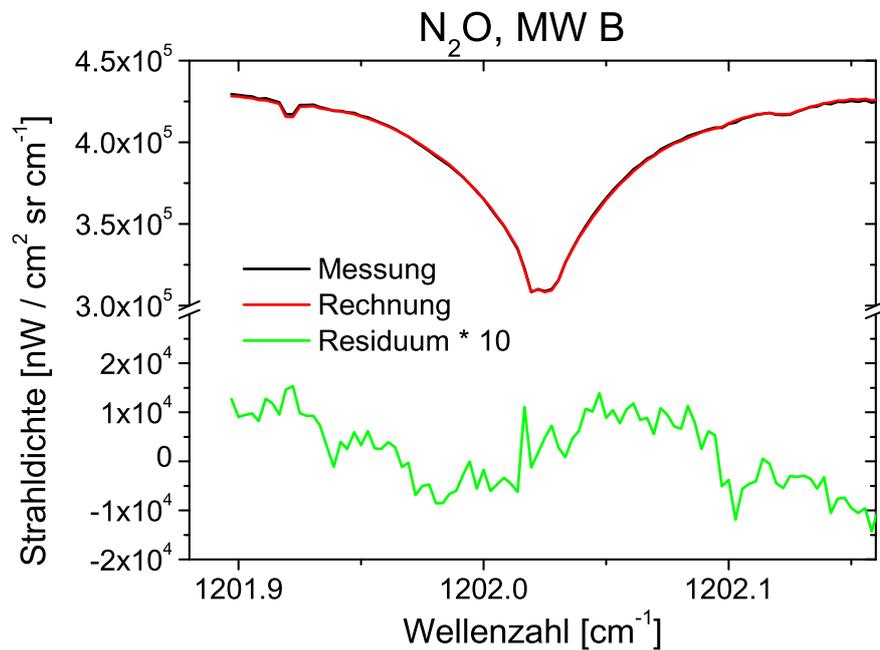
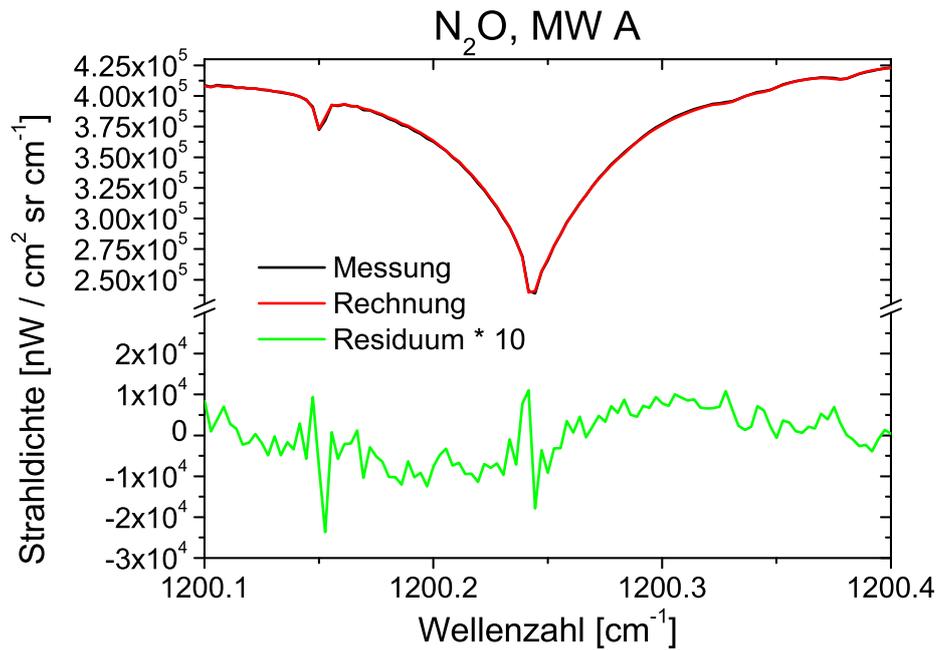


Abb. 7.9: Spektrum von N_2O am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt sind beide Auswertefenster. Das gemessene Spektrum ist durch die schwarze Kurve dargestellt, das angepasste synthetische Spektrum durch die rote Kurve und das Residuum, das zur Verdeutlichung mit zehn multipliziert wurde, durch die grüne Kurve.

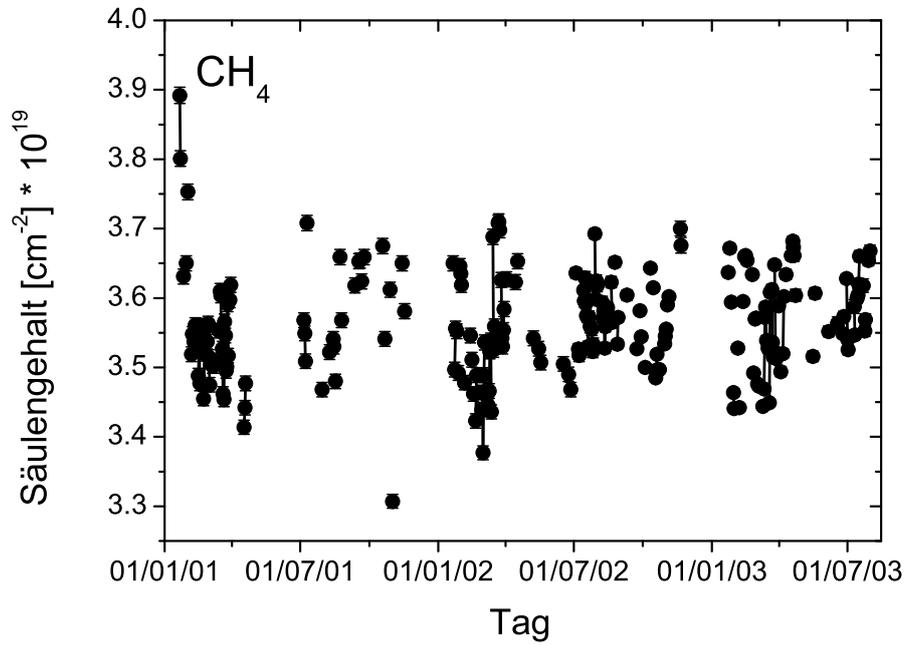


Abb. 7.10: CH₄-Säulengehalte mit Fehlerbalken von Januar 2001 bis Juli 2003 in Kiruna

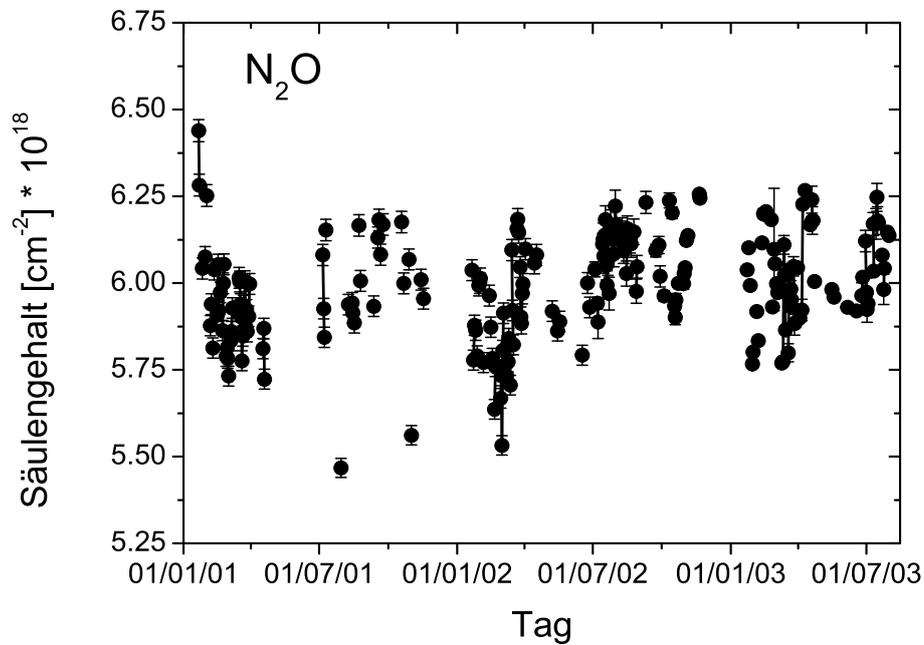


Abb. 7.11: N₂O-Säulengehalte mit Fehlerbalken von Januar 2001 bis Juli 2003 in Kiruna

7.2 Vertikalprofile

Die folgenden Abbildungen zeigen die aus den Messungen berechneten Vertikalprofile einiger Spurengase.

7.2.1 N₂O

N₂O ist ein troposphärisches Gas und besitzt damit am Boden hohe Mischungsverhältnisse, die oberhalb der Troposphäre allmählich abnehmen. Am oberen Rand der Modellatmosphäre wird das Profil deshalb auf den Wert $9 \cdot 10^{-6}$ ppmv eingestellt, wobei die Regularisierung gegen die Nullsteigung erfolgt. Das Profil wird auf einer logarithmischen Skala invertiert, da ansonsten aufgrund des schnellen Rückgangs des Mischungsverhältnisses oberhalb von 20 km negative Werte auftreten können, deren Beitrag zur Gesamtsäule nicht zu vernachlässigen ist. Abbildung 7.12 zeigt ein Beispiel eines N₂O-Profiles vom 5.2.03. Abbildung 7.13 zeigt die Höhenauflösung von N₂O. In der Abbildung sind einige Spalten der Auflösungsmatrix (engl.: Averaging Kernel Matrix) aufgetragen. Es können etwa drei unabhängige Höhenschichten aufgelöst werden.

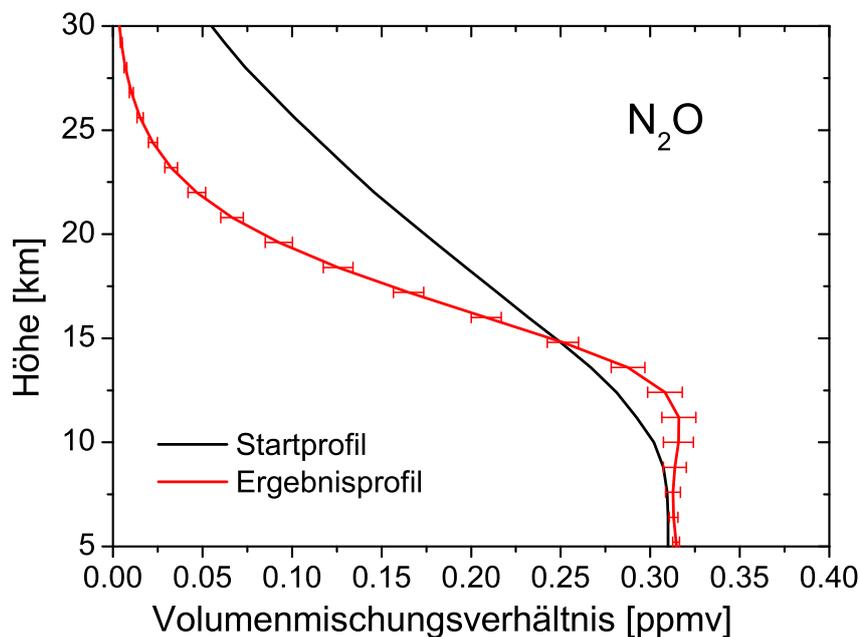


Abb. 7.12: N₂O-Profil am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt ist das Startprofil (schwarz) und das Ergebnisprofil (rot) mit dem Fehlerbalken, der den Einfluss des Rauschens auf das regularisierte Profil kennzeichnet.

In den Abbildungen 7.14 bis 7.16 sind die Volumenmischungsverhältnisse von N₂O in den Wintern 2001 bis 2003 dargestellt. Die grauen Flächen zeigen Tage, an denen keine bodengebundenen Messungen durchgeführt werden konnten.

7 Messergebnisse

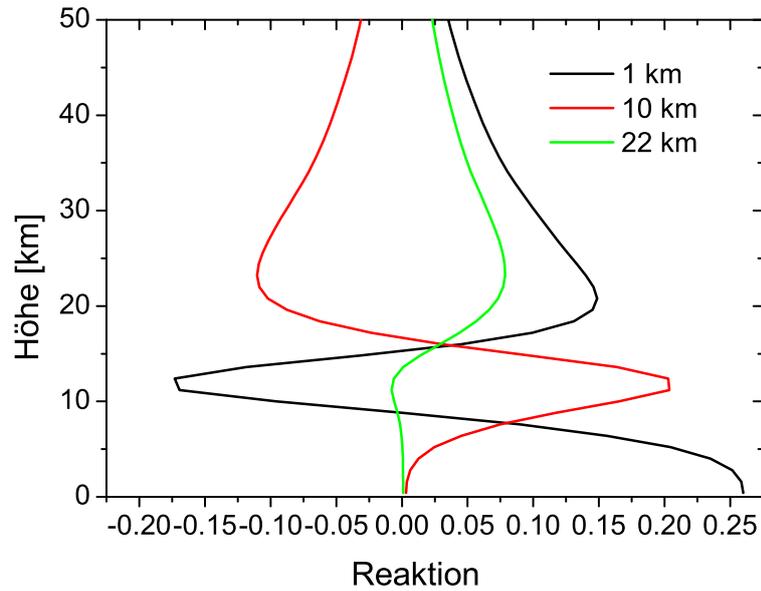


Abb. 7.13: Höhengauflösung von N₂O. Dargestellt sind einige Spalten der Auflösungsmatrix.

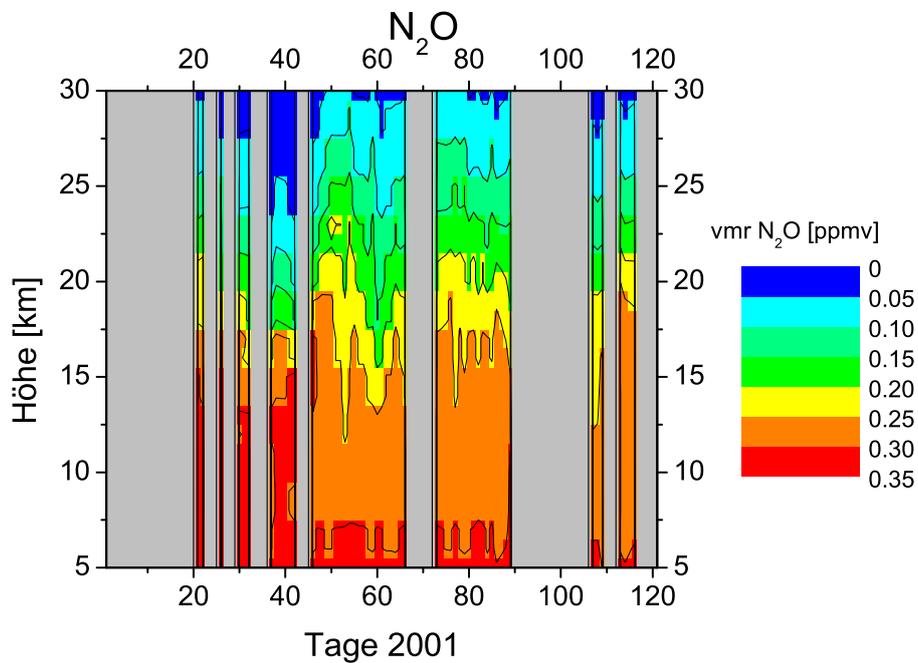


Abb. 7.14: N₂O-Profile im Winter 2001 in Kiruna

In Abbildung 7.14 ist bis Tag 35 (Anfang Februar 2001) das Absinken von Luft im Po-

larwirbel erkennbar. Zwischen Tag 40 und 42 sind unterhalb von 15 km aufsteigende, oberhalb von 15 km Höhe absinkende Luftmassen zu beobachten. Außerhalb des Wirbels (etwa ab Tag 45, Mitte Februar 2001) sind Luftmassen aus mittleren Breiten erkennbar.

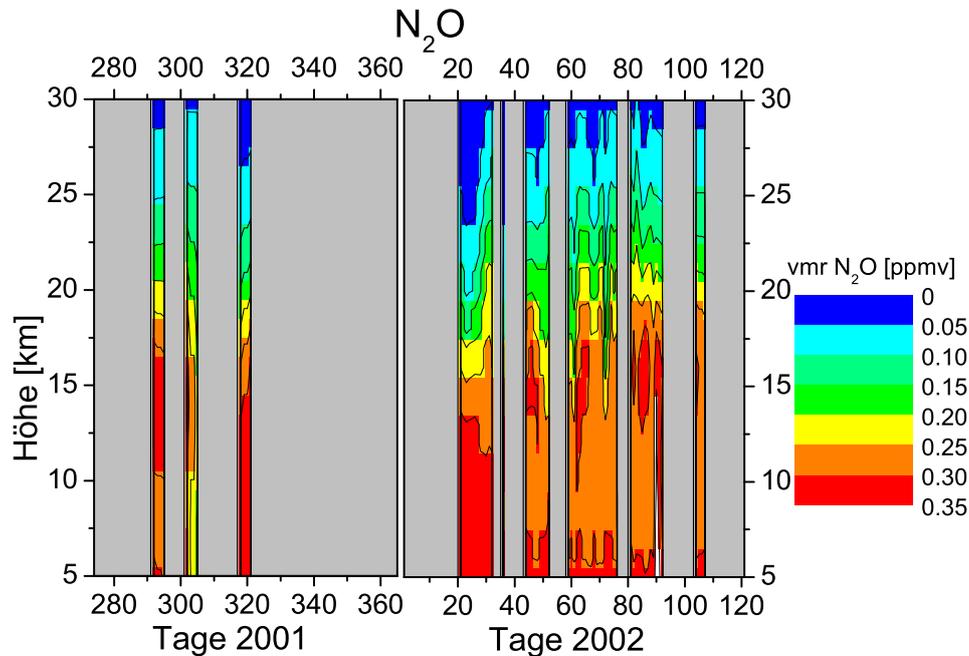


Abb. 7.15: N₂O-Profil im Winter 2001/2002 in Kiruna

Für den Winter 2001/2002 ist das Volumenmischungsverhältnis von N₂O in Abbildung 7.15 dargestellt. Ab Tag 315 bis 320 (Mitte November) sind aufsteigende Luftmassen zu erkennen. Oberhalb von 15 km Höhe ist um Tag 25 bis 30 (Ende Januar 2002) das Aufsteigen von Luft aus dem Polarwirbel erkennbar, während unterhalb absinkende Luftmassen zu beobachten sind. Etwa ab Tag 80 (Mitte bis Ende März 2002) stammt die Luft aus mittleren Breiten.

Im Winter 2002/2003 ist das Volumenmischungsverhältnis von N₂O sehr variabel (Abbildung 7.16). So ist teilweise zwischen 10 km und 15 km ein geringeres Volumenmischungsverhältnis erkennbar als darüber. Im Frühwinter sind etwa zwischen Tag 290 und 300 (Ende Oktober 2002) schon absinkende Luftmassen erkennbar. Dies ist auf einen sehr frühen Polarwirbel in diesem Winter zurückzuführen (Larsen et al., 2003; Tilmes et al., 2003). Anfang bis Mitte Februar 2003 (Tag 34 bis 45) und März 2003 (Tag 60 bis 83) sind aufsteigende Luftmassen zu beobachten. Zwischen Tag 20 und 30 (Ende Januar 2003) sind in 22 km Höhe sehr hohe Werte bis zu 0,35 ppmv erkennbar. Dies ist sehr ungewöhnlich, da N₂O ein troposphärisches Gas ist. Danach scheinen die Luftmassen aus mittleren Breiten zu stammen. Insgesamt war der Winter 2002/2003 schon früh sehr kalt, so dass es schon im Dezember PSCs gab (Larsen et al., 2003; Tilmes et al., 2003).

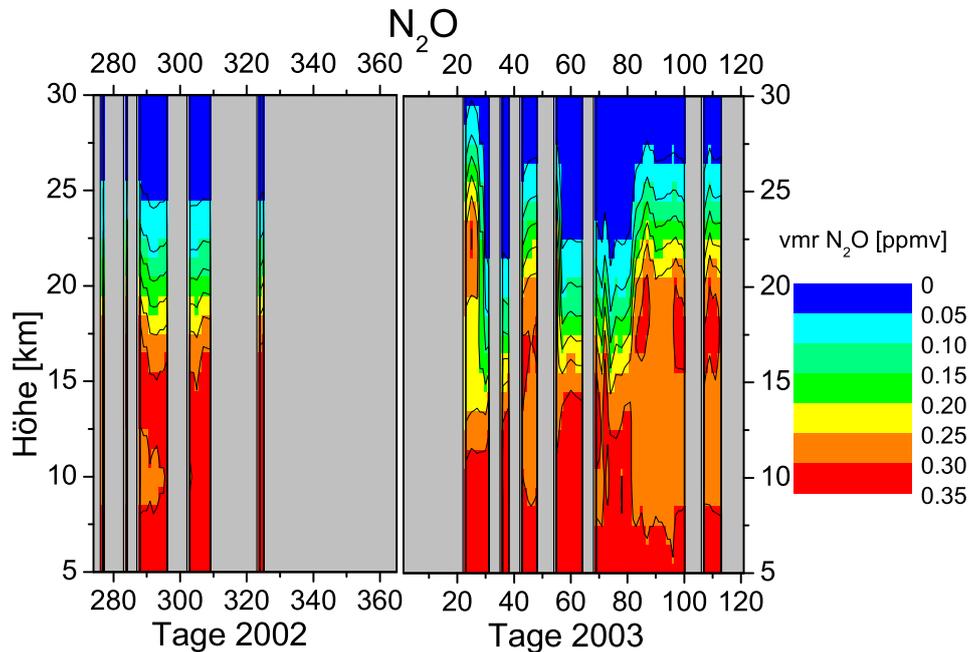


Abb. 7.16: N₂O-Profile im Winter 2002/2003 in Kiruna

7.2.2 HCl

Die Profilinversion von HCl erfolgt auf einer logarithmischen Skala. Der Bodenwert des Profils wird dabei auf dem Wert $9,1 \cdot 10^{-6}$ ppmv festgehalten. Es wird gegen die Steigung regularisiert, d. h. das Profil wird geglättet (Abbildung 7.17). Bei den Auflösungsmatrizen kann man drei unabhängige Höhenschichten erkennen (Abbildung 7.18).

Bei HCl (Abbildung 7.19) ist das gleiche Absinken zu beobachten wie bei N₂O. Zusätzlich ist zwischen Tag 45 und Tag 50 (Mitte Februar 2001) oberhalb von etwa 23 km ein sehr großes Volumenmischungsverhältnis mit Werten über 4 ppbv zu erkennen. Nach Tag 50 haben die gemessenen Luftmassen nicht mehr arktischen Ursprung, sondern stammen aus mittleren Breiten.

Bei HCl (Abbildung 7.20) ist schon Ende Oktober 2001 (Tag 290) in etwa 15 km Höhe Absinken erkennbar, oberhalb von 25 km dagegen aufsteigende Luftmassen. Ab Tag 303 bis 305 (Anfang November 2001) sind oberhalb von 20 km aufsteigende Luftmassen zu erkennen. 2002 ist Mitte bis Ende Februar (Tag 45 - 50) unterhalb von etwa 20 km Höhe Absinken zu sehen. Nach Tag 80 (Mitte März 2002) stammt die Luft der gemessenen Profile aus mittleren Breiten.

Im Winter 2002/2003 ist das Volumenmischungsverhältnis von HCl ähnlich wie bei N₂O sehr variabel (Abbildung 7.21). Im Frühwinter sind um den Tag 290 (Ende Oktober 2002) in etwa 15 km Höhe absinkende Luftmassen erkennbar. Ab Tag 22 bis Tag 65 (Mitte Januar bis Anfang März 2003) ist in 15 km Aufsteigen, in 25 km bis 30 km dagegen Absinken zu erkennen. Ab Tag 75 bis Tag 90 (Mitte bis Ende März 2003) ist es umgekehrt:

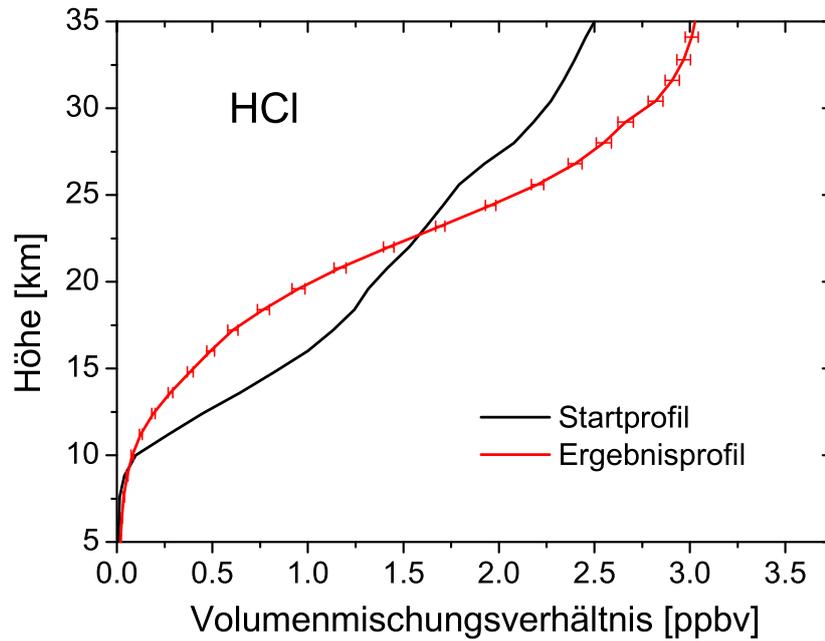


Abb. 7.17: HCl-Profil am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt ist das Startprofil (schwarz) und das Ergebnisprofil (rot) mit dem Fehlerbalken, der den Einfluss des Rauschens auf das regularisierte Profil kennzeichnet.

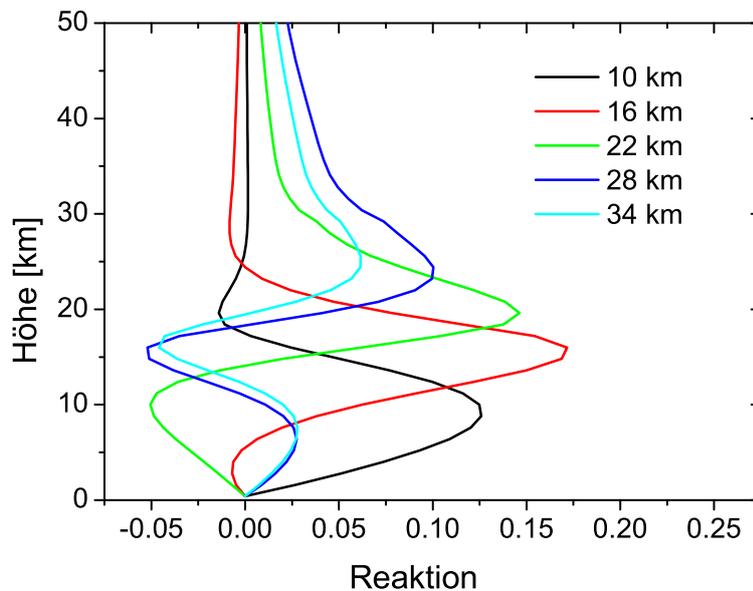


Abb. 7.18: Höherauflösung von HCl. Dargestellt sind einige Spalten der Auflösungsmatrix.

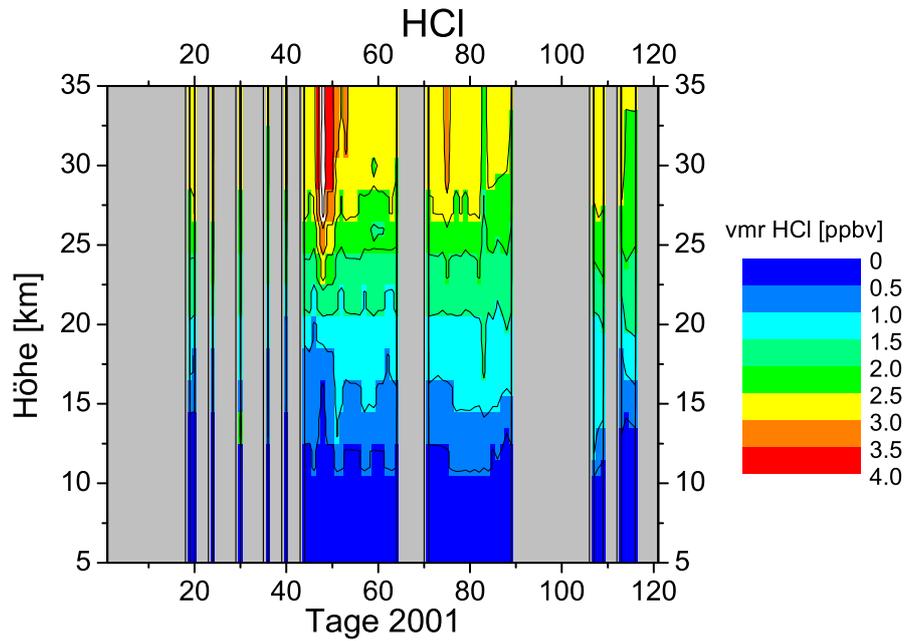


Abb. 7.19: HCl-Profil im Winter 2001 in Kiruna

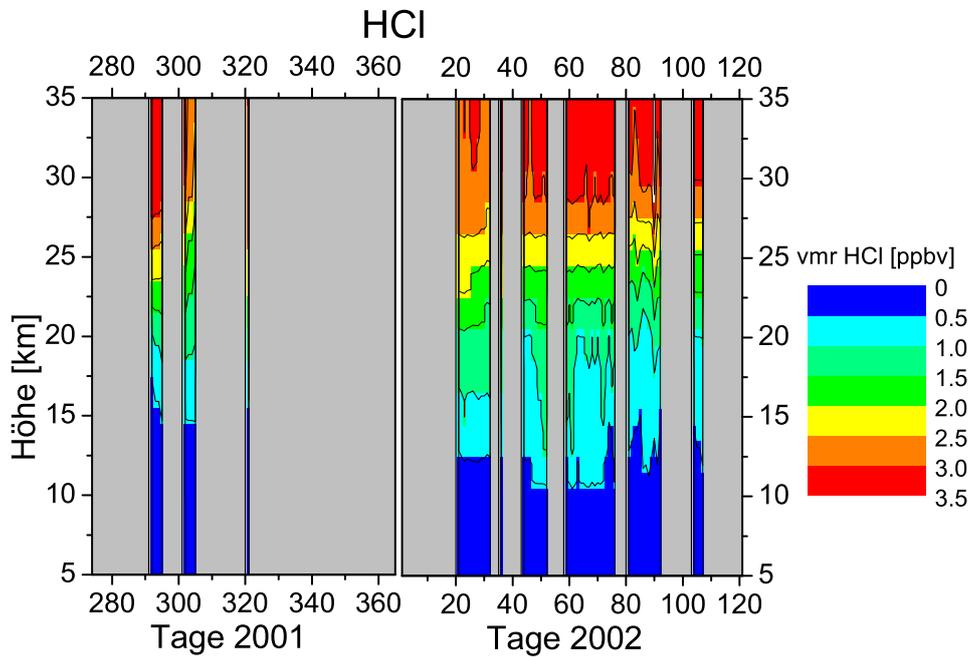


Abb. 7.20: HCl-Profil im Winter 2001/2002 in Kiruna

in unteren Höhe sinkt die Luft ab, während sie in oberen Höhen aufsteigt. Danach stammt die Luft aus mittleren Breiten. Im Frühwinter sind wie auch Ende 2001 höhere Werte

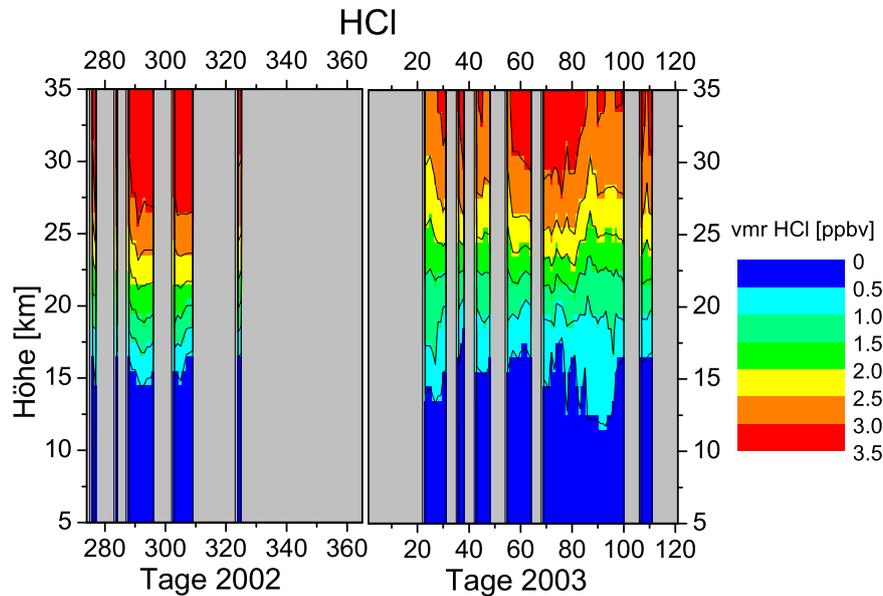


Abb. 7.21: HCl-Profil im Winter 2002/2003 in Kiruna

vorhanden als Anfang des Jahres. Insgesamt ist das Volumenmischungsverhältnis 2003 aber geringer als in den beiden Wintern zuvor.

7.2.3 O_3

O_3 wird auf einer logarithmischen Skala ausgewertet, damit besonders unterhalb von 10 km keine negativen Volumenmischungsverhältnisse auftreten können. Um den Rückgang des Mischungsverhältnisses oberhalb von 35 km realistisch darzustellen, wurde gegen die Steigung eines klimatologischen Profils regularisiert (Abbildung 7.22). Abbildung 7.23 zeigt die Höhenauflösung von O_3 . Es können etwa vier unabhängige Höhenschichten aufgelöst werden.

In Abbildung 7.24 werden Ozonprofile von Januar bis März 2001 bis in 35 km Höhe gezeigt. Außerhalb des Polarwirbels, etwa ab Tag 45 (Mitte Februar 2001) sieht man oberhalb von 20 km Höhe Luft aus mittleren Breiten. Auch das hohe Volumenmischungsverhältnis an Tag 39 (8.2.2001) mit mehr als 7 ppmv ist auf Luft aus mittleren Breiten zurückzuführen.

Abbildung 7.25 zeigt Ozonprofile von Oktober 2001 bis April 2002 bis in 35 km Höhe. Anfang November 2001 (Tag 300 bis 305) ist oberhalb von 30 km Höhe ein Maximum mit Werten von 5 - 6 ppmv. Zu Beginn des Jahres 2002 ist oberhalb von 30 km Höhe eine Zunahme von 4 - 5 ppmv auf mehr als 8 ppmv Ende März zu beobachten.

Abbildung 7.26 stellt Ozonprofile von Oktober 2002 bis April 2003 dar. Im Frühwinter sind nur geringe Volumenmischungsverhältnisse mit maximalen Werten von 5 - 6 ppmv erkennbar. Dabei ist um Tag 20 bis 25 (Ende Januar 2003) in 30 bis 35 km Höhe eine starke Abnahme bis Mitte März 2003 (Tag 85) von knapp 10 ppmv auf 5 - 6 ppmv zu

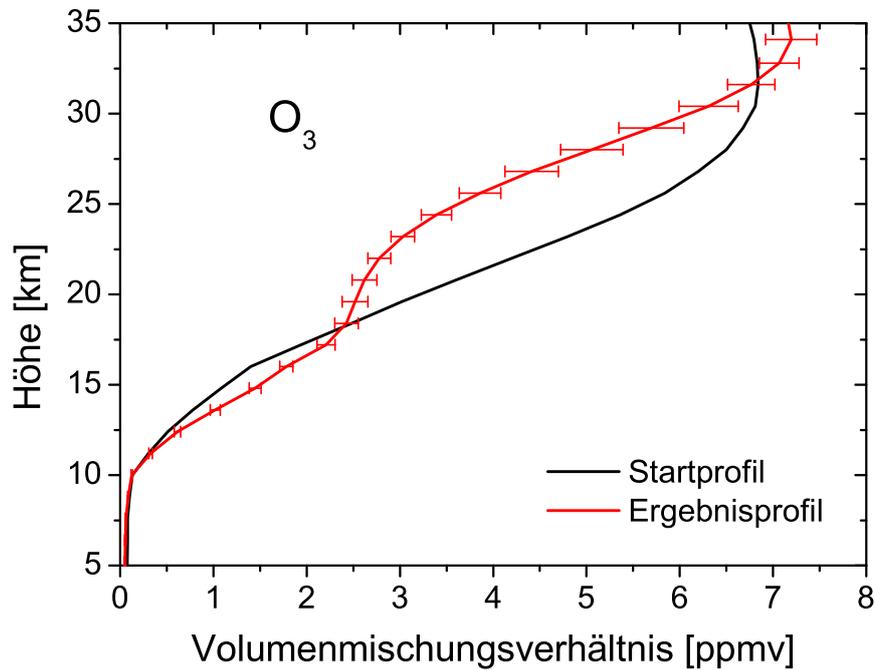


Abb. 7.22: O_3 -Profil am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt ist das Startprofil (schwarz) und das Ergebnisprofil (rot) mit dem Fehlerbalken, der den Einfluss des Rauschens auf das regularisierte Profil kennzeichnet.

erkennen. Diese starke Abnahme könnte durch Einmischen von mesosphärischer Luft zustande gekommen sein. Die Werte des Volumenmischungsverhältnisses steigen erst Ende März / Anfang April 2003 nach dem Auflösen des Polarwirbels wieder auf Werte von etwa 8 - 9 ppmv an.

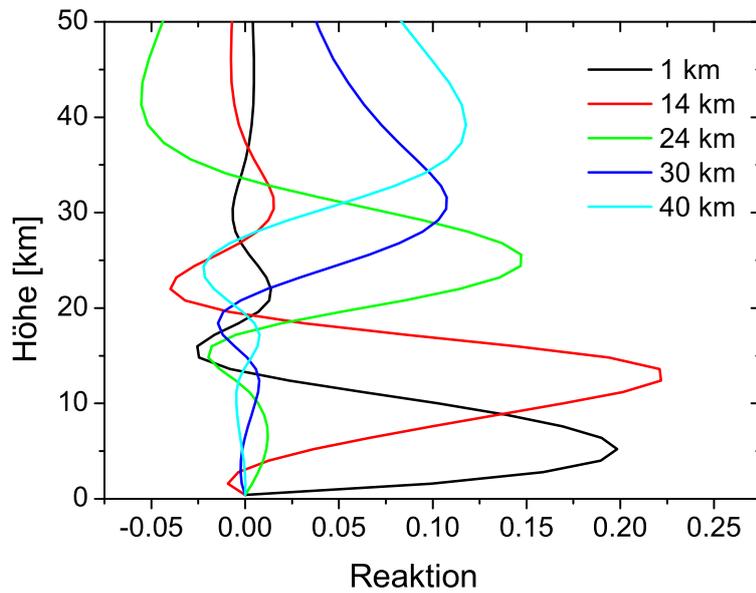


Abb. 7.23: Höhenaufösung von O_3 . Dargestellt sind einige Spalten der Auflösungsmatrix.

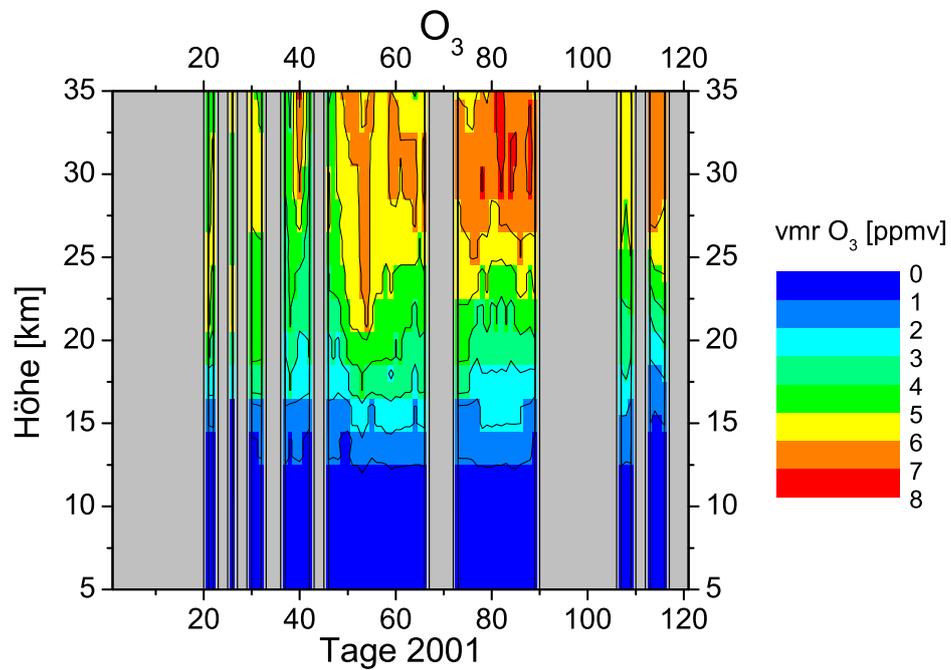


Abb. 7.24: O_3 -Profile im Winter 2001 in Kiruna

7 Messergebnisse

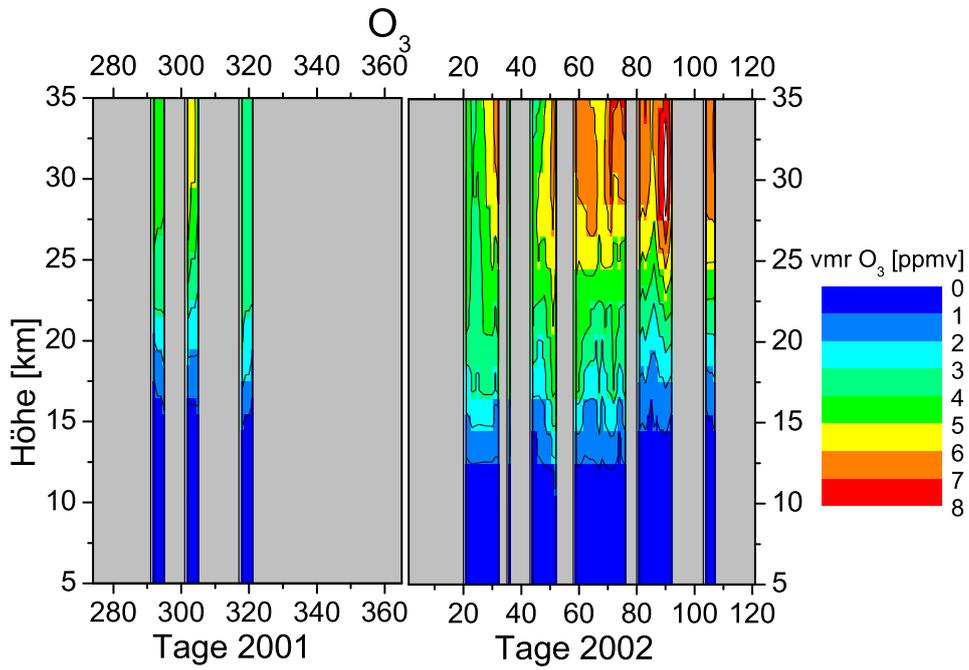


Abb. 7.25: O₃-Profile im Winter 2001/2002 in Kiruna

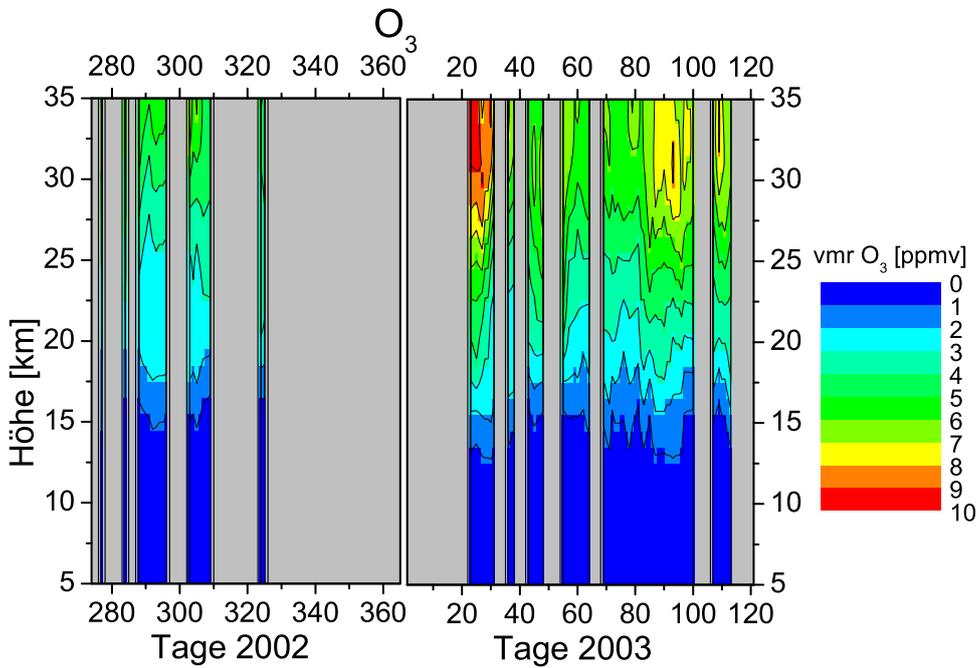


Abb. 7.26: O₃-Profile im Winter 2002/2003 in Kiruna

7.2.4 HNO₃

Die Auswertung von HNO₃ erfolgt in den beiden spektralen Auswertefenstern von 868,3 cm⁻¹ bis 869,59 cm⁻¹ und von 872,8 cm⁻¹ bis 874,0 cm⁻¹. Der Einfluss der Stör gases H₂O, CO₂ und OCS in diesen Bereichen ist gering. Die Profilinversion ist nur eingeschränkt möglich, da die spektroskopische Beschreibung der HNO₃-Signaturen breit ist. Die Inversion erfolgt normalerweise auf logarithmischer Skala gegen die Nullsteigung. Da in diesem Fall das Maximum relativ spitz ist, erfolgte später die Inversion auf linearer Skala. Für die Validierung der ENVISAT-Daten wurde die Inversion auf linearer Skala verwendet. Die hier gezeigten Zeitreihen der Profile wurden allerdings noch auf logarithmischer Skala invertiert. Ein Vergleich dieser beiden Inversionsergebnisse zeigt Abbildung 7.27. Das Profil wird für die Inversion am Boden ($3,8 \cdot 10^{-5}$ ppmv) und am oberen Rand der Modellatmosphäre ($4,1 \cdot 10^{-9}$ ppmv) festgehalten. Dabei sind drei Höhenschichten auflösbar (Abbildung 7.28).

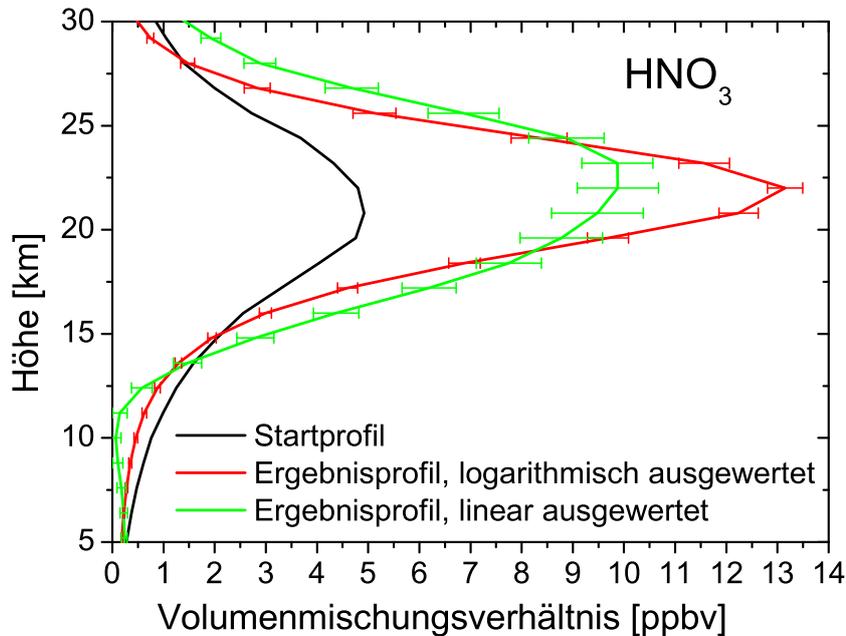


Abb. 7.27: HNO₃-Profil am Beispiel einer Messung vom 5.2.03. Dargestellt ist das Startprofil (schwarz), das Ergebnisprofil der logarithmischen Inversion (rot) und das Ergebnisprofil der linearen Inversion (grün) jeweils mit Fehlerbalken, die den Einfluss des Rauschens auf das regularisierte Profil kennzeichnen.

Abbildung 7.29 zeigt Ende Januar 2001 (Tag 25 bis 30) abgesunkene Luftmassen von HNO₃. Generell ist ein Absinken bis etwa Tag 50 (Mitte Februar 2001) zu beobachten, das von Luftmassen aus mittleren Breiten unterbrochen wird.

In Abbildung 7.30 sind im Oktober 2001 (Tag 290 bis 295) in etwa 23 km Höhe die höchsten Volumenmischungsverhältnisse des gesamten Winters mit Werten von bis zu 16 ppbv zu erkennen. Danach sinkt das Mischungsverhältnis auf Werte von 10 - 12 ppbv Anfang

7 Messergebnisse

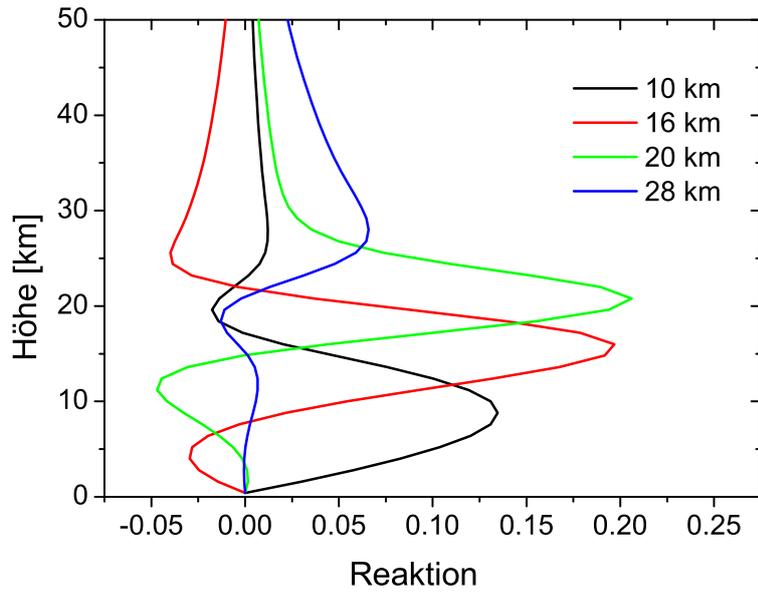


Abb. 7.28: Höhenauflösung von HNO₃. Dargestellt sind einige Spalten der Auflösungsmatrix.

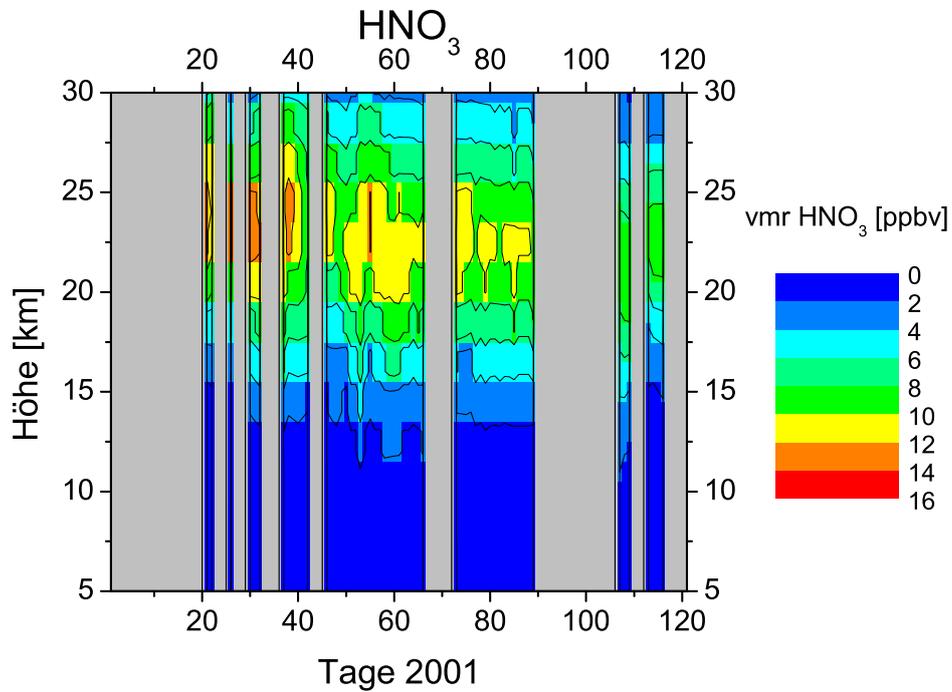


Abb. 7.29: HNO₃-Profil im Winter 2001 in Kiruna

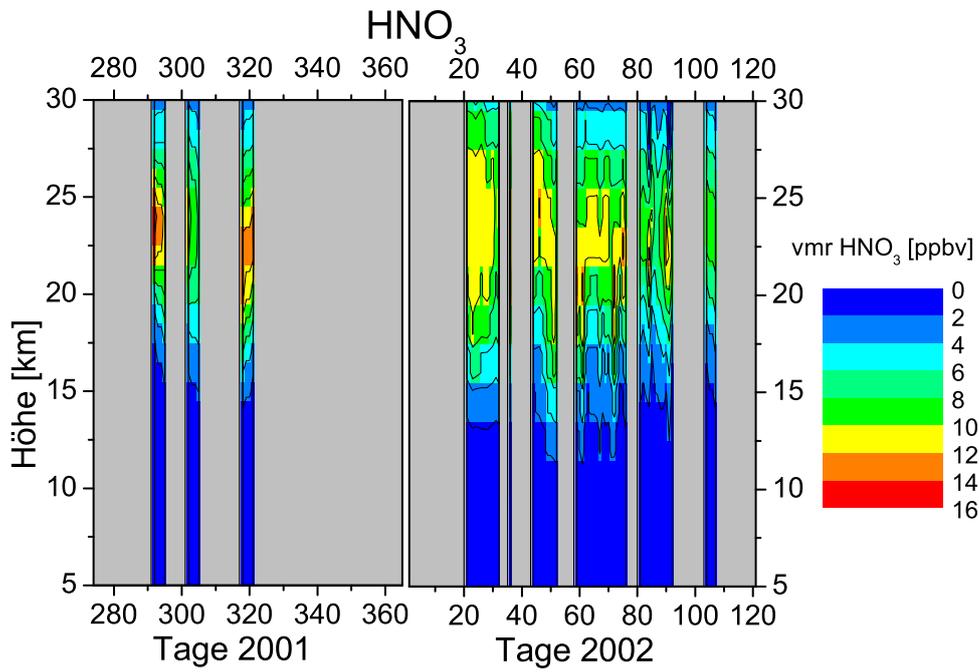


Abb. 7.30: HNO₃-Profile im Winter 2001/2002 in Kiruna

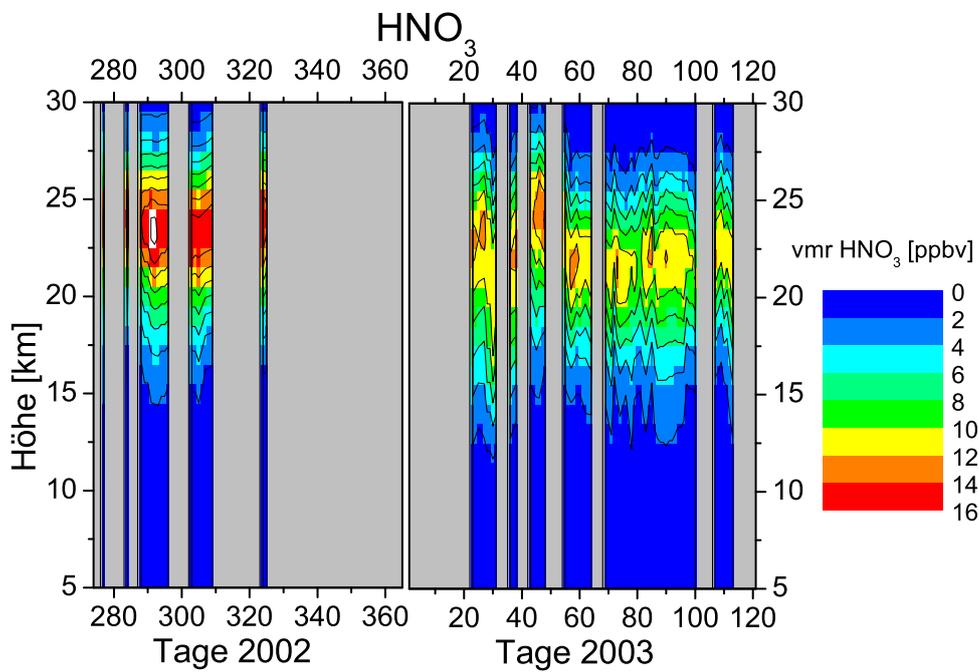


Abb. 7.31: HNO₃-Profile im Winter 2002/2003 in Kiruna

7 Messergebnisse

2002. Um Tag 45 - 50 (Ende Februar 2002) sind absinkende Luftmassen erkennbar. Zu Beginn des Frühlings ist eine durch Photolyse bedingte Abnahme des Volumenmischungsverhältnisses feststellbar. Allerdings sind keine Anzeichen von Denitrifizierung erkennbar.

In Abbildung 7.31 ist im Gegensatz zum Winter 2001/2002 kein deutliches Absinken der Luftmassen ersichtlich. Doch auch hier ist während des Winters eine Abnahme des Volumenmischungsverhältnisses feststellbar. So sinkt es von mehr als 16 ppbv im Frühwinter in etwa 23 km Höhe auf 10 bis 12 ppbv im April 2003.

8 Vergleiche mit verschiedenen Messungen

Vor der Validierung der Satellitendaten wurden die bodengebundenen Messungen mit anderen Messungen verglichen, welche eine bessere Höhengauflösung besitzen. Das Hauptproblem bei der Validierung von ENVISAT-Daten neben der zeitlichen und räumlichen Koinzidenz ist die unterschiedliche Höhengauflösung der Profile sowie die stärkere Abhängigkeit von der a priori Information für die aus Bodenmessungen gewonnenen Profile. Es wurden Spurengasprofile aus den FTIR-Messungen mit Ozonsondenaufstiegen, mit Ballondaten, mit einem Millimeterwellenradiometer und mit synthetisch erzeugten Profilen verglichen.

8.1 Vergleich mit Ozonsonden

Zur Überprüfung und Verbesserung der bodengebundenen Messungen wurden unsere Ozonprofile zunächst mit in-situ-Daten von Ozonsonden verglichen. Für diesen Vergleich wurden Ozonsondenaufstiege von der ESRANGE, die etwa 30 km von Kiruna entfernt ist, verwendet. Im Winter 1999/2000 gab es sechs Koinzidenzen für FTIR- und Ozonsondenmessungen, also an sechs Tagen gab es sowohl bodengebundene als auch Ozonsondenmessungen. Zwei davon sind als Beispiele in den folgenden Abbildungen dargestellt.

Da die Höhengauflösung der FTIR-Messungen mit etwa 8 bis 10 km sehr viel schlechter als die der in situ-Messungen mit etwa 150 m ist, wurde für den Profilvergleich die Höhengauflösung der Ozonsondenprofile vermindert, damit sie mit den FTIR-Profilen verglichen werden können. Dafür wurden synthetische Spektren, die auf den Ozonsonden-Profilen basieren, für jeden Tag, an dem sowohl Ozonsonden- als auch FTIR-Messungen vorliegen, berechnet. Es wurde also eine Vorwärtsrechnung mit den Sondenprofilen als Eingangsgröße durchgeführt und diese synthetischen Spektren mit der gleichen Inversionsmethode, die bei der normalen Auswertung der gemessenen Spektren verwendet wird, ausgewertet. Damit gehen die gleichen Randbedingungen wie bei den FTIR-Messungen ein und es ergibt sich die gleiche Höhengauflösung. Dies ist die einfachste Möglichkeit der Glättung ohne explizite Kenntnis der Auflösungsmatrix.

Die Ozonsonden sind nur in der Lage, bis zu einer Höhe von etwa 30 km zu messen. Für die Vorwärtsrechnung wurden oberhalb von den Original-Sondenprofilen die Profile aus den bodengebundenen Messungen ergänzt.

Die Abweichung zwischen den Profilen wurde berechnet. Dabei ergaben sich Unterschiede am Boden von mehr als 10 %, die mit zunehmender Höhe abnahmen.

In Abbildung 8.1 ist die gute Übereinstimmung zu dem auf die gleiche Höhengauflösung wie das FTIR-Profil reduzierten Sondenprofil erkennbar. So wird z. B. die Form des

8 Vergleiche mit verschiedenen Messungen

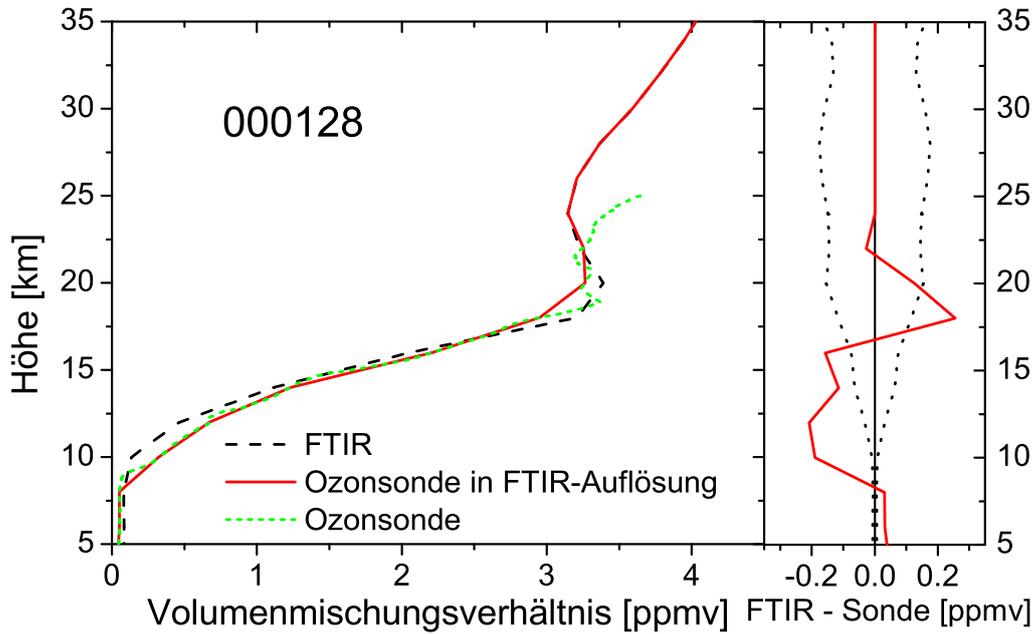


Abb. 8.1: Vergleich von bodengebundenen Messungen in Kiruna mit Messungen von Ozonsonden aus ESRANGE vom 28.01.2000

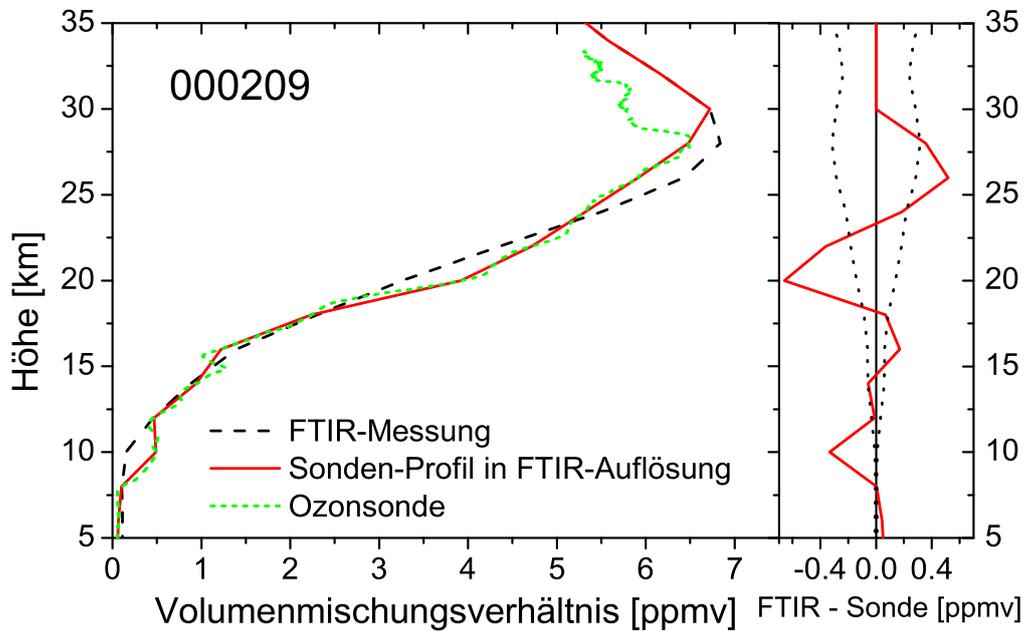


Abb. 8.2: Vergleich von bodengebundenen Messungen in Kiruna mit Messungen von Ozonsonden aus ESRANGE vom 09.02.2000

Profils von der FTIR-Messung gut wiedergegeben. Im rechten Teil der Abbildung sind die Unterschiede zwischen FTIR- und geglättetem Profil abgebildet. Dabei stellen die gepunkteten Linien die 1σ -Rausch-Fehlerbalken der bodengebundenen Messung dar. Bei den Vergleichen wurden nur die Rauschfehler berücksichtigt, weil sich die übrigen Fehler auf beide Auswertungen gleich auswirken und sich somit herauskürzen.

Abbildung 8.2 zeigt ein Beispiel mit kleinräumigen Strukturen in etwa 15 km Höhe, die geglättet werden.

Die Differenzen der sechs koinzidenten Messtage sind in den Abbildungen 8.3 dargestellt. Der linke Teil der Abbildung zeigt die Abweichung in ppmv, der rechte Teil die Abweichung in Prozent. Dabei ist die durchgezogene Linie der Mittelwert der Abweichungen und die Balken stellen die Standardabweichung dar. Es wird deutlich, dass die prozentuale Abweichung in unteren Höhenbereichen relativ groß ist. Dies ist sowohl auf das geringe Volumenmischungsverhältnis in diesen Schichten zurückzuführen, aber auch auf die geringe Sensitivität, da Auswertefenster für die stratosphärische Inversion verwendet wurden. Abgesehen von diesem niedrigen Höhenbereich liegen die größten Abweichungen in etwa 13 km Höhe und betragen 20 %. Unterhalb von 10 km existieren systematische Abweichungen. Oberhalb hingegen liegen die Unterschiede innerhalb der Fehlerbalken.

Die Unterschiede in diesen niedrigen Höhen können durch die Auswertefenster, die für die stratosphärische Arbeit ausgewählt wurden, entstehen.

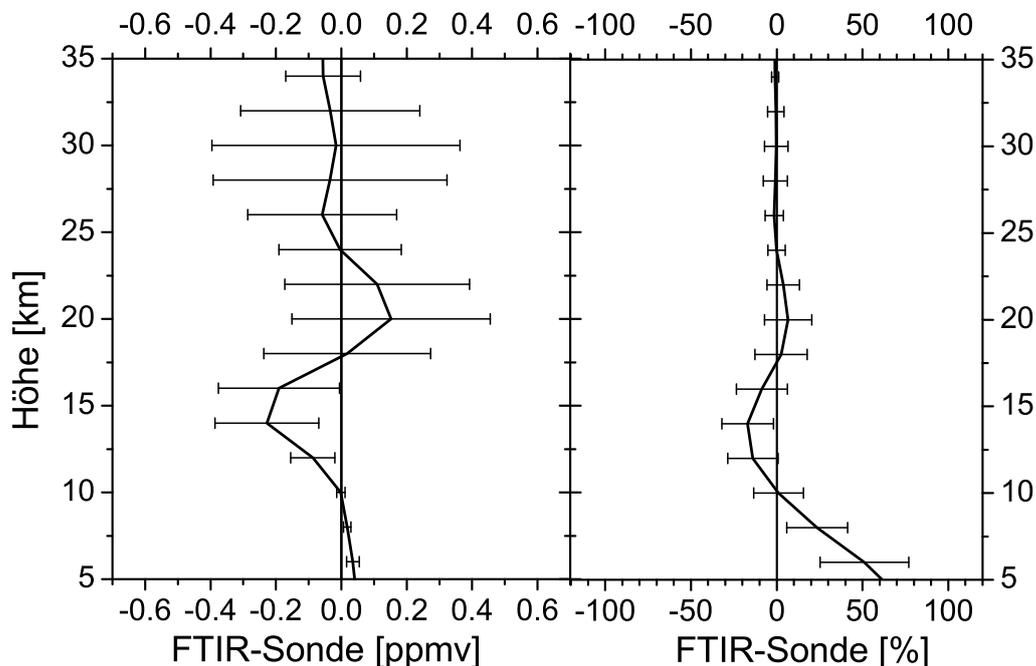


Abb. 8.3: Abweichungen der FTIR-Messungen zu allen sechs koinzidenten Ozonsondenmessungen für Kiruna im Winter 1999/2000

Für Izaña wurden von Matthias Schneider weitere Vergleiche mit Messungen von Ozon-

8 Vergleiche mit verschiedenen Messungen

sonden durchgeführt. Dabei gab es 55 koinzidente Messungen zwischen März 1999 und Dezember 2002 aus regelmäßigen Ozonsondenaufstiegen, die einmal pro Woche in Santa Cruz de Tenerife gestartet werden. Diese zeigen bis etwa 20 km keine großen Unterschiede zu den FTIR-Messungen, zwischen 25 km und 30 km sind die Unterschiede mit etwa 10 % am größten. Diese Vergleiche findet man in Schneider et al. (2003).

Auch bei MIPAS-ENVISAT (Kapitel 9.2.2) sind die Abweichungen in etwa 25 km Höhe am größten (siehe Abbildungen 9.24, 9.26 und 9.28 auf den Seiten 106, 108 und 110).

8.2 Vergleich mit MIPAS-B2 Ballonmessungen

Als weiteren Vergleich von zwei Messinstrumenten mit unterschiedlicher Höhenauflösung wurde ein Vergleich mit Ballondaten von MIPAS-B2 vorgenommen. Dabei wurden die Säulengehalte und Profile der Gase N_2O , CH_4 , NO_2 und $ClONO_2$ verglichen. Dies war insofern von besonderem Interesse, da die ballongetragenen Messungen der Messgeometrie von den zu erwartenden Datenprodukten von MIPAS-ENVISAT am nächsten kommen. Außerdem misst MIPAS-B2 genau wie ENVISAT die Emission in Horizontsondierung (Oelhaf et al., 2001).

Da die Höhenauflösung der beiden Messmethoden unterschiedlich ist, wurde die identische Methode wie bei dem Vergleich mit den Ozonsondendaten angewendet. Die vertikal hochaufgelösten Ballonprofile wurden als Eingabe für Vorwärtsrechnungen verwendet. Die daraus berechneten synthetischen Spektren wurden dann mit der gleichen Inversionsmethode, die bei der normalen Auswertung verwendet wird, ausgewertet. Damit gehen die gleichen Randbedingungen wie bei den FTIR-Messungen ein und es ergibt sich die gleiche Höhenauflösung.

Die vier koinzidenten Messungen sind detailliert in Anhang A aufgelistet. Die Koinzidenzen der verschiedenen Flüge decken verschiedene atmosphärische Situationen ab.

Die Übereinstimmungen zwischen den Messungen, die in Abbildung 8.4 bis Abbildung 8.9 dargestellt sind, sind gut. Die Abweichungen können z. B. durch die unterschiedlichen Messzeiten oder auch durch die verschiedenen Beobachtungsorte zustande kommen. So ist vor allem die zeitliche Übereinstimmung nicht sehr gut, da die FTIR-Messungen tagsüber gemacht wurden, da hierfür die Sonne benötigt wird, die ballongetragenen Messungen fanden dagegen nachts statt (siehe Tabelle A.1 im Anhang). Die Unterschiede können aber auch durch die unterschiedliche Ableitung der Profile kommen. Bei den bodengebundenen Messungen stammen die Profile, wie in vorherigen Kapiteln beschrieben, aus der Linienform, die ballongetragenen Messungen leiten die Profile aus den verschiedenen Tangentenhöhen der Horizontsondierung ab (Friedl-Vallon et al., 1992; Oelhaf et al., 1992). Auch durch verschiedene Blickrichtungen können Unterschiede in den Profilen resultieren.

Zu beachten ist, dass bei den Bodenmessungen die Fehlerbalken den Einfluss des Rauschens auf das regularisierte Profil enthalten, wohingegen bei den Ballonmessungen die Fehlerbalken zusätzlich zu dem Rauschfehler den Temperaturfehler sowie den Fehler in der Ungenauigkeit der Tangentenhöhe enthalten.

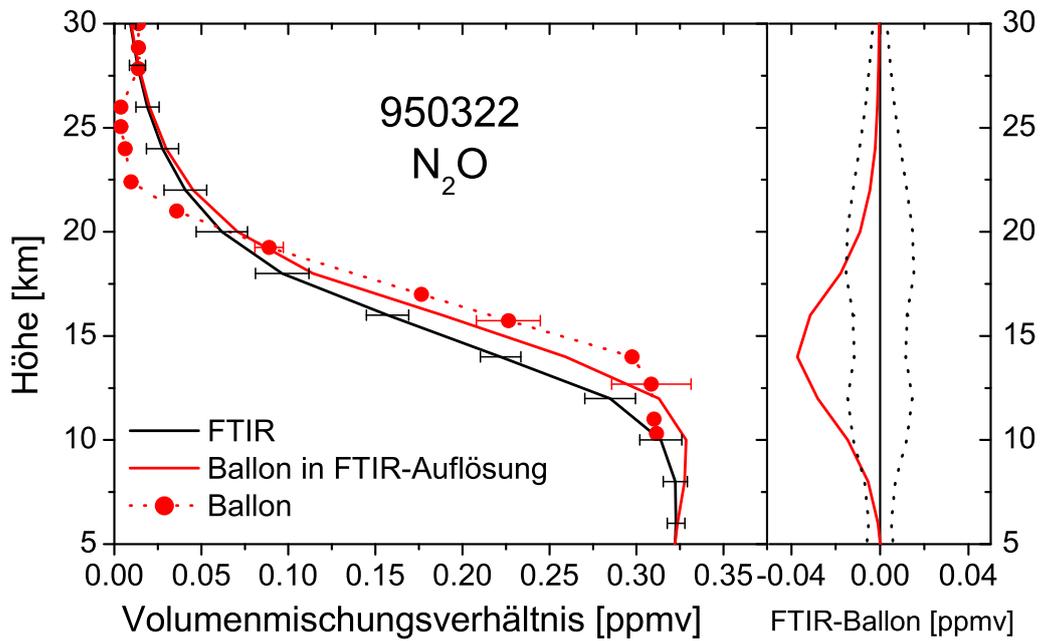


Abb. 8.4: Vergleiche von bodengebundenen Messungen mit ballongetragenen Messungen von N₂O vom 22.03.1995

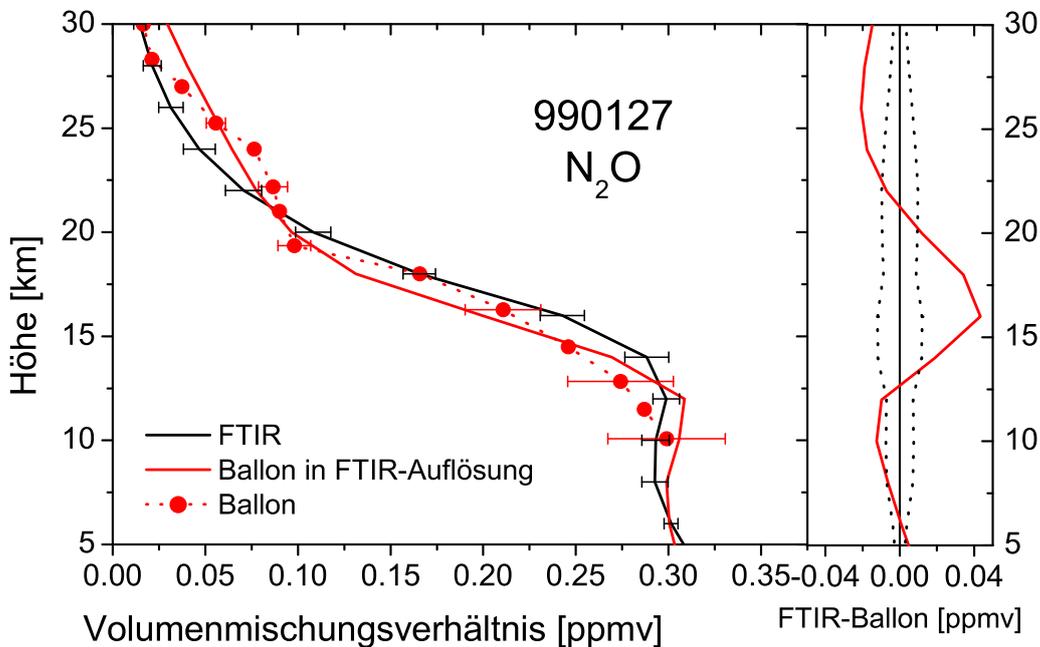


Abb. 8.5: Vergleiche von bodengebundenen Messungen mit ballongetragenen Messungen von N₂O vom 27.01.1999

8 Vergleiche mit verschiedenen Messungen

In den Abbildungen 8.4 und 8.5 sind zwei extreme Beispiele für das langlebige N_2O dargestellt: Am 22.3.1995 ist das größte Absinken, das MIPAS-B2 jemals beobachtet hat, dargestellt. In Abbildung 8.5 dagegen sind unterschiedliche Luftmassen unterhalb und oberhalb von 20 km Höhe zu erkennen. Die FTIR-Messungen beschreiben die erwartete Steilheit der Profile relativ gut, allerdings existieren oberhalb von 20 km Höhe nicht genug Informationen, um das Profil ausreichend gut berechnen zu können (Oelhaf et al., 2001).

Das stratosphärische Reservoirgas HNO_3 ist in den Abbildungen 8.6 und 8.7 dargestellt. Im Februar 1995 (Abbildung 8.6) ist in den Ballonmessungen Denitrifizierung erkennbar, also die irreversible Entfernung von Stickstoff aus der Stratosphäre durch Sedimentation, wie in Kapitel 2.4 beschrieben. Solche strukturierten Profile können aus den bodengebundenen Messungen wegen der schlechten vertikalen Auflösung nicht abgeleitet werden, jedoch sind die Strukturen ansatzweise zu erkennen, was am breiten Plateau im HNO_3 -Profil ersichtlich ist. Am 27.1.1999 (Abbildung 8.7) wurden typische Profile von HNO_3 ohne Denitrifizierung gemessen. Für diesen Zeitpunkt lassen sich die breiten stratosphärischen Maxima auch mit den bodengebundenen Messungen gut erfassen. In den Abweichungen im rechten Teil von Abbildung 8.7 ist ein Schwingen zu erkennen: zwischen 15 und 20 km Höhe ist das FTIR-Profil größer als das Ballonprofil, zwischen 25 und 30 km dagegen kleiner. Dies ist evtl. auf eine systematische Höhenverschiebung von etwa 1 bis 1,5 km zurückzuführen. Insgesamt kann bei HNO_3 festgestellt werden, dass die Profile der Volumenmischungsverhältnisse aus den bodengebundenen Beobachtungen mit der hohen spektralen Auflösung und dem niedrigen Rauschen geeignet sind, um den vertikalen Gradienten in der untersten Stratosphäre und die Höhe des Maximums gut zu bestimmen.

Für ClONO_2 stehen neue druckabhängige spektroskopische Daten von Birk und Wagner zur Verfügung (Birk und Wagner, 2000), die sogar vom Boden aus einige Informationen über die Höhenverteilung von ClONO_2 erlauben. Da diese spektroskopischen Daten auch bei den ballongetragenen Messungen verwendet wurden, ist die Spektroskopie der bodengebundenen Daten und der Ballondaten verträglich. Mit Hilfe dieser Spektroskopie können zwei unabhängige Höenschichten für ClONO_2 abgeleitet werden. Im Vergleich der beiden Messungen fällt auf, dass die Ballonprofile deutlich größere Werte haben als die bodengebundenen.

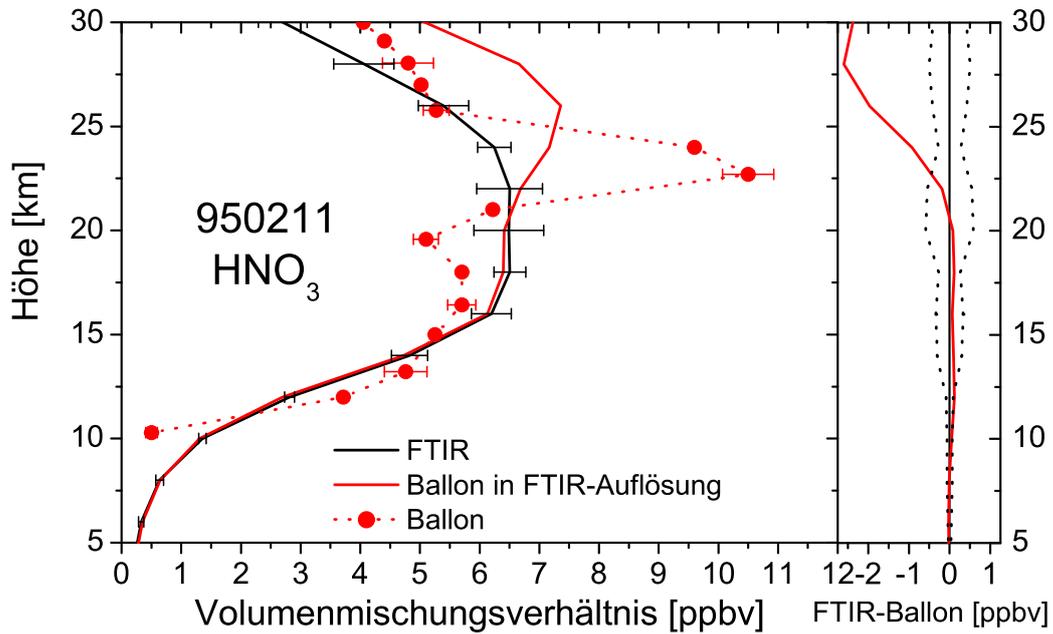


Abb. 8.6: Vergleiche von bodengebundenen Messungen mit ballongetragenen Messungen von HNO₃ vom 11.02.1995

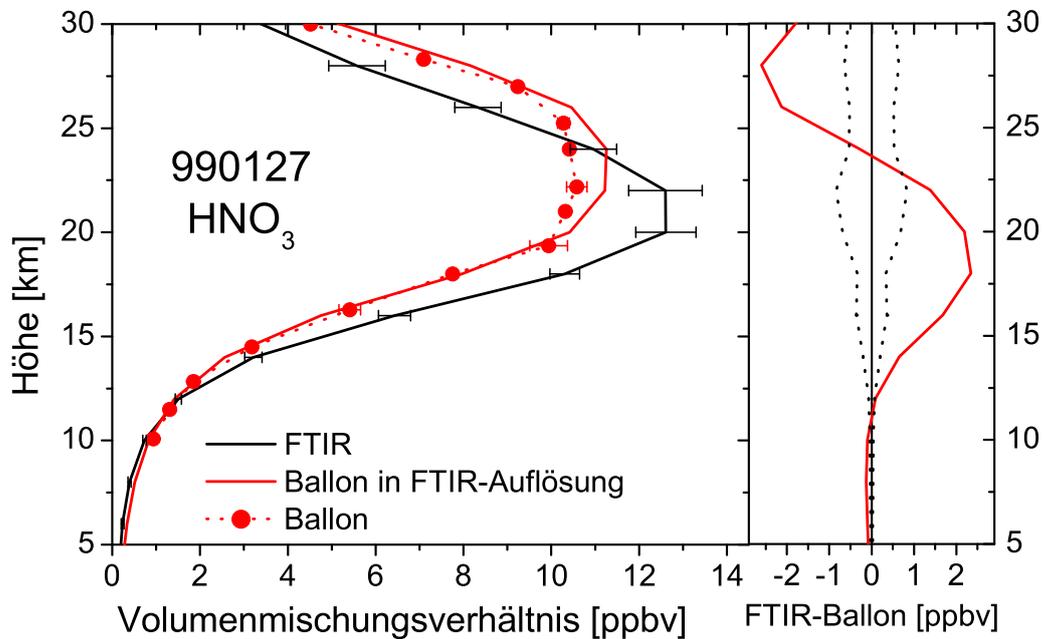


Abb. 8.7: Vergleiche von bodengebundenen Messungen mit ballongetragenen Messungen von HNO₃ vom 27.01.1999

8 Vergleiche mit verschiedenen Messungen

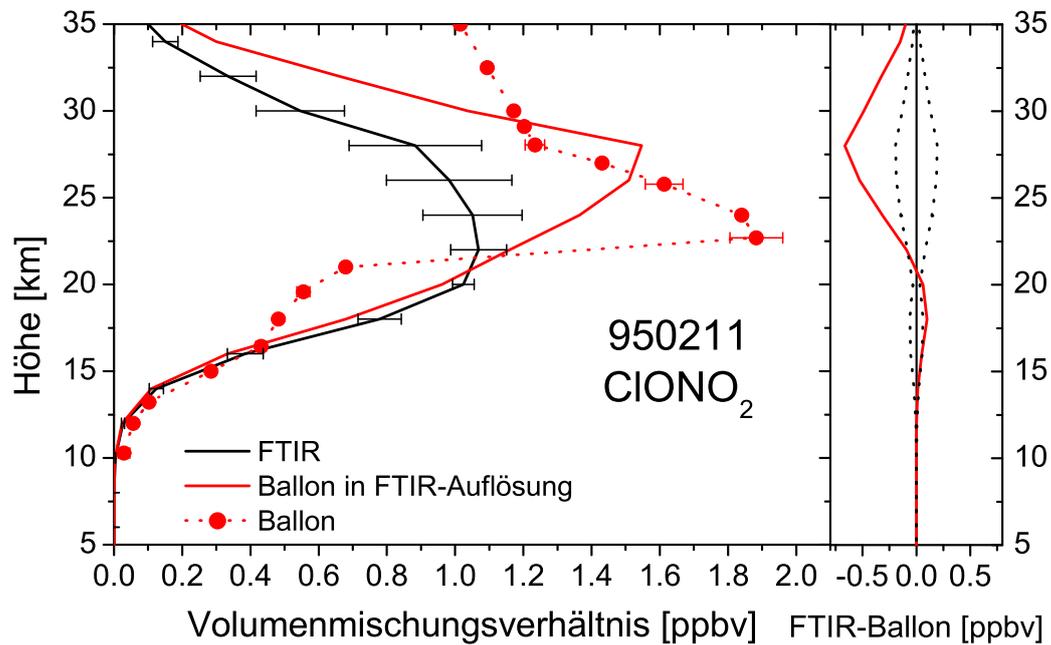


Abb. 8.8: Vergleiche von bodengebundenen Messungen mit ballongetragenen Messungen von CIONO₂ vom 11.02.1995

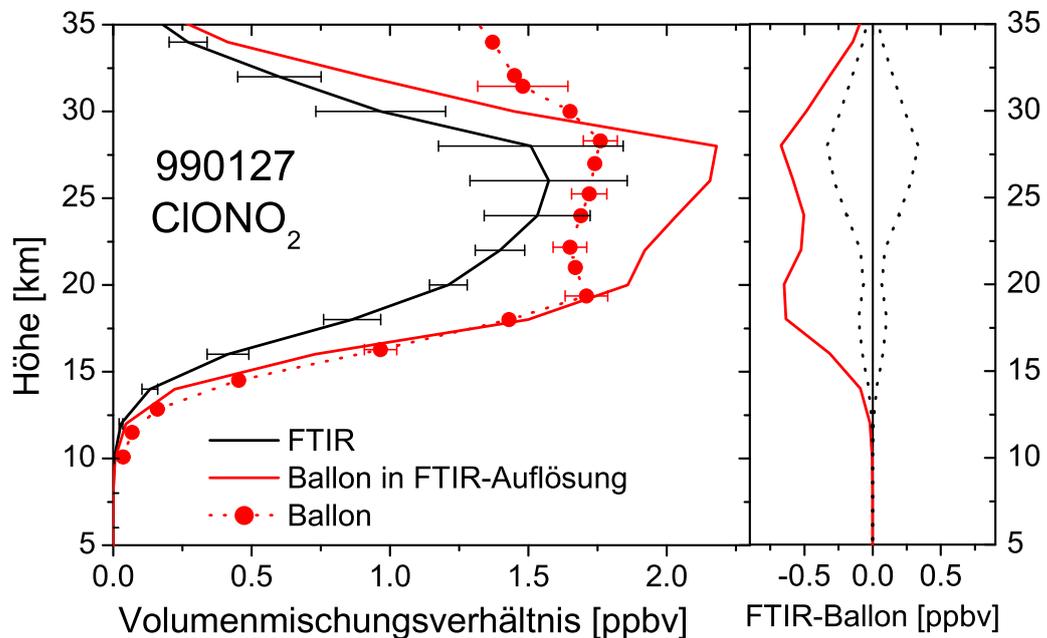


Abb. 8.9: Vergleiche von bodengebundenen Messungen mit ballongetragenen Messungen von CIONO₂ vom 27.01.1999

8.3 Vergleich mit einem Millimeterwellenradiometer

Als weiterer Vergleich mit anderen Messinstrumenten dient der Vergleich mit einem Millimeterwellenradiometer, das ebenfalls in Kiruna am IRF betrieben wird (Kopp, 2003). Diese beiden Messgeräte haben im Gegensatz zu den Vergleichen in den vorigen Kapiteln eine ähnliche Höhenauflösung.

Abbildung 8.10 zeigt den Mittelwert und die Standardabweichung aus dem Vergleich von 14 koinzidenten O_3 -Messungen von FTIR und Millimeterwellenradiometer aus dem Winter 2002/2003. Generell zeigt sich über den kompletten Höhenbereich eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Instrumenten. Die größten Abweichungen sind im unteren Höhenbereich mit mehr als 10 % zu finden. Doch auch hier liegen die Unterschiede noch innerhalb der Standardabweichung der 14 Koinzidenzen. Auch bei etwa 23 km liegen die Unterschiede von etwa 8 % noch innerhalb der Fehlerbalken. Zwischen 28 und 42 km Höhe stimmen die Messungen besonders gut überein. Dies ist der Höhenbereich, in dem das Mikrowellenradiometer sehr sensitiv ist, deshalb kann man davon ausgehen, dass auch die FTIR-Ergebnisse in diesem Bereich noch von guter Qualität sind. Nähere Informationen über das Mikrowellenradiometer findet sich z. B. bei Kopp (2000).

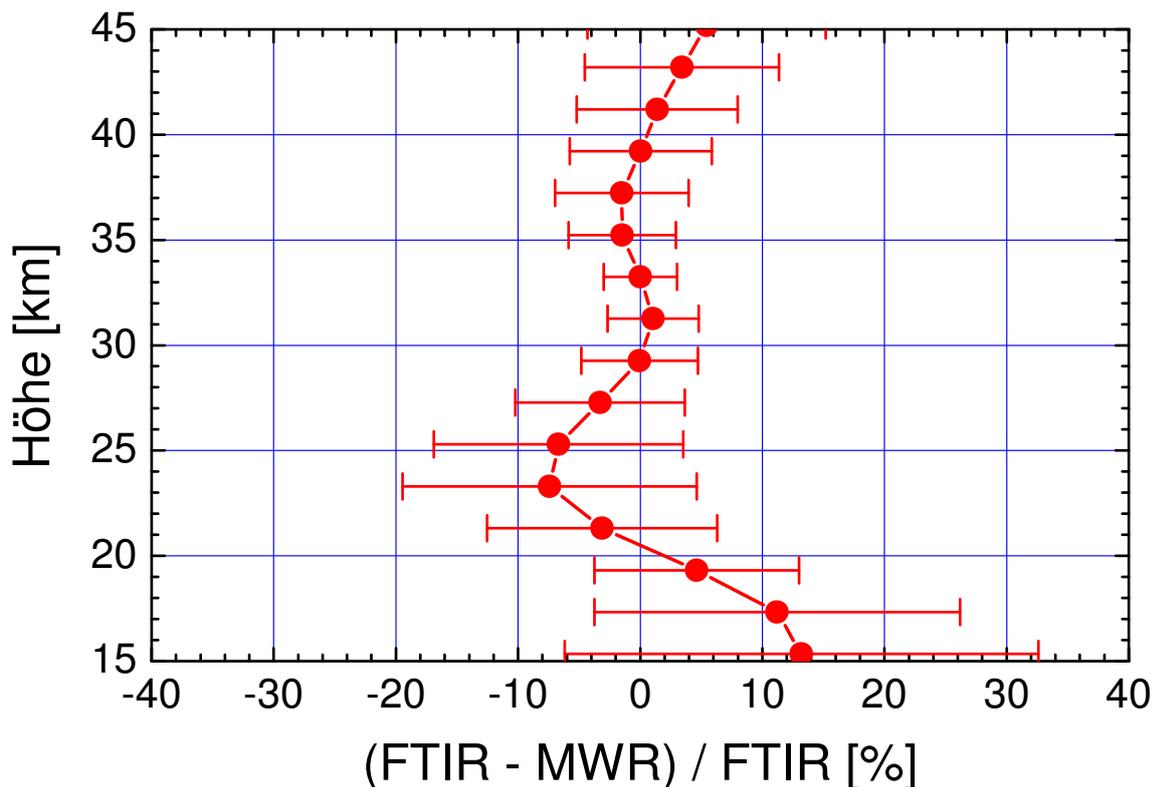


Abb. 8.10: Vergleich von Millimeterwellenradiometer und FTIR-Spektrometer

8.4 Vergleich von simulierten FTIR-Profilen mit simulierten MIPAS-ENVISAT-Profilen

Des Weiteren wurde ein Vergleich von Simulationsmessungen mit Testszenarien für MIPAS-ENVISAT mit verschiedenen Höhenauflösungen durchgeführt. Dafür wurden mit dem Strahlungsübertragungsmodell KOPRA synthetische Spektren für Ozon für bodengebundene Messungen erzeugt. Diese wurden mit synthetischen MIPAS-ENVISAT-Spektren verglichen (Steck, 2002; Steck et al., 2002).

Für den Vergleich von zwei Fernerkundungsmessgeräten wird das Verfahren von Rodgers und Connor verwendet (Rodgers, 2000; Rodgers und Connor, 2003).

Für das Verfahren von Rodgers und Connor werden zur Charakterisierung der Messungen von beiden Messinstrumenten folgende Profile und Matrizen benötigt: Das invertierte Profil $\hat{\vec{x}}$ mit der zugehörigen Kovarianzmatrix \mathbf{S}_x , die Auflösungsmatrizen A_{xx} und das a priori-Profil \vec{x}_a sowie \vec{x}_c und die Kovarianzmatrix \mathbf{S}_c des „Vergleichs-Ensembles“. Dieses „Vergleichs-Ensemble“ wird durch eine Verteilung beschrieben, wobei \vec{x}_c der Mittelwert ist.

Die Anwendung auf simulierte Profile von FTIR-Messungen und MIPAS-ENVISAT-Messungen erfolgt in vier Schritten:

1. Im 1. Schritt werden die Werte der beiden Messungen auf ein gemeinsames Höhengitter interpoliert. Dieses Höhengitter kann von einer der beiden Messungen stammen oder ein komplett neues sein. Auch die Kovarianzmatrizen, die ein Maß für die Streuung sind, sowie die Auflösungsmatrizen, die die Höheninformation enthalten, müssen auf diese Höhengitter interpoliert werden.
2. Anschließend folgt der zweite Schritt, bei dem der Übergang auf ein gemeinsames a priori-Profil erfolgt. Die allgemeine Gleichung für das invertierte Profil $\hat{\vec{x}}$ lautet (Rodgers, 2000; Rodgers und Connor, 2003):

$$\hat{\vec{x}} - \vec{x}_a = \mathbf{A}(\vec{x} - \vec{x}_a) + \vec{\epsilon}_x \quad (8.1)$$

3. Im 3. Schritt werden die Differenzen der Profile und der dazugehörigen Kovarianzmatrix der Profildifferenzen bestimmt.
4. Als Test, ob die Ergebnisse zusammenpassen, wird im letzten Schritt ein χ^2 -Test der Differenzen durchgeführt. Werden zwei Fernerkundungsinstrumente verglichen, so ist die χ^2 -Verteilung:

$$\chi^2 = (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^T \mathbf{S}_\Delta^{-1} (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \quad (8.2)$$

Hier sind \vec{x}_1 und \vec{x}_2 die Mischungsprofile der beiden Instrumente als Funktion der Höhe und \mathbf{S}_Δ die berechnete erwartete Kovarianzmatrix.

Dabei ist die Erwartung für die Differenz im Rahmen des Messfehlers Null.

8.4 Vergleich von simulierten FTIR-Profilen mit simulierten MIPAS-ENVISAT-Profilen

Ist der χ^2 -Test nicht erfolgreich, d. h. ist χ^2 größer als die Anzahl der unabhängigen Variablen, also der Anzahl der Freiheitsgrade, verhalten sich die Messgeräte unterschiedlich oder die Koinzidenzen sind nicht perfekt. Die hier gezeigten theoretischen Beispiele sind sehr gut gewählt, da das gleiche Auswerteverfahren und sogar das gleiche a priori-Profil verwendet wurde. Daher sind auch die Ergebnisse des χ^2 -Test in den beiden Unterkapiteln sehr gut.

Der Vergleich dieser verschiedenen Spektren ist im Hinblick auf die Validierung der ENVISAT-Daten von besonderem Interesse, da diese synthetisch erzeugten Satellitenspektren ebenso wie später die real gemessenen Profile von ENVISAT im Vergleich mit den bodengebundenen Messungen ein unterschiedliches Höhengitter mit einer unterschiedlichen Höhengitterbesitzung besitzen.

8.4.1 Szenario 1

Im ersten Test wurden mit dem Strahlungsübertragungsmodell KOPRA 50 synthetische Ozonspektren erzeugt. Dabei wurde nur das Rauschen auf den Spektren jedesmal neu „ausgewürfelt“.

Für den Vergleich wurde wie bei dem Ozonsonden- und Ballonvergleich zunächst eine Vorwärtsrechnung durchgeführt. Diese Berechnungen wurden bei einem mittleren Sonnenwinkel durchgeführt. Es wurde nur Ozon (ohne weitere Störgase) invertiert. Anschließend wurde auf Grundlage dieser synthetischen Spektren eine Inversionsrechnung durchgeführt. Für den Vergleich wurde der Höhenbereich zwischen 12 und 40 km verwendet.

Stimmen die Ergebnisse gut überein, sollte der χ^2 -Test eine Kurve ergeben, die bei etwa 13, also der Anzahl der Freiheitsgrade, ihr Maximum besitzt, wie in Kapitel 4.3.2 auf Seite 21 beschrieben ist. Dies ist der Fall, wie in Abbildung 8.11 zu sehen ist.

8.4.2 Szenario 2

Die 100 synthetischen Profile, die im zweiten Szenario berechnet wurden, wurden genauso erzeugt wie beim ersten Test, nur wurde diesmal bei der Vorwärtsrechnung jedesmal das Startprofil geändert, so dass 100 unterschiedliche Profile berechnet wurden. Die Vorwärtsrechnung und die Inversionsrechnung wurden dann wie gehabt durchgeführt.

Auch bei diesem Szenario sollte der χ^2 -Test eine Kurve ergeben, bei der dieses Mal das Maximum wie in Kapitel 4.3.2 beschrieben ebenfalls bei etwa 13 liegen sollte. Abbildung 8.12 zeigt, dass dies auch in diesem Szenario der Fall ist, der χ^2 -Test also erfolgreich ist und die synthetischen Profile sehr gut zusammen passen, wie es auch zu erwarten war.

8 Vergleiche mit verschiedenen Messungen

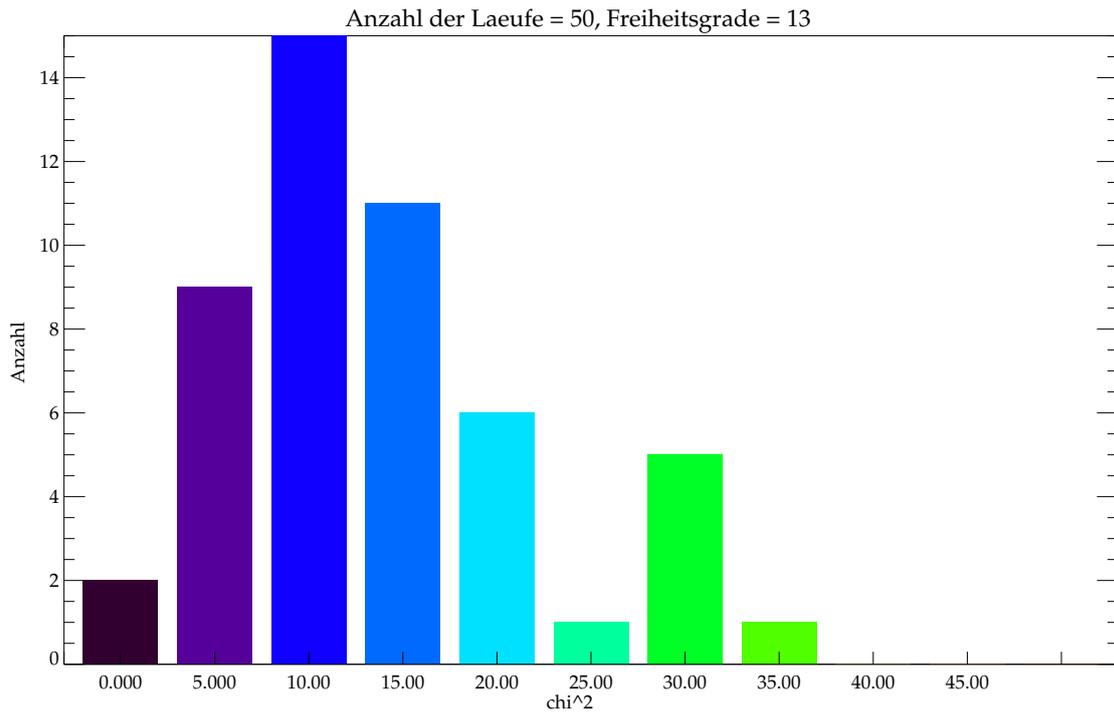


Abb. 8.11: χ^2 -Verteilung des Vergleichs mit 50 synthetischen Spektren (Steck et al., 2002)

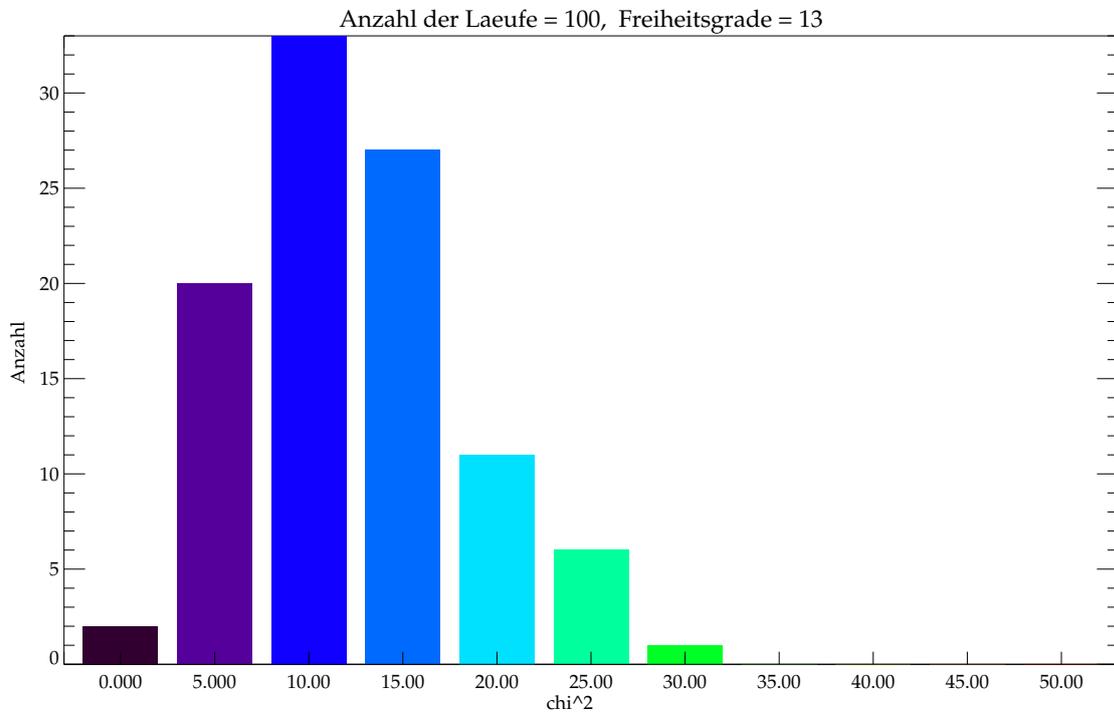


Abb. 8.12: χ^2 -Verteilung des Vergleichs mit 100 synthetischen Spektren (Steck et al., 2002)

9 Vergleiche mit ENVISAT-Daten

9.1 Koinzidenzkriterien

In dieser Arbeit wurden zwei Koinzidenzkriterien berücksichtigt: zeitliche und räumliche Koinzidenz.

Für die zeitliche Koinzidenz wurden sowohl für die Messungen aus Kiruna als auch für diejenigen aus Izaña ENVISAT-Messungen, die jeweils 12 Stunden vor und nach den Messungen am gleichen Tag an den oben genannten Orten durchgeführt wurden, betrachtet.

Als Koinzidenzkriterium für räumliche Übereinstimmung wurde von der ESA ein Gebiet mit einem Radius von 1000 km um den Messort empfohlen. Für die SCIAMACHY-Messungen wurde dieser 1000 km Umkreis aufgrund der Pixelgröße von bis zu 960 km so vorgegeben. Da dies zum Teil ein sehr großer Umkreis ist und damit die gemessenen Luftmassen nicht unbedingt übereinstimmen müssen, sollte für die MIPAS-Messungen ein Umkreis von 500 km um den Messort als Koinzidenzkriterium verwendet werden. Aus den Tabellen B.1 bis B.3 im Anhang ist ersichtlich, dass dies die Anzahl der Koinzidenzen stark verringert.

In den Tabellen B.1 bis B.3 im Anhang sind alle Messtage für Kiruna und für Izaña aufgelistet. Es ist leicht zu erkennen, dass vor allem in Izaña nicht für alle Messtage mögliche Koinzidenzen vorhanden sind. Allgemein gibt es für Kiruna mehr ENVISAT-Daten als für Izaña, da ENVISAT ein polarumlaufender Satellit ist und somit die Überdeckung im Polargebiet besser ist.

Insbesondere für 2002 wurden von der ESA ursprünglich nur sehr wenige Orbits bereitgestellt. Für Kiruna liegen nur an fünf Tagen bzw. sieben Orbits im Jahr 2002 Daten von der ESA vor, für Izaña sogar nur an zwei Tagen bzw. Orbits. Inzwischen wurden die Daten von 2002 reprozessiert, so dass auch hier mehr Koinzidenzen existieren.

	Anzahl Messtage	Anzahl Koinzidenzen in 500 km Umkreis
Kiruna 2002	50	5
Izaña 2002	61	2
Kiruna 2003	48	23
Izaña 2003	65	11

Tabelle 9.1: Anzahl der Messtage und der Koinzidenzen in 500 km Umkreis um die entsprechenden Messorte

9 Vergleiche mit ENVISAT-Daten

Tabelle 9.1 zeigt die Anzahl der Messtage 2002 und 2003 im Verhältnis zur Anzahl der koinzidenten Messungen für Kiruna und Izaña. Dies zeigt, dass in 2003 deutlich mehr Koinzidenzen zur Verfügung stehen. Auch hier wird deutlich, dass besonders für 2002 das Verhältnis sehr schlecht ist.

Wie schon in Kapitel 5 beschrieben, gab es Probleme bei der Datenbereitstellung von Seiten der ESA. Vor allem für das Jahr 2002 gab es nur wenige ENVISAT-Daten. Unter anderem deswegen hat die ESA diese Daten reprozessiert und im März 2004 bzw. April 2004 bereitgestellt. Diese neu prozessierten Daten werden allerdings in dieser Arbeit nicht diskutiert.

9.2 Ergebnisse für MIPAS

In die im Folgenden gezeigten Vergleiche mit den MIPAS-Ergebnissen gingen verschiedene Versionen der prozessierten Daten ein: Bis 13.11.2002 galt Version 4.53. Vom 13.11.2002 bis Mitte März gibt es die Version 4.55 und die MIPAS Daten ab Mitte März bis Ende Juni wurden mit Version 4.57 erstellt. Vergleiche mit den reprozessierten Daten von 2002 mit der Versionsnummer 4.61 werden in dieser Arbeit nicht gezeigt.

9.2.1 Vergleiche mit MIPAS-Säulengehalten

9.2.1.1 O₃

In diesem Kapitel sind die Ozonsäulen in Kiruna und in Izaña dargestellt. Dabei wurden die stratosphärischen Säulengehalte verglichen, da der unterste Tangentialpunkt von MIPAS im Standardmodus in etwa 11 km bis 13 km Höhe lag.

Kiruna

Abbildung 9.1 zeigt alle Ergebnisse von Kiruna, sowohl innerhalb als auch außerhalb des Polarwirbels. Dabei stellen die schwarzen Quadrate die O₃-Säulengehalte der bodengebundenen Messung dar, die roten Kreise die Werte, die von der ESA bestimmt wurden und die grünen und die blauen Dreiecke die Säulengehalte, die aus den auf die Höhenauflösung der bodengebundenen Messung reduzierten Profile berechnet wurden. (Dieses Verfahren wurde in Kapitel 8.1 beim Vergleich mit Messungen von Ozonsonden beschrieben.)

Die grünen Dreiecke zeigen diejenigen Säulengehalte, welche mit dem Druck als Höhenangabe geglättet wurden, die blauen diejenigen, die mit der von der ESA angegebenen Höhe geglättet wurden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Profile der ESA zunächst mit Hilfe der angegebenen Höhe geglättet. Aufgrund einer falschen Berechnung der Höhe von Seiten der ESA entstand jedoch ein Fehler in der Höhenzuordnung, wodurch auch die aus den geglätteten Profilen abgeleiteten Säulengehalte falsch waren. Diese falsche Höhenzuordnung trat schon 2002 auf, wie später im Kapitel 9.2.2 beim Vergleich mit den MIPAS-Profilen gezeigt wird. Der Höhenfehler von 2002 wurde von der ESA am 13.11.2002 korrigiert.

Die Säulengehalte, die aus Profilen abgeleitet wurden, bei denen die von der ESA angegebene Höhe verwendet wurde, wurden für oberhalb von 12,4 km berechnet. Für die aus Profilen mit dem Druck als Höhenangabe abgeleiteten Säulengehalten wurde untersucht, in welcher Höhe dieser Druck in den bodengebundenen Messungen liegt und ab dieser Höhe wurde dann der Säulengehalt berechnet.

In Abbildung 9.1 ist auffällig, dass die Säulengehalte der mit der Höhe geglätteten Profile deutlich von den Original-MIPAS-Säulengehalten abweichen. Die Unterschiede betragen teilweise mehr als 30 %. Außerdem fällt auf, dass diese geglätteten Säulengehalte kleiner sind als die der bodengebundenen Messungen, die der ESA allerdings größer.

Aufgrund dieser großen Unterschiede zwischen den Säulengehalten der geglätteten Profile und den von der ESA berechneten wurden die MIPAS-Profile erneut auf die Höhenauflösung der bodengebundenen Messung reduziert, diesmal mit dem Druck als Verti-

9 Vergleiche mit ENVISAT-Daten

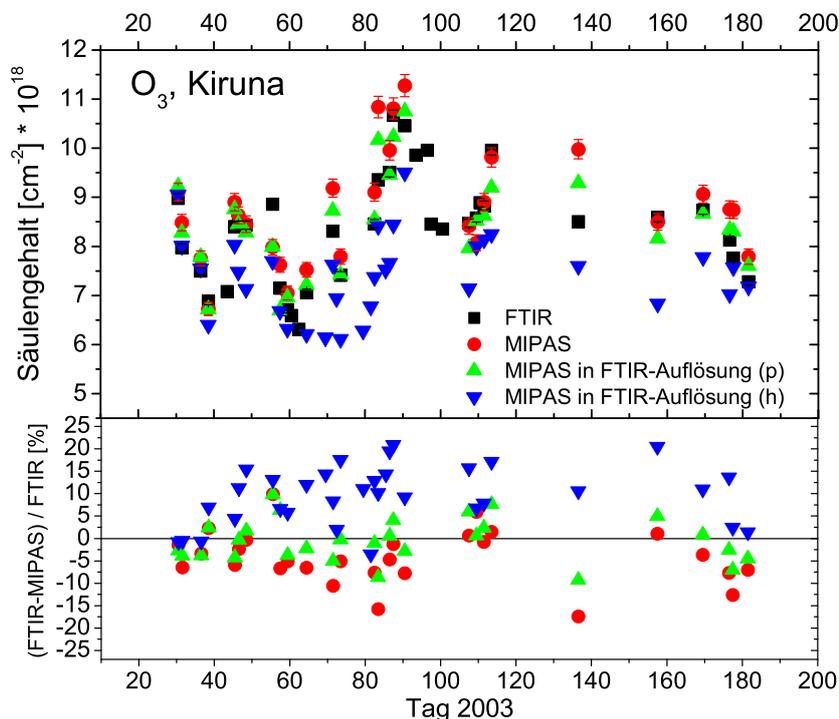


Abb. 9.1: Stratosphärische O₃-Säulengehalte mit 1 σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate), Original-MIPAS (rote Kreise), dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) und dem gegen die Höhe geglätteten MIPAS-Profil (blaue Dreiecke) über Kiruna. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

kalkoordinate. Diese in Abbildung 9.1 als grüne Dreiecke dargestellten Säulengehalte stimmen viel besser mit denen der ESA überein.

Insgesamt schwanken die Unterschiede zwischen den Säulengehalten bis auf wenige Ausnahmen um etwa ± 10 %. Die Abweichungen, die in Tabelle 9.2 aufgelistet sind, betragen für alle Messungen in Kiruna für die Original-MIPAS-Messungen $-5,8\% \pm 8,5\%$ und für Säulengehalte aus den mit dem Druck geglätteten Profilen $-0,5\% \pm 4,8\%$. Im Vergleich dazu sind die Abweichungen für die Säulengehalte aus den Profilen, die mit der Höhe geglättet wurden, $9,6\% \pm 6,5\%$.

Für weitere Vergleiche, z. B. bei der Untersuchung der Unterschiede innerhalb und außerhalb des Polarwirbels, werden die Original-MIPAS-Säulengehalte sowie diejenigen Säulengehalte verwendet, bei denen zur Glättung der Profile der Druck als Höhenkoordinate verwendet wurde.

In Abbildung 9.2 ist die Abhängigkeit der stratosphärischen O₃-Säulengehalte der FTIR- und der MIPAS-Messungen als Funktion des Unterschieds der geographischen Länge abgebildet. Die geographische Breite ist immer fast identisch: Für die südliche Messung beträgt die mittlere geographische Breite (in etwa 20 km Höhe) $65,70^\circ\text{N}$ bis $65,72^\circ\text{N}$.

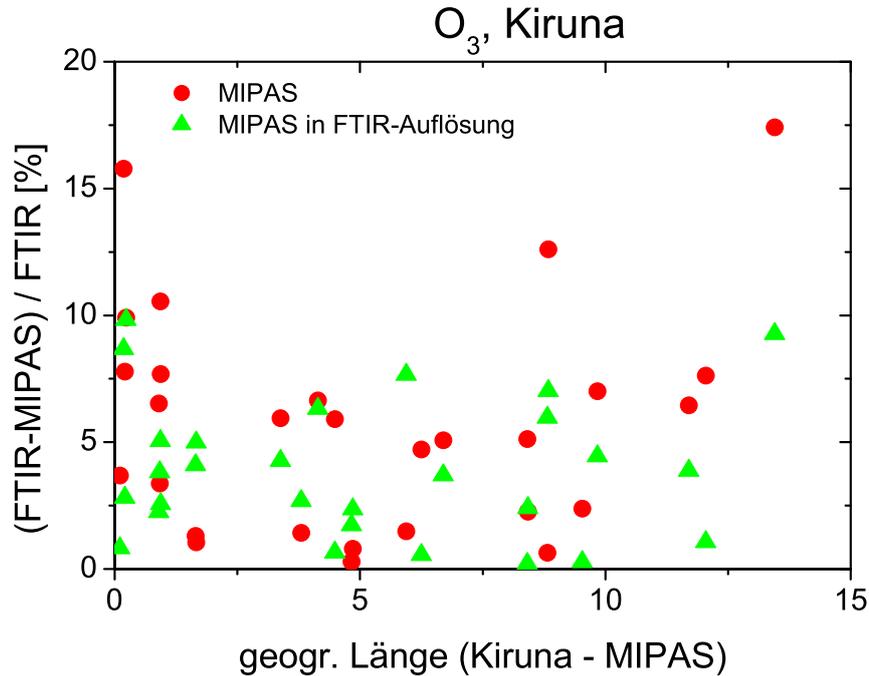


Abb. 9.2: Betrag der Differenzen der stratosphärischen O_3 -Säulengehalte von den Original-MIPAS-Daten (rote Kreise) und den gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profilen (grüne Dreiecke) über Kiruna in Abhängigkeit von der geographischen Länge.

Die nördliche Messung liegt für eine mittlere Höhe zwischen $70,49^\circ N$ und $70,55^\circ N$ (Kiruna liegt bei $67,84^\circ N$ und $20,41^\circ E$). Beim Vergleich der Säulengehalte wurden dabei die südlichen Messungen verwendet, da das FTIR-Spektrometer ebenfalls nach Süden misst.

Abbildung 9.2 zeigt keine große Abweichung in Abhängigkeit des Messortes. Die Abweichungen sind nicht größer, wenn die Messorte der bodengebundenen Messungen und der MIPAS-Messung weit auseinander liegen bzw. sie sind nicht am kleinsten, wenn es praktisch keine räumliche Abweichung gibt. Auffällig ist die große Streuung für die Messungen, die nah an Kiruna lagen

In Abbildung 9.3 ist das Verhältnis der Messungen von der ESA und des bodengebundenen FTIR-Spektrometers dargestellt. Dabei sind die Daten innerhalb des Polarwirbels grün dargestellt, außerhalb rot. Zusätzlich ist die 1:1-Gerade eingezeichnet, auf der idealerweise alle Daten liegen würden. Deutlich erkennbar ist, dass einige Werte zwar auf dieser Geraden liegen, die meisten jedoch unterhalb von ihr, d. h. die FTIR-Werte sind größer als die von MIPAS.

Der am weitesten von dieser Geraden entfernte Punkt ist der 28.03.2003. An diesem Tag lag der Messpunkt von MIPAS nur etwa 245 km von Kiruna entfernt und auch die zeitliche Abweichung betrug nur 50 Minuten, so dass sich wieder, wie in Abbildung 9.2, zeigt, dass keine große Abhängigkeit vom Messort feststellbar ist.

Tabelle 9.2 zeigt zusammengefasst die Mittelwerte und Standardabweichungen der Säulen-

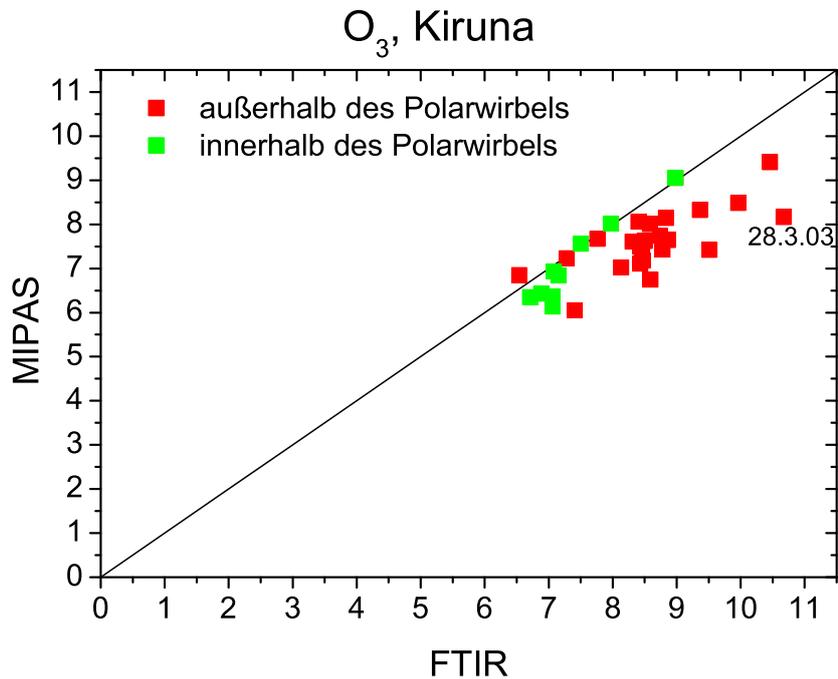


Abb. 9.3: Verhältnis zwischen den stratosphärischen O₃-Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Kiruna innerhalb (grün) und außerhalb (rot) des Polarwirbels.

gehalte der verschiedenen Gase. Dabei bezeichnet Kiruna (g) alle Säulengehalte für Kiruna, Kiruna (i) bzw. Kiruna (a) diejenigen für innerhalb bzw. außerhalb des Polarwirbels. Auffällig sind die großen Unterschiede zwischen den gegen die Höhe und gegen den Druck geglätteten Werte und insgesamt die sehr großen Abweichungen von N₂O und CH₄ zwischen den Original-MIPAS-Messungen und den bodengebundenen FTIR-Messungen.

9.2 Ergebnisse für MIPAS

Ort	Gas	Original MIPAS		MIPAS geglättet (Druck)		MIPAS geglättet (Höhe)	
		Mittelwert	Standard- abweichung	Mittelwert	Standard- abweichung	Mittelwert	Standard- abweichung
Kiruna (g)	O ₃	-5,8	±8,5	-0,5	±4,8	9,6	±6,5
Kiruna (i)		-5,9	±5,8	-2,4	±2,4	6,9	±6,4
Kiruna (a)		-5,8	±9,7	0,2	±5,4	11,0	±6,3
Izaña		-4,4	±6,3	-1,6	±3,8	12,6	±9,1
Kiruna (g)	HNO ₃	-14,9	±27,5	-0,8	±6,1	5,1	±17,5
Kiruna (i)		-22,5	±41,2	-1,0	±6,2	-2,7	±26,1
Kiruna (a)		-11,0	±17,2	-0,7	±6,2	9,0	±9,8
Izaña		-5,5	±18,6	-1,4	±10,0	9,5	±12,0
Kiruna (g)	N ₂ O	-63,6	±40,7	–	–	–	–
Kiruna (g)	CH ₄	-85,7	±44,2	–	–	–	–

Tabelle 9.2: Mittlere Abweichung und Standardabweichung der stratosphärischen FTIR-Säulengehalte im Vergleich mit den MIPAS-Säulengehalten für Kiruna gesamt (g), innerhalb des Polarwirbels (i), außerhalb des Polarwirbels (a) und für Izaña.

Innerhalb des Polarwirbels

Abbildung 9.4 zeigt den Vergleich der Ozon-Säulengehalte aus bodengebundenen Messungen und aus Original-MIPAS-Messungen. Zusätzlich dazu ist der Säulengehalt eingezeichnet, bei dem die Satellitenmessung mit dem Druck auf die vertikale Auflösung der FTIR-Messung reduziert wurde.

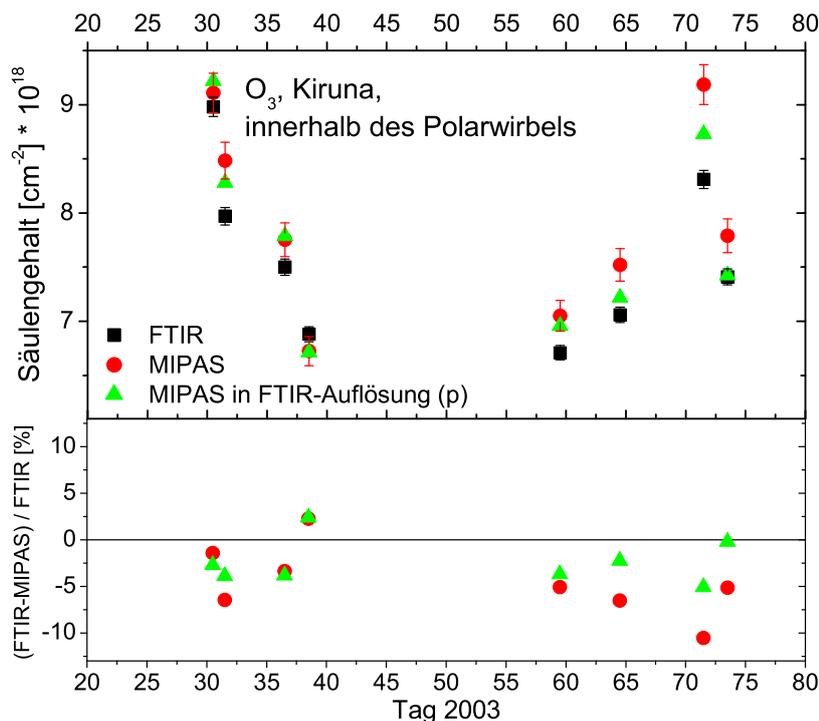


Abb. 9.4: Stratosphärische O_3 -Säulengehalte mit 1σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate), Original-MIPAS (rote Kreise) und dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) über Kiruna innerhalb des Polarwirbels. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

Die Übereinstimmung der Werte ist relativ gut und die Abweichung liegt bei etwa 5 % bis 7 %. Dabei sind die MIPAS-Säulengehalte bis auf eine Ausnahme am 7.2.2003 größer als die der bodengebundenen Messungen.

Dass die Abweichungen gering sind, sieht man auch in Tabelle 9.2: Sie betragen für die Säulengehalte aus dem geglätteten Profil $-2,4 \% \pm 2,4 \%$ und für die ESA-Messungen $-5,9 \% \pm 5,8 \%$.

Auffällig ist, dass die Ergebnisse der ESA-Messungen, die aus Version 4.55 stammen, zu Beginn des Jahres (bis etwa Tag 40, 9. Februar), als die Höhenkorrektur vom 13.11.2002 noch relativ neu war, besser mit den FTIR-Messungen übereinstimmen als die Messungen, die später gemacht wurden. Dies zeigt sich fast noch deutlicher in Abbildung 9.1.

Außerhalb des Polarwirbels

Die stratosphärischen Säulengehalte mit 1σ -Rausch-Fehlerbalken außerhalb des Polarwirbels sind in Abbildung 9.5 dargestellt.

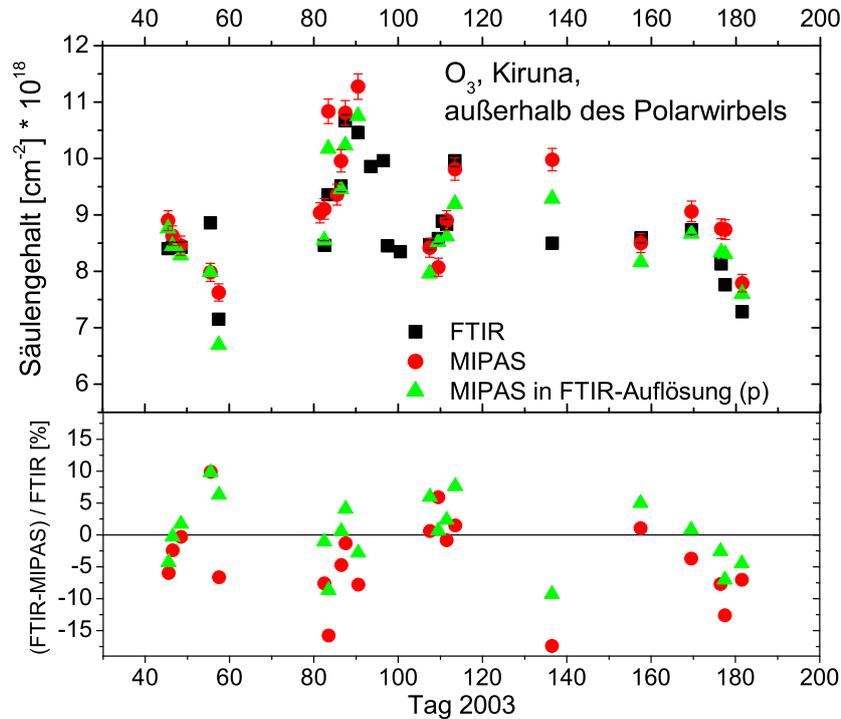


Abb. 9.5: Stratosphärische O_3 -Säulengehalte mit 1σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate), Original-MIPAS (rote Kreise) und dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) über Kiruna außerhalb des Polarwirbels. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

Bei den außerhalb des Polarwirbels gemessenen Säulengehalten aus Kiruna sind die Unterschiede etwas größer als innerhalb des Polarwirbels, was sich vor allem in der größeren Standardabweichung zeigt: Der Mittelwert beträgt hier für die Original-MIPAS-Messungen $-5,8\%$ mit einer Standardabweichung von $\pm 9,7\%$, für die geglätteten Säulengehalte $0,2\% \pm 5,4\%$ (Tabelle 9.2). Der Mittelwert der Abweichungen der Original-MIPAS-Messungen ist etwa gleich groß wie innerhalb des Polarwirbels, allerdings ist außerhalb die Standardabweichung viel größer.

Die in der Höhenauflösung angepassten Säulengehalte und die ESA-MIPAS-Messungen sind zum Teil größer, zum Teil kleiner als die FTIR-Messungen.

Izaña

Abbildung 9.6 zeigt die stratosphärischen Säulengehalte von Ozon von FTIR, MIPAS und MIPAS in FTIR-Auflösung, einmal mit der Höhe geglättet, einmal mit dem Druck, sowie die prozentualen Unterschiede für Izaña.

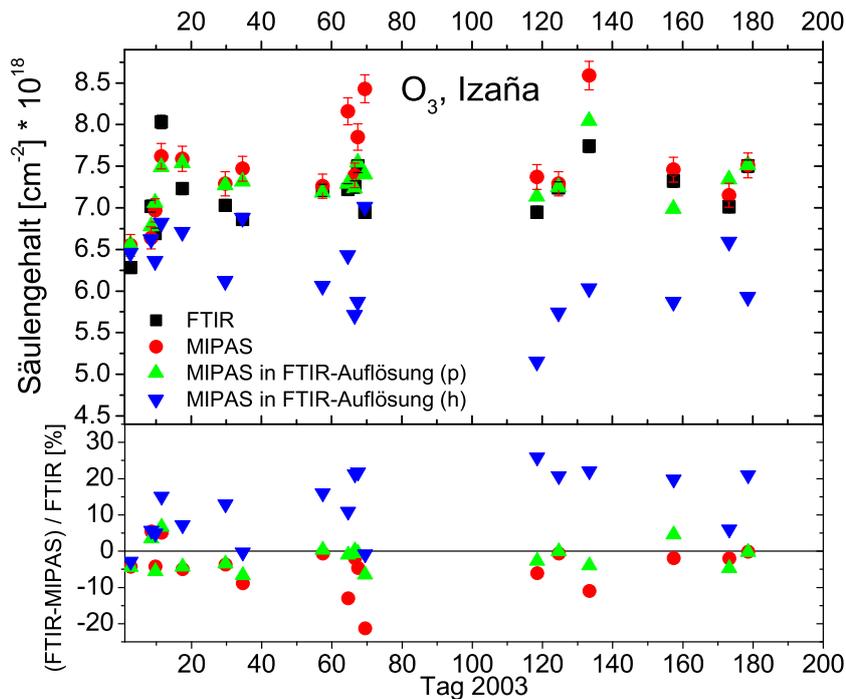


Abb. 9.6: Stratosphärische O₃-Säulengehalte mit 1 σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate), Original-MIPAS (rote Kreise), dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) und dem gegen die Höhe geglätteten MIPAS-Profil (blaue Dreiecke) über Izaña. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

Hier zeigt sich wieder deutlich der Fehler in den Säulengehalten, der durch die falsche Höhenzuordnung zustande kam: Die Unterschiede betragen etwa 30 % bis 40 % zwischen den Original-MIPAS-Säulengehalten und den mit der falschen Höhenzuordnung berechneten.

Die Abweichungen im Säulengehalt der mit dem Druck als Höhenkoordinate geglätteten Profilen liegen im Bereich von etwa ± 5 %, was man auch in Tabelle 9.2 sieht: Die Abweichungen betragen im Mittel für die ESA-Messungen $-4,4$ % \pm 6,3 % bzw. für die an die Höhenauflösung angepassten Säulengehalte $-1,6$ % \pm 3,8 %.

Abbildung 9.7 zeigt die Abweichungen der stratosphärischen O₃-Säulengehalte der FTIR- und der MIPAS-Messungen als Funktion des Unterschieds der geographischen Länge. Auch für Izaña ist die geographische Breite jeweils fast identisch: südliche Messungen werden bei einer mittleren geographischen Breite von 26,78°N bis 26,80°N durchgeführt,

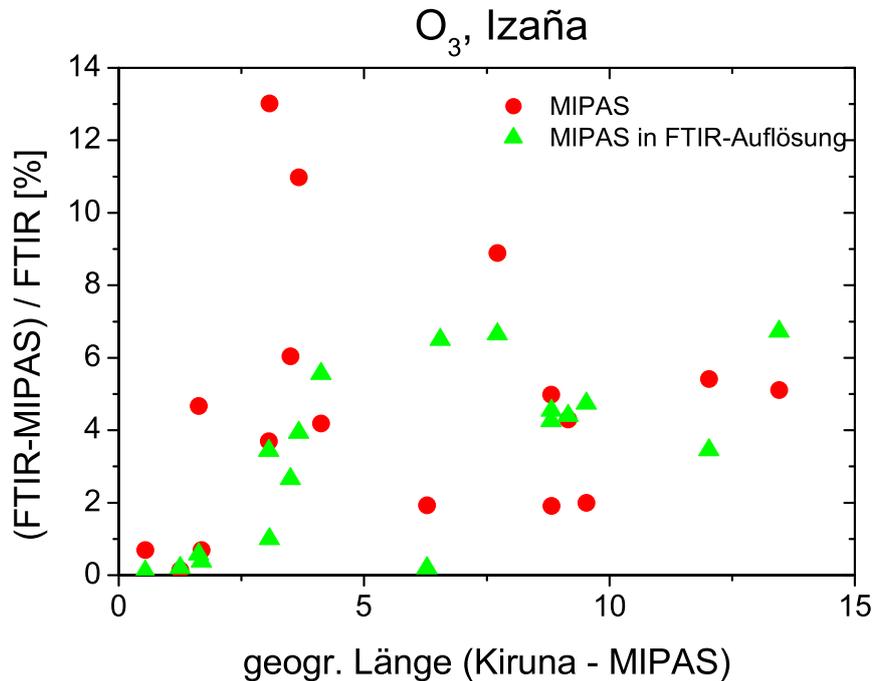


Abb. 9.7: Betrag der Differenzen der stratosphärischen O_3 -Säulengehalte von den Original-MIPAS-Daten (rote Kreise) und den gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profilen (grüne Dreiecke) über Izaña in Abhängigkeit von der geographischen Länge.

nördliche zwischen $31,56^\circ N$ und $31,58^\circ N$ (Izaña liegt bei $28,29^\circ N$ und $16,49^\circ W$). Wie für die Kiruna-Messungen wurden für den Vergleich der Säulengehalte die südlichen ESA-Messungen betrachtet (Tabelle B.3 im Anhang).

Für die Daten aus Izaña scheint die Abhängigkeit vom Messort etwas größer zu sein als für Kiruna. So ist die Abweichung für Messorte, die 1° bis 2° von Izaña entfernt liegen am kleinsten.

In Abbildung 9.8 ist das Verhältnis der Messungen von der ESA und des bodengebundenen FTIR-Spektrometers dargestellt.

Auch hier gibt es viele Abweichungen von der Geraden, auf der idealerweise die Daten liegen würden. Die Abweichungen sind am 4.5.03 am größten. An diesem Tag waren die Messorte nur knapp 175 km voneinander entfernt, aber der Unterschied in der Messzeit betrug 4 Stunden 51 Minuten (siehe Tabelle B.3 im Anhang).

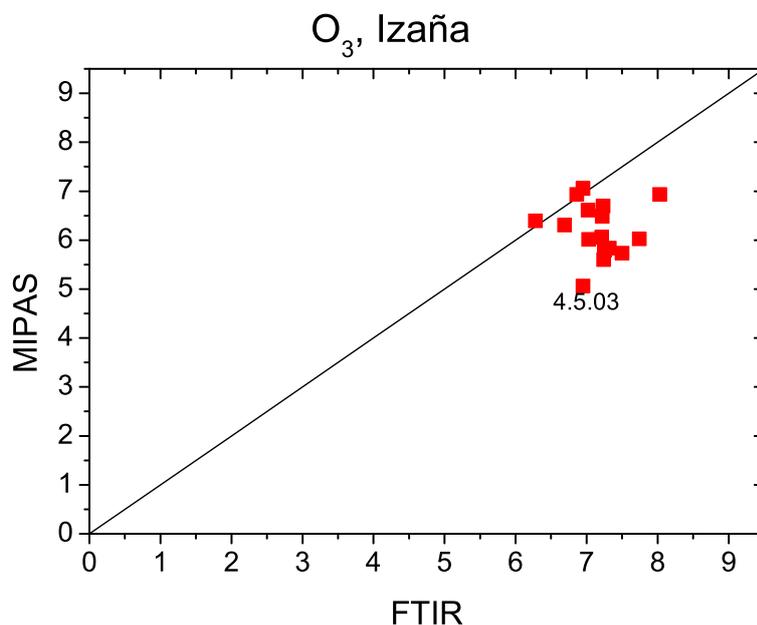


Abb. 9.8: Verhältnis zwischen den stratosphärischen O₃-Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Izaña.

9.2.1.2 HNO₃

Wie in Kapitel 7.2 beschrieben, erfolgt die Inversion der HNO₃-Profile normalerweise auf logarithmischer Skala mit Regularisierung gegen die Nullsteigung. Für den Vergleich mit den ENVISAT-Daten erfolgte die Inversion auf linearer Skala wegen des relativ spitzen Maximums des HNO₃-Profils (siehe Abbildung 7.27 auf Seite 65).

Kiruna

Abbildung 9.9 zeigt die stratosphärischen Säulengehalte von HNO₃.

Für HNO₃ gilt das Gleiche wie für O₃. Beim Vergleich der Säulengehalte, die aus den Profilen abgeleitet wurden, welche mit der Höhe geglättet wurden (blaue Dreiecke), fällt auf, dass diese sehr unterschiedlich zu den Original-MIPAS-Säulengehalten sind. Deshalb sind in Abbildung 9.9 wieder zusätzlich die Säulengehalte eingezeichnet, die mit dem Druck als Höhenkoordinate in der Auflösung reduziert wurden. Diese stimmen wie erwartet wieder besser mit den ESA-Messungen überein, wenn auch nicht ganz so gut wie bei O₃.

Insgesamt sind die Abweichungen für HNO₃ größer als für O₃, was man mit Hilfe von Tabelle 9.2 erkennen kann: Der Mittelwert der Abweichungen liegt für die ESA-Messungen bei $-14,9 \% \pm 27,5 \%$ und bei den Säulengehalten, die aus den mit dem Druck geglätteten Profilen abgeleitet wurden, bei $-0,8 \% \pm 6,1 \%$.

Für die Berechnung der HNO₃-Profile und -Säulengehalte werden bei der Auswertung der FTIR- und der MIPAS-ESA-Messungen die spektroskopischen Daten der HITRAN

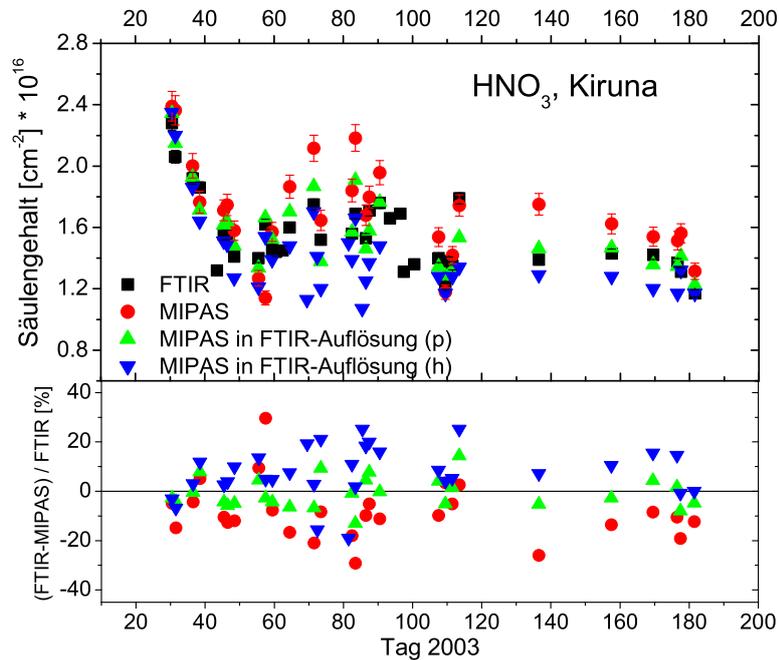


Abb. 9.9: Stratosphärische HNO₃-Säulengehalte mit 1σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate), Original-MIPAS (rote Kreise), dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) und dem gegen die Höhe geglätteten MIPAS-Profil (blaue Dreiecke) über Kiruna. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

2000 Datenbank genutzt. Allerdings wurden die Daten, welche die ESA verwendet, noch skaliert.

Die genauere Diskussion wird anhand der Abbildungen 9.13 und 9.14, unterteilt nach innerhalb und außerhalb des Polarwirbels, durchgeführt.

Die Abhängigkeit der stratosphärischen HNO₃-Säulengehalte der FTIR- und der MIPAS-Messungen von der geographischen Länge ist in Abbildung 9.10 dargestellt. Wie für die O₃-Säulengehalte ist keine deutliche Abhängigkeit vom Messort erkennbar.

In Abbildung 9.11 ist das Verhältnis der Messungen von der ESA und des bodengebundenen FTIR-Spektrometers dargestellt. Hier stimmen die Werte mit der Geraden, auf der idealerweise alle Daten liegen würden, besser überein als für O₃. Wieder ist der Wert für den 28.3.03, bei dem der Messpunkt von MIPAS nur etwa 245 km von Kiruna entfernt war und es auch nur ein geringer Zeitunterschied von 50 Minuten gab, am weitesten von dieser Geraden entfernt, wie schon für O₃. Zur Untersuchung, ob die Unterschiede an diesem Tag durch noch vorhandene Reste des Polarwirbels kommen können, wurde die potentielle Wirbelstärke auf dem 475 K-Niveau (etwa 20 km) über Kiruna am 28.3.03 betrachtet (Abbildung 9.12). Man kann erkennen, dass kein Gradient vorhanden ist und dass sowohl Kiruna als auch der MIPAS-Messort mit Werten zwischen 20 und 25 * 10⁻⁶ Km²/kgs nicht innerhalb des Polarwirbels lagen.

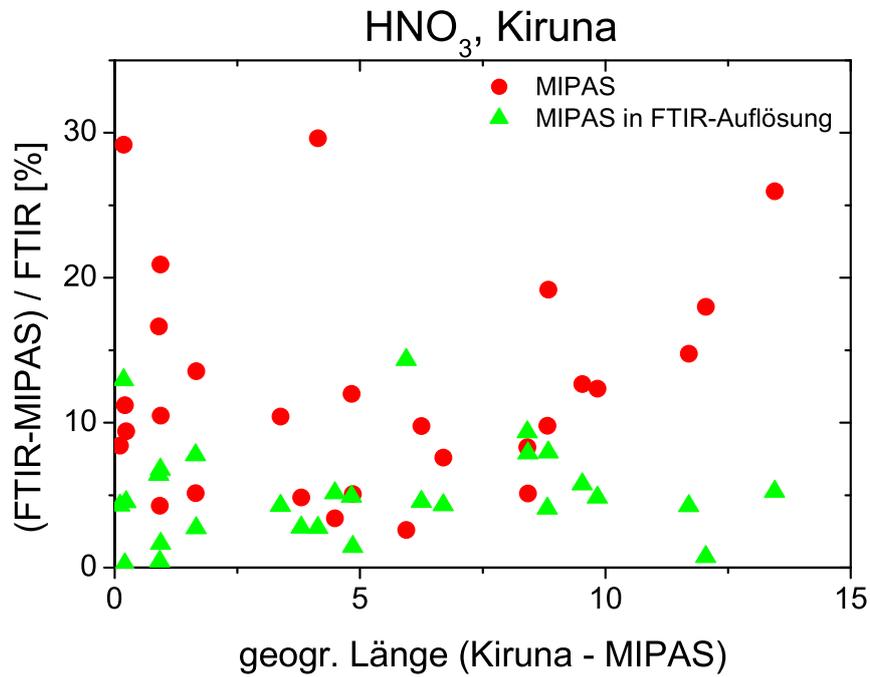


Abb. 9.10: Betrag der Differenzen der stratosphärischen HNO_3 -Säulengehalte von den Original-MIPAS-Daten (rote Kreise) und den gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profilen (grüne Dreiecke) über Kiruna in Abhängigkeit von der geographischen Länge.

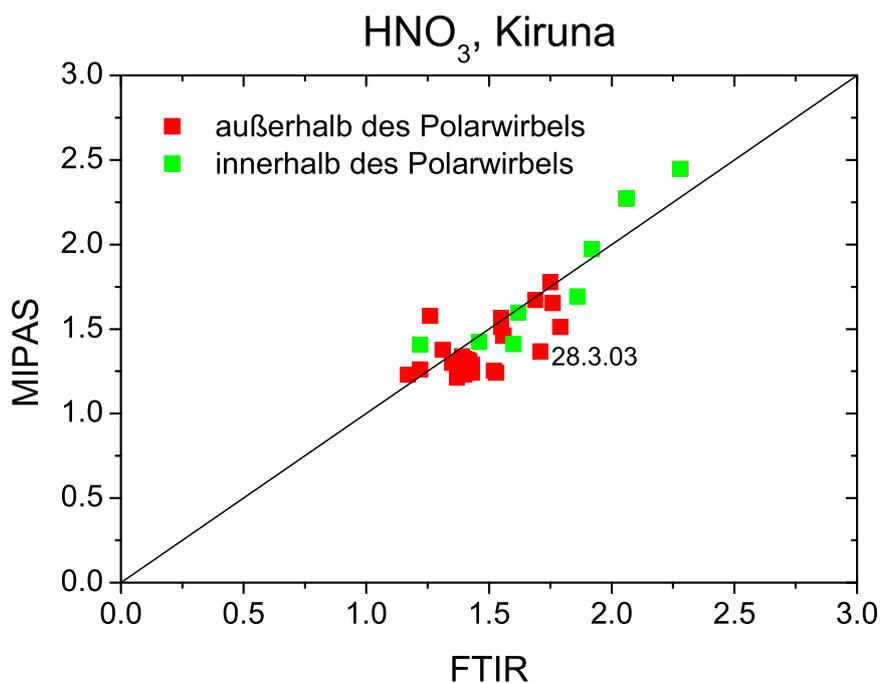


Abb. 9.11: Verhältnis zwischen den HNO_3 -Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Kiruna innerhalb (grün) und außerhalb (rot) des Polarwirbels.

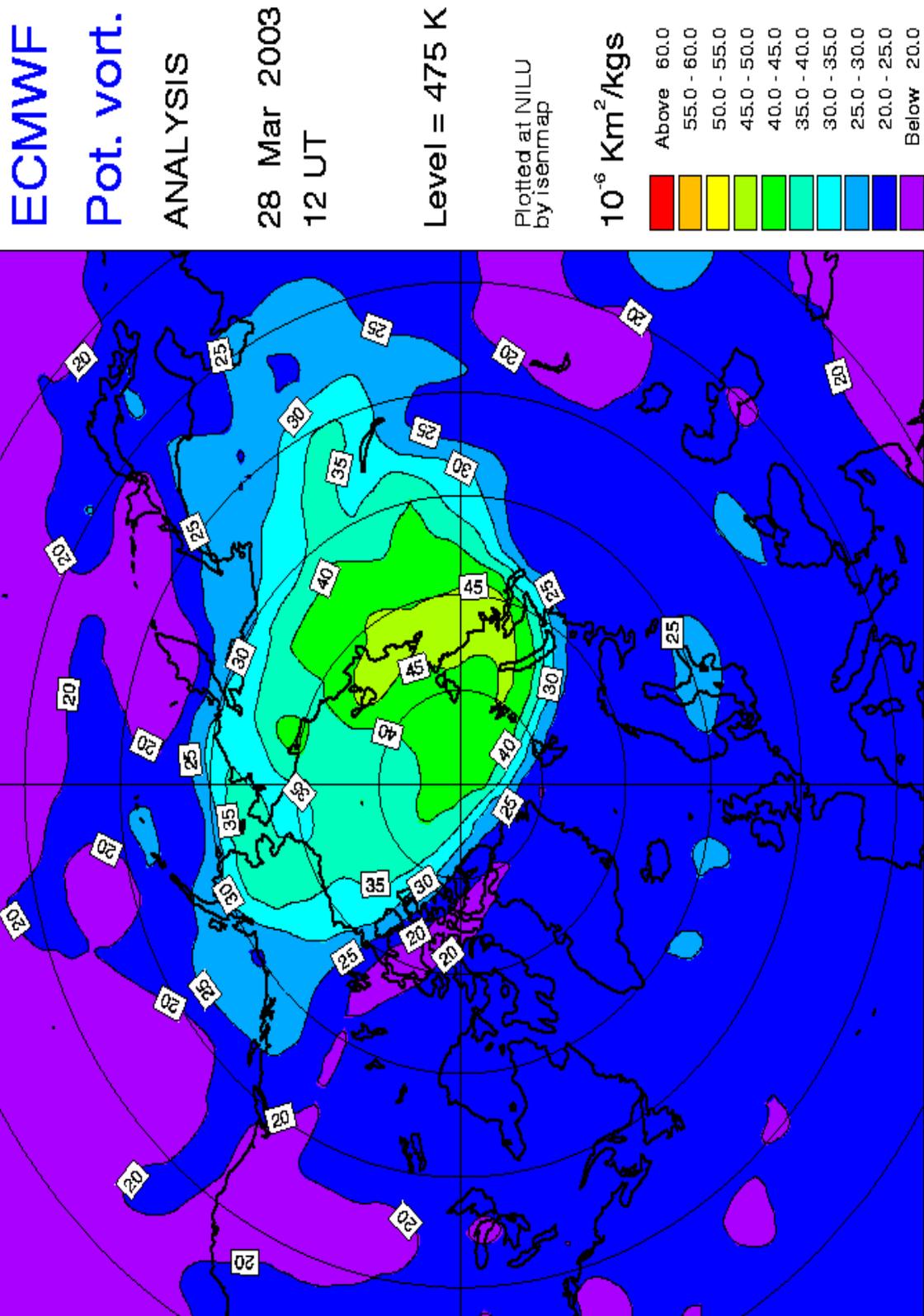


Abb. 9.12: IPV über Kiruna am 28.3.03

Innerhalb des Polarwirbels

Abbildung 9.13 zeigt die Säulengehalte von HNO_3 innerhalb des Polarwirbels.

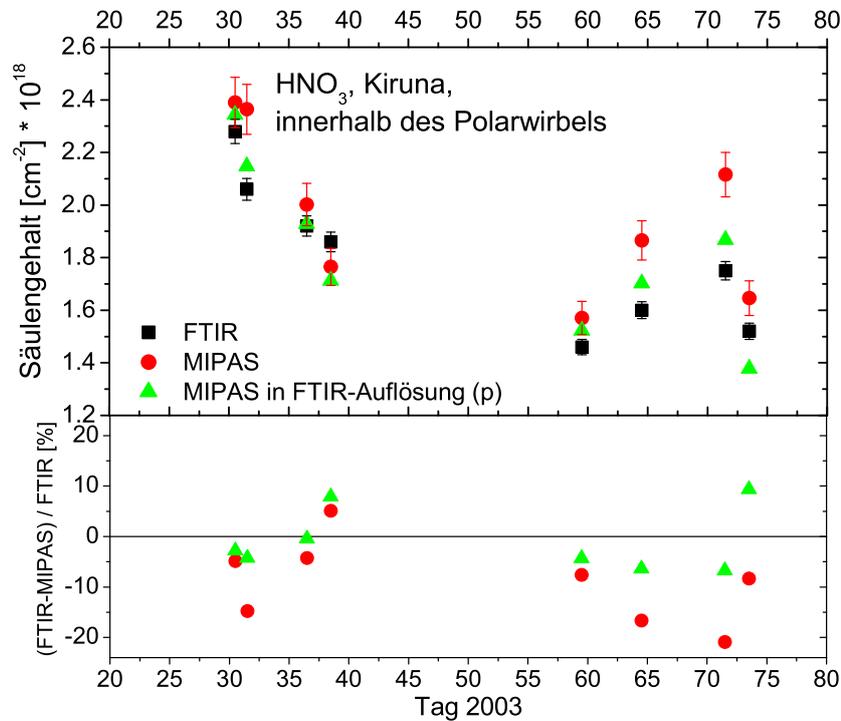


Abb. 9.13: Stratosphärische HNO_3 -Säulengehalte mit 1σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate Original-MIPAS (rote Kreise) und dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) über Kiruna innerhalb des Polarwirbels. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

Die HNO_3 -Säulengehalte stimmen vor allem für Ende Januar und Anfang Februar gut überein. Später werden die Abweichungen größer. Dies zeigt sich auch in den Mittelwerten und der Standardabweichung in Tabelle 9.2. Der Mittelwert der Abweichungen liegt für die ESA-Messungen bei $-22,5\% \pm 41,2\%$ und bei den in der Höhenauflösung angepassten Säulengehalten bei $-1,0\% \pm 6,2\%$.

Auffällig ist jedoch, wie gut die Säulengehalte der mit dem Druck als Höhenkoordinate geglätteten Profile mit denen der ESA übereinstimmen. Für diese Säulengehalte ist der Unterschied zu den FTIR-Messungen viel kleiner als für die von der ESA bereitgestellten Säulengehalten.

Außerhalb des Polarwirbels

Außerhalb des Wirbels sind die Unterschiede in den HNO_3 -Säulengehalten etwa gleich groß wie innerhalb, wie Abbildung 9.14 zeigt.

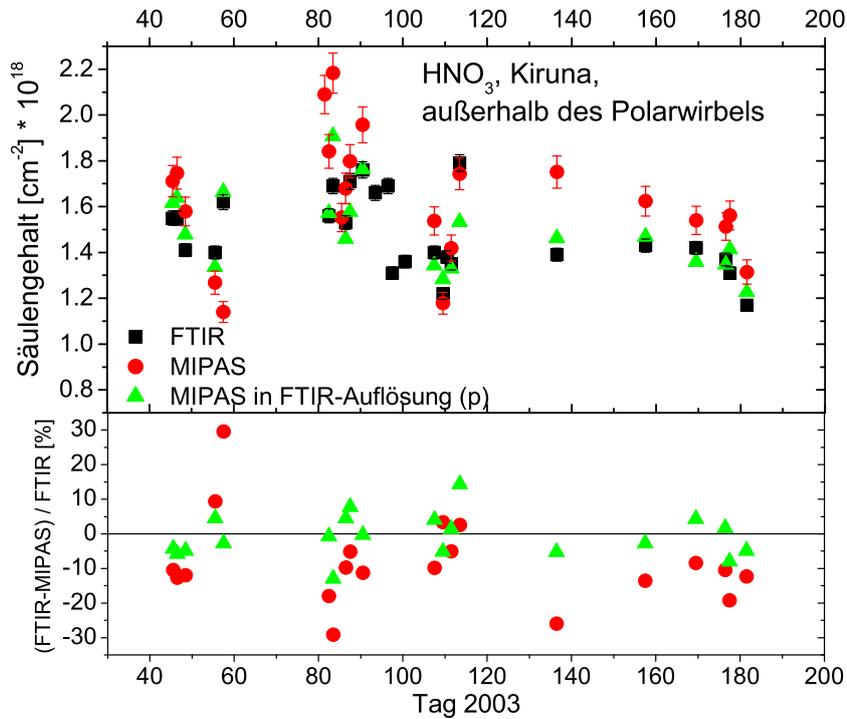


Abb. 9.14: Stratosphärische HNO_3 -Säulengehalte mit 1σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate), Original-MIPAS (rote Kreise) und dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) über Kiruna außerhalb des Polarwirbels. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

Dass die Differenzen kleiner sind, zeigt sich auch bei der mittleren Abweichung, die laut Tabelle 9.2 für die MIPAS-Werte bei $-11,0 \% \pm 17,2 \%$ und für die geglätteten Säulengehalte bei $-0,7 \% \pm 6,2 \%$ liegt.

Izaña

Für Izaña sind die Ergebnisse ähnlich wie für Kiruna, wie Abbildung 9.15 zeigt.

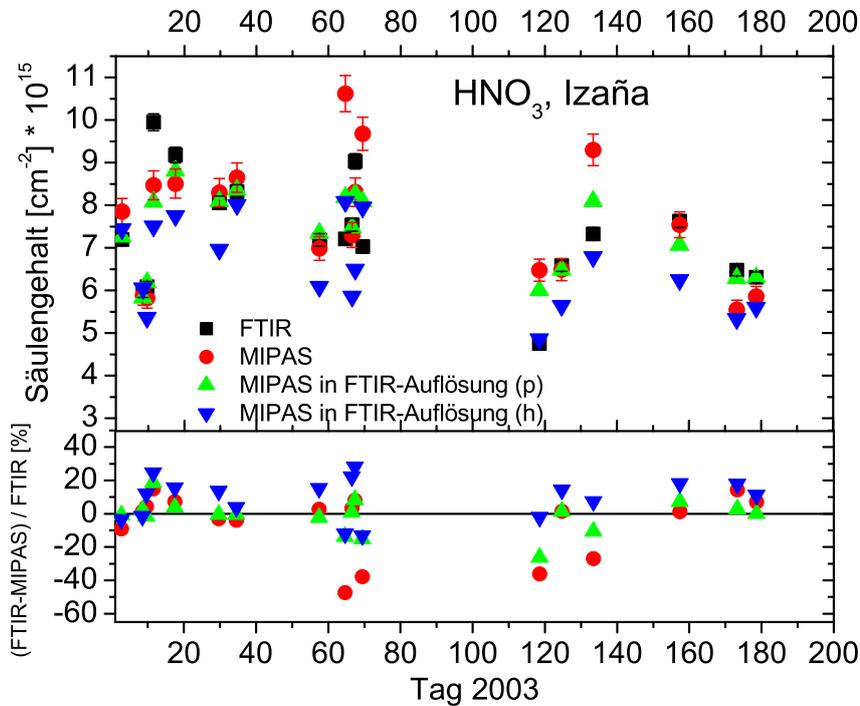


Abb. 9.15: Stratosphärische HNO₃-Säulengehalte mit 1 σ -Rausch-Fehlerbalken von FTIR (schwarze Quadrate), Original-MIPAS (rote Kreise), dem gegen den Druck geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) und dem gegen die Höhe geglätteten MIPAS-Profil (blaue Dreiecke) über Izaña. Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen in % dargestellt.

Die FTIR-Messungen haben wie in Kiruna größere Werte als die MIPAS-Messungen, wobei die Streuung für HNO₃ größer ist als für O₃. Die Abweichungen betragen im Mittel -5,5 % \pm 18,6 % für die Original-MIPAS-Daten und -1,4 % \pm 10,0 % für die geglätteten Daten (Tabelle 9.2).

Abbildung 9.16 zeigt die Abweichungen der stratosphärischen HNO₃-Säulengehalte der FTIR- und der MIPAS-Messungen als Funktion des Unterschieds der geographischen Länge. Wie für die O₃-Säulengehalte ist nur eine kleine Abhängigkeit vom Messort zu erkennen. Die Abweichungen sind für die Daten, die etwa 1° von Izaña entfernt sind am kleinsten.

In Abbildung 9.17 ist das Verhältnis der Messungen von der ESA und des bodengebundenen FTIR-Spektrometers dargestellt. Wieder gibt es Abweichungen zu der Geraden. Die größte Abweichung gibt es wie schon bei O₃ am 4.5.03, mit einer zeitlichen Abweichung von knapp 5 Stunden und einer räumlichen Differenz von etwa 175 km.

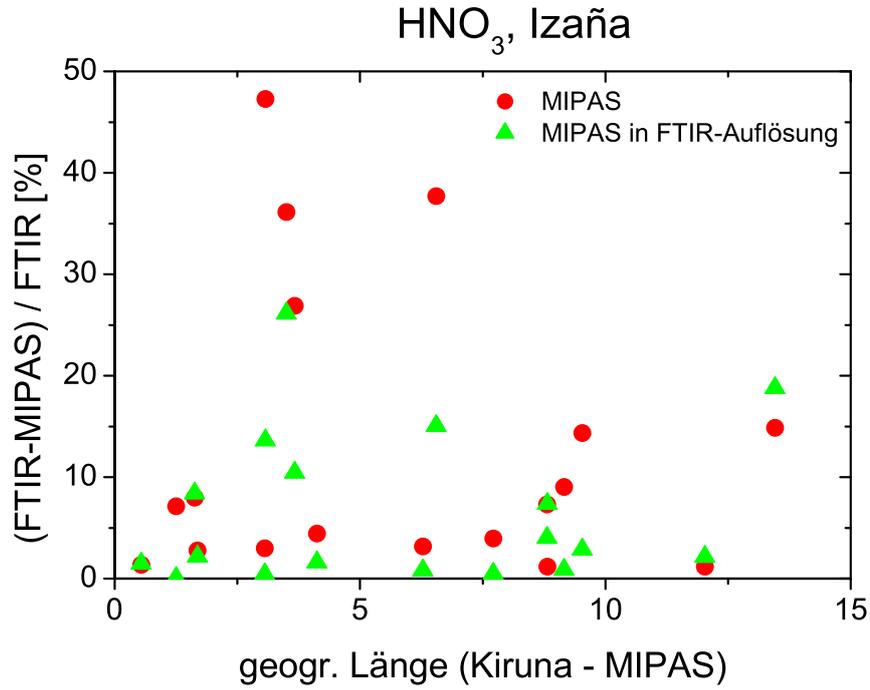


Abb. 9.16: Betrag der Differenzen der stratosphärischen HNO_3 -Säulengehalte von dem geglätteten MIPAS-Profil (grüne Dreiecke) und aus dem MIPAS-Profil (blaue Vierecke) über Izaña in Abhängigkeit von der geographischen Länge.

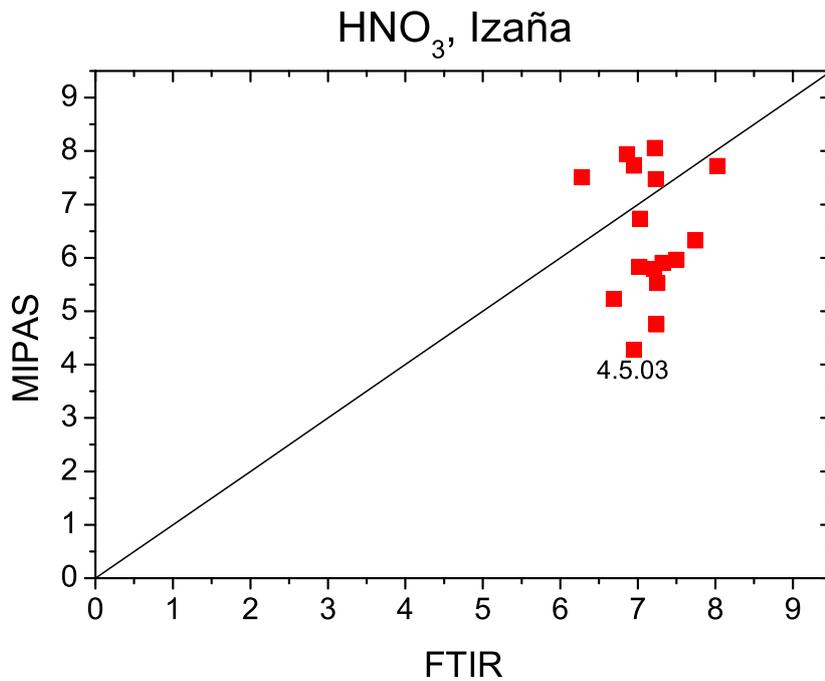


Abb. 9.17: Verhältnis zwischen den HNO_3 -Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Izaña.

9.2.1.3 N₂O und CH₄

Kiruna

Abbildung 9.18 zeigt die stratosphärischen N₂O-Säulengehalte über Kiruna, Abbildung 9.19 die stratosphärischen CH₄-Säulengehalte.

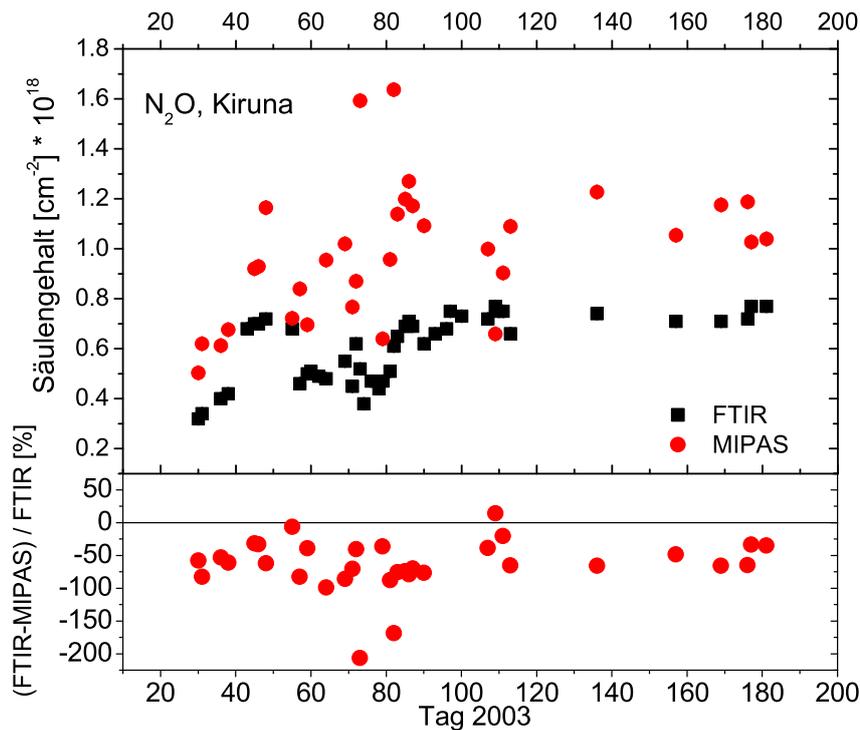


Abb. 9.18: Stratosphärische N₂O-Säulengehalte mit 1 σ -Rausch-Fehlerbalken oberhalb von 12,4 km Höhe von FTIR (schwarze Quadrate) und MIPAS (rote Kreise) über Kiruna.

Bei N₂O und CH₄ wurden die Profile von MIPAS nicht geglättet, da, wie in Kapitel 9.2.2 beschrieben, die Abweichungen der Profile zu deutlich sind.

Tabelle 9.2 zeigt die mittleren Abweichungen und die Standardabweichung für jedes Gas. Hier zeigt sich deutlich, dass die Abweichungen für N₂O und CH₄ mit -63,6 % \pm 40,7 % bzw. -85,7 % \pm 44,2 % sehr groß sind.

Insgesamt muss man zu N₂O und CH₄ jedoch sagen, dass MIPAS 90 % des Säulengehalts gar nicht sehen kann, da N₂O und CH₄ troposphärische Gase sind. Aus diesem Grund ist für diese beiden Gase auch der gemeinsame empfindliche Höhenbereich zu klein, so dass ein Vergleich wenig Sinn macht.

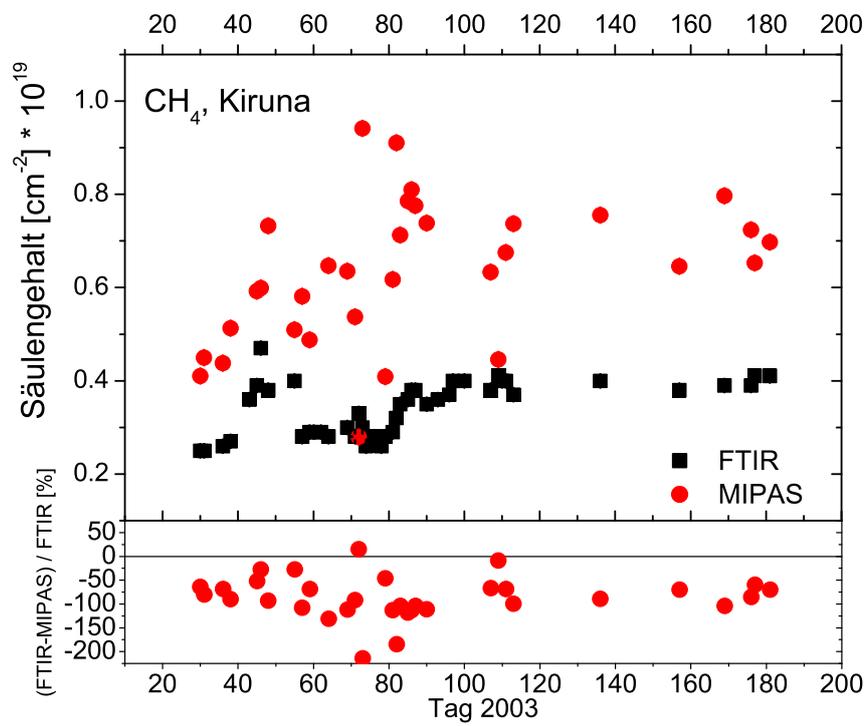


Abb. 9.19: Stratosphärische CH₄-Säulengehalte mit 1σ -Rausch-Fehlerbalken oberhalb von 12,4 km Höhe von FTIR (schwarze Quadrate) und MIPAS (rote Kreise) über Kiruna.

9.2.2 Vergleiche mit MIPAS-Profilen

9.2.2.1 O₃

Kiruna

2002

Zunächst wird ein Vergleich mit Daten aus dem Jahr 2002 vorgestellt. Für diesen Zeitraum liegen zwei Datenauswertungen der MIPAS-Daten vor, die von unterschiedlichen Prozessoren stammen: dem Prozessor der ESA und ein Prozessor, der am IMK entwickelt und betrieben wird (Nett et al., 1999; Ridolfi et al., 2000, 2001; Clarmann et al., 2003a,b,c,f).

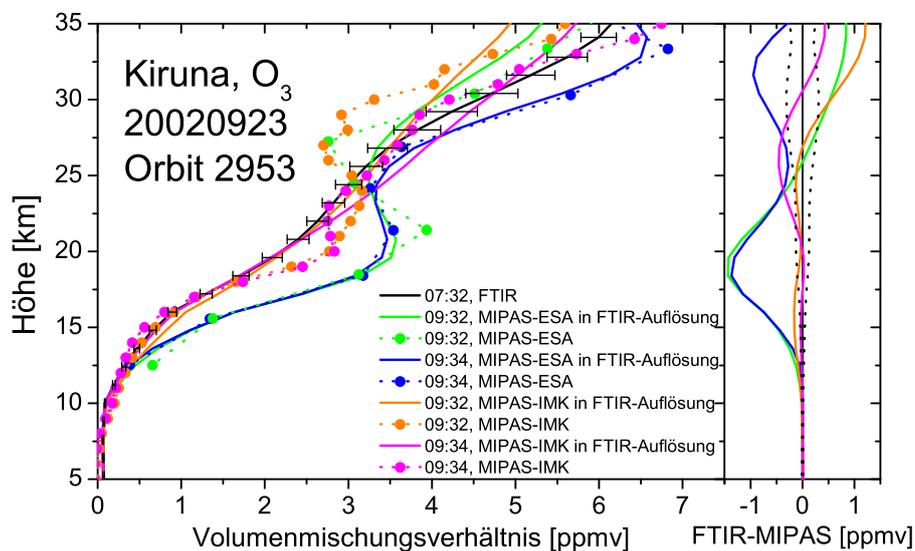


Abb. 9.20: Beispiel eines O₃-Vergleichs mit von der ESA und vom IMK prozessierten Daten von MIPAS vom 23.9.02

Abbildung 9.20 zeigt ein Beispiel für ein O₃-Profil vom 23.9.02. Die schwarze Kurve zeigt die bodengebundene Messung. Die grüne und die blaue durchgezogene Linie stellt die an die FTIR-Auflösung angepassten MIPAS-ESA-Messungen zu unterschiedlichen Zeiten sowie an unterschiedlichen Messorten dar. Die dazugehörigen gepunkteten grünen und blauen Kurven sind die Original-MIPAS-Messungen, die von der ESA ausgewertet wurden. In orange und pink sind die vom IMK ausgewerteten Profile der gleichen Orbits dargestellt, gepunktet ist die Original-Auswertung, die durchgezogene Linie zeigt die in der Auflösung angepasste Inversion. Die blaue und die pinkfarbene Kurve wurde südlich von Kiruna gemessen, die grüne bzw. die orangefarbene nördlich.

Auf der rechten Seite ist die Abweichung zwischen den bodengebundenen und den MIPAS-Profilen dargestellt. Die Farben sind jeweils die gleichen wie auf der linken Seite der Abbildung. Zusätzlich ist noch der 1 σ -Rauschfehler von der FTIR-Messung als gepunktete Linie eingezeichnet.

An diesem Beispiel erkennt man, dass bei den ESA-Profilen die Höhe falsch berechnet wurde: Es ist bemerkenswert, dass trotz der geringen Höhenauflösung des Fourier-Spektrometers eine Verschiebung in der Höhe von etwa 1,5 km zu erkennen ist. Diese Höhenverschiebung wurde nicht nur in den FTIR-Messungen, sondern auch von anderen bodengebundenen Messungen (Ozonsonden, LIDAR, Mikrowellenradiometer) erkannt (Blumenstock et al., 2003a; Clarmann et al., 2003f). Die ESA korrigierte diesen Fehler ab dem 13.11.2002, d. h. alle Profile vor dem 13.11.2002 haben diesen Höhenfehler. Dies ist u. a. ein Grund, warum die Daten von 2002 von der ESA reprozessiert wurden. Aber auch nach dem 13.11.2002 trat, wie schon im vorigen Kapitel beschrieben, eine Höhenverschiebung auf, die durch den Vergleich mit den FTIR-Messungen beobachtet werden konnte. Somit wurde für jeden Tag, an dem eine Koinzidenz mit MIPAS vorlag, ein Vertikalprofil der ESA-Messung in der Höhenauflösung reduziert, wobei diesmal der Druck als Höhenkoordinate verwendet wurde.

Es ist in dieser Abbildung aber auch ersichtlich, dass die vom IMK berechneten Profile in den orangefarbenen und pinkfarbenen Kurven bis zu einer Höhe von 20 km bis 25 km mit denen der bodengebundenen Messung etwa innerhalb der Fehlerbalken übereinstimmen. Oberhalb von 30 km werden die Abweichungen größer. Vor allem für die nördliche Messung (orangefarbene Kurve) ist die Abweichung mit mehr als 1 ppmv besonders groß.

Für einen Vergleich ohne diesen Höhenfehler wurden die ESA-Profile in Abbildung 9.21 gegen den Druck aufgetragen. Es ist erkennbar, dass die Übereinstimmung in diesem Fall deutlich besser ist. Doch auch in diesem Fall stimmen die am IMK prozessierten Profile besser mit den FTIR-Profilen überein als die von der ESA prozessierten.

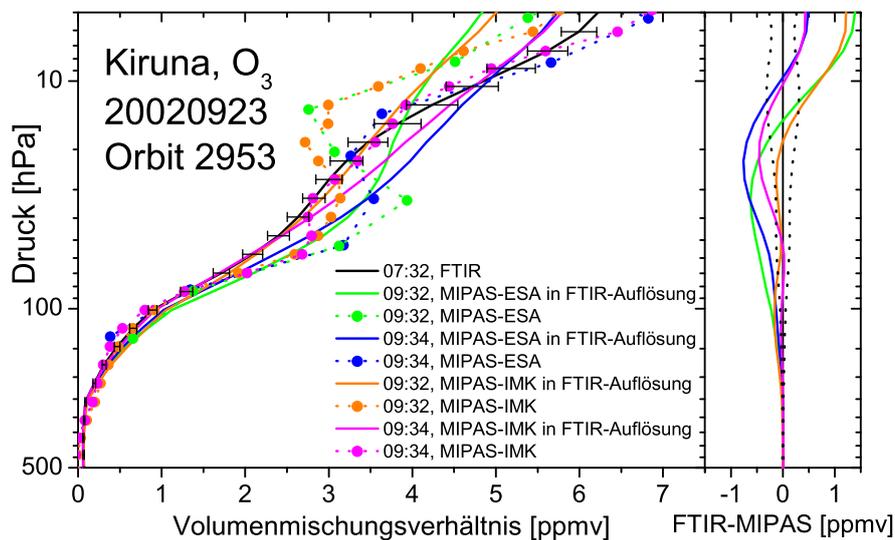


Abb. 9.21: Beispiel eines O₃-Vergleichs mit von der ESA und vom IMK prozessierten Daten von MIPAS vom 23.9.02 gegen den Druck aufgetragen

2003

Für 2003 liegen nur Profile vor, die vom ESA-Prozessor ausgewertet wurden.

Innerhalb des Polarwirbels

Abbildung 9.22 zeigt ein typisches O₃-Profil von Kiruna innerhalb des Polarwirbels vom 5.2.2003.

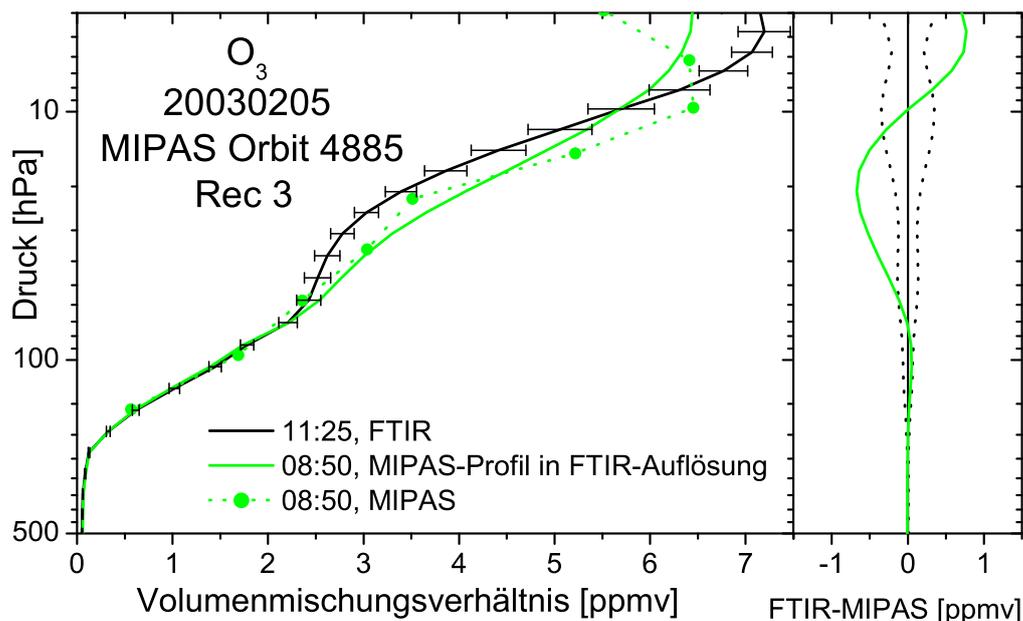


Abb. 9.22: Beispiel eines O₃-Vergleichs innerhalb des Wirbels für Kiruna vom 5.2.2003, Orbit 4885

Die schwarze durchgezogene Kurve stellt die bodengebundene Messung des FTIR-Spektrometers dar. Die grüne gepunktete Kurve stammt von der Original-MIPAS-Messung. Sie wurde um 8:50 Uhr südlich von Kiruna gemessen (65,72°N). Das dazugehörige, an die FTIR-Höhenauflösung angepasste Profil ist in der grünen durchgezogenen Kurve dargestellt. Auf der rechten Seite der Abbildung ist die Abweichung des geglätteten Profils zu der FTIR-Messung dargestellt. Zusätzlich ist der 1 σ -Rauschfehler der FTIR-Messung als gepunktete Linien eingetragen. Bei diesem Beispiel stimmen die Profile bis in etwa 70 hPa (etwa 17 km Höhe) recht gut überein, zwischen etwa 70 hPa und 10 hPa (etwa 17 km bis 29 km Höhe) sind die Mischungsverhältnisse der MIPAS-Messungen zu hoch, darüber sind sie zu klein.

Abbildung 9.23 zeigt die potentielle Wirbelstärke auf dem 475 K-Niveau (etwa 20 km) über Kiruna am 5.2.03. Sowohl über Kiruna (67,84°N, 20,41°E), das als blaues Kreuz dargestellt ist, als auch der Punkt, an dem MIPAS gemessen hat (rotes Kreuz, 65,72°N, 21,33°E) liegen bei Werten zwischen 45 und 50 * 10⁻⁶ Km²/kgs, also deutlich innerhalb des Polarwirbels. Der räumliche Abstand beträgt 239 km, der zeitliche Unterschied 2 Stunden 35 Minuten.

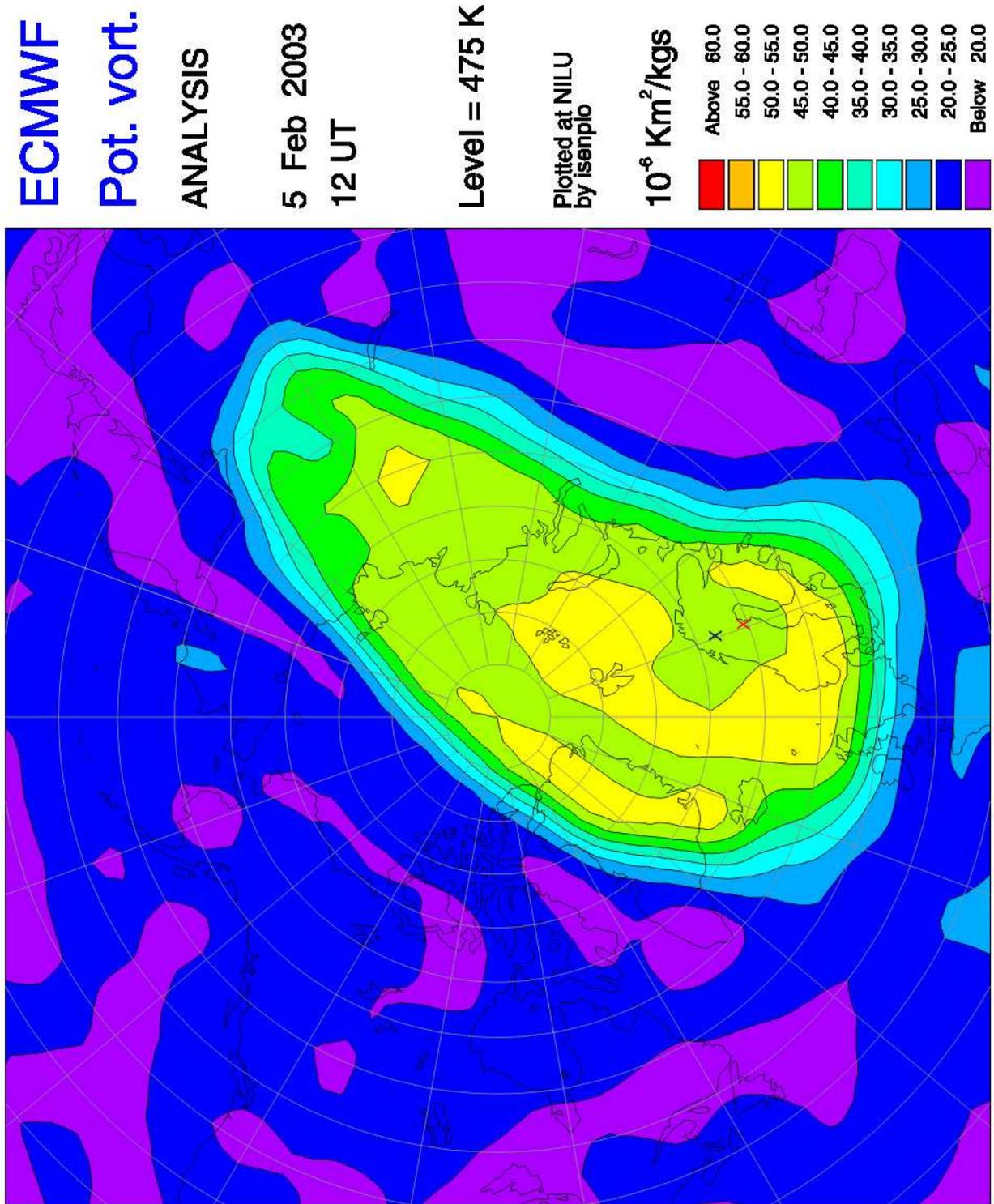


Abb. 9.23: IPV über Kiruna am 5.2.03

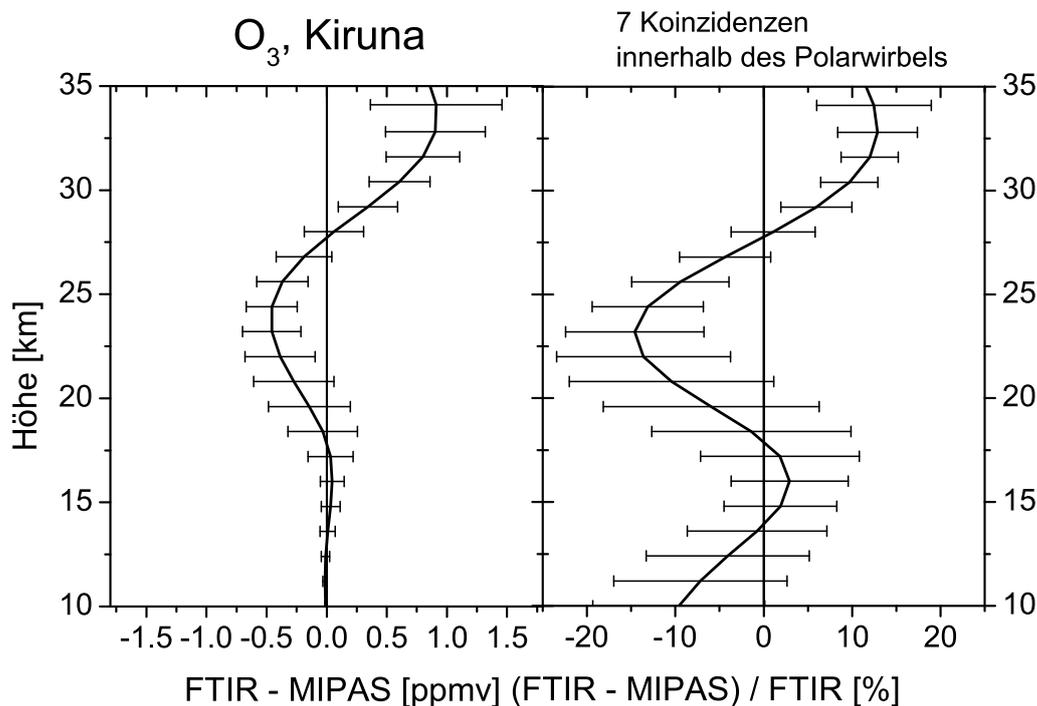


Abb. 9.24: Mittlere Abweichung und Standardabweichung des O_3 -Mischungsverhältnisses zwischen MIPAS-ENVISAT und bodengebundener FTIR-Messung in Kiruna innerhalb des Polarwirbels in ppmv und in Prozent.

Innerhalb des Polarwirbels liegen für Kiruna im Jahr 2003 7 Koinzidenzen mit MIPAS-Messungen vor. Die Abweichungen der Messungen sind in Abbildung 9.24 als Funktion des Volumenmischungsverhältnisses auf der linken Seite und rechts in Prozent dargestellt. Dabei ist die durchgezogene Linie der Mittelwert der Abweichungen und die Fehlerbalken stellen die Standardabweichung dar. Es sieht so aus, als würde das Profil schwingen, wobei die Schwingung von unten nach oben stärker wird. Bis etwa 20 km Höhe stimmen die Profile recht gut überein. Oberhalb davon werden die Abweichung größer und steigen auf etwa 12 % bzw. 1 ppmv in etwa 33 km Höhe, wobei das FTIR-Profil höhere Werte hat als das MIPAS-ESA-Profil.

In Abbildung 9.24 ist die Statistik als Funktion der Höhe aufgetragen. Die Profile, mit denen diese Statistik gemacht wurde, sind aber alle mit dem Druck als Höhenkoordinate geglättet worden.

Da in dem Höhenbereich oberhalb von 30 km die Auflösung des FTIR-Spektrometers relativ schlecht ist, könnte man meinen, dass MIPAS das genauere Ergebnis liefert. Ein Vergleich mit dem Millimeterwellenradiometer in Kapitel 8.3 zeigt jedoch, dass dessen Messungen mit denen des FTIR-Spektrometers gerade in diesem Bereich, in dem das Mikrowellenradiometer sehr sensitiv ist, sehr gut übereinstimmen (Abbildung 8.10, Seite 77).

Bei Studien mit dem IMK-Prozessor, bei der nicht die von der ESA bestimmte instru-

mentelle Linienform von MIPAS-ENVISAT verwendet wurde, wurde festgestellt, dass das Maximum der O_3 -Profile etwa 0,25 ppmv bis 0,5 ppmv größer wird, wenn eine bessere Beschreibung der instrumentellen Linienform verwendet wird (Milz, 2004). Berücksichtigt man dies, verbessert sich das Ergebnis in Abbildung 9.24 in etwa 30 km Höhe deutlich. Das heißt, die fehlerhafte Berechnung der instrumentellen Linienform ist für einen Teil des Fehlers verantwortlich. Zusätzlich wurde bei diesen Studien festgestellt, dass das Maximum des O_3 -Profils nicht nur größere Werte hat, sondern dass es auch breiter ist, wodurch sich der Säulengehalt vergrößert. Beachtet man das im Vergleich der Säulengehalte in Kapitel 9.2.1, werden auch dort die Unterschiede kleiner, da die Säulengehalte der ESA meist größer als die der bodengebundenen Messungen waren. Diese neu prozessierten Daten sollten in der Zukunft noch weiter untersucht werden, da die Ergebnisse vielversprechend aussehen. Allerdings wurden nicht die in dieser Arbeit verwendeten Profile reprozessiert, sondern andere Orbits. Doch liegt es nahe, dass man auch für Kiruna- und Izaña-Daten Rückschlüsse ziehen kann.

Außerhalb des Polarwirbels

In Abbildung 9.25 ist ein typisches O_3 -Profil von Kiruna außerhalb des Polarwirbels vom 27.3.2003 dargestellt.

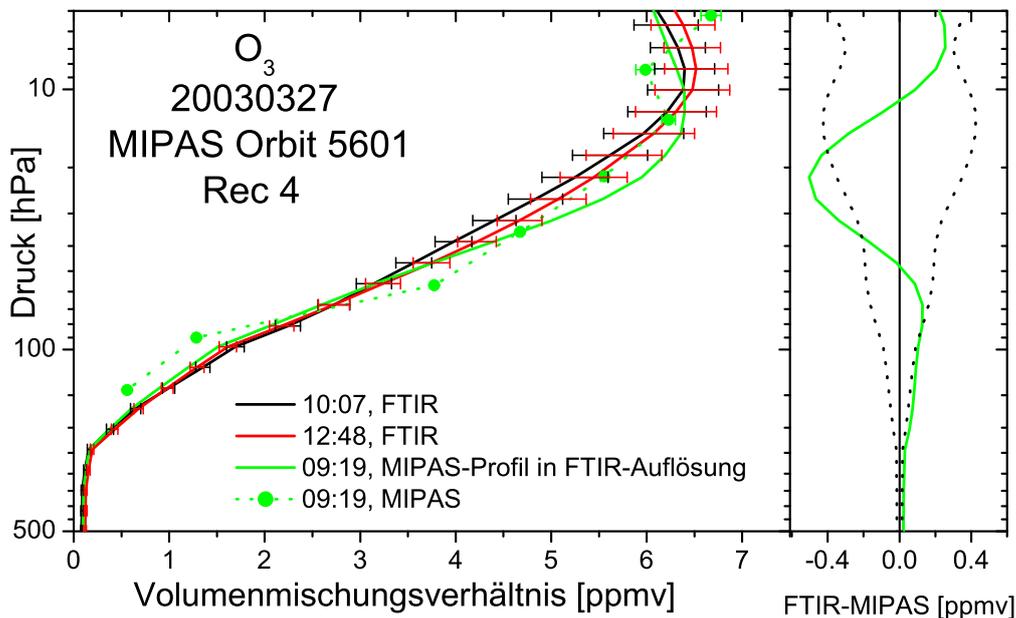


Abb. 9.25: Beispiel eines O_3 -Vergleichs außerhalb des Wirbels für Kiruna vom 27.3.2003, Orbit 5601

Auf der rechten Seite der Abbildung sind die Abweichungen der geglätteten Profile zu den FTIR-Messungen zu sehen. Zusätzlich sind die 1σ -Abweichungen als gepunktete Linien eingetragen. Die MIPAS-Messungen in diesem Beispiel liegen für fast alle Höhenbereiche innerhalb dieses Fehlerbalkens. Nur zwischen 20 hPa und 30 hPa (etwa 23 km bis 26 km

Höhe) hat das geglättete MIPAS-ESA-Profil um etwa 0,4 ppmv höhere Werte als das FTIR-Profil.

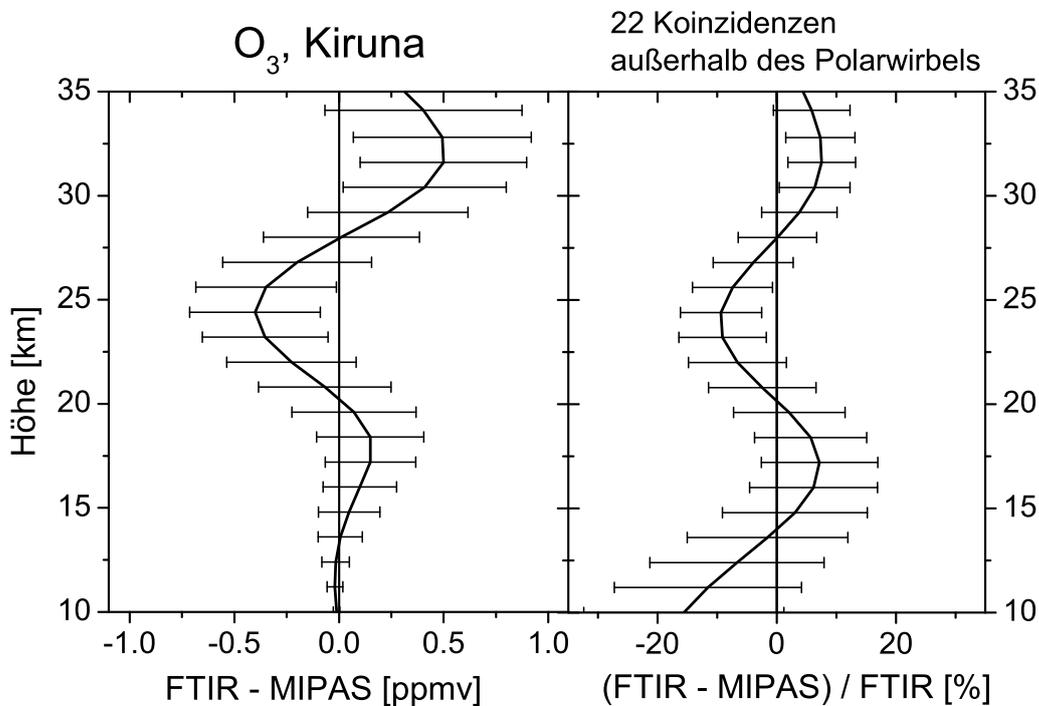


Abb. 9.26: Mittlere Abweichung und Standardabweichung des O_3 -Mischungsverhältnisses zwischen MIPAS-ENVISAT und bodengebundener FTIR-Messung in Kiruna außerhalb des Polarwirbels in ppmv und in Prozent.

Abbildung 9.26 stellt die Abweichungen der Messungen für Kiruna außerhalb des Polarwirbels dar. In diesem Fall liegen 22 Koinzidenzen vor.

Die größten Abweichungen für die Koinzidenzen außerhalb des Polarwirbels liegen in etwa 25 km Höhe bei etwa 10 % bzw. 0,3 ppmv. Die Abweichungen zwischen 30 km und 35 km sind mit etwa 10 % bzw. 0,5 ppmv nicht so groß wie innerhalb des Polarwirbels.

Izaña

Abbildung 9.27 zeigt ein typisches O_3 -Profil von Izaña.

Die Darstellung ist ähnlich wie in den Abbildungen 9.22 und 9.25. Grün ist wieder die MIPAS-Messungen als Original (gepunktete Linie) und als geglättetes Profil (durchgezogene Linie). Die grüne Messung wurde südlich (bei $31,58^\circ N$) von Izaña durchgeführt. Rechts sind die Abweichungen des geglätteten Profils zu der FTIR-Messung mit dem 1σ -Rausch-Fehlerbalken als gepunktete Linien zu sehen. Bis etwa 10 hPa (etwa 31 km Höhe) stimmen die Profile innerhalb des 1σ -Fehlerbalkens gut überein. Oberhalb von 10 hPa hat das MIPAS-ESA-Profil größere Werte als das bodengebundene Profil.

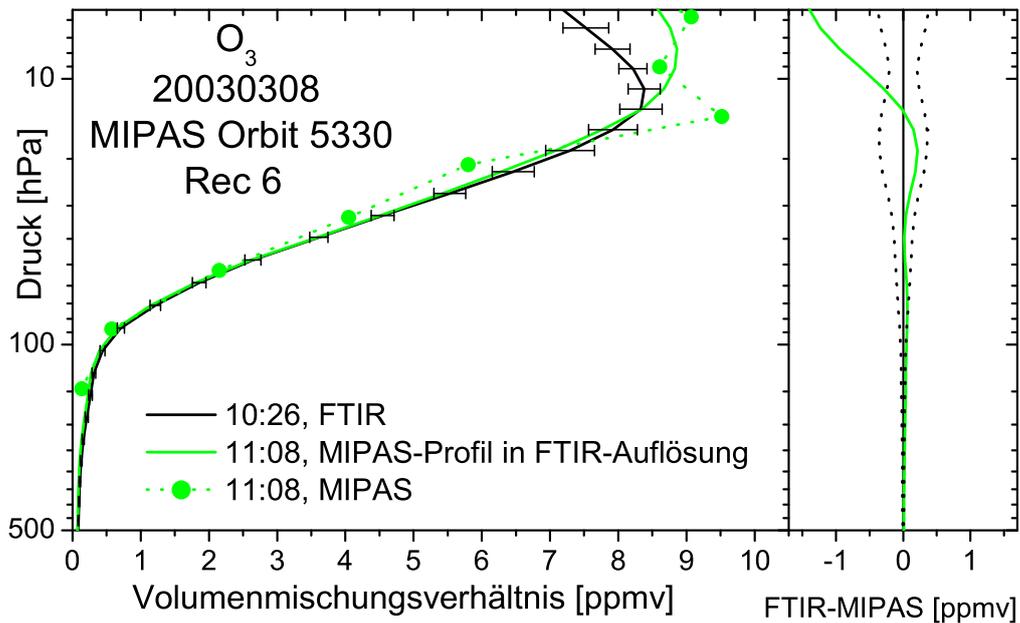


Abb. 9.27: Beispiel eines O₃-Vergleichs für Izaña vom 8.3.2003, Orbit 5330

Nicht nur in dem Beispiel aus Abbildung 9.27 sind die Abweichungen oberhalb von etwa 30 km am größten, sondern auch im Mittel bei allen 27 Koinzidenzen des Jahres 2003 (Abbildung 9.28). Die Unterschiede liegen in 25 km Höhe bei nahezu 0,5 ppmv bzw. 8 % und in 35 km Höhe bei 1,2 ppmv bzw. 17 %. Bis in ca. 32 km Höhe stimmen die Profile innerhalb der Standardabweichung überein.

In niedrigen Höhen sind die Abweichungen geringer als in Kiruna, da in Izaña ein anderes Startprofil als in Kiruna verwendet wird (Profil aus gemittelten Ozonsondenprofilen) und da in Kiruna die Variabilität größer ist. Für Izaña wurden von Matthias Schneider zusätzlich Vergleiche mit Ozonsonden durchgeführt, bei denen die größten Abweichungen mit etwa 10 % ebenfalls in etwa 30 km Höhe. Die Gründe für diese Unterschiede liegen allerdings bei den Ozonsonden. Details zu diesem Vergleich gibt Schneider et al. (2003).

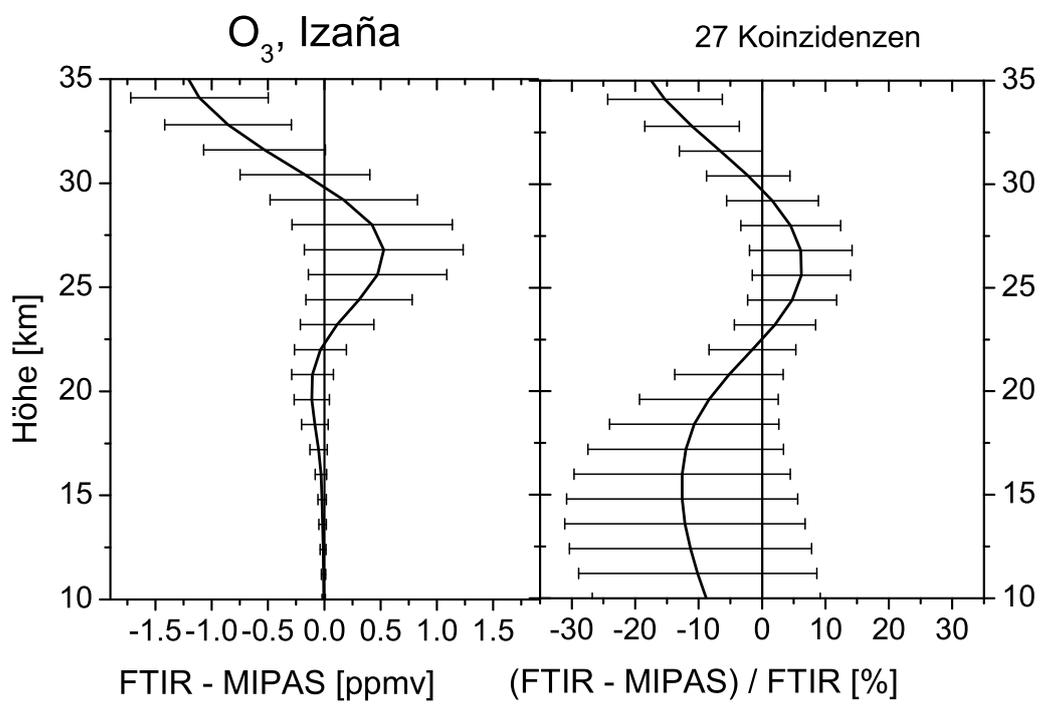


Abb. 9.28: Mittlere Abweichung und Standardabweichung des O₃-Mischungsverhältnisses zwischen MIPAS-ENVISAT und bodengebundener FTIR-Messung in Izaña in ppmv und in Prozent.

9.2.2.2 HNO_3

Kiruna

Innerhalb des Polarwirbels

Abbildung 9.29 zeigt ein typisches HNO_3 -Profil von Kiruna innerhalb des Polarwirbels vom 5.2.03.

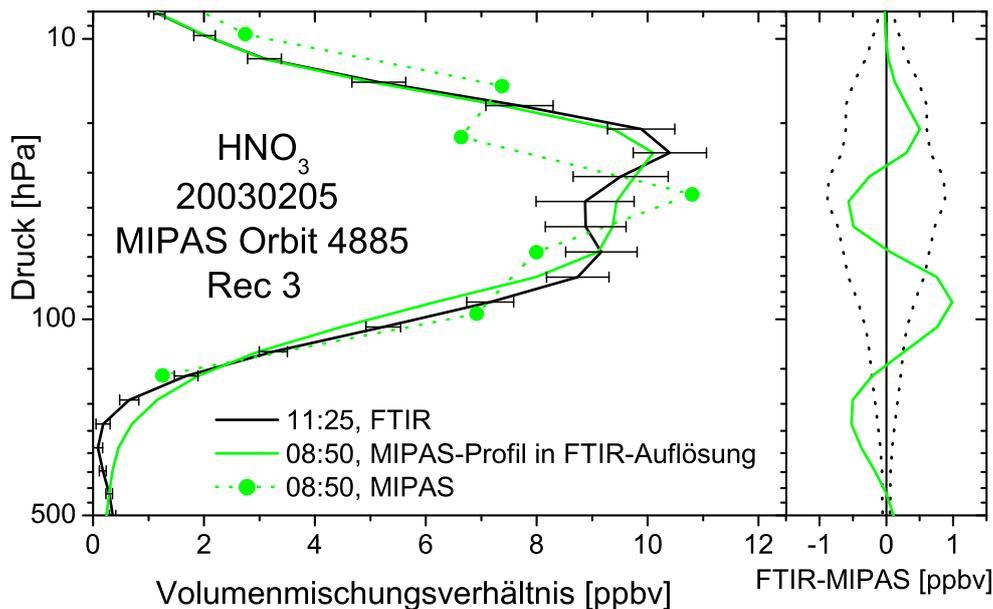


Abb. 9.29: Beispiel eines HNO_3 -Vergleichs innerhalb des Wirbels für Kiruna vom 5.2.2003, Orbit 4885

Die schwarze durchgezogene Kurve stellt wieder wie in Abbildung 9.22 die bodengebundene Messung des FTIR-Spektrometers am 5.2.2003 dar. Die PV-Karte von diesem Tag ist in Abbildung 9.23 auf Seite 105 dargestellt. Die grüne gepunktete Kurve stammt von der Original-MIPAS-Messung und das dazugehörige an die FTIR-Höhenauflösung angepasste Profil ist durch die grüne durchgezogene Kurve dargestellt. Auf der rechten Seite der Abbildung ist die Abweichung des geglätteten Profils zu den FTIR-Messungen dargestellt mit der 1σ -Abweichung als gepunktete Linien. Man erkennt, dass die Original-MIPAS-Messungen stark oszillieren, die Differenzen zu dem FTIR-Profil auf der rechten Seite der Abbildung aber ab 70 hPa (etwa 17 km Höhe) innerhalb des 1σ -Rauschfehlers der bodengebundenen Messung liegen.

Zu beachten ist allerdings die im Vergleich zu O_3 schlechtere Höhenauflösung von HNO_3 . Dies wird in Abbildung 7.28 auf Seite 66 gezeigt.

Auch für HNO_3 liegen für Kiruna für den Bereich des Polarwirbels 7 Koinzidenzen mit MIPAS-Messungen vor. Diese sind in Abbildung 9.30 als Funktion des Volumenmischungsverhältnisses und in Prozent dargestellt. Die Unterschiede sind in 16 km Höhe

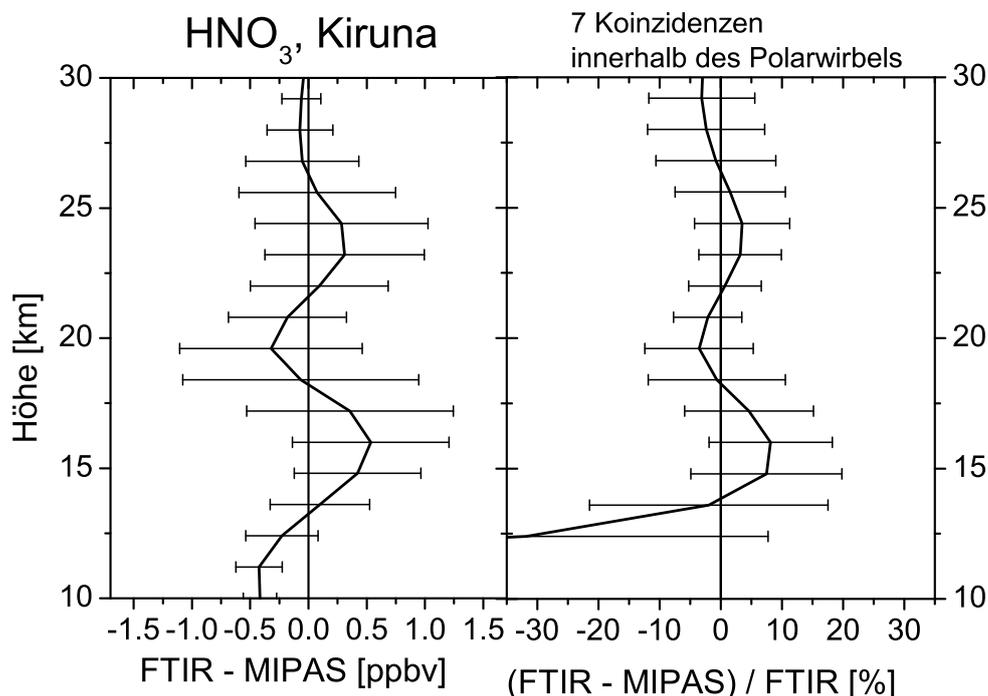


Abb. 9.30: Mittlere Abweichung und Standardabweichung des HNO_3 -Mischungsverhältnisses zwischen MIPAS-ENVISAT und bodengebundener FTIR-Messung innerhalb des Polarwirbels in Kiruna in ppbv und in Prozent.

mit etwa 0,5 ppbv am größten. Die Abweichungen liegen jedoch bis auf die untersten Höhenstufen innerhalb der Standardabweichung. Diese sehr großen Abweichungen in den untersten Höhen mit sehr großen prozentualen Abweichungen sind auffällig. Allerdings sind auch hier die Mischungsverhältnisse sehr gering, so dass es zu großen Prozentwerten kommt.

Außerhalb des Polarwirbels

Ein typisches Beispiel für HNO_3 in Kiruna außerhalb des Polarwirbels vom 27.3.2003 zeigt Abbildung 9.31.

Wie in Abbildung 9.25 zeigen die schwarze und die rote durchgezogene Kurve die bodengebundenen Messungen vom 27.3.03, grün steht für die MIPAS-Messungen. Bei diesem Beispiel sind die Abweichungen größer als für das Beispiel innerhalb des Polarwirbels. Bis etwa 40 hPa (etwa 21 km Höhe) stimmen die Profile recht gut überein. Zwischen 20 hPa und 30 hPa (etwa 23 km bis 26 km Höhe) ist die Abweichung wie schon bei O_3 mit etwa 2 ppbv am größten.

Abbildung 9.32 zeigt die Differenzen aller 22 Koinzidenzen. Wie schon bei dem Vergleich mit den Messungen innerhalb des Polarwirbels (Abbildung 9.30) liegen die Mittelwerte der Abweichungen bis auf die untersten Höhen innerhalb der Standardabweichung.

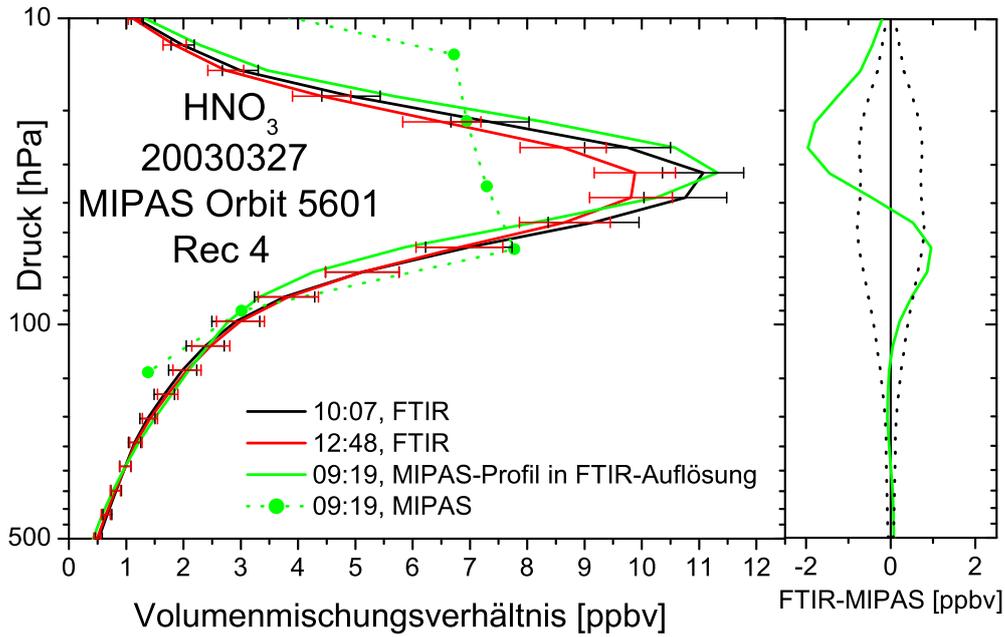


Abb. 9.31: Beispiel eines HNO₃-Vergleichs außerhalb des Wirbels für Kiruna vom 27.3.2003, Orbit 5601

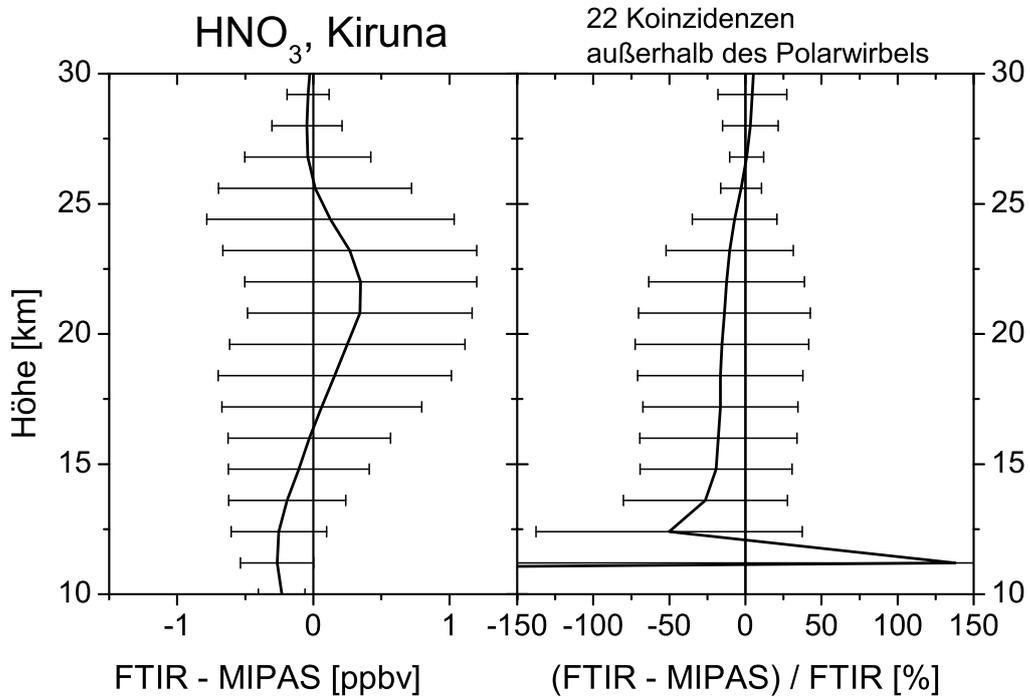


Abb. 9.32: Mittlere Abweichung und Standardabweichung des HNO₃-Mischungsverhältnisses zwischen MIPAS-ENVISAT und bodengebundener FTIR-Messung außerhalb des Polarwirbels in Kiruna in ppbv und in Prozent.

Izaña

Ein typisches Beispiel für HNO_3 in Izaña zeigt Abbildung 9.33 vom 8.3.2003.

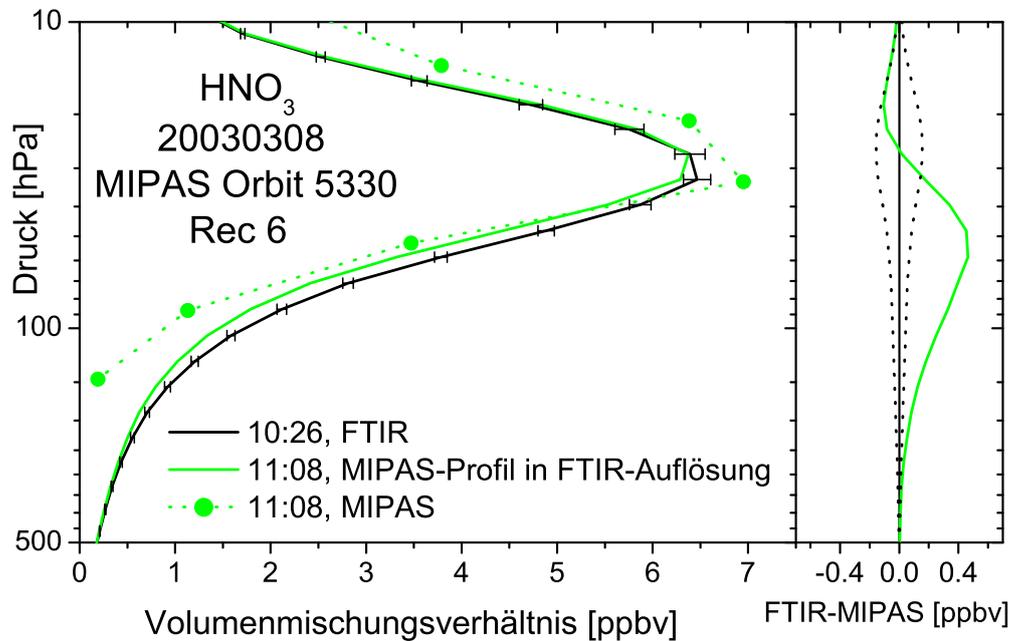


Abb. 9.33: Beispiel eines HNO_3 -Vergleichs für Izaña vom 8.3.2003, Orbit 5330

Das an die FTIR-Höhenauflösung angepasste Profil scheint trotz der Glättung mit dem Druck immer noch eine kleine Höhenverschiebung zu haben. Die größte Abweichung ist zwischen 50 hPa und 60 hPa (etwa zwischen 19 km und 20 km Höhe) mit 0,4 ppbv zu finden. Oberhalb von 20 hPa (etwa 26 km Höhe) stimmen die Ergebnisse innerhalb des 1σ -Rauschfehlers überein.

Beim Mittelwert der 27 Koinzidenzen in Abbildung 9.34 wird deutlich, dass die Abweichungen insgesamt viel kleiner sind als in Kiruna. Vor allem in niedrigen Höhen sind sie vergleichsweise gering, da in Kiruna die Variabilität größer ist. Die größten Unterschiede sind bei etwa 18 km und etwa 23 km Höhe mit weniger als 0,2 ppbv. Insgesamt liegt der Mittelwert der Differenzen in allen Höhen innerhalb der Standardabweichung.

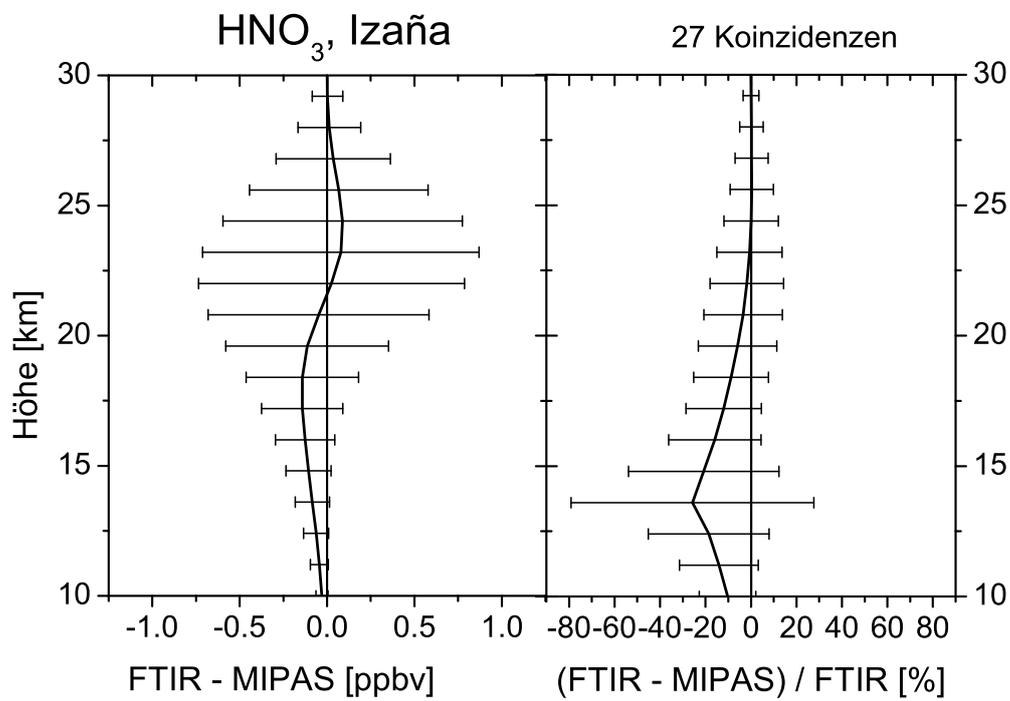


Abb. 9.34: Mittlere Abweichung und Standardabweichung des HNO₃-Mischungsverhältnisses zwischen MIPAS-ENVISAT und bodengebundener FTIR-Messung in Izaña in ppbv und in Prozent.

9.2.2.3 N₂O

MIPAS-ENVISAT sieht tangential durch die Atmosphäre, was zu geringer Sensitivität in der Troposphäre führt, so dass der Fehler dort groß wird, was sich bei einem troposphärischen Gas wie N₂O oder CH₄ besonders auswirkt. Allgemein gibt es in den unteren Tangentenpunkten Probleme bei MIPAS-ENVISAT, wobei nicht klar ist, wo diese herkommen und was die Ursache für diese Probleme ist.

Die Übereinstimmung mit dem troposphärischen Quellgas N₂O ist noch nicht sehr gut. Abbildung 9.35 zeigt ein Beispiel für Kiruna vom 27.3.03, das mit der Version 4.57 des ESA-Prozessors berechnet wurde.

Man sieht leicht, dass die MIPAS-Profile vor allem in niedrigen Höhen zu große Werte haben, wie beispielsweise 0,35 ppmv in 150 hPa (etwa 13 km Höhe). Bis etwa 30 hPa (etwa 23 km Höhe) hat das MIPAS-Profil kleinere Werte als das bodengebundene Profil, oberhalb dieser Höhe größere. Bei größeren Höhen wird das geglättete Profil auf das FTIR-Profil gezwungen. Auch sind Oszillationen in den MIPAS-Profilen, vor allem in den Original-Messungen, zu erkennen.

Da in diesem Beispiel und in weiteren untersuchten Fällen die Unterschiede offensichtlich zu groß sind, wurde keine statistische Analyse durchgeführt.

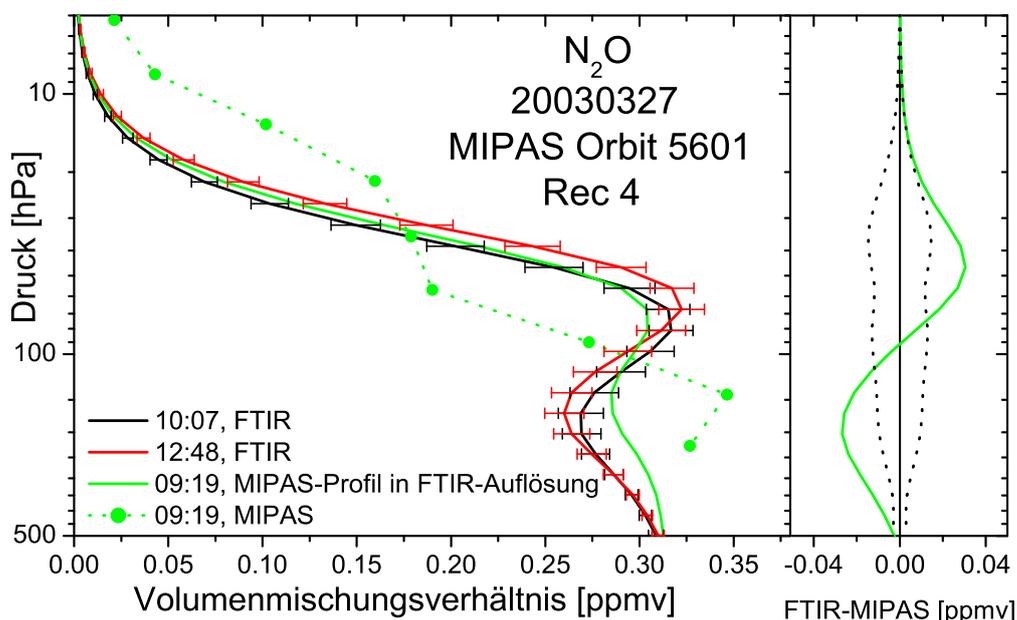


Abb. 9.35: Beispiel eines N₂O-Vergleichs

9.2.2.4 CH₄

CH₄ verhält sich ganz ähnlich wie N₂O. Die Unterschiede in den FTIR- und den MIPAS-Profilen sind sogar noch größer. Abbildung 9.36 zeigt ein typisches CH₄-Profil. Die Steigung der Profile stimmt nicht überein, sie sind für die MIPAS-Profile viel zu steil. Außerdem sind die Werte der MIPAS-ENVISAT-Profile zu hoch und es sind z. T. starke Schwingungen in diesen Profilen zu finden. Die Oszillationen sind noch stärker als bei N₂O. Da hier die Unterschiede noch gravierender als bei N₂O sind, wurden auch hier keine statistischen Untersuchungen durchgeführt.

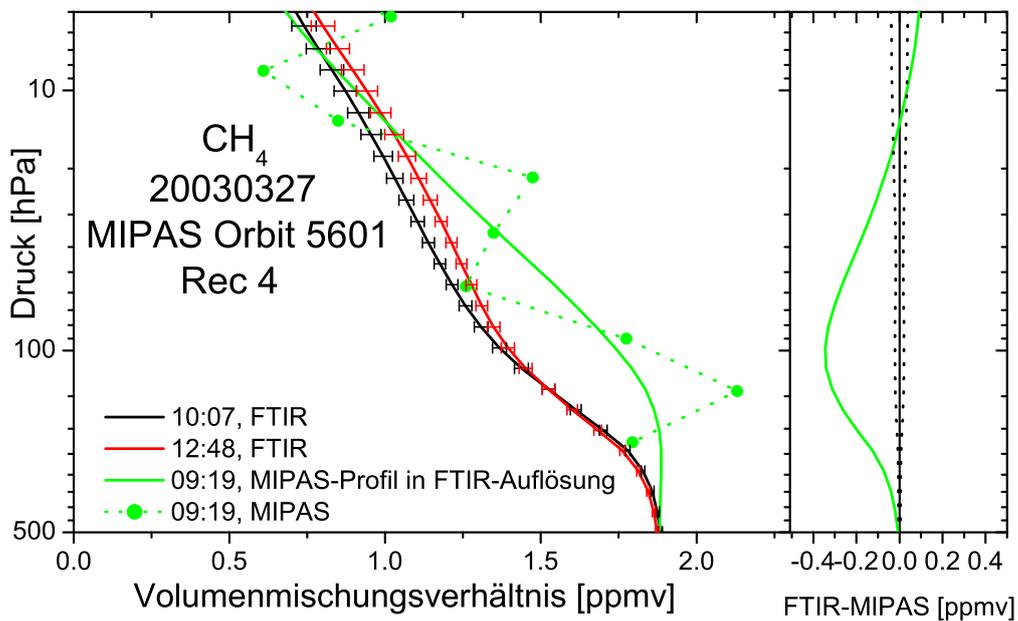


Abb. 9.36: Beispiel eines CH₄-Vergleichs

9.2.3 Zusammenfassung des Vergleichs mit MIPAS-Daten

Bei den verglichenen Säulengehalten sind für O₃ die großen Unterschiede zwischen den Werten der Original-Messung und den aus den geglätteten Profilen abgeleiteten Säulengehalten, bei denen die von der ESA angegebene Höhe verwendet wurde, auffällig. Deshalb wurden die Profile nochmals mit dem angegebenen Druck als Höhenkoordinate geglättet und daraus wieder die Säulengehalte abgeleitet.

Die Unterschiede zu diesen Säulengehalten sind viel kleiner geworden und die Übereinstimmung ist viel besser geworden. Die mittlere Abweichung für O₃ beträgt für die aus den geglätteten Profilen abgeleiteten Säulengehalte $-0,5 \% \pm 4,8 \%$ für Kiruna und $-1,6 \% \pm 3,8 \%$ für Izaña. Dagegen wichen die Original-ESA-Daten mit $-5,8 \% \pm 8,5 \%$ für Kiruna und $-4,4 \% \pm 6,3 \%$ für Izaña deutlich stärker ab als für die aus den mit dem Druck geglätteten Profilen abgeleiteten Säulengehalte.

Anhand dieser mittleren Abweichungen sieht man, dass die stratosphärischen Säulengehalte keinen Offset haben, dafür ist aber die Standardabweichung groß.

Anhand der O₃-Profile wurde im Jahr 2002 eine falsche Höhenzuordnung der Profile aus MIPAS-ESA-Messungen festgestellt. Die ESA korrigierte diese Verschiebung in der Höhe von etwa 1,5 km ab dem 13.11.2002. Für die Profile danach war die Höhenzuordnung richtig. Trägt man diese Profile gegen den Druck auf, ist die Übereinstimmung viel besser. Der Vergleich mit abgeleiteten Profilen der Arbeitsgruppe des IMK, welche die wissenschaftlichen Produkte von MIPAS auswertet, zeigt, dass diese Profile bis zu einer Höhe von 20 km bis 25 km recht gut mit denen der bodengebundenen Messung übereinstimmen.

Bei den Ergebnissen aus 2003 zeigte sich wieder ein Höhenfehler, der von der ESA nicht korrigiert wurde. Nachdem dieser im Rahmen dieser Arbeit herausgefunden wurde, wurden für alle Koinzidenzen die MIPAS-ESA-Profile noch einmal in der Höhenauflösung auf die der bodengebundenen Messungen reduziert, diesmal mit dem Druck als Höhenkoordinate. Daraufhin ergaben sich viel bessere Übereinstimmungen zwischen den Profilen.

So stimmen die Profile aus Kiruna für die 7 Koinzidenzen innerhalb des Polarwirbels bis etwa 20 km Höhe recht gut überein. Oberhalb davon werden die Abweichung größer und steigen auf etwa 12 % bzw. 1 ppmv in etwa 33 km Höhe, wobei das FTIR-Profil höhere Werte hat als das MIPAS-ESA-Profil.

Außerhalb des Polarwirbels liegen bis Ende Juni 2003 22 Koinzidenzen vor. Die größten Abweichungen der O₃-Profile liegen in etwa 25 km Höhe bei etwa 10 %. Die Abweichungen zwischen 30 km und 35 km Höhe sind mit etwa 10 % bzw. 0,5 ppmv nicht so groß wie innerhalb des Polarwirbels.

Für Izaña liegen im Zeitraum von Januar bis Juni 2003 27 Koinzidenzen mit MIPAS vor. Die größten Unterschiede für O₃ liegen in 35 km Höhe bei 1,2 ppmv bzw. 17 %.

Bei den HNO₃-Messungen sind die Unterschiede größer als für O₃. Die mittlere Abweichung bei den stratosphärischen Säulengehalten ist mit Werten von $-0,8 \%$ für Kiruna und $-1,4 \%$ für Izaña etwa ähnlich groß wie bei O₃. Allerdings sind die Standardabweichungen in diesen Fällen mit $6,1 \%$ bzw. 10% sehr groß.

Für die HNO₃-Profile sind die Unterschiede für Kiruna für die 7 Koinzidenzen innerhalb des Polarwirbels in etwa 16 km Höhe mit etwa 0,5 ppbv am größten. Der Mittelwert der

Abweichungen liegt jedoch bis auf die untersten Höhenstufen innerhalb der Standardabweichung.

Auch außerhalb des Polarwirbels liegt der Mittelwert der Abweichungen der 22 Koinzidenzen der HNO₃-Profile innerhalb der Standardabweichung.

Für Izaña wird anhand der 27 Koinzidenzen deutlich, dass die Abweichungen insgesamt viel kleiner sind als in Kiruna. Der größte Unterschied ist in Höhen bei etwa 18 km und 23 km mit weniger als 0,2 ppbv zu finden.

Für N₂O und CH₄ sind die Abweichungen bei den Säulengehalten mit Werten von -63,6 % ±40,7 % für N₂O und -85,7 % ±44,2 % für CH₄ sehr groß. Da MIPAS-ENVISAT jedoch 90 % des Säulengehaltes dieser beiden troposphärischen Gase nicht sehen kann und der gemeinsame empfindliche Höhenbereich zu klein ist, sind diese Abweichungen nicht unerwartet. Der Vergleich der Säulengehalte dieser troposphärischen Gase scheint also nicht sinnvoll zu sein.

Die N₂O- und CH₄-Messungen der Profile liefern wie für die Säulengehalte keine verwertbaren Ergebnisse, so dass für diese beiden Gase keine statistische Analyse durchgeführt werden konnte. Vor allem bei CH₄ liegen gravierende Unterschiede vor, so stimmt z. B. die Steigung der Profile nicht überein. Die Steigung der MIPAS-ENVISAT-Profile ist viel zu steil, die Werte der MIPAS-Profile sind zu hoch und es sind z. T. große Oszillationen in diesen Profilen zu erkennen.

Insgesamt kann man feststellen, dass die FTIR-Messungen und die Messungen von MIPAS-ENVISAT für stratosphärische Gase relativ gut übereinstimmen, wenn die Profile mit dem Druck als Höhenkoordinate geglättet werden und somit die Höhenauflösung der MIPAS-Profile auf das Höhenauflösung der FTIR-Messung reduziert wird.

9.3 Ergebnisse für SCIAMACHY

9.3.1 Vergleiche mit SCIAMACHY-Säulengehalten

Im Gegensatz zu MIPAS wurden im Rahmen dieser Arbeit für SCIAMACHY nur Säulengehalte verglichen, da Profil-Daten von der ESA erst mit den reprozessierten Daten von 2002 zur Verfügung stehen.

Deswegen wurde auch keine Anpassung an die Höhengauflösung, wie sie bei den MIPAS-Vergleichen gezeigt wurde, durchgeführt.

Die in diesem Kapitel dargestellten Säulengehalte sind aufgrund der Messgeometrie von SCIAMACHY (Kapitel 5.2) nicht, wie bei MIPAS, nur stratosphärische Säulengehalte, sondern Gesamtsäulengehalte, also stratosphärische und troposphärische.

9.3.1.1 O₃

Kiruna

Die Abbildungen 9.37 und 9.38 zeigen die Säulengehalte von SCIAMACHY im Vergleich mit den Säulengehalten der bodengebundenen FTIR-Messungen.

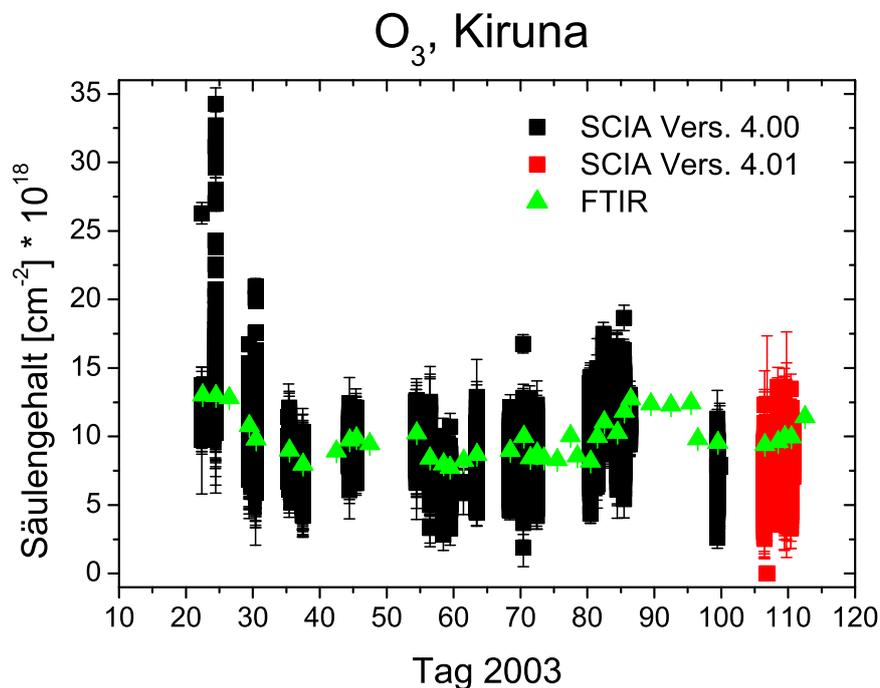


Abb. 9.37: O₃-Säulengehalte von FTIR (grüne Dreiecke) und SCIAMACHY (schwarze und rote Quadrate) über Kiruna.

Dabei stellt Abbildung 9.37 alle Säulengehalte der Versionen 4.00 und 4.01 der prozessierten Daten von SCIAMACHY dar. Es sind alle Daten, die in einem Umkreis von 1000 km um Kiruna gemessen wurden, dargestellt. Da hier die Streuung unrealistisch

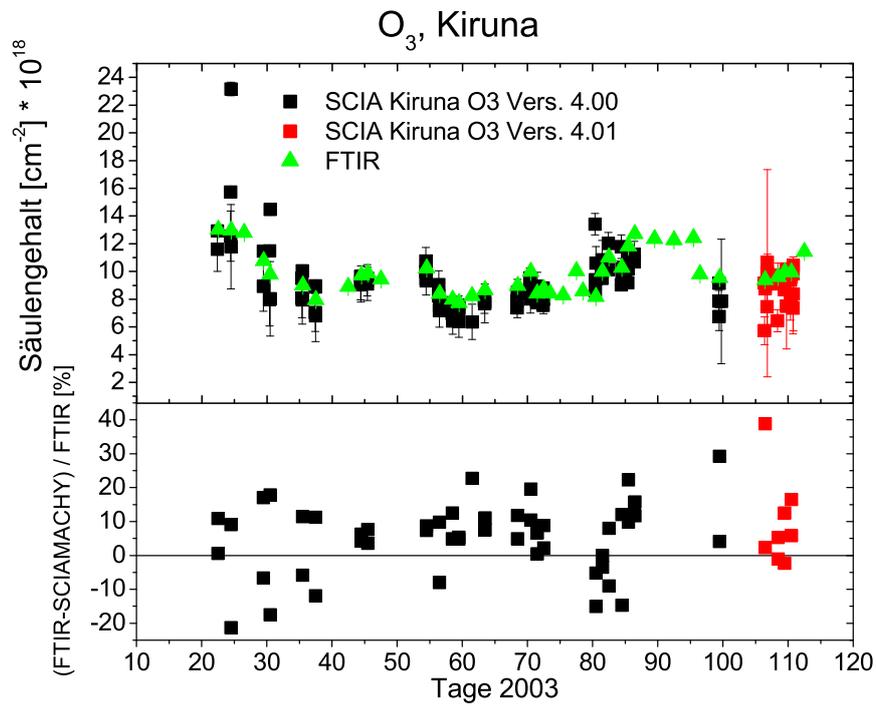


Abb. 9.38: Gemittelte O_3 -Säulengehalte von FTIR (grüne Dreiecke) und SCIAMACHY (schwarze und rote Quadrate) über Kiruna.

hoch ist, wurden die Daten der einzelnen Tage gemittelt. In Abbildung 9.38 sind die Abweichungen zu den FTIR-Messungen dargestellt.

Die Diskussion der Vergleiche für Kiruna ist wie bei den MIPAS-Daten in innerhalb und außerhalb des Polarwirbels unterteilt.

Innerhalb des Polarwirbels

Abbildung 9.39 zeigt im oberen Teil die gemittelten Werte und im unteren Teil die Abweichungen in Prozent. Die Unterschiede bewegen sich zwischen + und - 20 %. Dabei sind die SCIAMACHY-Werte teilweise größer und teilweise kleiner als die der FTIR-Messungen.

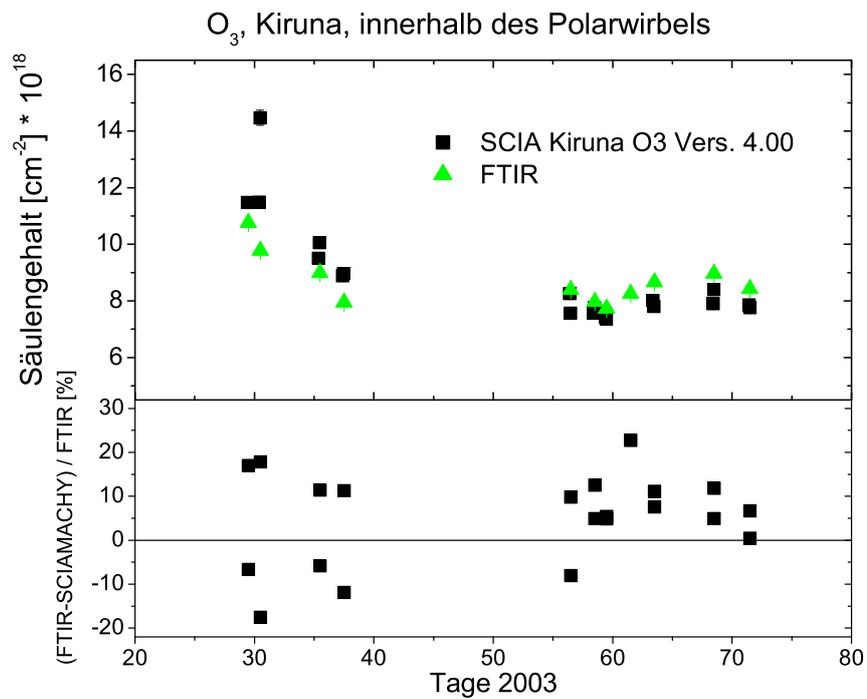


Abb. 9.39: Gemittelte O₃-Säulengehalte von FTIR (grüne Dreiecke) und SCIAMACHY (schwarze Quadrate) über Kiruna innerhalb des Polarwirbels.

Außerhalb des Polarwirbels

Die gemittelten SCIAMACHY-Daten außerhalb des Polarwirbels sind in Abbildung 9.40 als schwarze und rote Dreiecke dargestellt.

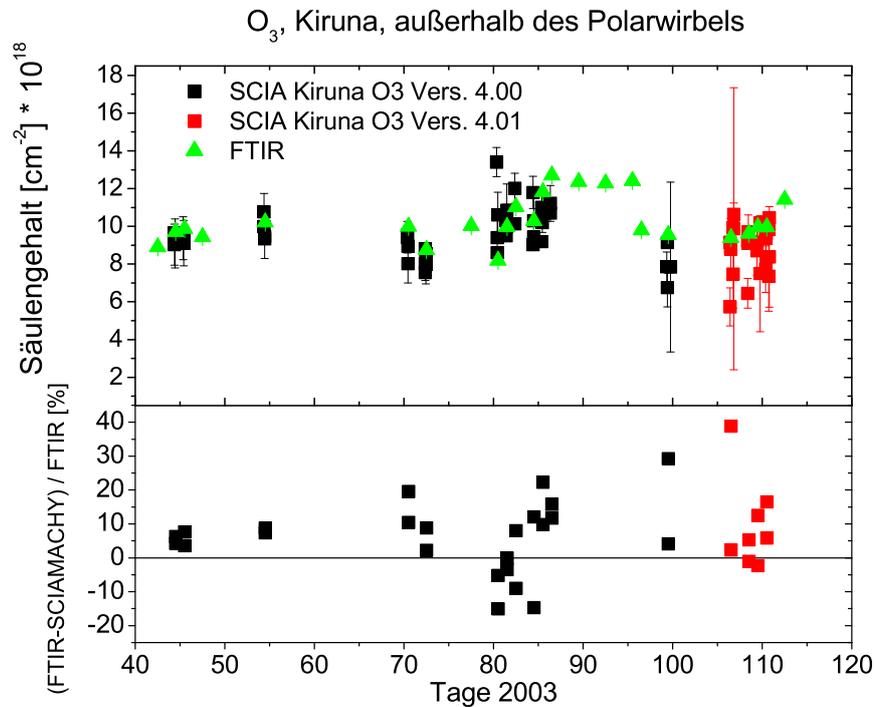


Abb. 9.40: Gemittelte O_3 -Säulengehalte von FTIR (grüne Dreiecke) und SCIAMACHY (schwarze und rote Quadrate) über Kiruna außerhalb des Polarwirbels.

Im unteren Teil der Abbildung sind die Abweichungen in Prozent dargestellt. Diese liegen für Version 4.00 der Prozessierung wieder im Bereich von etwa $\pm 20\%$. Für die neueren Daten von Version 4.01 (rote Quadrate) sind die Unterschiede z. T. größer: Sie liegen für einige Werte im Bereich von $+30\%$ bis $+40\%$. Allerdings sind hier auch die Fehlerbalken sehr viel größer als für die Daten der früheren Version.

Izaña

Für Izaña liegen wie für Kiruna gemittelte SCIAMACHY-Säulengehalte vor, die in Abbildung 9.41 dargestellt sind.

Leider gibt es für Izaña nur wenige Daten von SCIAMACHY. Aufgrund der wenigen Daten ist praktisch kein sinnvoller Vergleich möglich.

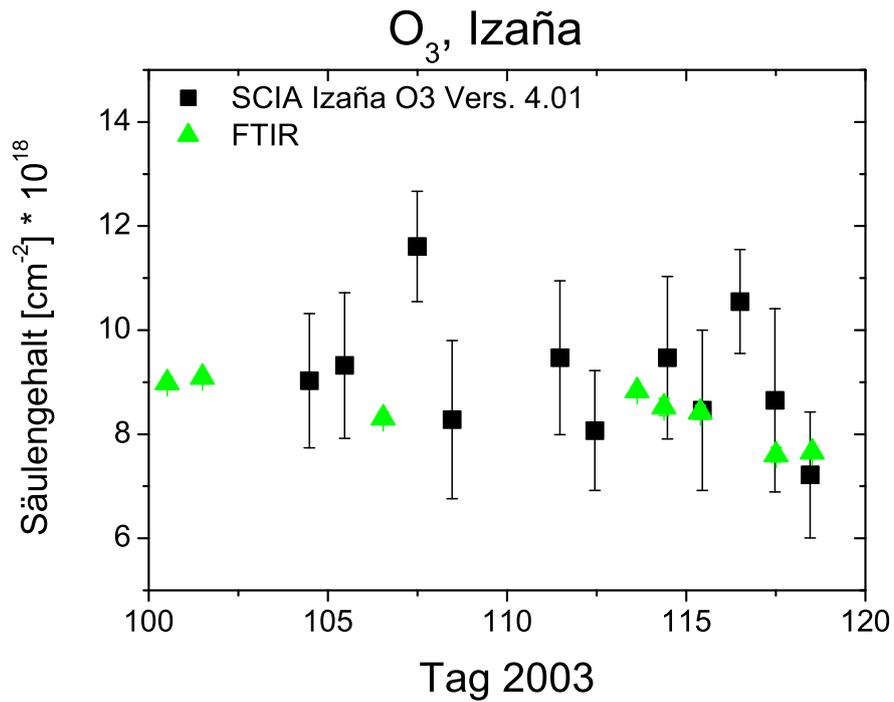


Abb. 9.41: Gemittelte O₃-Säulengehalte von FTIR (grüne Dreiecke) und SCIAMACHY (schwarze Quadrate) über Izaña.

9.3.1.2 NO₂

Kiruna

Für NO₂ liegen nicht nur die Original ESA-Daten vor, sondern auch hier werden, ähnlich wie bei den MIPAS-Profilen, auch von wissenschaftlichen Instituten Daten ausgewertet. Die Erzeugung der hier verwendeten wissenschaftlichen Produkte erfolgt am Institut für Umweltphysik (IUP) an der Universität Bremen (Richter, 2003; Richter et al., 2003). Diese Daten, die aus einem Umkreis von 200 km um Kiruna stammen, sind in den Abbildungen 9.42 und 9.43 für die Jahre 2002 und 2003 mit den Abweichungen in Prozent dargestellt.

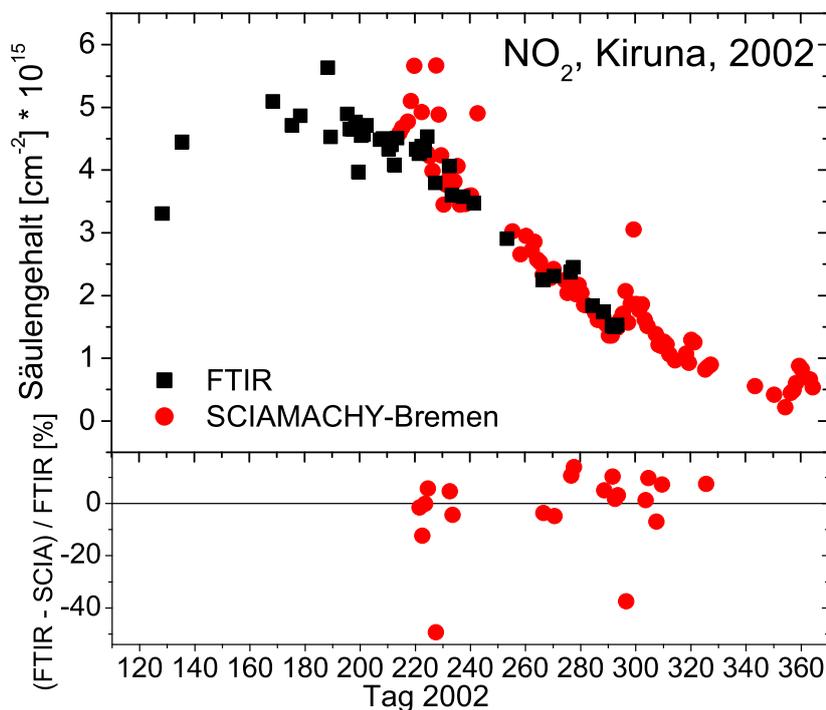


Abb. 9.42: NO₂-Säulengehalte von FTIR (schwarze Quadrate) und SCIAMACHY (rote Kreise) über Kiruna 2002.

In beiden Abbildungen ist erkennbar, dass der Verlauf der Zeitreihen recht gut übereinstimmt. Für die Daten aus 2002 ist der Unterschied bis auf zwei Ausnahmen kleiner als 20 %. Im Mittel betragen die Abweichungen für das Jahr 2002 $-1,9 \% \pm 15,4 \%$.

Für 2003 dagegen sind die Abweichungen größer. Sie liegen, bis auf eine Ausnahme, bei der die Abweichung knapp 80 % beträgt, zwischen $+20 \%$ und -40% , im Mittel bei $-12,2 \%$ mit einer Standardabweichung von $\pm 18,1 \%$.

Diese Abweichungen können durch den Tagesgang von NO₂ zustande kommen (Pirre et al., 1990; Salawitch et al., 1994), wenn die Messzeiten zu unterschiedlich sind. Eine wichtige Quelle ist die Photodissoziation von N₂O₅, die verantwortlich für die Zunahme an NO₂ während des Tages ist (Reaktion (9.2)), so dass abends die höchste Konzentration

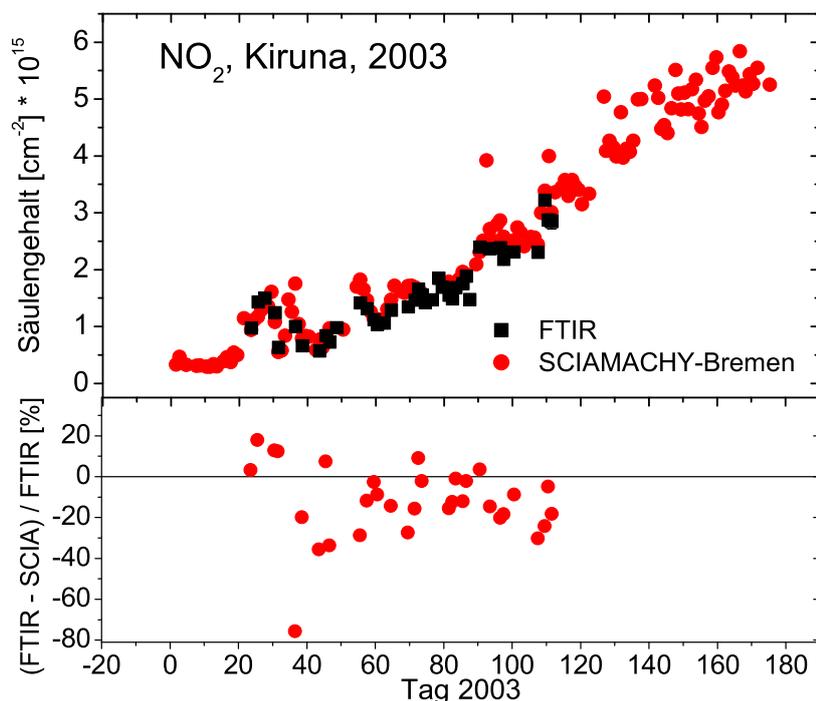
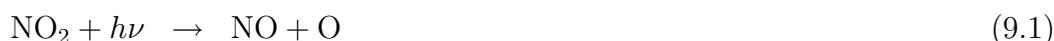


Abb. 9.43: NO₂-Säulengehalte von FTIR (schwarze Quadrate) und SCIAMACHY (rote Kreise) über Kiruna 2003.

während der Tagesstunden vorliegt. Nachts hingegen wird NO₂ wieder in N₂O₅ umgewandelt (Reaktionen (9.3) und (9.4)). Eine Korrektur dieses Tagesganges für Izaña ist bei Schneider (2002) nachzulesen.



Die Korrektur des Tagesganges wurde beim Vergleich der NO₂-Daten im Rahmen dieser Arbeit nicht angewendet, es wurde aber darauf geachtet, dass der zeitliche Unterschied gering ist.

Die Säulengehalte von allen ESA-Daten von Ende 2002 bis 2003 im Umkreis von 1000 km um Kiruna sind in Abbildung 9.44 dargestellt. Bildet man in etwa den Mittelwert der Messungen, kann man erkennen, dass die Säulengehalte der bodengebundenen Messungen im Vergleich zu den Messungen von SCIAMACHY kleiner sind. Allerdings ist die Variabilität viel zu groß, so dass kein Vergleich möglich ist.

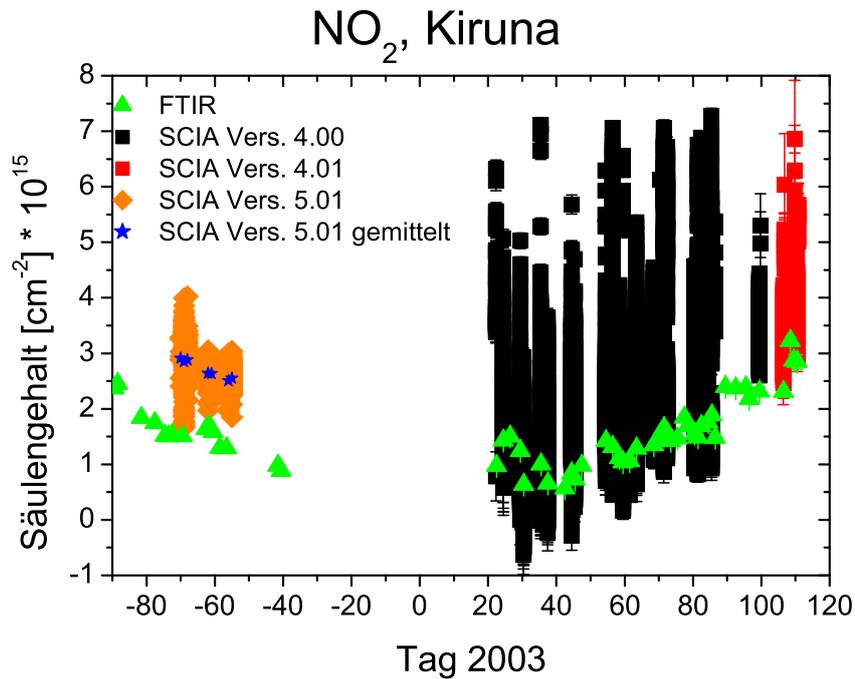


Abb. 9.44: NO₂-Säulengehalte von FTIR (grüne Dreiecke) und SCIAMACHY (schwarze und rote Quadrate) über Kiruna.

Ein Grund für die schlechten Produkte der ESA ist die Tatsache, dass der Kanal, in dem NO₂ gemessen wird, bislang noch nicht ausgewertet wurde und NO₂ von der ESA bisher nur als Störgas gemessen wird. Deshalb werden bei der Unterteilung der Daten in innerhalb und außerhalb des Polarwirbels nur die Daten des Bremer Instituts diskutiert. Diese Daten zeigen, dass die Probleme lösbar sind.

Innerhalb des Polarwirbels

Abbildung 9.45 zeigt wieder die Daten, die vom Institut für Umweltphysik (IUP) an der Universität Bremen ausgewertet wurden, dieses Mal für innerhalb des Polarwirbels.

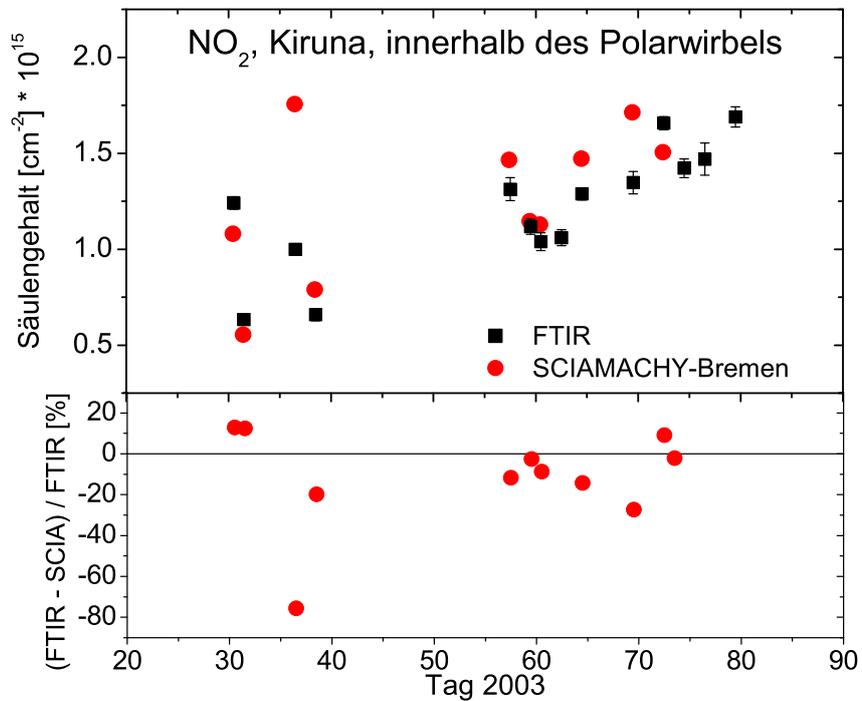


Abb. 9.45: NO₂-Säulengehalte von FTIR (schwarze Quadrate) und SCIAMACHY (rote Kreise) über Kiruna innerhalb des Polarwirbels.

Die Unterschiede liegen wieder, wie in Abbildung 9.43, bis auf eine Ausnahme zwischen + 20 % und - 40 %.

Außerhalb des Polarwirbels

In Abbildung 9.46 sind die Daten vom Institut für Umweltphysik (IUP) an der Universität Bremen dargestellt.

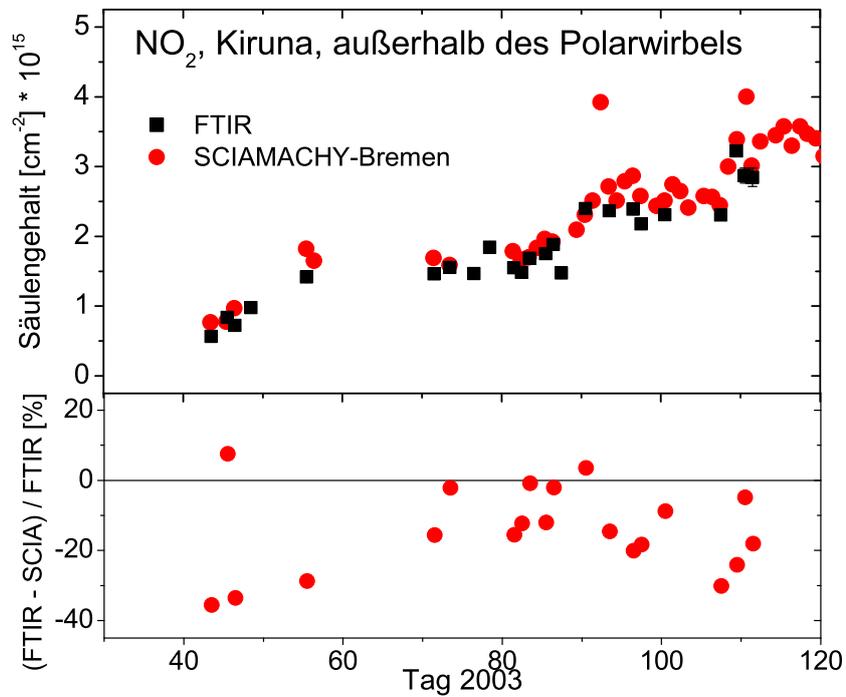


Abb. 9.46: NO₂-Säulengehalte von FTIR (schwarze Quadrate) und SCIAMACHY (rote Kreise) über Kiruna außerhalb des Polarwirbels.

Wie schon beschrieben, stammen die ausgewerteten Daten aus einem Umkreis von 200 km um Kiruna. Die Differenzen liegen wieder, wie in Abbildung 9.43, bis auf eine Ausnahme zwischen + 20 % und - 40 %.

Izaña

In Abbildung 9.47 sind wieder die Daten des Instituts für Umweltphysik (IUP) dargestellt.

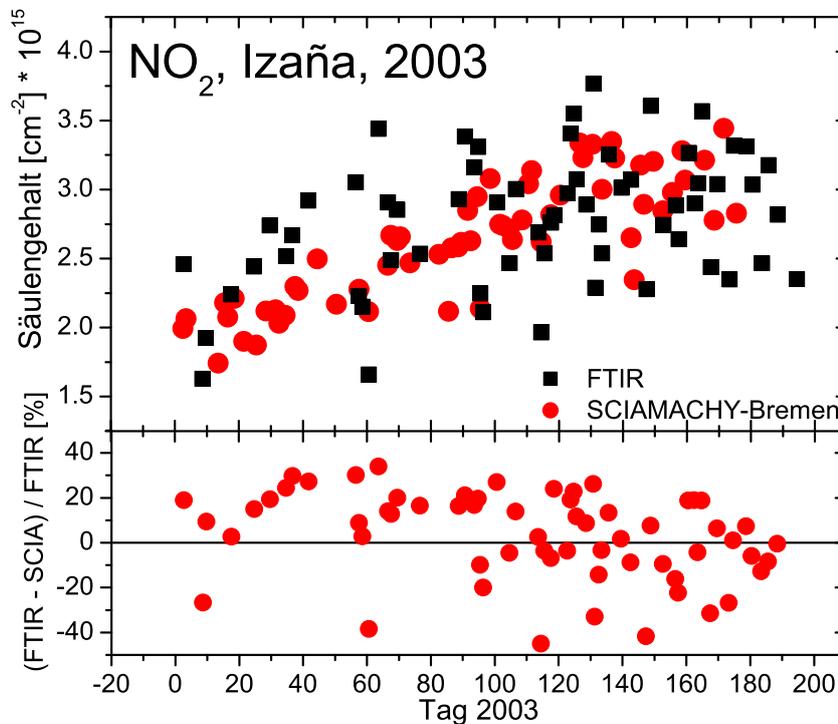


Abb. 9.47: Gemittelte NO_2 -Säulengehalte von FTIR (schwarze Quadrate) und SCIAMACHY (rote Kreise) über Izaña.

Die Abweichungen für die Izaña-Daten liegen im Bereich von $\pm 40 \%$.

Der Vergleich mit den ESA-SCIAMACHY-Säulengehalten ist unterschiedlich zu den Messungen, die in Kiruna durchgeführt wurden. Während dort die SCIAMACHY-Messungen größere Werte hatten als die FTIR-Messungen (Abbildungen 9.43, 9.45 und 9.46), sind bei den Izaña-Messungen die SCIAMACHY-Werte kleiner als die bodengebundenen Messungen (Abbildung 9.48).

Weitere Vergleiche mit NO_2 -Säulengehalten sind in den Beiträgen von Blumenstock et al. (2003b) und Lambert et al. (2003), die beim „Envisat Validation Workshop“ in Frascati, Italien, 2002 vorgestellt wurden, zu finden.

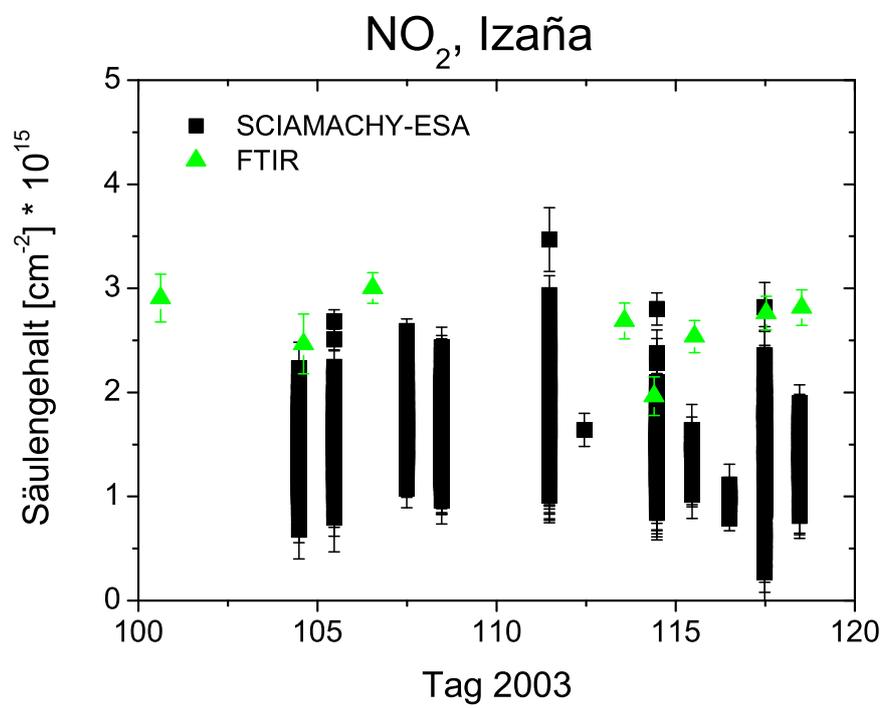


Abb. 9.48: NO₂-Säulengehalte von FTIR (grüne Dreiecke) und SCIAMACHY (schwarze Quadrate) über Izaña.

9.3.2 Zusammenfassung des Vergleichs mit SCIAMACHY-Daten

Im Gegensatz zu MIPAS wurden für SCIAMACHY nur Säulengehalte verglichen.

Die in diesem Kapitel abgebildeten Daten stammen aus den Versionen 4.00 und 4.01 für Kiruna und 4.01 für die Izaña-Daten.

Für die Ozonwerte innerhalb des Polarwirbels in Kiruna kann man beim Vergleich der gemittelten Werte Unterschiede bis zu $\pm 20\%$ erkennen.

Außerhalb des Polarwirbels liegen die Abweichungen für Version 4.00 wieder im Bereich von etwa $\pm 20\%$. Für die Daten von Version 4.01 sind die Unterschiede z. T. größer: Sie liegen für einige Messungen im Bereich von 30 % bis 40 %. Allerdings sind hier die Fehler sehr viel größer als für diejenigen der früheren Version.

Für Izaña liegen nur wenige Daten vor. Aufgrund dessen ist letztlich kein guter Vergleich möglich.

Für NO_2 liegen nicht nur die Original Daten der ESA vor. Die Erzeugung der wissenschaftlichen Produkte erfolgt am Institut für Umweltphysik (IUP) an der Universität Bremen. Diese Daten stammen aus einem Umkreis von bis zu 200 km um Kiruna. Ein Grund für die ungenauen NO_2 -Säulengehalte der ESA ist die Tatsache, dass die optimale NO_2 -Signatur bislang noch nicht ausgewertet wurde. Ganz offensichtlich sind die Ergebnisse des Bremer Prozessors deutlich besser als die ESA-Produkte.

Bei den Daten aus 2002 ist der Unterschied bis auf zwei Ausnahmen kleiner als 20 %. Für das Jahr 2003 dagegen sind die Abweichungen größer. Sie liegen, bis auf eine Ausnahme, bei der die Abweichung knapp 80 % beträgt, für außerhalb und innerhalb des Polarwirbels zwischen + 20 % und - 40 %.

Da NO_2 von der ESA bisher nur als Störgas gemessen wird, wurden bei der Unterteilung der Daten in innerhalb und außerhalb des Polarwirbels nur die Daten der Bremer Auswertung diskutiert.

Die Daten des Instituts für Umweltphysik (IUP) der Universität Bremen für Izaña stimmen nicht so gut mit den FTIR-Messungen überein .

10 Zusammenfassung und Ausblick

Gegenstand dieser Arbeit ist die Validierung dieser ENVISAT-Daten mit Hilfe von bodengebundenen FTIR-Messungen. Dafür werden in Kiruna (Nordschweden) und in Izaña (Teneriffa) Profile bzw. Säulengehalte, u. a. von O_3 , HCl, HF, HNO_3 , $ClONO_2$, N_2O , CH_4 , NO_2 , CO, NO und ClO, gemessen.

Beide Messstationen sind Teil des NDSC. Als Teil dieses Netzwerks werden mit den bodengebundenen Fourier-Spektrometern Messungen regelmäßig durchgeführt. Dadurch ist man nicht auf einzelne Messkampagnen, wie z. B. bei Ballon- oder Flugzeugmessungen, beschränkt. Deswegen eignen sie sich besonders gut für Trendbestimmungen und für die langfristige Validierung der Satellitendaten, wie z. B. der Daten von ENVISAT.

Die Validierung der Satellitendaten ist wichtig für die wissenschaftliche Nutzung dieser Daten, um sicherzugehen, dass diese Daten korrekt sind bzw. um deren Fehler zu kennen. Deswegen ist eine frühe Validierung notwendig.

Vor der Validierung mit ENVISAT-Daten wurden die Messungen des bodengebundenen FTIR-Spektrometers mit Hilfe von anderen Messgeräten validiert, deren Höhenauflösung sehr viel besser als die der FTIR-Messungen ist, wie das auch bei den ENVISAT-Messungen der Fall ist. Um die Profile der Messungen der Ozonsonden bzw. des Ballons mit den FTIR-Profilen vergleichen zu können, wurden diese in ihrer Höhenauflösung vermindert.

Im Rahmen dieser Arbeit konnten Vergleiche mit Messungen von MIPAS und SCIAMACHY, und damit mit zwei der drei Fernerkundungsgeräte für atmosphärische Chemie an Bord von ENVISAT, durchgeführt werden. Doch da es zu Verzögerungen vor dem Start und später auch bei der Datenbereitstellung gab bzw. gibt, und auch die einzelnen Instrumente noch Probleme haben, konnten nicht alle geplanten Vergleiche durchgeführt werden.

So standen für diese Arbeit für SCIAMACHY von der ESA bislang nur O_3 -Säulengehalte zur Verfügung, die validiert werden konnten. Auch die NO_2 -Säulengehalte von der ESA waren im Rahmen dieser Arbeit noch nicht für die Validierung geeignet. Ein Grund für die ungenauen NO_2 -Säulengehalte der ESA ist die Tatsache, dass der Kanal, in dem NO_2 gemessen wird, bislang noch nicht ausgewertet wurde. Und auch die Auswertung aus Horizontsondierungsgeometrie hat sich verzögert.

Aus einer wissenschaftlichen Auswertung des IUP Bremen liegen NO_2 -Säulengehalte vor, mit denen die bodengebundenen Messungen verglichen wurden, und deren Ergebnisse mit denen der bodengebundenen Messungen viel besser übereinstimmten als die Original-ESA-Messungen.

Bei den Vergleichen mit SCIAMACHY-Daten sind die Unterschiede zu den offiziellen ESA-Produkten in den frühen Versionen, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden, noch groß. Aber die inzwischen reprozessierten Daten zeigen eine bessere Übereinstimmung.

10 Zusammenfassung und Ausblick

Auch für MIPAS gibt es viele Koinzidenzen. Damit die Ergebnisse der bodengebundenen Messungen und der Messungen von MIPAS-ENVISAT verglichen werden können, mussten sie aufgrund der unterschiedlichen Höhenauflösungen geglättet werden. Dafür wurde jedes einzelne Profil, das von MIPAS-ENVISAT gemessen wurde und zu dem eine koinzidente bodengebundene Messung vorlag, in der Höhenauflösung reduziert. Nachdem bei den so erhaltenen Ergebnissen ein Fehler in der Höhenangabe der ESA festgestellt wurde, wurde diese Glättung ein zweites Mal mit dem von der ESA angegebenen Druck als Höhenkoordinate durchgeführt. Diese neu geglätteten Profile zeigten eine viel bessere Übereinstimmung mit den bodengebundenen Messungen. So haben die stratosphärischen Säulengehalte von O_3 eine mittlere Abweichung, die im Rahmen des gemeinsamen Fehlers liegt. Und auch die Abweichungen der O_3 -Profile lagen für fast den gesamten gemeinsamen sensitiven Höhenbereich im Bereich der Standardabweichung.

Und auch für HNO_3 waren die Abweichungen ab Version 4.55 vom MIPAS-ENVISAT relativ gering.

Die MIPAS-Produkte werden nicht nur von dem ESA-Prozessor berechnet, sondern auch hier gibt es Ergebnisse, die aus der wissenschaftlichen Auswertung mithilfe eines Prozessors, der am IMK entwickelt und betrieben wird, stammen. Der durchgeführte Vergleich mit einem O_3 -Profil dieses Prozessors zeigt für 2002 vor allem bis etwa 20 km Höhe eine noch bessere Übereinstimmung als die Daten des ESA-Prozessors.

Bei N_2O und CH_4 dagegen existierten große Abweichungen zu den bodengebundenen Messungen. Dies ist höchstwahrscheinlich darin begründet, dass diese beiden Gase troposphärische Gase sind, und MIPAS 90 % des Säulengehalts gar nicht sehen kann. Aus diesem Grund ist für diese beiden Gase auch der gemeinsame empfindliche Höhenbereich zu klein, so dass ein Vergleich wenig Sinn macht. Die Profile von N_2O und CH_4 liefern wie die Säulengehalte keine verwertbaren Ergebnisse, so dass für diese beiden Gase keine statistische Analyse durchgeführt werden konnte. Vor allem bei CH_4 liegen gravierende Unterschiede vor, so ist die Steigung der MIPAS-ENVISAT-Profile viel zu steil, die Werte der MIPAS-Profile sind zu hoch und es sind z. T. große Oszillationen in diesen Profilen vorhanden.

All diese Ergebnisse zeigen, dass man mithilfe der bodengebundenen Messungen in der Lage ist, etwaige Probleme der Satellitendaten zu erkennen.

Vor allem für die Langzeitvalidierung sind die bodengebundenen FTIR-Messungen gut geeignet, da mit ihnen kontinuierlich Messungen durchgeführt werden, und man nicht auf einzelne Messkampagnen, wie z. B. bei Ballon- oder Flugzeugmessungen, beschränkt ist.

Die ursprünglich von Juli bis Dezember 2002 angesetzte Validierungsphase von ENVISAT ist noch nicht abgeschlossen.

Für die reprozessierten Daten von 2002 existieren für SCIAMACHY inzwischen sowohl NO_2 -Säulengehalte als auch O_3 -Profile von der ESA. Diese wurden auf dem „Second Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of ENVISAT (ACVE-2)“ Anfang Mai 2004 in Frascati, Italien, gezeigt. Allerdings wurden diese Daten erst Ende März bzw. Anfang April 2004 von der ESA bereitgestellt, und konnten dadurch nicht mehr in diese Arbeit eingearbeitet werden. Auch sollen die reprozessierten Daten von 2002, sowohl Profile als auch Säulengehalte von MIPAS und von SCIAMACHY noch mit den bodengebundenen Daten verglichen werden.

Als weitere Daten sollten die ENVISAT-Daten ab Juli 2003 mit den bodengebundenen Daten verglichen werden, da im Rahmen dieser Arbeit nur die Daten bis einschließlich Juni 2003 verwendet wurden.

Als Test, ob die verglichenen Profile gut übereinstimmen, soll zusätzlich zu den Berechnungen der mittleren Abweichung ein χ^2 -Test durchgeführt werden.

10 Zusammenfassung und Ausblick

Literaturverzeichnis

- Adrian, G. P., T. Blumenstock, H. Fischer, L. Gerhardt, T. Gulde, H. Oelhaf, P. Thomas und O. Trieschmann (1991). Column amounts of trace gases derived from ground-based measurements with MIPAS during CHEOPS III. *Geophys. Res. Lett.* 18, 783–786.
- Adrian, G. P., T. von Clarmann, H. Fischer und H. Oelhaf (1993). Trace gas measurements with the ground-based MIPAS experiment during the Arctic winters 1990 to 1992. *International Radiation Symposium, Tallin, Estonia, August 3-8, 1992: Current Problems in Atmospheric Radiation*, (Hrsg.) S. Keevallik und O. Kärner. A. Deepak Publishing, Hampton, Va, USA, 359–362.
- Beer, R. (1992). *Remote Sensing by Fourier transform Spectrometry*. John Wiley & Sons, Inc., New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore.
- Bertaux, J. L., G. Megie, T. Widemann, E. Chassefiere, R. Pellinen, E. Kyrölä, S. Korpela und P. Simon (1991). Monitoring of ozone trend by stellar occultations: The GOMOS instrument. *Adv. Space Res.* 11, 237–242.
- Birk, M. und G. Wagner (2000). A new spectroscopic database for chlorine nitrate. *Proceedings of the 6th Biennial HITRAN Database Conference, 19.-21.06.2000, Cambridge, MA*.
- Blom, C. E., T. Gulde, C. Keim, W. Kimmig, C. Piesch, C. Sartorius und H. Fischer (1999). MIPAS-STR: A new instrument for stratospheric aircraft. *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, 693–694.
- Blumenstock, T., H. Fischer, A. Friedle, G. P. Stiller und P. Thomas (1998). Column amounts of HCl, ClONO₂ and HF measured by ground-based FTIR spectroscopy near Kiruna (S) during winter since 1990. *Atmospheric Ozone, Proceedings of the XVIII Quadrennial Ozone Symposium, L'Aquila, Italy, 12–21 September 1996*, (Hrsg.) R. D. Bojkov und G. Visconti, Bd. 1. International Ozone Commission, 469–472.
- Blumenstock, T., A. Griesfeller, F. Hase, M. Schneider, I. Boyd, Y. Calisesi, S. Godin, R. Koopman, J.-C. Lambert, V. Soebijanta, D. Swart, U. Raffalski, H. Schets, D. De Muer, K. Stebel, W. Steinbrecht und R. Stubi (2003a). Comparison of MIPAS O₃ profiles with ground-based measurements. *Proc. ENVISAT Validation Workshop, 9–13 December, 2002, ESRIN, Frascati, Italy, CD-ROM*, Bd. SP-531. ESA Publications Division, ESTEC, Postbus 299, 2200 AG Noordwijk, The Netherlands.

- Blumenstock, T., A. Griesfeller, F. Hase, M. Schneider, H. Fischer, M. Gil, J. R. Moreta, U. Raffalski, U. Friess, G. Schwarz und E. Cuevas (2003b). Validation of MIPAS, and SCIAMACHY data by ground-based spectroscopy at Kiruna, Sweden, and Izaña, Tenerife Island (AOID-191). *Proc. ENVISAT Validation Workshop, 9–13 December, 2002, ESRI, Frascati, Italy, CD-ROM*, Bd. SP-531. ESA Publications Division, ESTEC, Postbus 299, 2200 AG Noordwijk, The Netherlands.
- Blumenstock, T., F. Hase, H. Fischer, G. P. Stiller, A. Meier, A. Steen, D. Yashkov und Y. Kondo (2000). Ground based FTIR measurements of O₃, HF, HCl, ClONO₂, NO₂, NO, and HNO₃ at Kiruna (Sweden) since winter 1994. *Proceedings of the Quadrennial Ozone Symposium, Sapporo, Japan, 3–8 July 2000, NASDA*. 145–146.
- Bovensmann, H., J. P. Burrows, M. Buchwitz, J. Frerick, S. Noël, V. V. Rozanov, K. V. Chance und A. P. H. Goede (1999). SCIAMACHY: Mission objectives and measurement modes. *J. Atmos. Sci.* 56, 127–150.
- Burrows, J. P., M. Weber, M. Buchwitz, V. Rozanov, A. Landstätter-Weißmayer, A. Richter, R. Debeek, R. Hoogen, K. Bramstedt, K.-U. Eichmann, M. Eisinger und D. Perner (1999). The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME): Mission Concepts and First Scientific Results. *J. Atmos. Sci.* 56, 151–175.
- Chapman, S. (1930). A theory of upper-atmospheric ozone. *Mem. R. Meteorol. Soc.* 3, 103–125.
- Chubachi, S. (1984). A special ozone observation at Syowa Station, Antarctica from February 1982 to January 1983. *Atmospheric Ozone, Proceedings of the Quadrennial Ozone Symposium, Halkidiki, Greek, 3–7 September 1984*, (Hrsg.) C. S. Zerefos und A. Ghazi. 285–289.
- Chubachi, S. (1988). Total ozone by lunar dobson observation at Syowa, Antarctica. *Geophys. Res. Lett.* 15, 905–906.
- Clarmann, T., M. Birk, H. Bovensmann, A. Burgess, S. Ceccherini, A. Doicu, A. Dudhia, J.-M. Flaud, B. Funke, S. Hilgers, M. Höpfner, V. Jay, B. J. Kerridge, E. Kyrölä, A. Linden, M. López-Puertas, F.-J. Martín-Torres, G. Mengistu Tsidu, V. Payne, C. Piccolo, J. Reburn, M. Ridolfi, F. Schreier, G. Schwarz, R. Siddans, T. Steck und D.-Y. Wang (2003a). Advanced MIPAS–Level–2 Data Analysis (AMIL2DA). *Geophys. Res. Abstracts* 5. Abstracts of the Contributions of the EGS–AGU–EUG Joint Assembly, Nice, France, 06–11 April 2003, CD-ROM, ISSN:1029–7006.
- Clarmann, T., M. Birk, H. Bovensmann, A. Burgess, S. Ceccherini, A. Doicu, A. Dudhia, J.-M. Flaud, B. Funke, S. Hilgers, M. Höpfner, V. Jay, B. J. Kerridge, E. Kyrölä, A. Linden, M. López-Puertas, F.-J. Martín-Torres, G. Mengistu Tsidu, V. Payne, C. Piccolo, J. Reburn, M. Ridolfi, F. Schreier, G. Schwarz, R. Siddans, T. Steck und D.-Y. Wang (2003b). Advanced MIPAS–Level–2 Data Analysis (AMIL2DA). *11th International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, Bad Wildbad, Germany, Oct. 8–10, 2003*.
- Clarmann, T., T. Chidiezie Chineke, H. Fischer, B. Funke, M. García-Comas, S. Gil-López, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden,

- M. López-Puertas, M. Á. López-Valverde, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck und G. P. Stiller (2003c). Remote sensing of the middle atmosphere with MIPAS. *Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere VII*, (Hrsg.) K. Schäfer, O. Lado-Bordowsky, A. Comerón und R. H. Picard, Bd. 4882. SPIE, Bellingham, WA, USA, 172–183.
- Clarmann, T., G. Echle, H. Fischer, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, M. Kiefer, M. Milz und G. P. Stiller (2000). MIPAS interactive semi-operational level-2 data processing. *Proc. 9th International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, ASSFTS 2000, 22–24 May 2000, Kyoto, Japan*. 79–82.
- Clarmann, T., H. Fischer, B. Funke, M. García-Comas, S. Gil-López, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, M. López-Puertas, M. Á. López-Valverde, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller und D. Y. Wang (2003d). Retrieval of temperature and pointing information from MIPAS limb emission spectra. *Geophys. Res. Abstracts 5*. Abstracts of the Contributions of the EGS-AGU-EUG Joint Assembly, Nice, France, 06–11 April 2003, CD-ROM, ISSN:1029–7006.
- Clarmann, T., H. Fischer, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, M. Kiefer, F. J. Martín-Torres, M. Milz und G. P. Stiller (2001). MIPAS interactive semi-operational level-2 data processing. *IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation*, (Hrsg.) W. L. Smith und Y. M. Timofeyev. A. Deepak Publishing, Hampton, Va, USA, 785–788.
- Clarmann, T., N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, D. Y. Wang, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López und M. López-Puertas (2003e). Retrieval of temperature and pointing information from MIPAS limb emission spectra. *11th International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, Bad Wildbad, Germany, Oct. 8–10, 2003*.
- Clarmann, T., N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, D. Y. Wang, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López und M. López-Puertas (2003f). Retrieval of temperature and tangent altitude pointing from limb emission spectra recorded from space by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *J. Geophys. Res.* 108, 4736.
- Clarmann, T., G. Stiller, A. Friedle, K. Ressel und T. Steck (1999a). The MIPAS level 2 off-line processor: Requirements and concepts. *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, 529–532.
- Clarmann, T., G. P. Stiller, A. Friedle, K. Ressel und T. Steck (1999b). Scientific concept of the MIPAS level 2 offline processor. *Fourier Transform Spectroscopy: New Methods and Applications*, OSA Technical Digest. Optical Society of America, Washington, D.C., 79–81.

Literaturverzeichnis

- ESA (2000). Envisat, MIPAS An instrument for atmospheric chemistry and climate research. ESA Publications Division, ESTEC, P. O. Box 299, 2200 AG Noordwijk, The Netherlands, SP-1229.
- Etling, D. (2002). *Theoretische Meteorologie – Eine Einführung*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg.
- Farman, J. C., B. G. Gardiner und J. D. Shanklin (1985). Large losses of total ozone in Antarctica reveal seasonal ClO_x/NO_x interaction. *Nature* 315, 207–210.
- Fischer, H. (1992). Remote sensing of atmospheric trace constituents using Fourier Transform Spectrometry. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 96, 306–314.
- Fischer, H. (1993). Remote sensing of atmospheric trace gases. *Interdisc. Sci. Rev.* 18, 185–191.
- Fischer, H. und H. Oelhaf (1996). Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb-emission spectrometers. *Appl. Opt.* 35, 2787–2796.
- Friedl-Vallon, F., H. Fischer, T. Clarmann, C. Fritzsche, H. Oelhaf, C. Piesch, M. Seefeldner, D. Rabus und W. Völker (1992). Limb emission spectroscopy with the balloon-borne Michelson interferometer for passive atmospheric sounding (MIPAS). *Optical Methods in Atmospheric Chemistry*, (Hrsg.) H. I. Schiff und U. Platt, Bd. 1715. 441–450.
- Gulde, T., C. Piesch, C. E. Blom, H. Fischer, F. Fergg und G. Wildgruber (1994). The airborne MIPAS infrared emission experiment. *Proceedings of the 1st International Airborne Remote Sensing Conf. and Exhibition, Strasbourg, F, September 12-15, 1994*, Bd. II. II/301–II/311.
- Hase, F. (1995). *Messung des Apparateprofils eines hochauflösenden FTIR-Spektrometers*. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Fakultät für Physik, Universität Karlsruhe (TH).
- Hase, F. (2000). *Inversion von Spurengasprofilen aus hochaufgelösten bodengebundenen FTIR-Messungen in Absorption*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6512.
- Hase, F., T. Blumenstock und C. Paton-Walsh (1999). Analysis of the instrumental line shape of high-resolution Fourier transform IR spectrometers with gas cell measurements and new retrieval software. *Appl. Opt.* 38, 3417–3422.
- Hase, F., J. W. Hannigan, M. T. Coffey, A. Goldman, H. Höpfner, N. B. Jones, C. P. Rinsland und S. W. Wood (2004). Intercomparison of retrieval codes used for the analysis of high-resolution, ground-based FTIR measurements. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 87, 25–52.
- Holton, J. R., P. H. Haynes, M. E. McIntyre, A. R. Douglass, R. B. Rood und L. Pfister (1995). Stratosphere-troposphere exchange. *Rev. Geophys.* 33, 403–439.
- Höpfner, M., T. Blumenstock, F. Hase, A. Zimmermann, H. Flentje und S. Fueglistaler (2001). Mountain polar stratospheric cloud measurements by ground based FTIR solar absorption spectroscopy. *Geophys. Res. Lett.* 28, 2189–2192.

- Höpfner, M., G. P. Stiller, M. Kuntz, T. von Clarmann, G. Echle, B. Funke, N. Glatthor, F. Hase, H. Kemnitzer und S. Zorn (1998). The Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm. Part II: Interface to retrieval applications. *Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds, Beijing, China, 15–17 September 1998*, (Hrsg.) J. Wang, B. Wu, T. Ogawa und Z. Guan, Bd. 3501. 186–195.
- Karbstein, H. (1994). *Bestimmung von Säulengehalten atmosphärischer Spurengase aus mit Eigenstrahlung überlagerten IR-Spektren*. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Fakultät für Physik, Universität Karlsruhe (TH).
- Kopp, G. (2000). *Inversion arktischer stratosphärischer Spurengasprofile für die Ozonforschung aus Messungen eines bodengebundenen Millimeterwellenradiometers*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Fakultät für Physik, Universität Karlsruhe (TH).
- Kopp, G. (2003). Private Mitteilung.
- Lambert, J., J. Granville, M. Allaart, T. Blumenstock, T. Coosemans, M. D. Mazière, U. Friess, M. Gil, F. Goutail, D. V. Ionov, I. Kostadinov, E. Kyrö, A. Petritoli, A. Piders, A. Richter, H. K. Roscoe, H. Schets, J. D. Shanklin, V. T. Soebijanta, T. Suortti, M. V. Roozendael, C. Varotsos und T. Wagner (2003). Ground-based Comparisons of early SCIAMACHY O₃ and NO₂ Columns. *Proc. ENVISAT Validation Workshop, 9–13 December, 2002, ESRI, Frascati, Italy, CD-ROM*, Bd. SP-531. ESA Publications Division, ESTEC, Postbus 299, 2200 AG Noordwijk, The Netherlands.
- Larsen, N., B. M. Knudsen, T. Deshler, J. M. Rosen, R. Kivi, C. Weisser, J. Schreiner, K. Mauersberger, F. Caioro und J. Ovarlez (2003). Formation of Arctis sod type psc particles in early winter 2002/03. SOLVE II/VINTERSOL Joint Science Team Meeting, Orlando, USA, October 21-24, 2003.
- Lary, D. J. (1997). Catalytic destruction of stratospheric ozone. *J. Geophys. Res.* 102, 21,515–21,526.
- Milz, M. (2004). Private Mitteilung.
- Nett, H., B. Carli, M. Carlotti, A. Dudhia, H. Fischer, J.-M. Flaud, G. Perron, P. Raspollini und M. Ridolfi (1999). MIPAS ground processor and data products. *Proc. IEEE 1999 International Geoscience and Remote Sensing Symposium, 28 June - 2 July 1999, Hamburg, Germany*. 1692–1696.
- Oelhaf, H., T. Blumenstock, A. Griesfeller, F. Hase, M. Höpfner und G. Wetzel (2001). Comparison of column amounts and profiles as retrieved from ground-based ftir measurements with collocated balloon-borne observations at high latitudes in winter. NDSC Symposium, Arcachon, France, 24-27 September 2001.
- Oelhaf, H., T. von Clarmann, H. Fischer, F. Friedl-Vallon, C. Fritzsche, C. Piesch, D. Rabus, M. Seefeldner und W. Völker (1992). The MIPAS balloon borne trace constituent experiment. *Ozone in the Troposphere and Stratosphere Part 2*, (Hrsg.) R. D. Hudson, NASA Conference Publication 3266. 842–845. Proceedings of Quadrennial Ozone Symposium 1992, Charlottesville, VA, USA, June 4–13, 1992.

Literaturverzeichnis

- Oelhaf, H., T. von Clarmann, H. Fischer, F. Friedl-Vallon, C. Keim, G. Maucher, C. Sartorius, M. Seefeldner, O. Trieschmann, G. Wetzel und M. Wölfel (1996a). Remote sensing of the Arctic stratosphere with the new balloon-borne MIPAS-B2 instrument. *Proc. 3rd Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, (Hrsg.) J. A. Pyle, N. R. P. Harris und G. T. Amanatidis. European Commission, Brussels, Luxemburg, 270–275. Air Pollution Research Report 56.
- Oelhaf, H., G. Wetzel, T. von Clarmann, M. Schmidt, J. B. Renard, M. Pirre, E. Lateltin, P. Aïmedieu, C. Phillips, F. Goutail, J. Pommereau, Y. Kondo, T. Sugita, H. Nakajima, M. Koike, W. J. Williams, F. J. Murcray, P. Sullivan, A. Engel, U. Schmidt und A. Lee (1996b). Correlative balloon measurements of the vertical distribution of N₂O, NO, NO₂, NO₃, HNO₃, N₂O₅, ClONO₂ and total reactive NO_y inside the polar vortex during SESAME. *Proc. 3rd Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, (Hrsg.) J. A. Pyle, N. R. P. Harris und G. T. Amanatidis. European Commission, Brussels, Luxemburg, 187–192. Air Pollution Research Report 56.
- Phillips, D. (1962). A technique for the numerical solution of certain integral equations of first kind. *J. Ass. Comput. Mat.* 9, 84–97.
- Pichler, H. (1997). *Dynamik der Atmosphäre*. Spektrum Hochschultaschenbuch, Heidelberg.
- Pirre, M., H. Le Texier, F. Goutail, J. P. Pommereau und R. Ramaroson (1990). Seasonal behaviour of NO₂ total column at polar circle. *Polar Stratospheric Ozone: Proc. of the 1st Eur. Workshop, Schliersee, Germany, 3–5 Oct 1990*. European Commission, Brussels, Luxemburg, 263. Air Pollution Research Report 34.
- Richter, A. (2003). Private Mitteilung.
- Richter, A., A. Adukpó, S. Fietkau, A. Heckel, A. Ladstätter-Weißmayer, A. Löwe, T. Medeke, H. Oetjen, F. Wittrock und J. P. Burrows (2003). SCIAMACHY Validation using Ground-based DOAS Measurements of the University of Bremen BREDOM Network. *Proc. ENVISAT Validation Workshop, 9–13 December, 2002, ESRIN, Frascati, Italy, CD-ROM*, Bd. SP-531. ESA Publications Division, ESTEC, Postbus 299, 2200 AG Noordwijk, The Netherlands.
- Ridolfi, M., B. Carli, M. Carlotti, T. von Clarmann, B. Dinelli, A. Dudhia, J.-M. Flaud, M. Höpfner, P. E. Morris, P. Raspollini, G. Stiller und R. J. Wells (2000). Optimized forward and retrieval scheme for MIPAS near-real-time data processing. *Appl. Opt.* 39, 1323–1340.
- Ridolfi, M., B. Carli, M. Carlotti, T. von Clarmann, B. Dinelli, A. Dudhia, J.-M. Flaud, M. Höpfner, P. E. Morris, P. Raspollini, G. Stiller und R. J. Wells (2001). An optimized forward model and retrieval scheme for MIPAS near real time data processing. *ERS-ENVISAT SYMPOSIUM 2000, 16–20 October 2000, Göteborg, Sweden*, (Hrsg.) H. Sawaya-Lacoste, Bd. SP-461, CD-ROM. ESA Publications Division, ESTEC, Postbus 299, 2200 AG Noordwijk, The Netherlands.

- Rodgers, C. D. (2000). *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*, Series on Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics, F. W. Taylor, ed., Bd. 2. World Scientific.
- Rodgers, C. D. und B. J. Connor (2003). Intercomparison of remote sounding instruments. *J. Geophys. Res.* 108, 4116.
- Rothman, L. S., A. Barbe, D. C. Benner, L. R. Brown, C. Camy-Peyret, M. R. Carleer, K. Chance, C. Clerbaux, V. Dana, V. M. Devi, A. Fayt, J.-M. Flaud, R. R. Gamache, A. Goldman, D. Jacquemart, K. W. Jucks, W. J. Lafferty, J.-Y. Mandin, S. T. Massie, V. Nemtchinov, D. A. Newnham, A. Perrin, C. P. Rinsland, J. Schroeder, K. M. Smith, M. A. H. Smith, K. Tang, R. A. Toth, J. V. Auwera, P. Varanasi und K. Yoshino (2003). The HITRAN Molecular Spectroscopic Database: Edition of 2000 including updates through 2001. *HITRAN Special Issue: J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 82, 5–44.
- Rothman, L. S., C. P. Rinsland, A. Goldman, T. Massie, D. P. Edwards, J.-M. Flaud, A. Perrin, C. Camy-Peyret, V. Dana, J.-Y. Mandin, J. Schroeder, A. McCann, R. R. Gamache, R. B. Wattson, K. Yoshino, K. V. Chance, K. W. Jucks, L. R. Brown, V. Nemtchinov und P. Varanasi (1998). The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN atmospheric workstation): 1996 edition. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 60, 665–710.
- Salawitch, R. J., S. C. Wofsy, P. O. Wennberg, R. C. Cohen, J. G. Anderson, D. W. Fahey, R. S. Gao, E. R. Keim, E. L. Woodbridge, R. M. Stimpfle, J. P. Koplów, D. W. Kohn, C. R. Webster, R. D. May, L. Pfister, E. W. Gottlieb, H. A. Michelsen, G. K. Yue, M. J. Prather, J. C. Wilson, C. A. Brock, H. H. Jonsson, J. E. Dye, D. Baumgardner, M. H. Proffitt, M. Loewenstein, J. R. Podolske, J. W. Elkins, G. S. Dutton, E. J. Hintsa, A. E. Dessler, E. M. Weinstock, K. K. Kelly, K. A. Boering, B. C. Daube, K. R. Chan und S. W. Bowen (1994). The diurnal variation of hydrogen, nitrogen and chlorine radicals: Implications for the heterogeneous productions of HNO₂. *Geophys. Res. Lett.* 21, 2551–2554.
- Schneider, M. (2002). *Continuous Observations of Atmospheric Trace Gases by Ground-based FTIR Spectroscopy at Izaña Observatory, Tenerife Island*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6727.
- Schneider, M., T. Blumenstock, M. Chipperfield, F. Hase, W. Kouker, T. Reddmann, R. Ruhnke, E. Cuevas und H. Fischer (2004). Subtropical trace gas profiles determined by ground-based FTIR spectroscopy at Izaña (28°N, 16°W): Five year record, error analysis, and comparison with 3D-CTMs. *Atmos. Chem. Phys.* 4, 5261–5301.
- Schneider, M., T. Blumenstock, F. Hase, M. Höpfner, E. Cuevas, A. Redondas und J. M. Sancho (2003). Ozone Profiles and Total Column Amounts derived at Izaña, Tenerife Island, from FTIR Solar Absorption Spectra, and its Validation by an Intercomparison to ECC-Sonde and Brewer Spectrometer Measurements. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 91, 245–274.
- Steck, T. (2002). Private Mitteilung.

Literaturverzeichnis

- Steck, T., A. Griesfeller, F. Hase und M. Höpfner (2002). Intercomparison of remote sounding instruments: an example of application. NDSC Infrared Working Group Meeting, Boulder, USA, 6-8 May 2002.
- Stiller, G. P. (Hrsg.) (2000). *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm (KOPRA)*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6487.
- Stiller, G. P., M. Höpfner, M. Kuntz, T. von Clarmann, G. Echle, H. Fischer, B. Funke, N. Glatthor, F. Hase, H. Kemnitzer und S. Zorn (1998). The Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm. Part I: Requirements, justification, and model error estimation. *Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds, Beijing, China, 15-17 September 1998*, (Hrsg.) J. Wang, B. Wu, T. Ogawa und Z. Guan, Bd. 3501. 257-268.
- Stiller, G. P., T. von Clarmann, H. Fischer, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, M. Kiefer und M. Milz (2002). *Entwicklung eines Auswerte-Algorithmus und eines Datenverarbeitungssystems für das MIPAS Satellitenexperiment*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6703.
- Taylor, J. R. (1988). *Fehleranalyse; Eine Einführung in die Untersuchung von Unsicherheiten in physikalischen Messungen*. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim.
- Tikhonov, A. (1963). On the solution of incorrectly stated problems and method of regularization. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR 151*, 501-504.
- Tilmes, S., R. Müller, J.-U. Groß, M. Höpfner, G. C. Toon und J. M. Russell III (2003). Very early chlorine activation and ozone loss in the Arctic winter 2002-2003. *Geophys. Res. Lett.* 30.
- Wagner, G., M. Birk, F. Schreier und J.-M. Flaud (2002). Spectroscopic database for ozone in the fundamental spectral regions. *J. Geophys. Res.* 107, 4626.

A Koinzidenzen von FTIR-Messungen und MIPAS-B2-Messungen

	Flug 1	Flug 2	Flug 4	Flug 7
MIPAS-B2:				
Datum	11.2.1995	21./22.3.1995	24.3.1997	27.1.1999
Zeit (UT)	20:19 - 21:49	23:28 - 1:42	19:18 - 20.06	5:41 - 6:16
Koordinaten (in etwa 20 km Höhe)	≈68.3°N, 17°E	≈70.1°N, 20°E	≈70.0°N, 32°E	≈64.6°N, 18°E
FTIR:				
Datum	11.+12.2.1995	21.+22.3.1995	24.+25.3.1997	27.1.1999
Zeit (UT)	≈12 am	≈2 pm + 10 am	≈12 am	≈9 am
Koordinaten (in etwa 20 km Höhe)	≈66.5°N, 20°E	≈67.4°N, 21 + 19°E	≈67.4°N, 21°E	≈65.2°N, 20°E
Geophys. Situation:				
Winter	kalt	kalt	mäßig kalt	warm
Position im Polarwirbel	innerhalb	innerhalb	innerer Rand	Rand
PV _B / PV _{FTIR}	1.11 + 1.12	1.04 + 1.01	1.27 + 1.41	1.06

Tabelle A.1: Koinzidenzen von bodengebundenen FTIR-Messungen und MIPAS-B2-Messungen

B Koinzidenzen von FTIR-Messungen und MIPAS-ENVISAT-Messungen

Messtage	verfügbare Orbits im Umkreis von 1000 km	verfügbare Orbits im Umkreis von 500 km	Abweichung Zeit [h]	Abweichung Ort [° N / ° E]	Abweichung potentielle Vorticity [10 ⁻⁶ Km ² /kgs]
30.1.03	4799	4799	0:55	2,12 / -3,8	-
	4800	-	0:46	2,12 / 21,35	+10
31.1.03	4813	-	1:21	2,12 / -11,7	+5
	4821	-	11:50	2,13 / 8,44	+15
5.2.03	4885	4885	2:35	2,12 / -0,92	-
	4892	4892	8:56	2,13 / -5,94	-
7.2.03	4914	4914	2:04	2,12 / 8,42	-
	4921	4921	9:26	2,13 / 3,4	-
26.2.03	5193	5193	10:21	2,13 / 4,14	-
28.2.03	5214	5214	2:58	2,12 / -6,7	-
	5215	-	1:13	2,12 / 18,45	+5
1.3.03	5235	-	8:54	2,13 / -19,58	-
	5236	5236	10:35	2,13 / 5,57	-
3.3.03	5257	5257	0:33	2,12 / -5,26	-
	5264	-	10:58	2,13 / -10,24	-
5.3.03	5293	5293	9:56	2,13 / -0,9	-
13.3.03	5400	-	3:36	2,12 / -8,84	-5
	5401	-	1:55	2,11 / 16,31	-
15.3.03	-	-	-	-	-
17.3.03	-	-	-	-	-

Tabelle B.1: Koinzidenzen für MIPAS-Messungen um Kiruna innerhalb des Polarwirbels

Messtage	verfügbare Orbits im Umkreis von 1000 km	verfügbare Orbits im Umkreis von 500 km	Abweichung Zeit [h]	Abweichung Ort [° N / ° E]
23.1.03	–	–	–	–
25.1.03	–	–	–	–
27.1.03	–	–	–	–
12.2.03	–	–	–	–
14.2.03	5014	5014	1:41	2,12 / 3,38
	5021	5021	9:57	2,13 / -1,63
15.2.03	5035	–	10:27	2,13 / -9,53
17.2.03	5057	5057	2:36	2,12 / 4,83
24.2.03	5157	5157	2:23	2,12 / -0,23
	5164	5164	9:08	2,13 / -5,2
12.3.03	5386	5386	1:26	2,12 / -0,93
	5393	5393	10:05	2,13 / -5,92
14.3.03	5415	5415	2:01	2,12 / 8,41
	5422	5422	9:19	2,13 / 3,42
19.3.03	–	–	–	–
22.3.03	–	–	–	–
23.3.03	5543	–	0:01	3,28 / -12,05
	5551	–	11:09	2,13 / 7,72
24.3.03	5565	5565	9:17	2,13 / -0,18
26.3.03	–	–	–	–
27.3.03	5601	5601	3:29	2,11 / 6,25
	5608	5608	8:02	2,13 / 1,25
28.3.03	5615	5615	0:50	2,11 / -1,65
31.3.03	5658	5658	3:54	2,12 / -0,21
3.4.03	–	–	–	–
7.4.03	–	–	–	–
10.4.03	–	–	–	–
17.4.03	5901	–	0:09	2,11 / -8,82
19.4.03	5937	5937	6:31	2,14 / -4,49
20.4.03	–	–	–	–
21.4.03	5966	5966	10:47	2,14 / 4,85
23.4.03	5987	5987	0:24	2,11 / -5,94
	5994	–	11:55	2,14 / -10,96
16.5.03	6317	–	2:06	2,12 / 13,45
19.5.03	–	–	–	–
6.6.03	6617	6617	4:40	2,12 / -1,66
	6624	6624	6:50	2,13 / -6,65
18.6.03	6796	6796	10:16	2,13 / -0,11
25.6.03	6889	6889	1:46	2,12 / -0,94
26.6.03	6903	–	0:30	2,12 / -8,84
	6910	–	11:00	2,13 / -13,82
30.6.03	6961	–	5:32	2,12 / 9,84

Tabelle B.2: Koinzidenzen für MIPAS-Messungen um Kiruna außerhalb des Polarwirbels

B Koinzidenzen von FTIR-Messungen und MIPAS-ENVISAT-Messungen

Messtage	verfügbare Orbits im Umkreis von 1000 km	verfügbare Orbits im Umkreis von 500 km	Abweichung Zeit [h]	Abweichung Ort [° N / ° W]
2.1.03	4400	–	4:47	1,5 / -9,16
8.1.03	4486	–	1:38	1,51 / -12,03
9.1.03	4500	–	4:48	1,51 / -4,12
11.1.03	4528	–	1:22	1,51 / 11,69
	4529	–	0:18	1,51 / -13,46
17.1.03	4614	–	1:24	1,51 / 8,81
24.1.03	–	–	–	–
27.1.03	–	–	–	–
29.1.03	4786	4786	4:58	1,51 / 3,06
3.2.03	4858	–	0:47	1,5 / -7,72
10.2.03	–	–	–	–
26.2.03	5187	5187	0:29	1,5 / -1,96
27.2.03	–	–	–	–
1.3.03	–	–	–	–
4.3.03	–	–	–	–
5.3.03	5287	5287	4:28	1,5 / 3,07
7.3.03	5316	–	1:13	1,5 / -6,28
8.3.03	5330	5330	0:42	1,5 / 1,63
10.3.03	5359	–	0:17	-3,29 / -6,55
17.3.03	–	–	–	–
29.3.03	–	–	–	–
31.3.03	–	–	–	–
3.4.03	–	–	–	–
4.4.03	–	–	–	–
5.4.03	–	–	–	–
6.4.03	–	–	–	–
10.4.03	–	–	–	–
11.4.03	–	–	–	–
16.4.03	–	–	–	–
23.4.03	5996	5996	11:23	-8,19 / 1,87
24.4.03	–	–	–	–
25.4.03	–	–	–	–
27.4.03	–	–	–	–
28.4.03	6060	6060	1:32	-3,29 / 3,5

Tabelle B.3: Koinzidenzen für MIPAS-Messungen um Izaña

Messtage	verfügbare Orbits im Umkreis von 1000 km	verfügbare Orbits im Umkreis von 500 km	Abweichung Zeit [h]	Abweichung Ort [° N / ° W]
2.5.03	6117	–	0:11	1,49 / 8,79
3.5.03	–	–	–	–
4.5.03	6146	6146	4:51	1,5 / -0,54
5.5.03	–	–	–	–
8.5.03	6203	–	0:55	1,5 / 5,93
10.5.03	–	–	–	–
11.5.03	6246	–	3:05	-3,29 / 5,66
12.5.03	–	–	–	–
13.5.03	6275	–	1:45	-3,29 / -3,67
15.5.03	–	–	–	–
19.5.03	–	–	–	–
22.5.03	6404	–	1:53	1,45 / -9,14
27.5.03	–	–	–	–
28.5.03	–	–	–	–
30.5.03	–	–	–	–
1.6.03	–	–	–	–
5.6.03	6604	6604	1:16	-0,71 / 1,45
6.6.03	6618	–	1:52	1,5 / 8,82
11.6.03	–	–	–	–
12.6.03	–	–	–	–
13.6.03	–	–	–	–
16.6.03	6769	6769	11:24	-2,27 / 0,35
18.6.03	6790	6790	0:36	-3,29 / 4,23
22.6.03	6847	–	3:54	1,5 / 9,53
23.6.03	6862	–	3:54	1,5 / -7,72
27.6.03	6919	6919	4:21	1,5 / -1,25
29.6.03	–	–	–	–

B Koinzidenzen von FTIR-Messungen und MIPAS-ENVISAT-Messungen

Liste der verwendeten Abkürzungen und Symbole

Abkürzungen

ENVISAT	Environmental Satellite
ESA	European Space Agency (Europäische Raumfahrtbehörde)
FCKW	Fluor-Chlor-Kohlen-Wasserstoff
FTIR	Fourier Transformations Infra Rot
GOME	Global Ozone Monitoring Experiment
GOMOS	Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars
IMK	Institut für Meteorologie und Klimaforschung
INM	Instituto Nacional de Meteorología
IR	InfraRot
IRF	Institutet för Rymdfysik (Institut für Weltraumphysik)
KOPRA	Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm
ILS	Instrumental Line Shape (instrumentelle Linienform)
InSb-Detektor	Indium-Antimonide-Detektor
LINEFIT	Programm zur Inversion des Apparateprofils aus Gaszellenmessungen
MCT-Detektor	Mercury-Cadmium-Telluride-Detektor
MIPAS	Michelson Interferometer für Passive Atmosphärische Sondierung
MIPAS-B2	MIPAS-Ballonversion
MW	Microwindow (Auswertefenster)

NAT	Nitric Acid Trihydrate (Salpetersäure-Trihydrat)
NCEP	National Centers for Environmental Prediction
NDSC	Network for the Detection of Stratospheric Change
NIR	Spektralbereich im nahen InfraRot
OPD	Optical Path Difference
PROFFIT	Programm zur Inversion von Spurengasprofilen aus solaren Absorptionsmessungen
PSC	Polar Stratospheric Cloud (polare stratosphärische Wolke)
SCIAMACHY	SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY
SÜG	StrahlungsÜbertragungsGleichung
UV	Ultra Violetter Spektralbereich
Vis	Spektralbereich im Sichtbaren

Symbole

A	Auflösungsmatrix
$A(x)$	Apodisierungsfunktion
B	Nebenbedingung bei Optimal Estimation
$B(\nu, T_s)$	solare Planckfunktion
$B(\nu, T(z))$	atmosphärische Planckfunktion
χ^2	statistisches Testverfahren
$\vec{\epsilon}$	Rauschen in der Messung
ε	Erwartungswert
η	dynamische Viskosität
$f(\vec{x})$	Vorwärtsfunktion
$\vec{F}(\vec{x})$	Vorwärtsmodell
g	Schwerebeschleunigung
γ	Regularisierungsparameter
E	Einheitsmatrix

$I'(x)$	Intensität der monochromatischen Lichtquelle
$I(x)$	Intensität der polychromatischen Lichtquelle
I_{mess}	gemessenes Interferogramm
k	Wellenzahl
\mathbf{K}	Jacobimatrix
$\kappa(\nu, z)$	Absorptionskoeffizient
λ	Wellenlänge
ν	Frequenz
ν_N	Nyquist-Frequenz
p	Luftdruck
$\phi(k)$	wellenzahlabhängiges Phasenspektrum
ϕ_G	Gravitationspotential der Erde
R	individuelle Gaskonstante
ρ	Dichte
σ	Standardabweichung
$S'(k)$	Spektrum der monochromatischen Lichtquelle
$S(k)$	Spektrum der polychromatischen Lichtquelle
$S(\nu, z_o)$	Strahldichte (Strahlungsenergie pro Zeit-, Flächen- und Raumwinkeleinheit) bei ν
\mathbf{S}_Δ^{-1}	berechnete erwartete Kovarianzmatrix
\mathbf{S}_a	a priori Kovarianzmatrix
\mathbf{S}_y	Kovarianzmatrix der Messung
T	Temperatur
T_s	Temperatur der Sonnenoberfläche
$T(z)$	Temperatur der Atmosphäre
$\tau(\nu, z_o, z)$	optische Dicke der Atmosphäre bei ν zwischen Beobachter und der Höhe z
$\tau(\nu, z_o, \infty)$	optische Dicke der Atmosphäre bei ν zwischen Beobachter und dem oberen Rand der Atmosphäre

v	spezifisches (massebezogenes) Volumen
\vec{v}	Windgeschwindigkeit
\vec{x}	i. a. atmosphärischer Zustandsvektor, n-dimensional
\vec{x}_a	a priori Zustandsvektor
\vec{y}_{mess}	Messvektor, m-dimensional
z	Höhe
z_0	Höhe des Messgeräts

Abbildungsverzeichnis

2.1	Temperaturverlauf in der Erdatmosphäre	4
2.2	Allgemeine Zirkulation der Atmosphäre	7
2.3	Brewer-Dobson-Zirkulation	8
3.1	Aufbau eines FTIR-Spektrometers	14
5.1	Schematische Darstellung von ENVISAT	24
5.2	Messgeometrie von MIPAS	25
5.3	Messprinzip von MIPAS schematisch	26
5.4	Alternierende Nadir/Horizontalgeometriemessungen von SCIAMACHY	29
5.5	Messprinzip von GOMOS	31
7.1	Spektrum von O ₃ (Auswertefenster 1)	46
7.2	Spektrum von O ₃ (Auswertefenster 2)	47
7.3	O ₃ -Säulengehalte in Kiruna	47
7.4	Spektrum von HCl	49
7.5	Spektrum von ClONO ₂ (Fenster 1)	50
7.6	Spektrum von ClO (Fenster 4)	50
7.7	ClONO ₂ -, HCl- und ClO-Säulengehalte in Kiruna	51
7.8	Spektrum von CH ₄	52
7.9	Spektrum von N ₂ O	53
7.10	CH ₄ -Säulengehalte in Kiruna	54
7.11	N ₂ O-Säulengehalte in Kiruna	54
7.12	N ₂ O-Profil	55
7.13	Höhenauflösung von N ₂ O	56
7.14	N ₂ O-Profile im Winter 2001 in Kiruna	56
7.15	N ₂ O-Profile im Winter 2001/2002 in Kiruna	57
7.16	N ₂ O-Profile im Winter 2002/2003 in Kiruna	58
7.17	HCl-Profil	59
7.18	Höhenauflösung von HCl	59
7.19	HCl-Profile im Winter 2001 in Kiruna	60
7.20	HCl-Profile im Winter 2001/2002 in Kiruna	60
7.21	HCl-Profile im Winter 2002/2003 in Kiruna	61
7.22	O ₃ -Profil	62
7.23	Höhenauflösung von O ₃	63
7.24	O ₃ -Profile im Winter 2001 in Kiruna	63
7.25	O ₃ -Profile im Winter 2001/2002 in Kiruna	64
7.26	O ₃ -Profile im Winter 2002/2003 in Kiruna	64

7.27	HNO ₃ -Profil	65
7.28	Höhenauflösung von HNO ₃	66
7.29	HNO ₃ -Profile im Winter 2001 in Kiruna	66
7.30	HNO ₃ -Profile im Winter 2001/2002 in Kiruna	67
7.31	HNO ₃ -Profile im Winter 2002/2003 in Kiruna	67
8.1	Vergleich mit Ozonsonden vom 28.01.2000	70
8.2	Vergleich mit Ozonsonden vom 09.02.2000	70
8.3	Abweichungen der FTIR-Messungen zu den Ozonsonden für Kiruna im Winter 1999/2000	71
8.4	Vergleiche mit Ballonmessungen von N ₂ O vom 22.03.1995	73
8.5	Vergleiche mit Ballonmessungen von N ₂ O vom 27.01.1999	73
8.6	Vergleiche mit Ballonmessungen von HNO ₃ vom 11.02.199	75
8.7	Vergleiche mit Ballonmessungen von HNO ₃ vom 27.01.1999	75
8.8	Vergleiche mit Ballonmessungen von ClONO ₂ vom 11.02.1995	76
8.9	Vergleiche mit Ballonmessungen von ClONO ₂ vom 27.01.1999	76
8.10	Vergleich von Millimeterwellenradiometer und FTIR-Spektrometer	77
8.11	χ^2 -Verteilung des Vergleichs mit 50 synthetischen Spektren	80
8.12	χ^2 -Verteilung des Vergleichs mit 100 synthetischen Spektren	80
9.1	Stratosphärische O ₃ -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna	84
9.2	Betrag der Differenzen der stratosphärischen O ₃ -Säulengehalte von den Original-MIPAS-Daten und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna in Abhängigkeit von der geographischen Länge	85
9.3	Verhältnis zwischen den stratosphärischen O ₃ -Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Kiruna	86
9.4	Stratosphärische O ₃ -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna innerhalb des Polarwirbels	88
9.5	Stratosphärische O ₃ -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna außerhalb des Polarwirbels	89
9.6	Stratosphärische O ₃ -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Izaña	90
9.7	Betrag der Differenzen der stratosphärischen O ₃ -Säulengehalte von den Original-MIPAS-Daten und dem geglätteten MIPAS-Profil über Izaña in Abhängigkeit von der geographischen Länge	91
9.8	Verhältnis zwischen den stratosphärischen O ₃ -Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Izaña	92
9.9	Stratosphärische HNO ₃ -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna	93
9.10	Betrag der Differenzen der stratosphärischen HNO ₃ -Säulengehalte von den Original-MIPAS-Daten und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna in Abhängigkeit von der geographischen Länge	94
9.11	Verhältnis zwischen den HNO ₃ -Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Kiruna	94
9.12	IPV über Kiruna am 28.3.03	95

9.13	Stratosphärische HNO_3 -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna innerhalb des Polarwirbels . . .	96
9.14	Stratosphärische HNO_3 -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Kiruna außerhalb des Polarwirbels . .	97
9.15	Stratosphärische HNO_3 -Säulengehalte von FTIR, Original-MIPAS und dem geglätteten MIPAS-Profil über Izaña	98
9.16	Betrag der Differenzen der stratosphärischen HNO_3 -Säulengehalte von den Original-MIPAS-Daten und dem geglätteten MIPAS-Profil über Izaña in Abhängigkeit von der geographischen Länge	99
9.17	Verhältnis zwischen den HNO_3 -Säulengehalten aus FTIR-Messungen und den Original-MIPAS-Daten über Izaña	99
9.18	Stratosphärische N_2O -Säulengehalte von FTIR und MIPAS über Kiruna .	100
9.19	Stratosphärische CH_4 -Säulengehalte von FTIR und MIPAS über Kiruna . .	101
9.20	Beispiel eines O_3 -Vergleichs mit Daten von MIPAS vom 23.9.02	102
9.21	Beispiel eines O_3 -Vergleichs mit Daten von MIPAS vom 23.9.02 gegen den Druck aufgetragen	103
9.22	Beispiel eines O_3 -Vergleichs innerhalb des Wirbels für Kiruna	104
9.23	IPV über Kiruna am 5.2.03	105
9.24	Abweichungen von O_3 innerhalb des Polarwirbels	106
9.25	Beispiel eines O_3 -Vergleichs außerhalb des Wirbels für Kiruna	107
9.26	Abweichungen von O_3 außerhalb des Polarwirbels	108
9.27	Beispiel eines O_3 -Vergleichs für Izaña	109
9.28	Abweichungen von O_3 für Izaña	110
9.29	Beispiel eines HNO_3 -Vergleichs innerhalb des Wirbels für Kiruna	111
9.30	Abweichungen von HNO_3 für Kiruna	112
9.31	Beispiel eines HNO_3 -Vergleichs außerhalb des Wirbels für Kiruna	113
9.32	Abweichungen von HNO_3 für Kiruna	113
9.33	Beispiel eines HNO_3 -Vergleichs für Izaña	114
9.34	Abweichungen von HNO_3 für Izaña	115
9.35	Beispiel eines N_2O -Vergleichs	116
9.36	Beispiel eines CH_4 -Vergleichs	117
9.37	O_3 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna	120
9.38	Gemittelte O_3 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna . .	121
9.39	Gemittelte O_3 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna innerhalb des Polarwirbels	122
9.40	Gemittelte O_3 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna außerhalb des Polarwirbels	123
9.41	Gemittelte O_3 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Izaña . . .	124
9.42	NO_2 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna 2002	125
9.43	NO_2 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna 2003	126
9.44	NO_2 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna	127
9.45	NO_2 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna innerhalb des Polarwirbels	128
9.46	NO_2 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Kiruna außerhalb des Polarwirbels	129
9.47	Gemittelte NO_2 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Izaña . .	130
9.48	NO_2 -Säulengehalte von FTIR und SCIAMACHY über Izaña	131

Tabellenverzeichnis

6.1	Fehler durch das spektrale Rauschen	38
6.2	Fehler durch die Nichtlinearität des MCT-Detektors	39
6.3	Fehler durch Fehler im verwendeten Temperaturprofil	41
6.4	Fehler durch den Einfluss der Störgase	42
6.5	Fehler durch Glättungsfehler	43
9.1	Anzahl der Messtage und der Koinzidenzen	81
9.2	Mittlere Abweichung und Standardabweichung der stratosphärischen MIPAS-Säulengehalte	87
A.1	Koinzidenzen von FTIR-Messungen und MIPAS-B2-Messungen	145
B.1	Koinzidenzen für MIPAS-Messungen um Kiruna innerhalb des Polarwirbels	146
B.2	Koinzidenzen für MIPAS-Messungen um Kiruna außerhalb des Polarwirbels	147
B.3	Koinzidenzen für MIPAS-Messungen um Izaña	148

