



---

**Forschungszentrum Karlsruhe**  
in der Helmholtz-Gemeinschaft

---

**Wissenschaftliche Berichte**  
FZKA 7016

# **Bestimmung der Apparatefunktion des Fourierspektrometers MIPAS-B2 aus stratosphärischen Spektren**

**A. Lengel**

**Institut für Meteorologie und Klimaforschung**

**Oktober 2004**

**Forschungszentrum Karlsruhe**

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7016

**Bestimmung der Apparatfunktion des  
Fourierspektrometers MIPAS-B2 aus  
stratosphärischen Spektren\***

Anton Lengel

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:0005-070169**

# Bestimmung der Apparatefunktion des Fourierspektrometers MIPAS-B2 aus stratosphärischen Spektren

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN  
von der Fakultät für Physik der  
Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl.-Phys. Anton Lengel  
aus Bamberg

Tag der mündlichen Prüfung: 16.1.2004

Referent: Prof. Dr. H. Fischer

Korreferent: Priv. Doz. Dr. habil. C. E. Blom

# Zusammenfassung

Am Institut für Meteorologie und Klimaforschung wird seit 1995 die zweite Version eines kryogenen, ballongetragenen Fourierspektrometers zur Fernerkundung der Stratosphäre und oberen Troposphäre eingesetzt. Das Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung (MIPAS-B2) mißt mit dem Verfahren der Horizontsondierung Emissionsspektren im mittleren Infrarot-Spektralbereich, in dem zahlreiche klimarelevante Spurengase Signaturen aufweisen. Aus den gemessenen Spektren werden mit Hilfe eines Inversionsverfahrens die Höhenprofile von Spurengaskonzentrationen abgeleitet (Retrieval). Ein Charakteristikum der Spektren ist die Veränderung der ursprünglich vorhandenen Linienform durch das Spektrometer. Diese instrumentelle Eigenschaft wird durch die Instrumenten- oder Apparatfunktion (ILS, engl.: instrumental line shape) beschrieben und äußert sich in den Interferogrammen durch die Veränderung der Modulation.

Ziel dieser Arbeit war es zum einen zu quantifizieren, wie genau die Apparatfunktion bekannt sein muß, damit ihr Einfluß auf die abgeleiteten Volumemischungsverhältnisse (VMR) der Spurengas-Höhenprofile unter 1 % bleibt. Zum anderen sollte ein Verfahren entwickelt werden, mit dem es möglich ist, die Apparatfunktion von MIPAS-B2 mit der erforderlichen Genauigkeit zu bestimmen.

Rechnungen mit simulierten Spektren haben ergeben, daß für die geforderte Genauigkeit der VMR-Werte die Halbwertsbreite der Instrumentenfunktion wellenzahlabhängig auf ca. 1.7 – 3 % genau bestimmt werden muß. Oberhalb dieser Grenze muß beim Retrieval die Regularisierung so stark erhöht werden, daß eine Reduzierung der Höhenauflösung von Temperatur- und Spurengasprofilen von über 20 % auftreten kann.

Zur ILS-Bestimmung wurde ein Entfaltungsverfahren entwickelt, mit dem gleichzeitig aus allen Linien in einem kleinen Wellenzahlfenster die Apparatfunktion berechnet werden kann. Dies ist notwendig, da fast überall in den Spektren die Linien sehr dicht auftreten. Das mittlere Signal/Rauschverhältnis über das Entfaltungsfenster dient dabei als Anhaltspunkt, wo die Linien-Intensität in den

Spektren für die Entfaltung ausreicht. Unter bestimmten Voraussetzungen kann aus den einzelnen Wellenzahlfenstern eine wellenzahlunabhängige charakteristische Modulationsfunktion berechnet werden, die für den ganzen spektralen Kanal Gültigkeit besitzt. Damit wurde ein Verfahren geschaffen, das den Fehler der daraus berechneten Instrumentenfunktion vermindert. Gleichzeitig ermöglicht die charakteristische Modulationsfunktion die Parametrisierung der ILS des ganzen Kanals, wodurch diese für eine beliebige Wellenzahl des Kanals angegeben werden kann.

Eine Reihe von Testrechnungen zeigt, wie die ermittelte Apparatfunktion vom Rauschen und von den Ungenauigkeiten in den für die Entfaltung verwendeten Temperatur- und VMR-Profilen abhängt. Rauschen ist in den einzelnen Fenstern dann von Bedeutung, wenn der gemittelte Wert des Signal/Rauschverhältnisses 2 oder weniger beträgt. Bei neueren Meßflügen wird dieser Wert für genügend viele Bereiche in allen Kanälen überschritten. Der Fehler der Halbwertsbreite durch Ungenauigkeiten in den Profilen bleibt bei realistischen Annahmen unter 2 %. Mit Verwendung der charakteristischen Modulationsfunktion kann er sogar unter 1 % gesenkt werden.

Für die untersuchten MIPAS-B2-Flüge zeigt sich, daß die Apparatfunktion selten mehr als 1 % von der theoretischen Halbwertsbreite eines homogen ausgeleuchteten Interferometers abweicht. Dies demonstriert den sehr guten Justierungszustand des Instruments. Sollte in zukünftigen Meßflügen eine größere Abweichung auftreten, so muß die berechnete ILS beim Retrieval der VMR-Profile angegeben werden. Durch die Anwendung der beschriebenen Verfahren wird auch in diesem Fall der Einfluß der Apparatfunktion auf die VMR-Werte unter 1 % gehalten.

# Abstract

## **Determination of the instrumental line shape of the Fourier spectrometer MIPAS-B2 from stratospheric spectra**

Since 1995 the second version of a cryogenic, balloon-borne Fourier-transform spectrometer has been used for remote sensing of the stratosphere and upper troposphere at the Institute for Meteorology and Climate research. The Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS-B2) measures limb emission spectra in the mid-infrared spectral range. In this region many signatures of trace gases are located which are relevant for the earth's climate. Vertical profiles have been retrieved from the measured spectra by means of an inversion method. A feature of these spectra is the change of the original line shape due to the spectrometer. This instrumental property is described with the instrumental line shape (ILS). Its influence can also be seen in the interferograms where the modulation is changed.

The aim of this work was to quantify the influence of the ILS on the retrieved volume mixing ratios (VMRs) of the trace gas profiles and to keep this influence below 1 %. Furthermore a method to calculate the ILS of MIPAS-B2 with the required accuracy was developed.

Calculations with artificial spectra show that for the required accuracy of the VMRs the ILS has to be determined with an accuracy of approximately 1.7 – 3 % (wavenumber dependent) in the full width half maximum (FWHM). Above that threshold the regularization during the retrieval has to be increased. This can lead to a degradation of height resolution of more than 20 % for temperature and trace gas profiles.

For determination of the ILS a deconvolution method has been developed which calculates the instrumental line shape from all lines within a microwindow simultaneously. Such a method is necessary because lines are densely accumulated in almost every spectral region. The average signal-to-noise ratio in the deconvolution window serves as an indicator for the presence of enough line intensity to apply the

deconvolution method. Under certain conditions, a single wavenumber-independent characteristic modulation function can be calculated from the spectral microwindows. This function is valid for the whole spectral channel. Thus, a method was created which allows to reduce the error of the ILS if calculated from that function. The characteristic modulation function also allows a description for the ILS with only few parameters. Thus, the ILS can be given for any wavenumber in the whole spectral channel.

A series of test calculations shows the ILS dependencies on spectral noise and uncertainties of temperature and VMR profiles which are required for the deconvolution method. The impact of noise becomes significant, if the average signal-to-noise ratio is 2 or less. In recent flights this threshold was exceeded for a sufficient number of spectral ranges in every channel. The FWHM error induced by inaccuracies of the profiles stays below 2 % for realistic assumptions. Using the characteristic modulation function this error can be reduced to less than 1 %.

The instrumental line shape in the considered MIPAS-B2 flights differs rarely more than 1 % from the theoretical FWHM of an interferometer with an evenly illuminated field stop. This shows the very good adjustment of the instrument. In case of increasing deviations during future flights, the calculated ILS must be taken into account in the retrieval of the VMR profiles. Also in this case the application of the described methods keeps the influence of the instrumental line shape on the retrieved volume mixing ratios below 1 %.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Historie</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Das Fourierspektrometer MIPAS-B2</b>	<b>3</b>
2.1	Das Interferometer . . . . .	3
2.2	Dewaroptik und Detektoren . . . . .	5
2.3	Die Optik von MIPAS-B2 . . . . .	6
2.4	Die Meßgeometrie . . . . .	7
2.5	Der Ballon als Meßplattform . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Grundlagen der interferometrischen Spektroskopie</b>	<b>10</b>
3.1	Interferogramme und Spektren . . . . .	10
3.1.1	Interferometer mit infinitesimal kleinem Gesichtsfeld . . . . .	12
3.1.2	Definition der Apparatefunktion (ILS) . . . . .	13
3.1.3	Interferometer mit endlich großem Gesichtsfeld . . . . .	14
3.1.4	Definition der Modulationsfunktion . . . . .	19
3.1.5	Apparate- und Modulationsfunktion in der komplexen Ebene	21
3.1.6	Interferometer mit homogener Ausleuchtung und Interferometerbedingung . . . . .	22
3.2	Einführung der Charakteristischen Modulationsfunktion (CM) . . . . .	24
3.3	Apodisation . . . . .	26
3.4	Phasenkorrektur und Kalibrierung . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Ableitung von Vertikalprofilen aus Spektren</b>	<b>30</b>
4.1	Strahlungstransfer . . . . .	30
4.2	Inversion von Vertikalprofilen . . . . .	32
<b>5</b>	<b>Empfindlichkeit des Retrievals auf die Apparatefunktion</b>	<b>37</b>
5.1	Erzeugung der verzerrten Testspektren . . . . .	37
5.2	Ergebnisse des Retrievals mit Tikhonov-Phillips-Regularisierung . . . . .	39
5.2.1	Retrieval der Temperatur . . . . .	39
5.2.2	Retrieval von $\text{HNO}_3$ . . . . .	46

5.2.3	Retrieval von N <sub>2</sub> O . . . . .	50
5.2.4	Retrieval von NO <sub>2</sub> . . . . .	56
5.2.5	Retrieval bei asymmetrischer ILS . . . . .	60
5.3	Fazit der Retrievaltests . . . . .	61
<b>6</b>	<b>Methoden zur ILS-Bestimmung</b>	<b>63</b>
6.1	Bestimmung der ILS mit Hilfe von Gaszellen . . . . .	63
6.2	Bestimmung der ILS aus isolierten Linien . . . . .	64
6.3	Entfaltung der ILS aus vielen Linien . . . . .	64
6.4	Wahl des Verfahrens . . . . .	65
<b>7</b>	<b>Die Entfaltungsmethode zur Gewinnung der Apparatefunktion</b>	<b>66</b>
7.1	Faltung und Entfaltung . . . . .	66
7.2	Realisierung der Entfaltung . . . . .	68
7.2.1	Erzeugung der unapodisierten Spektren . . . . .	68
7.2.2	Temperatur und Spurengase der Vorwärtsrechnung . . . . .	69
7.2.3	Vorwärtsrechnung der ungefalteten Spektren . . . . .	69
7.2.4	Die Entfaltungsprozedur . . . . .	70
7.2.5	Die Glättungen in der Entfaltungsprozedur . . . . .	71
7.3	Bestimmung der Charakteristischen Modulationsfunktion . . . . .	74
<b>8</b>	<b>Einflüsse auf die Entfaltungsmethode und resultierende Fehler</b>	<b>75</b>
8.1	Angabe zur Durchführung der Rechnungen . . . . .	75
8.2	Systematische Fehler der Methode . . . . .	76
8.2.1	Beschränkung auf ein kleines Wellenzahlfenster . . . . .	76
8.2.2	Effekte bei einer Polynomannpassung der Modulationsfunktion	81
8.3	Fehler durch die Eingangsdaten . . . . .	83
8.3.1	Einfluß verrauschter Spektren . . . . .	83
8.3.2	Einfluß ungenauer Profildaten . . . . .	86
8.3.3	Einfluß ungenauer spektroskopischer Daten . . . . .	89
8.4	Fehler der ILS der Charakteristischen Modulationsfunktion . . . . .	91
8.4.1	Einfluß von Rauschen auf die CM . . . . .	91
8.4.2	Einfluß fehlerhafter Temperatur auf die CM . . . . .	95
8.4.3	Einfluß eines fehlerhaften H <sub>2</sub> O-Profiles auf die CM . . . . .	95
8.4.4	Zusammenfassung und Beurteilung der Fehler . . . . .	96
<b>9</b>	<b>Die Apparatefunktion des Fourierspektrometers MIPAS-B2</b>	<b>100</b>
9.1	Vorgehensweise . . . . .	100
9.2	Einzelergebnisse der Entfaltung ausgewählter Flüge . . . . .	101
9.3	Die Charakteristische Modulationsfunktion von MIPAS-B2 . . . . .	103
9.4	LINEFIT-Ergebnisse . . . . .	109

9.5 Weitere MIPAS-B2-Meßflüge . . . . .	110
<b>10 Schlußbemerkungen und Ausblick</b>	<b>113</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>116</b>
<b>A Die Fouriertransformation</b>	<b>121</b>
<b>B Faltung bei eingeschränktem Spektralbereich</b>	<b>123</b>
<b>C Stützstellensynchronisierung</b>	<b>125</b>
<b>D Gemittelte S/N-Spektren</b>	<b>127</b>
<b>E CM-Polynomfitergebnisse</b>	<b>129</b>
<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>132</b>
<b>Verzeichnis der Abkürzungen</b>	<b>135</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>137</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>139</b>
<b>Danksagung</b>	<b>140</b>
<b>Lebenslauf</b>	<b>141</b>



# Kapitel 1

## Einleitung und Historie

Im Laufe der Geschichte der Fourierspektroskopie wurde eine Vielzahl von Konstruktionen entwickelt, aber letztendlich gehen alle Zweistrahl-Interferometer, die heute in der Spektroskopie eingesetzt werden, auf die Konstruktion von Michelson [29] zurück. Rayleigh [31] erkannte, daß für die Beobachtung einer Spektrallinie eine Fouriertransformation der gemessenen Interferogramme nötig ist. Zur Umgehung der numerischen Berechnung konstruierte Michelson einen mechanischen, harmonischen Synthesizer aus 80 Rädern, Hebeln und Federn, die an einen Schreiber gekoppelt waren. Dies war sozusagen der erste Fourier-Transformations-Computer, wenn auch mechanisch und mit nur 80 Eingangskanälen.

Das erste echte Interferogramm wurde 1911 von Rubens und Wood [35] veröffentlicht, die ein Interferometer benutzen mußten, weil die zu messende Ferninfrarot-Strahlung zu stark von einem Quarzprisma absorbiert wurde. Es war allerdings kein Michelson-Interferometer, sondern es beobachtete die Interferenz, wie sie bei Newtonringen auftritt.

In den folgenden 40 Jahren wurden vor allem die Gitterspektrometer verwendet. Damals fehlte ein wirklich hochauflösendes Gerät, bis Jacquinet [20] und Fellgett [7] um 1950 zwei wichtige Vorteile eines Interferometers erkannten. Erstens ist der Energiedurchsatz größer als bei einem Spektrometer, das das Licht monochromatisch aufspaltet. Zweitens ergibt die gleichzeitige Messung eines Frequenzbereichs, wie sie beim Interferometer erfolgt, ein größeres Signal/Rauschverhältnis bei sonst gleichen Bedingungen. Dies ist der Multiplex- oder nach dem oben erwähnten Entdecker genannte Fellgett-Vorteil.

Das erste kommerzielle Michelson-Interferometer wurde erst über ein Jahrzehnt später in England im Jahre 1964 verkauft.

Etwa zur gleichen Zeit arbeitete John W. Tukey an einem Algorithmus zur schnelleren Berechnung der Fouriertransformation. Den Programmierauftrag bekam das IBM-Forschungszentrum in Yorktown Heights, wo die Aufgabe an James W. Cooley gegeben wurde. Nach Abschluß des Projektes häuften sich die Nachfragen nach Ko-

pion und schriftlicher Dokumentation des Programms so sehr, daß schließlich 1965 der dadurch berühmt gewordene Cooley-Tukey-Algorithmus [4] veröffentlicht wurde.

Von da an stieg die Zahl der Fourierspektrometer in der Forschung stark an. Die immer leistungsfähigeren Rechner, die zudem immer günstiger wurden, beschleunigten dies zusätzlich. Heute ist die Fourierspektroskopie aus der chemischen Analyse nicht mehr wegzudenken, vor allem in der Fernerkundung, wo man auf optische Methoden angewiesen ist.

Seit der Entdeckung des antarktischen Ozonlochs 1985 (Farman et al. [6]) wurden vermehrt die chemische Zusammensetzung der Stratosphäre und die darin ablaufenden Prozesse untersucht. Um höhenaufgelöste Erkenntnisse über diese oberhalb der Troposphäre liegende Atmosphärenschicht zu bekommen, sind fernerkundliche Methoden wie die Fourierspektroskopie ideal geeignet. Die dort vorhandenen Moleküle senden aufgrund ihrer Rotationen und Vibrationen ständig Infrarotstrahlung mit einem charakteristischen Spektrum aus, welches mit geeigneten Detektoren ohne Eingriff in die Prozesse beobachtbar ist. Am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) wurden Zweistrahl-Interferometer entwickelt, die präzise Messungen der infraroten (IR-) Emissionsstrahlung dieser Spurengase ermöglichen (Fischer, [9], Fischer und Oelhaf, [10]). Eines davon ist MIPAS-B2 (Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung, 2. Ballonversion), welches für Messungen aus der Gondel eines Stratosphärenballons ausgelegt wurde.

Das Spektrum besteht aus einer Vielzahl von sich zum Teil überlagernden Linien, die jeweils einem der vorhandenen Spurengase zugeordnet werden können. Um daraus die Konzentrationen der einzelnen Gase zu ermitteln, ist die Auflösung und damit die Form der Linien im gemessenen Spektrum von entscheidender Bedeutung. Zur ins Gerät eingestrahlten Linienform, die hauptsächlich vom Druck und der Temperatur des Spurengases abhängt, kommt noch die Veränderung durch das Spektrometer selbst. Diese instrumentelle Linienformveränderung heißt Apparatefunktion. Beim Zweistrahl-Interferometer wird sie durch den maximalen Wegunterschied der beiden Strahlengänge und durch die Größe und Form des Gesichtsfeldes bestimmt. Sie läßt sich aus theoretischen Ansätzen angeben, kann aber bei der Messung durch thermische Effekte (Dejustierung) davon abweichen.

Die vorliegende Arbeit zeigt zunächst die physikalischen Grundlagen der Fourierspektroskopie und die mathematischen Zusammenhänge. Es wird dann beschrieben, wie aus den Spektren die Höhenprofile ermittelt werden und wie stark diese von der Apparatefunktion abhängen. Danach wird ein Verfahren vorgestellt, das es ermöglicht, die Apparatefunktion aus den gemessenen atmosphärischen Spektren zu erhalten und dessen Eigenschaften untersucht. Schließlich wird die Apparatefunktion von verschiedenen Meßflügen von MIPAS-B2 dargestellt.

## Kapitel 2

# Das Fourierspektrometer MIPAS-B2

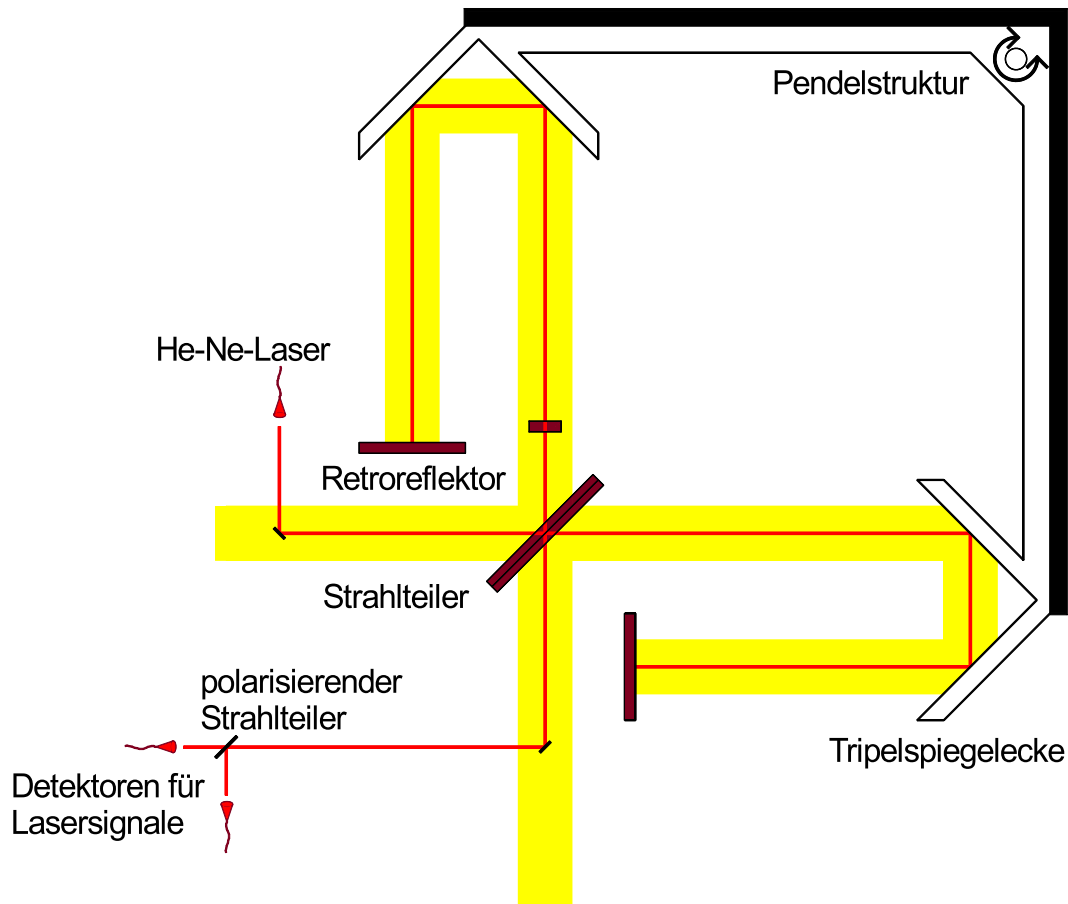
Ausgehend von den Erfahrungen mit den vorhergehenden Modellen MIPAS-B1 und MIPAS-FT (MIPAS- "Flugzeug" TRANSALL) konnte 1995 ein weiterentwickeltes Michelson-Doppelpendel-Interferometer fertiggestellt werden, das speziell an den Einsatz mit einem Stratosphärenballon angepaßt ist (Friedl-Vallon et. al., [12]).

### 2.1 Das Interferometer

Bei einem Michelson-Interferometer wird das einfallende Licht durch einen Strahlteiler in zwei Teilstrahlen aufgeteilt und über Spiegel zumeist am gleichen Strahlteiler wieder zusammengeführt. Durch Änderung der optischen Wege der beiden interferierenden Teilstrahlen ändert sich die Intensität des interferierenden Lichts und kann als Interferogramm aufgezeichnet werden.

Bei MIPAS-B2 wurde ein Doppelpendel-Interferometer eingebaut, bei dem die beiden Tripelspiegelecken zusammen drehbar um den Strahlteiler montiert sind (Abbildung 2.1). Die Retroreflektoren (Planspiegel) sind unterhalb des Strahlteilers auf dem Strahlteilerblock fest montiert. Diese Konstruktion ist sehr unempfindlich gegenüber Nick- und Rollschwingungen der Gondel, was bei einem Ballonflug unerlässlich ist. Zudem hat diese Anordnung den Vorteil eines 8-fachen Gangunterschieds im Vergleich zur mechanischen Wegstrecke einer der Spiegelecken. Die leichte Dreh- und Querbewegung der Ecken ist durch die Konstruktion selbst schon ausgeglichen (s. Steel, [38]). Damit läuft jeder Lichtstrahl bei jeder Stellung des Pendels genau in sich zurück, eine korrekte Justierung und präzise gearbeitete Bauelemente vorausgesetzt.

Im Tripelspiegel beispielsweise können die Wellenfronten des einlaufenden Lichtes eine Verkippung erleiden, die eine Mißweisung zur Folge hat. Da sich die Wellenfrontverkippung bei Abweichung von der optimalen Einstrahlrichtung vergrößert, müssen die Tripelspiegel sehr genau gearbeitet sein. Für einen Gangunterschied von  $\pm 15$  cm müssen sich die Spiegelecken um nur  $\pm 1.9$  cm bewegen, bei einem Hebelarm



**Abb. 2.1:** Prinzipaufbau des Doppelpendel-Interferometers.

In Wirklichkeit befinden sich die Retroreflektoren und der He-Ne-Laser in einer Ebene unterhalb des Strahlteilers. Der Laser wird für die Längenmessung der optischen Wegdifferenz der beiden Teilstrahlen benötigt.

von 22.4 cm entspricht dies einer Drehung von ca.  $5^\circ$ . Im ungünstigsten Fall ergäbe sich für beide Tripelspiegel zusammen eine Wellenfrontverkipfung von 10 Bogen Sekunden (entspricht  $48 \mu\text{rad}$ ), was bei  $2000 \text{ cm}^{-1}$  einen Verlust von 25 % in der hochpaßgefilterten Intensität des Interferogramms ausmacht (Fenske und Kraenz, [8], Phase-B-Studie (Kayser-Threde), [2]). Ebenso können Planitätsfehler der einzelnen Flächen zu Verzerrungen der Wellenfronten führen. In dieser Arbeit kann jedoch gezeigt werden, daß der Intensitätsverlust bei MIPAS-B2 hauptsächlich durch den Einfluß des Gesichtsfeldes zustande kommt.

Abweichend vom gezeigten Aufbau und Strahlengang in Abbildung 2.1 befinden



sich die Retroreflektoren des Interferometers in Wirklichkeit am Strahlteilerblock in einer Ebene unterhalb des Strahlteilers (siehe Abbildung 2.2). Um genau die Wegdifferenz und Bewegungsrichtung der Tripelspiegel festzustellen, ist ein Längenmeßsystem eingebaut, welches mit Hilfe eines zirkular polarisierten Helium-Neon-Lasers arbeitet. Genaueres hierzu findet man in Kimmig [21].

Der Strahlteiler selbst besteht bei MIPAS-B2 aus einer dünnen, strahlteilenden Mehrfachbeschichtung, die auf KCl aufgetragen ist, ein Substrat, welches sowohl im Sichtbaren als auch im Infraroten transparent ist. Eine zweite Substratschicht wird benötigt, um die Lichtwege der beiden Teilstrahlen dispersiv identisch zu halten (Kompensationsplatte). Damit durchlaufen die Lichtstrahlen auf beiden Wegen insgesamt vier Mal eine Substratschicht. Die beiden Platten des Strahlteilers müssen leicht keilförmig sein, damit Interferenzen innerhalb der Platten, wie bei einem Fabry-Pérot-Interferometer, vermieden werden.

## 2.2 Dewaroptik und Detektoren

Nach Durchlaufen des Interferometers wird der IR-Strahl auf vier Detektoren fokussiert, die sich innerhalb eines mit flüssigem Helium (LHe) gekühlten Kryostaten (Dewar) befinden. Dichroitische Strahlteiler lenken das Licht der vier verschiedenen Spektralbereiche (Kanäle) auf die zugehörigen Detektoren. In Tabelle 2.1 sind die Bereiche der Kanäle und die wichtigsten darin auswertbaren Spurengase aufgelistet. Im gekühlten Dewar befinden sich auch die entscheidenden Blenden für die

Kanal	Spektralbereich [ $\text{cm}^{-1}$ ]	Quantifizierbare Spurengase
1	765–986	$\text{CO}_2$ , $\text{HNO}_3$ , $\text{ClONO}_2$ , $\text{ClO}$ , $\text{CCl}_4$ , $\text{HNO}_4$ , $\text{CFCl}_3$ , $\text{CF}_2\text{Cl}_2$ , $\text{CHF}_2\text{Cl}$ , $\text{SF}_6$
2	1130–1525	$\text{O}_3$ , $\text{N}_2\text{O}$ , $\text{N}_2\text{O}_5$ , $\text{CH}_4$ , $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{HDO}$ , $\text{HOCl}$ , $\text{COF}_2$ , $\text{CF}_4$
3	1577–1758	$\text{NO}_2$ , $\text{H}_2\text{O}$
4	1873–1940	$\text{NO}$

**Tabelle 2.1:** Die Kanäle des MIPAS-B2 Instruments und die darin bestimmbaren Spurengase. Die Wellenzahlbereiche beziehen sich auf Flug 10, der in Kiruna (Nordschweden) Anfang 2001 durchgeführt wurde. Die  $\text{CO}_2$ -Signaturen im Kanal 1 werden zur Ableitung des Temperaturprofils genutzt.

Definition des Gesichtsfeldes und der Apertur. Die letztere befindet sich am Abbild der äußeren Apertur und unterdrückt die instrumentelle Eigenstrahlung, also das Licht der bis hierhin vorhandenen warmen Aperturblenden und Spiegelfassungen.

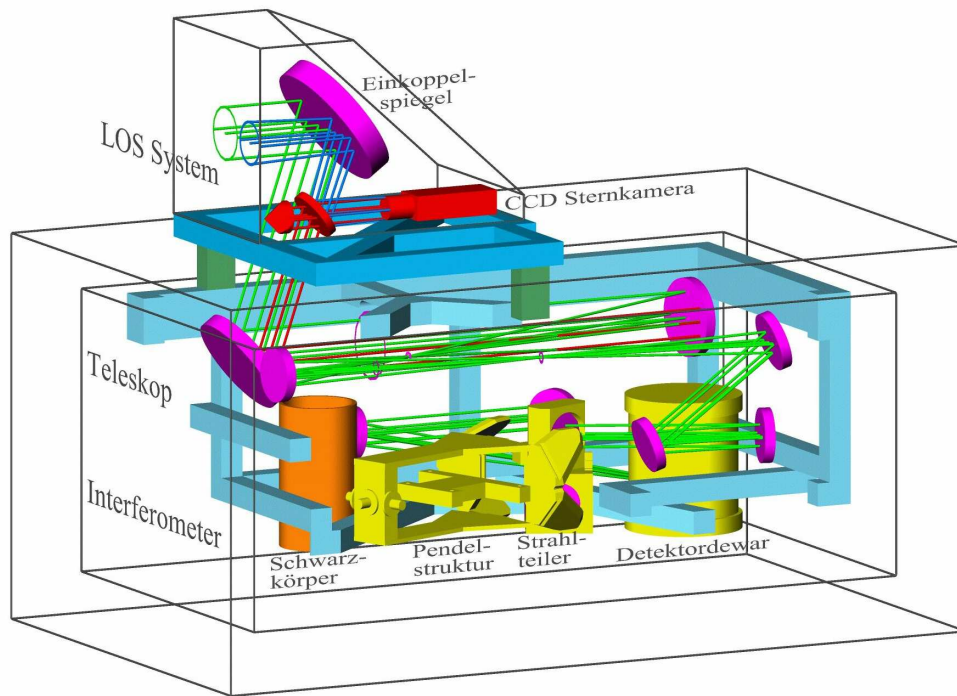
Die Gesichtsfeldblende befindet sich in der Brennebene des ersten sphärischen Spiegels nach dem Interferometer und schneidet aus dem Strahlenbündel jenes heraus, welches bis zu einem maximalen Neigungswinkel  $\alpha_{max}$  von der optischen Achse abweicht. Die Blende muß im Fokus positioniert sein, da sich sonst die Unschärfe des Blendenrandes über das Teleskop auf das äußere Gesichtsfeld übertrüge. Außerdem würde dadurch eine unnötige Verbreiterung oder Verformung des Apparateprofils eintreten. Hierauf wird in Abschnitt 3.1.2 ff., in denen der Einfluß des Gesichtsfeldes auf das Apparateprofil hergeleitet wird, näher eingegangen.

Die verbleibende Winkelverteilung des IR-Strahlenbündels muß nun möglichst vollständig von den Detektoren registriert werden. Im Infraroten sind hierfür Si:As-BIB-Detektoren geeignet, wobei Si:As für Arsen-dotiertes Silizium und BIB für 'Blocked Impurity Band', also gesperrtes Störstellenband steht (siehe hierzu Szmulowicz und Madarsz [36]). Diese Detektoren bestehen nicht aus einem dotierten Siliziumwürfel, sondern zeichnen sich durch eine Schichtstruktur aus. Eine dieser Schichten, die Sperrschicht, ist mehrere Mikrometer dünn und aus hochreinem Silizium. Sie verhindert, daß Elektronen ohne Anregung durch die Schichten fließen. Dieser Aufbau hat den Vorteil von vernachlässigbar kleinem thermischen Rauschen. Der Detektor kann somit größer gewählt werden als der erwartete Bereich des IR-Bündels, ohne zusätzliches Rauschen zu erzeugen. Diese Konstruktion stellt sicher, daß hierdurch keine Verformung des Apparateprofils auftritt.

## 2.3 Die Optik von MIPAS-B2

Die Gesamtkonstruktion des Sensors inklusive des Strahlengangs ist in Abbildung 2.2 dargestellt, sie läßt sich in drei Ebenen einteilen:

- Warmraumebene: Hier befindet sich der Einkoppelspiegel (auch Scanspiegel genannt), der das Einstellen der Sichtlinie auf die gewünschte Tangentialhöhe ermöglicht und störende Gondelschwingungen ausgleicht. Diese Ebene hat ständig die Umgebungstemperatur, im Gegensatz zu den anderen Ebenen, die vor dem Start mit Trockeneis oder flüssigem Stickstoff auf ca. 200 K abgekühlt werden, um die Eigenemission des Instruments zu reduzieren.
- Teleskopebene: Das Teleskop dient zur Anpassung des äußeren Gesichtsfeldes an den maximal erlaubten Neigungswinkel des Interferometers. Dies entspricht der Erhaltung der Etendue (Durchsatz des Instruments). Blenden unterdrücken das Störlicht von außen und das Streulicht aus der Warmraumebene.
- Interferometerebene: Hier befinden sich schließlich das Doppelpendel-Interferometer, ein Schwarzkörper und das Dewar, in dem die Detektoren und die Blende, die das Gesichtsfeld des Instruments bestimmt, untergebracht sind.



**Abb. 2.2:** Sensorkonstruktion mit Strahlengang.

Der Strahlengang des atmosphärischen Lichts ist grün; rot und blau sind der Blick der Sternkamera (selbst in rot) nach draußen bzw. nach innen auf die Gesichtsfeldblende eingezeichnet.

Der im oberen Teil in violett eingezeichnete Scanspiegel läßt sich auch nach unten drehen, so daß ein Blick in den für die Kalibrierung wichtigen Schwarzkörper (orange-farben in der Zeichnung) möglich ist. Die unterhalb des Scanspiegels eingebaute Sternkamera (rot) blickt mit einem kleinen Strahlteiler und einem Tripelprisma gleichzeitig in die Atmosphäre und ins Instrument. Die um die erste Gesichtsfeldblende angebrachten Leuchtdioden ermöglichen es, aus den Sternaufnahmen die zentrale Blickrichtung und damit auch die Sichtlinie der Messungen zu bestimmen.

## 2.4 Die Meßgeometrie

Messungen vom Boden aus sind für die Untersuchung der stratosphärischen Chemie nicht optimal geeignet. Durch die Troposphäre muß vollständig „hindurchgeschaut“ werden, was aufgrund des höheren Druckes, dem die Moleküle in tieferen Atmosphärenschichten ausgesetzt sind, zu einem sehr breiten Sockel der Linien führt (Druck-

verbreiterung). Besonders störend sind dabei die enormen Mengen von Wasserdampf in der Troposphäre. Der Weg durch die Atmosphäre ist zudem relativ kurz, so daß der Anteil der Strahldichte pro Atmosphärenschicht und damit die Information gering ist. Bei entsprechender Auflösung und genügendem Signal/Rauschverhältnis ist es trotzdem möglich, aus solchen Messungen Informationen über die Stratosphäre zu bekommen (Hase [16]), allerdings nur mit geringer Höhenauflösung von ca. 10 km. Der Vorteil hier liegt im langfristigen Monitoring der Atmosphäre.

Um einen langen Weg in einer bestimmten Schicht der Stratosphäre zu bekommen, ist es am günstigsten, sich oberhalb dieser Schicht zu befinden und mit einer negativen Elevation in diese tangential hineinzuschauen (s. Abbildung 2.3). In diesem Fall kommt der größte Anteil der Strahlung und damit auch der Information aus der tiefsten Schicht des Sehstrahls (oberhalb der Tangentenhöhe). Günstige Meßplattformen sind also Stratosphärenflugzeug, -ballon und Satellit.

Prinzipiell hat man die Möglichkeiten in Absorption (Sonnen-, Mond- und Sternokkultation) und in Emission zu messen. Gegen einen hellen Hintergrund messen hat den Vorteil, daß keine Probleme mit der Intensität zu erwarten sind. Man ist jedoch in Zeit und Richtung an das entsprechende Objekt gebunden. Bei der Detektion der Eigenemission der Moleküle sind Zeit und Richtung frei wählbar, die Strahlungsleistung ist aber mit Emissionstemperaturen um 200 K sehr gering, so daß die Meßzeiten länger sind.

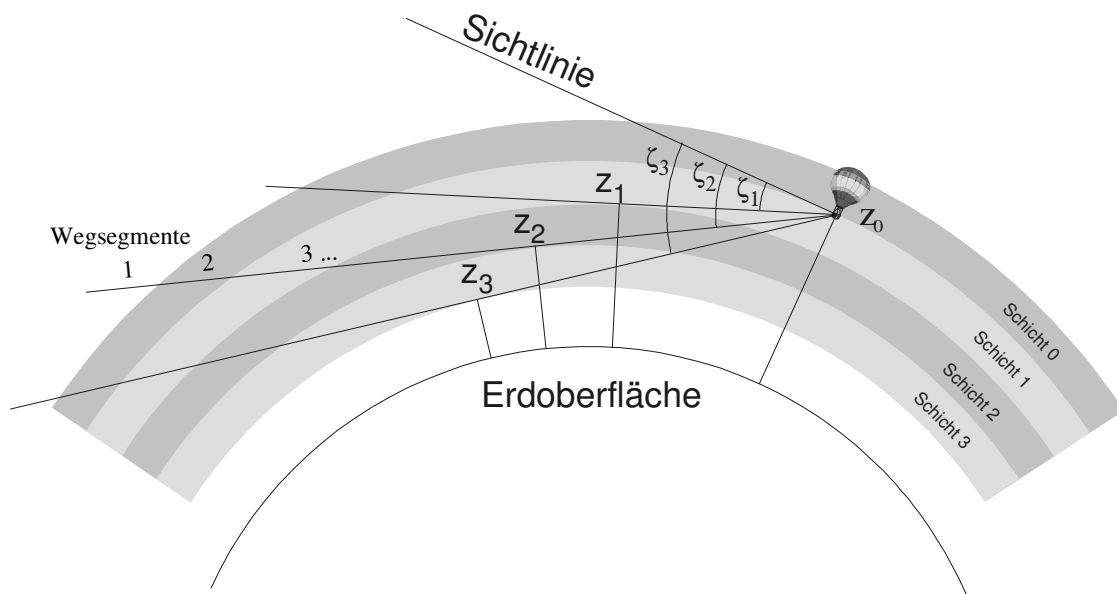
Durch schrittweise Variation des Elevationswinkels kann nun die Atmosphäre Schicht für Schicht vermessen werden. Die kleinste Elevation entspricht dabei theoretisch einem Sehstrahl, der genau die Erdoberfläche tangiert. Unter normalen Umständen ist aber nur eine Messung bis zur Wolkenobergrenze möglich. Diese Methode wird als Horizontsondierung (engl.: limb sounding) bezeichnet.

Bedingt durch den langen Weg des Sehstrahls steht dem Vorteil der sehr guten vertikalen Auflösung der Nachteil der begrenzten horizontalen Auflösung gegenüber.

## 2.5 Der Ballon als Meßplattform

Hierbei hängt das in eine Gondel eingebaute Instrument mit einem ca. 100 m langen Bifilarseil ("flight-train") an einem Stratosphärenballon. Da der Ballon den Windscherungen der Atmosphärenschichten ausgesetzt ist, werden immer wieder Schwingungen angeregt. Um diese Pendelbewegungen auszugleichen, muß die Sichtlinie stabilisiert werden. Ein an Bord befindliches AHRS (Attitude and Heading Reference System) gibt mit einer Frequenz von 128 Hz die genaue Lage der Gondel an. Der um eine horizontal liegende Achse drehbare Scanspiegel kann damit so geregelt werden, daß die Bewegungen der Gondel kompensiert werden können.

Die azimutale Blickrichtung wird durch das Pivot eingestellt, eine Konstruktion bestehend aus einem Motor und Trägheitsgewichten, die in der Aufhängung direkt



**Abb. 2.3:** Meßgeometrie vom Ballon bei der Horizontsondierung. Eingezeichnet sind mehrere Sichtlinien negativer Elevation durch die Erdatmosphäre.  $z_i$  sind die Tangentenpunkte zu den Elevationswinkeln  $\zeta_i$ .

über der Gondel eingebaut sind. Das erzeugte Drehmoment wird nach oben durch die Bifilare an den Ballon weitergegeben, der durch seine riesige Ausdehnung und Reibung dadurch kaum eine Bewegung vollführt. Ein Regelkreis mit einer Wiederholungsfrequenz von 8 Hz stabilisiert die Gondel in dieser Ausrichtung.

Die Raumkoordinaten der Gondel und die zugehörige Zeit werden mit Hilfe von GPS-Daten (Global Positioning System) bestimmt. Eine Sternkamera, die in die gleiche Richtung wie das Teleskop des Instruments blickt, erfährt einen Teil des Sternhimmels. Zusammen mit Daten aus Sternkatalogen läßt sich bei nächtlichen Messungen nachträglich die Sichtlinie auf eine Bogenminute und damit die Tangentenhöhe auf 150 m ( $3\sigma$ ) genau angeben (Maucher [28]).

## Kapitel 3

# Grundlagen der interferometrischen Spektroskopie

Im folgenden wird ausführlich darauf eingegangen, wie Interferogramme aufgenommen und daraus Spektren erzeugt werden, wobei besonderes Augenmerk auf die Rolle des Apparateprofils (auch Apparatefunktion genannt) gelegt wird.

### 3.1 Interferogramme und Spektren

Aus den Maxwell-Gleichungen wird die Wellengleichung für die elektrische Feldstärke gewonnen.<sup>1</sup> Die Lösung kann als Überlagerung von ebenen monochromatischen Wellen dargestellt werden. Betrachten wir also zunächst eine Welle bestimmter Frequenz  $f = \omega/2\pi$  und Wellenzahl  $\nu = 1/\lambda = k/2\pi$ , deren elektrische Feldstärke dann wie folgt beschrieben werden kann:

$$E(x_E, t) = E_0 \cos(2\pi\nu x_E - 2\pi f t) = E_0 \cos(kx_E - \omega t) \quad (3.1)$$

mit:  $E_0$ : Amplitude der elektrischen Feldstärke  
 $x_E$ : Ort  
 $t$ : Zeit  
 $k$ : Wellenvektor (hier eindimensional)

Im Interferometer wird das elektrische Feld gemäß den Reflexions- und Transmissionseigenschaften des Strahlteilers aufgespalten und nach Durchlaufen der beiden Interferometerarme wieder zusammengeführt. Es wird angenommen, daß die Koeffizienten hierfür auf den beiden Wegen  $x_1$  und  $x_2$  gleich sind ( $R$  bzw.  $T_g$  bezeichnen

---

<sup>1</sup>Man erhält auch eine magnetische Feldstärke, die jedoch zum Verständnis des Interferometers nicht benötigt wird.

das Reflexions- bzw. Transmissionsvermögen der Strahlungsenergie). Für die recombinierte, elektrische Feldstärke  $E_{rekomb}$  ergibt sich:

$$E_{rekomb}(x_{1,2}, t) = \sqrt{RT_g} E_0 \cos(kx_1 - wt) + \sqrt{RT_g} E_0 \cos(kx_2 - wt) \quad (3.2)$$

$$= 2\sqrt{RT_g} E_0 \cos\left(\frac{kx_1 - kx_2}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{kx_1 + kx_2 - 2wt}{2}\right) \quad (3.3)$$

$$= E_{res}(x_1, x_2) \cdot \cos\left(\frac{k}{2}(x_1 + x_2) - wt\right) \quad (3.4)$$

Der mit der Zeit  $t$  schwingende Anteil befindet sich in Gleichung 3.3 nur noch im Argument des zweiten Kosinus, d.h. die Vorfaktoren, die in Gleichung 3.4 mit  $E_{res}$  zusammengefaßt wurden, müssen als Amplitude der resultierenden Welle aufgefaßt werden, die nach wie vor von den Wegen  $x_1$  und  $x_2$  abhängt. Die resultierende Intensität  $I_{res}$  ergibt sich aus der Energiedichte, die proportional zum Quadrat der Feldstärke  $E_{res}$  ist:

$$I_{res}(x_1, x_2) \sim E_{res}^2(x_1, x_2) = 4RT_g E_0^2 \cos^2\left(\frac{kx_1 - kx_2}{2}\right) \quad (3.5)$$

$$= 2RT_g E_0^2 (1 + \cos(k(x_1 - x_2))) \quad (3.6)$$

$$= I_{DC} + 2RT_g E_0^2 \cos(k(x_1 - x_2)) \quad (3.7)$$

In Gleichung 3.7 wurde das Ergebnis in einen konstanten Anteil ( $I_{DC}$ ) und einen modulierten aufgespalten. Bei der Messung kann der konstante Anteil des Signals leicht durch einen Hochpaßfilter entfernt werden. Die Amplitude des modulierten Anteils enthält, abgesehen von den Koeffizienten  $R$  und  $T_g$ , welche durch die Eigenschaften des Instruments bestimmt werden, nur die Energiedichte  $E_0^2$  der einfallenden Strahlung, die in der eindimensionalen Beschreibung proportional zur spektralen Strahldichte  $S_0(\nu)$  ist. Die Ortsabhängigkeit ist nur im Argument des Kosinus' vorhanden. Mit dem Gangunterschied  $x := x_1 - x_2$  ergibt sich dann für die eindimensionale, hochpaßgefilterte Intensität bei der Wellenzahl  $\nu = k/2\pi$ :

$$I(x, \nu) \sim S_0(\nu) \cos(2\pi\nu x) \quad (3.8)$$

Der Proportionalitätsfaktor faßt dabei die Verluste aufgrund von Spiegeln und Strahlteiler sowie den Wirkungsgrad des Detektors zusammen und wird durch die Kalibrierung entfernt.

Um die meßbare Intensität zu erhalten, muß noch über die Wellenzahl, die Apertur und das Gesichtsfeld integriert werden. Das Produkt der beiden letzten Größen bezeichnet man als Etendue. Es beschreibt den „Intensitätsdurchsatz“ des Instruments aufgrund des optischen, geometrischen Aufbaus.

Das Integral über die Apertur ergibt nur einen konstanten Vorfaktor, der bei der Kalibrierung ebenso wie die instrumentellen Verluste verschwindet und deshalb nicht betrachtet wird.

Das Gesichtsfeld wird zunächst in den folgenden Betrachtungen als infinitesimal klein angenommen. In Abschnitt 3.1.3 wird dann der Effekt eines endlich großen Gesichtsfeldes hergeleitet.

### 3.1.1 Interferometer mit infinitesimal kleinem Gesichtsfeld

Die im letzten Abschnitt erhaltene Intensität hängt im allgemeinen von der Wellenzahl  $\nu$  ab. Um von der monochromatischen Welle zu einem Wellenzahlbereich überzugehen, integriert man über das ganze eingestrahlte Wellenzahlspektrum. Die Wellen verschiedener Frequenzen können jedoch gegeneinander in der Phase verschoben sein,<sup>2</sup> weshalb noch eine wellenzahlabhängige Phasenverschiebung  $\phi(\nu)$  beachtet werden muß. Das Ergebnis ist das Interferogramm  $I_{inf}$  eines Interferometers mit infinitesimal kleinem Gesichtsfeld:

$$I_{inf}(x) = \int_0^{\infty} S_0(\nu) \cos(2\pi\nu x + \phi(\nu)) d\nu \quad (3.9)$$

$$= \int_0^{\infty} \frac{S_0(\nu)}{2} (e^{i(2\pi\nu x + \phi(\nu))} + e^{-i(2\pi\nu x + \phi(\nu))}) d\nu \quad (3.10)$$

$$= \int_0^{\infty} \frac{S_0(\nu)}{2} e^{i\phi(\nu)} e^{i2\pi\nu x} d\nu + \int_0^{\infty} \frac{S_0(\nu)}{2} e^{-i\phi(\nu)} e^{-i2\pi\nu x} d\nu \quad (3.11)$$

Im zweiten Integral der Gleichung 3.11 kann das Minuszeichen zur Wellenzahl  $\nu$  assoziiert und als negative Frequenz interpretiert werden. Dazu müßten auch  $S_0(\nu)$  und  $\phi(\nu)$  auf den noch nicht definierten negativen Bereich erweitert werden. Zusammen mit dem Phasenfaktor  $e^{-i\phi(\nu)}$  kann aber auch ein komplexes Spektrum definiert werden, welches dann gleichzeitig Strahldichte und Phase der Wellenzahl  $\nu$  enthält.

$$S_{inf}(\nu) := \frac{1}{2} S_0(\nu) e^{i\phi(\nu)} \quad (3.12)$$

$$S_{inf}(-\nu) := \frac{1}{2} S_0(\nu) e^{-i\phi(\nu)} = S_{inf}^*(\nu) \quad (3.13)$$

Somit bekommt der negative und positive Wellenzahlbereich jeweils die Hälfte der Energie. Das Integral (also das Interferogramm) bleibt jedoch trotz des komplexen Integranden reell.

$$I_{inf}(x) = \int_0^{\infty} S_{inf}(\nu) e^{i2\pi\nu x} d\nu + \int_0^{\infty} S_{inf}(-\nu) e^{-i2\pi\nu x} d\nu \quad (3.14)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} S_{inf}(\nu) e^{i2\pi\nu x} d\nu \in \mathbb{R} \quad (3.15)$$

---

<sup>2</sup>Z.B. durch eine Ungleichheit der Strahlteiler- und Kompensationsplatte im Interferometer.



Dieser Zusammenhang bildet nun die bekannte Fourieranalyse, deren Umkehrung gut bekannt und aufgrund fortgeschrittener Rechenleistung heutiger Computer in der diskreten Form leicht durchzuführen ist.  $S_{inf}(\nu)$  heißt Fouriertransformierte von  $I_{inf}(x)$  und läßt sich schreiben als:

$$S_{inf}(\nu) = FT[I_{inf}(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} I_{inf}(x)e^{-i2\pi\nu x} dx \quad (3.16)$$

Das gemessene Interferogramm wird immer eine endliche Länge besitzen, also nach einem maximalen Wegunterschied  $x_{max} = L$  abgebrochen werden. Dies entspricht einer Multiplikation des unendlich ausgedehnten Interferogramms mit einer Rechteckfunktion, die im Meßbereich konstant eins und außerhalb davon null ist, im folgenden mit  $R_L(x)$  bezeichnet. Es ergibt sich das Spektrum  $S_{inf,L}$ , mit dem Einfluß der endlichen Interferogrammlänge  $L$ :

$$S_{inf,L}(\nu) = FT[R_L(x) \cdot I_{inf}(x)] = FT[R_L(x)] \otimes FT[I_{inf}(x)] \quad (3.17)$$

Hier wurde der Faltungssatz der Fouriertransformation angewandt, der es erlaubt, die Fouriertransformierte eines Produkts in die Faltung der Fouriertransformierten der einzelnen Faktoren umzuwandeln (siehe auch Anhang A). Die Transformierte des Rechtecks ergibt die sinc-Funktion, die in dieser Arbeit als  $\text{sinc}(x) = \sin(x)/x$  definiert wird. Als Spektrum aus einem Interferometer mit infinitesimal kleinem Gesichtsfeld erhält man somit:

$$S_{inf,L}(\nu) = 2L \text{sinc}(2\pi L\nu) \otimes S_{inf}(\nu) \quad (3.18)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} 2L \text{sinc}(2\pi L(\nu - \hat{\nu})) S_{inf}(\hat{\nu}) d\hat{\nu} \quad (3.19)$$

In Wirklichkeit kann  $I_{inf}(x)$  nur diskret gemessen werden, was aber in bezug auf das Apparateprofil keine Rolle spielt, da die diskreten Transformationsformeln ganz entsprechend gelten. Die diskrete Aufnahme von Meßpunkten beschränkt jedoch die meßbare Frequenz nach oben bis zu einer Grenze, welche als Nyquistfrequenz bezeichnet wird. Darüberliegende Frequenzen werden in den meßbaren Bereich hineingespiegelt (sog. Aliasing). Deshalb muß unbedingt auf eine korrekte „Kanaltrennung“ (Filter) geachtet werden, damit immer nur Frequenzen aus einer Alias-Ordnung zur Messung in einen Kanal gelangen.

Da die Fouriertransformation auf ein endliches Interferogramm angewandt wird, wird das berechnete Spektrum ebenso diskret wie das gemessene Interferogramm.

### 3.1.2 Definition der Apparatefunktion (ILS)

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, daß das gemessene Spektrum bei einem Interferometer mit  $OPD_{max} = L$  aus einer Faltung des ursprünglichen Spektrums  $S_{inf}$

mit einer skalierten sinc-Funktion entsteht. Dies bedeutet aber, daß die Linien des gemessenen Spektrums nicht mehr mit denen des ursprünglichen übereinstimmen. Beim realen Instrument wird die ursprüngliche Linie nicht nur von der endlichen Interferogrammlänge, sondern auch durch eine eventuelle Dejustierung der Optik, das Gesichtsfeld und andere Größen verändert. Ganz allgemein kann das Abbild einer  $\delta$ -Funktion im gemessenen Spektrum als Apparatfunktion oder -profil bezeichnet werden. Diese kann auch durchaus von der Wellenzahl abhängen wie im nächsten Abschnitt zu sehen sein wird. Wir definieren deshalb die Wirkung auf eine  $\delta$ -Funktion als Apparatfunktion ILS (von engl. "Instrumental Line Shape") des Fouriertransformationspektrometers FTS:

$$\text{wahres Spektrum} \quad \delta(\nu - \nu_0) \xrightarrow{\text{FTS}} \text{ILS}(\nu - \nu_0, \nu_0) \quad \text{gemessenes Spektrum}$$

Dabei soll das Spektrum korrekt kalibriert sein, d.h. die eingestrahlte Energie der Linie (pro Fläche und Raumwinkel), die dem Integral über die Wellenzahl entspricht, bleibt unverändert.

Für das Interferometer mit infinitesimal kleinem Gesichtsfeld des letzten Abschnittes ergibt sich somit als Apparatfunktion:

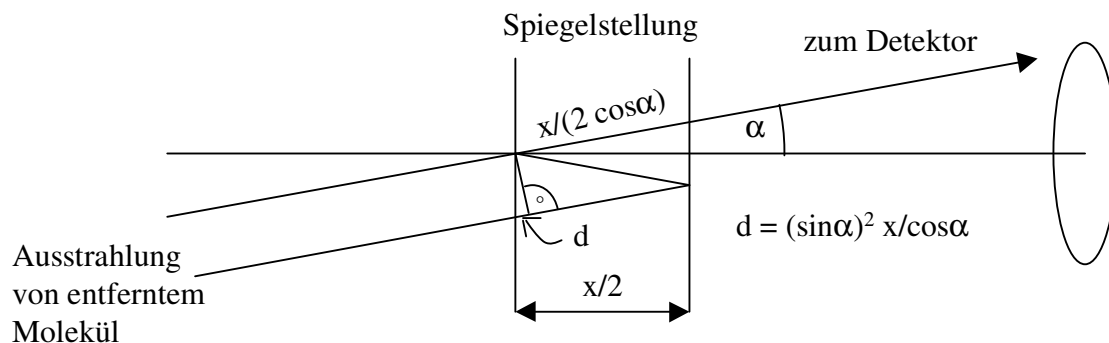
$$\text{ILS}_{inf}(\nu) = 2L \text{sinc}(2\pi L\nu) \quad (3.20)$$

In diesem Sonderfall ist keine Abhängigkeit von  $\nu_0$  vorhanden, das Apparatprofil ist also für alle Wellenzahlen des zu messenden Spektrums gleich. Es hat die Form einer sinc-Funktion der Höhe  $2L$  und der Halbwertsbreite  $1.207/(2L)$ . Die erste Nullstelle liegt bei  $1/(2L)$ . Dieser Wert ergibt die spektrale Auflösung des Instruments und entspricht dem Abstand der spektral unabhängigen Punkte.

Trotz der diskreten Spektren muß die ILS als kontinuierliche Funktion angesehen werden. Bei einer Linie, deren Wellenzahl z.B. zwischen zwei Stützstellen des Gitters liegt, werden die Punkte dieser Linie auf dem gedachten kontinuierlichen Verlauf der Apparatfunktion liegen.

### 3.1.3 Interferometer mit endlich großem Gesichtsfeld

In der Praxis haben die Gesichtsfeldblenden einen von null verschiedenen Durchmesser, um eine gewisse Strahlungsintensität detektieren zu können. Damit werden aber auch Strahlen bis zu einer maximalen Neigung  $\alpha_{max}$  zur optischen Achse in das Instrument gelassen und gemessen. Der nun winkelabhängige Gangunterschied  $x(\alpha)$  ist für geneigte Strahlen jedoch, wie in Abbildung 3.1 zu sehen ist, ein wenig kleiner als bei denen, die parallel zur optischen Achse verlaufen. Zusätzlich kann sich die Intensität für verschiedene Einstrahlrichtungen ändern. Zur Berechnung des Interferogramms muß deshalb die Intensität  $I_{inf}$  über den sichtbaren Raumwinkel



**Abb. 3.1:** Schematische Darstellung geneigter Einstrahlung bei einem Interferometer mit endlich großem Gesichtsfeld. Der Gangunterschied der geneigten Strahlen ist kürzer als auf der optischen Achse gemessen. Es ist  $x(\alpha) = \frac{3x}{2\cos\alpha} - \frac{x}{\cos\alpha}\sin^2\alpha - \frac{x}{2\cos\alpha} = x\cos\alpha$ .

$\Omega$  integriert werden. Betrachten wir zunächst aus dem Spektrum  $S_{inf}$  nur eine monochromatische Linie der Wellenzahl  $\nu_0$ , die im Interferogrammraum als komplexe Exponentialfunktion erscheint und das infinitesimale Interferogramm  $dI_{inf}$  erzeugt:

$$dI_{inf} = FT^+[S_{inf}(\nu)\delta(\nu - \nu_0)] = S_{inf}(\nu_0)e^{i2\pi\nu_0x} \quad (3.21)$$

$$dI(x, \nu_0) = \frac{1}{2\pi\eta_0} \int_{\Omega} \eta(\alpha, \varphi) S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi\nu_0x(\alpha)} d\Omega \quad (3.22)$$

$FT^+$  in der ersten Zeile ist hierbei die inverse Fouriertransformation nach Anhang A. In der zweiten Zeile wird mit  $d\Omega = \sin\alpha d\varphi d\alpha$  über den Raumwinkel  $\Omega$  integriert.  $\eta(\alpha, \varphi)$  ist dabei eine Gewichtungsfunktion für den Strahlungsbeitrag aus der Richtung  $(\alpha, \varphi)$ . Mit wachsendem Gesichtsfeld steigt die Intensität an und verbessert so das Signal/Rauschverhältnis.

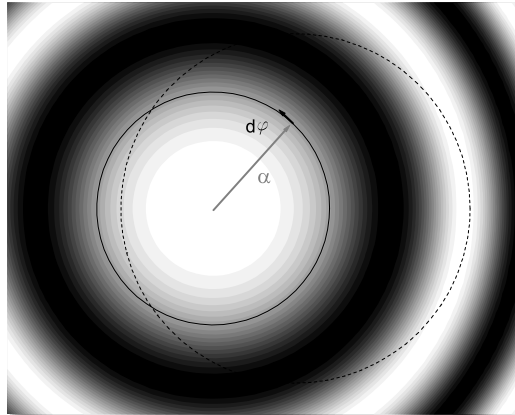
Der Vorfaktor  $2\pi$  wurde zur Normierung der Gewichtungsfunktion eingeführt:

$$2\pi\eta_0 = \int_{\Omega} \eta(\alpha, \varphi) d\Omega \quad (3.23)$$

Zusammen mit dem Gangunterschied  $x(\alpha) = x\cos\alpha$  mit  $\alpha \in [0, \alpha_{max}]$  ergibt sich aus Gleichung 3.22 für die Intensität:

$$dI(x, \nu_0) = \frac{1}{2\pi\eta_0} \int_0^{\alpha_{max}} \int_0^{2\pi} \eta(\alpha, \varphi) d\varphi S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi\nu_0x\cos\alpha} \sin\alpha d\alpha \quad (3.24)$$

Das Integral über  $\varphi$  enthält außer der Integrationsvariablen nur noch den Winkel  $\alpha$ . Da das Integral auf einem Kreis mit Radius  $\alpha$  um die optische Achse verläuft,



**Abb. 3.2:** Simulierte Intensitätsverteilung an der Gesichtsfeldblende im Dewar.

Durch den verkürzten Gangunterschied der geneigten Strahlen entstehen Haidinger-Ringe. Für die Gesamtintensität wird das Gesichtsfeld mit der Gewichtungsfunktion multipliziert und in Polarkoordinaten integriert. Dabei kann die tangentielle Integration über  $\varphi$  (dünner, schwarzer Kreis) durch die gemittelte Gewichtung  $\bar{\eta}(\alpha)$  ersetzt werden. Der gestrichelte Kreis zeigt ein Beispiel für das Gesichtsfeld bei dejustierter Optik.

läßt es sich – abgesehen vom Faktor  $2\pi$  – als gemittelte Gewichtung der Neigung  $\alpha$  interpretieren. Wir definieren deshalb

$$\bar{\eta}(\alpha) := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \eta(\alpha, \varphi) d\varphi \quad . \quad (3.25)$$

Abbildung 3.2 zeigt die Intensitätsverteilung an der Gesichtsfeldblende. Der kleinere Gangunterschied der geneigten Strahlen erzeugt Haidinger-Ringe. Der dünne, schwarze Kreis entspricht der Integration über  $\varphi$ , dessen Ergebnis mit  $\bar{\eta}(\alpha)$  ausgedrückt wurde. Eine eventuelle Dejustierung der optischen Achse ist in der Abbildung mit dem gestrichelten Kreis demonstriert. Die nicht mehr im Gesichtsfeld liegenden Teile der Haidinger-Ringe ergäben für die betroffenen Neigungen  $\alpha$  eine verminderte mittlere Gewichtung  $\bar{\eta}(\alpha)$ .

Für die Intensität ergibt sich mit obiger Definition:

$$dI(x, \nu_0) = \frac{1}{\eta_0} \int_0^{\alpha_{max}} \bar{\eta}(\alpha) S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu_0 \cos \alpha} \sin \alpha \, d\alpha \quad (3.26)$$

Der im Exponenten auftretende Kosinus kann mit  $\nu = \nu_0 \cos \alpha$  substituiert werden. Die Integrationsgrenzen und das Differential  $d\nu = -\nu_0 \sin \alpha \, d\alpha$  des Integrals werden

entsprechend angepaßt.

$$dI(x, \nu_0) = \frac{1}{\eta_0} \int_{\nu_0 \cos \alpha_{max}}^{\nu_0} \bar{\eta}(\alpha(\nu, \nu_0)) S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu} \frac{-1}{\nu_0} d\nu \quad (3.27)$$

$$= \frac{1}{\eta_0 \nu_0} \int_{\nu_0 \cos \alpha_{max}}^{\nu_0} \bar{\eta}(\alpha(\nu, \nu_0)) S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu} d\nu \quad (3.28)$$

$$= FT^+ \left[ \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu, \nu_0) S_{inf}(\nu_0) \right] \quad (3.29)$$

Für Gleichung 3.29 wurde die Integration ins Unendliche ausgedehnt und die Funktion  $\bar{\eta}(\nu, \nu_0) := \bar{\eta}(\alpha(\nu, \nu_0))$  entsprechend außerhalb des Intervalls  $[\nu_0 \cos \alpha_{max}, \nu_0]$  als null definiert.<sup>3</sup> Damit wurde die Integration über das Gesichtsfeld in eine Integration über die Wellenzahl  $\nu$  des angegebenen Intervalls transformiert. Die von der optischen Achse abweichenden Strahlenbündel haben somit eine scheinbar kleinere Wellenzahl, und das Interferogramm besteht aus einer Frequenzmischung des Wellenzahlintervalls  $[\nu_0 \cos \alpha_{max}, \nu_0]$  mit der Gewichtung  $\bar{\eta}$ .

Analog zu Gleichung 3.15 erkennen wir in 3.29 als Argument der Fouriertransformation das Spektrum mit integriertem Gesichtsfeld, welches noch aufgrund des endlichen Gangunterschieds  $L$  wie in Gleichung 3.18 mit der sinc-Funktion gefaltet werden muß. Damit ergibt sich das gemessene Spektrum einer monochromatischen Einstrahlung der Wellenzahl  $\nu_0$ :

$$S_L(\nu, \nu_0) = 2L \operatorname{sinc}(2\pi L\nu) \otimes \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu, \nu_0) S_{inf}(\nu_0) \quad (3.30)$$

Um die ursprünglich eingestrahlte Welle der Gleichung 3.21 zu erkennen, verschieben wir die Gewichtungsfunktion  $\bar{\eta}$  auf den Nullpunkt der Wellenzahlachse. Dies entspricht der Faltung mit einer Dirac-Funktion der Wellenzahl  $\nu_0$ .

$$\bar{\eta}(\nu, \nu_0) = \bar{\eta}(\nu + \nu_0, \nu_0) \otimes \delta(\nu - \nu_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\eta}(\nu + \nu_0 - \hat{\nu}, \nu_0) \delta(\hat{\nu} - \nu_0) d\hat{\nu} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} S_L(\nu, \nu_0) &= 2L \operatorname{sinc}(2\pi L\nu) \otimes \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu + \nu_0 - \hat{\nu}, \nu_0) \delta(\hat{\nu} - \nu_0) d\hat{\nu} S_{inf}(\nu_0) \\ &= 2L \operatorname{sinc}(2\pi L\nu) \otimes \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu + \nu_0, \nu_0) \otimes \delta(\nu - \nu_0) S_{inf}(\nu_0) \end{aligned} \quad (3.32)$$

Im rechten Faltungsfaktor erkennen wir nun wieder die monochromatische Welle von Gleichung 3.21. Der gesamte vordere Teil ist eine Veränderung der  $\delta$ -Linie und kann

---

<sup>3</sup>Der Betrag von  $\nu_0$  im Nenner ist notwendig, da sich für  $\nu_0 < 0$  die Integrationsgrenzen vertauschen, aber die der FT definitionsgemäß  $(-\infty, +\infty)$  lauten müssen.

somit als Apparatfunktion identifiziert werden.  $S_{inf}(\nu_0)$  selbst hängt nicht von  $\nu$  ab und geht somit in die Faltungen nur als konstanter Faktor ein. Für die ILS eines Interferometers mit endlich großem Gesichtsfeld ergibt sich dadurch:

$$ILS(\nu, \nu_0) = 2L \operatorname{sinc}(2\pi L\nu) \otimes \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu + \nu_0, \nu_0) \quad (3.33)$$

$$= 2L \operatorname{sinc}(2\pi L\nu) \otimes \frac{1}{|\nu_0|} V(\nu, \nu_0) \quad (3.34)$$

In Gleichung 3.35 wurde die Verteilungsfunktion  $V$  eingeführt, die wir folgendermaßen definieren:<sup>4</sup>

$$V(\nu, \nu_0) := \begin{cases} \frac{1}{\eta_0} \bar{\eta}(\alpha(\nu + \nu_0, \nu_0)) & , \quad -\nu_0(1 - \cos \alpha_{max}) < \nu < 0 \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.35)$$

Vergleicht man Gleichung 3.35 mit der ILS des infinitesimalen Gesichtsfeldes in Gleichung 3.20, so sieht man, daß eine Faltung mit der Verteilungsfunktion hinzugekommen ist. Die ursprüngliche  $\delta$ -Funktion wird bei festem  $\alpha_{max}$  mit steigender Wellenzahl  $\nu_0$  immer breiter. Der Vorfaktor  $1/|\nu_0|$  sorgt dabei für eine konstante integrale Fläche dieses Faltungsterms. Solange allerdings  $V$  auf der  $\nu$ -Achse schmal im Vergleich zur sinc-Funktion ist, wird die Faltung mit  $V$  über  $\nu$  kaum merklich sein (z.B. in Kanal 1 des MIPAS-B2 Instruments). Bei großen Wellenzahlen  $\nu_0$  bestimmt die Ausdehnung von  $V$  die Breite der ILS. Eine geeignete Wahl von  $\alpha_{max}$  ist deshalb wichtig für die erreichbare Auflösung des Instruments und führt zur sogenannten Interferometerbedingung, die später noch erläutert wird.

Das gesamte Spektrum ergibt sich erst nach Integration aller monochromatischen Einzelfrequenzen der Wellenzahlen  $\nu_0$ . Die Faltung der ILS mit der Dirac-Funktion über  $\nu$  kann dabei sofort wieder aufgelöst werden:

$$S(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} ILS(\nu, \nu_0) \otimes \delta(\nu - \nu_0) S_{inf}(\nu_0) d\nu_0 \quad (3.36)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} ILS(\nu - \nu_0, \nu_0) S_{inf}(\nu_0) d\nu_0 \quad (3.37)$$

Diese Formulierung ist allgemeingültig, da die ILS als Abbild einer Dirac-Funktion definiert wurde und jedes eingestrahlte Spektrum als Überlagerung monochromatischer Wellen dargestellt werden kann. Das Integral läßt sich nicht als Faltung schreiben, da  $\nu_0$  nicht nur mit dem Argument  $(\nu - \nu_0)$  in die ILS eingeht, sondern diese selbst noch von  $\nu_0$  abhängt.

---

<sup>4</sup>Für negatives  $\nu_0$  müssen die Ungleichheitszeichen entsprechend umgedreht werden.  
Zur Erinnerung:  $\nu = \nu_0 \cos \alpha(\nu, \nu_0) \Rightarrow \alpha(\nu + \nu_0, \nu_0) = \arccos((\nu + \nu_0)/\nu_0)$

### 3.1.4 Definition der Modulationsfunktion

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, wie sich die Veränderung vom eingestrahnten zum gemessenen Spektrum mit Hilfe der Apparatefunktion ILS beschreiben läßt. Diese ist eine Funktion im Spektralraum; der Einfluß auf das Spektrum manifestiert sich jedoch schon im Interferogrammraum. Ausgehend von Gleichung 3.29 können wir mit Hilfe des Verschiebungssatzes der Fouriertransformation (Anhang A) das Interferogramm der Wellenzahl  $\nu_0$  so umformen, daß die ursprünglich eingestrahlte Welle zu erkennen ist:

$$\begin{aligned} dI(x, \nu_0) &= FT^+ \left[ \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu, \nu_0) \right] \cdot S_{inf}(\nu_0) \\ &= FT^+ \left[ \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu + \nu_0, \nu_0) \right] \cdot S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu_0} \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$= FT^+ \left[ \frac{1}{|\nu_0|} V(\nu, \nu_0) \right] \cdot S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu_0} \quad (3.39)$$

Auch hier wurde wieder die in Gleichung 3.35 definierte Verteilungsfunktion  $V$  verwendet. Man beachte, daß das Interferogramm – abgesehen von den durch die linke Seite festgelegten Größen  $x$  und  $\nu_0$  – nur noch von der instrumentell bedingten Verteilungsfunktion  $V$  abhängt. Diese hängt wiederum über die gemittelte Gewichtung  $\bar{\eta}$  nur noch von der Gesichtsfeldgewichtung  $\eta$  ab.

Beachten wir noch den endlichen Gangunterschied  $L$ , so kann das Interferogramm einer monochromatischen Linie für ein Interferometer mit endlich großem Gesichtsfeld geschrieben werden als:

$$dI_L(x, \nu_0) = R_L(x) \cdot FT^+ \left[ \frac{1}{|\nu_0|} V(\nu, \nu_0) \right] \cdot S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu_0} \quad (3.40)$$

Im hinteren Teil erkennen wir durch den Vergleich mit Gleichung 3.21 die monochromatische Linie der Wellenzahl  $\nu_0$ . Die ursprüngliche Intensität  $S_{inf}(\nu_0)$  wird durch den gesamten vorderen Teil der Formel moduliert. Ähnlich zu einer Schwebung zweier Frequenzen ist hier die Mischung eines ganzen Frequenzintervalls als Modulation des monochromatischen Signals  $S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu_0}$  dargestellt.

Dieser im Ortsraum dargestellte Zusammenhang läßt sich verallgemeinern: Sei  $IFG_\delta$  ein Interferogramm, welches aus einer monochromatischen Linie entstand und  $IFG_\delta(0, \nu_0)$  der Wert beim Gangunterschied null, so definieren wir die normierte Veränderung entlang des Gangunterschieds als Modulationsfunktion  $MOD$  der Wellenzahl  $\nu_0$ :

$$MOD(x, \nu_0) := \frac{IFG_\delta(x, \nu_0)}{IFG_\delta(0, \nu_0) e^{i2\pi x \nu_0}} \quad (3.41)$$

Es ist folgendes festzuhalten:

- Die Normierung der Modulationsfunktion auf den Wert bei  $x = 0$  statt auf  $S_{inf}(\nu_0)$  macht diese unabhängig von der ursprünglichen Intensität der Linie. Damit ist auch immer  $MOD(0, \nu_0) = 1$ .
- Die hier definierte Modulationsfunktion unterscheidet sich von der bekannten Modulationseffizienz, welche üblicherweise auf den unmodulierten Gleichlichtanteil  $I_{DC}$  bezogen wird, wie er in Gleichung 3.7 auftritt. Hier betrachten wir Interferogramme, bei denen  $I_{DC}$  bereits entfernt worden ist.
- Da wir bei der Definition ein IFG einer monochromatischen Welle ohne den „Partner“ negativer Frequenz benutzen, ist die Modulationsfunktion komplex (mehr dazu in Abschnitt 3.1.5). Der Modulationsverlauf des reellen Interferogramms ergibt sich aus dem Betrag der MOD, also aus dem Quotienten der Amplituden:

$$|MOD(x, \nu_0)| = \frac{|IFG_\delta(x, \nu_0)|}{|IFG_\delta(0, \nu_0)|} \quad (3.42)$$

- Formal ist die Modulationsfunktion auf  $(-\infty, +\infty)$  definiert. Wegen des begrenzten Gangunterschieds  $\pm L$  der Interferogramme ist sie jedoch außerhalb von  $L$  stets null.

Bei einem Interferometer mit endlich großem Gesichtsfeld, wie es im letzten Abschnitt behandelt wurde, gilt für das monochromatische Interferogramm aufgrund der vorweggenommenen Kalibrierung  $IFG(x = 0, \nu_0) = S_{inf}(\nu_0)$ . Aus Gleichung 3.40 folgt damit sofort:

$$MOD(x, \nu_0) = R_L(x) \cdot FT^+ \left[ \frac{1}{|\nu_0|} V(\nu, \nu_0) \right] \quad (3.43)$$

$$= R_L(x) \cdot FT^+ \left[ \frac{1}{\eta_0 |\nu_0|} \bar{\eta}(\nu + \nu_0, \nu_0) \right] \quad (3.44)$$

Das gesamte Interferogramm ergibt sich erst nach Integration aller monochromatischen „Einzelinterferogramme“ der Wellenzahlen  $\nu_0$ .

$$IFG(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} MOD(x, \nu_0) S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x \nu_0} d\nu_0 \quad (3.45)$$

Diese Formulierung des normierten, gemessenen Interferogramms ohne den Gleichlichtanteil  $I_{DC}$  ist allgemeingültig, solange der Einfluß auf jede einzelne Wellenzahl mit der oben definierten Modulationsfunktion beschrieben werden kann. Dieses Integral kann nicht als Fouriertransformation geschrieben werden, da in der Modulationsfunktion die Abhängigkeit von der Ortsvariablen  $x$  besteht. Bei der FT darf die zu transformierende Funktion aber nur von der Integrationsvariablen abhängen.



### 3.1.5 Apparate- und Modulationsfunktion in der komplexen Ebene

In den letzten Abschnitten wurde mit der Apparatefunktion im Spektralraum und der Modulationsfunktion im Interferogrammraum beschrieben, wie ein eingestrahktes Spektrum durch die Messung verändert wird. Beide Darstellungen gehen letztendlich auf die gleichen Eigenschaften des Fourierpektrometers zurück und müssen deshalb auch zueinander einen Zusammenhang besitzen.

Zur Verdeutlichung dieses Zusammenhangs wenden wir auf Gleichung 3.45 beidseitig eine Fouriertransformation an und bekommen damit das gemessene Spektrum. Die Fouriertransformierte des Produkts läßt sich in eine Faltung der Fouriertransformierten der Faktoren umwandeln (s. Anhang A).

$$FT[IFG(x)] = \int_{-\infty}^{+\infty} FT[MOD(x, \nu_0) e^{i2\pi x\nu_0}] S_{inf}(\nu_0) d\nu_0 \quad (3.46)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} FT[MOD(x, \nu_0)] \otimes \delta(\nu_0 - \nu) S_{inf}(\nu_0) d\nu_0 \quad (3.47)$$

Unter Beachtung der Symmetrie  $\delta(\nu_0 - \nu) = \delta(\nu - \nu_0)$  ergibt sich aus dem Vergleich von Gleichung 3.36 und 3.47 für jede Wellenzahl  $\nu_0$  generell:

$$FT[MOD(x, \nu_0)] = ILS(\nu, \nu_0) \quad (3.48)$$

$$MOD(x, \nu_0) = FT^+[ILS(\nu, \nu_0)] \quad (3.49)$$

Da das Apparateprofil im allgemeinen asymmetrisch sein wird, muß die Modulationsfunktion als komplex angesehen werden. In Abschnitt 3.1.3 wurde zur Darstellung des Interferogramms zunächst nur eine einzelne Wellenzahl  $\nu_0$  betrachtet. Diese erzeugt das komplexe Interferogramm  $S_{inf}(\nu_0) e^{i2\pi x\nu_0}$ ; das reelle entsteht erst mit der Hinzunahme von  $S_{inf}(-\nu_0) e^{-i2\pi x\nu_0}$ :

$$dI(x, \nu_0) + dI(x, -\nu_0) \sim S_0(\nu_0) \cos(2\pi x\nu_0 + \phi(\nu_0)) \quad (3.50)$$

Dies gilt, da das Spektrum für negative Wellenzahlen mit  $S(-\nu_0) = S^*(\nu_0)$  definiert wurde. Da das gemessene Spektrum einer  $\delta$ -Funktion durch die ILS dargestellt wird, muß auch für sie die Symmetrie gelten:  $ILS(-\nu, -\nu_0) = ILS^*(\nu, \nu_0)$ . Das kombinierte Interferogramm ist immer noch reell, und man könnte eine reelle Modulationsfunktion zuordnen, die die Einhüllende des Interferogramms beschreibt:

$$dI(x, \nu_0) + dI(x, -\nu_0) \sim |MOD(x, \nu_0)| S_0(\nu_0) \cos(2\pi x\nu_0 + \phi(\nu_0) + \phi_{MOD}(x, \nu_0)) \quad (3.51)$$

Die Information über die Asymmetrie innerhalb der ILS wäre damit aber verloren, da sie nur noch als Phase  $\phi_{MOD}$  im Argument des Kosinus vorhanden ist.

Erst die Entscheidung für die positive (oder negative) Wellenzahl  $\nu_0$  erhält die innere Form der ILS, impliziert aber auch eine komplexe Modulationsfunktion mit  $MOD(x, -\nu_0) = MOD^*(x, \nu_0)$ .

Im beschriebenen Formalismus ist auch eine komplexe ILS eingeschlossen. Dies würde auftreten, wenn die Modulationsfunktion selbst asymmetrisch wäre. Die hinzukommenden Wellenzahlen links und rechts von  $\nu_0$  im Spektralraum bekämen dann eine abweichende Phase. Solch ein Fall konnte bei MIPAS-B2 bislang nicht beobachtet werden.

### 3.1.6 Interferometer mit homogener Ausleuchtung und Interferometerbedingung

Bei einer realen Konstruktion mit perfekter Justierung und idealer Güte der Optik wird das Gesichtsfeld mit einer kreisrunden Blende beschränkt und homogen ausgeleuchtet. Für die Gewichtsfunktion des Gesichtsfeldes gilt somit nach Gleichung 3.23:  $\eta([0, \alpha_{max}], \nu_0) = 1 = \bar{\eta}([0, \alpha_{max}])$ . Es ist dann

$$\begin{aligned} 2\pi\eta_0 &= \int_{\Omega} \eta(\alpha, \varphi) d\Omega = \int_0^{\alpha_{max}} \int_0^{2\pi} 1 \cdot \sin \alpha d\varphi d\alpha \\ &= \int_0^{\alpha_{max}} 2\pi \sin \alpha d\alpha = 2\pi(1 - \cos \alpha_{max}). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Mit  $\bar{\eta}(\alpha)$  ist auch  $\bar{\eta}(\nu + \nu_0, \nu_0)$  eine Rechteckfunktion, allerdings mit dem Wert 1 im Intervall  $[-\nu_0\eta_0, 0]$ . Für die Modulationsfunktion gilt dann nach Gleichung 3.44:

$$MOD(x, \nu_0) = R_L(x) \cdot FT^+ \left[ \frac{1}{\eta_0|\nu_0|} R_{|\nu_0|\eta_0/2}(\nu + \nu_0\eta_0/2) \right] \quad (3.53)$$

$$= R_L(x) \frac{1}{\eta_0|\nu_0|} \cdot e^{-i2\pi x \nu_0 \eta_0/2} FT^+ \left[ R_{|\nu_0|\eta_0/2}(\nu) \right] \quad (3.54)$$

$$= R_L(x) \cdot e^{-i2\pi x \nu_0 \eta_0/2} \text{sinc}(2\pi x \nu_0 \eta_0/2) \quad (3.55)$$

Durch die Zentrierung auf der Wellenzahlskala konnte sofort die Fouriertransformierte der Rechteckfunktion angegeben werden. Die Modulationsfunktion verläuft also wie eine sinc-Funktion, wobei deren Breite nur von  $\nu_0$  und der maximalen Strahlneigung  $\alpha_{max}$  abhängt. Es stellt sich die Frage, wie die Optik des Instruments ausgelegt werden muß, um optimale Spektren zu erhalten. Je stärker das ursprüngliche Interferogramm bei großen Gangunterschieden gedämpft wird, desto breiter wird das resultierende Apparateprofil werden. Am kritischsten ist dabei die größte zu messende Wellenzahl, da diese am meisten durch die Modulationsfunktion beeinflusst wird. Andererseits wird die absolute Intensität mit wachsendem  $\alpha_{max}$  auf dem Detektor größer. Als Optimum wird deshalb üblicherweise das Maximum der absoluten

Modulationstiefe des Interferogramms für den maximalen Gangunterschied  $L$  angesehen. Wir optimieren deshalb die MOD ohne die in Gleichung 3.22 eingeführte Normierung:

$$\eta_0 \operatorname{sinc}(2\pi L\nu_0\eta_0/2) = \frac{1}{\pi L\nu_0} \sin(\pi L\nu_{max}\eta_0) \quad (3.56)$$

Das Maximum ergibt sich aus dem Argument des Sinus bei  $\pi/2$ :

$$\pi L\nu_{max}\eta_0 = \frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad \eta_0 = \frac{1}{2L\nu_{max}} \quad (3.57)$$

Mit  $\eta_0$  (s. Gleichung 3.52) und der Näherung für kleine  $\alpha$ :  $1 - \cos \alpha \approx \alpha^2/2$  folgt

$$\alpha_{max} = \arccos\left(1 - \frac{1}{2L\nu_{max}}\right) \approx \frac{1}{\sqrt{L\nu_{max}}} \quad (3.58)$$

Diese Gleichung wird als Interferometerbedingung bezeichnet, sie stellt eine Beziehung zwischen der Gesichtsfeldgröße und der maximalen Wellenzahl bei einer optimalen Modulationstiefe dar.

Für die Modulationsfunktion ergibt sich bereits aus Gleichung 3.55 mit Gleichung 3.57 ohne Näherung:

$$MOD(x, \nu_0) = R_L(x) \cdot e^{-i\frac{\pi x\nu_0}{2L\nu_{max}}} \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi x\nu_0}{2L\nu_{max}}\right) \quad (3.59)$$

$$\text{bzw. } MOD(L, \nu_{max}) = R_L(L) \cdot e^{-i\frac{\pi}{2}} \operatorname{sinc}\frac{\pi}{2} = -\frac{2}{\pi} i \quad (3.60)$$

$$\approx -0.63662 i \quad (3.61)$$

Es ergibt sich also für den maximalen Gangunterschied  $L$  bei der Wellenzahl  $\nu_{max}$  eine Modulationstiefe von ca. 60 % des Wertes im Maximum des Interferogramms. Somit wird von der sinc-förmigen Modulationsfunktion nur der innerste zentrale Teil verwendet. Bei einem Interferometer, das nach der Interferometerbedingung gebaut wurde, ist es demnach möglich, noch oberhalb von  $\nu_{max}$  zu messen. Allerdings nimmt die Modulation weiter ab, bis sie schließlich bei  $2\nu_{max}$  auf Null absinkt.

Aus der allgemeinen Form der ILS nach Gleichung 3.33 für ein Interferometer mit endlich großem Gesichtsfeld ergibt sich bei homogener Ausleuchtung für die Apparatfunktion:

$$ILS(\nu, \nu_0) = 2L \operatorname{sinc}(2\pi L\nu) \otimes \frac{2L\nu_{max}}{|\nu_0|} R_{|\nu_0|/(4L\nu_{max})}\left(\nu + \frac{\nu_0}{4L\nu_{max}}\right) \quad (3.62)$$

Die komplexe Exponentialfunktion im Interferogrammraum verursacht im Spektralraum eine Verschiebung zu betragsmäßig kleineren Wellenzahlen. Dies ist eine Folge

der Addition im Argument der Rechteckfunktion. Der Schwerpunkt der ILS bzw. einer Linie bei  $\nu_0$  verschiebt sich dadurch um  $-\nu_0/(4L\nu_{max}) = -\nu_0\eta_0/2$ .

Die Breite der sinc-Funktion beträgt  $1.207/(2L)$ , die der Rechteckfunktion  $|\nu_0|/(2L\nu_{max})$ . Damit übernimmt oberhalb der Wellenzahl von ca.  $1.2\nu_{max}$  der Einfluß des Gesichtsfeldes die Hauptrolle. Auch darunter findet schon eine sichtbare Verbreiterung des Apparateprofils statt.

Für den Grenzfall  $\nu_0 = \nu_{max}$  erhält man

$$ILS(\nu, \nu_{max}) = 2L \operatorname{sinc}(2\pi L\nu) \otimes 2L R_{1/(4L)}(\nu + \frac{1}{4L}) \quad . \quad (3.63)$$

D.h. für die Wellenzahl, die der Interferometerbedingung entspricht, ist die ILS genau um die halbe Auflösung zu kleineren Wellenzahlen verschoben.

## 3.2 Einführung der Charakteristischen Modulationsfunktion (CM)

Es wurde gezeigt, wie sich bei endlich großem Gesichtsfeld die ILS mit der Wellenzahl verändert. Dies ist schon bei idealen Bedingungen der Fall; bei einer Dejustierung oder asymmetrischen Einschränkung des Gesichtsfeldes verstärkt sich diese Veränderung der ILS.

In der Beschreibung der MOD in Gleichung 3.43 können die Variablen  $\nu$  und  $\nu_0$  der auf Seite 18 eingeführten Verteilungsfunktion  $V(\nu, \nu_0)$  unabhängig gewählt werden. Diese gehen jedoch nur über  $\alpha(\nu + \nu_0, \nu_0)$  in  $V$  ein, da  $\nu$  als substituierte Integrationsvariable aus dem Winkel  $\alpha$  hervorging. Der Zusammenhang kann aus der Substitution von Gleichung 3.27 abgelesen werden. Es ist

$$\alpha(\nu + \nu_0, \nu_0) = \arccos\left(\frac{\nu + \nu_0}{\nu_0}\right) = \arccos\left(\frac{\nu}{\nu_0} + 1\right) \quad . \quad (3.64)$$

Beschreibt man auch das Gültigkeitsintervall von  $V$  mit der relativen Wellenzahl  $\nu_r = \nu/\nu_0$  so läßt sich  $V$  als eindimensionale Funktion darstellen:<sup>5</sup>

$$V(\nu_r) = \begin{cases} \frac{1}{\eta_0} \bar{\eta}(\arccos(\nu_r + 1)) & , \quad -(1 - \cos \alpha_{max}) < \nu_r < 0 \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.65)$$

$V(\nu_r)$  hat die gleiche Wertemenge wie  $V(\nu, \nu_0)$  und es gilt  $V(\nu_r) = V(\frac{\nu}{\nu_0}, 1) = V(\nu, \nu_0)$ . Auf die rechte Seite der Gleichung 3.43 läßt sich damit der Ähnlichkeitssatz der Fouriertransformation in umgekehrter Richtung anwenden (siehe Anhang A),

---

<sup>5</sup>Da sicher gilt  $0 < \alpha_{max} < \pi/2$  und damit für die erste Zeile auch  $0 < \nu_r + 1 < 1$  ist der Arkuskosinus immer ausführbar.

wodurch der Zusammenhang der Modulationsfunktionen verschiedener Wellenzahlen als Skalierung der Abszisse zutage tritt:

$$MOD(x, \nu_0) = R_L(x) \cdot FT^+ \left[ \frac{1}{|\nu_0|} V\left(\frac{\nu}{\nu_0}\right) \right] \quad (3.66)$$

$$= R_L(x) \cdot CM(\nu_0 x) \quad (3.67)$$

Als Fouriertransformierte von  $V$  wurde hiermit die Charakteristische Modulationsfunktion  $CM$  eingeführt. Die Gültigkeit erstreckt sich auf einen Bereich, in dem die Veränderung der ILS nur von einem wellenzahlunabhängigen Gesichtsfeld abhängt. Konstruktionsbedingt können Modulationsschwankungen entlang des interferometrischen Hubs durch die Bewegung der beleuchteten Flächen auf den Tripel- und Retrosiegeln entstehen. Bei MIPAS-B2 ist dieser zusätzliche Einfluß auf die Apparatfunktion aufgrund der kleinen Pendelbewegung ( $\pm 4.6^\circ$ ) jedoch minimal. Dadurch ist die  $CM$  im Idealfall über einen gesamten Kanal gültig.

Für die explizite Darstellung der  $CM$  definieren wir die skalierte Abszisse mit  $b = \nu_0 x$  und indizieren die Fouriertransformation mit den zu transformierenden Variablen  $\nu_r$  und  $b$ .

$$CM(b) = FT_{\nu_r, b}^+ [V(\nu_r)] \quad (3.68)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} V(\nu_r) e^{i2\pi\nu_r b} d\nu_r \quad (3.69)$$

$$= \int_{-(1-\cos \alpha_{max})}^0 \frac{1}{\eta_0} \bar{\eta}(\arccos(\nu_r + 1)) e^{i2\pi\nu_r b} d\nu_r \quad (3.70)$$

Im Falle eines Interferometers mit homogen ausgeleuchtetem Gesichtsfeld ist  $\bar{\eta} = 1$  und  $1 - \cos \alpha_{max} \equiv \eta_0$  und somit

$$CM(b) = \int_{-\eta_0}^0 \frac{1}{\eta_0} e^{i2\pi\nu_r b} d\nu_r \quad (3.71)$$

$$= FT_{\nu_r, b}^+ \left[ \frac{1}{\eta_0} R_{\eta_0/2}(\nu_r + \frac{\eta_0}{2}) \right] \quad (3.72)$$

$$= e^{-i2\pi\eta_0/2} FT_{\nu_r, b}^+ \left[ \frac{1}{\eta_0} R_{\eta_0/2}(\nu_r) \right] \quad (3.73)$$

$$= \text{sinc}(\pi\eta_0 b) e^{-i\pi\eta_0 b} = \text{sinc} \left( \frac{\pi b}{2L\nu_{max}} \right) e^{-i\frac{\pi b}{2L\nu_{max}}} \quad (3.74)$$

Für Gleichung 3.74 wurde die in Gleichung 3.57 (Seite 23) angeführte exakte Form der Interferometerbedingung verwendet. Hiermit sind alle theoretischen Modulationsfunktionen eines korrekt justierten FTS, welches nach dieser Bedingung gebaut

wurde, in einer Funktion zusammengeführt. Durch Skalierung und Fouriertransformation wird sofort die Berechnung der Apparatefunktion einer beliebigen Wellenzahl  $\nu_0$  ermöglicht.

Man beachte, daß die Darstellung der Charakteristischen Modulation nach Gleichung 3.70 immer noch die Beschreibung eines veränderten Gesichtsfeldes oder einer dejustierten Optik beinhaltet. Dazu muß nur die mittlere Gewichtung des Gesichtsfeldes  $\bar{\eta}$  entsprechend eingesetzt werden.

### 3.3 Apodisation

Das in den bisherigen Abschnitten berechnete Apparateprofil sieht auch im Falle des endlich großen Gesichtsfeldes der sinc-Funktion immer noch sehr ähnlich. Diese hat neben ihrem Maximum noch weitere kleine, lokale Maxima (Seitenflügel), die beim Auffinden und der Identifikation von Linien sehr störend sind, vor allem, wenn sich sehr schwache Linien neben sehr starken befinden. Aber auch die Berechnung der Spurengaskonzentrationen ist davon betroffen. So kann z.B. eine große, gestörte Linie aufgrund der seitlichen Überschwinger ihren negativen Einfluß auf einen breiten Spektralbereich um das Linienzentrum ausdehnen, so daß Konzentrationen von Spurengasen, die kleinere Linien in diesem Gebiet haben, verfälscht werden.

Der Grund für die Überschwinger ist das abrupte Abbrechen des Interferogramms beim maximalen Gangunterschied  $\pm L$ . Wird das Interferogramm mit einer Funktion multipliziert, die es zu den Enden hin dämpft, so werden damit die Seitenflügel verkleinert. Diese zusätzliche Bearbeitung der Interferogramme heißt Apodisation. Gleichzeitig mit der Dämpfung wird die Breite der Linien durch die Apodisation vergrößert, es muß also ein Kompromiß zwischen der Seitenflügelunterdrückung und einer möglichst geringen Linienverbreiterung eingegangen werden. In Tabelle 3.1 sind einige hierfür nützliche Funktionen aufgeführt. Am gebräuchlichsten bei der MIPAS-B-Auswertung ist die Apodisationsfunktion von Norton und Beer in der „starken“ Version, bei der die Seitenflügel erster Ordnung auf 0.4 % des Maximums verkleinert werden und die Halbwertsbreite um den Faktor 1.6 vergrößert wird.

In Anlehnung an die vergleichbare Wirkung von Apodisation und endlich großem Gesichtsfeld bzw. Justierungsgüte des Instruments auf die Apparatefunktion nennt man die instrumentellen Effekte auch Selbstapodisation.

### 3.4 Phasenkorrektur und Kalibrierung

In Abschnitt 3.1.1 haben wir eine wellenzahlabhängige Phase zu den monochromatischen Wellen hinzugefügt, da im reellen Interferogramm die kosinusförmigen Wellen auf der Ortsachse gegeneinander verschoben sein können. Quellen solch einer instru-

Name	Formel	Koeffizienten			
Norton-Beer	$\sum_{i=0}^4 \alpha_i \left[1 - \left(\frac{x}{L}\right)^2\right]^i$		<i>stark</i>	<i>mittel</i>	<i>schwach</i>
		$\alpha_0$	0.045335	0.152442	0.384093
		$\alpha_1$	0.0	-0.136176	-0.087577
		$\alpha_2$	0.554883	0.983734	0.703484
		$\alpha_3$	0.0	0.0	0.0
	$\alpha_4$	0.399782	0.0	0.0	
Filler D	$\cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) + \alpha \cos\left(\frac{3\pi x}{2L}\right)$	$\alpha = 0.18$			
Blackman	$\sum_{j=0}^2 \alpha_j \cos \frac{j\pi x}{L}$	$\alpha_0 = 0.42, \alpha_1 = 0.50, \alpha_2 = 0.08$			

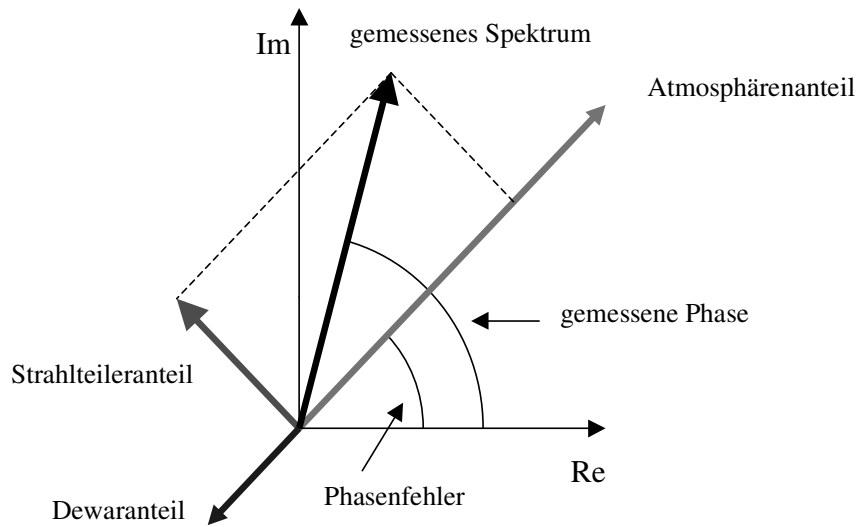
**Tabelle 3.1:** Gebräuchliche Apodisationsfunktionen zur Bearbeitung von Interferogrammen für die Seitenflügelunterdrückung von Spektrallinien.

mentellen Phasenverschiebung sind z.B. die Dispersion im Strahlteilersubstrat bei einer Ungleichheit zwischen Strahlteiler- und Kompensationsplatte oder die unterschiedlichen Gruppenlaufzeiten in der analogen Verstärkung zwischen dem Infrarot- und dem Triggersignal des Längenmeßsystems.

Zu dieser Phasenverschiebung kommen noch zwei instrumentelle Strahlungsterme, die sich auch auf die Phase auswirken, nämlich die Eigenstrahlung des Strahlteilers und Strahlung von der Detektorseite des Instruments. Ein Teil dieser Strahlung durchläuft ebenfalls das Interferometer und wird vom Detektor registriert. Eine Analyse der Phasen zeigt, daß der moduliert gemessene Anteil des Strahlteilers gegenüber der atmosphärischen Strahlung einer Phasenverschiebung von  $\pi/2$  (also  $90^\circ$ ) unterworfen ist.

Der Strahlungsanteil von der Detektorseite ist um  $\pi$  (also  $180^\circ$ ) gegenüber der atmosphärischen Phase verschoben (Trieschmann und Weddigen [43]). Das hat zur Folge, daß er negativ ins Spektrum eingeht. Der Anteil stammt größtenteils von Reflexionen am Dewarfenster, weshalb er im folgenden als Dewaranteil bezeichnet wird.

Das aus der Messung des Interferogramms durch die Fouriertransformation erhaltene, komplexe Spektrum besteht somit aus drei Strahlungsanteilen und kann deshalb nicht einfach ins Reelle „gedreht“ werden (siehe Abbildung 3.3). Der Anteil des Strahlteilers muß im Imaginären bleiben. Da zunächst nur das gemessene Spektrum bekannt ist, wird eine Phasenkorrektur benötigt, die die verschiedenen Anteile unterscheiden kann. Ermöglicht wird dies hauptsächlich dadurch, daß die



**Abb. 3.3:** Die Anteile des gemessenen Spektrums in der komplexen Ebene. Aufgrund der instrumentellen Phasenverschiebung und durch die zusätzlichen Strahlungsbeiträge vom Strahlteiler und vom Dewar ergibt sich ein komplexes Spektrum, wovon der atmosphärische Anteil auf die positive reelle Achse gedreht werden muß. Alle Anteile sind wellenzahlabhängig, so daß die Verhältnisse in der Zeichnung nur als Beispiel für eine Wellenzahl anzusehen sind.

instrumentellen Eigenemissionen von Festkörpern herrühren und damit nur breitbandige Strukturen aufweisen. Linienstrukturen aus der Atmosphäre sollten also im Imaginärteil des phasenkorrigierten Spektrums nicht zu sehen sein. Durch Minimierung der Varianz des Imaginärteils und durch Minimierung der Korrelation zwischen Imaginär- und Realteil des hochpaßgefilterten Spektrums kann dieses phasenkorrigiert werden (sog. statistische Phasenkorrektur). Eine genaue Darstellung der Anwendung dieses Verfahrens findet man in Trieschmann [42].

Für die Kalibrierung der Spektren werden zwei Schwarzkörpermessungen verschiedener Temperatur benötigt. Ein Schwarzkörper ist, wie in Abbildung 2.2 zu sehen, im Sensor unterhalb des Einkoppelspiegels untergebracht. Dieser steht im thermischen Gleichgewicht mit dem Instrument und hat eine Temperatur von ca. 220 K. Als zweites Schwarzkörperspektrum wird eine Messung in den Weltraum verwendet, dessen Hintergrundtemperatur bei ca. 3 K liegt. Um dieses als Schwarzkörperspektrum verwenden zu können, müssen verbliebene Linien, die von den Gasen aus der dünnen Atmosphäre oberhalb des Ballons stammen, nachträglich herausge-



nommen werden. Die Formel zur Zweipunkt-Kalibrierung lautet:

$$L_{ATM} = (S_{ATM} - S_{DS}) \frac{B(T)}{S_{BB} - S_{DS}} \quad (3.75)$$

Dabei ist  $L_{ATM}$  die spektrale Strahldichte des kalibrierten Atmosphärenspektrums,  $B(T)$  die Planckfunktion des Schwarzkörpers der Temperatur  $T$ ,  $S_{ATM}$  das gemessene Atmosphärenspektrum,  $S_{BB}$  das gemessene Schwarzkörperspektrum und  $S_{DS}$  das gemessene Weltraumspektrum.

Bevor diese Kalibrierung bei MIPAS-B2 angewendet werden kann, muß erst die Nichtlinearität der Detektoren korrigiert und das Rauschen von  $S_{BB}$  und  $S_{DS}$  reduziert werden. Näheres hierzu findet man in Kleinert [22], Friedl-Vallon et al. [11] und in Trieschmann und Friedl-Vallon [41].

Die endgültigen Spektren in Form von phasenkorrigierten, kalibrierten spektralen Strahldichten unterscheiden sich von den eingestrahlt im Idealfall nur noch durch Rauschen und die Veränderung durch das Apparateprofil. Aus diesen phasenkorrigierten, kalibrierten Spektren werden im weiteren Prozeß der Auswertung die Spurengasprofile bestimmt. Von diesen Spektren müssen also bei der Ableitung der Spurengasprofile die Apparateprofile bekannt sein.

## Kapitel 4

# Ableitung von Vertikalprofilen aus Spektren

Aus den kalibrierten Spektren werden die Vertikalprofile der Spurengase abgeleitet. Der Vorgang wird auch Inversion oder Retrieval genannt.

Der komplizierte Zusammenhang zwischen der Höhenverteilung der Spurengase und den durch MIPAS gemessenen Spektren macht es unmöglich, die Profile analytisch zu berechnen. Die physikalischen Vorgänge beim Durchqueren von Strahlung durch die Atmosphäre sind jedoch bekannt, so daß aus der angenommenen Spurengasverteilung und Meßgeometrie theoretische Spektren berechnet werden können. Abschnitt 4.1 beschreibt die Grundlagen zur Berechnung der theoretischen Spektren und Abschnitt 4.2, wie diese Vorwärtsrechnung zur Bestimmung der Vertikalprofile benutzt wird.

### 4.1 Strahlungstransfer

Wie oben erwähnt, ist für die Spurengasinversion zuerst die Strahlungsübertragung durch die Atmosphäre zu berechnen. Diese sogenannte Vorwärtsmodellierung sollte möglichst alle physikalisch relevanten Vorgänge der Strahlungsemission und -absorption beinhalten, da sonst eine Anpassung an die gemessenen Spektren erschwert oder unmöglich wird bzw. zu falschen Ergebnissen führt.

Zur Berechnung denken wir uns die Atmosphäre aus nahezu kugelsymmetrischen Schichten aufgebaut (Abbildung 2.3 auf Seite 9). Die von einem Molekül emittierte Strahlung wird dann in den Schichten bis zum Meßinstrument durch die dort vorhandenen Gase entsprechend deren Absorptionskoeffizienten geschwächt. Ebenso kommt von den Molekülen dieser Gase emittierte Strahlung hinzu. Eine eventuelle Streuung, die bei Infrarot-Strahlung an größeren Partikeln auftreten kann, oder ein nichtvorhandenes lokales thermodynamisches Gleichgewicht werden hier nicht

beachtet. Für die Änderung der spektralen Strahldichte in einer Schicht folgt damit:

$$dL_\nu(s) = [B_\nu(T(s)) - L_\nu(s)] \sigma_{\nu,a}(s) ds \quad (4.1)$$

mit:  $s$ : Ort  
 $T$ : Temperatur  
 $L_\nu$ : spektrale Strahldichte  
 $B_\nu$ : Planckfunktion  
 $\sigma_{\nu,a}$ : Absorptionskoeffizient

Gleichung 4.1 läßt sich leicht integrieren, wodurch man die Strahlungsübertragungsgleichung in integraler Form erhält:

$$L_\nu(s_m) = L_\nu(s_0) \tau_\nu(s_0, s_m) + \int_{s_0}^{s_m} B_\nu(T(s)) \sigma_{\nu,a}(s) \tau_\nu(s, s_m) ds \quad (4.2)$$

wobei  $\tau_\nu(s, s_m) = \exp\left(-\int_s^{s_m} \sigma_{\nu,a}(s') ds'\right)$

die Transmission zwischen  $s$  und  $s_m$  darstellt. Dabei ist  $s$  ein Ort zwischen  $s_0$  (im Weltraum außerhalb der Atmosphäre) und  $s_m$  (Ort des Meßinstruments). Der erste Term auf der rechten Seite bildet die Hintergrundstrahlungsquelle, deren Strahlung alle Atmosphärenschichten bis zum Instrument durchqueren muß.

Für die numerische Berechnung wird die Atmosphäre diskretisiert, d.h. in endlich große Schichten eingeteilt. Diese zerteilen den Weg der Strahlung in unterschiedliche Wegsegmente  $n$ . Diesen wiederum wird unter Berücksichtigung der Meßgeometrie von MIPAS-B die Transmission  $\tau_{\nu,n}$  zugeordnet, die sich aus der optischen Dicke  $\sigma_{\nu,ng} \Delta s_n$  der Wegsegmente  $n$  und Gase  $g$  ergibt (siehe unten). Die meßbare Strahldichte am Ort des Instruments ist damit die Summe über alle Wegsegmente entlang des Sehstrahls vom Weltraum ( $n = 1$ ) zum Instrument ( $n = N$ ):

$$L_\nu = \sum_{n=1}^N \left[ (1 - \tau_{\nu,n}) B_\nu(T_n) \prod_{j=n+1}^N \tau_{\nu,j} \right], \text{ wobei } \tau_{\nu,n} = \exp\left(-\sum_g \sigma_{\nu,ng} \Delta s_n\right) \quad (4.3)$$

die Transmission der Gase  $g$  im Wegsegment  $n$  sei.

Die Spektren der beobachteten Moleküle im Infraroten entstehen meist aus Rotations-Vibrationsübergängen und haben somit eine Linienstruktur. Die Lage, Stärke und Breite dieser Linien sind größtenteils tabellarisch in Datenbanken erfaßt und elektronisch erhältlich (z.B. HITRAN = High resolution Transmission molecular Absorption, siehe hierzu Rothman et al. [33] und [34]). Es ist also möglich, in einem Algorithmus die spektrale Strahldichte längs des Weges Linie für Linie aufzuaddieren. Die im IMK verwendeten Programme zur Vorwärtsmodellierung sind FASCOD2 (**F**ast **A**tmospheric **S**ignature **C**ODE 2, Clough et al. [3]) und KOPRA

(**K**arlsruhe **O**ptimized and **P**recise **R**adiative transfer **A**lgorithm, Stiller et al. [39]), die nach dieser "line-by-line"-Methode arbeiten. Im letzteren Algorithmus ist es sogar möglich, ein nichtvorhandenes lokales thermodynamisches Gleichgewicht (engl.: non-LTE, siehe Funke [13] und [39], Kap. 10) und Einstreuung von Strahlung durch Wolken in den Sehstrahl zu berücksichtigen (Höpfner et al. [17]). Die Modellierung von Streuprozessen ist insbesondere beim Auftreten von polaren Stratosphärenwolken (engl.: polar stratospheric clouds, PSC) von Bedeutung, die sich über den Polargebieten bei sehr kalten Temperaturen in der Stratosphäre bilden. An ihnen kann es zu relevanter Einstreuung des von der Erde emittierten Lichts in den Sehstrahl kommen (Höpfner et al. [18]).

Die Einbeziehung der atmosphärischen Parameter reicht jedoch nicht aus. Da die gemessenen Spektren das Apparateprofil enthalten, muß auch dieses im Vorwärtsmodell implementiert oder in Form von Eingangsdaten vorgebar sein.

## 4.2 Inversion von Vertikalprofilen

Im letzten Abschnitt wurde beschrieben, wie mittels der Vorwärtsrechnung Spurengasprofile in Spektren überführt werden können. Die Umkehrung ist jedoch schwieriger und führt auf einen iterativen Prozeß, bei dem man sich der Lösung (Profile der vorhandenen Spurengase) nur Schritt für Schritt nähern kann.

Sei  $\vec{y}$  der Vektor mit allen gemessenen Größen, die in die Inversion mit einfließen sollen, im Falle von MIPAS-B also den kalibrierten Spektren verschiedener Elevationswinkel.  $\vec{x}$  sei der gesuchte Vektor aller Spurengasprofile, die aus den Spektren invertiert werden sollen. Das Vorwärtsmodell kann dann durch eine vektorwertige Funktion  $\vec{F}$  dargestellt werden, die  $\vec{x}$  und  $\vec{y}$  verbindet. Dies geschieht jedoch nicht exakt, da sowohl die Messung als auch das Vorwärtsmodell fehlerbehaftet sind. Für die Gleichheit muß also noch ein Fehlervektor  $\vec{\epsilon}$  hinzugefügt werden:

$$\vec{y} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{\epsilon} \quad (4.4)$$

Im allgemeinen ist wegen  $\vec{\epsilon} \neq 0$  keine exakte Lösung auffindbar, weswegen man versucht, eine optimierte Lösung durch die Minimierung der Abweichungsquadrate (least squares) zwischen Messung und Vorwärtsrechnung zu finden. Zur Gewichtung der Größen in  $\vec{y}$  wird hierfür eine Norm eingeführt, die mit der inversen Kovarianzmatrix  $S_{\epsilon}^{-1}$  gebildet wird:

$$\|\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})\|_{S_{\epsilon}^{-1}}^2 = (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}))^T S_{\epsilon}^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})) \quad (4.5)$$

Für die Minimierung wird der Term abgeleitet und dann die Lösung mit Hilfe des mehrdimensionalen Newtonverfahrens bestimmt. Dieses ist wegen der Nichtlinearität der Strahlungsübertragungsgleichung notwendig und damit die Ursache für den

iterativen Prozeß bei der Annäherung an die Lösung.

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i - (\nabla \vec{g}(\vec{x}_i))^{-1} \cdot \vec{g}(\vec{x}_i) \quad (4.6)$$

In unserem Fall ist  $\vec{g}$  die Ableitung der rechten Seite der Gleichung 4.5. Wegen des Terms  $\nabla \vec{g}$  im Newtonverfahren entstehen zweite Ableitungen der Funktion  $\vec{F}$ . Das Vorwärtsmodell ist zwar nichtlinear, aber erfahrungsgemäß so schwach, daß die Terme mit den zweiten Ableitungen von  $\vec{F}$  vernachlässigt werden können. Wird die erste Ableitung von  $\vec{F}$ , also die Jacobi-Matrix, mit  $K$  bezeichnet, so ergibt sich als Lösung die Iterationsvorschrift:

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + (K_i^T S_\epsilon^{-1} K_i)^{-1} \cdot K_i^T S_\epsilon^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_i)) \quad (4.7)$$

In der Praxis führt diese Vorschrift aufgrund der Fehler des Vorwärtsmodells und des Rauschens der Messungen oft zu Divergenzen. Es wurde deshalb von Levenberg [26] und Marquardt [27] ein Dämpfungsparameter in den Ableitungsterm eingeführt, der als Wirkung einen verkürzten Sprung im Variablenraum bei einer Iteration zur Folge hat. Dieser Parameter kann zwischen den Iterationen verändert werden, so daß er nahe der Lösung zweckmäßigerweise wieder auf Null gesetzt wird. Die Lösung selbst bleibt dadurch unverändert.

Oft ist der Informationsgehalt der Spektren so niedrig, daß die erreichte Lösung unsinnige Spurengasprofile ergibt. Die Konzentrationen können mit der Höhe oszillieren oder unrealistische Größenordnungen annehmen. In diesem Fall ist es notwendig, Nebenbedingungen hinzuzufügen, die die Lösung an das A-priori-Wissen (z.B. Startprofil) annähern. Diese Bedingungen können sowohl aus der Differenz von  $\vec{x}_i$  und dem A-priori-Vektor  $\vec{x}_a$  gebildet werden, wie es bei der "Optimal Estimation"-Methode der Fall ist (s. Rodgers [32]), als auch aus einer Glattheitsbedingung für  $\vec{x}_i$ , wie es von Tikhonov [40] und Phillips [30] beschrieben wurde. Die Newton-Iteration für die Lösung lautet dann

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + (K_i^T S_\epsilon^{-1} K_i + \gamma \mathcal{L}^T \mathcal{L})^{-1} \cdot [K_i^T S_\epsilon^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_i)) - \gamma \mathcal{L}^T \mathcal{L} (\vec{x}_i - \vec{x}_a)] \quad (4.8)$$

mit:  $\mathcal{L}$ : Regularisierungsoperator  
 $\gamma$ : Regularisierungsparameter  
 $K$ : Jacobi-Matrix  
 $S_\epsilon$ : Kovarianzmatrix

Diese Art der Lösungseinschränkung heißt Regularisierung. Hierbei ist  $\mathcal{L}$  der Regularisierungsoperator. Dieser kann z.B. die Differenzen benachbarter Werte des Startprofils berechnen und dadurch die Glattheit des Profils bewirken. In diesem Fall stellt sich  $\mathcal{L}$  als diskreter erster Ableitungsoperator dar, der die folgende Form

hat:

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\dim \vec{x} - 1) \times \dim \vec{x} \quad (4.9)$$

Wie stark regularisiert werden soll, wird durch den Regularisierungsparameter  $\gamma$  eingestellt. Ein kleines  $\gamma$  bedeutet eine schwache Regularisierung, die Lösung kann unter gewissen Umständen oszillieren. Ein großes  $\gamma$  zieht die Lösung in Richtung des A-priori-Wissens (z.B. gleiche Form), wodurch in bestimmten Fällen aus dem Spektrum keine Information mehr gewonnen wird. Die richtige Wahl dieses Parameters ist schwierig, eine Möglichkeit zur Lösung dieses Problems stellt das von Hansen [14] vorgeschlagene L-Kurven-Verfahren dar, bei dem die Abweichung zwischen Messung und Vorwärtsrechnung gegen den Beitrag der Nebenbedingungen aufgetragen wird. Der Knickpunkt dieser L-förmigen Kurve soll das optimale  $\gamma$  ergeben. Weitere Möglichkeiten zur richtigen Wahl von  $\gamma$ , die z.T. mit den Freiheitsgraden der Inversionsgleichung zusammenhängen, findet man in Steck [37].

Am IMK sind für das Retrieval von FTS-Emissionsmessungen die Programme RAT (**R**etrieval of **A**tmospheric **T**race gas profiles, T. v. Clarmann [44]) und KOPRAFIT (Inversionsversion des oben erwähnten Vorwärtsprogramms KOPRA) in Gebrauch.

Da die Sichtlinie bei der Horizontsondierung die Atmosphäre nur bis zu einer minimalen Höhe über der Erde durchläuft (der Tangentenhöhe), sind in dem zugehörigen Spektrum auch nur Informationen oberhalb dieser Höhe enthalten. RAT arbeitet deshalb bei der Inversion die Schichten von oben her sukzessive ab, wie beim Schälen einer Zwiebel, weshalb diese Vorgehensweise auch „onion-peeling“ genannt wird.

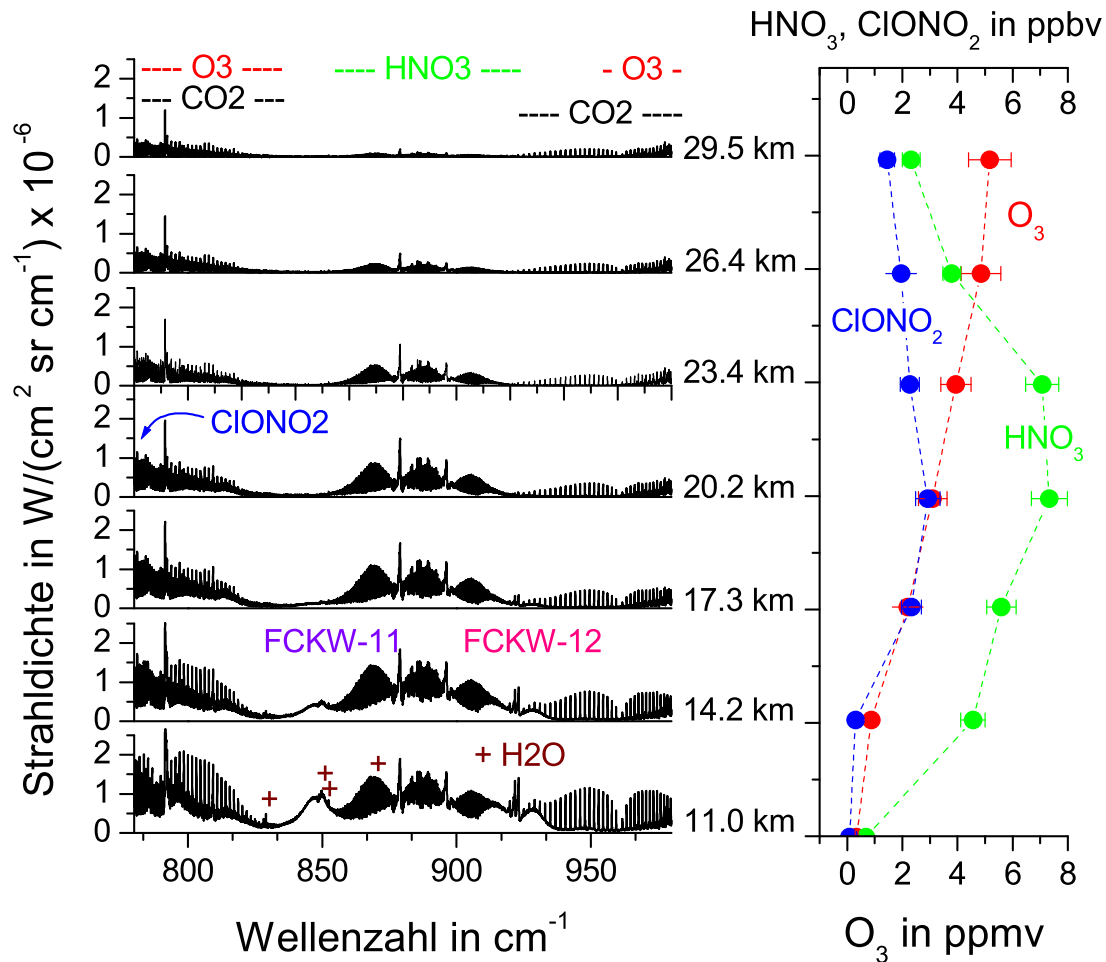
KOPRAFIT verwendet die Spektren verschiedener Elevationswinkel gleichzeitig. Die Regularisierung sorgt bei ausreichender Stärke für die Stabilität des Inversionsverfahrens.

Bei der Ableitung von Spurengasprofilen und der Temperatur aus kalibrierten MIPAS-B2-Spektren wird folgendermaßen vorgegangen:

1. Aus ECMWF-Daten (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) und Messungen von Ozon- bzw. Radiosonden werden A-priori-Profile für Druck, Temperatur und Ozon gewonnen. Für die anderen Spurengase werden der jeweiligen meteorologischen Situation angepaßte, klimatologische Standardprofile verwendet.

2. Die Temperatur wird aus den CO<sub>2</sub>-Emissionslinien verschiedener spektraler Fenster (Microwindows) des Kanals 1 invertiert.
3. Es wird ein sukzessives Retrieval von HNO<sub>3</sub>, ClONO<sub>2</sub> und HNO<sub>4</sub> in verschiedenen Auswertefenstern in Kanal 1 durchgeführt.
4. In Kanal 2 wird im allgemeinen zuerst das Spurengas N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, das eine breitbandige spektrale Struktur aufweist, in einem großen Fenster abgeleitet und dann die Konzentrationen der Gase N<sub>2</sub>O und CH<sub>4</sub> in geeigneten Microwindows bestimmt.
5. Aus Kanal 3 läßt sich NO<sub>2</sub> bestimmen und H<sub>2</sub>O für die oberen Tangentenhöhen. Für die Ableitung von H<sub>2</sub>O-Konzentrationen der tieferen Schichten wird auf die Kanäle 1 und 2 zurückgegriffen.
6. Je nach Güte der Spektren können weitere Spurengase mit schwachen Signaturen, wie beispielsweise Fluorverbindungen, bestimmt werden (siehe Tabelle 2.1 auf Seite 5).

Abbildung 4.1 zeigt, wie sich einige Spurengase in den gemessenen Spektren (hier Kanal 1) darstellen und wie daraus abgeleitete typische Spurengasprofile aussehen.



**Abb. 4.1:** MIPAS-B2 Spektren und abgeleitete Spurengasprofile.

Links sind die Spektren von Kanal 1 der verschiedenen Höhen einer Horizontsondierungssequenz aufgetragen. Die Emissionsbereiche verschiedener Spurengase sind markiert. Direkt erkennbar ist z.B. wie die Signaturen der FCKW-Moleküle 11 und 12 oberhalb von 17 km verschwinden. Rechts sind beispielhaft die abgeleiteten Profile von Ozon ( $O_3$ , untere Skala), Salpetersäure ( $HNO_3$ ) und Chlornitrat ( $ClONO_2$ , obere Skala) gezeigt. Letztere spielen beim Ozonabbau in den Polargebieten eine entscheidende Rolle.



## Kapitel 5

# Empfindlichkeit des Retrievals auf die Apparatefunktion

In den Abschnitten 3.1.3 ff. wurde gezeigt, wie die Apparatefunktion (ILS) das gemessene Spektrum verändert. Für das Retrieval müssen die Spektren der Vorwärtsrechnung möglichst korrekt berechnet werden, d.h. auch die ILS geht in das Retrieval mit ein. Bei fehlerhafter ILS wird sich dieser Fehler in das Ergebnis der Inversion, also in die Temperatur und die Spurengaskonzentrationen, fortpflanzen. Der Druck wird bei MIPAS-B2 aus aufbereiteten ECMWF-Daten gewonnen, da diese genauer sind als ein Druck-Retrieval. Ein Einfluß der ILS auf den Druck wurde deshalb nicht untersucht.

Um die Anforderungen an die Genauigkeit der ILS festzulegen, muß zuerst die Sensitivität des Retrievals auf eine fehlerhafte ILS geklärt werden. Dafür wurden Testspektren aus vorgegebenen Temperatur- bzw. Spurengasprofilen mit Hilfe einer KOPRA-Vorwärtsrechnung erzeugt. Bei der Faltung der hochaufgelösten Spektren mit der ILS wurde statt der theoretischen, eine mit Fehlern versehene ILS verwendet. Nach dem Retrieval der so erzeugten „Meßspektren“, werden dann die gewonnenen Ergebnisprofile mit den ursprünglich vorgegebenen Profilen verglichen.

### 5.1 Erzeugung der verzerrten Testspektren

Für die Tests wurden Wellenzahlfenster ausgewählt, die in denselben Spektralbereichen liegen wie beim eigentlichen Retrieval (s. Abschnitt 4.2). Für die Temperatur waren dies sechs Microwindows aus Kanal 1, für  $\text{HNO}_3$  ein Fenster ebenfalls aus Kanal 1, für  $\text{N}_2\text{O}$  ein Fenster aus Kanal 2 und für  $\text{NO}_2$  eines aus Kanal 3.

Die Tangentenhöhen wurden aus tatsächlichen Messungen genommen, meist basierend auf den Daten von Flug 6. In den Fällen, bei denen auch Rauschen in die Tests mit einging, wurde ein realistischer Wert angenommen, wie er nach Mitte-

lung mehrerer, unapodisierter Spektren übrig bleibt, und zwar je nach Kanal 5 bzw. 2 nW/(cm<sup>2</sup> sr cm<sup>-1</sup>).

Für die Vorwärtsrechnung mit KOPRA mußten die modifizierten Apparatfunktionen der verschiedenen Fenster als Eingangsdatensätze zur Verfügung gestellt werden. Zur Quantifizierung des Einflusses einer mit Fehlern versehenen ILS muß diese Veränderung ebenfalls quantifiziert werden. Eine parametrisierte Darstellung der ILS wäre dazu geeignet, die bekannten Möglichkeiten hierfür sind jedoch ziemlich unhandlich.

Wie in Abschnitt 3.1.4 gezeigt, geht die ILS durch die Fouriertransformation in die Modulationsfunktion über. Diese besitzt eine wesentlich geringere Variation als die ILS im Spektralraum, da sie im Normalfall von eins ausgehend nach außen hin leicht abfällt, ohne die zahlreichen lokalen Maxima und Minima der ILS. Eine Beschreibung mit einem Polynom ist problemlos, und dieses kann analytisch fouriertransformiert werden (Bronstein und Semendjajew [1]).

Für die Ableitung der Temperatur werden mehrere Fenster gleichzeitig verwendet, in denen die Apparatfunktionen leicht unterschiedlich sind. Bei den Tests wollen wir aber annehmen, daß die unterschiedlichen ILS innerhalb eines Kanals durch die eingeführte Charakteristische Modulationsfunktion (CM) beschrieben werden können. Die Form der CM entspricht der Modulationsfunktion (MOD), nur die Abszissenskala ist verändert, und die Multiplikation mit der Rechteckfunktion fehlt, d.h. auch die CM läßt sich problemlos in ein Polynom zerlegen bzw. durch ein solches annähern. Da wir von einer reellen ILS ausgehen, sind die MOD und die CM konjugiert komplex symmetrisch. Es wird deshalb eine getrennte Entwicklung von Betrag und Phase durchgeführt:

$$\begin{aligned} |CM(\nu_0 x)| &= 1 + c_2 (\nu_0 x)^2 + c_4 (\nu_0 x)^4 + \dots \\ \arg(CM(\nu_0 x)) &= c_1 (\nu_0 x) + c_3 (\nu_0 x)^3 + c_5 (\nu_0 x)^5 + \dots \end{aligned} \quad (5.1)$$

Die Vorfaktoren  $c_j$  der Monome  $(\nu_0 x)^j$  können für die Verzerrung der ILS verwendet werden. Eine Veränderung der geraden Monome läßt die ILS symmetrisch, beeinflußt aber Form, Maximum und Halbwertsbreite. Bei der Phase läßt nur die 1. Ordnung die ILS symmetrisch, verursacht aber eine Verschiebung auf der Wellenzahlskala. Alle Veränderungen höherer, ungerader Ordnungen verursachen eine Asymmetrie. Die Modulationsfunktion ergibt sich aus der CM durch Multiplikation mit der Rechteckfunktion  $R_L$ :

$$MOD(x, \nu_0) = R_L(x) CM(\nu_0 x) \quad (5.2)$$

Die ILS selbst erhält man erst nach der Fouriertransformation der MOD, wie in Abschnitt 3.1.5 beschrieben. Dabei muß darauf geachtet werden, daß die Stützstellen den richtigen Abstand bekommen. KOPRA benötigt für die Faltung der Spektren auf einem internen, sehr feinen Gitter eine apodisierte ILS (AILS). Diese muß im

Eingabedatensatz auf demselben Gitter zur Verfügung stehen. Da dieses mit der Länge des Interferogramms zusammenhängt, muß es schon im voraus korrekt bestimmt worden sein.

Die Fouriertransformation und die Apodisation der Modulationsfunktion zur ILS wurde mit IDL (Interactive Data Language) der Firma RSI [45] durchgeführt.

Als Ausgangsdatsatz dient eine Polynomannpassung 6. Ordnung des theoretischen Verlaufs der CM eines homogen ausgeleuchteten Interferometers mit den Eigenschaften von MIPAS-B2. Es ergibt sich:

$$|CM(\nu_0 x)| = 1 - 6.02019 \cdot 10^{-10} (\nu_0 x)^2 + 1.08091 \cdot 10^{-19} (\nu_0 x)^4 - 8.35055 \cdot 10^{-30} (\nu_0 x)^6 \quad (5.3)$$

Die Phase besteht nur aus einem linearen Term, der eine Verschiebung verursacht und zur Zentrierung der Linien auf null gesetzt wurde. In Tabelle 5.1 sind die Werte des CM-Koeffizienten 2. Ordnung aufgeführt, die in den folgenden Tests verwendet wurden. Bei Kanal 1 und 3 wurde für  $\pm 1\Delta$  eine Veränderung gewählt, die bei der Modulationsfunktion am Ende des IFGs eine Veränderung von 0.1 bewirkt, bei Kanal 2 die Hälfte.<sup>1</sup> Höhere Ordnungen wurden ebenfalls getestet, ergaben jedoch ähnliche Ergebnisse.

$\Delta c_2$	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3
$-3\Delta$	$-2.277804 \cdot 10^{-9}$	$-1.142019 \cdot 10^{-9}$	$-1.142019 \cdot 10^{-9}$
$-2\Delta$	$-1.719209 \cdot 10^{-9}$	$-9.62019 \cdot 10^{-10}$	$-9.62019 \cdot 10^{-10}$
$-1\Delta$	$-1.160614 \cdot 10^{-9}$	$-7.82019 \cdot 10^{-10}$	$-7.82019 \cdot 10^{-10}$
$+3\Delta$	$1.073796 \cdot 10^{-9}$	$-6.2019 \cdot 10^{-11}$	$-6.2019 \cdot 10^{-11}$
$+2\Delta$	$5.15171 \cdot 10^{-10}$	$-2.42019 \cdot 10^{-10}$	$-2.42019 \cdot 10^{-10}$
$+1\Delta$	$-4.3424 \cdot 10^{-11}$	$-4.22019 \cdot 10^{-10}$	$-4.22019 \cdot 10^{-10}$
0	$-6.02019 \cdot 10^{-10}$	$-6.02019 \cdot 10^{-10}$	$-6.02019 \cdot 10^{-10}$

**Tabelle 5.1:** Für die Tests verwendete CM-Koeffizienten 2. Ordnung.

## 5.2 Ergebnisse des Retrievals mit Tikhonov-Phillips-Regularisierung

### 5.2.1 Retrieval der Temperatur

Für das Test-Retrieval der Temperatur wurden die bewährten sechs Microwindows mit CO<sub>2</sub>-Linien im Kanal 1 benutzt (s. Tabelle 5.2). Als Testprofil (Referenz)

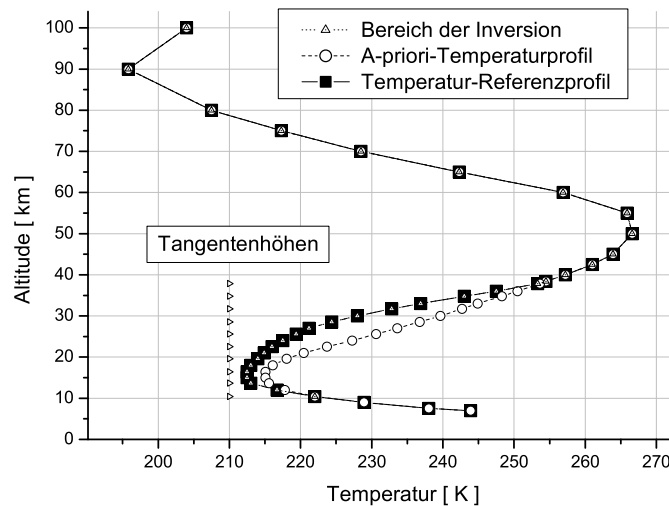
<sup>1</sup>In Kanal 2 ist die ILS aufgrund der günstigen Linienverteilung genauer bestimmbar.

Nr.	Microwindow [ $\text{cm}^{-1}$ ]	Breite [ $\text{cm}^{-1}$ ]	CO <sub>2</sub> -Linien
1	801.4 - 801.7	0.3	1
2	810.75 - 811.15	0.4	1
3	812.30 - 812.65	0.35	1
4	941.3 - 947.0	5.7	3
5	948.5 - 951.5	3.0	2
6	952.0 - 956.7	4.7	3

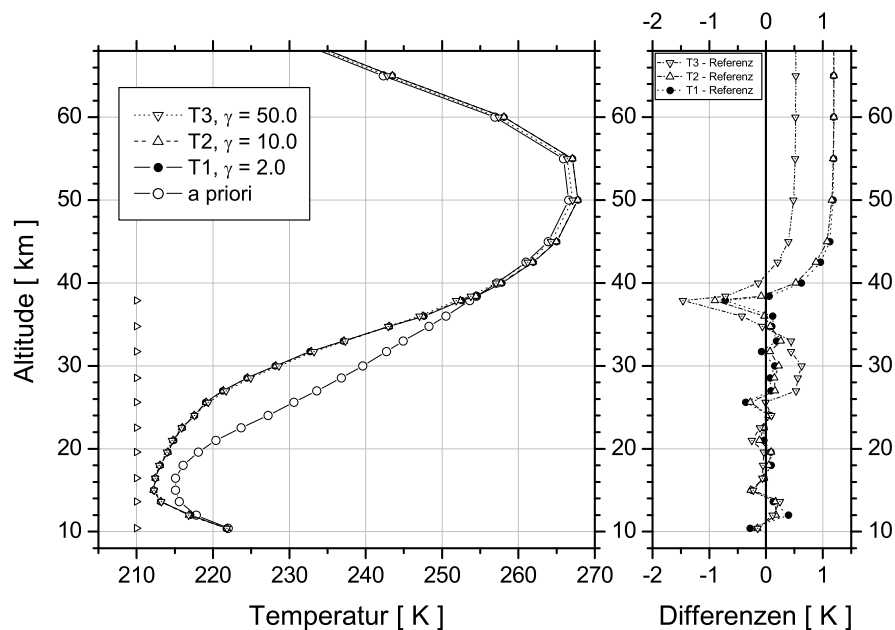
**Tabelle 5.2:** Microwindows des Temperatur-Retrievals.

In diesen sechs Wellenzahlfenstern im Kanal 1 wird aus den CO<sub>2</sub>-Linien das Temperaturprofil abgeleitet. Die letzte Spalte gibt die Anzahl der CO<sub>2</sub>-Linien des Hauptübergangs im Microwindow an.

wurde ein typisches Temperaturprofil gewählt, dessen Verlauf geglättet wurde, um das Retrieval nicht zusätzlich zu erschweren. Die Priorität ist nicht die Retrieval-Genauigkeit eines komplizierten Temperaturverlaufs, sondern die Bestimmung der Abweichungen bei veränderter ILS. Das A-priori-Profil wurde oberhalb der Beobachterhöhe und unterhalb der tiefsten Tangentenhöhe dem Referenzprofil gleichgesetzt. Die Temperaturen an den Tangentenhöhen wurden im oberen Teil linear und nach unten parabelähnlich weitergeführt, wie in Abbildung 5.1 zu sehen ist. Zur Be-



**Abb. 5.1:** Referenz- und A-priori-Profil für das Temperatur-Retrieval. Testspektren wurden für die eingezeichneten zehn Tangentenhöhen erzeugt. Invertiert wurde der Bereich von 10,42 bis 100 km.

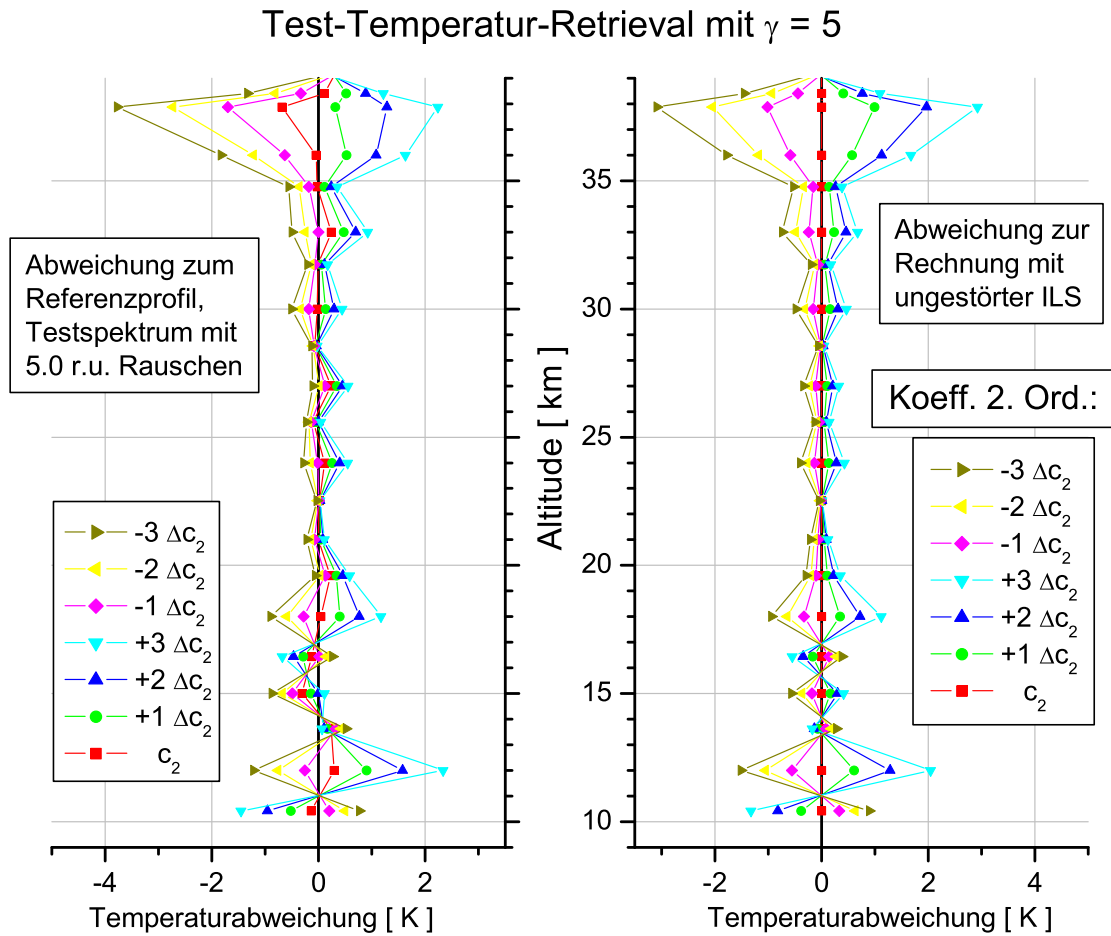


**Abb. 5.2:** Temperatur-Retrieval mit verschiedenen Regularisierungsparametern.

Von der Beobachterhöhe an aufwärts gehen die invertierten Profile in die Form des A-priori-Profiles über. Die Zwischenhöhen werden hinzugefügt, um den Verlauf der invertierten Profile genauer beurteilen zu können.

stimmung des optimalen Regularisierungsparameters  $\gamma$  muß zuerst mit einem Satz verrauschter, aber sonst idealer Spektren ein Retrieval durchgeführt werden. Mit dem so erhaltenen  $\gamma$  werden dann die Testspektren mit der verzerrten ILS invertiert. Abbildung 5.2 zeigt die Ergebnisse für drei verschiedene  $\gamma$ -Werte. Option 4 ist im KOPRAFIT die Einstellung für die Tikhonov-Phillips-Regularisierung mit Kopplung an die Form des A-priori-Profiles. Die Konvergenz stellt sich bereits nach fünf Iterationen ein. Im rechten Teil sind die Differenzen zum Referenzprofil gezeigt, oberhalb der Beobachterhöhe gehen diese Differenzen in eine Gerade über, da die Spektren oberhalb dieser Höhen keine Information mehr liefern. Die Form des Profils gleicht deshalb auch der A-priori-Temperatur. Zwischen den Tangentenhöhen, die die Messungen darstellen, werden noch weitere Höhenstufen verwendet, um den Verlauf der invertierten Profile genauer beurteilen zu können. Da sich weder  $\gamma=2$  noch  $\gamma=10$  als optimale Regularisierungsstärke zeigt, wurde der Zwischenwert  $\gamma=5$  für die folgenden Retrievals verwendet.

Zur Verzerrung der Breite der ILS wird der CM-Koeffizient 2. Ordnung verändert. Entfernt man sich vom idealen Wert ( $-6.0 \cdot 10^{-10}$ ) durch Verkleinerung, so entspricht



**Abb. 5.3:** Temperatur-Retrieval bei veränderter ILS-Breite (CM-Koeffizient 2. Ordnung). r.u.= $nW / (\text{cm}^2 \text{sr cm}^{-1})$ .

Die verzerrte ILS beeinflusst das Ergebnis des Temperatur-Retrievals. Je nach Verstärkung oder Abschwächung der Selbstapodisation werden die Temperaturen zu kleineren bzw. größeren Werten verschoben. In der rechten Grafik sind direkt die Differenzen zum Retrieval-Ergebnis mit ungestörter ILS dargestellt. Die Werte des  $c_2$ -Koeffizienten sind in Tabelle 5.1 auf Seite 39 aufgeführt.

dies einer stärkeren Selbstapodisation, eine Vergrößerung hingegen bedeutet, daß die Modulationsfunktion des Instruments zu großen Gangunterschieden hin langsamer abnimmt, als beim Retrieval angenommen wird.

Die Abbildungen 5.3 zeigen die Retrieval-Ergebnisse bis zur Beobachterhöhe. Bei der Auftragung rechts wurden dabei alle Kurven vom Ergebnis mit ungestörter ILS

abgezogen. Diese Auftragung zeigt damit direkt den Einfluß der veränderten ILS auf das Retrieval. Bei Verstärkung der Selbstapodisation werden die Temperaturen im Mittel zu kleineren Werten verschoben, bei Verkleinerung zu größeren Werten. Dies ist verständlich, wenn man bedenkt, daß kleinere CO<sub>2</sub>-Linien auch niedrigere Temperatur bedeuten, da das Mischungsverhältnis als bekannt vorausgesetzt wurde. Zum Ausgleich wird die Temperatur bei den Höhen oberhalb des Instruments zu hoch berechnet. Allerdings sieht man auch, daß es an den Grenzen der obersten und untersten Tangentenhöhen zu Oszillationen kommt. Dies deutet an, daß das zuvor als optimal angesehene  $\gamma$  nun nicht mehr ausreicht. Die Veränderung der Spektren durch die Verzerrung der Linienform erfordert eine stärkere Regularisierung.

Es fällt auch auf, daß die hinzugefügten Zwischenhöhen empfindlicher auf eine veränderte ILS reagieren als die Tangentenhöhen selbst. Eine Ausnahme bildet nur die oberste Tangentenhöhe (37.88 km), die stärker abweicht als ihre beiden Nachbarn. In Abbildung 5.4 ist das Ergebnis des Temperatur-Retrievals mit angepaßtem  $\gamma=50$  dargestellt. Bei diesem Wert tritt nur noch in den untersten Tangentenhöhen eine Oszillation auf.

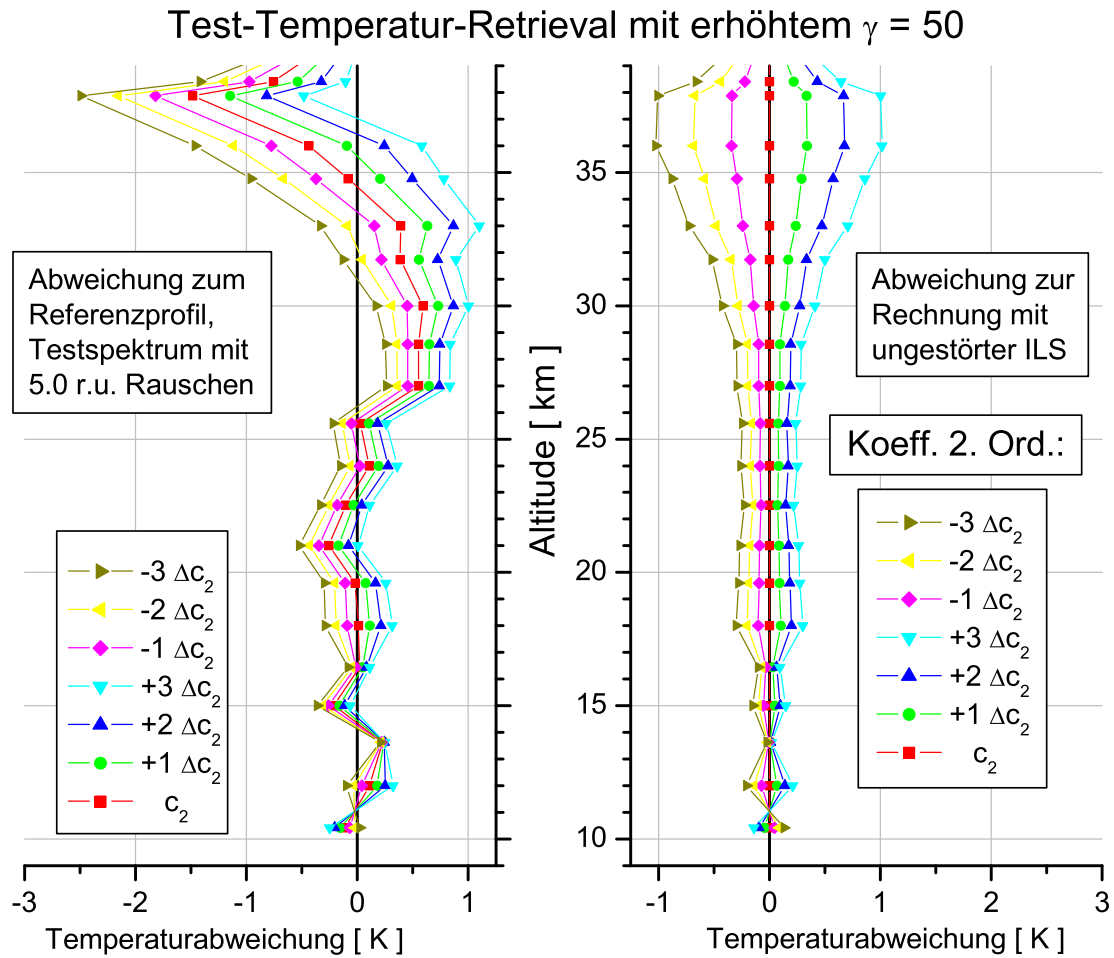
Die Veränderung der Halbwertsbreite (FWHM) abhängig vom CM-Koeffizienten 2. Ordnung ist in Abbildung 5.5 oben zu sehen. Der direkte Einfluß des Koeffizienten auf das Retrieval ist in der Mitte für die kleine Regularisierung und vier ausgewählte Tangentenhöhen gezeigt. Bei der mittleren Tangentenhöhe (ca. 26 km) findet kaum eine Änderung statt. Die unterste ist leicht verändert, aber hier oszillieren die abgeleiteten Temperaturen mit der Höhe. Die oberste Tangentenhöhe (ca. 38 km) weicht im Meßbereich am stärksten ab, der Übergangsbereich ist offensichtlich am empfindlichsten auf eine nicht korrekte Apparatfunktion. Die oberen Retrieval-Höhen (50 km repräsentativ) weichen in umgekehrter Richtung ab. Vom oberen Bereich ist sehr wenig Information in den Spektren, so daß sich dort die Temperatur an das A-priori-Profil anpaßt, nachdem es die Abweichungen der oberen Tangentenhöhen ausgeglichen hat. Bei der größeren Regularisierung ist der Einfluß viel geringer, die größte Abhängigkeit besteht bei der obersten Tangentenhöhe.

Auffällig ist auch die Linearität der Abweichungen in Abhängigkeit vom CM-Koeffizienten. Dies deutet an, daß die Differentiation bei den hier vorkommenden Veränderungen durch den Differenzenquotienten angenähert werden kann.

$$\frac{d(T)}{d(CM)} \approx \frac{\Delta(T)}{\Delta(CM)} \quad (5.4)$$

Weitere Rechnungen mit Option 2, das ist die Einstellung, in der KOPRAFIT mit einem höhenkonstanten A-priori-Profil regularisiert, zeigten ähnliche Ergebnisse wie oben beschrieben.

Die Temperaturänderungen bei verstärkter Regularisierung unterhalb von 30 km bleiben unter  $0.25 \cdot 10^9 \text{ K}/[\text{c}_2]$ , also bei  $950 \text{ cm}^{-1}$  ca. 0.14 K pro 0.1 Änderung der

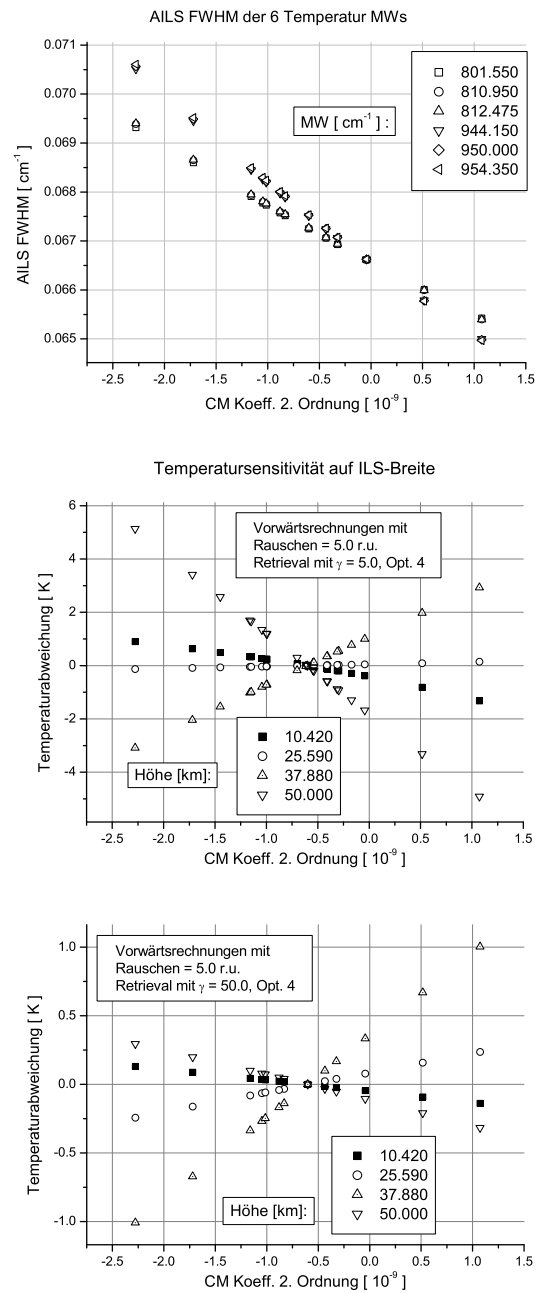


**Abb. 5.4:** Temperatur-Retrieval bei veränderter ILS-Breite und starker Regularisierung.

Die verzerrte ILS beeinflusst das Ergebnis des Temperatur-Retrievals so stark, daß eine erhöhte Regularisierung notwendig ist. Die Oszillationen im unteren Bereich verschwinden dann. Qualitativ bleibt jedoch das Verhalten im Vergleich zur kleineren Regularisierung gleich: Der Bereich oberhalb von 35 km ist am stärksten betroffen und zwar so, daß eine kleinere Modulationstiefe eine kleinere Temperatur zur Folge hat.

Modulation bei maximalem Gangunterschied von 14.5 cm. Die auffällige 37.88-km-Tangentenhöhe weicht um  $0.6 \cdot 10^9 \text{ K}/[c_2]$  ab, das sind 0.33 K pro 0.1 Modulationsänderung bei maximalem Gangunterschied. Da der totale Fehler der Temperatur beim realen Retrieval ca. 1 K beträgt, sollte die Modulationsfunktion also auf etwa





**Abb. 5.5:** Halbwertsbreite und ausgewählte Tangentenhöhen beim Temperatur-Retrieval.

Oben: FWHM der verzerrten AILS der sechs Microwindows in Abhängigkeit des CM-Koeffizienten 2. Ordnung. Mitte: Ergebnis des Temperatur-Retrievals für vier Tangentenhöhen mit  $\gamma=5$  in gleicher Abhängigkeit wie oben. Unten: Wie mittlerer Graph, aber mit erhöhtem  $\gamma=50$ .

0.1 genau bekannt sein, wenn man auch in der obersten Tangentenhöhe den Fehler durch eine falsche ILS unter 0.5 K halten möchte. Für die mittleren Höhen ist der Einfluß unkritisch.

### 5.2.2 Retrieval von $\text{HNO}_3$

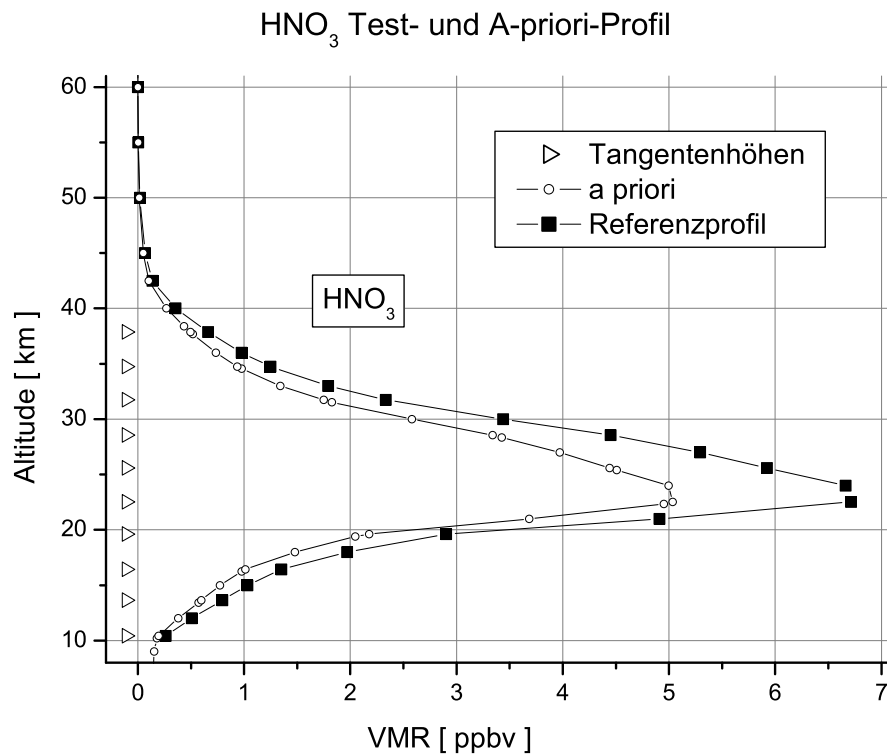
Als Beispiel eines Spurengases, welches in Kanal 1 bestimmt wird, dient  $\text{HNO}_3$ . Dessen Signatur besteht aus sehr vielen dicht beieinander liegenden Linien im Bereich von 840 bis 920  $\text{cm}^{-1}$ . Verwendet wurde das Wellenzahlfenster von 864.019 bis 874.012  $\text{cm}^{-1}$ , also einer Breite von ca. 10  $\text{cm}^{-1}$ ; ansonsten fand das Retrieval wie bei der Temperatur statt. Allerdings ist zu beachten, daß ein Temperaturprofil vorgegeben werden muß. Es ist deshalb zu unterscheiden, ob das Temperaturprofil genau bekannt ist, oder aber selbst aus einem vorherigen Retrieval gewonnen wurde. In diesem Fall ist das T-Profil fehlerhaft und beeinflusst das Retrieval des Spurengases.

Es wurden Rechnungen mit verschiedenen A-priori-VMR-Profilen durchgeführt. Abweichungen treten hauptsächlich im Bereich des VMR-Maximums zwischen 20 und 25 km auf. Als Beispiel für die beobachteten Effekte soll ein A-priori-Profil dienen, bei dem die Mischungsverhältnisse um 25 % gegenüber dem Referenzprofil vermindert wurden (s. Abbildung 5.6). Da sich das Maximum von  $\text{HNO}_3$  nicht immer in der selben Höhe befindet, wurde auch eine Testrechnung mit einem höhenkonstanten A-priori-Profil durchgeführt (Option 2 in KOPRAINV). Das Retrieval selbst wird dadurch unsicherer, der Einfluß einer verzerrten ILS bleibt jedoch gleich.

Es wurden die gleichen Tangentenhöhen wie beim Temperatur-Retrieval, also die des Flugs 6 herangezogen. Ebenfalls wie beim Temperatur-Retrieval wurde zunächst der optimale Regularisierungsparameter  $\gamma$  aus einem Satz Spektren ermittelt, die nur ein definiertes Rauschen von 5  $\text{nW}/(\text{cm}^2 \text{sr cm}^{-1})$  enthielten. Es ergab sich allerdings ein weiter Bereich, in dem  $\gamma$  gewählt werden konnte, ohne daß sich das Retrieval-Ergebnis merklich änderte. Zur Feststellung, wie sich das  $\gamma$  auf das abgeleitete Vertikalprofil auswirkt, wurden für das VMR-Retrieval von  $\text{HNO}_3$  verschiedene  $\gamma$  verwendet.

Abbildung 5.7 zeigt die Abweichung des Retrieval-Ergebnisses bei Veränderung der ILS-Breite und einer Regularisierungsstärke von  $1.0 \cdot 10^8$ . Wie bei der Temperatur ist ein  $\gamma$ , welches bei korrekter ILS noch gut war, bei verzerrter ILS nicht mehr optimal, wie man im unteren Teil der Profile bis 25 km erkennt. Oberhalb dieser Höhe ergibt sich eine Abweichung zu kleineren VMR-Werten bei Verkleinerung der Modulationsfunktion zum Rand des optischen Hubs. Auch dies war bereits beim Temperatur-Retrieval beobachtet worden.

Zur Unterdrückung der Oszillationen in den unteren Höhen wurde ein Retrieval durchgeführt mit einem  $\gamma$  von  $5.0 \cdot 10^8$ . Die stärkere Regularisierung bringt das Ergebnis näher an das A-priori-Profil und dämpft damit nicht nur die Oszillationen



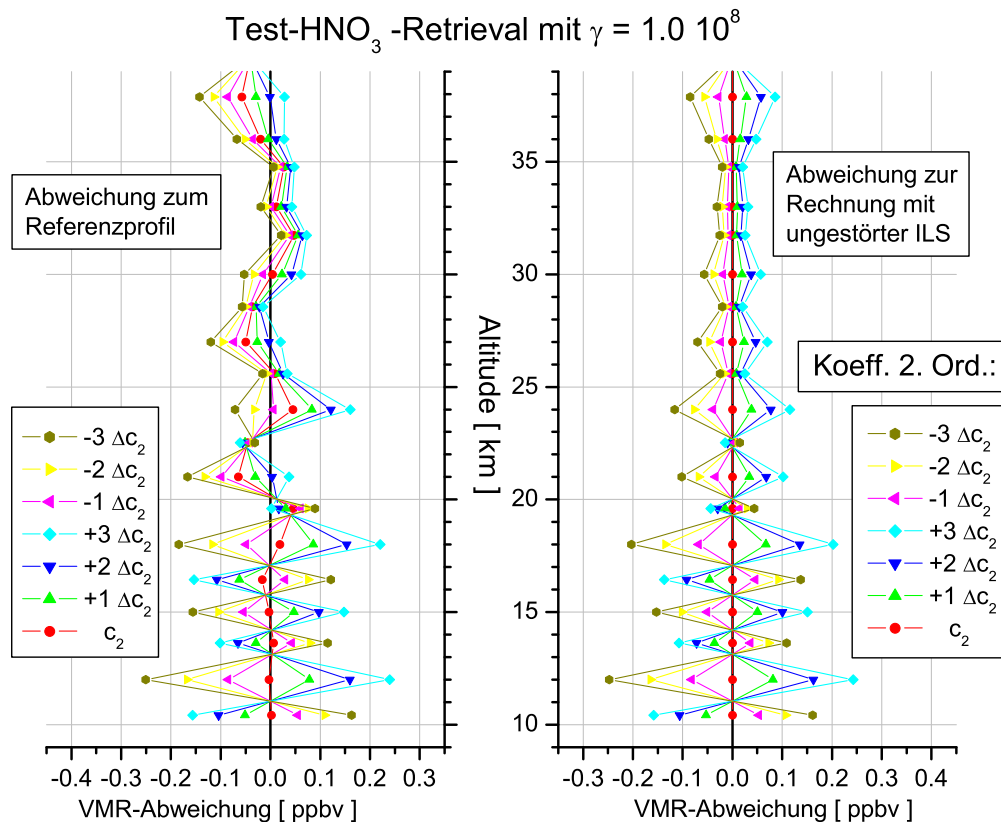
**Abb. 5.6:** Referenz- und A-priori-Profil von HNO<sub>3</sub>.

Das A-priori-Profil für HNO<sub>3</sub> wurde gegenüber dem Referenzprofil um 25 % verringert. Eingezeichnet sind auch die Tangentenhöhen für die beim Retrieval Spektren zur Verfügung gestellt wurden.

sondern auch den Einfluß der veränderten ILS (s. Abbildung 5.8). Qualitativ ist das gleiche Ergebnis wie mit dem ersten  $\gamma$  zu sehen. Oberhalb von 20 km verursacht eine kleinere Modulation auch ein kleineres Mischungsverhältnis. Allerdings ist die Abweichung nicht besonders groß, im Maximum bei ca. 25 km beträgt sie nur 0.02 ppbv (0.3 %) pro 0.1 Modulationsverlust bei maximalem Gangunterschied.

Als zweites muß, wie erwähnt, betrachtet werden, daß auch das Temperaturprofil aus einem Retrieval stammt und deshalb nicht dem korrekten Referenz-Temperaturprofil entspricht. Zur Bestimmung des Einflusses wurde das jeweilige T-Profil des Ergebnisses mit verzierter ILS aus dem vorherigen T-Retrieval verwendet und damit das HNO<sub>3</sub>-Retrieval durchgeführt. D.h. die ILS-Veränderung beim T-Retrieval war genau die gleiche wie beim HNO<sub>3</sub>-Retrieval (bezogen auf die CM).

Bemerkenswert ist, daß die Fehler des T-Retrievals einen umgekehrten Einfluß auf das Ergebnisprofil von HNO<sub>3</sub> haben. D.h. das T-Profil stimmt zwar nicht mit

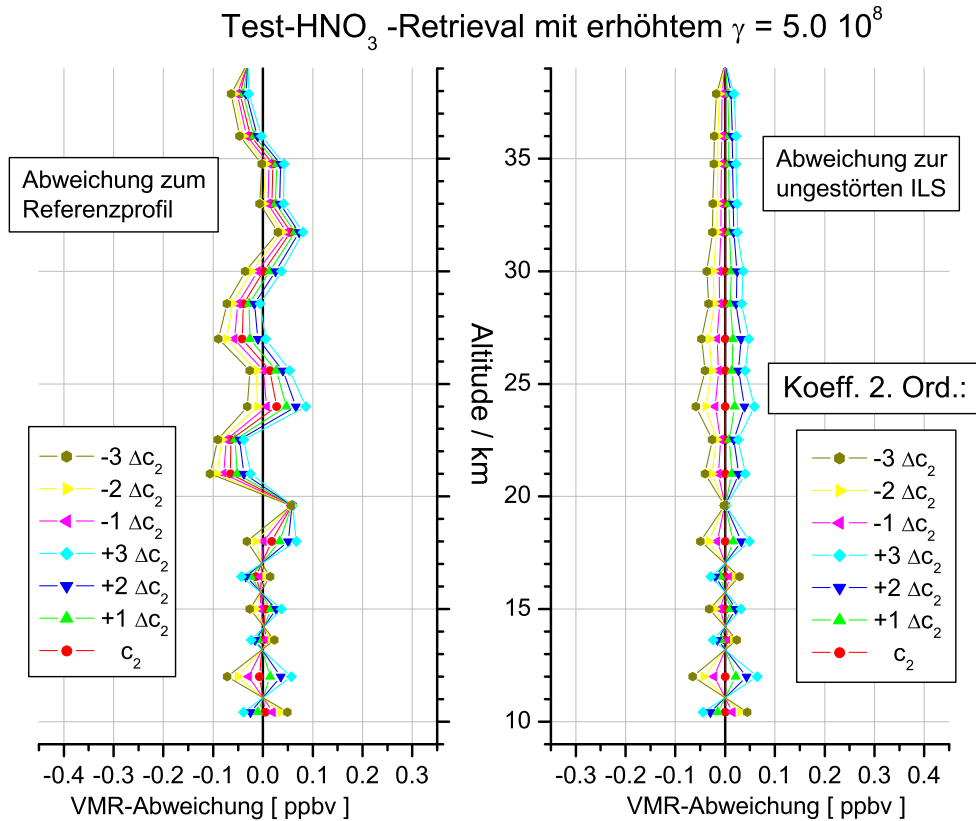


**Abb. 5.7:** HNO<sub>3</sub>-Retrieval bei veränderter ILS-Breite.

Die Stabilität des Retrievals reagiert empfindlich auf eine ILS falscher Breite und Höhe. Im unteren Teil oszillieren die invertierten Profile mit der Höhe. Zwischen 25 und 38 km findet eine kleine Veränderung der Mischungsverhältnisse statt. Je kleiner die Modulationsfunktion, desto kleiner sind auch die VMR-Werte.

den Eingangsdaten der Vorwärtsrechnung überein, aber dafür wird der Fehler des HNO<sub>3</sub>-Retrievals kompensiert. Eine Erklärung soll für eine kleinere, breitere ILS im Vergleich zur exakten gegeben werden:

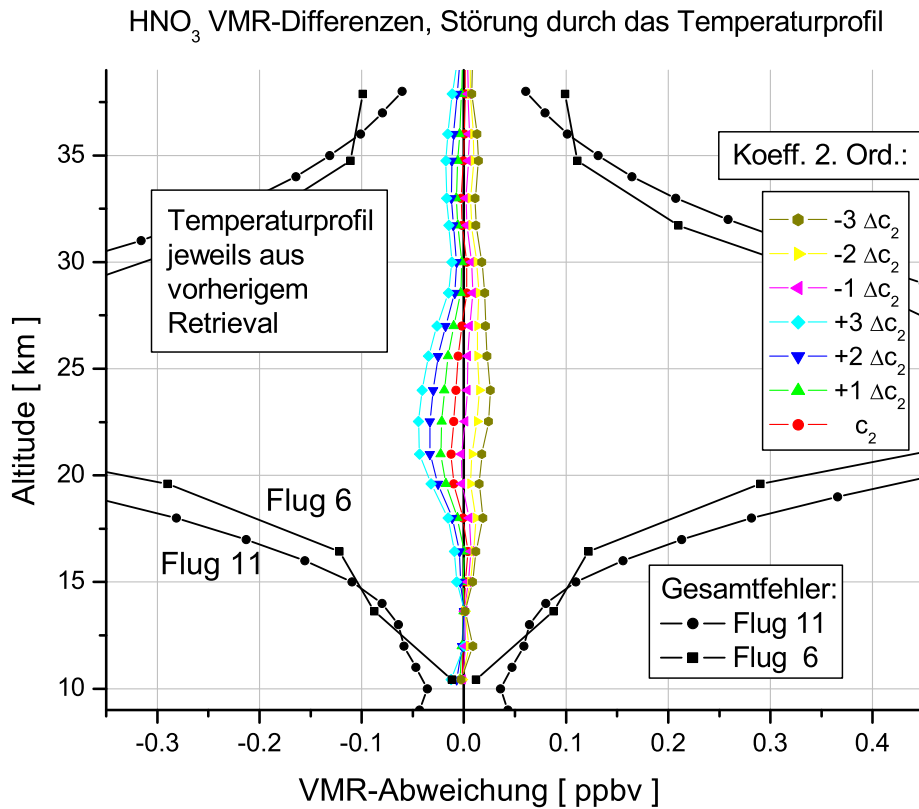
Die CO<sub>2</sub>-Linien der Temperaturbestimmung sind dadurch ebenfalls verkleinert und verbreitert, was nach Abschnitt 5.2.1 zu einer niedrigeren Temperatur im Retrieval führt. Die HNO<sub>3</sub>-Linien befinden sich im selben Kanal und sind in etwa der gleichen ILS-Verzerrung unterworfen. Diese kann beim Retrieval von HNO<sub>3</sub> durch geringere Mischungsverhältnisse im Ergebnis oder durch eine kleinere, vorgegebene Temperatur ausgeglichen werden. Aber genau das letztere war das Ergebnis der veränderten ILS im zuvor durchgeführten Temperatur-Retrieval.



**Abb. 5.8:** HNO<sub>3</sub>-Retrieval bei veränderter ILS-Breite und erhöhtem  $\gamma$ . Die Stabilität des Retrievals bei starker Regularisierung reagiert schwächer auf eine ILS falscher Breite und Höhe als bei kleiner Regularisierung. Die Oszillationen mit der Höhe im unteren Teil sind nur noch schwach ausgeprägt. Zwischen 20 und 38 km findet eine kleine Veränderung der VMR-Werte mit der gleichen Abhängigkeit wie zuvor von der Modulationsfunktion statt.

Im betrachteten Fall ist der kompensierende Effekt allerdings so stark, daß die Abweichungen in die umgekehrte Richtung gehen, d.h. eine kleinere Modulationsfunktion verursacht größere VMR-Werte. Abbildung 5.9 zeigt das Ergebnis des Retrievals, wenn zur vorgegebenen ILS jeweils auch das zuvor aus den gleichen Spektren abgeleitete Temperaturprofil verwendet wird. Die umgekehrte Reihenfolge in der Kurvenschar zeigt deutlich die Überkompensation der VMR-Abweichung durch die zuvor abgeleitete Temperatur. Verglichen mit dem Retrieval bei dem das korrekte Temperaturprofil verwendet wurde, sind die Änderungen aber ca. um eine Größenordnung geringer.

Insgesamt betrachtet sind die Abweichungen durch die verzerrte ILS aber mini-



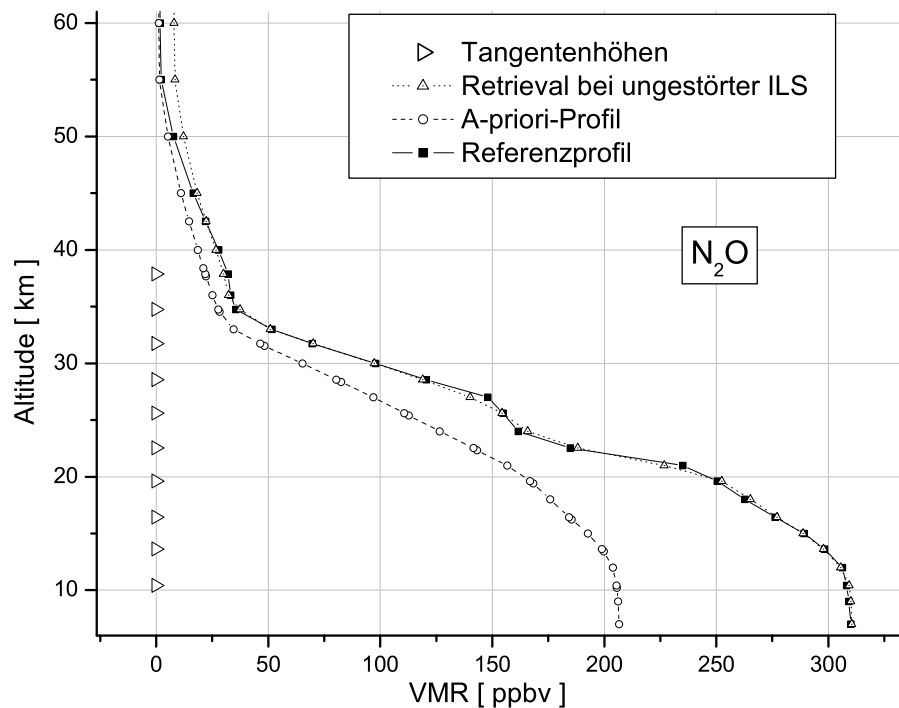
**Abb. 5.9:** HNO<sub>3</sub>-Retrieval mit  $\gamma = 5.0 \cdot 10^8$  bei veränderter ILS-Breite und aus gleichem Spektrum abgeleitete Temperatur.

Die fast gleiche ILS der CO<sub>2</sub>-Linien beim vorhergegangenen T-Retrieval verursacht eine Überkompensation der Effekte der veränderten ILS des HNO<sub>3</sub>-Retrievals. Es findet durchweg eine Veränderung der Mischungsverhältnisse statt, die umso größere VMR-Werte liefert, je kleiner die Modulationsfunktion ist. Verglichen mit dem Gesamtfehler sind sie aber vernachlässigbar.

mal und verglichen mit dem 10 %igen Gesamtfehler des Retrievals von HNO<sub>3</sub> vernachlässigbar. In diesem sind die Fehler durch Rauschen, der Temperatur, Sichtlinie und der spektroskopischen Daten enthalten.

### 5.2.3 Retrieval von N<sub>2</sub>O

Ein wichtiges Spurengas im Kanal 2 ist N<sub>2</sub>O, welches hier als Beispiel für die Sensitivität des Retrievals auf die ILS in diesem Kanal benutzt wurde. Im Gegensatz zu HNO<sub>3</sub> hat N<sub>2</sub>O als Quellgas sein Maximum in der Troposphäre und nimmt nach

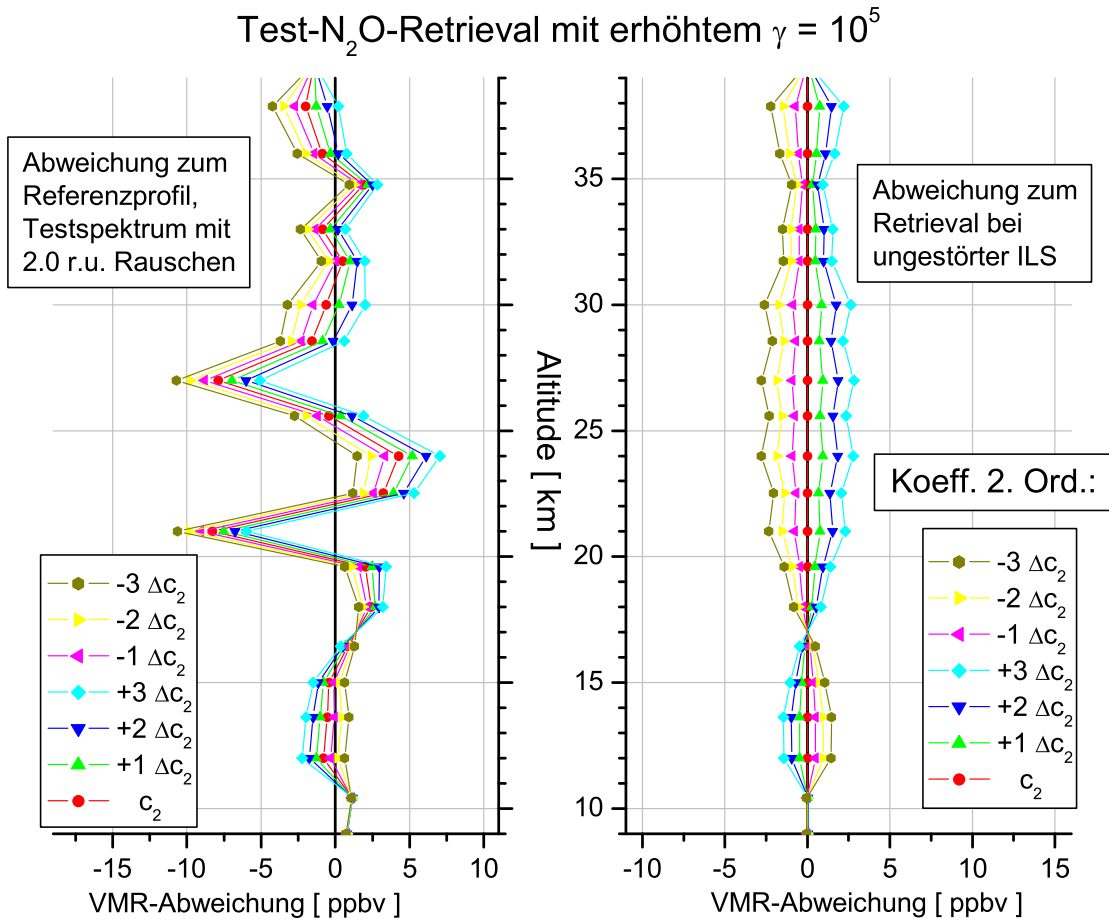


**Abb. 5.10:** Referenz- und A-priori-Profil für das Test-Retrieval von  $\text{N}_2\text{O}$  in Kanal 2.

Eingezeichnet ist auch das Retrieval mit ungestörter ILS mit der Regularisierungsstärke  $1.0 \cdot 10^5$ . Die Einsenkung bei 25 km kann mit dem glatten A-priori-Profil und dem verwendeten  $\gamma$  nicht vollständig wiedergegeben werden. Diese Regularisierungsstärke ist aber notwendig, um bei verzerrter ILS Oszillationen zu verhindern.

oben hin ab. Die Tests wurden wie bei der Temperatur und bei  $\text{HNO}_3$  durchgeführt. Es traten auch die gleichen Phänomene in Erscheinung. Abbildung 5.10 zeigt das verwendete Referenz- und A-priori-Profil. Zusätzlich ist das abgeleitete Profil aus einem Spektrensatz mit ungestörter ILS aber einem Rauschen von  $2.0 \text{ nW}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$  eingezeichnet. Die Struktur bei einer Höhe von 25 km kann mit dem glatten A-priori-Profil und dem verwendeten  $\gamma$  von  $1.0 \cdot 10^5$  nicht vollständig wiedergegeben werden. Erst eine kleinere Regularisierung ( $\leq 2.0 \cdot 10^4$ ) macht dies möglich, dann treten bei verzerrter ILS jedoch die schon bekannten Oszillationen auf, wie sie ähnlich bei  $\text{HNO}_3$  in Abbildung 5.7 zu sehen sind.

Die Ergebnisse mit verschieden stark veränderten ILS-Breiten sind in Abbildung 5.11 gezeigt: links die Differenzen zum Referenzprofil und rechts die zum Retrieval der Spektren mit ungestörter ILS. Bei den Höhen oberhalb von 17 km

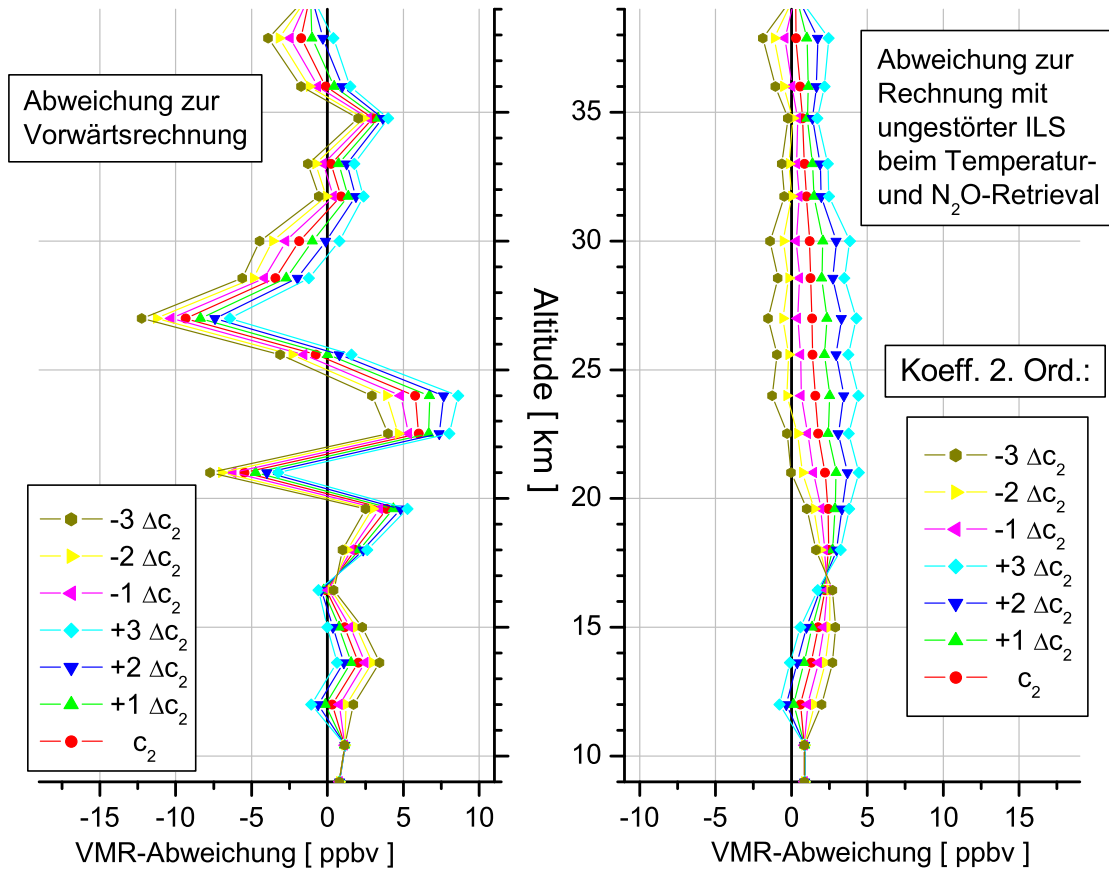


**Abb. 5.11:** N<sub>2</sub>O-Retrieval bei veränderter ILS-Breite und erhöhtem  $\gamma$ . Links das direkte Retrieval-Ergebnis mit den starken Abweichungen um 25 km, wo die Struktur des Referenzprofils mit dem verwendeten  $\gamma$  nicht wiedergegeben werden kann. Die Regularisierungsstärke von  $1.0 \cdot 10^5$  ist aber notwendig, um Oszillationen zu verhindern. Rechts sind die Abweichungen zum Retrieval mit ungestörter ILS dargestellt.

tritt der gleiche Effekt wie bei den Tests mit der Temperatur und HNO<sub>3</sub> auf. Eine kleinere Modulationsfunktion zum Rand des Interferogramms führt zu einem kleineren Volumenmischungsverhältnis. Bei N<sub>2</sub>O kehren sich unterhalb davon die Verhältnisse allerdings um: Die verbreiterten Linien zusammen mit der hohen Konzentration nahe der Tropopause können im Retrieval offensichtlich nur mit noch höheren VMR-Werten angepaßt werden.



Test-N<sub>2</sub>O-Retrieval mit  $\gamma = 10^5$  und abgeleitetem T-Profil aus  $-1\Delta c_{2,T}$ -Spektrum



**Abb. 5.12:** N<sub>2</sub>O-Retrieval mit abgeleitetem T-Profil bei verbreiteter ILS. Links abgebildet ist die Differenz zum Referenzprofil, rechts die Differenz zum N<sub>2</sub>O-Profil aus dem Retrieval mit ungestörter ILS beim Temperatur- und N<sub>2</sub>O-Retrieval. Die falsche Temperatur verursacht einen Versatz zu höheren VMR-Werten. Wie zuvor ist die Regularisierungsstärke von  $1.0 \cdot 10^5$  notwendig, um Oszillationen zu verhindern.

Da die ILS von Kanal 1 nicht unbedingt mit der von Kanal 2 übereinstimmen muß, kann auch die zuvor in Kanal 1 bestimmte Temperatur so fehlerbehaftet sein, daß es beim Retrieval von N<sub>2</sub>O im Kanal 2 nicht zu dem beschriebenen kompensierenden Effekt kommt. Um dies zu quantifizieren wurden zwei verschiedene Ergebnisse des Temperatur-Retrievals zur Inversion von N<sub>2</sub>O verwendet.

- Zuerst wurde angenommen, daß die ILS der CO<sub>2</sub>-Linien breiter sind als für das Temperatur-Retrieval verwendet ( $\Delta CM = -1\Delta c_{2,T}$ ). Das beste Ergebnis geht nun

in das Retrieval von  $\text{N}_2\text{O}$  ein. Hier haben wir wieder die Möglichkeit verschieden verformter Apparatefunktionen. Auch die theoretisch mögliche ILS entspricht aufgrund des Einflusses des Gesichtsfeldes nicht der von Kanal 1, da die Verbreiterung mit der Wellenzahl wächst.

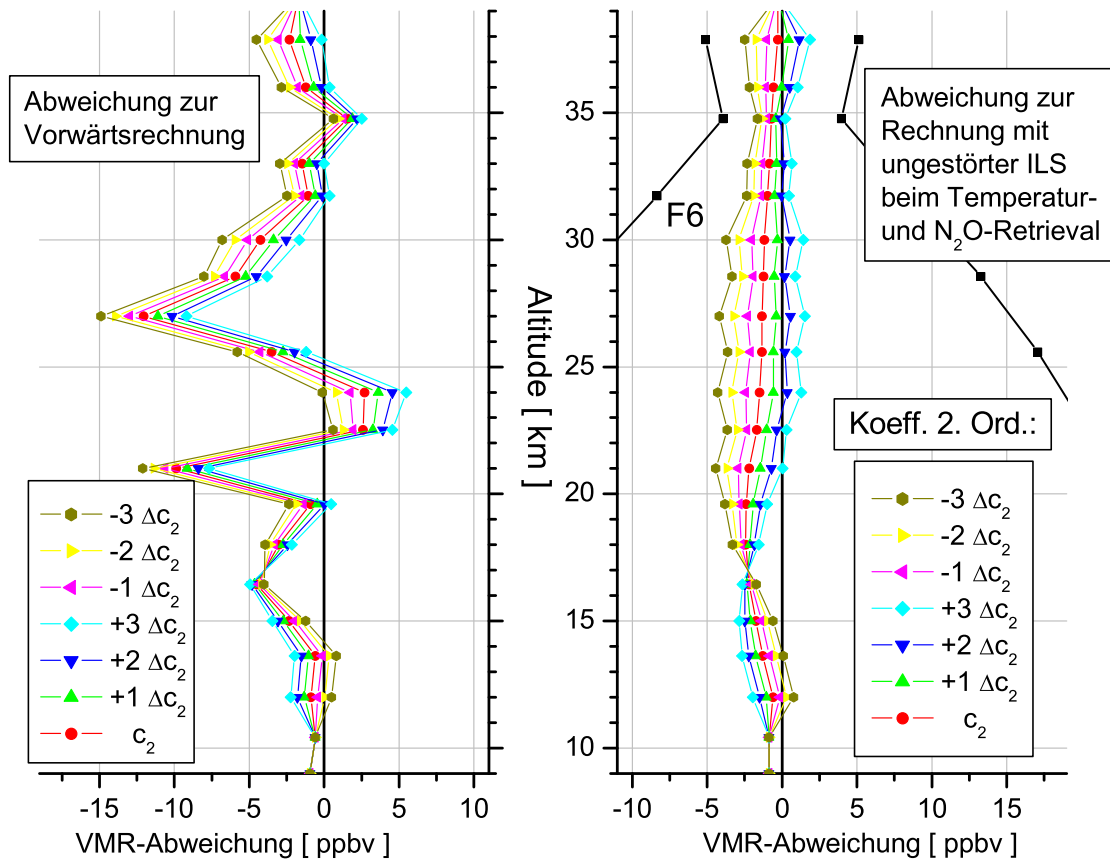
Das Ergebnis sechs verschiedener Retrievals mit  $\gamma = 1.0 \cdot 10^5$  ist in Abbildung 5.12 zu sehen. Links sind die Differenzen zum Referenzprofil aufgetragen; das Ergebnis ähnelt stark dem von Abbildung 5.11, bei dem das korrekte T-Profil verwendet wurde. Im rechten Graph ist die Wirkung des falschen Temperaturprofils besser zu sehen, hier wurde das Profil, welches mit korrekter ILS beim Temperatur- und  $\text{N}_2\text{O}$ -Retrieval erhalten wurde, subtrahiert. Das ganze Profil ist zu größeren VMR-Werten verschoben. Der kompensatorische Effekt des vorhergegangenen T-Retrievals tritt hier genauso auf wie beim  $\text{HNO}_3$ -Retrieval. Ist die zur ILS gehörende Modulation beim  $\text{N}_2\text{O}$ -Retrieval in die gleiche Richtung verändert wie beim T-Retrieval, so wirkt dies der VMR-Abweichung entgegen. Unterhalb von 17 km war die Änderung des VMR-Profiles von  $\text{N}_2\text{O}$  aber umgekehrt (Abb. 5.11), deswegen tritt hier nun eine verstärkte Abweichung auf, d.h. der Effekt einer falschen ILS im Temperatur-Retrieval addiert sich zum Effekt der falschen ILS beim  $\text{N}_2\text{O}$ -Retrieval.

- Als zweites wurde umgekehrt angenommen, daß die ILS der  $\text{CO}_2$ -Linien schmaler waren, als die beim T-Retrieval verwendete ILS ( $\Delta CM = +1\Delta c_{2,T}$ ). Beim  $\text{N}_2\text{O}$ -Retrieval wurden nun wieder verschieden breite ILS für die Spektren bei der Vorwärtsrechnung angenommen.

Abbildung 5.13 zeigt links wieder die Abweichungen vom Referenzprofil und rechts die vom  $\text{N}_2\text{O}$ -Profil aus dem Temperatur-Retrieval mit ungestörter ILS. Fast symmetrisch zu vorher tritt nun eine Verschiebung aller Kurven zu kleineren VMR-Werten auf. Die schmale ILS beim T-Retrieval verkleinert also die Ergebnisse der  $\text{N}_2\text{O}$ -Inversion. Eine Kompensation der Effekte tritt oberhalb von 17 km wiederum auf, wenn die ILS der  $\text{CO}_2$ - und der  $\text{N}_2\text{O}$ -Linien in die gleiche Richtung verändert wurden, in diesem Fall sind sie schmaler als erwartet. Unterhalb 17 km sind die Verhältnisse wieder umgekehrt: Eine schmale ILS der  $\text{CO}_2$ -Linien würde durch eine breitere der  $\text{N}_2\text{O}$ -Linien kompensiert. Zur Bewertung der Abweichungen sind die Gesamtfehler von  $\text{N}_2\text{O}$ , wie sie sich bei Flug 6 ergaben, eingezeichnet (schwarze Quadrate).

Diese Rechnung basierte auf Daten eines Fluges mittlerer Breite. Als ungefähren Einfluß für den Bereich um 25 km läßt sich ohne den „Temperaturversatz“ ein Wert von  $4.1 \cdot 10^9$  ppbv/[ $c_2$ ] angeben, das sind 1.4 ppbv pro 0.1 Modulationsänderung am Ende des optischen Hubs. Bezogen auf die 150 ppbv des erwähnten Höhenbereichs entspricht dies einer VMR-Abweichung von ca. 0.9 % pro 0.1 Modulationsänderung. Bei gleichartiger ILS in den Kanälen 1 und 2 gilt dies auch beim Einfluß durch das Temperatur-Retrieval. Da der Gesamtfehler des  $\text{N}_2\text{O}$ -Retrievals bei ca. 10 % liegt, wird der Einfluß der ILS in diesem Höhenbereich erst bei der nächsten Größenordnung interessant. Oberhalb von 35 km, wo die  $\text{N}_2\text{O}$ -Konzentration sehr gering ist,

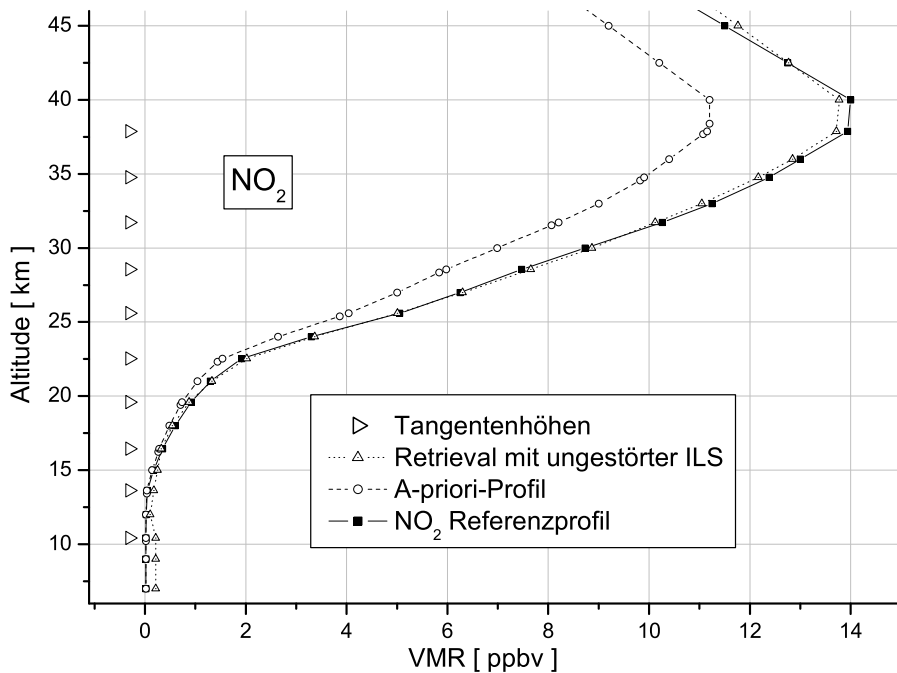
Test-N<sub>2</sub>O-Retrieval mit  $\gamma = 10^5$  und abgeleitetem T-Profil aus  $+1\Delta c_{2,T}$ -Spektrum



**Abb. 5.13:** N<sub>2</sub>O-Retrieval bei verjüngter ILS im T-Retrieval.

Wie im letzten Bild ist hier links die Differenz zum Referenzprofil und rechts die Differenz zum N<sub>2</sub>O-Profil der Spektren mit ungestörter ILS beim Temperatur- und N<sub>2</sub>O-Retrieval abgebildet. Die falsche Temperatur verursacht einen Versatz zu kleineren VMR-Werten. Zur Bewertung sind zusätzlich die Gesamtfehler von N<sub>2</sub>O bei Flug 6 (schwarze Quadrate) eingezeichnet.

erreicht der Einfluß der ILS z.T. die gleiche Größenordnung. Extrem geringe N<sub>2</sub>O-Konzentrationen oberhalb von 25 km kommen durch Absinkbewegungen im stratosphärischen Polarwirbel zustande. Rechnungen bei einer solchen Situation (Flug 13) bestätigen für den erwähnten Höhenbereich, daß der Einfluß der ILS zum Teil die Größenordnung des Gesamtfehlers erreicht.

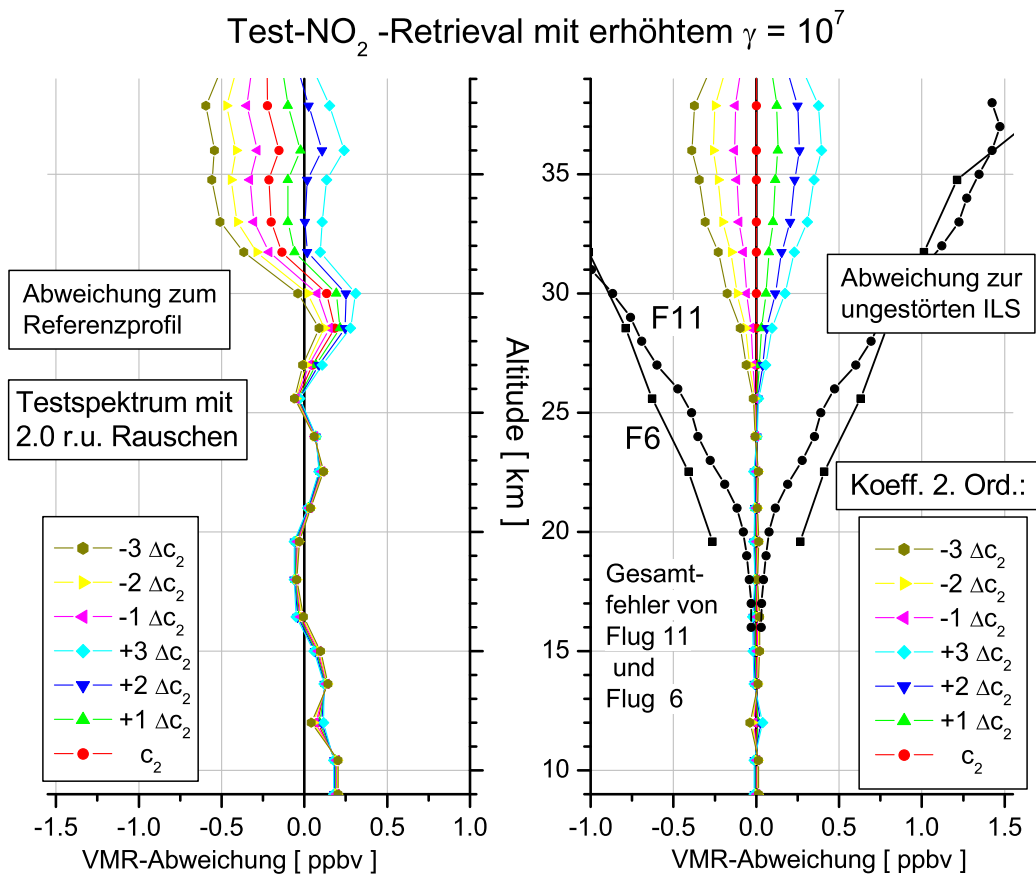


**Abb. 5.14:** Referenz- und A-priori-Profil für das Test-Retrieval von NO<sub>2</sub> in Kanal 3.

Eingezeichnet ist auch das Retrieval mit ungestörter ILS mit der Regularisierungsstärke  $1.0 \cdot 10^7$ . Das Maximum in der Nähe der Beobachterhöhe kann mit dem eingezeichneten A-priori-Profil und dem verwendeten, erhöhten  $\gamma$  nur auf 1.4 % genau wiedergegeben werden. Wie zuvor ist diese Regularisierungsstärke aber notwendig, um Oszillationen als Funktion der Höhe zu vermeiden.

### 5.2.4 Retrieval von NO<sub>2</sub>

Ein wichtiges Gas, welches aus Kanal 3 bestimmt wird, ist NO<sub>2</sub>. Die Bande besteht aus vielen Linien im Bereich um  $1600 \text{ cm}^{-1}$ , die von z. T. großen H<sub>2</sub>O-Linien überlagert sind. Eine Lücke ohne starke H<sub>2</sub>O-Linie existiert von  $1590$  bis  $1595 \text{ cm}^{-1}$ , in der sowohl Wasser als auch NO<sub>2</sub> invertiert werden kann. Die Spektren wurden mit  $2.0 \text{ nW}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$  Rauschen berechnet. Das Retrieval zur Bestimmung der optimalen Regularisierungsstärke bei ungestörter ILS ergab  $\gamma = 1.0 \cdot 10^6$ . Bei den Retrievals mit verzerrter ILS mußte die Regularisierung auf  $10^7$  erhöht werden. In Abbildung 5.14 sind das Referenz- und das A-priori-Profil von NO<sub>2</sub> dargestellt, außerdem das Retrieval-Ergebnis mit einer ungestörten ILS und der Regularisierungsstärke von  $1.0 \cdot 10^7$ . Bei dieser starken Regularisierung wird das Profil im Maximum nicht optimal wiedergegeben, die größte absolute Abweichung tritt deshalb dort auf und



**Abb. 5.15:** NO<sub>2</sub>-Retrieval bei veränderter ILS-Breite und verstärkter Regularisierung.

Rechts die Abweichungen der Retrieval-Ergebnisse von links vom ebenfalls eingezeichneten Retrieval mit ungestörter ILS. Im Bereich der Beobachterhöhe, wo sich auch das Maximum befindet, treten die größten Abweichungen auf. Die Form des ausgeprägten Maximums kann mit der Regularisierungsstärke  $1.0 \cdot 10^7$  nicht wiedergegeben werden. Diese Regularisierungsstärke ist aber notwendig, um Oszillationen des Profils aufgrund der verzerrten ILS zu verhindern.

beträgt 1.4 %. Bei veränderter ILS-Breite, wie zuvor durch den CM-Koeffizienten 2. Ordnung erzeugt, treten die größten Veränderungen genau im Maximum auf. Abbildung 5.15 zeigt die Abweichungen, die wie bei den anderen Spurengasen umso größer werden, je größer die ILS-Verzerrung ist. Auch die Richtung ist die gleiche: Eine verkleinerte Modulationsfunktion am Rand des Interferogramms verursacht kleinere VMR-Werte beim Retrieval. Deutlich zutage treten diese aber erst oberhalb von

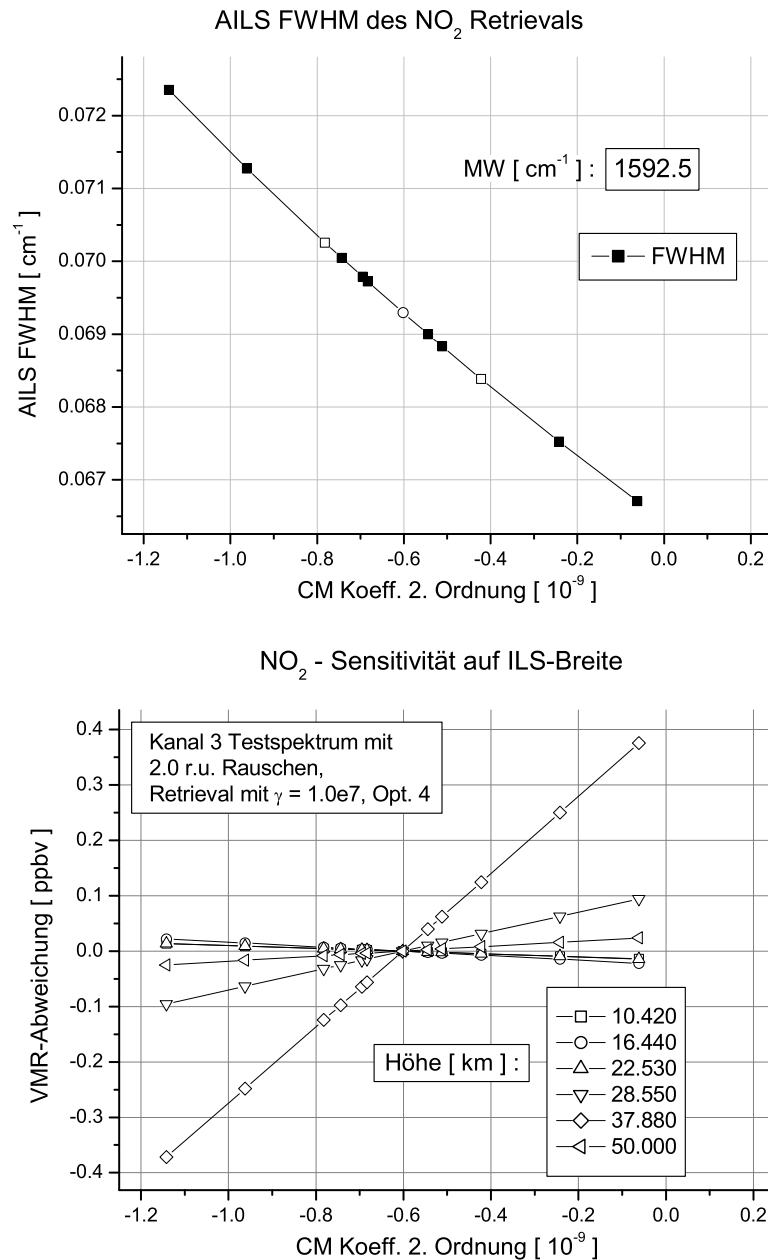
25 km, wo das Profil auf sein Maximum zusteuert. Abbildung 5.16 zeigt oben den Zusammenhang zwischen dem veränderten Koeffizienten und der Halbwertsbreite der AILS. Unten ist die Abhängigkeit der VMR-Veränderung ausgewählter Höhen von CM-Koeffizienten dargestellt. Dabei kann die 50 km-Höhe als repräsentativ für die Höhen oberhalb des Instruments angesehen werden. In Flughöhe ergibt sich die größte Abhängigkeit mit  $6.96 \cdot 10^8$  ppbv/[ $c_2$ ], das sind 0.13 ppbv pro 0.1 Modulationsänderung am Ende des IFGs im verwendeten Wellenzahlbereich. Verglichen mit dem absoluten VMR-Wert von 14 ppbv dieser Höhe ergibt sich eine Änderung von 0.9 %.

Zur Abschätzung der Auswirkung durch eine zuvor in Kanal 1 bestimmte, fehlerhafte Temperatur wurde das Ergebnis des T-Retrievals aus Spektren mit verbreiteter ILS für die Temperatur von NO<sub>2</sub> in Kanal 3 herangezogen. Da die ILS dieser Kanäle nicht übereinstimmen muß, wurden die NO<sub>2</sub>-Retrievals alle mit dem T-Profil aus dem Retrieval mit erhöhtem  $\gamma=50$  (siehe Abb. 5.4 auf S. 44) und der  $-1\Delta c_{2,T}$ -Verbreiterung gerechnet. In Abbildung 5.17 ist links wie zuvor die Abweichung zum NO<sub>2</sub>-Referenzprofil dargestellt. Oberhalb von 25 km haben sich die Ergebnisse grundlegend geändert. Dies ist ein kombinierter Effekt aus der Verwendung eines abgeleiteten T-Profiles beim NO<sub>2</sub>-Retrieval und dadurch, daß dieses T-Profil aus einem Spektrum mit verbreiteter ILS stammt.

Um den Einfluß der ILS zu erkennen, sind im rechten Teil die Differenzen bezüglich des Ergebnisprofils mit ungestörter ILS beim Temperatur- und NO<sub>2</sub>-Retrieval dargestellt. Oberhalb von 23 km tritt die schon beobachtete Überkompensation auf: Die zu kleinen Temperaturwerte (s. Abbildung 5.4) verursachen beim Retrieval von NO<sub>2</sub> vergrößerte VMR-Werte, sogar viel zu große. Insbesondere ist jeweils die dritte Kurve von links zu beachten, da diese die gleiche Modulationsabsenkung der zur Temperaturbestimmung verwendeten CO<sub>2</sub>-Linien und der NO<sub>2</sub>-Linien repräsentiert. Unterhalb von 23 km summieren sich die Effekte der gleichartig verzerrten ILS vom Temperatur- und NO<sub>2</sub>-Retrieval, sind jedoch insgesamt wesentlich geringer. Zur Beurteilung der Abweichungen sind die realen Gesamtfehler zweier Meßflüge eingezeichnet.

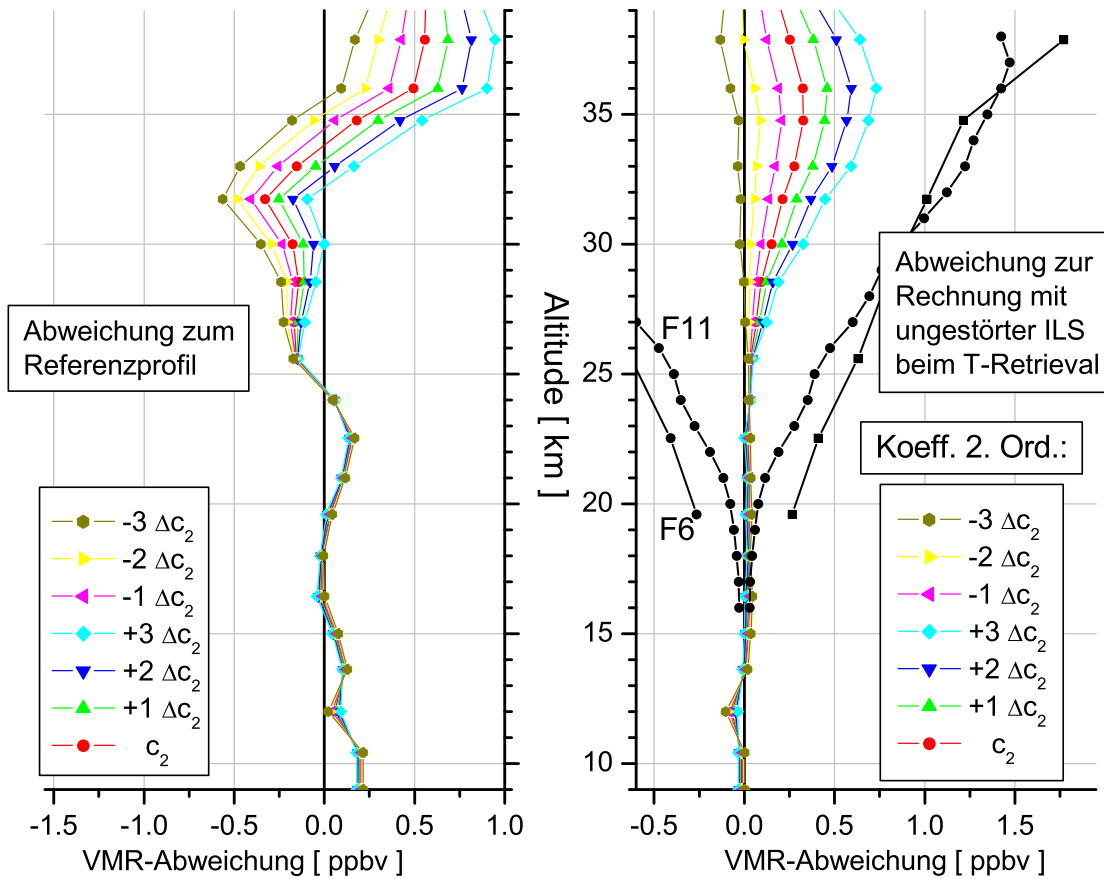
Im Maximum beträgt die Veränderung durch die verzerrte ILS 0.2 ppbv bei einer Änderung von 0.1 der Modulation, das sind 1.5 % von den bei 35 km vorhandenen 13 ppbv, also ca. 1.5mal soviel wie der Einfluß der ILS bei korrekter Temperatur. An den beiden linken Kurven im rechten Graph ist zu sehen, daß eine Kompensation in etwa dann eintritt, wenn das Verhältnis der Modulationsabsenkung zwischen Kanal 1 und 3 etwa 1/2 bis 1/3 beträgt.

Da der Gesamtfehler von NO<sub>2</sub> bei ca. 20 % liegt, ist der Einfluß der ILS oberhalb von 20 km von untergeordneter Bedeutung. Darunter liegt die Konzentration von NO<sub>2</sub> selbst unter 1 ppbv, dort hat der Einfluß der veränderten ILS zum Teil die gleiche Größenordnung wie der Gesamtfehler.



**Abb. 5.16:** Halbwertsbreite und ausgewählte Tangentenhöhen beim Retrieval von NO<sub>2</sub> mit erhöhter Regularisierungsstärke. Oben: FWHM der verzerrten AILS des Microwindows in Abhängigkeit des CM-Koeffizienten 2. Ordnung. Unten: Ergebnis des VMR-Retrievals für sechs Tangentenhöhen in gleicher Abhängigkeit wie oben.

Test-NO<sub>2</sub>-Retrieval mit  $\gamma = 10^7$  und abgeleitetem T-Profil aus  $-1\Delta c_{2,T}$ -Spektrum



**Abb. 5.17:** NO<sub>2</sub>-Retrieval bei verbreiteter ILS im T-Retrieval.

Links abgebildet ist die Differenz zum Referenzprofil, rechts die Differenz zum NO<sub>2</sub>-Profil mit ungestörter ILS beim Temperatur- und NO<sub>2</sub>-Retrieval. Die falsche Temperatur verursacht einen Versatz zu höheren VMR-Werten. Im Bereich der Beobachterhöhe, wo sich auch das Maximum befindet, treten die größten Abweichungen auf. Zur Veränderung durch die verbreiterte ILS des T-Retrievals in Kanal 1 kommt im Kanal 3 der Effekt der veränderten ILS-Breite hinzu.

### 5.2.5 Retrieval bei asymmetrischer ILS

Auch der Einfluß einer asymmetrisch verzerrten ILS auf das Spurengas-Retrieval wurde getestet. Zur Parametrisierung wurde der 3. Koeffizient der Entwicklung der Charakteristischen Modulationsfunktion verwendet (s. Abschnitt 5.1). Da wir die un-



geraden Monome nur für die Phase der CM verwendet haben, wird dadurch hauptsächlich eine Asymmetrie in der ILS verursacht. Eine minimale Veränderung der Halbwertsbreite findet jedoch auch statt. Da die Ableitung der Potenzen ab 2. Ordnung für  $x=0$  stets null beträgt, ist der Schwerpunkt der ILS trotz der Asymmetrie nicht beeinflusst. Eine Asymmetrie, die eine Verschiebung der ILS zur Folge hat, muß nicht betrachtet werden, da diese alle Linien betrifft und im Zuge der Kalibrierung für jeden Kanal korrigiert werden kann oder beim Retrieval als weiterer Parameter angepaßt wird.

Die Einflüsse auf das Retrieval sind noch beim Vielfachen der bisher festgestellten asymmetrischen Verzerrung so klein, daß sie vernachlässigt werden können.

### 5.3 Fazit der Retrievaltests

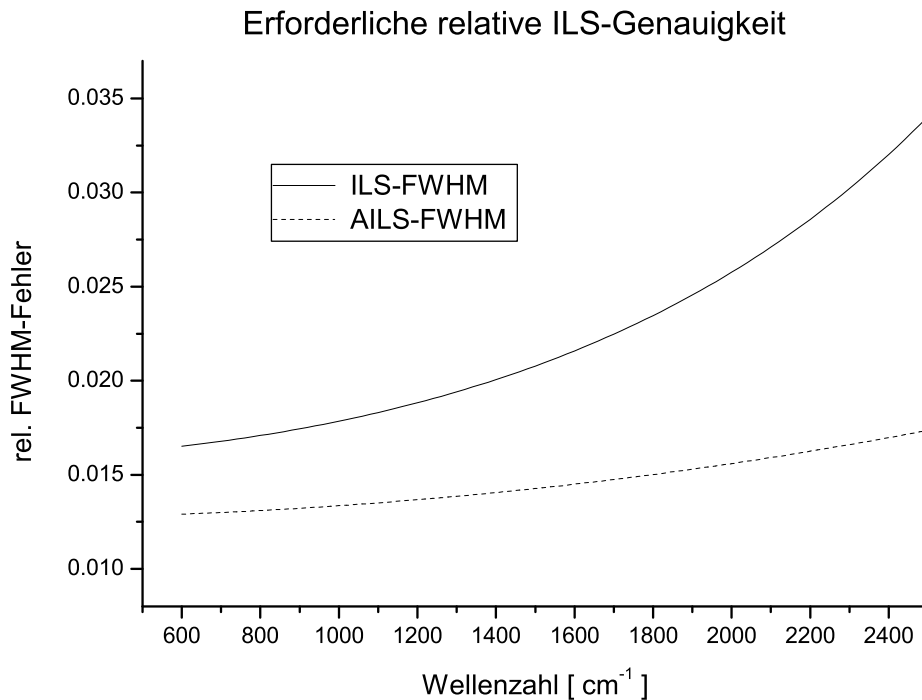
Die vorhergehenden Tests zeigen, daß die Verwendung einer ungenauen ILS die Instabilitäten im Höhenprofil-Retrieval fördert und systematische Retrievalfehler verursachen kann. Die Oszillationen verschwinden im Vergleich zur korrekten ILS erst bei erhöhter Regularisierung. Bemerkenswert dabei ist, daß die Größe der Oszillationen nicht nur von der Stärke der ILS-Verzerrung, sondern auch von der Profilform und den Absolutwerten abhängt. Bei  $\text{HNO}_3$  (Abbildung 5.7) beispielsweise ist die VMR-Änderung in etwa proportional der ILS-Verbreiterung. Während die Punkte der oberen Höhen zwischen 30 und 35 km in die gleiche Richtung verändert werden, beginnen benachbarte Punkte der unteren Höhen schon bei der kleinsten verwendeten ILS-Verbreiterung in entgegengesetzte Richtung abzuweichen.

Die Erhöhung der Regularisierungsstärke bedeutet eine Einschränkung der Freiheitsgrade und damit eine Verminderung der Höhenauflösung. Bei den durchgeführten Tests mußte dabei für die kleinste ILS-Verzerrung meist ein 5-fach erhöhtes  $\gamma$  verwendet werden, was einen Verlust von ca. 2 Freiheitsgraden von ursprünglich 10 auf 8 mit sich brachte.<sup>2</sup>

Die Rechnungen haben für die betrachteten Spurengase gezeigt, daß im Vergleich zum Gesamtfehler der Einfluß durch eine begrenzt fehlerbehaftete ILS kaum ins Gewicht fällt. Will man jedoch den Einfluß der ILS auf die Temperatur unter 0.5 K und auf die Spurengase unter 1 % halten, so ist die Modulationsfunktion etwa mit einer Genauigkeit von  $\pm 0.1$  zu bestimmen. Nimmt man diesen Wert als Grundlage für eine Abschätzung der Halbwertsbreite der ILS, so ergibt sich daraus eine wellenzahlabhängige, erforderliche Genauigkeit, wie sie in Abbildung 5.18 dargestellt ist. Im Kapitel 8 wird gezeigt, daß diese Genauigkeit bei einem Meßflug für die meisten Wellenzahlbereiche erreichbar ist.

---

<sup>2</sup>Bei der Meßgeometrie von MIPAS-B2 mit dem Tangentenhöhenabstand von ca. 3 km bildet jede Tangentenhöhe in etwa einen Freiheitsgrad.



**Abb. 5.18:** Erforderliche relative Genauigkeit der Halbwertsbreite (FWHM) der ILS.

Um den Einfluß der ILS auf die Retrieval-Ergebnisse im Maximum etwa unter 1 % (Temperatur 0.5 K) zu halten, muß die FWHM der ILS (bzw. AILS) besser als die gezeigten Kurven bekannt sein. Dies ist gleichbedeutend mit einer Unsicherheit des quadratischen Anteils der Modulation am Ende des IFGs von 0.1.

Wird für das VMR-Retrieval ein Temperaturprofil genommen, welches aus Spektren mit gleichem Modulationsfehler entstand, so werden die Einflüsse der ILS auf die VMR-Werte meist geringer. Eine Ausnahme bildet das Spurengas  $\text{NO}_2$ , bei dem in unteren Höhen die Veränderung in der Größenordnung der VMR-Werte selbst liegt und in den oberen Höhen eine Überkompensation stattfindet. Das aus einem Retrieval erhaltene, fehlerbehaftete T-Profil beeinflusst das  $\text{NO}_2$ -Retrieval stärker als die verbreiterte ILS. Die in Abbildung 5.18 dargestellten Kurven ergeben für  $\text{NO}_2$  im Maximum des Profils dann eine Abweichung von ca. 1.5 %.

## Kapitel 6

# Methoden zur ILS-Bestimmung

Wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben, manifestiert sich die ILS (Instrumental Line Shape) in der vom Spektrometer erzeugten Linienform einer monochromatischen Einstrahlung. Am nächstliegenden scheint deshalb zu sein, die ILS mit einem Laser als Lichtquelle direkt zu messen. Dies hat jedoch zwei Nachteile: Wie in Abschnitt 3.1.3 gezeigt, hängt die ILS vom Gesichtsfeld ab, der Laser müßte deshalb so aufgeweitet werden, daß er alle Einstrahlwinkel homogen abdeckt. Außerdem liefert eine solche Messung nur die ILS für die Wellenzahl des Lasers.

Im folgenden werden drei Methoden vorgestellt, die in verschiedenen Situationen angewandt werden können.

### 6.1 Bestimmung der ILS mit Hilfe von Gaszellen

Zur genau definierten Erzeugung von Linien hat man die Möglichkeit, in eine mit Fenstern versehene Gaszelle (Küvette) ein bestimmtes Gas einzufüllen, dessen Linien in den Wellenzahlbereichen liegen, in denen man die ILS bestimmen möchte. Senkt man den Druck des Gases so weit ab, daß die Druckverbreiterung verschwindet, so wird die Linienform durch die temperaturabhängige Dopplerverbreiterung bestimmt (Hollas [19]). Liegt die resultierende Breite weit unterhalb der Instrumentenaufösung, so ist die Linienform in den gemessenen Spektren nur noch durch die Apparatfunktion bestimmt.

Anders ist es bei hochauflösenden Geräten mit ILS-Breiten in der Größenordnung der Dopplerverbreiterung. Dort kann aber durch eine Vorwärtsrechnung die theoretische Linienform berechnet werden. Jede Abweichung davon muß als Störung durch die ILS aufgefaßt werden.

Hase [16] führt eine solche Bestimmung der ILS für ein am Boden stationär betriebenes Gerät des Typs 'Bruker IFS 120HR' durch. Standardgas hierfür ist  $N_2O$ , was in beiden Detektorzweigen dieses Instruments auflösbare Absorptionsbanden

besitzt und sehr leicht zu handhaben ist.

Für die Anpassung der Vorwärtsrechnung an die Gaszellenmessung wird dabei eine punktweise Darstellung der komplexen Modulationsfunktion mit je 20 Punkten für den Betrag und die Phase benutzt. Eine Zerlegung in Dreiecke ermöglicht es, diese Punkte gleichzeitig als Koeffizienten für die Basisfunktionen der ILS im Spektralraum zu verwenden.

Da das Instrument an Ort und Stelle mit der Küvette ausgestattet und die Optik entsprechend modifiziert werden kann, entspricht die so bestimmte ILS genau derjenigen der atmosphärischen Messungen.

## 6.2 Bestimmung der ILS aus isolierten Linien

Seit März 2002 ist der europäische Umweltsatellit ENVISAT in einem sonnensynchronen Orbit. Auf diesem Satelliten befindet sich ebenfalls ein MIPAS, ähnlich den Geräten, die am IMK auf einem Stratosphärenflugzeug bzw. einem Ballon betrieben werden.

Zur Bestimmung der ILS von MIPAS auf ENVISAT wurden von Lachance [25] mehrere Möglichkeiten betrachtet und getestet. Es erwies sich als günstig, die ILS direkt aus isolierten, ausgesuchten Linien in den gemessenen Atmosphärenspektren zu bestimmen. Dies ist beim Satelliten durch Anwendung eines Meßmodes möglich, der die obersten Atmosphärenschichten sondiert. Dort sind nur noch Linien weniger Moleküle sichtbar, wie z.B.  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2\text{O}$  und Wasser. Aufgrund der fehlenden Druckverbreiterung und der im Vergleich zur Dopplerverbreiterung niedrigen Auflösung spiegeln diese Linien direkt die ILS wider.

Als Parametrisierung für die ILS wurde ein spezieller Satz von Justierungs- und anderen Parametern des Instruments gewählt, die die ILS direkt beeinflussen. Aus diesen Parametern wird nun die ILS berechnet, und in einem Minimierungsalgorithmus werden die Parameter variiert und an die gemessene Linie angepaßt. Das Verfahren wird mit PIFM (Parametric ILS Fitting Method) bezeichnet. Damit ist die ILS punktuell für einige Wellenzahlen bekannt. Um sie an einer beliebigen Wellenzahl zu berechnen, wird ein spezielles Interpolationsverfahren angewandt.

## 6.3 Entfaltung der ILS aus vielen Linien

Für nebeneinanderliegende Linien in einem schmalen Spektralbereich ist die ILS beinahe identisch. Dies hängt damit zusammen, daß sich die wellenzahlabhängigen Eigenschaften des Instruments nicht sprunghaft ändern. Wurde die Optik des Instruments z.B. auf die Interferometerbedingung ausgelegt und ist sie korrekt justiert, so sinkt die Modulation bei der zugehörigen Grenzwellenzahl (s. Seite 23) am Ende des

Interferogramms auf ca. 60 % des zentralen Werts ab. Dabei wird genau der Bereich bis zum 1. Haidinger-Ring detektiert. Bei Änderung der Wellenzahl ändert sich der Radius der Haidinger-Ringe, jedoch tritt nur eine Veränderung der Modulation von  $6 \cdot 10^{-4}$  pro Wellenzahl ein. Die Degradierung des Interferogramms hängt also nur schwach von der Wellenzahl ab und ist somit für die Linien eines kleinen Bereichs des Spektrums nahezu gleich. Eine ungewollte Beeinflussung des Gesichtsfeldes (Abschattung oder ähnliches) wird ebenso schwach von der Wellenzahl abhängen, so daß die Degradierung für einen schmalen Spektralbereich einer Faltung des eingestrahlten Spektrums mit der ILS entspricht. In Umkehrung sollte es demnach möglich sein, zusammen mit einem vorwärtsgerechneten Spektrum aus a priori bekannten Mischungsverhältnissen, die ILS zu entfalten.

Am besten eignen sich dafür Spektren hoher Tangentenhöhe, da deren Linien kaum druckverbreitert und aufgrund der geringen Konzentrationen selten gesättigt sind. Eine Änderung der Konzentration beeinflusst in diesem Fall nur noch die Größe, aber wenig die Form der Linien. Letzteres ist besonders wichtig, da die VMR-Werte für die benötigte Vorwärtsrechnung aus A-priori-Profilen oder ersten Retrievals stammen, welche mit nomineller ILS durchgeführt werden mußten.

## 6.4 Wahl des Verfahrens

Eine Bestimmung der ILS im Labor mit einer Küvette wie beim bodengebundenen Instrument (s. Abschnitt 6.1) kommt für das Ballongerät nicht in Frage, da sich die Justierung während des Aufstiegs ändern kann. Auch wenn bei Erreichen der endgültigen Flughöhe wieder auf maximale Intensität justiert wird, ist nicht gesichert, daß die gleiche ILS wie am Boden gültig ist. So führt z.B. eine Dejustierung der optischen Achse zwischen Interferometer und Dewar von nur 0.5 mm zu einer Verbreiterung der Apparatefunktion bei  $2100 \text{ cm}^{-1}$  um 1 %, 1 mm Dejustierung schon zu über 4 %.

Auch die Methode von Lachance (s. Abschnitt 6.2) ist für MIPAS-B2 ungeeignet, da in einer Flughöhe von 30 bis 40 km nicht in allen Spektralkanälen genügend isolierte Linien zu finden sind. Zudem muß das Signal/Rauschverhältnis der einzelnen Linie möglichst groß sein, da sich jede statistische Abweichung direkt in die ILS überträgt.

Fast an jeder Stelle der vier Kanäle von MIPAS-B2 sind die Linien verschiedener Spurengase dicht nebeneinander. In einem kleinen Bereich sind die Signaturen immer mit der gleichen ILS gefaltet. Es scheint daher zweckmäßig, als Verfahren zur Bestimmung der ILS die Entfaltung aus mehreren Linien zu verwenden, die eben genau diesen Umstand ausnutzt. Dadurch wird es möglich, die ILS direkt aus den Messungen eines Fluges zu bestimmen, aus denen später die Spurengasprofile abgeleitet werden.

## Kapitel 7

# Die Entfaltungsmethode zur Gewinnung der Modulations- bzw. Apparatefunktion

### 7.1 Faltung und Entfaltung

In Abschnitt 3.1.3 wurde gezeigt, wie sich bei einem Interferometer mit endlich großem Gesichtsfeld das gemessene Spektrum  $S(\nu)$  aus dem ursprünglichen Spektrum  $S_{inf}(\nu)$  und der ILS zusammensetzt. Im allgemeinen Fall kann dieser Zusammenhang nicht als Faltung geschrieben werden, da sich die ILS mit der Wellenzahl ändert. Diese Änderung geht aber sehr langsam vonstatten und nimmt erst in Kanal 3 und 4 an Stärke zu.

Da das Retrieval von Spurengasen nur in kleinen spektralen Fenstern stattfindet, kann innerhalb dieser Microwindows die ILS als konstant angenommen und der mittleren Wellenzahl  $\bar{\nu}_{MW}$  zugeordnet werden. In diesem Fall kann der erwähnte Zusammenhang als Faltung geschrieben werden.

$$S(\nu) \approx \int S_{inf}(\nu_0) ILS(\nu - \nu_0, \bar{\nu}_{MW}) d\nu_0 \quad (7.1)$$

$$= S_{inf}(\nu) \otimes ILS(\nu, \bar{\nu}_{MW}) \quad (7.2)$$

Mit dem Faltungssatz können wir die letzte Gleichung fouriertransformieren. Die Apparatefunktion des Microwindows der Wellenzahl  $\bar{\nu}_{MW}$  bezeichnen wir von nun an vereinfacht mit  $ILS(\nu)$ .

$$FT^+[S(\nu)] \approx FT^+[S_{inf}(\nu) \otimes ILS(\nu)] \quad (7.3)$$

$$= FT^+[S_{inf}(\nu)] \cdot FT^+[ILS(\nu)] \quad (7.4)$$

Die Auflösung nach der ILS bzw. MOD ergibt eine erste Näherung für die Apparatefunktion des betrachteten Bereichs, die der Umkehrung der Faltung in Gleichung 7.2

entspricht und deshalb als Entfaltung bezeichnet wird.

$$MOD(x) = FT^+[ILS(\nu)] \approx \frac{FT^+[S(\nu)]}{FT^+[S_{inf}(\nu)]} \quad (7.5)$$

$$ILS(\nu) \approx FT \left[ \frac{FT^+[S(\nu)]}{FT^+[S_{inf}(\nu)]} \right] \quad (7.6)$$

Die fouriertransformierten Spektren des Quotienten entsprechen nicht den gemessenen Interferogrammen, da wir nur ein kleines Wellenzahlfenster betrachtet haben.

Um zu erkennen, was das Herausschneiden eines spektralen Bereichs für die Faltung bedeutet, unterteilen wir  $S_{inf}(\nu)$  in Gleichung 7.2 mit Hilfe der spektralen Rechteckfunktion  $R_{\Delta\nu}(\nu)$  in den Innenbereich  $\mathcal{R} := R_{\Delta\nu}(\nu - \nu_0)$  und den Außenbereich  $\bar{\mathcal{R}} := 1 - R_{\Delta\nu}(\nu - \nu_0)$ .

$$\begin{aligned} S(\nu) &= (\mathcal{R} S_{inf}(\nu) + \bar{\mathcal{R}} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) \\ &= (\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) + (\bar{\mathcal{R}} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) \end{aligned} \quad (7.7)$$

Löst man diese Gleichung nach der ILS bzw. MOD des ersten Terms auf, so ergibt sich:

$$MOD(x) = \frac{FT^+[S(\nu) - (\bar{\mathcal{R}} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu)]}{FT^+[\mathcal{R} S_{inf}(\nu)]} \quad (7.8)$$

Der Zähler beinhaltet im Argument der Fouriertransformation das ganze gemessene Spektrum, von dem noch der Außenbereich von  $S_{inf}$ , gefaltet mit der ILS, subtrahiert wird. Im Innenbereich sind das die Anteile, die durch die Faltung mit der ILS von außen in den Innenbereich hineinragen, also Linien knapp außerhalb der Bereichsgrenzen, die durch die Ausdehnung der ILS den Innenbereich beeinflussen.

Da die ILS nach wenigen  $\text{cm}^{-1}$  bereits auf null absinkt, wird bei größerer Entfernung vom Innenbereich der Einfluß des Ausschnittsoperators  $\bar{\mathcal{R}}$  verschwinden. Dadurch werden die zwei Terme im Zähler gleich und das Argument der Fouriertransformation null. Wir spalten deshalb  $S(\nu)$  ebenfalls in die zwei Bereiche auf und verrechnen sie mit dem zweitem Term des Zählers. Es ergibt sich der Innenbereich des gemessenen Spektrums mit zwei Korrekturen:<sup>1</sup>

$$MOD(x) = \frac{FT^+ \left[ \begin{aligned} &\mathcal{R} S(\nu) - \mathcal{R} \{ (\bar{\mathcal{R}} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) \} \\ &+ \bar{\mathcal{R}} \{ (\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) \} \end{aligned} \right]}{FT^+[\mathcal{R} S_{inf}(\nu)]} \quad (7.9)$$

Interpretation:

Die Faltung des ungestörten, ausgeschnittenen Spektrums  $\mathcal{R} S_{inf}(\nu)$  mit der Apparatfunktion ergibt nicht nur das gleich ausgeschnittene, gemessene Spektrum  $\mathcal{R} S(\nu)$ ,

<sup>1</sup>Eine einfachere Herleitung der Gleichung 7.9 findet sich in Anhang B.

sondern benötigt noch zwei Korrekturterme. Der erste stellt den Einfluß der Linien des Außenbereichs in den Innenbereich dar. Der zweite, positive Term ist der fehlende Anteil im Außenbereich nahe der Grenzen, der aus den Linien des Innenbereichs durch die faltungsbedingte Verbreiterung entsteht. Beide Einflüsse verschwinden, wenn man sich von den Bereichsgrenzen entfernt.

Da in die Korrekturterme auf der rechten Seite der Gleichung 7.9 auch die Apparatefunktion mit eingeht, ist die Berechnung nur iterativ möglich.

Als erste Näherung für die ILS kann die unkorrigierte Entfaltung nach Gleichung 7.6 dienen.

## 7.2 Realisierung der Entfaltung

An der rechten Seite der Gleichung 7.9 erkennt man, welche Vorbereitungen für die Entfaltung der ILS aus den Spektren notwendig sind. Folgende Schritte werden durchgeführt:

- Erzeugung von unapodisierten Spektren aus den Messungen eines MIPAS-B2-Flugs.
- Temperatur aus ECMWF-Daten oder erstem Retrieval erzeugen.
- Grobes Retrieval der wichtigsten Spurengase, oder Standardprofile nutzen.
- Vorwärtsrechnung von theoretischen Spektren ohne Faltung mit der ILS.
- Entfaltungsprozedur für kleine Fenster durchführen.

### 7.2.1 Erzeugung der unapodisierten Spektren

Aus den Messungen eines MIPAS-B2-Flugs werden zunächst kalibrierte Spektren aus den Rohinterferogrammen gewonnen. Für das spätere Retrieval werden diese Norton-Beer-apodisiert. Für die Entfaltung müssen unapodisierte Spektren erzeugt werden. Am besten geeignet sind die obersten Tangentenhöhen, da hier aufgrund der fehlenden Druckverbreiterung am meisten Information über die ILS in den Linien vorhanden ist.

Bei einer Flughöhe von ca. 40 km haben sich die Messungen einer Elevation von ca.  $-0.7^\circ$  als brauchbar erwiesen. Bei 30 km Beobachterhöhe war die  $+2^\circ$ -Messung für die ILS-Bestimmung mit der Entfaltung durchführbar. Bei diesen Konstellationen ist eine ausreichende Anzahl von Linien mit genügend großem Signal/Rauschverhältnis vorhanden.



### 7.2.2 Temperatur und Spurengase der Vorwärtsrechnung

Das Temperatur- und die Spurengasprofile werden aus ersten Retrievals genommen. Diese können aufgrund der unbekannteren Apparatefunktion fehlerbehaftet sein. Da jedoch nur die obersten Tangentenhöhen bzw. die  $+2^\circ$ -Messungen für die Entfaltung benötigt werden, ist dies unkritisch. Die Konzentrationsverteilung der Gase oberhalb von 30 km beeinflusst hauptsächlich die Höhe der Linien. Die Druckverbreiterung ist kaum noch vorhanden, so daß optisch dünne Linien durch diese Unsicherheit nur skaliert werden. Gesättigte Linien hingegen verändern ihre Breite bei Änderung der Konzentration und können dadurch Information über die ILS verlieren.

### 7.2.3 Vorwärtsrechnung der ungefalteten Spektren

Bei der Entfaltung findet eine Division von fouriertransformierten Spektren statt. Diese sind jedoch nur diskret auf endlich vielen Stützstellen vorhanden. Zur Vermeidung von Interpolationsfehlern bei der numerischen Berechnung müssen die ungefalteten Spektren von vornherein so erzeugt werden, daß sie nach der Fouriertransformation gleiche Stützstellen enthalten.

Gleiche Stützstellenabstände im Interferogrammraum erhält man genau dann, wenn die Ausschnitte der Spektren im Spektralraum gleich groß sind. Da aus Geschwindigkeitsgründen eine schnelle Fouriertransformation (FFT) durchgeführt werden sollte, muß die Länge der spektralen Ausschnitte auf  $2^N$  Punkte erweitert werden. Das Punktegitter der vorwärtsgerechneten Spektren muß sehr eng sein, um die schmalen, ungefalteten Linien wiedergeben zu können. Im Gegensatz dazu ist das Gitter der gemessenen Spektren relativ weit, da dieses durch die Auflösung des Instruments bestimmt wird. Ein interpolierendes „oversampling“ der Flugspektren ist nicht möglich, da dies eine Punktzahl von mehreren Millionen zur Folge hätte, was bezüglich FFT numerisch nicht mehr handhabbar ist.

Die Lösung dieses Problems ist eine Stützstellensynchronisierung, d.h. das Punktegitter der theoretischen Spektren wird schon bei der Berechnung genau so gewählt, daß es sowohl im gewünschten, als auch mit dem auf die nächste Zweierpotenz erweiterten Ausschnitt des gemessenen Spektrums übereinstimmt. Die Rechnung (s. Anhang C) zeigt, daß dies dann erreicht wird, wenn das Verhältnis der Stützstellenabstände selbst genau  $2^n$  ( $n \in \mathbb{N}$ ) beträgt.

Für die Vorwärtsrechnung wird also die Stützstellenbreite des Flugspektrums solange durch zwei dividiert, bis diese unterhalb des maximalen Stützstellenabstands von KOPRA ( $= 5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ) liegt. Die resultierende Gitterweite beträgt dann ca.  $3.125 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  und das Verhältnis der Stützstellenbreiten  $1/64$  oder  $1/32$ , je nachdem, ob das gemessene Spektrum zur nächsten oder übernächsten Zweierpotenz erweitert wurde.

Die mit KOPRA berechneten Spektren setzen aufgrund des kleinen Stützstel-

lenabstands eine erhebliche Kapazität des Rechners voraus. Reicht diese nicht aus, so muß bei der Aufteilung des Wellenzahlbereichs eines Kanals in z.B. je  $100 \text{ cm}^{-1}$  auf eine Erweiterung von einigen  $\text{cm}^{-1}$  an beiden Enden für eine Überlappung geachtet werden. Mit dem mittlerweile am IMK vorhandenen Rechner-Cluster ist eine Berechnung jedes Kanals an einem Stück möglich.

Effekte durch ein nichtvorhandenes lokales thermodynamisches Gleichgewicht (non-LTE) müssen nicht berücksichtigt werden, da diese hauptsächlich die gesamte Emission einer Rotations-Vibrationsbande verändern und die Effekte erst in großen Höhen auftreten.

### 7.2.4 Die Entfaltungsprozedur

Zur Programmierung der gesamten Entfaltung samt Korrekturen und Glättungen wurde IDL (Interactive Data Language) gewählt, da hier der Umgang mit Vektoren und Matrizen im Reellen und Komplexen sehr einfach formulierbar ist.

Aus dem gemessenen und dem vorwärtsgerechneten Spektrum wird jeweils das gewünschte Fenster für die Entfaltung ausgeschnitten. Gemäß Gleichung 7.9 wird nur der Ausschnitt auf der positiven Achse gebraucht, es können deshalb beide Spektren direkt so verwendet werden, wie sie vorliegen. Beim ersten Durchgang werden noch keine Korrekturen gemacht, auch nicht mit der theoretischen ILS, um zu einem neutralen, von Annahmen möglichst unabhängigen Ergebnis zu gelangen.

Nach der Erweiterung der Punktezahl des spektralen Ausschnitts auf die nächste Zweierpotenz findet getrennt die FFT statt. Die Ergebnisse im Interferogrammraum sind komplex, da nur positive Wellenzahlen Verwendung fanden. Aufgrund des feinen Punktegitters des theoretischen Spektrums erstreckt sich das zugehörige Interferogramm über ein Vielfaches des maximalen optischen Weges. Die Entfaltung findet nur im Bereich innerhalb des optischen Gangunterschieds statt, zuzüglich der Erweiterung auf die nächste oder übernächste Zweierpotenz, die bei der Erzeugung des Flugspektrums verwendet wurde.

Die Division ist nicht unproblematisch, da der Nenner  $FT^+[\mathcal{R} S_{inf}(\nu)]$  durchaus auch in der komplexen Ebene der Null nahe kommen kann. Durch die Ungenauigkeit der Messung wird der Quotient für solch einen Punkt stark vom korrekten Wert abweichen. Nach der Division wird deshalb eine Überprüfung des Ergebnisses und eine Glättung notwendig sein (siehe unten). Dies ist gerechtfertigt, da für die Modulation eine stetige, differenzierbare Funktion bis zum Ende des Interferogramms zu erwarten ist.

Da für die folgenden Durchgänge in den beiden Korrekturtermen die Faltung der ILS mit  $S_{inf}(\nu)$  zu berechnen ist, muß eine Anpassung an dessen Punktraster stattfinden. Dies geschieht durch die Erweiterung der Modulationsfunktion auf die Punktzahl des erweiterten Ausschnitts von  $\mathcal{R} S_{inf}(\nu)$  mit Nullen. Da die MOD außerhalb des Interferogramms definitionsgemäß null ist, entspricht dies der bestmög-

lichen Interpolation der ILS. Vom gefalteten Spektrum werden nur die Stützstellen des Flugspektrums und die Wellenzahlbereiche in der Nähe der Grenzen benötigt. Die Faltung des ersten Korrekturterms im Zähler der Gleichung 7.9 wird deshalb nur für eine kleine wählbare Anzahl von Punkten innerhalb des Bereichs berechnet. Für den zweiten Korrekturterm muß die Faltung außerhalb des Bereichs berechnet werden. Hier kommt uns die Erweiterung auf die nächste Zweierpotenz zugute, die nun auf beiden Seiten halbiert angehängt wird. Die Faltung des zweiten Korrekturterms muß nur für diese angehängten Punkte berechnet werden. Allerdings sollte die Größe des ganzen Wellenzahlfensters für die Entfaltung so gewählt werden, daß der Erweiterungsbereich genügend Seitenschwinger der ILS beinhalten kann, um deren Einfluß zu berücksichtigen. Bei MIPAS-B2 mit einem optischen Gesamthub von 29 cm mindestens  $1 \text{ cm}^{-1}$  auf beiden Seiten.

Die Konvergenz ist bereits nach ca. 5 Iterationsschritten erreicht. In ungünstigen Fällen kann es vorkommen, daß eine Oszillation von Schritt zu Schritt auftritt, bei der die ILS zwischen zwei Zuständen wechselt, sich aber sonst nicht mehr ändert. Teilweise kann dies durch die im folgenden beschriebenen Glättungsmaßnahmen verhindert werden.

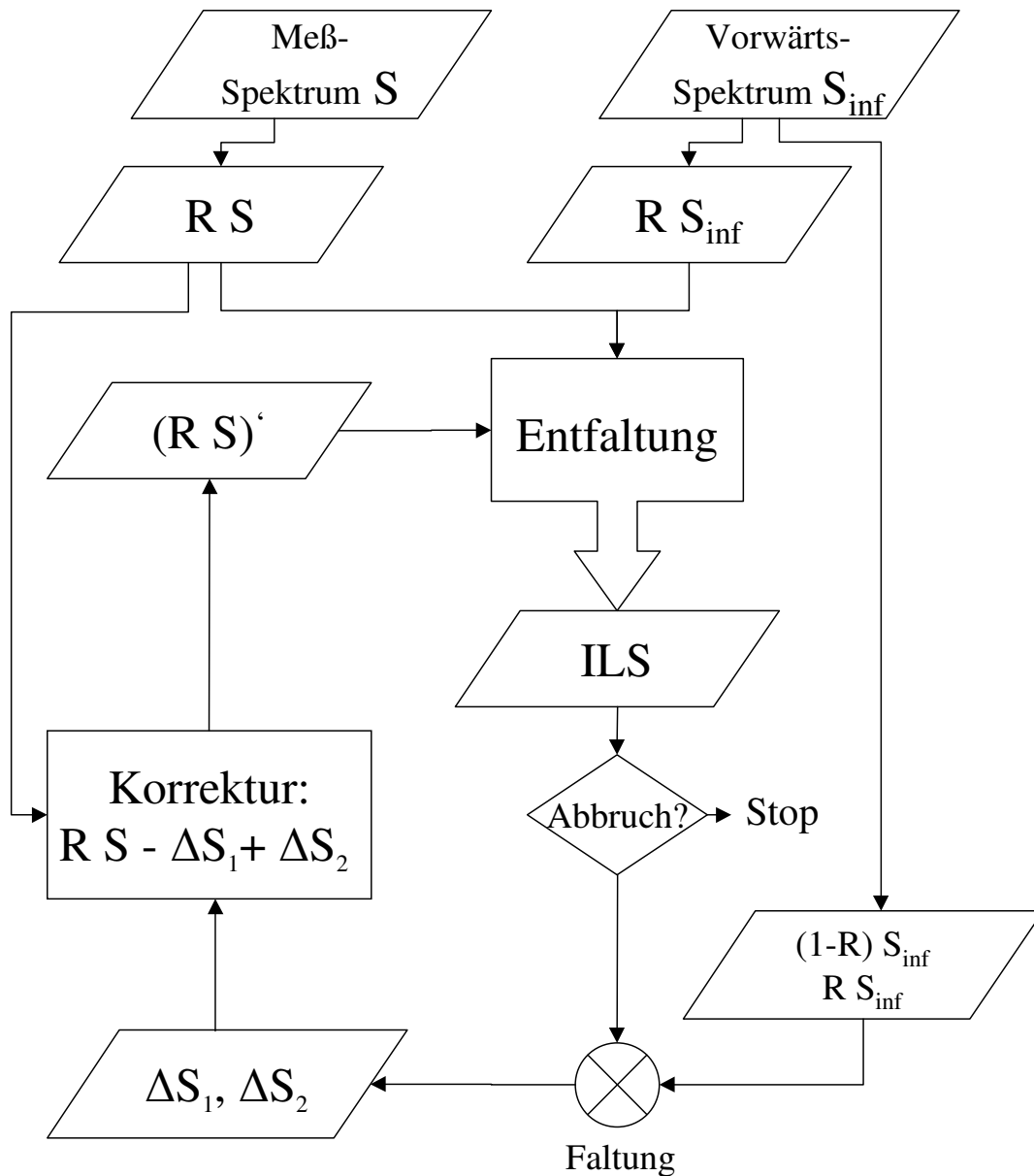
### 7.2.5 Die Glättungen in der Entfaltungsprozedur

Aufgrund des Rauschens in den Flugspektren und der ungenauen Kenntnis der atmosphärischen Parameter sind die berechneten Punkte der entfalteten Modulationsfunktion einer Streuung unterworfen. Eine objektive Glättung ist notwendig, um eine Veränderung in Richtung der nominellen ILS zu verhindern. Nachfolgende Eigenschaften werden angenommen:

- Die MOD ist stetig und differenzierbar im Interferogrammbereich.
- Der Wertebereich ist in der Größenordnung von eins.
- Einzelne Ausreißerpunkte sind nicht real.

Alle Filteroperationen, die als Grundlage eine Entfernung hoher Frequenzen der Funktion haben, können nicht angewandt werden, da diese sprunghafte Änderungen, wie sie am Rande des Interferogramms entstehen, abschwächen würden. Dies käme einer Apodisation gleich und ergäbe eine zu breite ILS mit einem zu kleinen Maximum.

Stark fehlerbehaftet sind offensichtlich die Punkte, bei denen der Betrag des Nenners, also das fouriertransformierte, theoretische Spektrum, fast null war. Es zeigt sich, daß solche Punkte meist in Gruppen mehrerer aufeinanderfolgender Punkte auftreten, die im folgenden als kritische Gruppen bezeichnet werden. Diese werden aus der Modulationsfunktion entfernt und durch eine Interpolation mit den Randpunkten (die ersten Punkte außerhalb der kritischen Gruppe) ersetzt. Dies geschieht



**Abb. 7.1:** Entfaltungsprozeß mit den Korrekturtermen  $\Delta S_1, \Delta S_2$  für die beiden Randeﬀekte der Faltung.

'R' ist die Rechteckfunktion, die aus dem Spektrum den Teil ausschneidet, der entfaltet werden soll. Nach fünfmaligem Durchlaufen kann der Prozeß meist abgebrochen werden. Der Entfaltung folgt die Glättung wie sie in Abschnitt 7.2.5 beschrieben wird. Der Abbruch findet statt, wenn die Konvergenz (Änderung der ILS fällt unter eine bestimmte Schranke) oder die vorgegebene Maximalzahl von Iterationen erreicht wird.

für den Betrag und die Phase der MOD separat. Damit sind potentielle Pole aus der Modulationsfunktion beseitigt.

Weitere Ausreißerpunkte werden in Betrag oder Phase getrennt identifiziert. Der Betrag sollte zwischen null und eins liegen, so daß Punkte oberhalb einer einstellbaren Schwelle (ca. 1.3) als Ausreißer angesehen werden. Bei der Phase wird zuerst eine Anpassung mit einem Polynom niedriger Ordnung vorgenommen (drei oder fünf). Liegt die Differenz zu diesem Polynom über einer bestimmten Schwelle (ca. 0.3), so kann dieser Punkt als Ausreißer angesehen werden. Erfahrungsgemäß wird die Phase nicht so groß, daß diese bis zum Sprungwinkel  $\pm\pi$  des Bogens reicht. Nur bei starkem Versatz der Wellenzahlen kommt dies vor und wird entsprechend bei der Anpassung des Polynoms berücksichtigt. Die Ausreißer werden jeweils durch Mittelwerte der Nachbarpunkte ersetzt.

Eine getrennte Glättung von Betrag und Phase ist wichtig, da sich die Modulationsfunktion in der komplexen Ebene um den Nullpunkt herum in einem Bogenstück erstreckt. Eine direkte zweidimensionale Glättung brächte die Mittelwerte näher an den Nullpunkt, was sich vom wahren Verlauf entfernen würde. Die Glättung in Polarkoordinaten vermindert diesen Effekt.

Nach der Division ist bei der Modulation oft beobachtbar, daß der zentrale Teil um die Null herum von der Umgebung abgesetzt ist. Dies entspricht einem "offset" oder Kontinuumsuntergrund im ausgeschnittenen Flugspektrum, der von der Vorwärtsrechnung nicht reproduziert wird. In solch einem Fall kann der Ausschnitt des gemessenen Spektrums schon vor der Fouriertransformation in der Intensität verschoben werden, so daß der erwähnte Absatz in der MOD verschwindet. Dies entspricht gleichzeitig einer Normierung der Fläche der ILS auf eins. Diese Korrektur funktioniert nicht, wenn die Gesamtintensitäten der beiden Spektren aus anderen Gründen nicht übereinstimmen. Durch eine Polynom Anpassung der Modulationsfunktion ohne den abgesetzten Teil in der Mitte kann die ILS unabhängig von einem Untergrund skaliert werden.

Normalerweise ist die Interferogrammlänge gut bekannt. Die Modulation könnte aber aufgrund einer Dejustierung vorher schon stark absinken. Wenn die sich abzeichnende Punkteverteilung es zuläßt, kann eine Polynom Anpassung der Modulationsfunktion stattfinden. Dies ist sinnvoll, um das Rauschen in der ILS zu unterdrücken, aber nur dann, wenn keine Charakteristische Modulation berechnet werden kann. Bei MIPAS-B2 wird die Polynom Anpassung nicht durchgeführt, da konstruktionsbedingt die Berechnung der CM möglich ist.

Außerhalb der Interferogrammlänge ist die Modulationsfunktion null. Bei der Entfaltung entsteht hier eine dem Rauschen ähnliche Streuung, die durch das veränderte Punktegitter bei der Beschränkung auf den kleinen Wellenzahlbereich mit der Fouriertransformation entsteht. Der Bereich außerhalb des maximalen Gangunterschieds wird deshalb auf null gesetzt.

### 7.3 Bestimmung der Charakteristischen Modulationsfunktion

Wie in Abschnitt 3.2 eingeführt, kann unter der Vorgabe, daß die ILS nur vom Detektorgesichtsfeld abhängt, eine CM für jeden Kanal bestimmt werden. Bei MIPAS-B2 wird dies durch die robuste Pendelkonstruktion mit den Tripelspiegeln und den unbeweglich montierten Retroreflektoren bewerkstelligt. Im Detektordewar wird der IR-Strahl für die vier Kanäle aufgespalten, so daß diese nicht notwendigerweise dieselbe CM besitzen müssen.

Alle plausiblen Punkte der einzelnen Entfaltungsergebnisse der verschiedenen Wellenzahlen eines Kanals werden zu einer CM pro Kanal zusammengeführt. Als Kriterien dafür, welche der Modulationsfunktionen verwendet werden, dienen die Standardabweichungen der komplexen MOD bezüglich ihrer Polynomannpassungen (RMS-Werte des Betrags und der Phase). Diese werden sowohl durch Rauschen bzw. zu wenige Linien oberhalb des Rauschniveaus als auch durch schlecht passende Linien in der Vorwärtsrechnung erhöht. Für eine flexible Berechnung der CM wurde in den Standardeinstellungen der Mittelwert aller Einzel-RMS-Werte als obere Schwelle einer genügend guten Entfaltung verwendet. Das Ergebnis muß jedoch geprüft werden, da z.B. Kanal 3 fast vollständig von starken Wasserdampflinien dominiert wird, kann dies bei fehlerbehaftetem H<sub>2</sub>O-Profil zu insgesamt schlechten RMS-Werten führen. Eine niedrigere Schwelle sollte dann gewählt werden.

Durch die Skalierung der x-Achse der MOD mit der mittleren Wellenzahl des Entfaltungsfensters, entstehen für die verschiedenen Fenster völlig verschiedene Abszissenskalen. Die Punkte der einzelnen CM müssen also nach dem Zusammenhängen nach ihrer Abszisse sortiert werden. Es entsteht eine Punktwolke, die im Zentrum sehr dicht ist und nach außen hin immer lockerer wird, da die äußeren Bereiche erst durch die großen Wellenzahlen besetzt werden.

Die Prozessierung von den Rohinterferogrammen bis zu den kalibrierten Spektren kann verursachen, daß die spektrale Skala ein wenig verschoben ist. Dies drückt sich in der CM durch eine nicht überlappende Phase der Punktwolken der einzelnen Wellenzahlen aus. In solch einem Fall muß schon bei der Phase der MOD durch eine Polynomannpassung der lineare Anteil bestimmt und entfernt werden. Dies entspricht einer Zentrierung der ILS des zugehörigen Fensters auf ihren Schwerpunkt, die Form der ILS wird dadurch nicht verändert.

Schließlich werden Betrag und Phase der CM getrennt mit einem Polynom angenähert. Die Ränder sind dabei aufgrund der geringeren Punktedichte am fehleranfälligen. Als Standard wird ein Polynom 6. Grades für den Betrag und eines 5. Grades für die Phase verwendet. Eine Anpassung mit anderen Funktionen ist machbar, war allerdings bislang nicht notwendig.

## Kapitel 8

# Einflüsse auf die Entfaltungsmethode und resultierende Fehler

Unsicherheiten in den Eingangsdaten projizieren sich auf das Ergebnis der Entfaltung, also die Modulationsfunktion (MOD) und das Apparateprofil (ILS). Im folgenden wird deshalb untersucht wie sich die Fehler der Messung und der vorwärtsgerechneten Spektren auf die Entfaltung auswirken.

### 8.1 Angabe zur Durchführung der Rechnungen

Für die Tests müssen zum einen mit der ILS gefaltete Spektren mit vorgegebenen Unsicherheiten (Rauschen, ILS-Fehler) vorwärtsgerechnet werden. Diese stellen die „gemessenen“ Spektren dar. Als zweites müssen die dazu gehörigen ungefalteten Spektren erzeugt werden, die mit den Profilunsicherheiten (VMR-Fehler) behaftet in den Nenner der Entfaltung eingehen.

Das Rauschen ist in den Spektren der bisher durchgeführten Flüge in den einzelnen Kanälen und von Flug zu Flug sehr unterschiedlich. Es wurden deshalb für alle Kanäle verschieden stark verrauschte Spektren erzeugt. Um den Einfluß der ungenau bekannten VMR-Profile für die dominierenden Spurengase untereinander vergleichen zu können, wurden bei der Erzeugung der ungefalteten Testspektren die VMR-Werte jeweils um 10 % vergrößert. Spurengase, deren Linien im Spektrum mit kleineren Intensitäten auftreten, haben eine kleinere Amplitude im Interferogrammraum und damit einen kleineren Anteil am Ergebnis der Entfaltung, weshalb diese nicht betrachtet wurden.

## 8.2 Systematische Fehler der Methode

### 8.2.1 Beschränkung auf ein kleines Wellenzahlfenster

Aufgrund der Verbreiterung einer Linie durch die Faltung mit der ILS führt die Beschränkung auf einen spektralen Ausschnitt zu Fehlern bei der Entfaltung. Diese können iterativ vermindert werden, wie in Abschnitt 7.2.5 beschrieben wurde. Da die Korrektur nur auf wenigen  $\text{cm}^{-1}$  durchgeführt wird, sind die Fehler auch im Idealfall nicht vollständig entfernbar. Abbildung 8.1 zeigt die Modulationsfunktion des Ergebnisses der Entfaltung im Kanal 2 bei  $1245 \text{ cm}^{-1}$  mit einem  $20 \text{ cm}^{-1}$  breiten Ausschnitt nach dem ersten und fünften Durchlauf. Die Störungen aufgrund der Randeffekte verschwinden nicht vollständig, da die Auswirkungen jeder Linie spektral weiter gehen als eine Korrektur möglich ist. Durch Apodisation wäre dies vermeidbar, jedoch erhielte man dann nur die Linienform dieser Apodisierung.

Zur quantitativen Abschätzung dieses Fehlers wurden Entfaltungen mit Spektren ohne Störungen durchgeführt. Dabei wurden die Glättungsparameter auf den Standardwerten belassen, wie sie auch bei fehlerbehafteten Spektren funktionieren.

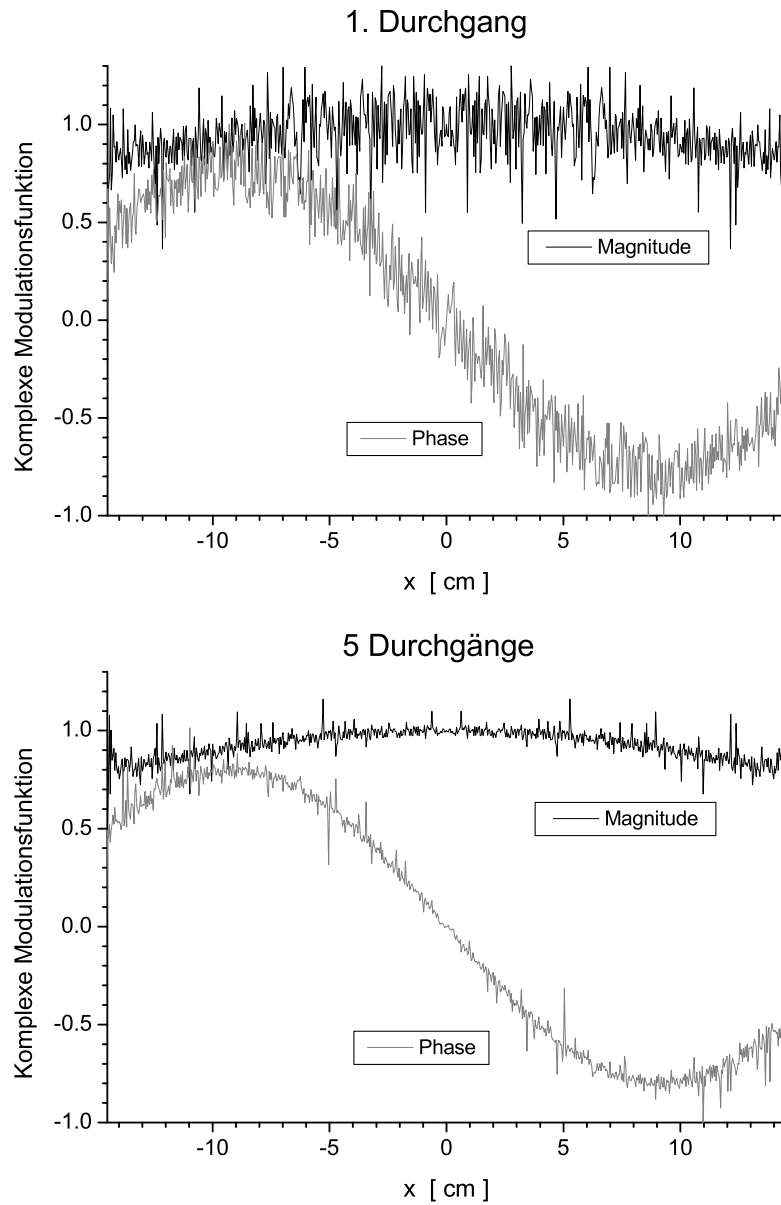
Die Abbildungen 8.2 und 8.3 zeigen die Halbwertsbreite (FWHM) und das normierte Maximum der ILS aus der Entfaltung. Abweichungen zwischen der verwendeten und der entfalteten ILS treten dort auf, wo die Liniendichte oder -breite so groß ist, daß das Spektrum zwischen den Linien nicht mehr auf null absinkt. Extrem ist die Situation in Kanal 4 bei ca.  $2350 \text{ cm}^{-1}$ , wo das Spektrum Absorptionsstrukturen aufweist. Darauf ist die Entfaltung nicht ausgelegt und schlägt entsprechend fehl.

Die Abweichung der Halbwertsbreite der entfalteten von der verwendeten ILS ist deutlich linear von der Wellenzahl abhängig, und eine Anpassung ergibt einen Fehler von 0.30 % bei  $600 \text{ cm}^{-1}$  und 0.22 % bei  $2450 \text{ cm}^{-1}$ . Die Halbwertsbreite wird also von der Entfaltung ein wenig zu groß ermittelt. Dies ist ein Effekt der übriggebliebenen Schwankungen der MOD zum Rand des optischen Hubs.

Die ebenfalls eingezeichnete Standardabweichung der Polynomanpassung des Betrages der Modulationsfunktion (RMS-Wert) dient als Indikator für eine fehlgeschlagene Entfaltung. Da hohe RMS-Werte starke Schwankungen in der entfalteten MOD bedeuten, sollte bei Werten über eins das Ergebnis auf jeden Fall verworfen werden. Kleinere Werte sind nicht unbedingt korrekt. Die Halbwertsbreite selbst sollte bei einer bestimmten Wellenzahl nicht stark variieren. Solche Phänomene sind Artefakte der Entfaltung und können ausgeblendet werden.

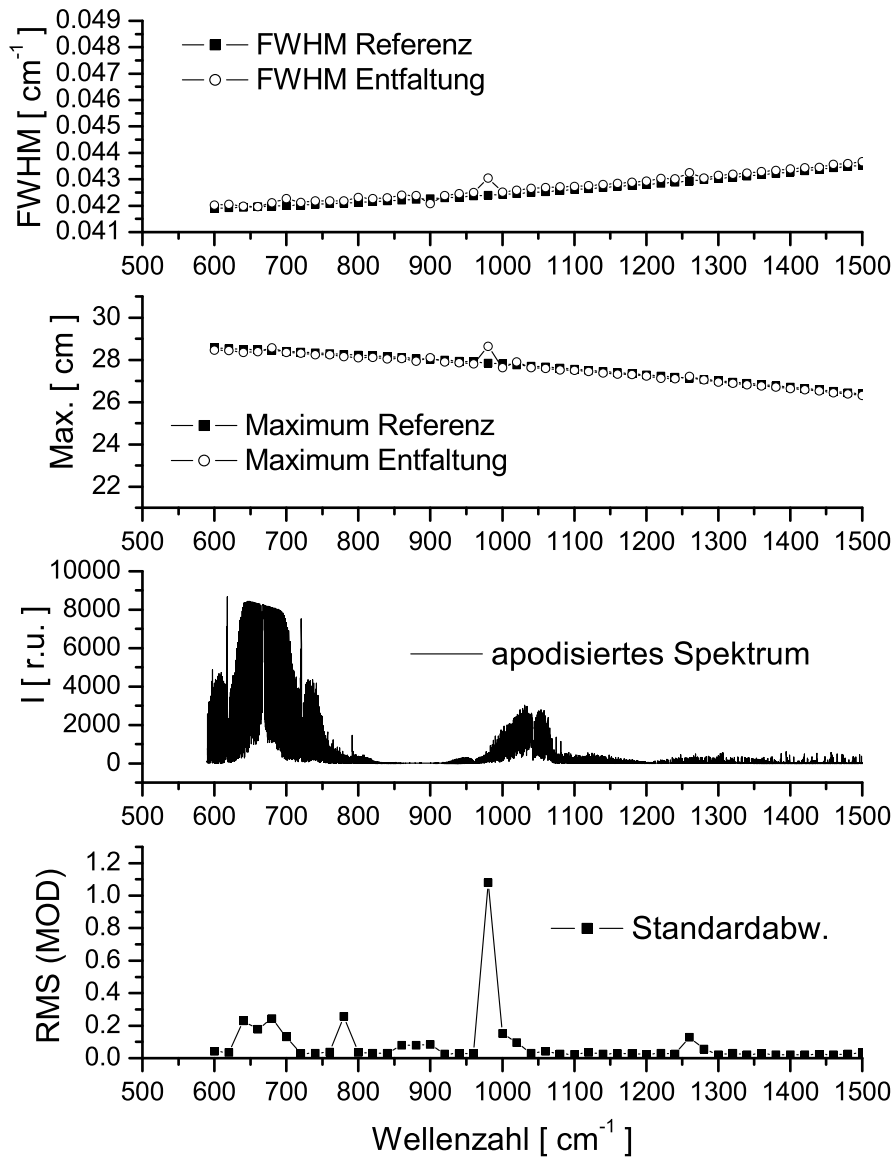
Um die Auswirkung auf die Apparatefunktion und damit eine Fehlerabschätzung zu bekommen, kann das Residuum zwischen den wie Rauschen aussehenden Schwankungen der Modulationsfunktion und einer Polynomanpassung derselben gebildet werden. Die Fouriertransformation und anschließende Berechnung der Standardabweichung liefert den  $1\sigma$ -Fehler der ILS. Diese Fehlerabschätzung ist nur für die Wellenzahlen sinnvoll, bei denen die Schwankungen der Modulationsfunktion





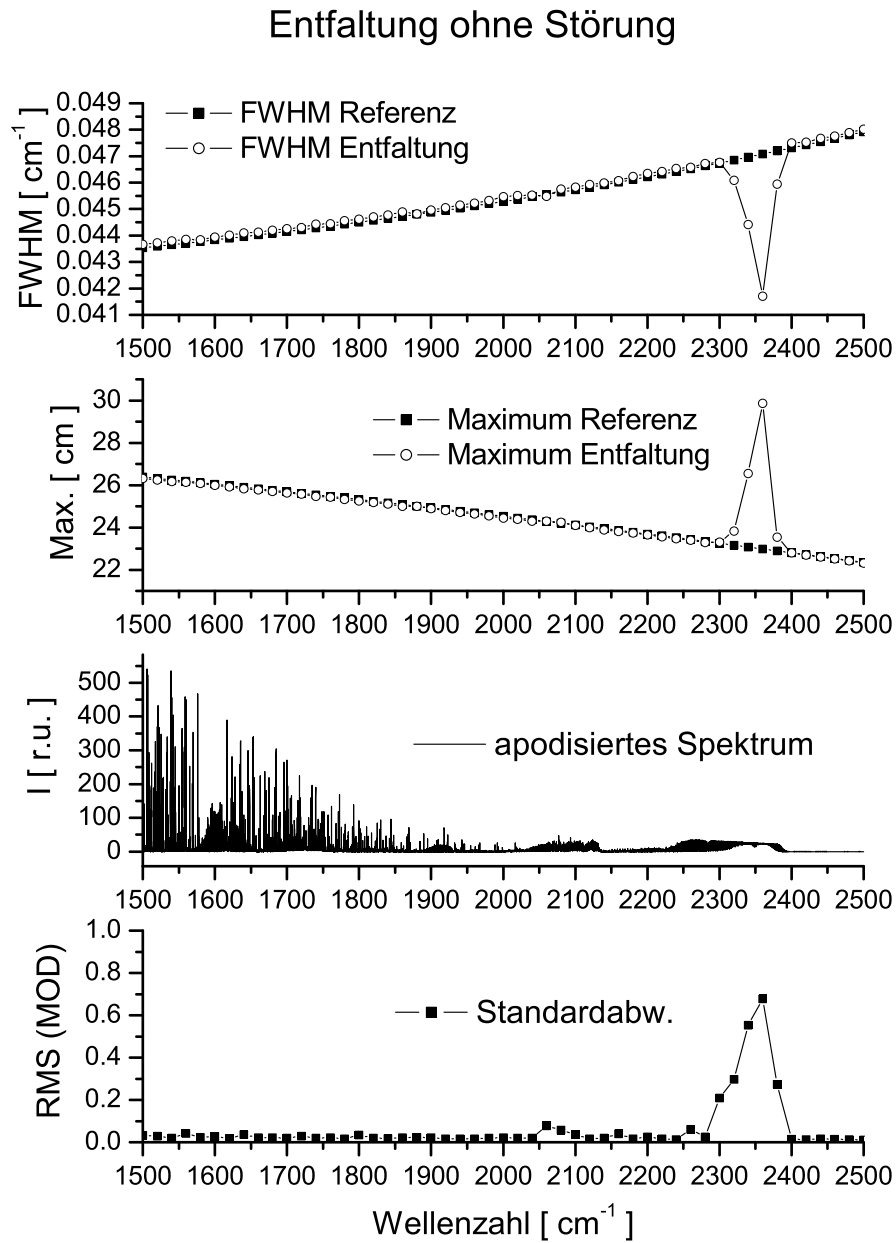
**Abb. 8.1:** Beispiel für die Korrektur der Randeffekte bei ca.  $1245 \text{ cm}^{-1}$ . Modulationsfkt. der Entfaltung eines  $20 \text{ cm}^{-1}$  breiten, spektralen Fensters in Kanal 2 von  $1235 - 1255 \text{ cm}^{-1}$ . Für die Korrektur wurde beidseitig zusätzlich ein Bereich von  $2.8 \text{ cm}^{-1}$  berücksichtigt. Oben: nach dem ersten Durchlauf beeinflussen die Randeffekte noch stark das Ergebnis. Unten: nach fünf Durchläufen sind die Störungen fast verschwunden.

## Entfaltung ohne Störung

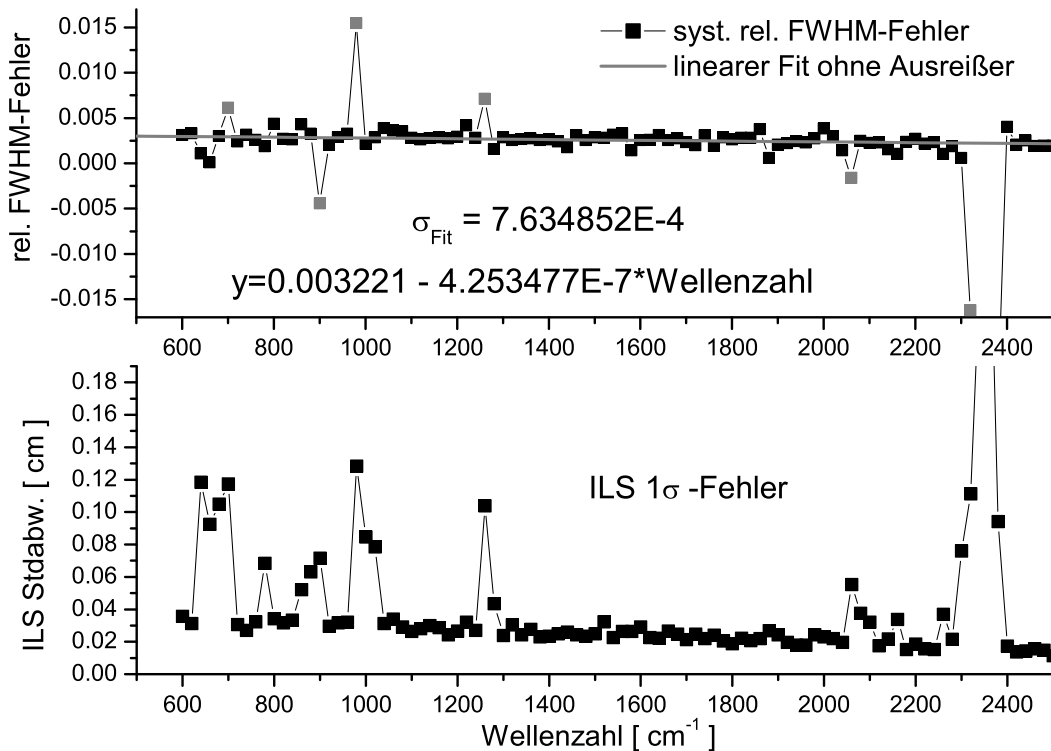


**Abb. 8.2:** Entfaltungsergebnisse bei unverrauschten Spektren mit korrekter ILS in den Bereichen der Kanäle 1 und 2.

Strukturen in den Spektren, die einen Absorptionscharakter aufweisen, wie es z.B. bei 660 cm<sup>-1</sup> der Fall ist, sind für die Entfaltungsmethode nicht geeignet. Die größte Abweichung der Halbwertsbreite am auffälligen Fenster um 980 cm<sup>-1</sup> beträgt nur 1.5 %, ist jedoch ein numerischer Ausreißer (s. auch Abbildung 8.4 oben).



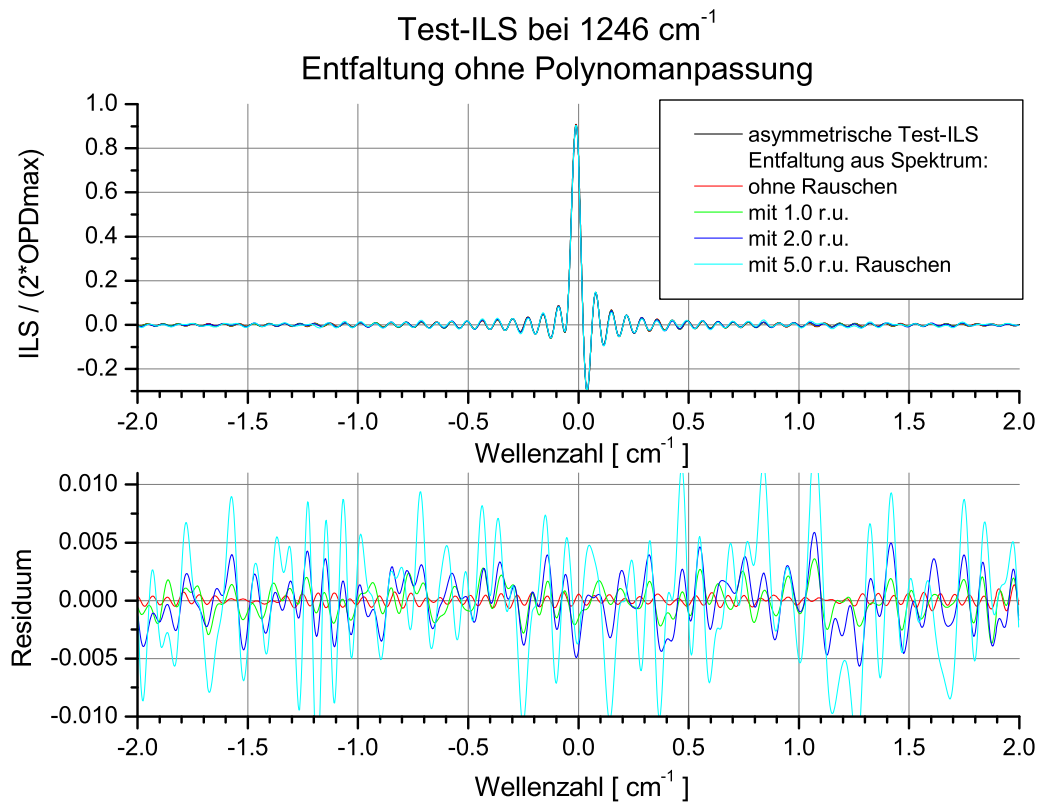
**Abb. 8.3:** Ungestörte Entfaltung in den Bereichen der Kanäle 3 und 4. Im Bereich um 2360 cm<sup>-1</sup> weist das Spektrum starke Emission mit Absorptionslinien auf; dort liefert die Entfaltungsmethode keine brauchbaren Ergebnisse.



**Abb. 8.4:** Fehler der ILS-Entfaltung bei unverrauschem Spektrum. Der Fehler, der durch die Beschränkung auf das kleine Wellenzahlfenster entsteht, kann nicht vollständig entfernt werden, und pflanzt sich in die ILS fort. Dargestellt ist oben die Abweichung der Halbwertsbreite von der verwendeten ILS und unten der  $1\sigma$ -Fehler, der durch Fouriertransformation der Modulationsschwankungen berechnet wurde.

durch statistisches Rauschen dominiert werden. Weisen die Schwankungen Strukturen auf, die von einer normalverteilten Statistik abweichen, so sind auch die Fehler in der Apparatefunktion nicht gleichmäßig verteilt. Dies ist z.B. dort der Fall, wo von vornherein keine Entfaltung möglich ist.

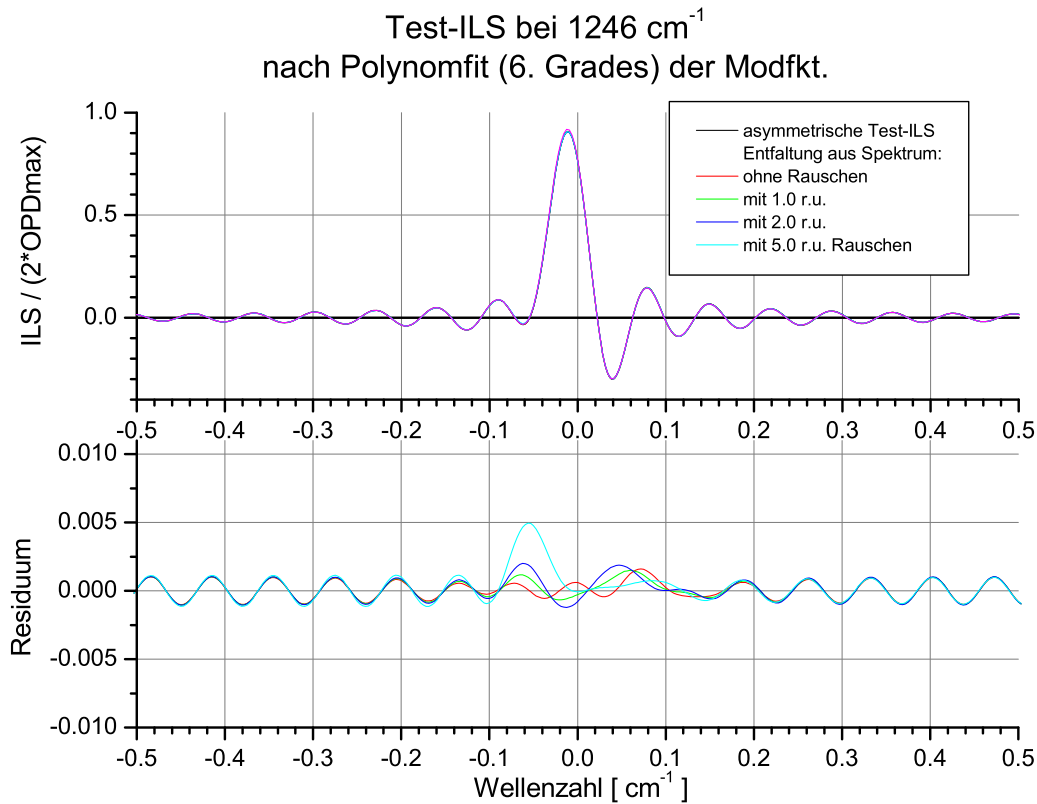
Abbildung 8.4 zeigt im unteren Graph den  $1\sigma$ -Fehler des Apparateprofils, wie er sich aus den fouriertransformierten Schwankungen der geglätteten Modulationsfunktion bei unverrauschten Spektren ergibt. Im Vergleich dazu ist oben die relative Abweichung der Halbwertsbreite dargestellt, die abgesehen von den Ausreißern fast durchweg 0.3 % beträgt. Die Entfaltungsmethode für die einzelnen Fenster ergibt also eine systematische Abweichung zu größeren Halbwertsbreiten. Die in Kapitel 7 beschriebene Methode zur Verringerung des Einflusses durch die Beschränkung auf ein kleines Wellenzahlfenster gelingt nur nahezu perfekt.



**Abb. 8.5:** Entfaltung einer asymmetrischen ILS ohne Polynomanpassung. Die Abweichung zur Test-ILS wächst erwartungsgemäß mit dem Anstieg des Rauschens im Spektrum. Es ist jedoch keine Struktur erkennbar, die mit dem Verlauf der ILS zusammenhinge.

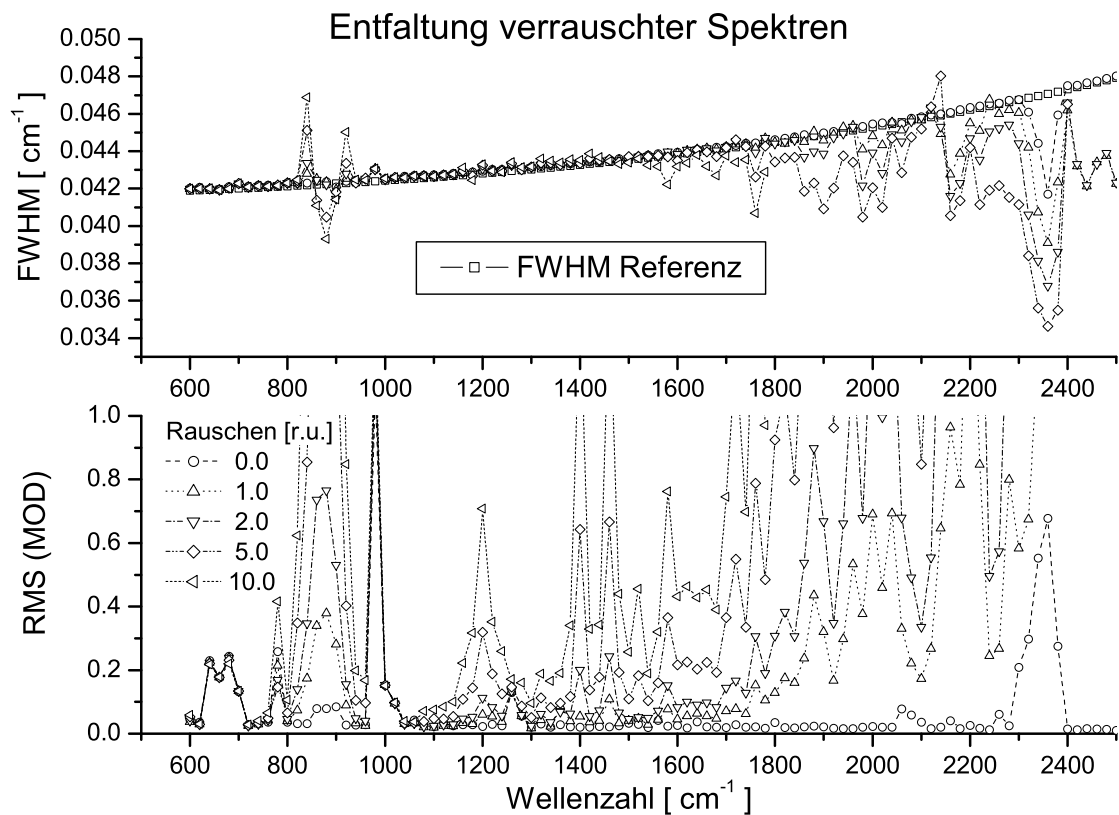
### 8.2.2 Effekte bei einer Polynomanpassung der Modulationsfunktion

Vor der Fouriertransformation der Modulationsfunktion zum Apparateprofil werden einige Glättungen durchgeführt. Es besteht auch die Möglichkeit, die MOD mit einem Polynom zu nähern, um das vorhandene Rauschen völlig zu beseitigen. Abbildung 8.5 zeigt die Ergebnisse der Entfaltung einer asymmetrischen ILS eines Bereichs in Kanal 2, in dem Linien der Moleküle Methan, Kohlendioxid und Wasser vorhanden sind. Die unterschiedlichen Rauschniveaus erzeugen entsprechend große Fehler, die anscheinend gleichmäßig über die ILS verteilt sind. Wird die gleiche Entfaltung jeweils mit einer Anpassung mit einem Polynom 6. Grades durchgeführt, so ergeben sich die Resultate von Abbildung 8.6. Insgesamt sind die Abweichungen klei-



**Abb. 8.6:** Entfaltung einer asymmetrischen ILS mit Polynom Anpassung. Es ergeben sich unabhängig vom Rauschniveau systematische Abweichungen in den Flanken der Nebenmaxima. Es ist zu beachten, daß auch das Ergebnis mit unverrauschem Spektrum diese Abweichung aufweist.

ner, es ergeben sich nun aber systematische Fehler im Zentrum der ILS und jeweils in den Flanken der Nebenmaxima. Dies ist vermutlich ein Effekt des zunehmenden Anpassungsfehlers zum Rand der Modulationsfunktion hin. Für eine einzelne Entfaltung an einer bestimmten Wellenzahl ist die Polynom Anpassung aufgrund der kleineren Abweichungen sinnvoll. Bei einer Serie von aneinanderhängenden Fenstern erscheint es jedoch günstiger, die gleichmäßig verteilten Fehler beizubehalten, um dann die Streuung einer Größe, z.B. der Halbwertsbreite, im Verlauf über die Wellenzahl zu erhalten. Auch bei der Bestimmung der CM müssen die unangepaßten Daten einfließen, um diese dann dort einer Polynom Anpassung zu unterziehen (siehe Abschnitt 8.4). Aus diesem Grund wurde generell auf eine Anpassung in den einzelnen Entfaltungsfenstern verzichtet.



**Abb. 8.7:** Entfaltungsergebnisse bei verschieden stark verrauschten Spektren.

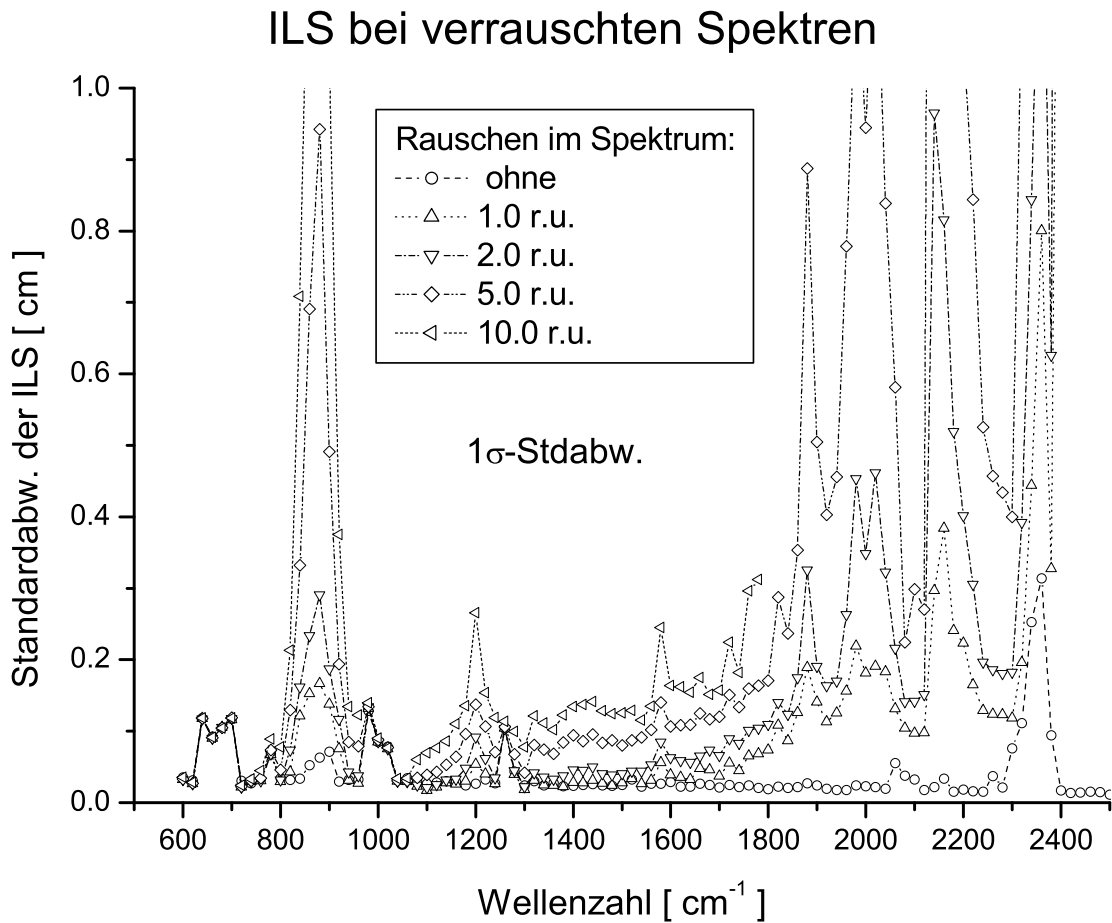
Abhängig von der Wellenzahl wird oberhalb eines bestimmten Rauschniveaus die Entfaltungsmethode immer unsicherer. Das scheinbare Rauschen in der Modulationsfunktion (unten) wird dann so groß, daß auch die Glättungsmaßnahmen keine vernünftigen Ergebnisse liefern.

## 8.3 Fehler durch die Eingangsdaten

### 8.3.1 Einfluß verrauschter Spektren

Abhängig von Kanal, Flug und Anzahl der koaddierbaren Interferogramme ist das Rauschen in den kalibrierten, unapodisierten Spektren in etwa zwischen 0.4 und 10 nW/(cm<sup>2</sup> sr cm<sup>-1</sup>). Zur Bestimmung dieses Einflusses auf die Entfaltung wurde deshalb der ganze Spektralbereich des Instruments mit den Werten 1.0, 2.0, 5.0 und 10.0 nW/(cm<sup>2</sup> sr cm<sup>-1</sup>) verrauscht.

Abbildung 8.7 zeigt das Ergebnis der Entfaltung bei den aufgezählten Rausch-

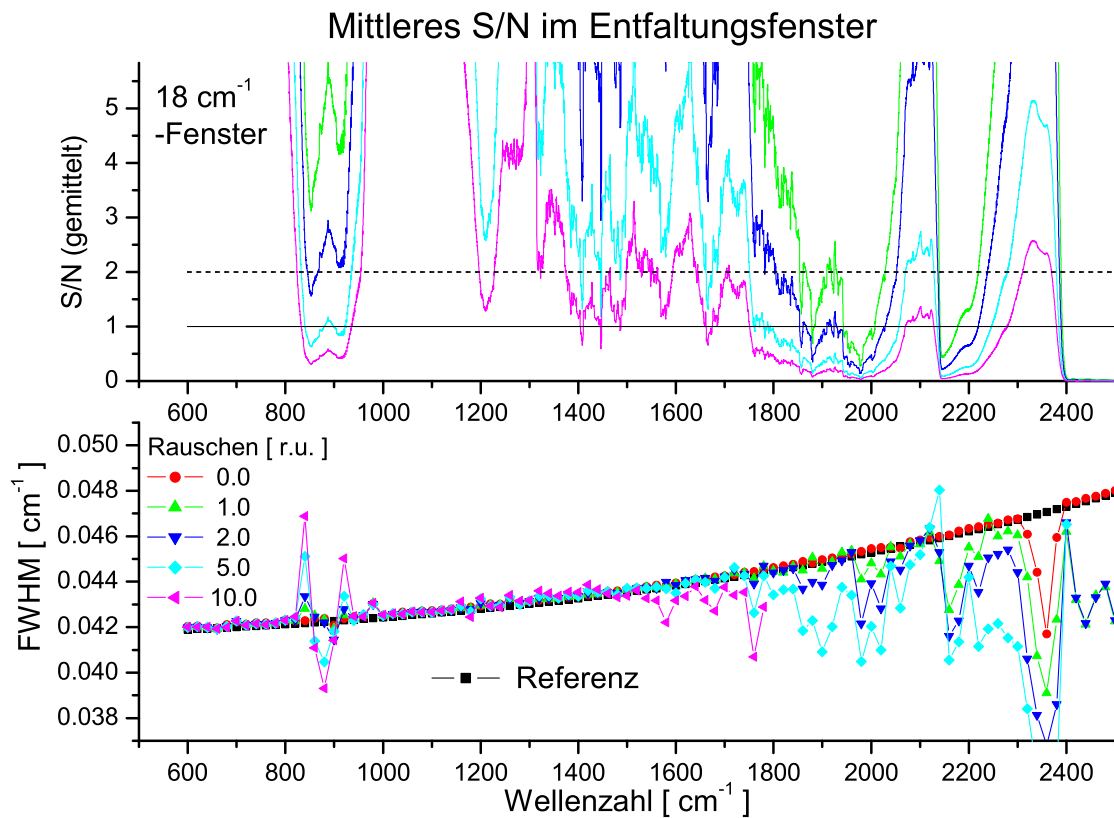


**Abb. 8.8:** Fehler der ILS bei verrauschten Spektren.

Das Rauschen des Spektrums überträgt sich auf die ILS in Abhängigkeit von der Strahldichte im betrachteten Entfaltungsfenster. Je mehr Energie enthalten ist, desto kleiner ist der resultierende Fehler. Dargestellt ist die  $1\sigma$ -Standardabw. der fouriertransformierten Schwankungen der MOD für die verschiedenen RMS-Werte des Rauschens im Spektrum (siehe Text).

niveaus. Das scheinbare Rauschen in der Modulationsfunktion nimmt entsprechend zu, hängt aber stark von der Wellenlänge ab. Kanal 4 zeigt schon bei 1.0 r.u. große Bereiche, in denen die Entfaltung nicht mehr möglich ist. Dort haben die Linien sehr kleine Intensitäten, so daß sie schnell vom Rauschen dominiert werden. Dieser Zustand ist auch bei  $880\text{ cm}^{-1}$  in Kanal 1 und  $1200\text{ cm}^{-1}$  in Kanal 2 zu beobachten. Solange jedoch genügend Fenster für die Entfaltung vorhanden sind, ist dies unkritisch.





**Abb. 8.9:** Bedeutung des mittleren Signal/Rauschverhältnisses (S/N) im Entfaltungsfenster.

Anzahl und Intensität der Linien entscheiden über die Möglichkeit der Entfaltung. Ist das gemittelte Signal/Rauschverhältnis im Entfaltungsbereich (hier 18 cm<sup>-1</sup>) größer als zwei, so ist die Entfaltung möglich. Eine Ausnahme bilden Bereiche, die eher einem Kontinuums- als einem Linienspektrum gleichen (z.B. bei 2350 cm<sup>-1</sup>).

Eine Fehlerabschätzung der ILS erhält man wiederum, indem man die Abweichungen der MOD zu einer Polynomannpassung in den Spektralraum fouriertransformiert. Abbildung 8.8 zeigt, wie der aus der Modulation übertragene Fehler abhängig von verschiedenen RMS-Werten des Spektrums anwächst. Der Fehler wächst vor allem dort schnell, wo nur wenige, kleine Linien im Entfaltungsfenster vorhanden sind, da diese bald im Rauschen verschwinden. Es existieren aber auch Bereiche, die fast unbeeinflusst vom Rauschen bleiben. Z.B. ist der 1 $\sigma$ -Fehler der ILS im Bereich um 1050 cm<sup>-1</sup> mit einem Wert von 0.03 cm extrem klein verglichen mit der ILS selbst, deren Maximum dort ca. 28 cm beträgt (vgl. Max. in Abbil-

dung 8.2). Hier befinden sich die starken Linien einer Ozon-Bande mit relativ großem Signal/Rauschverhältnis (S/N).

Das S/N ist jedoch nicht allein ausschlaggebend für die Durchführbarkeit der Entfaltung. Auch die Anzahl der Linien im Entfaltungsbereich ist entscheidend. Um dies darzustellen, wurden die S/N-Spektren für jeden Punkt über die Breite des Entfaltungsfensters gemittelt. Das entspricht einer Faltung mit einem Kern dieser Breite und dem Betrag eins und der anschließenden Division durch die Breite des Fensters. In Abbildung 8.9 ist oben dieses gemittelte Signal/Rauschverhältnis und die Linien der Beträge eins und zwei aufgetragen. Im Vergleich mit der unten dargestellten Halbwertsbreite kann man deutlich sehen, daß Bereiche oberhalb des 2-fachen NESR-Niveaus gut für die Entfaltung geeignet sind. Die bereits erwähnten Bereiche um  $660\text{ cm}^{-1}$  und  $2360\text{ cm}^{-1}$  mit den Absorptionsstrukturen bilden jedoch eine Ausnahme dieser Regel.

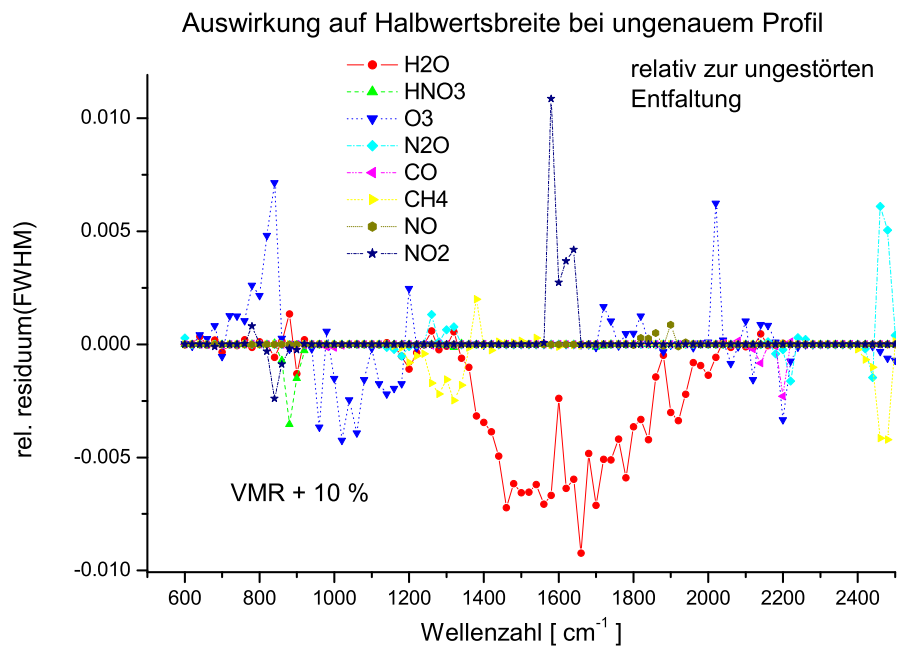
### 8.3.2 Einfluß ungenauer Profildaten

Zum Entfalten werden vorwärtsgerechnete Spektren benötigt, die nicht mit der ILS des Instruments verbreitert wurden. Diese Spektren müssen für die benötigte Sichtlinie bestimmt werden. Dabei fließen Profildaten der Temperatur und der Spurengase mit ein, die aus einem ersten, groben Retrieval oder Standarddaten gewonnen werden. Die ungenaue Kenntnis der Profile pflanzt sich auf den Fehler der ILS fort, jedoch nur gering, da in den oberen Höhen die Form der Linien kaum mehr von der Spurengaskonzentration abhängt.

Je nach Kanal und Wellenzahlbereich dominieren andere Gase die Entfaltung. In Kanal 1 sind dies für Höhen oberhalb von 20 km Kohlendioxid ( $\text{CO}_2$ ), Ozon ( $\text{O}_3$ ) und Salpetersäure ( $\text{HNO}_3$ ). Wie in Abschnitt 4.2 auf Seite 32 geschildert, wird das VMR-Profil von  $\text{CO}_2$  als bekannt vorausgesetzt, um daraus das Temperaturprofil zu bestimmen. Tritt hierbei ein Fehler auf, so beeinflusst dieser alle damit berechneten spektralen Strahldichten, also die Linienhöhen in den Spektren. Die Form der Linien ist davon nur wenig berührt. Im Kanal 2 dominieren  $\text{O}_3$ ,  $\text{CH}_4$  und  $\text{H}_2\text{O}$ , wobei zwischen den  $\text{CH}_4$ -Linien noch  $\text{N}_2\text{O}$  und  $\text{HNO}_3$ -Linien hervortreten. Kanal 3 ist hauptsächlich bestimmt von  $\text{H}_2\text{O}$ . Weniger dominierend sind  $\text{NO}_2$ ,  $\text{HNO}_3$  und  $\text{O}_3$  zwischen den Wasserdampfprofilen. Im Kanal 4 dominieren  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{CO}$  und  $\text{N}_2\text{O}$  je nach Wellenzahl.

Da für die Entfaltung nur Elevationswinkel um die oberste Tangentenhöhe in Frage kommen, wurden zur Bestimmung des Einflusses auf das Apparateprofil die VMR-Profile der Spurengase über die ganze Säule prozentual verändert. Diese Profile wurden sukzessive zur Vorwärtsrechnung der ungefalteten Spektren verwendet. Das simulierte gemessene Spektrum, welches einer Messung aus mittleren Breiten mit der Tangentenhöhe von ca. 38 km entspricht, wurde dabei unverändert beibehalten.

Je nachdem, welche Stellung ein Spurengas an einer Wellenzahl einnimmt (do-



**Abb. 8.10:** Halbwertsbreite nach 10 %iger VMR-Änderung.

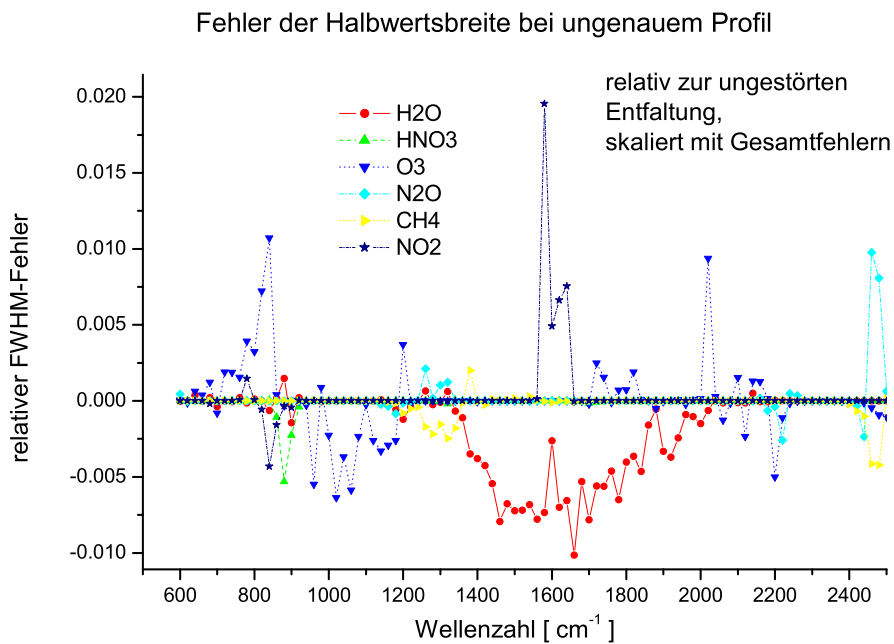
Die Auswirkung eines ungenauen VMR-Profiles auf die entfaltete ILS ist abhängig vom Auftreten des jeweiligen Spurengases im betrachteten Wellenzahlbereich. Die ILS von überschätzten, dominierenden Linien (z.B.  $\text{H}_2\text{O}$ ) wird mit einer geringeren FWHM entfaltet als im Spektrum vorhanden.

minierend, gleich oder untergeordnet), bewirkt es bei ungenauer Kenntnis einen anderen Fehler im entfalteten Apparateprofil. Dominiert es oder ist es praktisch als einziges vorhanden, so wird bei überschätzter Konzentration die Halbwertsbreite der ILS etwas zu klein entfaltet. Wasserdampf, der von  $1380 \text{ cm}^{-1}$  bis  $2030 \text{ cm}^{-1}$  dominiert, ist hierfür das auffälligste Beispiel (Abbildung 8.10). Die Änderung der Halbwertsbreite bei der 10 %igen Überschätzung bleibt aber unter 1 %. Dort, wo andere Spurengase zwischen den Wasserlinien auftauchen, ist die Änderung entsprechend geringer, wie z.B. bei  $1600 \text{ cm}^{-1}$ , wo  $\text{NO}_2$  zur Geltung kommt. Spielt das Spurengas eine untergeordnete Rolle, so wird die ILS scheinbar kleiner und breiter. Beispiele hierfür sind Ozon bei  $820 \text{ cm}^{-1}$ , und  $\text{NO}_2$  im Bereich um  $1600 \text{ cm}^{-1}$ . Abbildung 8.10 zeigt wie die einzelnen Gase im Vergleich zueinander auf die Entfaltung wirken. Werden die Profile z.B. aus einem zuvor gemachten, ersten Retrieval gewonnen, so muß noch der dabei auftretende Fehler berücksichtigt werden. Als Näherung werden die Abweichungen linear angenommen, weshalb zur Abschätzung vereinfacht mit dem Gesamtfehler skaliert werden kann. Folgende Tabelle gibt den Gesamtfehler

der obersten Höhe des jeweiligen Spurengases von Flug 6 und 7 an. Abbildung 8.11 zeigt die mit den Gesamtfehlern von Flug 6 skalierten relativen Fehler der FWHM. Nicht verfügbare Werte wurden durch die von Flug 7 ersetzt. Trotz der VMR-Fehler von 10 bis 20 % bleiben die Auswirkungen auf die ILS-FWHM unter 2 %.

Gesamtfehler in der obersten Tangentenhöhe [ % ]						
Flug	H <sub>2</sub> O	HNO <sub>3</sub>	O <sub>3</sub>	N <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	NO <sub>2</sub>
6	-	15	15	16	-	18
7	11	14	-	15	10	21

**Tabelle 8.1:** VMR-Gesamtfehler der obersten Tangentenhöhe bei Flug 6 und 7 für einige ausgewählte Spurengase in Prozent.



**Abb. 8.11:** Fehler der ILS-Halbwertsbreite durch VMR-Fehler.

Zur Abschätzung des realen Einflusses von ungenauen VMR-Profilen auf die ILS-Halbwertsbreite der Entfaltung wurden die erhaltenen Residuen von Abbildung 8.10 mit den Gesamtfehlern der obersten Tangentenhöhe des Retrievals von Flug 6 bzw. 7 skaliert.

Um den auffallend starken, sich über einen breiten Spektralbereich erstreckenden Einfluß von Wasserdampf zu verringern, wurde eine Rechnung mit der Elevation

von  $+2^\circ$  durchgeführt, da mit abnehmender Konzentration auch der Einfluß auf die Linienform abnimmt. Der Betrag des FWHM-Fehlers wird dadurch aber nur um  $1/4$  gesenkt.

### 8.3.3 Einfluß ungenauer spektroskopischer Daten

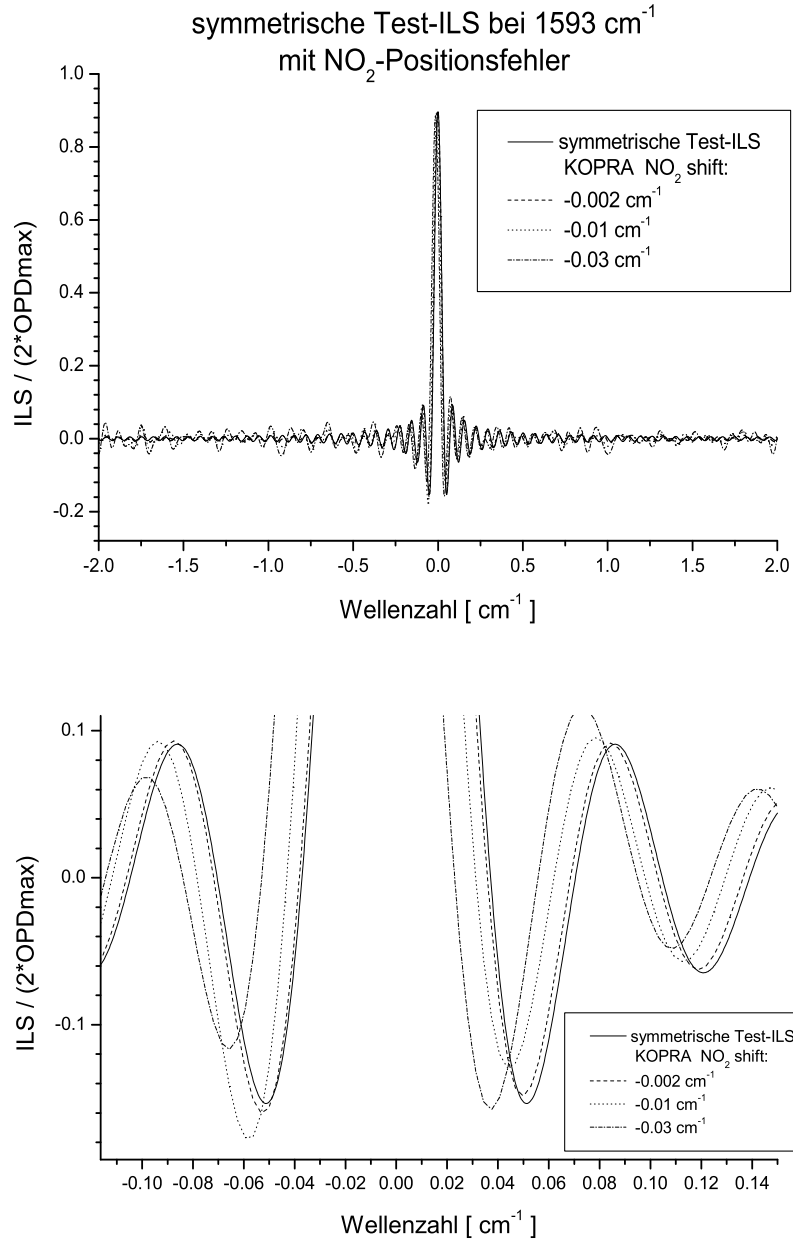
Für die benötigten spektroskopischen Daten bei der Vorwärtsrechnung der ungefalteten Spektren wird von KOPRA die HITRAN-Datenbank verwendet. Diese Daten können fehlerbehaftet sein und somit eine Diskrepanz zu den gemessenen Spektren verursachen.

Die Halbwertsbreiten der starken Linien, die bei der Entfaltungsmethode die dominierende Rolle spielen, sind gut bekannt. Eine Unsicherheit in den Daten bildet der Druckverbreiterungskoeffizient, der die Verbreiterung der Linienform bei den höheren Drücken unterer Tangentenhöhen beschreibt. Für die Entfaltung werden jedoch die dopplerverbreiterten Spektren der obersten Tangentenhöhen verwendet, so daß diese Unsicherheit keine Rolle spielt.

Auch falsche Positionen oder Intensitäten einzelner Linien sind für die Entfaltung wenig bedeutend, wenn genügend korrekte Linien im Entfaltungsfenster vorhanden sind. Erst sehr viele Linien, z.B. eine ganze Bande eines Spurengases, können einen Einfluß auf die Entfaltung haben. Es ist nicht zu erwarten, daß bedeutende Banden der Spektralbereiche von MIPAS-B2 starke Fehler in den Datenbanken aufweisen. Dies wäre beim Retrieval längst bemerkt worden. Falls ein bisher noch nicht verwendeter Spektralbereich hinzukommt, könnte diese Problematik eine Rolle spielen. Um abzuschätzen, in welcher Größenordnung der Einfluß von spektralen Positionsfehlern liegt, wurde die folgende Untersuchung durchgeführt.

Wenn der Spektralbereich vom fehlerbehafteten Spurengas allein beherrscht wird, so ergibt sich nur eine Verschiebung im Ergebnis der Entfaltung. Sollten aber die Hälfte der Linien zu einem anderen Spurengas gehören, deren Positionen korrekt sind, so wird sich diese Diskrepanz auf die ILS fortpflanzen. Abbildung 8.12 zeigt als Beispiel, wie sich ein Positionsfehler der  $\text{NO}_2$ -Bande im Kanal 3, deren Linien zwischen den dominierenden  $\text{H}_2\text{O}$ -Linien liegen, auf die entfaltete ILS auswirken würde. Verschiebungen von  $0.002$ ,  $0.01$  und  $0.03 \text{ cm}^{-1}$  wurden dabei beispielhaft verwendet. Die beiden kleineren Werte sind für einzelne Linien durchaus realistisch. Der große Wert liegt im Bereich der Auflösung von MIPAS-B2 und würde bei einer Linie durchschnittlicher Intensität sofort auffallen.

Für die großen Werte treten starke Asymmetrien und Fehler in den Randbereichen auf. Trotz Verschiebung in die gleiche Richtung, gehen die Asymmetrien im Zentrum der ILS in verschiedene Richtungen.



**Abb. 8.12:** Entfaltungsergebnisse bei Positionsfehlern von  $\text{NO}_2$  im Kanal 3. Zur Demonstration wurden die Linienpositionen von  $\text{NO}_2$  verschoben und die entfaltete ILS zusammen mit der ursprünglichen dargestellt. Starke Asymmetrien und Schwankungen in den Randbereichen treten auf.

## 8.4 Fehler der ILS bei Bestimmung aus der Charakteristischen Modulationsfunktion (CM)

Die Apparatfunktionen verschiedener Wellenzahlen sind nicht unabhängig voneinander. Die zugehörigen Modulationsfunktionen können bei gleichem Detektorge-sichtsfeld durch eine einzelne CM beschrieben werden. Dies ermöglicht es, aus allen plausiblen Einzelergebnissen eines Kanals die CM zu berechnen und diese dann als Grundlage der ILS-Berechnung zu verwenden. Als Kriterium der Plausibilität kann die Standardabweichung der einzelnen Modulationen zur Polynom-anpassung dienen. Im Gegensatz zu den Einzelergebnissen ist der verfügbare Bereich eines Kanals bei der CM von entscheidender Bedeutung. Je mehr Bereiche brauchbarer Liniensigna-turen vorhanden sind, desto genauer wird das Ergebnis für den gesamten Kanal werden. Da sich bei MIPAS-B2 die Kanalbereiche von Flug zu Flug ändern, wur-de für die folgenden Rechnungen die Auswahl der erlaubten Wellenzahlfenster an den Flug 6 bzw. 7 angelehnt. In Tabelle 8.2 stehen die verwendeten Bereiche dieser Einschränkung. Im Folgenden wird der Einfluß von Rauschen in simulierten, gemes-

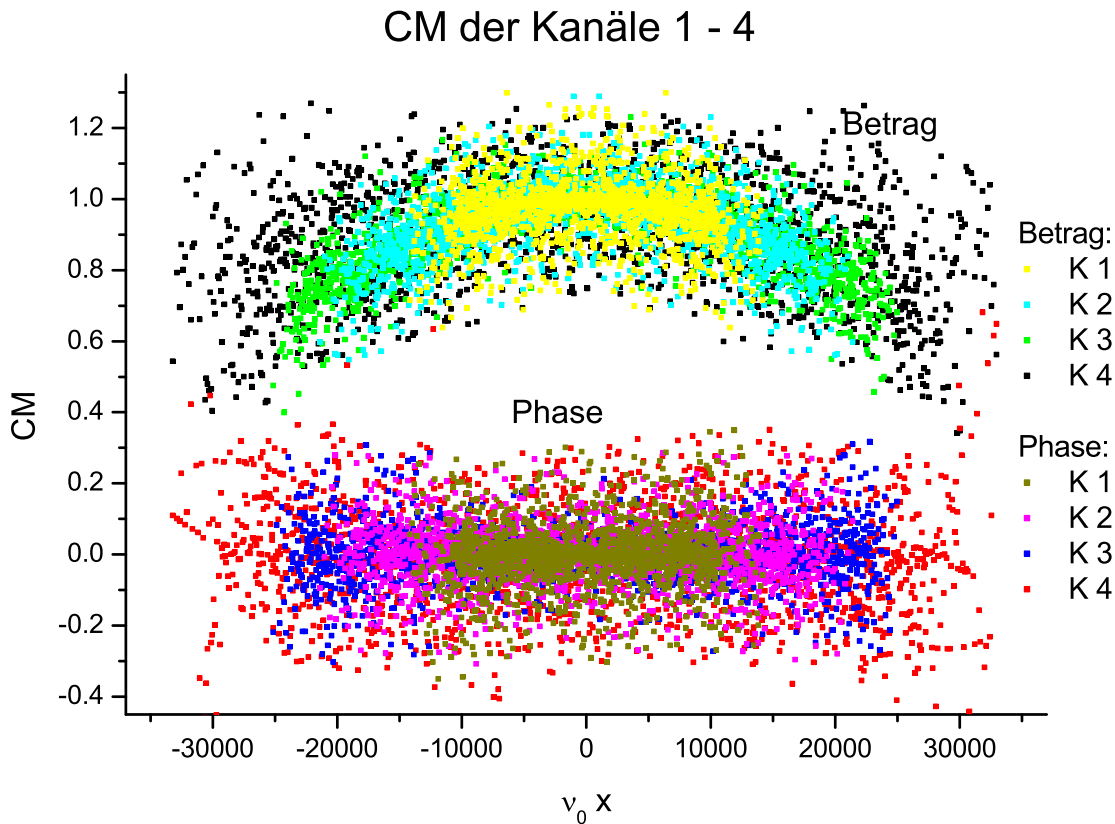
	Spektralbereich [ $\text{cm}^{-1}$ ]	
Kanal	Flug 6	Flug 7
1	680–970	750–990
2	1010–1430	1130–1350
3	1580–1750	1560–1760
4	1800–2440	1800–2450

**Tabelle 8.2:** Die Wellenzahlbereiche für die Testberechnung der CM. In Anlehnung an Flug 6 und 7 wurde der Wellenzahlbereich für die Berechnung der CM eingeschränkt.

senen Spektren und der Einfluß eines ungenau bekannten Temperatur- sowie eines  $\text{H}_2\text{O}$ -Profils auf die Berechnung der CM untersucht.

### 8.4.1 Einfluß von Rauschen auf die CM

Abbildung 8.13 zeigt alle ausgewählten Punkte der CM der Kanäle 1 bis 4 für Flug 6. Die zugrundeliegenden Spektren wurden mit jeweils einem mittleren Rauschen wie in Flug 6 verrauscht, also mit 20.0, 7.5, 2.5 und 4.0  $\text{nW}/(\text{cm}^2 \text{sr cm}^{-1})$ . Aufgrund der erhöhten Punktzahl für die CM gegenüber einer einzelnen Modulationsfunktion kann die CM in jedem Kanal wesentlich genauer bestimmt werden. Eine Polynom-anpassung geeigneter Ordnung erlaubt es, auch die ILS an einer beliebigen Stelle anzugeben.

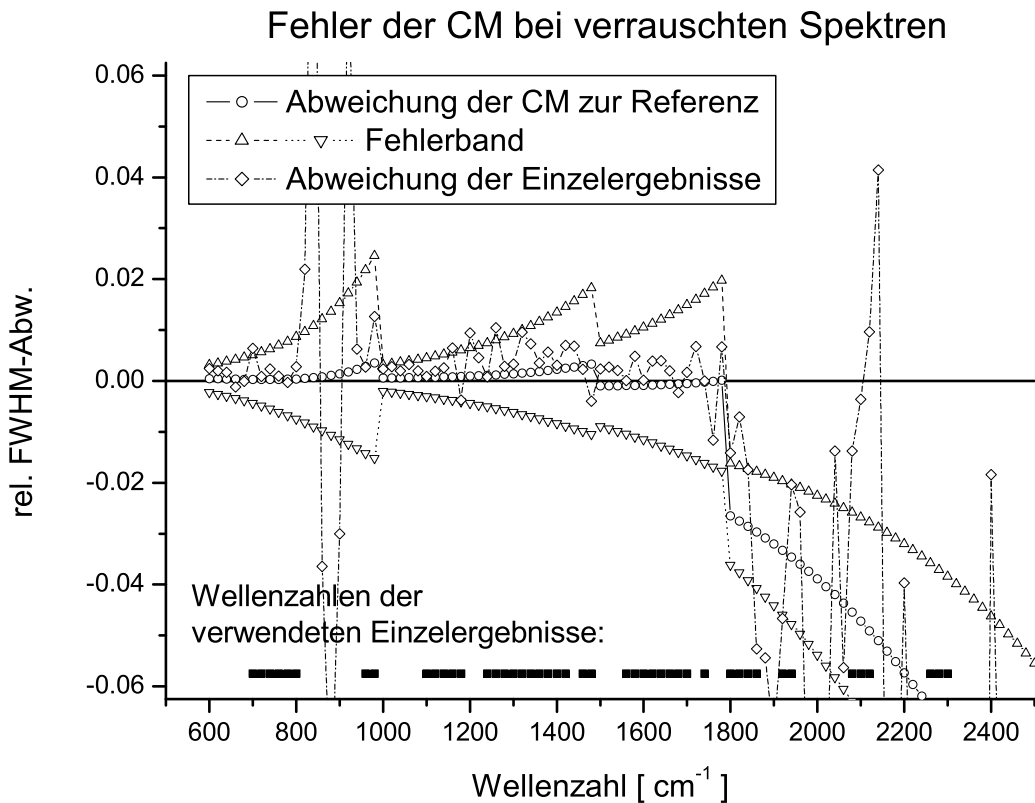


**Abb. 8.13:** Charakteristische Modulationsfunktionen (CM) aus künstlich verrauschten Spektren.

Mit wachsender Wellenzahl kann die CM für immer größere Abszissenwerte bestimmt werden. Die CM von Kanal 4 ist aufgrund der großen Wellenzahlen am stärksten durch den Modulationsabfall betroffen.

In den folgenden Abbildungen sind jeweils die relativen Abweichungen der Halbwertsbreiten dargestellt, wie sie sich aus der CM durch Polynomanpassung und Umrechnung in die ILS ergeben. Als Referenz dient jeweils die FWHM der für die Vorwärtsrechnung verwendeten ILS. Die  $1\sigma$ -Fehler der Anpassungsparameter werden in einen Fehler der ILS umgerechnet und sind als FWHM-Fehlerband eingezeichnet. Abbildung 8.14 zeigt die Ergebnisse für die Situation von Flug 6. Am Rande des Intervalls wird eine Polynomanpassung immer ungenauer, deshalb nehmen die Fehler zum Ende des Kanals zu. Zusätzlich nimmt aufgrund der Konstruktion der CM die Punktedichte zum Rand hin ab. Das aus den Standardfehlern der Anpassungsparameter bestimmte Fehlerband gibt dies vernünftig wieder. Das Rauschen in Kanal 4 ist so groß, daß die Abweichung der Halbwertsbreite zur Referenz durchweg





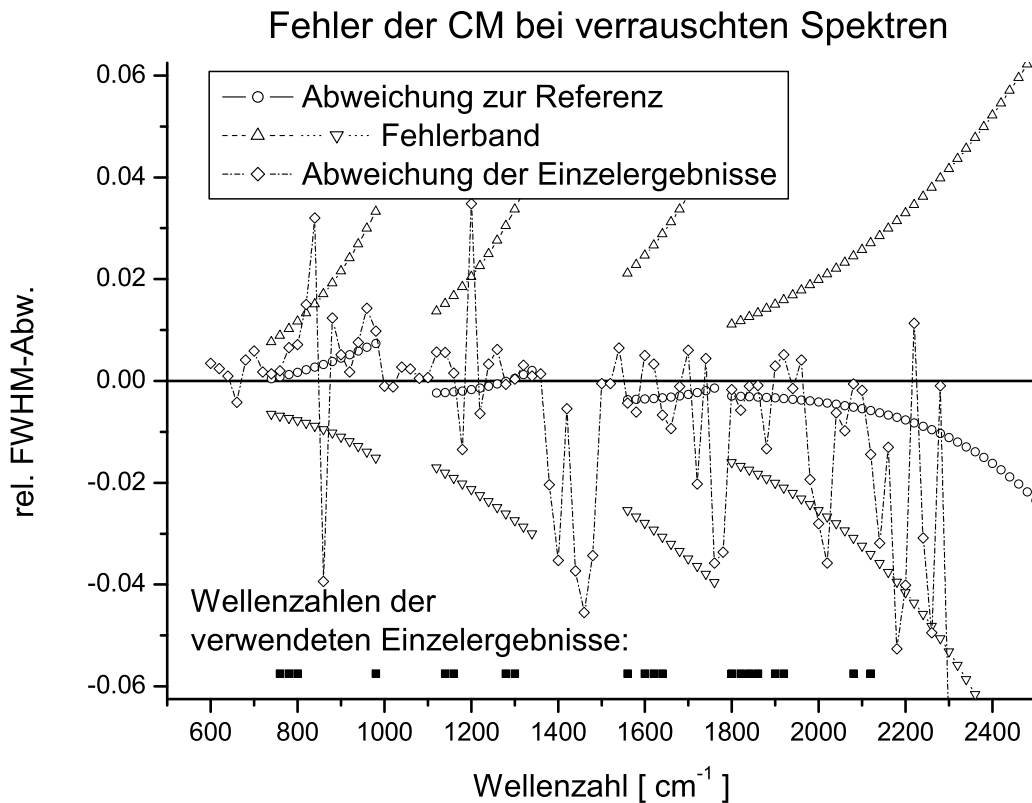
**Abb. 8.14:** Fehler der ILS-FWHM aus der CM bei künstlich verrauschten Spektren gemäß Flug 6.

Die relative Abweichung der Halbwertsbreite (FWHM) liegt deutlich unter denen der Einzelergebnisse. Das Fehlerband wächst jeweils zum Kanalende hin stark an, da dort die Polynome aus der Anpassung immer ungenauer werden. Die Balken im unteren Teil der Grafik markieren die Wellenzahlfenster, deren Ergebnisse in die Berechnungen der CM eingegangen sind.

über 2 % liegt. Erst ein Rauschen unter  $2 \text{ nW}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$  ergibt eine Abweichung unter 2 %.<sup>1</sup> Im Vergleich zu den Einzelergebnissen sind die Abweichungen zur Referenz deutlich kleiner und diese liegt in Kanal 1 bis 3 vollständig innerhalb des Fehlerbandes.

Abbildung 8.15 zeigt für die Situation von Flug 7 die Abweichungen der ermittelten ILS von der Referenz-ILS, jeweils für die Einzelergebnisse und die aus der CM gewonnenen Werte. Das in der Referenzrechnung verwendete Rauschen der Kanäle 1

<sup>1</sup>Bei den neueren Meßflügen spielt das Rauschen nur noch eine untergeordnete Rolle, da die genannte Grenze weit unterschritten wird. Z.B. Rauschen in Flug 11 bei  $2100 \text{ cm}^{-1}$ : 0.5 r.u.



**Abb. 8.15:** Fehler der ILS-FWHM aus der CM bei künstlich verrauschten Spektren gemäß der Kanäle 1 und 2 in Flug 7, Kanäle 3 und 4 mit vermindertem Rauschen.

Die relative Abweichung der Halbwertsbreite (FWHM) bleibt für die mit realem Rauschen berechneten Kanäle 1 bzw. 2 unter 0.7 bzw. 0.2 %. Bei Kanal 3 bzw. 4 wäre ein Rauschen von maximal 0.5 bzw. 0.1 r.u. notwendig gewesen, um eine Berechnung der CM zu ermöglichen.

und 2 entspricht dem mittleren, realistischen Wert von  $3.0 \text{ nW}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$  der aus Koaddition entstandenen Spektren. Die Abweichung steigt in Kanal 1 zum Ende hin auf 0.7 % an. In Kanal 2 beträgt sie  $\pm 0.2 \%$ . Zu beachten ist, daß hier Kanal 2 mit der oberen Grenze bei  $1350 \text{ cm}^{-1}$  wesentlich schmäler ist als in Flug 6. Das letzte verwendete Ergebnis (siehe schwarze Markierungen) kommt aus dem Fenster bei  $1300 \text{ cm}^{-1}$ . Die ab ca.  $1380 \text{ cm}^{-1}$  beginnende Wasserdampfbande steht für die Entfaltung in diesem Flug nicht zur Verfügung. Bei Flug 7 betrug das Rauschen in den koaddierten Spektren in Kanal 3 und 4 im Mittel  $1.2$  bzw.  $1.7 \text{ nW}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ . Aufgrund der extrem kalten Stratosphäre war jedoch das S/N so klein, daß eine

Standard-CM-Berechnung nicht mehr möglich war. In den Testrechnungen wurde daher untersucht, wie groß das Rauschen in dieser Situation maximal sein darf, damit eine Berechnung der CM noch möglich ist. Es ergaben sich Werte von 0.5 bzw. 0.1 nW/(cm<sup>2</sup> sr cm<sup>-1</sup>) für Kanal 3 bzw. 4. Die Ergebnisse für diese Werte sind in 8.15 dargestellt. Die letzten verwendbaren Fenster sind 1640 bzw. 2120 cm<sup>-1</sup>, in den oberen Wellenzahlbereichen der beiden Kanäle wird die ILS aus der CM extrapoliert.

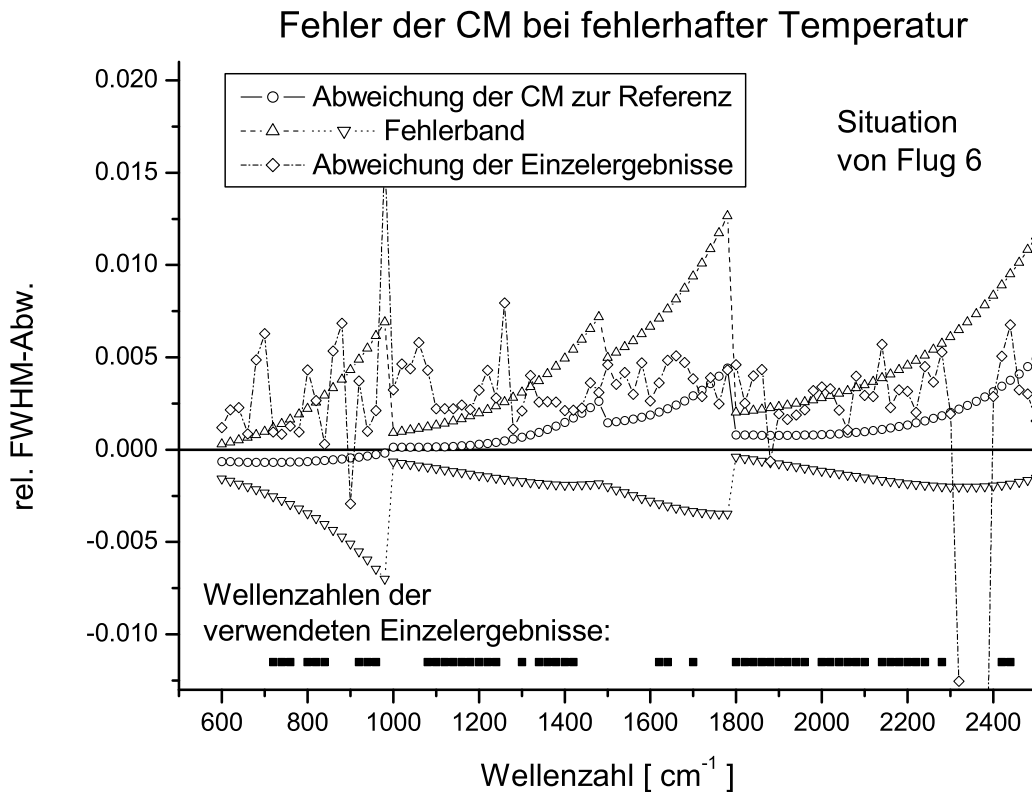
### 8.4.2 Einfluß fehlerhafter Temperatur auf die CM

Im Falle von ungenauen Profilen in der Vorwärtsrechnung (siehe Abschnitt 8.3.2) führt die Berechnung der ILS über die CM ebenfalls zu besseren Ergebnissen. Abbildung 8.16 zeigt die relative Abweichung der Halbwertsbreite von der als Referenz verwendeten ILS bei um 1 % überschätzter Temperatur für die Situation von Flug 6. Auch wenn die Verschiebung der Einzelergebnisse berücksichtigt wird, sind die Abweichungen der FWHM von der Referenz größer als bei der Berechnung aus der CM. Nur in Kanal 3 weicht die FWHM relativ stark von der Referenz ab (bis 0.4 %), die Wasserdampflinien dort erhöhen den Fehler der Entfaltung, so daß die Auswahl für die CM nicht optimal ist.

Als Beispiel für Messungen in polaren Breiten dient wiederum Flug 7 mit seiner extrem kalten Stratosphäre im Flugniveau und darüber. In Abbildung 8.17 ist für Flug 7 der Einfluß einer um 1 % überschätzten Temperatur gezeigt. Die Verhältnisse sind ganz ähnlich zum letzten Beispiel, nur in Kanal 2 macht sich die Einschränkung auf 1350 cm<sup>-1</sup> mit einer größeren Abweichung bemerkbar, und die Halbwertsbreite von Kanal 1 liegt nun auch oberhalb der Abszisse, so daß man eine systematische Überschätzung der Halbwertsbreite vermuten könnte. Gesichert kann dies jedoch nicht behauptet werden, da das Fehlerband in beiden Abbildungen viel größer ist als die FWHM-Abweichung von der Abszisse (Referenz). Dies zeigt, daß der berechnete Betrag des Fehlerbandes eine sinnvolle Abschätzung des FWHM-Entfaltungsfehlers darstellt.

### 8.4.3 Einfluß eines fehlerhaften H<sub>2</sub>O-Profiles auf die CM

Unter den Spurengasen ist auf Wasserdampf besonders zu achten, da dieser bei MIPAS-B2 im gesamten Kanal 3 vorkommt und daher nicht umgangen werden kann. Eine 10 %ige Überschätzung von H<sub>2</sub>O bei der Vorwärtsrechnung führt zu der in Abbildung 8.18 dargestellten Abweichung der Halbwertsbreite. Der automatische Auswahlprozeß bei der Berechnung der CM kann die veränderte Linienform durch das fehlerhafte H<sub>2</sub>O-Profil nicht von einer verzerrten ILS unterscheiden. Durch eine manuelle Auswahl von Wellenzahlfenstern läßt sich die Abweichung aber stark verkleinern. So sind die Linien um 1600 cm<sup>-1</sup> beispielsweise weit weniger gesättigt, so daß ihre Formen deshalb weniger stark vom H<sub>2</sub>O-Profil abhängen. Gleichzeitig



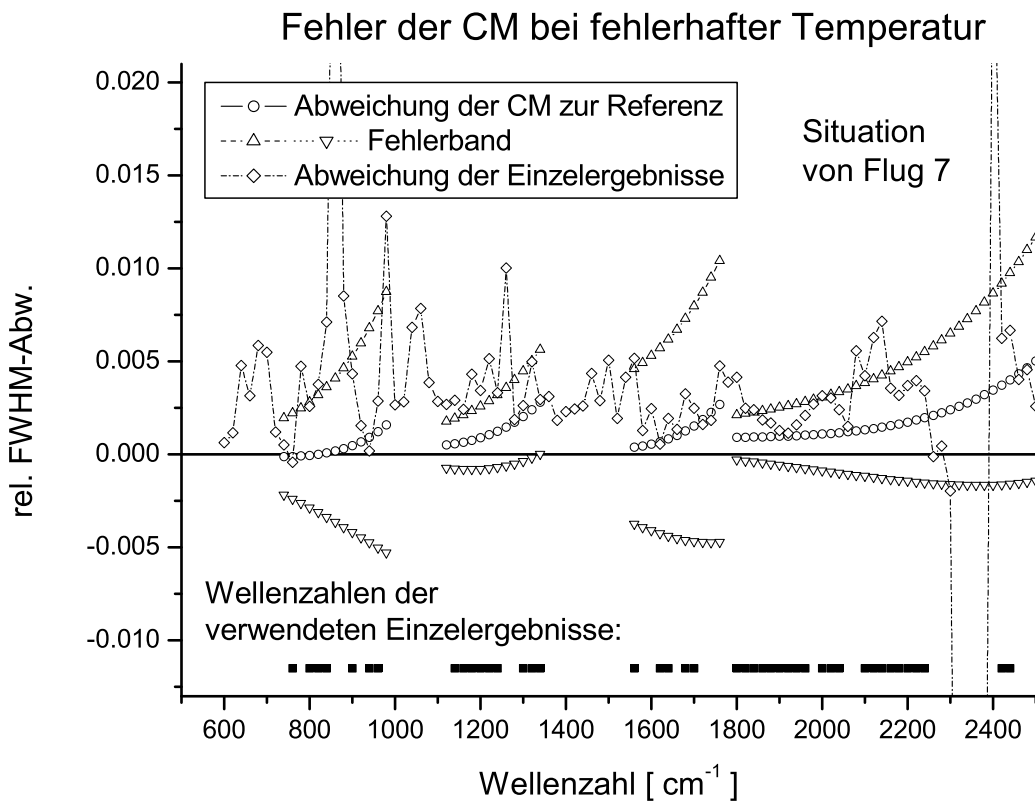
**Abb. 8.16:** Fehler der ILS-FWHM aus der CM bei einem Temperaturfehler von +1 % für die Situation von Flug 6.

Eine signifikante systematische Abweichung der Halbwertsbreite (FWHM) ist nicht zu erkennen. Die relative Abweichung bleibt unter 0.4 %. Die Verschiebung der Einzelergebnisse ist schon bei der Entfaltung ungestörter Spektren vorhanden.

fallen die dort vorhandenen  $\text{NO}_2$ -Linien mehr ins Gewicht. Das Ergebnis daraus ist in der gleichen Abbildung (Quadrate) zu sehen, es bleibt unter einer Abweichung von 0.3 %. Das zugehörige Fehlerband (nicht gezeichnet) ist aufgrund der wenigen Wellenzahlfenster etwa doppelt so groß wie bei Verwendung des ganzen Kanals, d.h. die korrekte ILS wird gut getroffen, der berechnete Fehler überschätzt jedoch die tatsächliche Abweichung stark.

#### 8.4.4 Zusammenfassung und Beurteilung der Fehler

In den vorangegangenen Testrechnungen wurde der Einfluß verschiedener Fehlerquellen auf die CM untersucht. Zur Fehlerabschätzung wurden dabei die  $1\sigma$ -

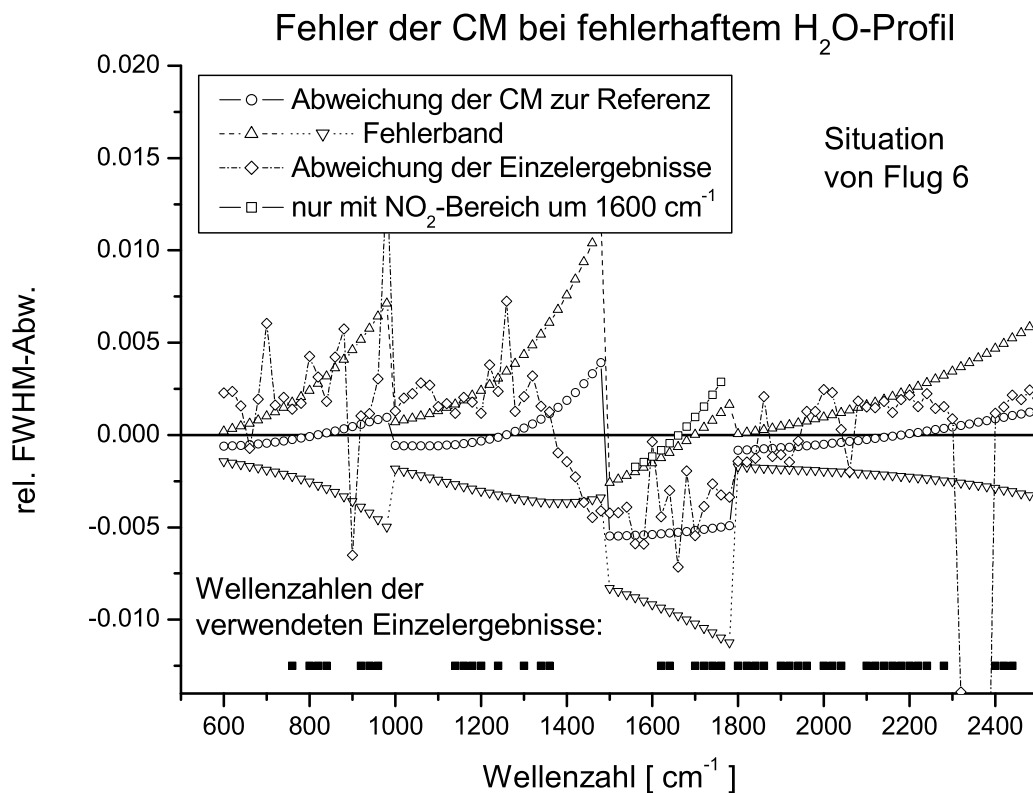


**Abb. 8.17:** Fehler der ILS-FWHM aus der CM gemäß Flug 7 bei 1 %ig überschätzter Temperatur.

Eine systematische Abweichung der Halbwertsbreite (FWHM) scheint vorzuliegen, ist jedoch bei Beachtung des Fehlerbandes nicht signifikant. Die relative Abweichung bleibt unter 0.4 %. Die Verschiebung der Einzelergebnisse ist schon bei der Entfaltung ungestörter Spektren vorhanden.

Vertrauensbereiche der Parameter aus der Polynomanpassung der CM verwendet. Die Tests zeigten, daß sich diese Fehlerabschätzung für die resultierenden ILS eignen. Die tatsächlichen Abweichungen der Halbwertsbreiten lagen meist innerhalb des berechneten Fehlers. Eine Ausnahme bildet der Fall des ungenau bekannten Wasserdampfes in Kanal 3, hier liegt die Abweichung der FWHM von der Referenz z.T. außerhalb des 0.3 – 0.7 %igen Fehlerbandes. Trotzdem schlägt sich die 10 %ige Konzentrationsänderung nur in einer 0.6 %igen Abweichung der Halbwertsbreite nieder.

Ebenfalls mit Vorsicht zu betrachten sind die Wellenzahlbereiche, für die die CM extrapoliert werden muß, da die Polynome aus Anpassungen am Rand und darüber hinaus große Fehler aufweisen. Wie bei der Polynomanpassung der Einzelergebnisse



**Abb. 8.18:** Fehler der ILS-FWHM bei Berechnung aus der CM bei 10 % überschätztem H<sub>2</sub>O-Profil.

Die relativen Abweichungen der FWHM bleiben unter 0.6 % und können in Kanal 3 unter 0.3 % gesenkt werden, wenn nur der Bereich um 1600 cm<sup>-1</sup> für die Berechnung der CM verwendet wird, wie in der Grafik (Kurve mit Quadraten) zu sehen ist.

können hier systematische Abweichungen auftreten. Um die ILS an einer beliebigen Wellenzahl innerhalb eines Kanals auf schnelle Weise angeben zu können, ist die Polynomannpassung der CM aber notwendig. In der Praxis ist abgesehen von Kanal 3 bei fehlerbehaftetem H<sub>2</sub>O-Profil nur eine kleine Extrapolation erforderlich. Der linke Bereich (kleine Wellenzahlen) eines jeden Kanals wird durch den inneren Teil der CM meist sehr gut wiedergegeben. Der Bereich großer Wellenzahlen wird in Kanal 1 durch CO<sub>2</sub> abgedeckt. In Kanal 2 ist der Bereich bis 1370 cm<sup>-1</sup> durch das vorhandene CH<sub>4</sub> verwendbar. Bei größeren Wellenzahlen erscheinen H<sub>2</sub>O-Linien. Sind diese nicht verwendbar, so kann von 1370 cm<sup>-1</sup> aus die CM extrapoliert werden. Im von Wasserdampflinien dominierten Kanal 3 kann bei unsicherem H<sub>2</sub>O-Profil um

1600  $\text{cm}^{-1}$  ein Bereich mit  $\text{NO}_2$  gewählt werden, der nur relativ kleine  $\text{H}_2\text{O}$ -Linien enthält. In diesem Fall muß der restliche Bereich von Kanal 3 in der CM extrapoliert werden. Bei den bisherigen Flügen sind dies ca. 150  $\text{cm}^{-1}$  zu höheren Wellenzahlen hin. In Kanal 4 sind Linienstrukturen von einer Vielzahl von Spurengasen vorhanden. Aufgrund der Planckfunktion haben die Linien im Vergleich zu den anderen Kanälen aber ein sehr kleines S/N, so daß nur die stärksten Banden verwendbar sind. Abgesehen von Wasser im Bereich niedriger Wellenzahlen, sind  $\text{CO}_2$  um 1900  $\text{cm}^{-1}$ , 2050  $\text{cm}^{-1}$  und 2250  $\text{cm}^{-1}$  vor Beginn der breitbandigen Emission verwendbar. Außerdem sind noch  $\text{O}_3$  um 2100  $\text{cm}^{-1}$  sowie evtl.  $\text{CO}$  um 2150  $\text{cm}^{-1}$  und  $\text{N}_2\text{O}$  um 2200  $\text{cm}^{-1}$  verwendbar, falls genügend hohe Konzentrationen vorhanden sind.

Bei den hier für die Tests verwendeten Flügen 6 und 7 war die größte Fehlerquelle das Rauschen in den gemessenen Spektren. In den nachfolgenden Flügen wurde dieses z.T. (insbesondere in Kanal 4) erheblich gesenkt, so daß nun der Einfluß des Rauschens auf die Entfaltung eine ähnliche oder sogar weniger bedeutende Rolle im Vergleich zu anderen Fehlerquellen bekommen hat.

Aus den Testrechnungen mit verrauschten Meßspektren lassen sich Mindestanforderungen an das Signal/Rauschverhältnis bzw. die Zahl der zu koaddierenden Spektren ableiten. Das über das Entfaltungsfenster gemittelte S/N ist hierfür, abgesehen von Kontinuumsstrukturen, geeignet. Wie Abbildung 8.9 zeigt, sollte es den Wert 2 übersteigen. Für eine Verdoppelung des Wertes ist eine vierfache Meßzeit notwendig. Ein Vergleich verschiedener Situationen ist in Anhang D zu finden.

## Kapitel 9

# Die Apparatfunktion des Fourierspektrometers MIPAS-B2

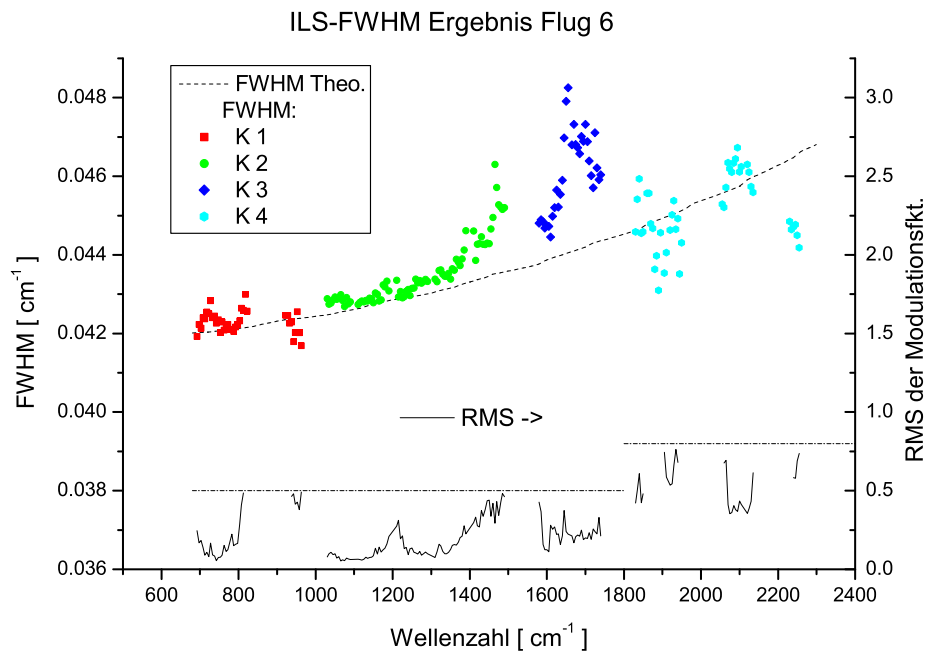
### 9.1 Vorgehensweise

Um das Entfaltungsverfahren zur Gewinnung des Apparateprofils anwenden zu können, muß zunächst aus den gemessenen, kalibrierten Spektren ein erstes Retrieval der oberen Elevationen bzw. Tangentenhöhen durchgeführt werden. Als brauchbar zeigten sich  $+2^\circ$ -Messungen bei einer Flughöhe um 30 km und  $-0.7^\circ$  (oberste Tangentenhöhe) bei 40 km Flughöhe. Bei zu kleinem S/N kann auf eine tiefere Tangentenhöhe ausgewichen werden. Die oberen sind jedoch zu bevorzugen, da die Information über die ILS mit zunehmender Druckverbreiterung geringer wird.

Aus den im ersten Retrieval gewonnenen Profilen lassen sich dann die zugehörigen, eingestrahnten Spektren mit KOPRA berechnen, die in Abschnitt 7.2.4 mit  $S_{inf}$  bezeichnet sind. Da diese nicht mit der ILS gefaltet wurden, weisen die Linien nur die gut berechenbare Dopplerverbreiterung auf. Die nachfolgende Entfaltung der gemessenen Spektren liefert also direkt die Modulationsfunktion und das Apparateprofil an der betrachteten Wellenzahl.

Wie in Kapitel 8 gezeigt, funktioniert die Entfaltung der ILS nicht für alle Wellenzahlen gleich zufriedenstellend. Es gibt Bereiche, in denen nur wenige Linien aus dem Rauschen herausragen, die dann entsprechend wenig verlässliche Information über die ILS liefern. Man kann geeignete Fenster in den Spektren suchen und die Entfaltungsprozedur dort durchführen. Einfacher ist es jedoch, die ILS in einem ganzen Kanal zu berechnen und dann mit einem geeigneten Kriterium zu entscheiden, welche der Ergebnisse glaubhaft sind und welche verworfen werden. Als Kriterium hat sich die Schwankung der Modulationsfunktion (Standardabweichung des Residuums bezüglich einer Polynomannäherung) als brauchbar herausgestellt. Ein Kanal wird also mit einem gleitenden Wellenzahlfenster der Entfaltung unterzogen, und die





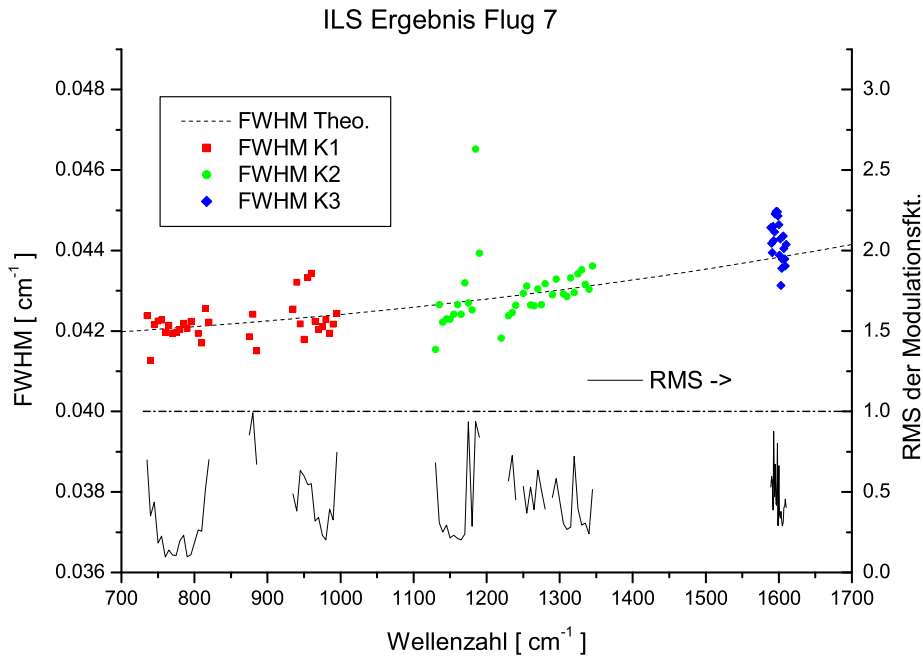
**Abb. 9.1:** ILS-FWHM Einzelergebnisse der Entfaltung von Spektren aus Flug 6.

Die Punkte mit der linken Skala zeigen die Halbwertsbreite der ILS für die einzelnen Wellenzahlfenster durch alle Kanäle. Der theoretische Verlauf ist gestrichelt eingezeichnet. In schwarz ist die Standardabweichung des Residuums der Modulationsfkt. bezügl. eines Polynomfits (rechte Skala) aufgetragen. Große Werte bedeuten fehlerhafte Entfaltung, Ergebnisse oberhalb der eingezeichneten Schranken wurden verworfen.

Charakteristiken der Apparatfunktion werden gegen die Wellenzahl aufgetragen.

## 9.2 Einzelergebnisse der Entfaltung ausgewählter Flüge

Ein Beispiel für einen Flug in mittleren Breiten ist Flug 6, der in der Nacht zum 8.5.1998 in Südfrankreich in Aire sur l'Adour durchgeführt wurde. Abbildung 9.1 zeigt die Ergebnisse der Halbwertsbreiten von Flug 6 für alle vier Kanäle. Bei großen RMS-Werten (schwarze Kurve mit rechter Skala) ist das Ergebnis unsicher. Für die Kanäle 1 – 3 wurden Ergebnisse oberhalb des RMS-Wertes von 0.5 und in Kanal 4 oberhalb von 0.8 verworfen. Die Punkte (Skala auf der linken Seite) zeigen

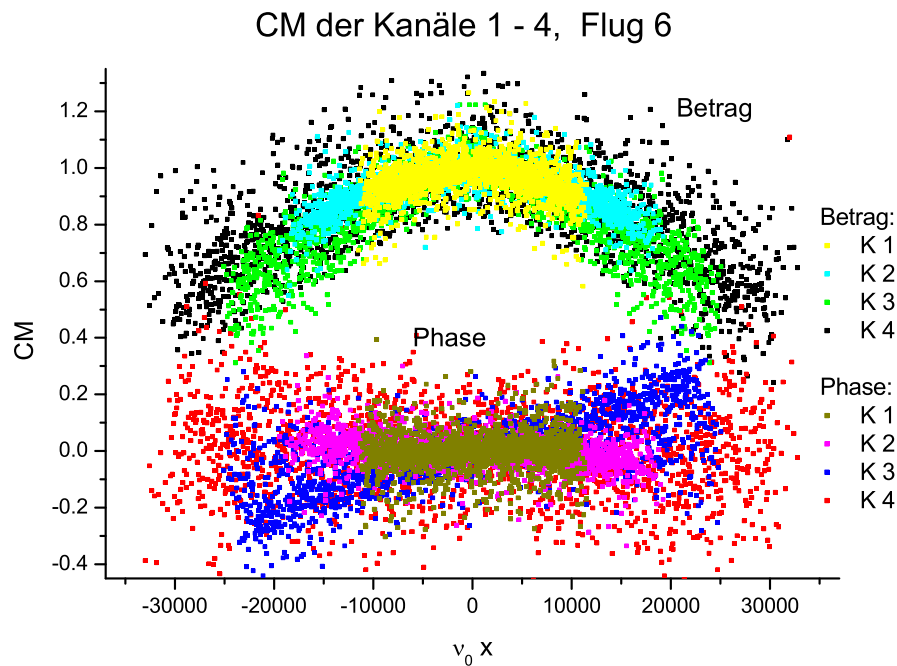


**Abb. 9.2:** ILS-FWHM Einzelergebnisse der Entfaltung von Spektren aus Flug 7.

In den Kanälen 1 bis 3 gab es Wellenzahlfenster, in denen eine Entfaltung möglich war. Die rechte Skala ist wiederum die Standardabw. des Residuums der Modulationsfkt. bezügl. eines Polynomfits. Bei Werten, die den Betrag eins überschritten, wurden diese und die zugehörigen Ergebnisse der FWHM ausgeblendet. Kanal 4 lieferte keine brauchbaren Ergebnisse.

die Einzelergebnisse der FWHM der unapodisierten ILS. Die gestrichelt eingezeichnete Kurve stellt den theoretischen Verlauf der ILS eines homogen ausgeleuchteten Interferometers dar. Die starken Abweichungen der Ergebnisse vom theoretischen Verlauf sind ein Effekt der ILS-Bestimmung mit der Entfaltung, wie ein Blick auf die RMS-Werte der Modulationsfunktion zeigt, und entsprechen nicht den wahren Halbwertsbreiten. Der Bereich von 1400 bis 1800  $\text{cm}^{-1}$  enthält  $\text{H}_2\text{O}$ -Linien großer Intensität, deren Form durch Wasser im Gerät verändert wurden. Nur der Bereich um 1600  $\text{cm}^{-1}$  ist für die Entfaltung brauchbar. Im Kanal 4 konnte trotz des großen Rauschens im Bereich um 1900 und 2100  $\text{cm}^{-1}$  eine vernünftige ILS bestimmt werden.

Der darauffolgende Flug 7 ist ein extremes Beispiel für polare Breiten, er wurde in der Nacht zum 27.1.1999 in Kiruna, Nordschweden durchgeführt. Auf Flugniveau von 32 km betrug die Temperatur ca. 200 K und nach oben wurde es noch kälter.



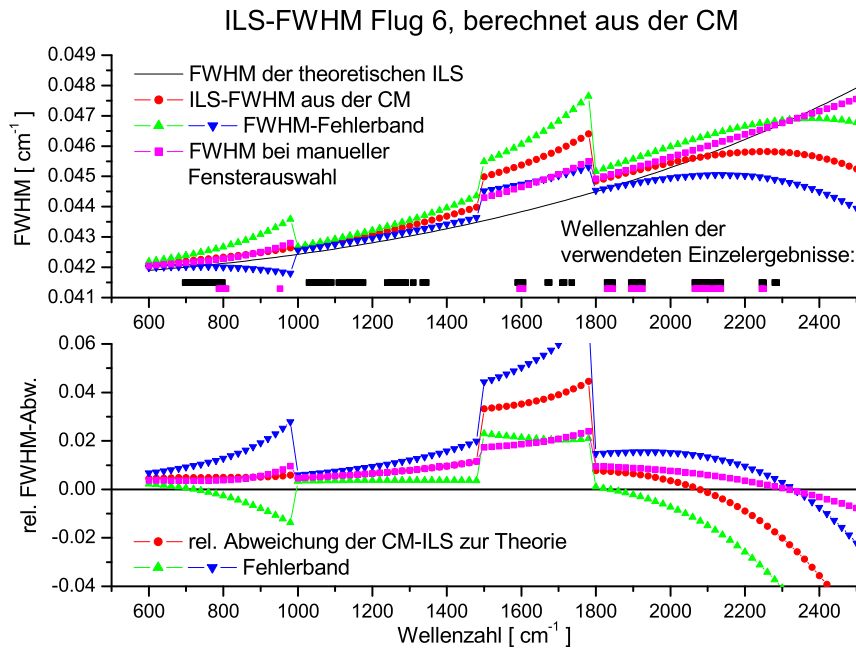
**Abb. 9.3:** CM aller Kanäle für Flug 6.

Punkte aller Einzelergebnisse, die in die Berechnung der CM eingegangen sind. Die verschiedenen Farben geben von innen nach außen überlappend die einzelnen Kanäle wieder. Der Betrag der CM von Kanal 3 (grün) sinkt nach außen hin im Vergleich zu den anderen Kanälen deutlich schneller ab.

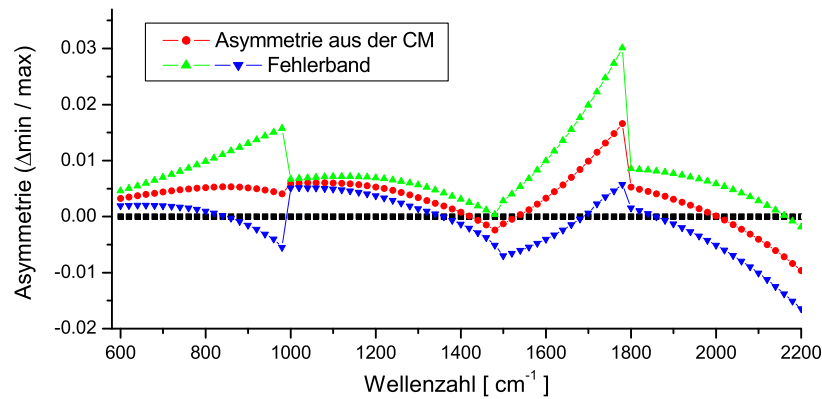
Abbildung 9.2 zeigt die Halbwertsbreiten der auswertbaren Wellenzahlen. Ergebnisse mit RMS-Werten größer als eins (rechte Skala) wurden verworfen, da diese in keinem Falle zu einer sinnvollen ILS führen. Eine gute obere Grenze stellt der Wert 0.5 dar (vgl. Abbildung 8.7 auf Seite 83). Bei Kanal 3 ergab wie bei Flug 6 nur der Bereich um  $1600 \text{ cm}^{-1}$  ( $\text{NO}_2$  mit relativ wenig  $\text{H}_2\text{O}$ ) brauchbare Ergebnisse. In Kanal 4 waren keine Signaturen vorhanden, deren Intensitäten für eine plausible Entfaltung stark genug waren.

### 9.3 Die Charakteristische Modulationsfunktion von MIPAS-B2

Mit der Voraussetzung, daß die Änderung der ILS mit der Wellenzahl den in Kapitel 3 geschilderten Gesetzen folgt, kann aus den vertrauenswürdigen Einzelergebnissen der MOD eine CM berechnet werden. Von Flug 6 ist diese in Abbildung 9.3 für die



**Abb. 9.4:** ILS-FWHM von Flug 6, aus der CM berechnet. Verlauf und relative Abweichung der aus der CM berechneten FWHM zur theoretischen eines Instruments homogener Ausleuchtung und gleicher Auflösung.



**Abb. 9.5:** ILS-Asymmetrie von Flug 6, aus der CM berechnet. Kanal 1 und 2 zeigen eine ca. 0.5 %ige Asymmetrie (Unterschied der beiden ersten Minima rechts und links des Zentrums relativ zum Maximum der ILS). Für das Spurengas-Retrieval sind diese Ausmaße nicht relevant.

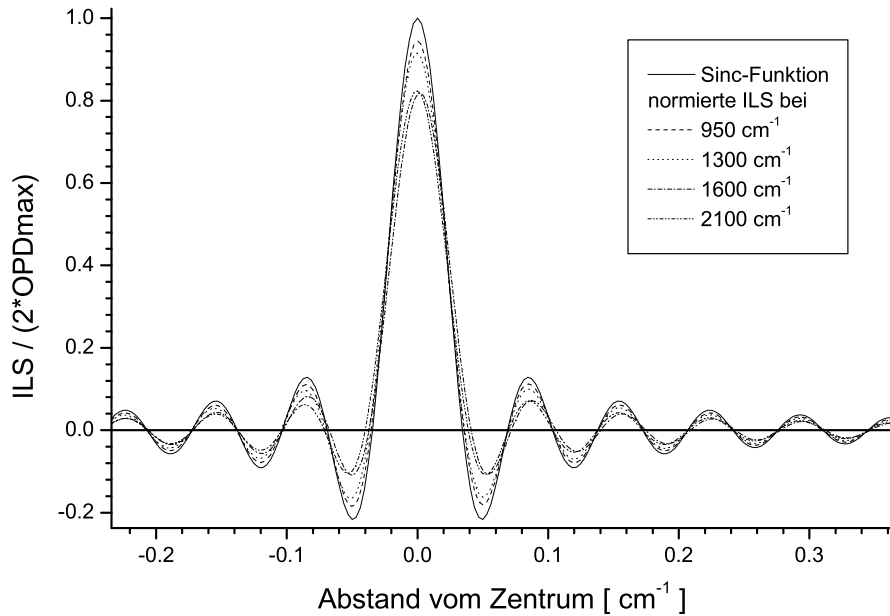
vier Kanäle dargestellt. Abgesehen von Kanal 3 wird der Verlauf des Betrags der CM nach außen gut durch die Kanäle mit den höheren Wellenzahlen fortgeführt. Kanal 3 ist etwas stärker gedämpft und weist eine abweichende Phase auf. Letzteres ist normal, wenn wie bei den vorliegenden Spektren die Abszisse umskaliert wurde. Die Bedeutung des schnelleren Abfalls der CM und damit der Modulation in Kanal 3 wird deutlich bei der Halbwertsbreite. Diese ist in Abbildung 9.4 dargestellt. Während Kanal 1 und 2 nur ca. 0.5 % vom theoretischen Verlauf bei homogener Ausleuchtung des Gesichtsfeldes abweichen, tritt in Kanal 3 eine ca. 4 %ige Abweichung auf, die weit außerhalb des Fehlerbalkens liegt. Die Größe der Abweichung kann weder durch das Rauschen noch durch ein fehlerhaftes H<sub>2</sub>O-Profil erklärt werden (vgl. Abbildungen 8.14 u. 8.18 auf den Seiten 93 u. 98). Sie ist eine Folge von Wasser, welches bei feuchten Bodenbedingungen vor dem Flug ins Instrument eindringt. Aufgrund der Emissions- und Absorptionseigenschaften des Wasserdampfes im Gerät führt die Zweipunkt-Kalibrierung in Spektralbereichen, in denen H<sub>2</sub>O-Linien bei den Schwarzkörpermessungen auftreten, zu Kalibrierungsfehlern (s. auch Trieschmann [42]). Insbesondere wird die Form der Linien in diesem Fall verändert.

Bei der Auftragung aller Punkte wie in Abbildung 9.3 bietet die CM die Möglichkeit, Unstimmigkeiten in einem Spektrum aufzudecken. Teilt sich die Punktwolke eines Kanals z.B. in zwei Verläufe, so sind im Spektrum zwei verschiedene Apparatfunktionen vorhanden.

Die systematische Abweichung der Halbwertsbreite von ca. 0.5 % zu größeren Werten in den Kanälen 1 und 2 kann leicht durch eine Dejustierung (z.B. Unschärfe) der Optik verursacht werden. Bei einem Versatz der optischen Achse (gestrichelte Linie in Abbildung 3.2 auf Seite 16) wird beispielsweise ein Teil der Haidinger-Ringe ausgeblendet, dafür kommen andere, außenliegende „Monde“ hinzu. Eine Verbreiterung mit weichem Abfallen der Gesichtsfeldgewichtung, und damit eine Verzerrung der Apparatfunktion ist die Folge. Diese wird ebenfalls verbreitert und asymmetrisch, wie Abbildung 9.5 zeigt. Als Asymmetrie wurde hier eine anschauliche Größe definiert: Die Differenz der ersten Minima neben dem Zentrum bezogen auf das Maximum. Die Stärke der Asymmetrie von 0.5 % des Maximums ist jedoch ohne Bedeutung und in der ILS selbst, wie in Abbildung 9.6 zu sehen ist, kaum wahrnehmbar. Auf das Retrieval hat solch eine kleine Verzerrung ebenfalls keinen Einfluß, wie in Kapitel 5 untersucht wurde. Man muß beachten, daß für das Retrieval nur apodisierte Spektren Verwendung finden. Durch die gedämpften Seitenflügel wird hier auch die Asymmetrie unterdrückt. In Kanal 4 treten ebenfalls Abweichungen auf, allerdings nur um bis zu 1 %, wenn man vom Bereich oberhalb von 2150 cm<sup>-1</sup> absieht, der kaum brauchbare Strukturen enthält. Wird zur Berechnung von vornherein nur der Bereich bis 2250 cm<sup>-1</sup> verwendet, so ergibt sich das magentafarbene Ergebnis in Abbildung 9.4.

Aufgrund des Problems mit Wasserdampf im Gerät sollten die Ergebnisse von Kanal 3 nicht als die korrekte ILS des Instruments dieser Wellenzahlen angesehen

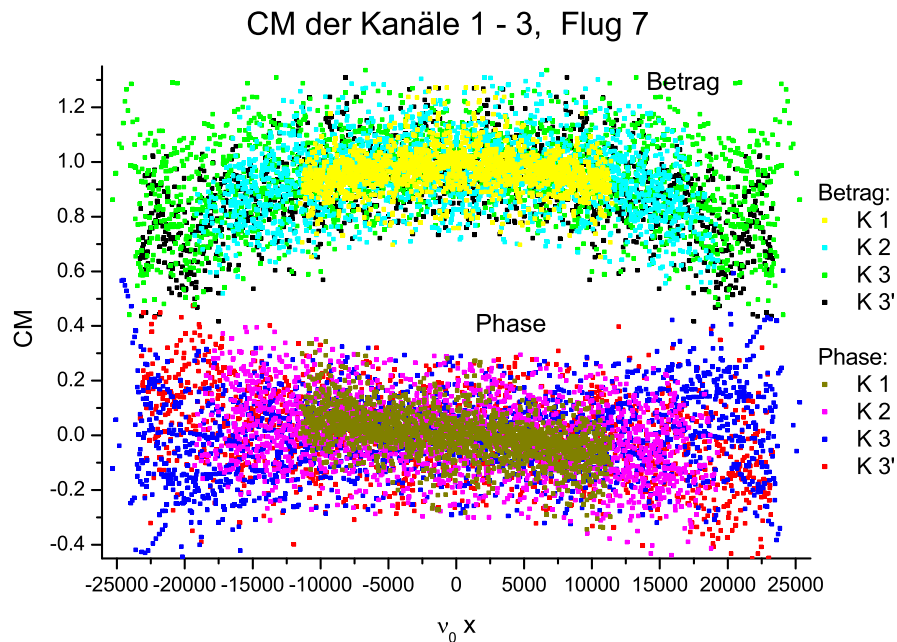
## ILS Flug 6, berechnet aus der CM



**Abb. 9.6:** ILS Flug 6 für ausgewählte Wellenzahlen, aus der CM berechnet. Die vorhandene Asymmetrie ist zu klein, um sie hier zu erkennen. Kanal 3 hat aufgrund der verzerrten  $\text{H}_2\text{O}$ -Linien scheinbar eine ILS, wie sie erst in Kanal 4 auftreten sollte.

werden. Um  $1600\text{ cm}^{-1}$  dominieren die  $\text{H}_2\text{O}$ -Linien nicht so stark wie sonst in diesem Kanal. Dort kommen auch die Linien von  $\text{NO}_2$  zur Geltung, so daß in diesem Bereich das Ergebnis für die ILS plausibler erscheint, wie auch an der FWHM in Abbildung 9.1 andeutungsweise zu sehen ist. In Abbildung 9.4 ist dieses Ergebnis magentafarben dargestellt. Die etwa gleich großen Fehlerbalken (wegen Übersichtlichkeit nicht eingezeichnet) deuten auch in Kanal 3 auf eine leicht vergrößerte Halbwertsbreite im Vergleich zum theoretischen Verlauf hin.

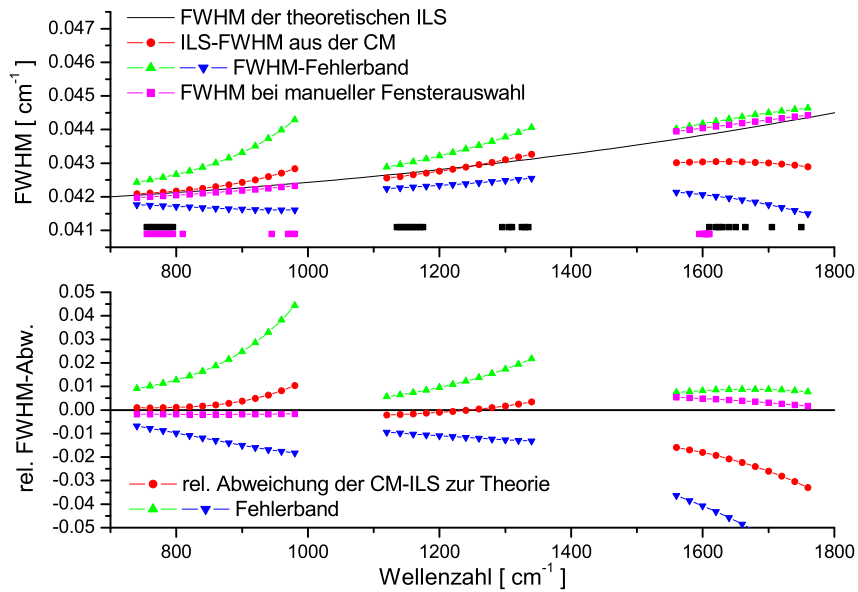
Bei Flug 7 war es nicht möglich, in Kanal 4 mit der Entfaltung eine glaubwürdige ILS zu bekommen. Die Charakteristischen Modulationsfunktionen der anderen Kanäle sind in Abbildung 9.7 zu sehen. Die von null verschiedenen Steigungen der Phasen stellen eine Verschiebung der Wellenzahlskala dar. Dies kann durch einen etwas schräg einfallenden Laser des Längenmeßsystems verursacht werden. Eine Korrektur der Spektren ist für das Retrieval nicht notwendig, da dort eine Verschiebung des Microwindows als variabler Parameter eingeht und das Programm den optimalen Wert selbst berechnet und zurückliefert.



**Abb. 9.7:** CM der Kanäle 1 – 3, Flug 7.

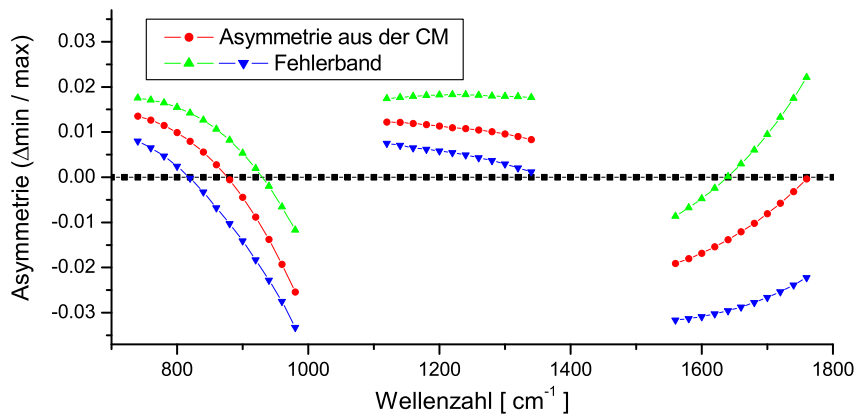
Punkte aller Einzelergebnisse, die in die Berechnung der CM eingegangen sind. Die schwarzen Punkte (rot bei der Phase) gehören wie grün (bzw. blau) zum Kanal 3, wobei nur einige Fenster um  $1600 \text{ cm}^{-1}$  Verwendung fanden, da dieser Bereich weniger von  $\text{H}_2\text{O}$  beeinflusst wird. Die Steigung der Phasen deutet auf eine Verschiebung der Wellenzahlskala hin.

Die sich nach der Berechnung der CM ergebenden Abweichungen der ILS-Halbwertsbreiten vom theoretischen Verlauf sind in Abbildung 9.8 gezeigt. Die Bereiche zwischen den Kanälen wurden ausgeblendet, da diese bei Flug 7 für eine Extrapolation zu groß sind. In magenta sind für Kanal 1 und 3 die Ergebnisse für eine Polynomannpassung 4. Ordnung und eine veränderte Auswahl der Wellenzahlfenster dargestellt. In Kanal 1 werden dadurch die Linien von  $\text{CO}_2$  bei ca.  $950 \text{ cm}^{-1}$  eingeschlossen, und in Kanal 3 nur der Bereich des  $\text{NO}_2$  um  $1600 \text{ cm}^{-1}$  verwendet. Die Ergebnisse der Halbwertsbreite sehen dadurch plausibler aus und der theoretische Verlauf eines Interferometers gleicher Hubs und homogener Ausleuchtung ist dann im Fehlerband (nicht eingezeichnet) enthalten. Man muß annehmen, daß sich die reale ILS des Instruments in diesem Schwankungsbereich befindet, auch wenn die abgeschätzten Standardfehler etwas kleiner sind. Die vorhandenen Schwankungen der Asymmetrie bis 3% des Maximums sind in der ILS zwar sichtbar (Abbildung 9.10), aber für das Retrieval kaum von Bedeutung (siehe Kapitel 5).



**Abb. 9.8:** ILS-FWHM Flug 7, aus der CM berechnet.

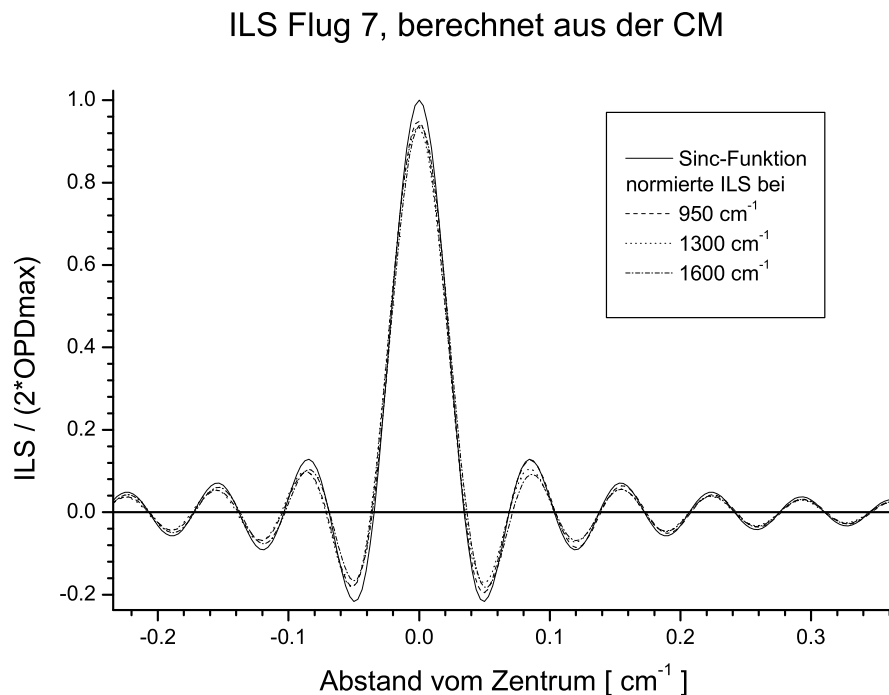
Absoluter Verlauf der FWHM und relative Abweichung der aus der CM berechneten FWHM zur theoretischen. In magenta die Ergebnisse mit Anpassung 4. Ordnung statt 6. und veränderter Toleranz.



**Abb. 9.9:** ILS-Asymmetrie Flug 7, aus der CM berechnet.

Die Ergebnisse oberhalb von  $800 \text{ cm}^{-1}$  in Kanal 1 sind aufgrund der weiten Extrapolation sehr unsicher. Die Größenordnung dieser Asymmetrie ist jedoch für das Spurengas-Retrieval nicht von Bedeutung.





**Abb. 9.10:** ILS von Flug 7 für ausgewählte Wellenzahlen, aus der CM berechnet.

Die vorhandene Asymmetrie ist deutlich in den Seitenschwingern zu erkennen. In Kanal 4 konnte aufgrund des geringen Signal/Rauschverhältnis keine ILS bestimmt werden.

## 9.4 LINEFIT-Ergebnisse

Wie in Abschnitt 6.1 beschrieben, hat F. Hase für hochauflösende, bodengebundene FTS des NDSC (Network for the Detection of Stratospheric Change, siehe Kurylo [23], Kurylo und Zander [24]), wie sie am IMK betrieben werden, ein Verfahren entwickelt, mit Hilfe von Küvetten die ILS aus Absorptionsspektren zu bestimmen (Hase et al., [15]). Dabei berechnet das Programm LINEFIT gleichzeitig die ILS, die Verschiebung, die Menge des auf dem Sehstrahl durchlaufenen Gases und Baselineparameter.

Um aus den Emissionsspektren von MIPAS-B2 eine ILS zu bestimmen, wurde eine modifizierte Version des Programms verwendet, die es erlaubt Emissionsspektren zu behandeln. Für MIPAS-B2 entspricht dann der gesamte Weg des Sehstrahls der Küvette, wobei der Hauptanteil, wie in Abschnitt 2.4 beschrieben, von der untersten Schicht herrührt.

Als aussichtsreich erschienen die CO<sub>2</sub>-Linien im Kanal 1 der obersten Tangentenhöhe, da diese nicht gesättigt und frei von einer Basislinie sind. Für ein günstiges Signal/Rauschverhältnis wurde ein neuerer Flug bei mittleren Breiten ausgewählt (Flug 11).

Zuerst wurde durch mehrere Läufe mit linearem Modulationsverlust und konstanter Phase die Temperatur des Gases bestimmt. Danach wurde mit einem Lauf im Wellenzahlfenster von 945 – 955 cm<sup>-1</sup> (6 große Linien) gleichzeitig die ILS und die Gasmenge gefittet.

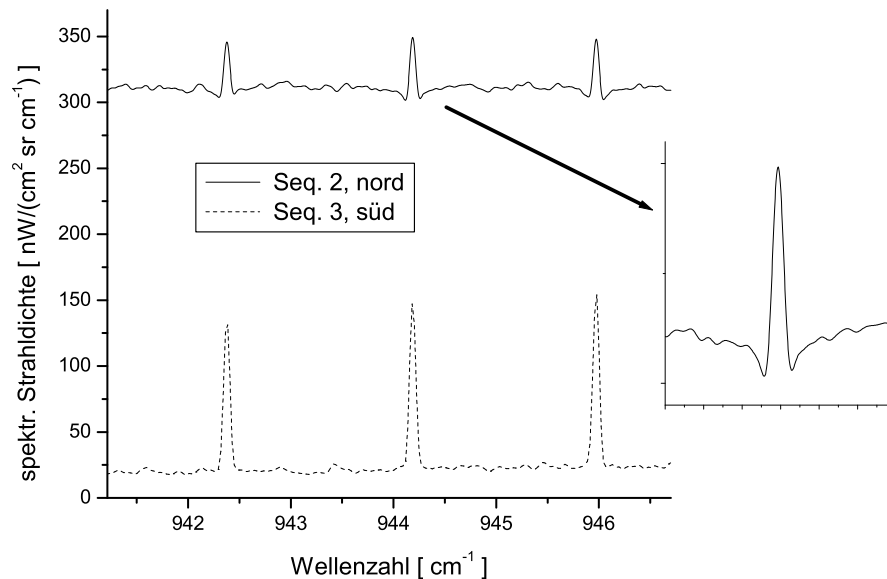
Das Ergebnis ist eine maximale Abweichung der Modulation vom theoretischen Verlauf von 0.02 im Betrag und 0.02 rad in der Phase. Für die FWHM ergibt sich eine verschwindend geringe Abweichung von 0.05 %. Diese Ergebnisse stimmen mit denen der Entfaltung im Rahmen der Unsicherheiten sehr gut überein.

## 9.5 Weitere MIPAS-B2-Meßflüge

Neben den bisher betrachteten Flügen wurden auch die Flüge Nr. 4, 9 und 13 untersucht, wobei der im letzten Abschnitt behandelte Flug 11 wie Flug 6 in Aire sur l'Adour also in mittleren Breiten stattfand. Am zuverlässigsten sind dabei durchweg die Ergebnisse in Kanal 2. Die dort auftretenden dichten Liniensignaturen von Ozon und Methan sind für die Entfaltung offenbar besonders gut geeignet. Eine Aufstellung der Polynomfitkoeffizienten der CM findet sich in Anhang E.

Im besonderen ist dabei Flug 9 zu erwähnen, der in polaren Breiten in Kiruna am 11.1. im Winter 2001 im Rahmen des POSTA-Projekts (Polare Stratosphärische Aerosole) stattfand. Der Flug und alle Messungen wurden vollständig im polaren Wirbel durchgeführt. Die Sequenzen nach Norden und Süden lieferten völlig unterschiedliche Ergebnisse. Abbildung 9.11 zeigt die Spektren einiger CO<sub>2</sub>-Linien aus Kanal 1 mit der Tangentenhöhe von 21.8 km. Die Spektren nach Süden haben ein normales Erscheinungsbild, während die nach Norden einen ungewöhnlich großen Untergrund und veränderte Linien aufweisen. Die Linien besitzen nach unten zeigende Überschwinger, obwohl die zugehörigen Interferogramme apodisiert wurden. Die naheliegende erste Vermutung war eine verzerrte ILS, vielleicht aufgrund einer mechanischen Dejustierung durch die zwischen den Sequenzen notwendigen Azimutdrehungen der Gondel.

Die Entfaltung der +2°-Spektren dieser anfangs rätselhaften Nordsequenz ergab jedoch eine völlig korrekte ILS, die im Rahmen der Fehler weder zu breit noch asymmetrisch ist, nach der Apodisierung also keine Überschwinger enthalten dürfte. Die Suche nach einer anderen Erklärung führte zur Theorie, daß die vorhandenen PSCs die von der Erde kommende IR-Strahlung in den Sehstrahl des Instruments streuen. Unterhalb der Tangentenhöhe liegendes CO<sub>2</sub> erzeugt wegen des höheren Drucks breite Absorptionslinien, die im Spektrum als „Füßchen“ zu sehen sind. Darauf auf-



**Abb. 9.11:** Spektrenausschnitte von Kanal 1, Flug 9.

Nach Süden wurden Spektren ohne Untergrund mit normalen  $\text{CO}_2$ -Linien beobachtet. Die Nordsequenz enthält aufgrund von PSC-Einstreuung Spektren mit starkem Untergrund und überschwingende „Linienfüße“. Die mittlere Linie ist rechts vergrößert dargestellt.

gesetzt erscheinen die schmalen Emissionslinien des  $\text{CO}_2$  aus dem Sehstrahl.

Die Verwendung des in KOPRA implementierten, auf der Mie-Theorie basierenden Programm-Moduls bestätigte dies nicht nur, sondern ermöglichte es auch, die Radien, Anzahldichten und Zusammensetzung der PSCs abzuschätzen. Schließlich wurden die Ergebnisse 2002 von Höpfner et al. [18] veröffentlicht.

Im Abschnitt 8.3.2 wurde getestet, wie groß der Einfluß unkorrekter VMR-Profile auf die Entfaltung ist. Da die Ergebnisse zeigten, daß nur eine geringe Auswirkung auf die ILS besteht, liegt es nahe, anstatt abgeleiteter Profile für die Vorwärtsrechnung A-priori-Profile zu verwenden. Weichen diese zu stark von den realen VMR-Profilen ab, so werden große Schwankungen in der entfalteten Modulationsfunktion erzeugt. Dadurch werden die betroffenen Entfaltungsfenster erkannt und bei der nachfolgenden Berechnung der CM nicht berücksichtigt. Dies hat den Vorteil, daß auf das Vorab-Retrieval der Profile verzichtet werden kann.

Bei Flug 13 wurde nur die abgeleitete Temperatur verwendet. Für die VMR-Profile wurden einmal A-priori-Daten und einmal abgeleitete Profile verwendet. Die Ergebnisse unterscheiden sich kaum: bei Verwendung der A-priori-Daten wurden jedoch einige Bereiche bei der Berechnung der CM vom Algorithmus entfernt, da

diese zu große Schwankungen enthielten. Dies sind genau jene Wellenzahlfenster, bei denen die A-priori-Profile der enthaltenen Linien zu ungenau sind. Solange jedoch genügend andere Bereiche vernünftige Ergebnisse liefern, ist dies unkritisch.

Eine signifikante Abweichung vom theoretischen Verlauf der FWHM ergab sich nur in Kanal 2 und 3. Wie schon zuvor beobachtet, machen sich in Kanal 3 die H<sub>2</sub>O-Linien ungünstig bemerkbar. Bei den NO<sub>2</sub>-Linien um 1600 cm<sup>-1</sup> ergibt sich trotzdem eine um ca. 1 % zu breite ILS. Im Kanal 2 ist die FWHM ansteigend um 0.5–1 % zu breit.

Die Verwendung der aus der Entfaltung erhaltenen ILS beim N<sub>2</sub>O-Retrieval ergab schließlich wie bei anderen Spurengasen und Meßflügen eine bessere Anpassung an die gemessenen MIPAS-B2-Spektren.

## Kapitel 10

# Schlußbemerkungen und Ausblick

Die Apparatefunktion wurde bei MIPAS-B2 vor dieser Arbeit aus instrumentellen Parametern berechnet. Es bestand ein großes Interesse die Qualität des Instruments während des Fluges genau zu charakterisieren. Da die Apparatefunktion (ILS) stark von der Justierung des Instruments abhängt, können Messungen im Labor nur bedingt für einen Meßflug verwendet werden. Durch Temperaturänderungen während des Aufstiegs können Verformungen der MIPAS-B-Struktur auftreten, die den optischen Aufbau und damit die ILS verändern.

Da die Apparatefunktion der gemessenen Spektren in die Spurengas-Retrievals eingeht, ist bei falsch angenommener ILS ein Einfluß auf die Spurengaskonzentrationen zu erwarten. Zur Abschätzung der Abhängigkeit von der ILS wurden Testretrievals mit künstlich erzeugten Spektren und verzerrter ILS durchgeführt. Das Verhalten der Retrieval-Ergebnisse bezüglich Temperatur und Spurengaskonzentrationen von  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{N}_2\text{O}$  und  $\text{NO}_2$  wurde bei Änderung der Breite und der Symmetrie der ILS untersucht. Die Einflüsse eines mit verzerrter ILS abgeleiteten Temperaturprofils auf die genannten Spurengase wurde ebenso überprüft. Die ILS wurde dabei nicht direkt, sondern über die Charakteristische Modulationsfunktion parametrisiert. Der Betrag dieser Funktion ändert die Breite und Höhe der ILS. Bei Veränderung der Phase wird hauptsächlich eine Asymmetrie erzeugt.

Eine asymmetrische ILS hat nur einen geringen Einfluß auf die Spurengasprofile. Eine veränderte Halbwertsbreite hingegen zeigt einen höhenabhängigen, deutlichen Einfluß. Mit zunehmender Breite der ILS in den Meßspektren, also geringerer Modulation zum Rand des optischen Hubs, verringerten sich die Temperaturen ebenso wie die VMR-Werte der getesteten Spurengase. Außerdem entstehen beim Retrieval teilweise Oszillationen in den Profilen, die durch eine Erhöhung des Regularisierungsparameters unterdrückt werden müssen. Damit vermindert man jedoch die Höhenauflösung der abgeleiteten Profile. Um die Änderung der Temperatur unter 0.5 K und die der VMR-Werte unter 1 % zu halten, muß die Modulationsfunktion

am Rand auf ca.  $\pm 10\%$  des Maximums genau bestimmt werden.

Verwendet man für das VMR-Retrieval ein Temperaturprofil, welches zuvor aus Spektren mit einer verzerrten ILS bestimmt wurde, so tritt z.T. eine Kompensation des Fehlers in den VMR-Profilen auf. Bei  $\text{NO}_2$  entsteht allerdings eine Überkompensation, so daß die VMR-Abweichung im Maximum  $1.5\%$  beträgt.

In den meisten Wellenzahlbereichen im Infraroten liegt eine Vielzahl von Linien dicht beieinander. Da diese in einem kleinen Wellenzahlfenster die gleiche ILS besitzen, wurde eine gleichzeitige Entfaltung der ILS für solche spektrale Fenster entwickelt. Dazu werden mit KOPRA berechnete Spektren verwendet, deren wichtigste VMR-Profile mit einer Standard-ILS abgeleitet wurden. Zur Kompensierung der durch das Ausschneiden des spektralen Fensters entstehenden Randeffekte wurde ein iterativ arbeitendes Verfahren entwickelt, das die gegenseitigen Einflüsse über die Ränder hinweg berücksichtigt.

Die primären Ergebnisse der Entfaltung sind den entsprechenden Wellenzahlfenstern zugeordnete Modulationsfunktionen. Bei MIPAS-B2 war es bei den untersuchten Flügen möglich, diese pro Kanal in eine wellenzahlunabhängige Charakteristische Modulationsfunktion zusammenzufassen.

In dieser Arbeit wurde gezeigt, daß die Entfaltung der ILS meist für alle vier Kanäle zu brauchbaren Ergebnissen führt. Die Verwendung von KOPRA-Vorwärtsrechnungen mit ungefähren VMR-Profilen zeigt weit weniger Einfluß als erwartet. Ein  $10\%$ iger Fehler des VMR-Profils eines einzelnen Spurengases verursachte bei den getesteten Gasen nur eine Abweichung von bis zu  $1\%$  in der Halbwertsbreite der ILS. Diese schwache Kopplung liegt an der Unabhängigkeit der Dopplerbreite von der Spurengaskonzentration. Eine ungesättigte Linie bei geringem Druck wird bei Veränderung der Temperatur oder Konzentration hauptsächlich skaliert. Eine Skalierung wird jedoch durch die veränderte Höhe bei der Modulationsfunktion festgestellt und korrigiert.

Rauschen in den gemessenen Spektren hat auf das Entfaltungsergebnis dann einen Einfluß, wenn das gemittelte Signal/Rauschverhältnis über das Entfaltungsfenster den Wert 2 unterschreitet. Hier kommt die Einführung der Charakteristischen Modulationsfunktion zur Geltung. Ihre Wellenzahlunabhängigkeit ermöglicht eine Mittelung über einen Kanal. Dabei können ungünstige Fenster übergangen werden, und der Fehler wird insgesamt vermindert. Der sich daraus in das Retrieval fortpflanzende Fehler bleibt weit unterhalb des Gesamtfehlers der VMR-Profile.

Bei der Anwendung der Entfaltungsmethode auf die Spektren der Meßflüge von MIPAS-B2 ergab sich eine nahezu perfekte ILS. Die Halbwertsbreite weicht meist weniger als  $1\%$  vom theoretisch möglichen Verlauf ab, und die Asymmetrie bleibt meist unter  $1.5\%$ . Der Justierungszustand des Instruments kann damit als exzellent bezeichnet werden.

Die festgestellte geringe Empfindlichkeit der Entfaltung auf ungenau bekannte VMR-Profile eröffnet die Möglichkeit, für die Berechnung der hochaufgelösten Vorwärtsspektren zur ILS-Bestimmung statt der ersten Retrievals direkt klimatologische Standardprofile zu verwenden. Spektrale Fenster mit Spurengassignaturen, deren angenommenen Konzentrationen stark von der Realität abweichen, werden bei der Entfaltung erkannt und bei der Berechnung der CM aussortiert. Dies konnte erfolgreich bei der Bestimmung der ILS von Flug 13 durchgeführt werden, bei der für die Mischungsverhältnisse A-priori-Profile genutzt wurden und nur für die Temperatur ein abgeleitetes Profil. Dadurch wird das Verfahren operationell anwendbar.

Im Abschnitt 7.2.3 wurde beschrieben, welche numerischen Schwierigkeiten durch die Berücksichtigung einer wellenzahlabhängigen ILS entstehen. Für die vorwärtsgerechneten Spektren müssen hochaufgelöste Stützstellengitter verwendet werden, weil mit einer sich über die Wellenzahl kontinuierlich ändernden ILS in KOPRA nicht gefaltet werden kann.

Eine Vereinfachung könnte dadurch geschaffen werden, daß in den Eingangsdaten zu KOPRA nicht die ILS selbst, sondern die Charakteristische Modulationsfunktion parametrisiert wird. Diese hat den Vorteil, daß sie die ILS eines weiten Spektralbereichs beschreibt. Die Faltung mit der sich ändernden ILS in KOPRA würde Retrievals über breitbandige Spektralbereiche mit der jeweils korrekten ILS ermöglichen.

# Literaturverzeichnis

- [1] Bronstein, I. N., K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/Main, 1987.
- [2] Burkert, P., Kayser-Threde GmbH, *Phase - B - Studie des Michelson Interferometers, 1. Zwischenpräsentation*, Vertrag Nr. 01QS 17 0 - AK/WF/WE 0275 - 4.2, München 1981.
- [3] Clough, S. A., F. X. Kneizys, E. P. Shettle, and G. P. Anderson *Atmospheric radiance and transmittance: FASCOD2*, in Proc. of 6th Conference on Atmospheric Radiation, Am. Meteorol. Soc., Boston, Mass., p. 141, 1986.
- [4] Cooley, J. W. und J.W. Tukey, *An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series*, Mathematics of Computation, Vol. 19, No. 90, pp. 297-301, 1965.
- [5] Davis, S. P., M. C. Abrams, and J. W. Brault, *Fourier transform spectrometry*, Academic Press, London, 2001.
- [6] Farman, J. C., B. G. Gardiner, J. D. Shanklin, *Large Losses of Total Ozone in Antarctica Reveal Seasonal ClO<sub>x</sub>/NO<sub>x</sub> Interaction*, Nature, Vol. 315, pp. 207–210, May 1985.
- [7] Fellgett, P. G., Ph.D. thesis, University of Cambridge, 1951.
- [8] Fenske, G., M. E. Kraenz, *Einfluß von Spiegelverkippen des Michelson Interferometers in der Fourier-Spektroskopie und nachträgliche numerische Korrektur der Spektren*, Optica Acta, Vol. 23, No. 4, S. 265–277, 1976.
- [9] Fischer, H., *Remote Sensing of Atmospheric Trace Constituents using Fourier Transform Spectroscopy*, Berichte der Bunsen-Gesellschaft f. phys. Chemie, Bd. 96, Nr. 3, S. 306–314, 1992.
- [10] Fischer, H., H. Oelhaf, *Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb-emission spectrometers*, Applied Optics, Vol. 35, pp. 2787–2796, 1996.



- [11] Friedl-Vallon, F., A. Kleinert, O. Trieschmann, H. Oelhaf, and G. Wetzel, *Radiometric calibration of MIPAS-B2 spectra*, Proc. 8th Intern. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, Toulouse, 16-18 Nov. 1998, pp. 209-213, 1999.
- [12] Friedl-Vallon, F., G. Maucher, A. Kleinert, A. Lengel, C. Keim, H. Oelhaf, H. Fischer, M. Seefeldner, and O. Trieschmann, *Design and characterization of the balloon-borne Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS-B2)*, Appl. Optics 43, 3335-3355, (2004).
- [13] Funke, Bernd, *Ein Modell für die Zustandsverteilung von NO bei nichtvorhandenem lokalem thermodynamischem Gleichgewicht und dessen Nutzung zur Ableitung atmosphärischer Parameter aus 5.3  $\mu\text{m}$  Emissionsspektren*, Dissertation im Fach Physik, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6413, 2000.
- [14] Hansen, P. C., *Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve*, SIAM Review, 34, pp. 561-580, 1992.
- [15] Hase, F., T. Blumenstock, C. Paton-Walsh, *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, 1999.
- [16] Hase, F., *Inversion von Spurengasprofilen aus hochaufgelösten bodengebundenen FTIR-Messungen in Absorption*, Dissertation, genehmigt von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH), Wissenschaftliche Berichte FZKA 6512, 2000.
- [17] Höpfner, M., Stiller, G.P., Kuntz, M., v. Clarmann, T., Echle, G., Funke, B., Glatthor, N., Hase, F., Kemnitzer, H., and Zorn, S., *The Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm. Part II: Interface to retrieval applications*, SPIE proceedings 3501, pp. 186-195, 1998.
- [18] M. Höpfner, H. Oelhaf, G. Wetzel, F. Friedl-Vallon, A. Kleinert, A. Lengel, G. Maucher, H. Nordmeyer, N. Glatthor, G. Stiller, T.v. Clarmann, H. Fischer, C. Kröger, and T. Deshler, *Evidence of scattering of tropospheric radiation by PSCs in mid-IR limb emission spectra: MIPAS-B observations and KOPRA simulations*, Geophys. Res. Lett., Vol. 29, No. 8, 1278, doi: 10.1029/2001GL014443, 2002.
- [19] Hollas, J.M., *High Resolution Spectroscopy*, Butterworths, London, 1982.
- [20] Jacquinet, P. und C. J. Dufour, *J. Rech. C.N.R.S.*, 6, p. 91, 1948.

- [21] Kimmig, Wolfgang, *Das Abtastverfahren der Interferogramme des flugzeuggetragenen Fourierspektrometers MIPAS-STR*, Dissertation im Fach Physik, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6665, 2001.
- [22] Kleinert, A., *Quantifizierung und Optimierung der radiometrischen Genauigkeit des Fourierspektrometers MIPAS-B2*, Dissertation, genehmigt von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH), Wissenschaftliche Berichte FZKA 6909, 2003.
- [23] Kurylo M. J., *Network for the Detection of Stratospheric Change (NDSC)*., Proceedings SPIE - The International Society for Optical Engineering, 1491:168-74, 1991.
- [24] Kurylo M. J. und Zander R., *The NDSC - Its status after 10 years of operation.*, Proc. XIX Quadrennial Ozone Symposium, Sapporo, Japan, 3-8 July 2000, pp. 167-168, 2000.
- [25] Lachance, R. L., *ENVISAT-1 GROUND SEGMENT, MIPAS In-flight Spectral Calibration and Instrument Line Shape Retrieval*, Program Document No: POTN-BOM-GS-0006, Issue 2, Revision: B, 1995.
- [26] Levenberg, A., *A method for the solution of certain non-linear problems in least squares*, Quart. Appl. Math., 2, pp. 164-168, 1944.
- [27] Marquardt, D. W., *An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters*, J. Soc. Indust. Appl. Math., 11, pp. 431-441, 1963.
- [28] Maucher, G., *Das Sternreferenzsystem von MIPAS-B2: Sichtlinien-Bestimmung für ein ballongetragenes Spektrometer zur Fernerkundung atmosphärischer Spurengase*, Dissertation der Fakultät für Physik, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6227, 1999.
- [29] Michelson, A. A., *Phil. Mag. (5)*, 31, p. 256, 1891.
- [30] Phillips, D., *A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind*, J. Ass. Comput. Math., 9, pp. 84-97, 1962.
- [31] Lord Rayleigh, *Phil. Mag. (5)*, 34, p. 407, 1892.
- [32] Rodgers, C. D., *Retrieval of Atmospheric Temperature and Composition From Remote Measurements of Thermal Radiation*, Reviews of Geophysics and Space Physics, Vol. 14, No. 4, pp. 609-624, Nov. 1976.

- [33] Rothman, L. S. et al., *The HITRAN Molecular Database: Editions of 1991 and 1992*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Vol. 48, pp. 469–507, June 1992.
- [34] Rothman, L. S. et al., *The HITRAN Molecular Spectroscopic Database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 Edition*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Vol. 60, No. 5, pp. 665–710, 1998.
- [35] Rubens, H. und R. W. Wood, *Phil. Mag.*, 21, p. 249, 1911.
- [36] Smulowicz, F., F. L. Madarsz, *Blocked impurity band detectors - An analytic model: Figures of merit*, J. Appl. Physics, 62 (6), pp. 2533–2540, 1987.
- [37] Steck, T., *Bestimmung der Vertikalprofile von Spurengasen aus MIPAS-Messungen unter Hinzunahme von a priori Wissen.*, Dissertation, Universität Karlsruhe und Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) e.V. in Oberpfaffenhofen, 2000.
- [38] Steel, W.H., Aspen Int. Conf. on Fourier Spectrosc., 1970 (G.A. Vanasse, A.T. Stair, and D.J. Baker, eds.), AFCRL-71-0019, p.43, 1971.
- [39] Stiller, G. P. (Editor) with contributions from T. v. Clarmann, A. Dudhia, G. Ehle, B. Funke, N. Glatthor, F. Hase, M. Höpfner, S. Kellmann, H. Kemnitzer, M. Kuntz, A. Linden, M. Linder, G. P. Stiller, S. Zorn, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, 2000.
- [40] Tikhonov, A., *On the solution of incorrectly stated problems and a method of regularisation*, Dokl. Acad. Nauk SSSR, 151, p. 501, 1963.
- [41] Trieschmann, O. and F. Friedl-Vallon, *Parameterization of MIPAS-B2 non-linearity and calibration scheme*, Proc. 8th Intern. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, Toulouse, 16-18 Nov. 1998, pp. 355-358, 1999.
- [42] Trieschmann, O., *Phasenkorrektur und Radiometrie gekühlter Fourierspektrometer: Charakterisierung des Instruments MIPAS-B2*, Dissertation im Fach Physik, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6411, 2000.
- [43] Trieschmann, O., Weddigen, C., *Thermal emission from dielectric beam splitters in Michelson interferometers: a schematic analysis*, Applied Optics, Vol. 39, No. 31, pp. 5834-5842, Nov. 2000.

- [44] von Clarmann, T., *RAT: A computational tool for retrieval of atmospheric trace gas profiles from infrared spectra*, Report KfK 5423, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1994.
- [45] Research Systems, Inc. 4990 Pearl East Circle Boulder, CO 80301  
<http://www.rsinc.com/idl/>

# Anhang A

## Die Fouriertransformation

In Übereinstimmung mit Brault (s. Davis, Abrams, Brault [5]) und anderen Autoren definieren wir in dieser Arbeit die Fouriertransformation und ihre Inverse folgendermaßen:

$$FT[f(x)] = F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi\nu x} dx \quad (\text{A.1})$$

$$FT^+[F(\nu)] = f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu) e^{i2\pi\nu x} d\nu \quad (\text{A.2})$$

Ist  $x$  eine Ortskoordinate, so läßt sich Gleichung A.2 als eine Entwicklung der Funktion  $f(x)$  in ein kontinuierliches Spektrum der Wellenzahlen  $\nu$  auffassen. Die Fouriertransformierte  $F(\nu)$  ergibt genau dieses Spektrum.

Bei beliebigem, aber reellem  $f(x)$  wird die Fouriertransformierte  $F(\nu)$  im allg. komplex ausfallen, allerdings mit der konjugiert komplexen Symmetrie  $F^*(-\nu) = F(\nu)$ . Der Winkel  $\phi(\nu) = \arg(F(\nu))$  heißt Phase und beschreibt dabei die notwendige Verschiebung der Welle dieser Wellenzahl zurück zur Kosinusfunktion.

Für die Sätze der Fouriertransformation definieren wir noch vorab zwei Verknüpfungen:

Das Faltungsprodukt

$$f(x) \otimes g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(y) g(x - y) dy \quad (\text{A.3})$$

und das Kreuzkorrelationsprodukt

$$f(x) * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(y) g(x + y) dy \quad (\text{A.4})$$

Im folgenden sind Großbuchstaben die Fouriertransformierten der Funktionen der zugehörigen Kleinbuchstaben.

Linearität:

$$FT[af(x) + bg(x)] = aF(\nu) + bG(\nu) \quad (\text{A.5})$$

Ähnlichkeit:

$$FT[f(ax)] = \frac{1}{|a|} F\left(\frac{\nu}{a}\right) \quad (\text{A.6})$$

Verschiebung:

$$FT[f(x - x_0)] = e^{-i2\pi\nu x_0} F(\nu) \quad (\text{A.7})$$

Modulation:

$$FT[f(x) \cos(2\pi\nu_0 x)] = \frac{1}{2}F(\nu - \nu_0) + \frac{1}{2}F(\nu + \nu_0) \quad (\text{A.8})$$

Ableitung:

$$FT[f'(x)] = i2\pi\nu F(\nu) \quad (\text{A.9})$$

Produkt:

$$FT[f(x) \cdot g(x)] = F(\nu) \otimes G(\nu) \quad (\text{A.10})$$

Faltung:

$$FT[f(x) \otimes g(x)] = F(\nu) \cdot G(\nu) \quad (\text{A.11})$$

Kreuzkorrelation:

$$FT[f(x) * g(x)] = F^*(\nu) \cdot G(\nu) \quad (\text{A.12})$$

Die Sätze der inversen Fouriertransformation sind mit diesen identisch, abgesehen vom Verschiebungs- und Ableitungssatz:

$$FT^+[F(\nu - \nu_0)] = e^{i2\pi\nu_0 x} f(x) \quad (\text{A.13})$$

$$FT^+[F'(\nu)] = -i2\pi x f(x) \quad (\text{A.14})$$

Folgende Paare von Fouriertransformierten ergeben sich:<sup>1</sup>

$f(x)$	$F(\nu)$
$A$	$A\delta(\nu)$
$A\delta(x - x_0)$	$Ae^{-i2\pi\nu x_0}$
$R_L(x)$	$2L\text{sinc}(2\pi\nu L)$
$A \cos(2\pi\nu_0 x)$	$\frac{A}{2} (\delta(\nu - \nu_0) + \delta(\nu + \nu_0))$
$A \sin(2\pi\nu_0 x)$	$\frac{A}{2i} (\delta(\nu - \nu_0) - \delta(\nu + \nu_0))$
$Ae^{i2\pi\nu_0 x}$	$A\delta(\nu - \nu_0)$

---

<sup>1</sup>Die sinc-Funktion ist in dieser Arbeit definiert als  $\text{sinc}(x) = \frac{\sin x}{x}$

## Anhang B

# Faltung bei eingeschränktem Spektralbereich

Ein Ausschnitt eines gemessenen Spektrums enthält außer den gefalteten Linien innerhalb des Ausschnitts auch Linienflügel, die vom Außenbereich in den Ausschnitt hineinreichen. Umgekehrt verschwinden Anteile im Außenbereich, die von Linien innerhalb des Ausschnitts stammen.

Zur Übersichtlichkeit definieren wir die Operatoren  $\mathcal{R}$  und  $\bar{\mathcal{R}}$  für den Ausschnitt und den Außenbereich mit Hilfe der Rechteckfunktion.

$$\mathcal{R} := R_{\Delta\nu}(\nu - \nu_0) \quad \text{und} \quad \bar{\mathcal{R}} := 1 - R_{\Delta\nu}(\nu - \nu_0) \quad (\text{B.1})$$

Zu klären ist, was mit einem Ausschnitt eines vorwärtsgerechneten Spektrums bei der Faltung passiert und wie es mit dem Ausschnitt des gefalteten Spektrums zusammenhängt. Dazu wird der gefaltete Ausschnitt aufgeteilt:

$$\begin{aligned} (\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) = & \quad (\text{B.2}) \\ & \mathcal{R}\{(\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu)\} + \bar{\mathcal{R}}\{(\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu)\} \end{aligned}$$

Im vorderen Teil der rechten Seite kann nun  $\mathcal{R} S_{inf}(\nu)$  ausgedrückt werden als  $S_{inf}(\nu) - \bar{\mathcal{R}} S_{inf}(\nu)$ :

$$\begin{aligned} (\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) = & \mathcal{R}\{S_{inf}(\nu) \otimes ILS(\nu)\} \quad (\text{B.3}) \\ & - \mathcal{R}\{(\bar{\mathcal{R}} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu)\} + \bar{\mathcal{R}}\{(\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu)\} \end{aligned}$$

Der erste Term der rechten Seite enthält die Faltung des uneingeschränkten, theoretischen Spektrums mit der ILS, dies ist in unserem Fall das gemessene Spektrum  $S(\nu)$ , womit sich der gesuchte Zusammenhang ergibt:

$$\begin{aligned} (\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu) = & \mathcal{R} S(\nu) \quad (\text{B.4}) \\ & - \mathcal{R}\{(\bar{\mathcal{R}} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu)\} + \bar{\mathcal{R}}\{(\mathcal{R} S_{inf}(\nu)) \otimes ILS(\nu)\} \end{aligned}$$

Alle Terme enthalten nun eine Beschränkung auf den Ausschnitt entweder vor oder nach der Faltung mit der Apparatefunktion. Dadurch wird aufgrund der endlichen Ausdehnung der ILS, diese nur um den Bereich des Ausschnitts benötigt. Somit ist es gerechtfertigt die ILS auch für die Korrekturterme als konstant anzunehmen, solange der Ausschnitt selbst klein genug ist.

Eine inverse Fouriertransformation von Gleichung B.4 und Auflösung nach  $FT^+[ILS(\nu)] = MOD(x)$  ergibt Gleichung 7.9 auf Seite 67.



## Anhang C

# Stützstellensynchronisierung

Beim Übergang vom Spektralraum in den Ortsraum mit der diskreten Fouriertransformation ist das neue Stützstellengitter reziprok von der Breite des ursprünglichen Spektralbereichs abhängig. Folglich müssen zwei Spektren, die man im Ortsraum bearbeiten möchte (wie z.B. bei der Entfaltung), im Spektralraum die gleiche Breite haben, auch wenn sie auf unterschiedlichem spektralen Gitter gegeben sind. Besteht eines der Spektren aus sehr vielen Punkten wird man eine Schnelle Fouriertransformation (FFT) nicht umgehen können, und folgendes Problem tritt auf:

Die FFT erfordert eine Anzahl von  $2^N$  ( $N \in \mathbb{N}$ ) Punkten, so daß eine Erweiterung des ursprünglichen Ausschnitts der Spektren notwendig wird. Aufgrund des unterschiedlichen Gitters wird der erweiterte Bereich der beiden Spektren nicht mehr übereinstimmen, und das Stützstellengitter im Ortsraum ist nicht mehr identisch.

Lösung: Eines der Stützstellengitter muß von vornherein so gewählt werden, daß bei der Erweiterung beider Ausschnitte immer noch die gleiche spektrale Breite möglich ist.

Seien die Punktanzahlen der ursprünglichen Spektralbereiche für das feine bzw. grobe Spektrum  $N_f$  und  $N_g$ . Diese Größen werden um  $\Delta N_f$  bzw.  $\Delta N_g$  auf die Punktanzahlen  $2^{e_f}$  und  $2^{e_g}$  erweitert, um die FFT durchführen zu können.

$$N_f + \Delta N_f = 2^{e_f}, \quad e_f \in \mathbb{N} \quad (\text{C.1})$$

$$N_g + \Delta N_g = 2^{e_g}, \quad e_g \in \mathbb{N} \quad (\text{C.2})$$

Vielversprechend scheint der Ansatz, daß die Gitterabstände ein ganzes Vielfaches ( $a \in \mathbb{N}$ ) voneinander sind. Damit gilt dies aber auch für die Punktanzahlen selbst, also  $N_f = aN_g$ . Bei jeder Erweiterung von  $N_g$  um einen Punkt muß  $N_f$  um  $a$  Punkte erweitert werden. Es gilt also auch für die Erweiterungen die Beziehung  $\Delta N_f = a\Delta N_g$ . Setzt man diese Zusammenhänge in Gleichung C.1 ein und vereinfacht mit

Gleichung C.2, so erhält man

$$a(N_f + \Delta N_f) = 2^{e_f} \quad (\text{C.3})$$

$$a = 2^{e_f - e_g} =: 2^n, n \in \mathbb{N} \quad (\text{C.4})$$

D.h. die synchrone Erweiterung zweier Spektren verschiedener Stützstellengitter auf FFT-verträgliche Punktanzahlen ist dann gewährleistet, wenn das Verhältnis der Stützstellenabstände  $a$  selbst genau  $2^n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  beträgt.

## Anhang D

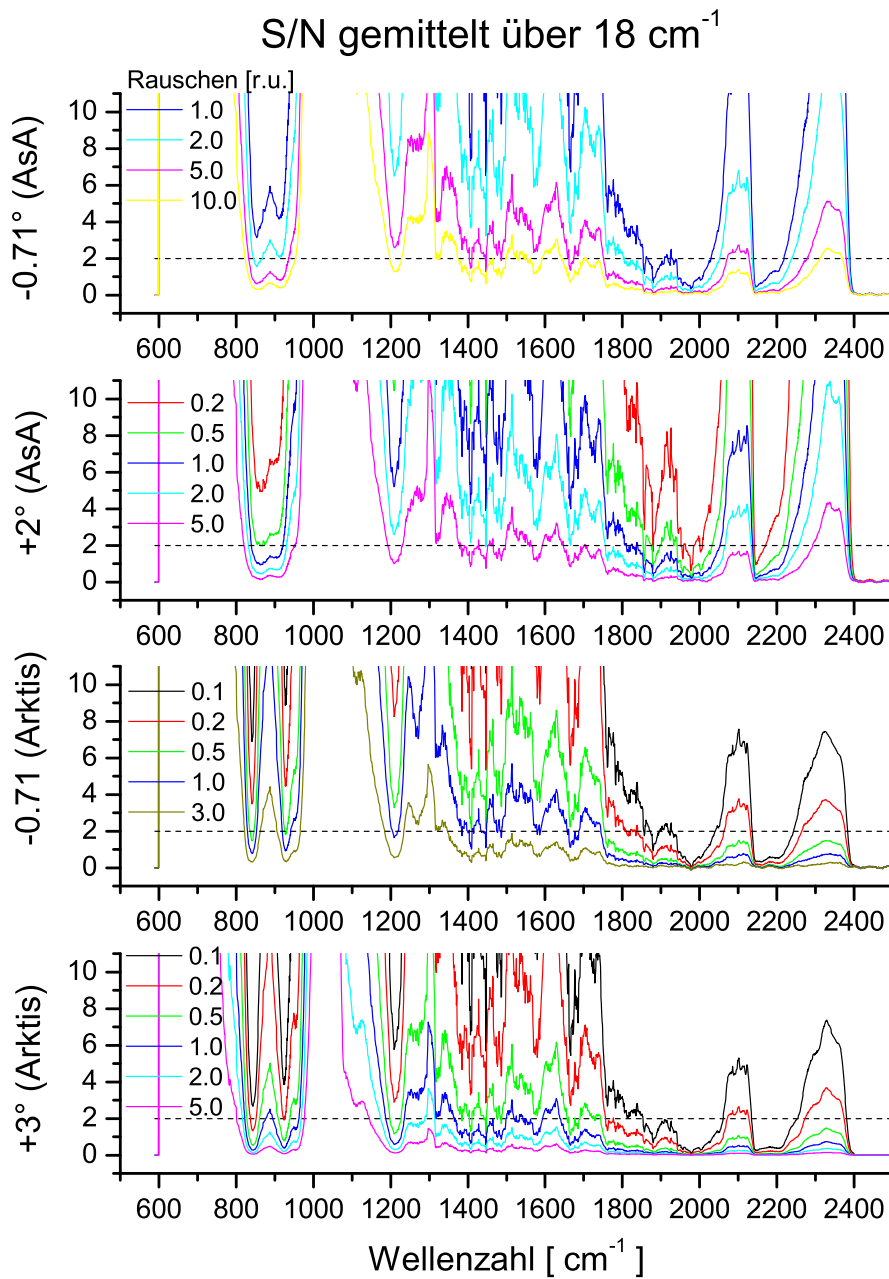
### Gemittelte S/N-Spektren

Zur Abschätzung, ob genügend Linien bzw. Intensität in einem Bereich des Spektrums für die Entfaltung vorhanden sind, kann das über das Entfaltungsfenster gemittelte Signal/Rauschverhältnis dienen. Im folgenden sind vorwärtsgerechnete Spektren der beiden Situationen eines Fluges mittlerer Breite (Aire sur l'Adour, Frühjahr) und eines arktischen (Kiruna, Winter) dargestellt. Eine Kurve bestimmter Farbe entspricht einem Rauschniveau, welches für den ganzen Spektralbereich verwendet wurde. Für eine reale Messung kann damit im Voraus bei bekannter NESR die Anzahl, der aufzunehmenden Interferogramme abgeschätzt werden. Es ist zu beachten, daß unapodisierte Spektren, wie sie bei der Entfaltung verwendet werden, etwa ein um den Faktor 1.6 höheres Rauschen aufweisen. Temperatur- und VMR-Profile stammen aus Flug 6 und 7.

Zur Entfaltung eines Bereichs sollten die Linien nicht zu stark verbreitert sein und sich auch nicht zu weit überlagern, da sich sonst die Information über die ILS verringert. Die Kurve sollte für die entsprechende Stelle den Wert 2 deutlich überschreiten, zur Verdoppelung muß das Rauschen halbiert bzw. müssen 4mal so viele Messungen gemacht werden.

Es ist zu erkennen, daß der Unterschied zwischen Arktis und mittlerer Breite wesentlich größer ist als zwischen den Blickrichtungen. Außerdem existieren aufgrund der Bandenstruktur der Molekülemissionen Fenster mit vielen Linien, in denen die Entfaltung begünstigt wird.

Die aus den Kurven resultierenden Interferogrammzahlen können extrem variieren. Beispielsweise genügte bei Flug 6 (mittlere Breite) um  $2100\text{ cm}^{-1}$  ein Rauschen von 5 r.u. (oberstes Bild, magentafarbene Kurve). Mit dem unapodisierten, tatsächlichen NESR-Wert von 8.0 r.u. eines Einzelspektrums ergibt sich eine Anzahl von mindestens 3 Messungen. Bei Flug 7 (Arktis) wäre an der gleichen Stelle ein maximales Rauschen von 0.2 r.u. erlaubt gewesen (drittes Bild, rote Kurve). Mit dem tatsächlichen Wert von 5.9 r.u. ergibt sich eine Anzahl von 870 Messungen, was den zeitlichen Rahmen mit zweieinhalb Stunden für eine Tangentenhöhe weit übersteigt.



**Abb. D.1:** Gemittelte, vorwärtsgerechnete S/N-Spektren verschiedener Situationen.

Temperatur- und VMR-Profile stammen aus Flug 6 (8.5.1998, Aire sur l'Adour) und 7 (27.1.1999, Kiruna).

## Anhang E

### CM-Polynomfitergebnisse

In den nachfolgenden Tabellen E.1 und E.2 sind die Ergebnisse der Polynom Anpassungen der Charakteristischen Modulation (CM) der untersuchten Flüge aufgeführt. Wie bei den Testrechnungen in Kapitel 5 werden Betrag und Phase getrennt zusammengesetzt:

$$\begin{aligned} |CM(\nu_0 x)| &= c_0 + c_2 (\nu_0 x)^2 + c_4 (\nu_0 x)^4 + \dots \\ \arg(CM(\nu_0 x)) &= c_1 (\nu_0 x) + c_3 (\nu_0 x)^3 + c_5 (\nu_0 x)^5 + \dots \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

In den Tabellen sind die Koeffizienten einer CM jeweils für den Betrag bzw. die Phase untereinander angeordnet. Der lineare Koeffizient der Phase bedeutet eine Verschiebung des Schwerpunkts der ILS. Für die Vorwärtsrechnung mit einer zentrierten ILS, kann er auf null gesetzt werden.

	CM-Koeffizienten des Betrags			
Flug	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4
<b>4</b>	$9.966 * 10^{-1}$ $-4.157 * 10^{-9}$ $2.324 * 10^{-17}$ $-5.962 * 10^{-26}$	$1.0000 * 10^0$ $-2.687 * 10^{-9}$ $2.255 * 10^{-18}$ $9.62 * 10^{-28}$	$9.990 * 10^{-1}$ $-2.058 * 10^{-9}$ $1.350 * 10^{-18}$ $6.78 * 10^{-28}$	–
<b>6</b>	$9.982 * 10^{-1}$ $-1.3905 * 10^{-9}$ $1.0625 * 10^{-17}$ $-4.507 * 10^{-26}$	$9.9981 * 10^{-1}$ $-7.912 * 10^{-10}$ $5.997 * 10^{-19}$ $-8.61 * 10^{-28}$	$1.0024 * 10^0$ $-1.1900 * 10^{-9}$ $1.8122 * 10^{-18}$ $-1.6659 * 10^{-27}$	$1.0022 * 10^{-1}$ $-8.0861 * 10^{-10}$ $4.1843 * 10^{-19}$ $-9.465 * 10^{-29}$
<b>7</b>	$9.990 * 10^{-1}$ $-4.427 * 10^{-10}$ $-5.51 * 10^{-19}$ –	$1.0015 * 10^0$ $-5.300 * 10^{-10}$ $6.174 * 10^{-19}$ $-2.947 * 10^{-27}$	$9.966 * 10^{-1}$ $-7.999 * 10^{-10}$ $4.654 * 10^{-19}$ –	–
<b>9</b>	$9.988 * 10^{-1}$ $-3.091 * 10^{-10}$ $-2.075 * 10^{-18}$ $-2.45 * 10^{-27}$	$1.0001 * 10^0$ $-7.816 * 10^{-10}$ $1.0277 * 10^{-18}$ $-2.660 * 10^{-27}$	–	–
<b>11</b>	$1.0003 * 10^0$ $-6.334 * 10^{-10}$ $-5.185 * 10^{-19}$ $5.721 * 10^{-27}$	$1.0006 * 10^0$ $-7.348 * 10^{-10}$ $4.976 * 10^{-19}$ $-4.00 * 10^{-28}$	$1.0025 * 10^0$ $-7.540 * 10^{-10}$ – –	$1.0011 * 10^0$ $-8.3115 * 10^{-10}$ $4.3932 * 10^{-19}$ $-4.279 * 10^{-29}$
<b>13</b>	$1.0002 * 10^0$ $-7.910 * 10^{-10}$ $1.4080 * 10^{-19}$ $-1.0498 * 10^{-27}$	$1.0005 * 10^0$ $-7.703 * 10^{-10}$ $6.226 * 10^{-19}$ $-9.62 * 10^{-28}$	$9.996 * 10^{-1}$ $-1.0380 * 10^{-9}$ $1.1624 * 10^{-18}$ $-8.787 * 10^{-28}$	$9.963 * 10^{-1}$ $-7.1628 * 10^{-10}$ $2.6946 * 10^{-19}$ $-3.993 * 10^{-29}$

**Tabelle E.1:** CM-Polynomkoeffizienten einiger MIPAS-B2-Meßflüge.

Für einen Kanal sind jeweils die Koeffizienten des CM-Betrags ( $c_0, c_2, c_4$  und  $c_6$ ) untereinander angeordnet. Bei zu unsicheren Ergebnissen mit der Fitordnung 6, wurde ein kleinerer Grad für die Polynome verwendet.

	CM-Koeffizienten der Phase			
Flug	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4
<b>4</b>	$8.0 * 10^{-7}$ $3.2 * 10^{-14}$ $-6.7 * 10^{-23}$	$-4.3 * 10^{-8}$ $1.28 * 10^{-14}$ $1.092 * 10^{-22}$	$-1.15 * 10^{-6}$ $5.36 * 10^{-14}$ $2.18 * 10^{-23}$	–
<b>6</b>	$-1.64 * 10^{-6}$ $1.2 * 10^{-14}$ $-7.4 * 10^{-23}$	$-9.1 * 10^{-8}$ $-2.06 * 10^{-14}$ $4.89 * 10^{-23}$	$1.164 * 10^{-5}$ $-9.5 * 10^{-15}$ $1.58 * 10^{-23}$	$-9.7 * 10^{-7}$ $-3.8 * 10^{-15}$ $4.7 * 10^{-24}$
<b>7</b>	$-4.50 * 10^{-6}$ $-4.8 * 10^{-15}$ –	$-9.6 * 10^{-7}$ $-3.73 * 10^{-14}$ $8.4 * 10^{-23}$	$-9.8 * 10^{-7}$ $-9.9 * 10^{-15}$ –	–
<b>9</b>	$-4.625 * 10^{-5}$ $-7.6 * 10^{-15}$ $2.2 * 10^{-23}$	$-5.312 * 10^{-5}$ $1.3 * 10^{-14}$ $-2.0 * 10^{-23}$	–	–
<b>11</b>	$-4.945 * 10^{-5}$ $1.3 * 10^{-15}$ $-3.4 * 10^{-23}$	$-5.234 * 10^{-5}$ $2.9 * 10^{-15}$ $-3.3 * 10^{-24}$	$1.883 * 10^{-6}$ – –	$-5.227 * 10^{-5}$ $6.2 * 10^{-16}$ $2.4 * 10^{-26}$
<b>13</b>	$1.0002 * 10^0$ $-7.910 * 10^{-10}$ $1.4080 * 10^{-19}$ $-1.0498 * 10^{-27}$	$1.0005 * 10^0$ $-7.703 * 10^{-10}$ $6.226 * 10^{-19}$ $-9.62 * 10^{-28}$	$9.996 * 10^{-1}$ $-1.0380 * 10^{-9}$ $1.1624 * 10^{-18}$ $-8.787 * 10^{-28}$	$9.963 * 10^{-1}$ $-7.1628 * 10^{-10}$ $2.6946 * 10^{-19}$

**Tabelle E.2:** CM-Polynomkoeffizienten der Phase.

Die CM-Phasenkoeffizienten ( $c_1, c_3$  und  $c_5$ ) sind jeweils für einen Kanal untereinander angeordnet. Bei zu unsicheren Ergebnissen mit der Fitordnung 5, wurde ein kleinerer Grad für die Polynome verwendet.

# Symbolverzeichnis

$\otimes$	Faltungsverknüpfungsoperator, Seite 13
$\alpha$	Polwinkel des Raumwinkels $\Omega$ , Seite 15
$\alpha_{max}$	Winkel maximaler Strahlneigung im IFM, Seite 14
$\gamma$	Regularisierungsparameter/-stärke, Seite 33
$\delta$	Diracsche Deltafunktion, Seite 14
$\eta$	Gewichtungsfunktion des Gesichtsfeldes im IFM, Seite 15
$\eta_0$	integrierte Gesichtsfeldgewichtung im IFM, Seite 15
$\bar{\eta}$	über $\varphi$ gemittelte Gesichtsfeldgewichtung, Seite 16
$\vec{\epsilon}$	Fehlervektor, Seite 32
$\lambda$	Wellenlänge, Seite 10
$\nu$	Wellenzahl, Seite 10
$\nu_0$	ausgewählte Wellenzahl, Seite 14
$\nu_r$	normierte Wellenzahl, Seite 24
$\bar{\nu}_{MW}$	mittlere Wellenzahl des Microwindows
$1\sigma, \dots, 3\sigma$	Bereich der 1,...,3fachen Standardabweichung
$\sigma_{\nu,a}$	Absorptionskoeffizient, Seite 31
$\tau_\nu$	Transmission entlang des Sehstrahls, Seite 31
$\phi$	Phase des komplexen Spektrums, Seite 12
$\varphi$	Azimutwinkel des Raumwinkels $\Omega$ , Seite 15



$\Omega$	Raumwinkel, Seite 15
$\omega$	Kreisfrequenz, Seite 10
$B$	Planckfunktion in Strahldichteinheiten, Seite 29
$b$	skalierter Ort, Seite 25
$CM$	Charakteristische Modulationsfunktion, Seite 25
$dI$	Interferogramm monochromatischer Einstrahlung, Seite 19
$E$	elektrische Feldstärke, Seite 10
$E_0$	Amplitude der elektrischen Feldstärke, Seite 10
$E_{rekomb}$	rekombinierte elektrische Feldstärke, Seite 11
$E_{res}$	resultierende Amplitude der elektrischen Feldstärke, Seite 11
$\vec{F}$	Funktion des Vorwärtsmodells, Seite 32
$f$	Frequenz, Seite 10
$FT$	Fouriertransformationsoperator, Seite 13
$I$	eindimensionale resultierende Intensität im IFM, Seite 11
$I_{DC}$	Gleichlichtanteil von $E_{res}$ , Seite 11
$I_{inf}$	Interferogramm-Intensität bei infinitesimalem Gesichtsfeld, Seite 12
$I_{res}$	resultierende Intensität im IFM, Seite 11
$IFG$	normiertes, gemessenes Interferogramm, Seite 20
$ILS$	Apparatefunktion, Seite 14
$K$	Jacobi-Matrix von $\vec{F}$ , Seite 33
$k$	Wellenvektor, Seite 10
$\mathcal{L}$	Regularisierungsoperator, Seite 33
$L$	maximaler optischer Wegunterschied des IFM, Seite 13
$L_{ATM}$	kalibriertes Atmosphärenspektrum, Seite 29
$MOD$	Modulationsfunktion, Seite 19

$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen, Seite 13
$R$	Gesamtreflexionsgrad im IFM, Seite 11
$R_L$	Rechteckfunktion mit 1 auf $[-L, L]$ , Seite 13
$s$	Ort im Sehstrahl, Seite 31
$S_0$	einstrahlende, spektrale Strahldichte, Seite 11
$s_0$	Ort im Weltraum, Seite 31
$S_\epsilon$	Kovarianzmatrix, Seite 32
$s_m$	Ort des Meßinstruments, Seite 31
$S_{ATM}$	gemessenes Atmosphärenspektrum, Seite 29
$S_{BB}$	gemessenes Schwarzkörperspektrum, Seite 29
$S_{DS}$	gemessenes Deep-Space-Spektrum, Seite 29
$S_{inf}$	Spektrum bei infinitesimalem Gesichtsfeld, Seite 12
sinc	sinc-Funktion, Seite 13
$T$	Temperatur, Seite 31
$t$	Zeit, Seite 10
$T_g$	Gesamttransmissionsgrad im IFM, Seite 11
$V$	gesichtsfeldinduzierte Verteilungsfunktion, Seite 18
$\vec{x}$	Vektor der gesuchten Größen, Seite 32
$\vec{x}_a$	Vektor mit A-priori-Werten, Seite 33
$x$	Gangunterschied der Teilstrahlen im IFM, Seite 11
$x_E$	Ort der elektrischen Feldstärke, Seite 10
$x_{1,2}$	Längen der beiden Teilwege des IFM, Seite 11
$\vec{y}$	Vektor gemessener Größen, Seite 32

# Verzeichnis der Abkürzungen

- AILS** Apodized Instrumental Line Shape, apodisierte Apparatefunktion
- AsA** Aire sur l'Adour, Ballonstartplatz mittlerer Breite in Südfrankreich
- CM** Charakteristische Modulationsfunktion
- ECMWF** European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
- ENVISAT** Environmental Satellite, Umweltsatellit
- FASCODE** Fast Atmospheric Signature CODE
- FCKWs** Fluor-Chlor-Kohlenwasserstoffe
- FFT** Fast Fourier Transform, schnelle Fouriertransformation
- FTIR** Fourier Transform Infrared Spectrometer
- FTS** Fouriertransformspektrometer
- FWHM** Full Width Half Mean, Halbwertsbreite
- HITRAN** High Resolution Transmission Molecular Absorption Database
- IFG** Interferogramm
- ILS** Instrumental Line Shape, Apparatefunktion
- IMK** Institut für Meteorologie und Klimaforschung
- KOPRA** Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm
- LTE** Local Thermodynamic Equilibrium, lokales thermodyn. Gleichgewicht
- MIPAS-B2** Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung,  
zweite ballongetragene Version

**MOD** Modulationsfunktion

**NAT** Nitric Acid Trihydrate

**OPD<sub>max</sub>** maximal Optical Path Difference, maximaler optischer Gangunterschied

**PIFM** Parametric ILS Fitting Method

**POSTA** Polare Stratosphärische Aerosole

**PSC** Polar Stratospheric Cloud, polare Stratosphärenwolke

**RAT** Retrieval of Atmospheric Trace gas profiles

**r.u.** radiance units, Strahldichteinheiten =  $\text{nW}/(\text{cm}^2 \text{sr cm}^{-1})$

**SNR** Signal Noise Ratio S/N, Signal/Rauschverhältnis

**VMR** Volume Mixing Ratio, Volumenmischungsverhältnis

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Interferometer . . . . .	4
2.2	Sensorkonstruktion . . . . .	7
2.3	Meßgeometrie vom Ballon . . . . .	9
3.1	Geneigte Einstrahlung . . . . .	15
3.2	Haidinger-Ringe . . . . .	16
3.3	Spektrum in der komplexen Ebene . . . . .	28
4.1	MIPAS-B2 Spektren und O <sub>3</sub> -Profile. . . . .	36
5.1	Temperatur-Referenzprofil . . . . .	40
5.2	Temperatur-Retrieval zur $\gamma$ -Berechnung. . . . .	41
5.3	Temperatur-Retrieval bei veränderter ILS. . . . .	42
5.4	T-Retrieval bei veränderter ILS und starker Regularisierung. . . . .	44
5.5	Halbwertsbreite der AILS und ausgewählte Tangentenhöhen der Temperatur. . . . .	45
5.6	HNO <sub>3</sub> Referenz- und A-priori-Profil. . . . .	47
5.7	HNO <sub>3</sub> -Retrieval bei veränderter ILS-Breite. . . . .	48
5.8	HNO <sub>3</sub> -Retrieval bei veränderter ILS und erhöhter Regularisierung. . . . .	49
5.9	HNO <sub>3</sub> -Retrieval bei veränderter ILS und mit abgeleiteter Temperatur. . . . .	50
5.10	N <sub>2</sub> O Referenz- und A-priori-Profil. . . . .	51
5.11	N <sub>2</sub> O-Retrieval bei veränderter ILS-Breite. . . . .	52
5.12	N <sub>2</sub> O-Retrieval mit abgeleitetem T-Profil bei verbreiteter ILS. . . . .	53
5.13	N <sub>2</sub> O-Retrieval mit abgeleitetem T-Profil bei verjüngter ILS. . . . .	55
5.14	Referenz- und A-priori-Profil von NO <sub>2</sub> . . . . .	56
5.15	NO <sub>2</sub> -Retrieval bei veränderter ILS-Breite. . . . .	57
5.16	Halbwertsbreite der AILS und ausgewählte Tangentenhöhen bei NO <sub>2</sub> . . . . .	59
5.17	NO <sub>2</sub> -Retrieval bei verbreiteter ILS im T-Retrieval. . . . .	60
5.18	Erforderliche relative FWHM-Genauigkeit. . . . .	62
7.1	Entfaltungsprozeß mit Korrektur. . . . .	72

8.1	Bsp. für die Korrektur der Randeffekte. . . . .	77
8.2	Entfaltungsergebnisse bei ungestörten Spektren K1 und K2. . . . .	78
8.3	Entfaltungsergebnisse bei ungestörten Spektren K3 und K4. . . . .	79
8.4	Fehler der ungestörten ILS-Entfaltung. . . . .	80
8.5	Entfaltung ohne Polynom Anpassung. . . . .	81
8.6	Entfaltung mit Polynom Anpassung. . . . .	82
8.7	Entfaltungsergebnisse bei verrauschten Spektren. . . . .	83
8.8	Fehler der ILS mit Rauschen. . . . .	84
8.9	Bedeutung des mittleren S/N im Entfaltungsfenster. . . . .	85
8.10	Halbwertsbreite nach 10 %iger VMR-Änderung. . . . .	87
8.11	Fehler der Halbwertsbreite durch VMR-Fehler. . . . .	88
8.12	Entfaltungsergebnisse bei Positionsfehlern. . . . .	90
8.13	CM bei verrauschten Spektren. . . . .	92
8.14	FWHM aus CM bei verrauschten Spektren gemäß Flug 6. . . . .	93
8.15	FWHM aus CM bei verrauschten Spektren gemäß Flug 7. . . . .	94
8.16	FWHM aus CM bei 1 %ig überschätzter Temperatur gemäß Flug 6. . . . .	96
8.17	FWHM aus CM bei 1 %ig überschätzter Temperatur gemäß Flug 7. . . . .	97
8.18	FWHM aus CM bei überschätztem H <sub>2</sub> O-Profil. . . . .	98
9.1	Einzelresultate FWHM Flug 6. . . . .	101
9.2	Einzelresultate FWHM Flug 7. . . . .	102
9.3	CM aller Kanäle, Flug 6. . . . .	103
9.4	FWHM aus CM, Flug 6. . . . .	104
9.5	Asymmetrie aus CM, Flug 6. . . . .	104
9.6	ILS, berechnet aus CM, Flug 6. . . . .	106
9.7	CM der Kanäle 1 – 3, Flug 7. . . . .	107
9.8	FWHM aus CM, Flug 7. . . . .	108
9.9	Asymmetrie aus CM, Flug 7. . . . .	108
9.10	ILS, berechnet aus CM, Flug 7. . . . .	109
9.11	CO <sub>2</sub> aus Kanal 1 Spektren, Flug 9. . . . .	111
D.1	Gemittelte S/N-Spektren. . . . .	128

# Tabellenverzeichnis

2.1	Die Kanäle des MIPAS-B2 Instruments . . . . .	5
3.1	Apodisationsfunktionen . . . . .	27
5.1	Verwendete CM-Koeffizienten . . . . .	39
5.2	Microwindows des Temperatur-Retrievals . . . . .	40
8.1	VMR-Gesamtfehler der obersten Tangentenhöhe . . . . .	88
8.2	Wellenzahlbereiche für die Testberechnung der CM . . . . .	91
E.1	CM-Koeffizienten einiger Flüge. . . . .	130
E.2	CM-Phasenkoeffizienten einiger Flüge. . . . .	131