

**Variabilität von Wasserdampf in der unteren und  
mittleren Stratosphäre auf der Basis von  
HALOE/UARS und MIPAS/Envisat  
Beobachtungen**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN  
der Fakultät für Physik des  
Karlsruher Instituts für Technologie

genehmigte

DISSERTATION

von

Tobias Schieferdecker  
aus Karlsruhe

Tag der mündlichen Prüfung:	6. Februar 2015
Referent:	Prof. Dr. Johannes Orphal
Korreferent:	PD Dr. Michael Höpfner



# Zusammenfassung

In dieser Doktorarbeit werden die Effekte von mehreren atmosphärischen Prozessen auf stratosphärischen Wasserdampf untersucht. Hierfür werden die Daten von zwei Satelliteninstrumenten verwendet: Halogen Occultation Experiment (HALOE) und Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). Diese Daten werden kombiniert, um eine homogene Zeitserie zwischen Oktober 1991 und April 2012 zu erhalten.

Wir bestimmen lineare Trends von Wasserdampf während dieser Periode. Zudem untersuchen wir den Einfluss auf stratosphärischen Wasserdampf von einer jährlichen Oszillation (AO) und ihren Oberschwingungen, der Quasi-Biennial Oscillation (QBO), des El Niño Southern Oscillation (ENSO) und des elfjährigen Sonnenfleckenzyklus (SC) mittels vier verschiedener Regressionsmodelle. Es wird auch der Beitrag des zunehmenden atmosphärischen Methans zur Entwicklung stratosphärischen Wasserdampfs untersucht, sowie mögliche Gründe für den abrupten Abfall in den Mischungsverhältnissen von stratosphärischem Wasserdampf um das Jahr 2001 herum, dem sogenannten „Millenium Drop“.

Wir erhalten Ergebnisse für die Wasserdampftrends zwischen 15 km und 30 km Höhe innerhalb eines Breitenbereichs von 50°S und 50°N zwischen  $\sim -0,35$  ppmv/Jahrzehnt und  $\sim 0,1$  ppmv/Jahrzehnt (wobei die plausibleren Ergebnisse für den Trend die am negativen Ende dieses Intervalls sind). Der als sinusförmig angenommene Effekt der AO auf Wasserdampf besitzt maximale Amplituden in der Stratosphäre von  $\sim 0,6$  ppmv in einer Höhe von etwa 17 km–18 km und zeigt Werte von  $\sim 0,1$  ppmv zwischen 20 km und 30 km. Für den Halbjahreszyklus (SAO) betragen die maximalen stratosphärischen Amplituden  $\sim 0,17$  ppmv in einer Höhe  $\sim 17$  km. In größeren Höhen, ab etwa 27 km, über den Tropen werden fast so hohe Amplituden wie bei der AO in diesen Höhen erreicht. Außerhalb der Tropen sind die Amplituden des Effekts der SAO auf Wasserdampf  $\sim 0,05$  ppmv.

Ähnlich wie bei der SAO, kann das QBO-Signal die Mischungsverhältnisse von Wasserdampf lokal um bis zu  $\sim 0,18$  ppmv beeinflussen, jeweils bei 10°S–10°N auf 25 km–30 km und zwischen 50°S–10°S etwas höher bei 28 km–30 km. Höhere Werte für diese Effekte auf die Mischungsverhältnisse, bis zu 0,4 ppmv, werden in der

Region der oberen Troposphäre/unteren Stratosphäre über den Tropen bestimmt. In der übrigen betrachteten Atmosphäre sind die Effekte kleiner und verschwinden fast ganz in manchen Bereichen, z. B. zwischen 22 km–25 km in den mittleren Breiten auf der Südhemisphäre. Jegliche potenziellen Effekte von ENSO auf stratosphärischen Wasserdampf können nicht von dem verwendeten linearen Regressionsmodell erfasst werden. Der SC beeinflusst Wasserdampfmischungsverhältnisse in der Tropischen-Tropopausen-Schicht stark um bis zu  $\sim 0,4$  ppmv, mit geringerem Einfluss in anderen Regionen.

Es konnte kein eindeutiger Effekt des ansteigenden Methans auf Wasserdampf gefunden werden, obwohl ein ansteigender Beitrag zu stratosphärischem Wasserdampf jedoch wahrscheinlich ist, wobei die Abschätzung für eine Obergrenze desselben  $\sim 0,02$  ppmv/Jahr beträgt.

Des Weiteren werden mögliche Verbindungen zwischen dem Millennium Drop und dem Signal des SC, sowie mit den Signalen der QBO, ENSO und der Brewer-Dobson Zirkulation vorgestellt.

# Abstract

This thesis examines effects of various atmospheric processes on stratospheric water vapor. This is done using data from two satellite instruments: Halogen Occultation Experiment (HALOE) and Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). The data is combined to create a homogeneous time series ranging from October 1991 until April 2012.

Linear trends in water vapor over this period were examined. We also investigate the influence on stratospheric water vapor concentrations due to the annual oscillation (AO) and its harmonics, the Quasi-Biennial Oscillation (QBO), the El Niño Southern Oscillation (ENSO) and the eleven-year sunspot cycle (SC). Further, we investigate contributions of the increasing atmospheric methane to the evolution of stratospheric water vapor and also possible reasons for the rapid drop of water vapor mixing ratios in the stratosphere around 2001 during the so-called „Millenium Drop“.

We find that the trends in water vapor lie between  $\sim -0,35$  ppmv/decade and  $\sim 0,1$  ppmv/decade (the more plausible values for the trend are on the negative end of this range). The assumed sinusoidal effect of the AO on water vapor is found to have maximum amplitudes in the stratosphere of  $\sim 0,6$  ppmv at an altitude of around 17 km–18 km, but they may be as low as  $\sim 0,1$  ppmv between 20 km and 30 km. For the semi-annual oscillation (SAO) these maxima of stratospheric amplitudes are  $\sim 0,17$  ppmv at  $\sim 17$  km, and at higher altitudes over the tropics, from  $\sim 27$  km upwards, similar amplitudes as for the AO in this altitude region are attained. Outside the tropics, the amplitudes of the effect of the SAO on water vapor are  $\sim 0,05$  ppmv.

Similarly to the SAO, the QBO-signal may alter the mixing ratios of water vapor up to  $\sim 0,18$  ppmv locally at both  $10^{\circ}\text{S}$ – $10^{\circ}\text{N}$  at 25 km–30 km and between  $50^{\circ}\text{S}$ – $10^{\circ}\text{S}$  at slightly higher altitudes 28 km–30 km. Higher values for these effects on the mixing ratios, up to 0,4 ppmv, can be found in the tropical Upper Troposphere Lower Stratosphere. In the remaining atmospheric regions the effects are smaller, and almost completely vanish in some regions, e.g. at 22 km–25 km in the midlatitudes of the Southern Hemisphere. Any potential effects of ENSO on stratospheric water vapor are not captured by the linear regression model used. The SC signal affects water

vapor mixing ratios in the Tropical Tropopause Layer strongly, by up to  $\sim 0,4$  ppmv, with smaller influences seen in other locations.

No distinct effects of increasing methane mixing ratios on water vapor are found, although an increased contribution to stratospheric water vapor with an estimated upper limit of  $\sim 0,02$  ppmv/year is probable.

The Millenium Drop in water vapor is found to have possible connections with the signal of the SC, as well as to the signals of the QBO, ENSO and Brewer-Dobson Circulation.

# Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	iii
Abstract	v
Inhaltsverzeichnis	vii
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Wasserdampf in der Atmosphäre</b>	<b>5</b>
2.1 H <sub>2</sub> O-Verteilung in der Atmosphäre . . . . .	5
2.2 Wasserdampf als Treibhausgas . . . . .	6
2.3 Wasserdampf in der Ozonchemie . . . . .	7
2.4 Methanoxidation . . . . .	9
2.5 Transportmechanismen in die Stratosphäre . . . . .	11
2.6 Zirkulation in der Stratosphäre . . . . .	16
2.7 Atmosphärische Signale in der Stratosphäre . . . . .	16
2.8 Satellitenmessinstrumente . . . . .	19
2.8.1 Übersicht über die stratosphärischen Wasserdampf messenden limb-sounding Satelliteninstrumente . . . . .	19
2.8.2 Liste einiger die Temperatur messender Satelliteninstrumente .	23
<b>3 Messprinzipien</b>	<b>24</b>
3.1 MIPAS/Envisat . . . . .	24
3.1.1 Messgeometrie . . . . .	24
3.1.2 Messprinzip . . . . .	27

3.1.3	Wissenschaftliche Arbeiten . . . . .	29
3.2	HALOE/UARS . . . . .	31
3.3	Strahlungsübertragung und Retrievaltheorie . . . . .	34
3.3.1	Strahlungsübertragung in der Atmosphäre . . . . .	34
3.3.2	Numerische Modellierung der Strahlungsübertragung . . . . .	40
3.3.3	Retrievaltheorie . . . . .	42
3.3.4	Prozessierung der Messdaten . . . . .	46
3.3.5	Fehlerabschätzung . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Daten von MIPAS/Envisat und HALOE/UARS</b>	<b>50</b>
4.1	Wasserdampf-Retrieval von MIPAS und HALOE . . . . .	50
4.2	Vergleich der beiden Instrumente . . . . .	53
4.3	Vergleich mit anderen Messinstrumenten . . . . .	54
4.3.1	MIPAS . . . . .	54
4.3.2	HALOE . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Kombinierte HALOE/MIPAS-Zeitserie</b>	<b>65</b>
5.1	Faltung von HALOE-Daten mit MIPAS Averaging Kernels . . . . .	66
5.2	Ansätze zur Kombination der beiden Zeitreihen . . . . .	72
5.2.1	Differenzenmethode . . . . .	72
5.2.2	Verschiebungsmethode . . . . .	75
5.3	Vergleiche mit anderen Instrumenten . . . . .	79
5.3.1	Vergleich mit Boulder Frostpoint-Hygrometer Daten . . . . .	79
5.3.2	Vergleich mit diversen Satelliteninstrumenten und der Zeitreihe der Tropopausen-Temperatur . . . . .	81
5.4	Vergleiche mit Modellläufen . . . . .	85
5.5	Analyse der kombinierten Zeitreihe . . . . .	90
5.5.1	Generelle Beschreibung der Durchführung der Regression . . . . .	90
5.5.2	Ansatz mit einer grundlegenden Fitfunktion . . . . .	95
5.5.3	Ansatz mit einer durch Bruchpunkte im linearen Trend erweiterten Fitfunktion . . . . .	98

5.5.4	Ansatz mit einer durch eine Beschreibung des solaren Zyklus erweiterten Fitfunktion . . . . .	105
5.5.5	Lineare Trends, Jahreszyklus, Halbjahreszyklus, QBO, ENSO und solarer Zyklus . . . . .	113
5.5.6	Einfluss von stratosphärischem Methan, BDC und vulkanischen Aerosolen . . . . .	120
<b>6</b>	<b>Ergebnisse der Studien und Diskussion</b>	<b>134</b>
6.1	Trends von H <sub>2</sub> O aus den Regressionen . . . . .	135
6.1.1	Vergleich von Trends aus der HALOE-MIPAS-Zeitreihe mit Trends aus anderen Daten . . . . .	135
6.1.2	Höhenprofile von Trends in H <sub>2</sub> O . . . . .	138
6.2	Zusammenhang von CH <sub>4</sub> mit H <sub>2</sub> O . . . . .	139
6.3	Zusammenhang der BDC mit H <sub>2</sub> O . . . . .	144
6.4	Zusammenhang von solarem Zyklus und H <sub>2</sub> O . . . . .	144
6.4.1	Potentielle Auswirkungen des solaren Zyklus auf ENSO . . . . .	145
6.4.2	Beeinflussung der Cold Trap Temperatur durch den solaren Zyklus . . . . .	147
6.5	Zeitpunkt des H <sub>2</sub> O-Absinkens & Erklärungsansätze . . . . .	153
6.5.1	Zeitpunkt und Dauer des Millenium-Drops . . . . .	153
6.5.2	Zusammenhang mit QBO, ENSO und BDC . . . . .	154
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>161</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>167</b>
<b>A</b>	<b>MIPAS Messmodi</b>	<b>187</b>
<b>B</b>	<b>Identitätsbeweis</b>	<b>189</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>190</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

Die Erdatmosphäre besteht aus vielen verschiedenen Gasen, von denen die Hauptbestandteile  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , Ar und  $\text{CO}_2$  sind. Diese besitzen unterschiedliche chemische Eigenschaften und wechselwirken mit der solaren Strahlung oder Strahlung von thermischen Emissionen der Erdoberfläche, beziehungsweise der unterschiedlichen Atmosphärenschichten, verschieden stark.

Die unterste Schicht nennt sich Troposphäre und reicht, abhängig vom Breitengrad, von der Erdoberfläche bis in eine Höhe von ca. 8 km an den Polen und bis ungefähr 17 km am Äquator. In der Troposphäre nimmt die Temperatur nach oben hin ab, bis eine minimale Temperatur in einer Höhe erreicht wird, die als Tropopause bezeichnet wird. Diese Höhe stellt die Grenze zu der nächsthöheren Atmosphärenschicht dar, der Stratosphäre, welche von der Tropopause bis in eine Höhe von ca. 50 km reicht und durch mit der Höhe zunehmende Temperaturen gekennzeichnet ist.

In dieser Arbeit wird der gasförmige Aggregatzustand von Wasser näher beleuchtet. Wasserdampf macht in der Troposphäre einen großen prozentualen Anteil der Luft aus (bis zu 3 % der Luft), nimmt aber zur oberen Troposphäre hin prozentual stark ab. Ungefähr in der Höhe der Tropopause befindet sich ein lokales Minimum in der Höhenverteilung des Wasserdampfmischungsverhältnis, die sogenannte Hygropause. Darüber nimmt das Mischungsverhältnis wieder zu, hauptsächlich dank der Oxidation von Methan, welche in der Stratosphäre stattfindet. Die Konzentration ist aber lange nicht so hoch wie in manchen Teilen der Troposphäre.

Das Mischungsverhältnis (Englisch: VMR, **V**olume **M**ixing **R**atio) eines Gases kann zum Beispiel in ppmv (**p**arts **p**er **m**illion by **v**olume) angegeben werden und bedeutet – ähnlich wie die Prozentangabe –, wieviele Teilchen dieses Gases auf eine Million Gasteilchen in einem betrachteten Volumen kommen. Das Mischungsverhältnis von Wasserdampf in der Stratosphäre reicht von ca. 2 ppmv in der unteren Stratosphäre bis ca. 8 ppmv in der oberen Stratosphäre. Am Boden beträgt es im Mittel  $\sim 13000$  ppmv, was  $\sim 1,3\%$  entspricht.

In Verbindung mit der Temperaturverteilung und der Luftzirkulation hat der Wasserdampf in der Troposphäre einen großen Einfluss auf das Wetter. Wolkenbildung und Niederschlag hängen unter anderem direkt mit der Wasserdampfverteilung und Konvektion zusammen.

Neben den lokal stark schwankenden Wetterphänomenen nimmt der Wasserdampf auch einen großen Einfluss auf das längerfristige globale Klima. Wasserdampf ist das wichtigste Treibhausgas der Troposphäre und unteren Stratosphäre (oberhalb sind  $O_3$  und  $CO_2$  dominant), und eine Erhöhung der Konzentration in diesem Bereich sorgt deshalb für eine Erwärmung der Erdoberflächentemperaturen. In der Abbildung 1.1 ist die Sensitivität der Strahlung an der Erdoberfläche auf eine Veränderung der Masse an  $H_2O$  in verschiedenen Breitengraden und Höhen relativ zur größten Strahlungsänderung. Anhand dieser Abbildung wird deutlich, dass eine Änderung des Wasserdampfs vor allem im Bereich um die Tropopause zwischen  $30^\circ S$  und  $30^\circ N$  die größten Auswirkungen hat.

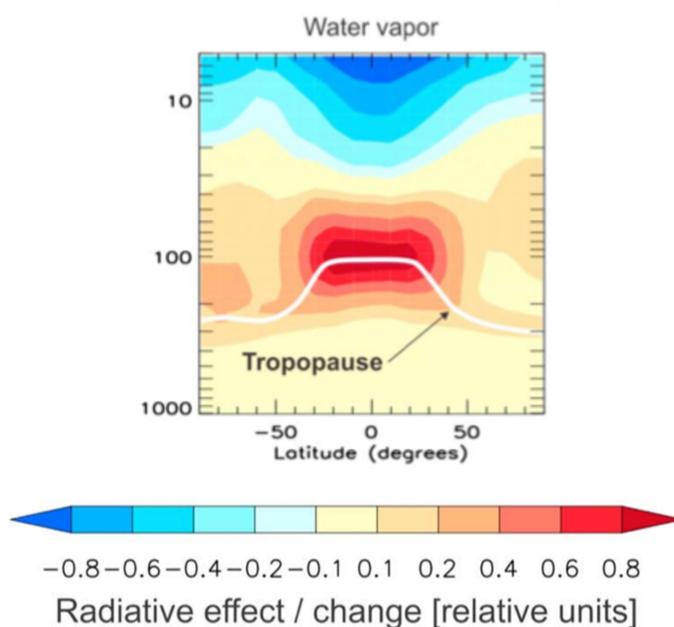


Abbildung 1.1: Sensitivität der Strahlung an der Erdoberfläche in Bezug auf Änderungen der Masse an  $H_2O$  relativ zur größten Strahlungsänderung. Die weiße Linie in der Darstellung kennzeichnet die Tropopause. Diese Abbildung wurde entnommen aus Riese et al. (2012).

Wie in einem Klima-Chemie-Modell nachgestellt (siehe Dessler, 2013), existiert ein Rückkopplungseffekt des Wasserdampfs in der Atmosphäre: erhöhte mittlere troposphärische Temperaturen führen zu größeren Konzentrationen troposphärischen Wasserdampfs. Durch den Aufstieg tropischer troposphärischer Luft in die Stratosphäre werden diese höheren Wasserdampfwerte in die Stratosphäre gebracht, wo

---

sich der Effekt als Treibhausgas verstärkt auswirkt und wiederum zu höheren troposphärischen Temperaturen führt. Allerdings wird auch Wolkenbildung wahrscheinlicher, wenn die Wasserdampfkonzentration in der Troposphäre oder auch in der Stratosphäre zunimmt, was die mittlere Bestrahlung der Erdoberfläche verringert und somit dem Treibhauseffekt entgegenwirken könnte.

Aus diesem Grund wurde im Zuge dieser Arbeit ein Versuch gemacht, die globale Wasserdampfverteilung von der unteren bis mittleren Stratosphäre (in den Tropen 17 km–30 km) über einen längeren Zeitraum genauer zu studieren. Hierzu wurden die H<sub>2</sub>O-Datensätze zweier Satelliteninstrumente zusammengefügt, um einen zwei Jahrzehnte umfassenden Datensatz zu erzeugen. Beide Geräte sind Fernerkundungsmessgeräte, was heißt, dass sie die Erdatmosphäre von einer gewissen Entfernung aus sondieren und aus den gemessenen Daten Informationen über die Zusammensetzung derselben gewonnen werden können. Aus den Messungen beider Instrumente werden vertikale Profile von verschiedenen Gasen erzeugt, zu denen jeweils auch H<sub>2</sub>O zählt.

Das Messgerät, welches zuerst von seiner Erdumlaufbahn aus Daten über die Atmosphäre in einem Zeitraum von Ende 1991 bis Ende 2005 gesammelt hat, war das Instrument HALOE (**HAL**ogen **O**ccultation **E**xperiment) auf dem Satelliten UARS (**U**pper **A**tmosphere **R**esearch **S**atellite). Dieses Instrument blickte von seiner Position aus quer durch die Atmosphäre in die Sonne. Die starke Strahlung der Sonne bei dieser Okkultationsmessung genannten Messgeometrie sorgt dafür, dass die Strahlung der auch strahlenden Erdatmosphäre vernachlässigt werden kann. Jedoch absorbieren die verschiedenen Bestandteile der Atmosphäre Strahlung der Sonne und ermöglichen es so, Erkenntnisse über die atmosphärische Zusammensetzung aus derartigen Messungen zu gewinnen.

Das zweite Messinstrument nennt sich MIPAS (**M**ichelson **I**nterferometer for **P**assive **A**tmospheric **S**ounding) und befand sich auf dem Satelliten Envisat (**E**nvironmental **S**atellite). Der Zeitraum, in welchem Messungen von MIPAS vorliegen, reicht von Juli 2002 bis April 2012. Die Messgeometrie dieses Messgeräts unterschied sich von der von HALOE. Das Instrument blickte in verschiedenen Höhen quer durch die Atmosphäre in den Weltraum und hat dabei atmosphärische Strahlungsemissionen aufgezeichnet, was man Emissionsspektroskopie nennt.

Zusammengenommen überdecken die Zeiträume der Messungen beider Instrumente etwas mehr als zwei Jahrzehnte von globalen Messungen von atmosphärischen Konstituenten und unter anderem auch von Wasserdampf. Im Zuge dieser Arbeit wurden Methoden entwickelt, diese beiden Zeitreihen von Messungen zu einer einzigen, möglichst homogenen Zeitreihe zusammenzufügen.

Im auf die Einleitung folgenden Teil der Arbeit, Kapitel 2, wird eine Übersicht über die für diese Arbeit relevantesten Informationen über Wasserdampf in der Atmosphäre und dort hauptsächlich in der Stratosphäre gegeben. Kapitel 3 behandelt

---

die Theorie hinter den beiden Instrumenten, sowie die mathematischen Methoden, mit denen aus den ursprünglich gemessenen Daten auf die Zusammensetzung der Atmosphäre geschlossen werden kann. Außerdem werden die Fehlerquellen beschrieben, welche in die Daten einfließen. Im nächsten Abschnitt in Kapitel 4 werden die Wasserdampfmessungen beider Instrumente genauer beleuchtet und in Relation zueinander und anderen Instrumenten gestellt. Kapitel 5 behandelt die Kombination der Daten der beiden Instrumente und Vergleiche und Analysen der entstandenen Zeitserie. In Kapitel 6 werden die relevanten Ergebnisse vorgestellt und in Zusammenhang mit den Ergebnissen aus anderen Veröffentlichungen gebracht. Im letzten Abschnitt dieser Arbeit, Kapitel 7, wird die Arbeit in groben Zügen zusammengefasst und die wichtigsten Ergebnisse und Schlussfolgerungen herausgestellt.

Diese Arbeit wurde im Zuge des SHARP (**S**tratospheric **C**hange and its **R**ole for Climate **P**rediction, für die Homepage des SHARP Projekts, siehe Link im Literaturverzeichnis) Projekts vorgenommen. Dies ist ein von der DFG (**D**eutschen **F**orschungsgemeinschaft) gefördertes Projekt, welches sich mit Veränderungen anthropogener und natürlicher Art in der Stratosphäre befasst. Eines der verschiedenen Gebiete, auf die dieses Projekt abzielt, ist Wasserdampf in der Stratosphäre, in welchem diese Arbeit angesiedelt ist. Im Zuge dieses Projekts wurden unter anderem diverse Klimamodellläufe durchgeführt. Die Ergebnisse der Vergleiche der zusammengeführten Zeitreihe und dieser Modelle sind in Unterkapitel 5.4 beschrieben.

---

# Kapitel 2

## Wasserdampf in der Atmosphäre

Dieses Kapitel befasst sich mit den verschiedenen Aspekten der Rolle von Wasserdampf in der Atmosphäre. In Unterkapitel 2.1 wird eine Beschreibung der Höhenabhängigkeit von Wasserdampf in der Atmosphäre über den Tropen gegeben. Das folgende Unterkapitel 2.2 befasst sich mit der Rolle von Wasserdampf für den Treibhauseffekt und Unterkapitel 2.3 damit, wie sich Wasserdampf in der Ozonchemie auswirkt. Unterkapitel 2.4 gibt eine Übersicht über die ablaufenden Reaktionen bei der Oxidation von Methan und wie diese das Mischungsverhältnis von Wasserdampf beeinflussen. Die beiden Unterkapitel 2.5 und 2.6 befassen sich mit dem Transport von Wasserdampf in die Stratosphäre und wie im Mittel der Transport von Luft im Allgemeinen in der Stratosphäre aussieht. Im letzten Unterkapitel 2.7 werden atmosphärische Effekte aufgelistet, welche einen Einfluss auf Wasserdampf in der Stratosphäre ausüben können.

### 2.1 H<sub>2</sub>O-Verteilung in der Atmosphäre

Abbildung 2.1 zeigt die Verteilung von Wasserdampf und der Temperatur mit der Höhe über den Tropen. Die Abnahme des Wasserdampfprofils nach oben hin in der Troposphäre hängt direkt mit der abnehmenden Temperatur zusammen, da bei den mit der Höhe immer kälter werden Temperaturen immer mehr von dem gasförmigen Wasser zu flüssigem Wasser oder Eis kondensiert. Die Höhe der Hygropause ist etwas weiter oben angesiedelt als die der minimalen Temperatur. Die Zunahme des Wasserdampfs in der Stratosphäre hängt hauptsächlich mit der chemischen Reaktion der Oxidation von Methan zusammen, wobei Wasserdampf eines der Produkte ist (siehe Unterkapitel 2.4). Es gibt keine direkte Verbindung von den nach oben hin zunehmenden H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnissen in der Stratosphäre mit der auch zunehmenden Temperatur.

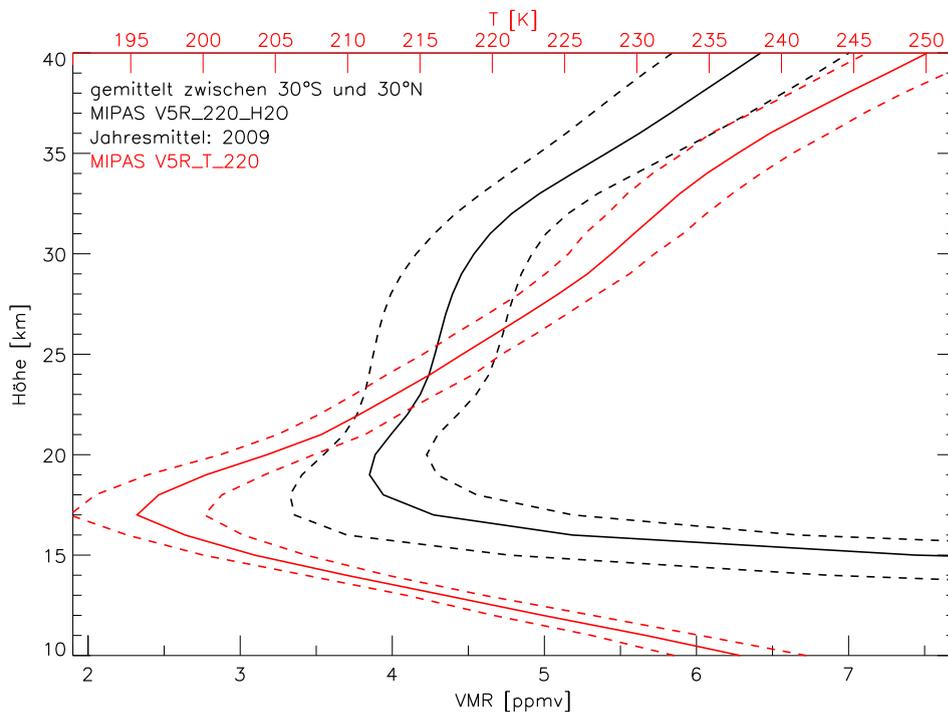


Abbildung 2.1: Mittleres Profil von MIPAS-Wasserdampfdaten (schwarz, untere x-Achse) und MIPAS-Temperaturdaten (rot, obere x-Achse) zwischen 30°S und 30°N aus dem Jahr 2009 auf einem in Kilometerschritten unterteilten Höhengitter zwischen 10 km und 40 km Höhe. Die gestrichelten Linien kennzeichnen den Verlauf der Standardabweichung mit der Höhe.

Außerhalb der Tropen ist sowohl das Minimum in den Temperaturprofilen als auch die Hygropause tiefer angesiedelt und beide erreichen eine minimale Höhe in polaren Breiten (vergleiche Kapitel 1).

## 2.2 Wasserdampf als Treibhausgas

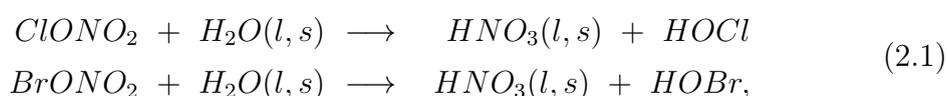
Wie in Kapitel 1 erwähnt, ist Wasserdampf eines der dominierenden Treibhausgase in der Erdatmosphäre. Jones und Henderson-Sellers (1990) schreiben, dass  $\text{H}_2\text{O}$  von den  $\sim 148 \frac{\text{Watt}}{\text{m}^2}$  zusätzlicher Heizleistung durch Absorption und Reemission der thermischen Strahlung der Erde  $\sim 100 \frac{\text{Watt}}{\text{m}^2}$  beiträgt. Die hauptsächliche Menge an gasförmigem  $\text{H}_2\text{O}$  in der Atmosphäre kommt aus der Verdampfung von Meerwasser und liegt somit außerhalb der Kontrolle des Menschen, wenn man davon absieht, dass der durch anthropogenes  $\text{CO}_2$  und  $\text{CH}_4$  verstärkte Treibhauseffekt dazu führt, dass mehr  $\text{H}_2\text{O}$  verdunstet und somit in die Atmosphäre gelangt. Dieser sekundäre Effekt hat zur Folge, dass durch den erhöhten  $\text{H}_2\text{O}$ -Gehalt der Atmosphäre noch mehr Wärmestrahlung zur Erde zurück reflektiert wird und es zu einer „Rückkopp-

lung“ kommt, da nun noch mehr Wasserdampf durch Evaporation in die Atmosphäre gelangt.

Ein anderer Effekt einer wasserdampfreichen Atmosphäre ist die vermehrte Wolkenbildung. Wolken haben hier wiederum zwei verschiedene Auswirkungen auf den Strahlungshaushalt und somit auf die Atmosphären- sowie auf die Oberflächentemperatur. Einerseits wird ein großer Anteil der Sonneneinstrahlung von ihnen reflektiert, was die Absorption von Energie durch die untere Atmosphäre und die Erdoberfläche vermindert. Und andererseits verringert sich auch der Verlust an Energie in der Atmosphäre dadurch, dass die thermische Abstrahlung der Erde effektiv von der Oberfläche der Wolken ausgeht und nicht von der deutlich wärmeren Erdoberfläche (Wetherald und Manabe, 1988). Welcher dieser beiden Effekte überwiegt, hängt von mehreren Faktoren ab. Ein Beispiel, bei dem der zweite – Wärme konservierende – Effekt überwiegt, ist eine nächtliche Bewölkung, bei der die von der Erde abgestrahlte thermische Strahlung zu einem Teil von den Wolken zurückgeworfen wird und es keine einfallende Strahlung von der Sonne gibt. Zu den Faktoren, welche auf die Wirkung von Wolken in der Atmosphäre Einfluss haben, zählt unter anderem die Position der Wolken. Etwa ob sie sich über dem Meer oder über Land befinden, und wenn über Land, ob sie sich über einem Gebirge, oder über Flachland befinden, da die abgestrahlte Energie von höhergelegenen Gebieten der Erde wegen der geringeren Oberflächentemperatur niedriger ist. Auch die Beschaffenheit der Erdoberfläche spielt eine Rolle für die Energiebilanz, so wäre etwa der Effekt einer Wolkenschicht über einer mit Eis bedeckten Oberfläche verschieden von einer selbigen über einer Landschaft mit stärker absorbierendem Material. Aus diesen Gründen ist es nicht eindeutig, wie sich ein Trend im Wasserdampfgehalt der Atmosphäre auf den Strahlungshaushalt der Erde auswirken würde und bedarf eingehender Studien.

## 2.3 Wasserdampf in der Ozonchemie

Des weiteren spielt  $H_2O$  auch eine Rolle in der Ozon-Chemie der Stratosphäre, wobei dies auf viele verschiedene Arten geschehen kann. Zum Beispiel bestimmen  $H_2O$ -Konzentrationen die Schwellentemperatur, unterhalb derer heterogene Reaktionen stattfinden, bei welchen Halogenverbindungen an der Oberfläche von Aerosolen (wie etwa in polaren stratosphärischen Wolken (PSC)) „aktiviert“ werden (siehe Kirk-Davidoff et al., 1999). Die dadurch entstandenen halogenhaltigen Moleküle wirken als Katalysatoren bei der Zersetzung von  $O_3$ . Liegt zum Beispiel ein  $ClONO_2$ - oder  $BrONO_2$ -Molekül vor, können folgende Reaktionen stattfinden:



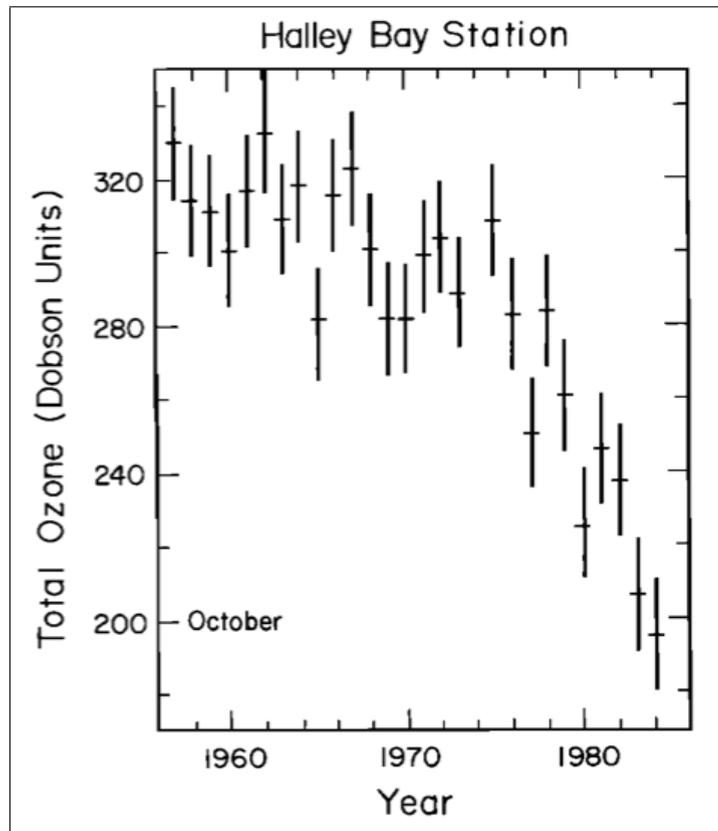
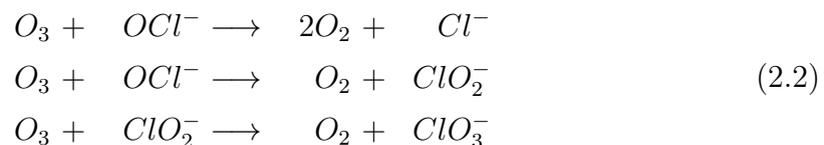


Abbildung 2.2: Die Entwicklung der Monatsmittel vom Monat Oktober des Säulen-  
 gehalts von Ozon zwischen 1957 und 1984 über Halley Bay ( $76^{\circ}\text{S}$ ,  $27^{\circ}\text{W}$ ). Die Abbil-  
 dung ist entnommen aus Solomon (1988), worin es adaptiert worden ist von Farman  
 et al. (1985)

wobei das Symbol (*l*) für den flüssigen Aggregatzustand (Englisch liquid) steht und (*s*) für den festen Aggregatzustand (Englisch solid). Die entstehenden Mole-  
 küle HOCl und HOBr sind wiederum verantwortlich für den Abbau von Ozon. In  
 Gleichung 2.3 wird am Beispiel des Anions von HOCl die Reaktion mit  $\text{O}_3$  darge-  
 stellt.



Neben diesem Zyklus gibt es zahlreiche weitere katalytische Zyklen, welche auf  
 verschiedenen Höhen unterschiedlich stark zu der Zerstörung von Ozon beitragen  
 und bei denen oft Wasserdampf indirekt eine Rolle spielt. Ein Beispiel hierfür sind  
 die katalytischen Zyklen mit Wasserstoff (hydrogen catalytic cycles). Dieses und  
 andere Beispiele finden sich unter anderem in Lary (1997) und Solomon (1988).

Die Auswirkungen dieser Zyklen auf Ozon über der Antarktis sind in Abbildung 2.2 dargestellt.

## 2.4 Methanoxidation

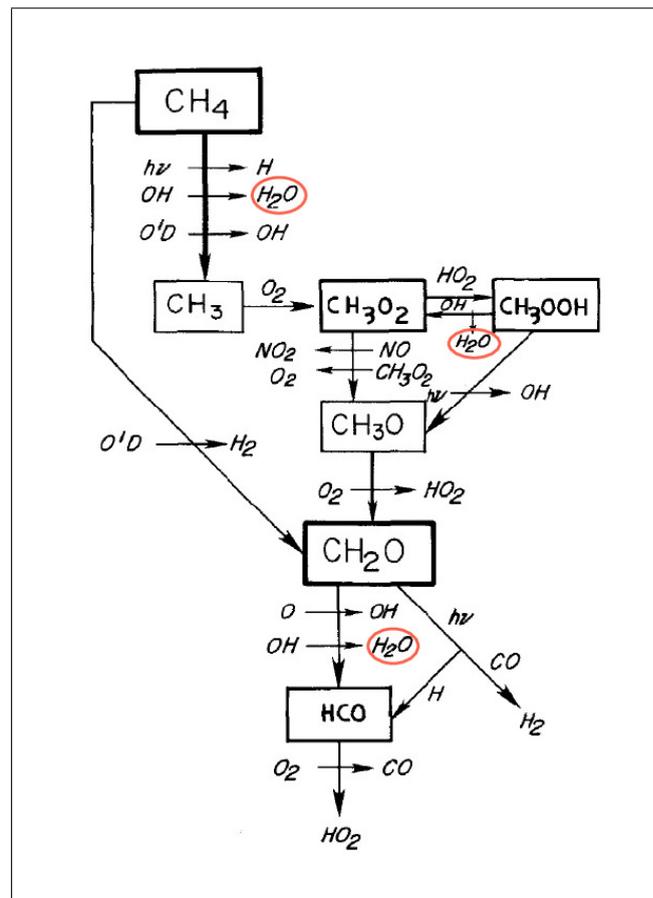


Abbildung 2.3: Die bei der  $\text{CH}_4$ -Oxidation ablaufenden Reaktionen, entnommen aus Le Texier et al. (1988).

Die Quellen von Methan liegen ausschließlich am Erdboden. Das Gas entsteht durch anaerobe Prozesse, wie etwa beim Reisanbau, bei der Viehzucht oder durch Bakterien in Sümpfen oder marinen Sedimenten. Es gibt noch einige weitere Beispiele für Quellen von Methan, vgl. Ehhalt und Schmidt (1978). In Le Texier et al. (1988) und Bates und Nicolet (1950) wird die Oxidation von Methan in der Stratosphäre behandelt. Da eines der Produkte bei diesem Reaktionskomplex  $\text{H}_2\text{O}$  ist, das Volumenmischungsverhältnis von  $\text{CH}_4$  in der Stratosphäre in derselben Größenordnung wie das von  $\text{H}_2\text{O}$  liegt und die Reaktionswahrscheinlichkeit verhältnismäßig hoch ist, hat sie in der Stratosphäre einen großen Einfluss auf das Volumenmischungsverhältnis von  $\text{H}_2\text{O}$ . Eine Übersicht über die ablaufenden Reaktionen ist in Abbildung 2.3 gege-

ben. Unter bestimmten Bedingungen - die weiter unten noch angeführt werden - ergibt sich bei einem Verlust an  $x$  ppmv von Methan durch Oxidation eine Produktion von  $2 \cdot x$  ppmv von  $\text{H}_2\text{O}$ . Es entsteht bei der Methan-Oxidation neben Wasserdampf aber auch ein nicht zu vernachlässigender Prozentsatz an  $\text{H}_2$ , wobei der Anteil abhängig von der Höhe und dem Breitengrad ist, siehe Abbildung 2.4. In dieser Abbildung wird ersichtlich, dass die Summe aus den Verhältnissen  $\Delta\text{VMR}(\text{H}_2)/\Delta\text{VMR}(\text{CH}_4)$  und  $\Delta\text{VMR}(\text{H}_2\text{O})/\Delta\text{VMR}(\text{CH}_4)$  ungefähr gleich zwei ist. Dies bedeutet, dass die Summe aus dem Verhältnis von produziertem  $\text{H}_2$  mit verbrauchtem  $\text{CH}_4$  und dem Verhältnis von produziertem  $\text{H}_2\text{O}$  mit dem verbrauchten  $\text{CH}_4$  relativ konstant ist und wenig Wasserstoff in anderen Molekülen untergebracht wird. Die Lebensdauer von  $\text{H}_2$  ist in der gleichen Größenordnung wie die von Methan und es wird in einer Reaktion mit OH oxidiert, wobei auch  $\text{H}_2\text{O}$  entsteht. Diese Reaktion läuft vor allem in Höhen von 35 km – 50 km ab, da hier die Maxima von OH und  $\text{O}^1\text{D}$  vorliegen.

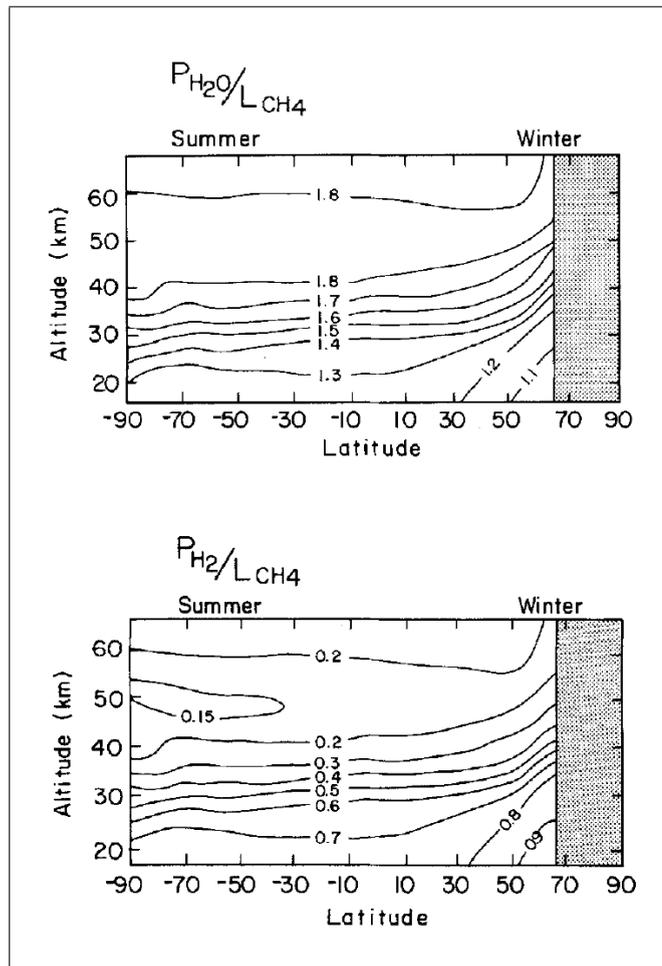


Abbildung 2.4: Modellergebnis für das bei der Oxidation von Methan im Januar entstehenden Verhältnisses von produziertem  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{H}_2$  zu verbrauchtem  $\text{CH}_4$  in Abhängigkeit von Breitengrad und Höhe, entnommen aus Le Texier et al. (1988).

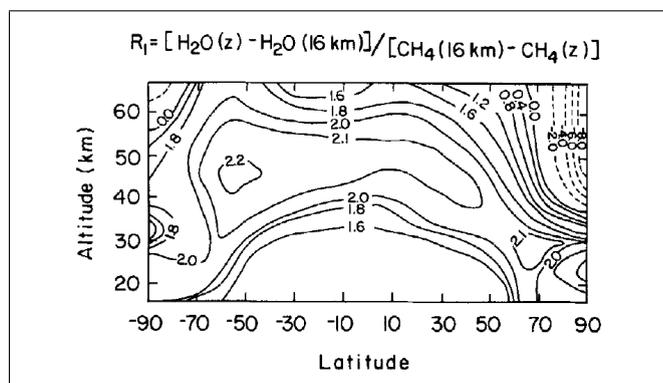


Abbildung 2.5: Modellergebnis für das Verhältnis der Konzentrationen von  $\text{H}_2\text{O}$  zu  $\text{CH}_4$  im Januar. Zähler und Nenner sind jeweils bezogen auf die jeweiligen Konzentrationen bei 16 km, dem niedrigsten Höhengniveau im Modell. Die Abbildung ist entnommen aus Le Texier et al. (1988).

Eine zusätzliche Quelle von  $\text{H}_2$  liegt in der Mesosphäre, wo das Gas in einer photochemischen Reaktion aus  $\text{H}_2\text{O}$  entsteht. In den hohen Breiten der Winterhemisphäre herrscht ein starker Abwärtstransport von Luft vor, wodurch  $\text{H}_2$ -reiche und wasserdampfarme Luft von der Mesosphäre in die Stratosphäre gelangt, jedoch nicht unterhalb von 35 km. Durch diesen Effekt kann wiederum die Produktion von Wasserdampf durch  $\text{H}_2$ -Oxidation in diesen Regionen angeregt werden. An den Stellen in Abbildung 2.5, wo das Verhältnis  $\frac{\text{VMR}(\text{H}_2\text{O}) - \text{VMR}(\text{H}_2\text{O}(16 \text{ km}))}{\text{VMR}(\text{CH}_4) - \text{VMR}(\text{CH}_4(16 \text{ km}))} = 2$  ist, herrscht ein Gleichgewicht zwischen der Produktionsrate von  $\text{H}_2$  und der Abbaurrate von  $\text{H}_2$  (Le Texier et al., 1988).

## 2.5 Transportmechanismen in die Stratosphäre

Der Transport von Luft von der Troposphäre in die Stratosphäre geschieht hauptsächlich durch die Tropical Tropopause Layer (TTL). Dies ist eine Schicht der Atmosphäre, deren Charakteristika sowohl von der Troposphäre als auch der Stratosphäre geprägt sind. Die Eigenschaften innerhalb dieser Schicht sind für die Transportmechanismen von Luft aus der Troposphäre in die Stratosphäre prägend. Die TTL befindet sich oberhalb der Tropen und reicht von oberhalb der Höhen des hauptsächlich konvektiven Transports ( $\approx 150$  hPa, 355 K oder 14 km) bis  $\approx 70$  hPa, 425 K oder 18,5 km. Meridional reicht die TTL von  $\approx 30^\circ$  Süd bis  $\approx 30^\circ$  Nord. Aufgrund der subtropischen Jetstreams und der dort herrschenden hohen potenziellen Vortizität gibt es bis unterhalb der TTL nur wenig meridionalen Austausch von Luft (vgl. Fueglistaler et al., 2009). Darüber befindet sich eine Zone mit regem Austausch zwischen den Tropen und Subtropen in Höhen der TTL. Oberhalb der TTL in der Stratosphäre bildet die sogenannte „tropical pipe“ eine Barriere zwischen tropischer

und subtropischer Luft (siehe zum Beispiel Plumb, 1996). Über das ganze Jahr hinweg steigt Luft über den Tropen auf und erreicht über verschiedene Prozesse die Stratosphäre.

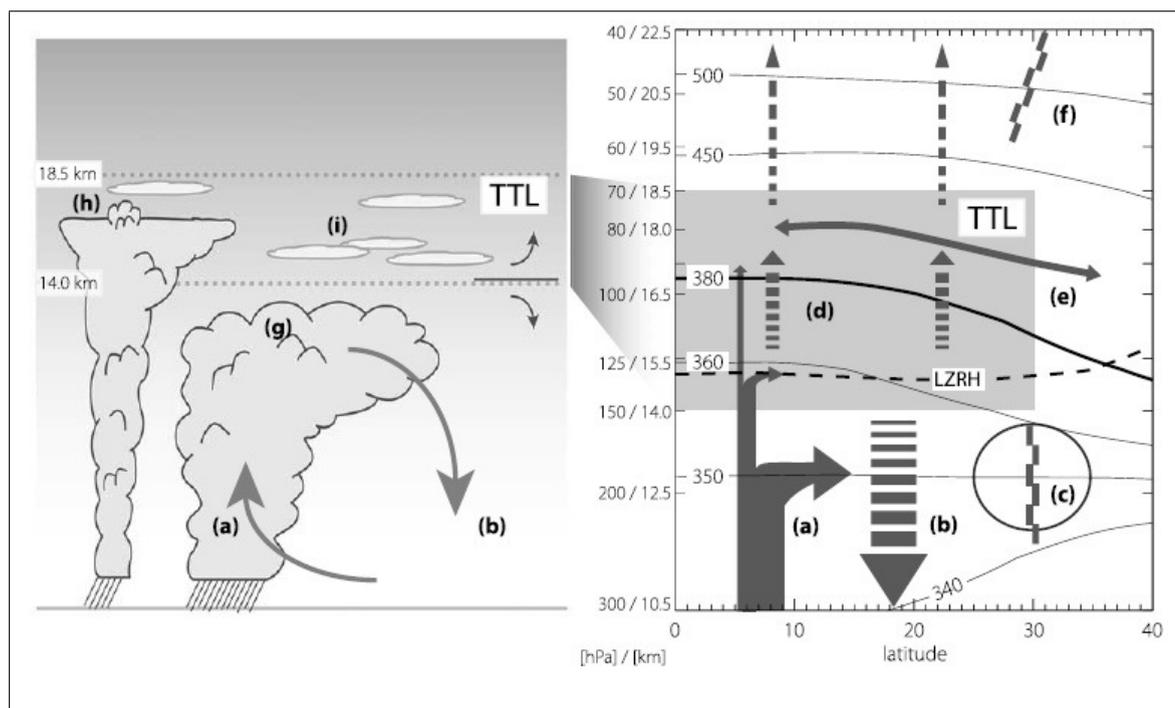


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung von (links) Wolkenprozessen und Transport und (rechts) zonal gemittelter Zirkulation (Quelle: Fueglistaler et al., 2009)

In Abbildung 2.6 wird die TTL in Zusammenhang mit verschiedenen atmosphärischen Größen und Transportmechanismen gebracht. Es folgt eine kurze Beschreibung, was die Abbildung zeigt: Die Pfeile bedeuten Zirkulation, die schwarze gestrichelte Linie ist die Grenze, bei der bei klarem Himmel die Aufheizung der Luft durch Strahlung der Sonne mit der Emission im Gleichgewicht steht (englisch: clear-sky level of zero net radiative heating (LZRH)). Schwarze durchgezogene Linien sind die Isentropen (bzw. Linien gleicher potenzieller Temperatur, gegeben in K) nach der 40-Jahres Reanalyse („ERA-40“ des European Centre for Medium Range Weather Forecast (ECMWF)). Bei (a) herrscht „deep convection“ (zu Deutsch etwa „hochreichende Konvektion“) mit einem oberen Ende des Aufwärtstransports und dem damit verbundenen größten horizontalen Ausströmen der Luft (nördlicher bzw. südlicher Transport) bei circa 200 hPa. In der sich darüber befindenden TTL nimmt der vertikale Transport rasch ab und reicht nur selten bis über die Höhe der Tropopause hinauf. Reicht aber diese Konvektion bis zur Tropopause oder zumindest bis über das LZRH hinaus, so spricht man von „overshooting convection“ (zu Deutsch etwa „überschießende Konvektion“). Bei (b) findet eine Abkühlung durch eine die Absorption überwindende Abstrahlung von Energie statt (englisch: radiati-

ve cooling). Dies führt zu absinkender Luft. Bei **(c)** befinden sich die subtropischen Jetstreams, welche eine Transportbarriere für den quasi-isentropen Luftaustausch zwischen der tropischen und extratropischen Stratosphäre darstellen. Bei **(d)** wird die Luft erwärmt, da hier mehr Strahlung absorbiert als emittiert wird (englisch: radiative heating). Dies führt zu einem diabatischen Aufsteigen der Luft. Bei **(e)** findet ein rascher meridionaler Transport von Spurengasen und Luftdurchmischung entlang der Isentropen statt, welcher oberhalb und unterhalb der TTL blockiert ist. **(f)** kennzeichnet den Rand der „tropical pipe“-Zone, durch welche tropische Luft in der Stratosphäre nur sehr wenig Austausch mit extratropischer Luft erfährt. Außerhalb dieser Zone findet eine stärkere Durchmischung der Luft statt. Bei **(g)** befindet sich eine durch „deep convection“ entstandene Wolke. Bei **(h)** ist eine Wolke dargestellt, wie sie bei „overshooting convection“ aussähe. Diese Art von Konvektion ist dadurch gekennzeichnet, dass sie über das LZRH hinausreicht und durch das darüber erfolgende Aufsteigen von Luft troposphärische Luft direkt in die Stratosphäre gelangt. **(i)** ist gekennzeichnet durch optisch dünne Zirruswolken, die sich horizontal weit erstrecken können und welche häufig in situ entstanden sind (Fueglistaler et al., 2009).

Die oben genannten Konzepte der „deep convection“ und der „overshooting convection“ wurden durch die Arbeiten von Newell und Gould-Stewart (1981) begründet. In dieser Veröffentlichung wird ein „stratospheric fountain“ (auf Deutsch etwa: stratosphärischer Springbrunnen) postuliert, womit die Autoren meinten, dass außergewöhnlich starke und teils in die Stratosphäre reichende Konvektion über dem westlichen Pazifik, Nordaustralien, Indonesien und Malaysia zwischen November und März auftreten kann, sowie in der Monsunzeit über dem Golf von Bengalen und Indien.

Nach diesem kurzen Exkurs über die Eigenschaften der TTL werden nun verschiedene Prozesse beschrieben, wie der Transport troposphärischer Luft über den Tropen in die Stratosphäre vonstatten gehen kann.

Ein möglicher Transportweg aus der Troposphäre in die Stratosphäre ist der Transport von Luft entlang der Isentropen von der oberen tropischen Troposphäre in die untere Stratosphäre in höheren Breiten, ähnlich wie weiter oben schon als Punkt **(e)** in Abbildung 2.6 beschrieben. Der in der Abbildung dargestellte Transport läuft nur innerhalb der Stratosphäre entlang einer Isentropen, jedoch kann eine solche Isentrope von der Troposphäre oberhalb der Tropen in höheren Breiten in die Stratosphäre eintreten. Analog zu diesem Transportweg kann auch ein extratropischer Austausch troposphärischer und stratosphärischer Luft stattfinden, wenn es zu „Falten“ in der Tropopausenhöhe in meridionaler Richtung kommt, also eine starke Abweichung von der normalen Tropopausenhöhe lokal auftritt. Dann kann ebenso über isentropen Transport von Luft troposphärische Luft in die Stratosphäre

---

gelangen. Diese beiden Transportwege werden beschrieben in Holton et al. (1995).

Wie in Unterkapitel 2.6 beschrieben, wurde von Brewer (1949) zum ersten Mal von der Existenz einer großskaligen Zirkulation in der Stratosphäre geschrieben, wobei auch das Konzept einer „cold trap“ (etwa: „Kältefalle“) entstand, da bei dieser Zirkulation die troposphärische Luft durch die kalte tropische Tropopause in die Stratosphäre eindringt und dabei durch Kondensation extrem niedrige Wasserdampfmischungsverhältnisse erreicht werden. Holton und Gettelman (2001) haben untersucht, wie sich ein langsames Aufsteigen von Luft durch die TTL auf den  $\text{H}_2\text{O}$ -Gehalt der Stratosphäre auswirkt. Dieser Prozess nennt sich graduelle Dehydrierung. Die vertikale Geschwindigkeit von aufsteigenden Luftpaketen in der TTL, welche sich nicht in Konvektionszellen befinden, ist im globalen Mittel in etwa  $0.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$ . Die horizontale Bewegung dieser Luftpakete geschieht mit einer Geschwindigkeit von etwa  $5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ , also um einen Faktor  $10^4$  schneller. Während eines Aufstiegs von wenigen hundert Metern werden einige tausend Kilometer horizontal zurückgelegt. Für die Wasserdampfkonzentration bei Eintritt in die Stratosphäre spielt also neben dem vertikalen Temperaturgradienten auch der horizontale Transport eine Rolle. Das Luftpaket enthält das Mischungsverhältnis von Wasserdampf, welches dem niedrigsten Sättigungsdampfdruck - bei der niedrigsten Temperatur - entspricht, welchen das Luftpaket auf seinem Weg annimmt. Ein großer Teil der Luft nimmt den Weg durch die TTL über dem westlichen Pazifik, wo die Tropopausentemperatur minimal ist aufgrund der starken Konvektion durch die extrem hohen SST (Sea Surface Temperatures), weswegen diese Region an der Erdoberfläche auch Warm Pool genannt wird. Holton und Gettelman (2001) schränken nun das durch Brewer (1949) aufgekommene Konzept der „cold trap“ auf diesen Ort über dem Warm Pool in der TTL ein, und bezeichnen diese Region der TTL als „cold trap“. Den schnellen horizontalen Transport im Vergleich zum vertikalen Transport und retrospektive Modellierungen von Trajektorien von Luftpaketen ziehen die Autoren als Erklärung für den sehr geringen Wasserdampfgehalt in der unteren Stratosphäre heran.

Ein weiterer Mechanismus für den  $\text{H}_2\text{O}$ -Transport in die Stratosphäre ist „ice lofting“, wie in Moyer et al. (1996) beschrieben. Hierbei spielen die weiter oben erwähnten Konzepte der deep convection und des convective overshootings eine tragende Rolle. Das ice lofting kann auftreten, wenn starke Konvektionszellen Eispartikel direkt in die obere TTL oder untere Stratosphäre transportieren. Diese Art von Transport lässt sich durch Messungen des Isotopenverhältnisses  $\frac{\text{HDO}}{\text{H}_2\text{O}}$  nachweisen. Bei einem wie im letzten Absatz beschriebenen graduellen Ausfrieren des Wasserdampfes bei langsamer Abkühlung der Luft wird aufgrund des geringeren Dampfdruckes des etwas schwereren HDO, verhältnismäßig mehr von diesem Gas zu Eis als von  $\text{H}_2\text{O}$  (Steinwagner et al., 2007). Eine gängige Größe, in der das Verhältnis  $\frac{\text{HDO}}{\text{H}_2\text{O}}$  angegeben wird ist  $\delta D = \left( \frac{\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}}{(\text{HDO}/\text{H}_2\text{O})_{\text{SMOW}}} - 1 \right) * 1000$  in [‰], wobei

$(\text{HDO}/\text{H}_2\text{O})_{\text{SMOW}} = 3,115 * 10^{-4}$  das Standard Isotopenverhältnis von Meerwasser ist (Vienna **S**tandard **M**ean **O**cean **W**ater). Im Falle des langsamen Ausfrierens würde  $\delta\text{D}$  der Kurve der sogenannten Rayleigh-Fraktionierung folgen, welche die stabile isotopische Entwicklung eines homogenen Reservoirs beschreibt, von welchem nach und nach ein Isotop entnommen wird, bzw. welche die Änderung des Isotopenverhältnisses während einer pseudoadiabatischen Zustandsänderung beschreibt (Smith et al., 2006). Beim ice lofting wird jedoch HDO-reiches Wasser in Eisform aus niedrigeren Luftschichten in die Stratosphäre transportiert werden und wird dort wieder zu Wasserdampf. Ein anderer Mechanismus für den Transport von  $\text{H}_2\text{O}$  in die Stratosphäre ist das oben erwähnte Phänomen des convective overshooting, also über das LZRH hinausreichende Konvektion. Dies ist ein adiabatischer Prozess und führt deshalb zu extrem niedrigen Temperaturen. Die Höhe, in welcher das Ausströmen von Luft aus einer Konvektionszelle geschieht (**L**evel of **N**eutral **B**uoyancy (**LNB**)), wird einerseits bestimmt durch die äquivalente potenzielle Temperatur  $\Theta_e$  des Luftpakets auf Bodenniveau, bis zu der das Paket aufsteigen würde, sollte es keine Mischung mit anderer Luft geben und wenn keine Kondensations- oder Verdampfungsprozesse ablaufen würden. Des weiteren spielt die konvektiv verfügbare potenzielle Energie (convectively available potential temperature (CAPE)) eine Rolle (Fueglistaler et al., 2009). Wenn in dem Luftpaket enthaltener Wasserdampf die Phase von gasförmig zu flüssig wechselt, oder in einem zweiten Schritt von flüssig zu eisförmig, wird Energie freigesetzt, welche  $\Theta_e$  merklich erhöhen kann (Danielsen, 1993). Ein letzter Faktor ist die Einmischung anderer Luftmassen. Haben diese eine höhere äquivalente potenzielle Temperatur, führt dies ebenso zu einer Anhebung von  $\Theta_e$  des betrachteten Luftpakets (Fueglistaler et al., 2009).

Eine Theorie ist, dass mit einer über die Tropopause hinausreichenden Konvektion ein sehr niedriger Wasserdampfgehalt beim Ausströmen der Luft aus der Konvektionszelle in die Stratosphäre einher geht (vgl. unter anderem: Sherwood und Dessler, 2000, und Referenzen darin), da bei der starken Abkühlung beim Aufsteigen des Luftpakets ein großer Teil des mitgeführten Wasserdampfs kondensiert. Ein Befund, welcher jedoch dieser Theorie des Transports von trockener Luft in die Stratosphäre durch hochreichende Konvektion widerspricht, ist in Corti et al. (2008) gegeben. Hier haben die Autoren in zwei Flugzeugkampagnen (TROCCINOX und SCOUT-O3) Hinweise auf eine Befeuchtung der Stratosphäre durch hochreichende Konvektion gefunden. Die Erklärung hierfür ist, dass für die Sedimentierung von Wasserdampf eine gewisse Zeit notwendig ist, welche nicht unbedingt beim schnellen Aufsteigen von Luft bei overshooting convection gegeben ist. Die Autoren weisen jedoch auch darauf hin, dass die in der Stratosphäre gefundenen und langsam verdampfenden Eiskristalle teilweise wieder in die Troposphäre absinken könnten.

## 2.6 Zirkulation in der Stratosphäre

Zuerst wurden Hinweise auf eine globale Zirkulation in der Stratosphäre von Brewer (1949) erkannt, welche er anhand von Helium- und Wasserdampfverteilungen in der Stratosphäre ableitete. Der Ausgangspunkt für seine Ideen, dass der Transport aus der Troposphäre in die Stratosphäre durch die tropische Tropopause vonstatten gehen konnte, waren Messungen von Wasserdampf über Südengland, bei welchen durchwegs das Mischungsverhältnis von Wasserdampf in Höhe der Tropopause viel stärker abnahm, als es aufgrund der dortigen Temperatur der Tropopause der Fall sein hätte müssen. Diese geringen Wasserdampfkonzentrationen in der Stratosphäre interpretierte er so, dass der Transport von Luft durch die kalte tropische Tropopause vonstatten gehen muss. Dobson (1956) folgerte aus minimalen tropischen Ozonwerten, dass Ozon von dem Ort seiner photochemischen Produktion weg transportiert werden muss, hin zu extratropischen Regionen. Zusammengenommen folgte aus diesen Beobachtungen und Überlegungen die Existenz einer großskaligen Zirkulation, der sogenannten Brewer-Dobson-Zirkulation (BDC), bei welcher Luft in der Stratosphäre in niedrigen Breiten aufsteigt, in der oberen Stratosphäre polwärts transportiert wird und über den Polen absinkt. Seit diesen Entdeckungen wurden einige Studien über die BDC durchgeführt, in welchen die Stärke, Ursachen und der jährliche Zyklus untersucht wurden. Die Energie, um diesen Kreislaufprozess anzutreiben, kommt aus der Deponierung von Drehmoment durch das Zusammenbrechen von außertropischen planetarischen Wellen (Shepherd, 2000). Die beobachtete jährliche Schwankung in der Stärke der BDC wird von Yulaeva et al. (1994) auf eine stärkere Deponierung von Drehmoment im Nordwinter als im Südwinter zurückgeführt. Im Allgemeinen ist die Zone in der Stratosphäre in welcher planetare Wellen brechen und somit die BDC antreiben können in der Winterhemisphäre deutlich größer und stärker ausgeprägt. Auf der Nordhemisphäre herrscht zudem allgemein eine stärkere Wellenaktivität, was durch die unregelmäßigere Erdoberflächenstruktur sowie den Land-Meer-Kontrast begünstigt ist (Vallis, 2008).

## 2.7 Atmosphärische Signale in der Stratosphäre

Die Temperatur in der atmosphärischen Luft sowie damit zusammenhängend die Konzentration vieler Gase unterliegt periodischen Schwankungen mit verschiedenen Frequenzen und Amplituden. Den stärksten Einfluss hat häufig eine jährliche Schwingung, welche in der Troposphäre auf der Nordhalbkugel NAM (Northern Annular Mode) und auf der Südhalbkugel SAM (Southern Annular Mode) genannt wird. In der unteren Stratosphäre über den Tropen wird eine jährliche Oszillation in Temperaturen und vertikalen Transportgeschwindigkeiten von der BDC angetrie-

---

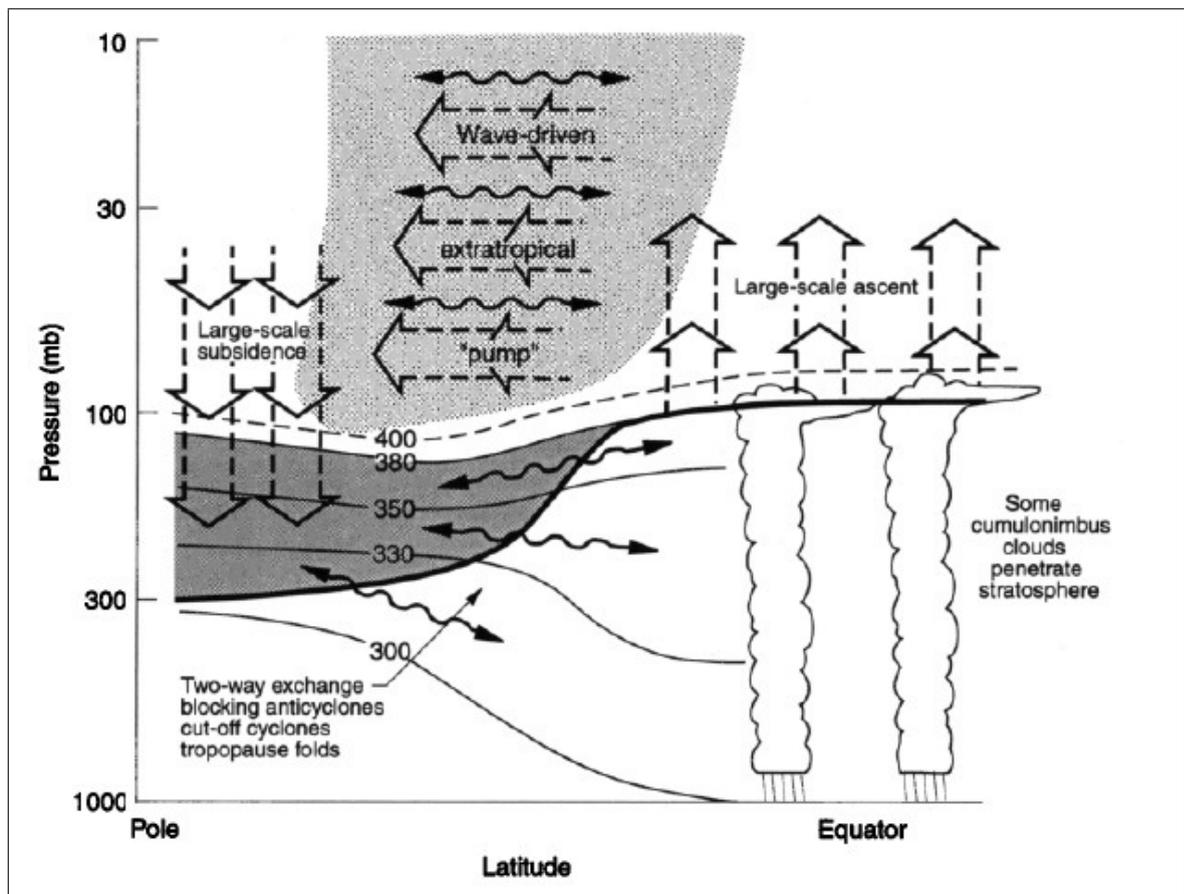


Abbildung 2.7: Brewer-Dobson-Zirkulation (Quelle: Holton et al., 1995)

ben, was über die Auswirkung auf die Temperatur der Tropopause Einfluss auf die Mischungsverhältnisse von Wasserdampf bei Eintritt in die Stratosphäre ausübt. In der TTL und vor allem der untersten Stratosphäre dominiert diese jährliche Schwankung über andere atmosphärische Einflüsse, und dieses Signal ist deutlich stärker ausgeprägt als es in der oberen Troposphäre der Fall ist. Die maximalen Temperaturwerte werden im nordhemisphärischen Sommer angenommen und die minimalen im nordhemisphärischen Winter. In einer Höhe, welche einem Druckniveau von ca. 40 - 30 hPa entspricht, geht die jährliche Schwankung über den Tropen in eine halbjährliche Schwankung (SAO) über, wobei die Maxima im Mai und November und die Minima im Januar und August auftreten. Die Theorie, dass diese halbjährliche Schwankung durch eine Aufheizung des Ozons durch die in den Tropen zweimal im Jahr im Zenit stehende Sonne erklärt werden könnte, konnte nicht bestätigt werden, da der Effekt zu schwach ist, um die auftretenden Amplituden zu erklären (Reid, 1994). Jedoch zeigen Hitchman und Leovy (1988), dass Kelvin- sowie Gravitationswellen die halbjährliche Oszillation antreiben.

Der Tageszyklus, welcher dadurch entsteht, dass die Atmosphäre abwechselnd Sonnenlicht und dem Erdschatten ausgesetzt ist, hat lediglich geringe Auswirkun-

gen auf den Wasserdampfgehalt in der Stratosphäre. Nach Haefele et al. (2008) sind Tagesschwankungen im Wasserdampf von ca. 1 % sind zu erwarten und werden hauptsächlich von meridionaler Advektion bestimmt.

Eine andere Schwingung ist die „**Q**uasi-**B**iennial **O**scillation“ (QBO), welche eine Schwingungsdauer von etwa 28 Monaten hat. Als QBO werden abwärts wandernde Winde in der tropischen Stratosphäre bezeichnet, welche abwechselnd ostwärts oder westwärts gerichtet sind und Einfluss auf die Temperatur sowie Gaskonzentrationen nehmen. Über die Brewer-Dobson-Zirkulation nimmt die QBO auch Einfluss auf Gebiete außerhalb der Tropen. Die antreibende Kraft hinter der QBO sind aufsteigende außertropische Kelvin- und Gravitationswellen (Baldwin et al., 2001). In Krüger et al. (2008) wurden Klimatologien der Orte in der Atmosphäre und den Temperaturen der kältesten Punkte von Transporttrajektorien (diese kältesten Punkte der Trajektorien nennen sich **L**agrangian **C**old **P**oints (LCP)) aus der Troposphäre in die Stratosphäre unter Verwendung von ERA40 (ECMWF (**E**uropean **C**entre for **M**edium **R**ange **W**eather **F**orecast) Reanalyse über 40 Jahre, Uppala et al. (2005)) erstellt. Eine Analyse des Zusammenhangs dieser LCP mit der QBO hat zum Ergebnis, dass die LCP im Mittel kälter sind, falls die Ostphase der QBO sich in Höhe der Tropopause befindet. Umgekehrt sind die mittleren LCP wärmer während der Westphase der QBO. Über die Modulation der Tropopausentemperatur und somit der LCP der Trajektorien aus der Troposphäre in die Stratosphäre, werden die Mischungsverhältnisse von Wasserdampf in der unteren Stratosphäre beeinflusst.

Eine sehr unregelmäßige Oszillation ist die ENSO (**E**l **N**iño **S**outhern **O**scillation), mit einer Schwingungsdauer von zwischen zwei bis sieben Jahren, wobei die – bezüglich von Anomalien in den SST (**S**ea **S**urface **T**emperature, Meeresoberflächentemperaturen) gegensätzlichen – Effekte von El Niño und La Niña im Durchschnitt alle vier Jahre auftreten. Diese SST-Schwankungen besitzen eine lokal starke Auswirkung auf Temperaturen in der Troposphäre. Die Untersuchung des Zusammenhangs in Krüger et al. (2008) ergab höhere LCP-Temperaturen bei El Niño bzw. kältere LCP-Temperaturen bei La Niña, was in der unteren Stratosphäre höhere bzw. niedrigere VMR-Werte für H<sub>2</sub>O impliziert. Ähnliche Ergebnisse werden in Rosenlof und Reid (2008) vorgestellt, wo eine Verbindung zwischen SST und unter anderem der Tropopausentemperatur untersucht wird. In dieser Veröffentlichung wurden Anomalien der Tropopausentemperatur aus Ballonsondenmessungen lokal über dem Warm Pool mit dortigen SST-Anomalien verglichen und – hauptsächlich in den Jahren zwischen ca. 1999 bis zum Ende der Messungen 2005 – eine Antikorrelation zwischen diesen beiden Zeitreihen festgestellt.

Vulkanische Aerosole können im Falle eines hohen Aufsteigens in der Atmosphäre die stratosphärischen Mischungsverhältnisse von Wasserdampf beeinflussen. Falls die Aerosolkonzentration in der TTL und unteren Stratosphäre ansteigen, so steigt auch

---

die Absorption von Sonnenlicht an und führt damit zu höheren Temperaturwerten, was wiederum einen Transport von Luft in die Stratosphäre zulässt, welche reich an Wasserdampf ist (Hervig et al., 1995). Gleiche Ergebnisse finden sich auch in den Studien in Krüger et al. (2008) bezüglich der LCP der Trajektorien aus der Troposphäre in die Stratosphäre.

Einen weiteren Einfluss auf die Zusammensetzung und Temperaturverteilung der Stratosphäre übt der solare Zyklus aus, mit einer Schwingungsdauer von elf Jahren. Der Ursprung dieser Schwingung liegt in einer periodischen Abfolge in der Anzahl von Sonnenflecken auf der Oberfläche der Sonne. Je mehr Sonnenflecken vorhanden sind, desto größer ist der Strom von Photonen, welche die Erdatmosphäre erreichen. Diese Schwingung wirkt sich hauptsächlich auf die Temperatur, den Gehalt von Ozon, Winde, Wolken, Niederschlag, Monsune sowie die NAO (North Atlantic Oscillation) aus (Gray et al., 2010). Egorova et al. (2005) schreiben jedoch, dass auch Methan und Wasserdampf von dieser Oszillation beeinflusst werden. Die Photolyserate von sowohl  $\text{CH}_4$  als auch  $\text{H}_2\text{O}$  verändert sich im Laufe des solaren Zyklus um einen Faktor von zwei, nimmt jedoch stark von der Stratopause bis zur Tropopause ab. In der tropischen Stratosphäre ergibt sich beim Sonnenflecken-Maximum allerdings nicht ein geringerer, sondern ein um 1 – 2% erhöhter Wasserdampfgehalt, da der photochemische Prozess der  $\text{CH}_4$ -Oxidation verstärkt wird. Ein Einfluss auf die Tropopausentemperaturen bzw. der LCP von Trajektorien aus der Troposphäre in die Stratosphäre wurde in Krüger et al. (2008) gefunden, wobei geringere LCP-Temperaturen während des solaren Maximums über dem westlichen Pazifik und wärmere LCP-Temperaturen über dem östlichen Pazifik festgestellt wurden. Ein umgekehrtes Signal tritt bei solarem Minimum auf.

## 2.8 Satellitenmessinstrumente

In diesem Unterkapitel werden verschiedene Instrumente auf diversen Satelliten vorgestellt. Zunächst werden diejenigen Messgeräte kurz beschrieben, welche Wasserdampfmessungen in einer von der Nadir-Geometrie (zur Definition siehe Unterkapitel 3.3.1) verschiedenen Messgeometrie durchführen bzw. durchgeführt haben. Zudem werden im Anschluss daran jene Messgeräte beschrieben, von denen Temperaturmessungen in dieser Arbeit Daten verwendet wurden.

### 2.8.1 Übersicht über die stratosphärischen Wasserdampf messenden limb-sounding Satelliteninstrumente

Wasserdampfmessungen in der Stratosphäre wurden mittlerweile schon von vielen Messinstrumenten auf Satelliten durchgeführt, wobei diese Messungen in un-

---

terschiedlichen Messgeometrien sowie spektralen Bereichen vorgenommen wurden. Diese Instrumente spielten und spielen eine große Rolle für unsere Kenntnis und unser Verständnis der atmosphärischen Verteilung und Variabilität dieses Gases.

Erste Messungen von Wasserdampf wurden durch das Instrument LRIR (Limb Radiance Inversion Radiometer, Gille et al., 1980) von dem Satelliten Nimbus-6 aus vorgenommen, welcher am 12. Juni 1975 gestartet ist. Die Mischungsverhältnisse von Wasserdampf wurden bei diesem Instrument aus Messungen im infraroten Spektralbereich berechnet, wobei die Kalibrierung in dem verwendeten Kanal jedoch Schwierigkeiten bereitete. Die ersten verwertbaren Messungen kamen von den zwei Instrumenten SAMS (Stratospheric And Mesospheric Sounder, Drummond et al., 1980) und LIMS (Limb Infrared Monitor of the Stratosphere, vergleiche Gille et al., 1980; Remsberg et al., 2009) auf dem Satelliten Nimbus-7, welcher im Oktober 1978 gestartet wurde. Während das Instrument SAMS sowohl in einem Band um eine Wellenlänge von  $2,7 \mu\text{m}$  als auch zwischen  $25 \mu\text{m}$  und  $100 \mu\text{m}$  gemessen hat, führte LIMS Messungen von Wasserdampf in einem um  $6,3 \mu\text{m}$  zentrierten spektralen Band durch. Die LIMS-Messungen dauerten lediglich sieben Monate bis Mai 1979 an, und die Messungen von SAMS reichten bis Juni 1983.

Ein weiteres frühes Satelliteninstrument, welches unter anderem Informationen über die Mischungsverhältnisse von Wasserdampf sammelte, war SAGE II (Stratospheric Aerosol and Gas Experiment II, Mauldin III et al., 1985) auf dem Satelliten ERBS (Earth Radiation Budget Satellite). Dieses Instrument ist ein Okkultationsmessgerät (für die Definition siehe Unterkapitel 3.3.1), welches im Oktober 1984 gestartet wurde und über einen langen Zeitraum hinweg Messungen bis 2005 lieferte. Es wurde die Zusammensetzung der Strahlung in sieben verschiedenen spektralen Bändern zwischen 385 nm und 1020 nm bestimmt, wobei die Bandbreite der meisten Bänder zwischen 10 nm und 20 nm lag. Die Wasserdampfmessungen erfolgten im Frequenzbereich von dessen Absorptionsbande bei 940 nm. Das Nachfolgeinstrument SAGE III (Thomason und Taha, 2003) wurde im Dezember 2001 gestartet und hat bis Dezember 2005 Messungen durchgeführt.

Der am 12. September 1991 gestartete Satellit UARS (Upper Atmospheric Research Satellite, Reber et al., 1993) beherbergte gleich vier Instrumente, welche in der Lage waren, atmosphärischen Wasserdampf zu messen. Eines dieser Instrumente war HALOE (HALogen Occultation Experiment, Russell III et al., 1993), welches Daten zwischen Oktober 1991 und November 2005 bezüglich mehrerer Komponenten der Atmosphäre lieferte, unter anderem auch von Wasserdampf. Die Wasserdampfdaten dieses Instruments werden in dieser Arbeit als einer von zwei Datensätzen zur Konstruktion einer kombinierten Wasserdampfzeitreihe verwendet. Eine Beschreibung dieses Instruments wird in Unterkapitel 3.2 gegeben. Die drei anderen Instrumente nannten sich MLS (Microwave Limb Sounder; für allgemeine Informationen über

---

das Instrument siehe Barath et al. (1993) und in Pumphrey (1999) findet sich eine Beschreibung des Wasserdampfretrievals), ISAMS (Improved Stratospheric and Mesospheric Sounder, Taylor et al., 1993) und CLAES (Cryogenic Limb Array Etalon Spectrometer, Roche et al., 1993). Das MLS Instrument verwendete Kanäle in der Mikrowellenregion des Wellenlängenspektrums. Für Wasserdampf wurde die Linie bei 183 GHz verwendet. Die allgemeinen Messungen von MLS endeten, deutlich früher als die von HALOE, im Juli 1999, und die Wasserdampfmessungen sogar schon im April 1993. Eine ebenfalls sehr kurze Lebensdauer wiesen die beiden im infraroten Wellenlängenbereich messenden Instrumente ISAMS und CLAES auf.

Im März 1998 wurde der französische Satellit SPOT 4 (Satellite Pour l'Observation de la Terre 4) mit dem Instrument POAM III (Polar Ozone and Aerosol Measurements III, Lucke et al., 1999) gestartet. Dieses Instrument maß in der solaren Okkultationsgeometrie und verwendete die gleiche Absorptionslinie bei 940 nm zur Bestimmung von Wasserdampfdaten wie SAGE II. POAM III funktionierte bis Dezember 2005. Die beiden solaren Okkultationsmessgeräte ILAS (Improved Limb Atmospheric Sounder, Nakajima et al., 2002) und dessen Nachfolger ILAS II (Nakajima et al., 2006) auf den Satelliten ADEOS-I (Advanced Earth Observing Satellite I) und ADEOS-II, respektive, funktionierten jeweils nur wenige Monate. ILAS I lieferte Messungen von Oktober 1996 bis Juni 1997 und ILAS II von April bis Oktober 2003. Beide Instrumente haben im Spektralbereich der Infrarotstrahlung gemessen.

Der schwedische Satellit Odin wurde am 20. Februar 2001 gestartet, mit dem Instrument SMR (Sub-Millimetre Radiometer, Urban et al., 2007) an Bord, welches in Frequenzbereichen zwischen 486 GHz und 580 GHz und bei 119 GHz misst. Das Wasserdampfretrieval wird unter Verwendung der Wasserdampfemissionsbande um 488,5 GHz herum durchgeführt.

Auf dem Europäischen Satelliten Envisat (Environmental Satellite), welcher kurz nach Odin, am 1. März 2002 gestartet wurde, befanden sich drei Instrumente, welche Wasserdampf in der besagten Höhenregion gemessen haben, namentlich MIPAS (Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding, Fischer und Oelhaf, 1996; Fischer et al., 2008), SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption spectrometer for Atmospheric CHartographY, siehe Noël et al. (1998) für eine allgemeine Beschreibung und Rozanov et al. (2011) für eine Beschreibung des Retrievals von Wasserdampf) und GOMOS (Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars, Kyrolä et al., 2004). MIPAS ist neben HALOE das zweite Messgerät, dessen Messwerte von Wasserdampf zur Konstruktion der kombinierten Zeitreihe verwendet wurden. Eine Beschreibung dieses Instruments wird in Unterkapitel 3.1 gegeben. SCIAMACHY hat in allen drei möglichen Messmodi Messungen vorgenommen, wobei in dem ersten Modus Nadir-Beobachtungen der Atmosphäre gemacht werden, im zweiten Modus in Limb-Geometrie gemessen wurde und im dritten Modus solare Sonnenauf-

gangsmessungen sowie lunare Mondaufgangsmessungen durchgeführt wurden. Der spektrale Bereich der Messungen war dementsprechend sehr ausgedehnt und reichte vom UV-Bereich (240 nm) bis zum nahen Infrarotbereich (2380 nm). GOMOS war ein Messgerät, welches in stellarer Okkultation gegen geeignete Sterne in einem Frequenzbereich vom nahen Infrarot bis in den UV-Bereich hinein gemessen hat. Am 8.4.2012 brachen die Datenübertragungen von Envisat ab.

Im August 2003 wurde der kanadische Satellit SciSat (Science Satellite) im Zuge der Mission ACE (Atmospheric Chemistry Experiment) in seine Erdumlaufbahn gebracht. Ein Instrument zur Messung atmosphärischen Wasserdampfs auf diesem Satelliten ist das FTS-Messgerät (Fourier Transform Spectrometer, Bernath et al., 2005), welches in solarer Okkultationsgeometrie Messungen in einem Wellenlängenbereich zwischen  $2,2 \mu\text{m}$  und  $13,3 \mu\text{m}$  durchführt. Ein weiteres Instrument an Bord dieses Satelliten ist MAESTRO (Measurements of Aerosol Extinction in the Stratosphere and Troposphere Retrieved by Occultation, Sioris et al., 2010), welches Wasserdampfsignaturen in einem Spektralbereich zwischen 926 nm und 970 nm nutzt, um mittels solarer Okkultationsmessungen Informationen über die Mischungsverhältnisse dieses Gases zu erlangen.

Etwa ein Jahr später, im Juli 2004, wurde der Satellit Aura gestartet. Für Wasserdampfmessungen von diesem Satelliten aus ist unter anderem das Instrument EOS MLS (Earth Observing System Microwave Limb Sounder) zuständig, der Nachfolger von UARS/MLS. Zusätzlich zu diesem Instrument befindet sich auch das Instrument HIRDLS (High Resolution Dynamics Limb Sounder, Gille et al., 2008) an Bord dieses Satelliten. Beim Start des Satelliten wurde der Hauptteil der Optik des Instruments verdeckt und es mussten viele Anpassungen vorgenommen werden, um dennoch Daten von diesem limb-sounding Messinstrument zu erhalten. Die Wasserdampfmessungen werden in einem Wellenzahlbereich zwischen  $1387 \text{ cm}^{-1}$  und  $1432,2 \text{ cm}^{-1}$  vorgenommen.

Ein weiterer Satellit mit einem Gerät an Bord, welches unter anderem für Wasserdampfmessungen ausgelegt ist, ist AIM (Aeronomy of Ice in the Mesosphere, Russell III et al., 2009). Dieser Satellit ist am 25. April 2007 mit dem Instrument SOFIE (Solar Occultation For Ice Experiment, Gordley et al., 2008) an Bord gestartet, welches in solarer Okkultationsgeometrie in Wellenlängenbereichen zwischen  $2,6 \mu\text{m}$  und  $2,45 \mu\text{m}$  misst.

Das Instrument SMILES (Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder, Kikuchi et al., 2010) befindet sich seit September 2009 auf der ISS (International Space Station) in dem Japanese Experiment Module (JEM). Dieses limb-sounding Instrument hat zwar keinen spektralen Kanal, in dem sich Wasserdampfemissionslinien befinden, es werden jedoch Informationen über Wasserdampf aus dem Wasserdampfkontinuum erhalten. Seit 2010 ist dieses Messgerät nicht mehr

---

funktionsfähig.

Im Laufe der Zeit gab es auch einige Messkampagnen, bei denen Space Shuttles unter anderem Wasserdampf messende Instrumente in die Erdumlaufbahn brachten und wieder einsammelten. Diese Missionen waren alle von deutlich kürzerer Dauer. Die erste derartige Kampagne war Mitte der 80er Jahre.

### **2.8.2 Liste einiger Satelliteninstrumente, welche Temperaturmessungen der Atmosphäre durchführen**

In diesem Unterkapitel werden einige wenige Messinstrumente auf Satelliten vorgestellt, deren Daten über die Temperatur in der Atmosphäre im Zuge dieser Arbeit verwendet wurden (vergleiche Unterkapitel 5.3.2 und 6.4.2).

Zwei schon im vergangenen Unterkapitel über Wasserdampf messende Instrumente erwähnte Messgeräte, welche auch Messungen der atmosphärischen Temperaturen vornehmen, sind MIPAS/Envisat und EOS MLS auf dem Satelliten Aura.

Der Satellit Aqua, welcher wie Aura auch zum EOS gehört, wurde am 4. Mai 2002 gestartet, mit dem Instrument AIRS (Atmospheric Infrared Sounder, Aumann et al., 2003) an Bord. Dieses hat im mittleren Infrarotbereich Nadir- und sub-limb Strahlungsmessungen durchgeführt und daraus Temperaturverteilungen in der Stratosphäre abgeleitet (vergleiche Hoffmann und Alexander, 2009).

Der Satellit CHAMP (CHALLENGING Minisatellite Payload, Wickert et al., 2001; Hajj et al., 2004) wurde am 15. Juli 2000 gestartet und lieferte von Februar 2001 bis September 2010 Daten über globale vertikale Temperaturverteilungen in der Atmosphäre. Die Daten über die Temperaturen wurden aus der Abhängigkeit der Brechung von Signalen von GPS (Global Positioning System) Satelliten von verschiedenen Temperaturen und spezifischen Luftfeuchtigkeiten, sowie vom herrschenden Druck gewonnen. Am 21. November 2000 wurde der Satellit SAC-C (Satélite de Aplicaciones Científicas-C, Hajj et al., 2004) in seine Umlaufbahn gebracht. Zwei Satelliten wurden für die sogenannte GRACE Mission (Gravity Recovery And Climate Experiment, Tapley et al., 2004) im März 2002 gestartet. Sechs weitere Minisatelliten wurden am 15. April 2006 in einer Kooperation zwischen der National Space Organization (NSPO) in Taiwan und der University Corporation for Atmospheric Research (UCAR) in den USA gestartet. Diese Mission wurde in den USA COSMIC (Constellation Observing System for Meteorology, Ionosphere, and Climate) und in Taiwan FORMOSAT-3 (Formosa Satellite Mission 3) genannt, für mehr Details siehe Anthes et al. (2008). Sowohl bei SAC-C als auch bei GRACE und COSMIC/FORMOSAT-3 wurden - wie auch bei CHAMP - GPS Signale zur Temperaturbestimmung verwendet.

---

# Kapitel 3

## Messprinzipien

### 3.1 MIPAS/Envisat

Der Environmental Satellite (Envisat) wurde von der European Space Agency (ESA) am 1. März 2002 gestartet und hat verschiedene zur Umweltbeobachtung relevante Daten an die Erde gesendet, bis am 8.4.2012 die Datenverbindung abbrach. Er war ein fortschrittlicher polumlaufender Erdbeobachtungssatellit, auf welchem sich sieben Messgeräte (MIPAS, SCIAMACHY, MERIS, GOMOS, MWR, AATSR, RA-2) befanden, welche Messungen von Atmosphäre, Ozean, Land und Eis lieferten. Der Satellit umrundete die Erde einmal in circa 101 Minuten in einem sonnensynchronen Orbit in etwa 800 km Höhe über der Erdoberfläche. Die Bahn des Satelliten hatte eine Inklination von  $98,55^\circ$ . Er durchflog alle 35 Tage erneut den gleichen Orbit.

Das Instrument auf Envisat, dessen Messdaten in der Satellitengruppe vom IMK-ASF (Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Atmosphärische Spurengase und Fernerkundung) am KIT (Karlsruhe Institut für Technologie) verwendet und analysiert werden, ist das Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung (MIPAS) (Fischer und Oelhaf, 1996; Fischer et al., 2008), welches in Unterkapitel 2.8.1 erwähnt und in einer zeitlichen Abfolge der Wasserdampf messenden Satelliteninstrumente eingeordnet ist. Es dient zur Untersuchung der chemischen Zusammensetzung der Atmosphäre. Aus den von MIPAS gemessenen Interferogrammen werden Spektren ermittelt, welche zur Bestimmung von Temperatur- und Volumenmischungsverhältnis-Profilen verschiedener Spurengase verwendet werden.

#### 3.1.1 Messgeometrie

Im Unterschied zu anderen Instrumenten zur Atmosphärenbeobachtung, welche in Nadir-Geometrie das Objektiv direkt auf die Erdoberfläche gerichtet haben, hat

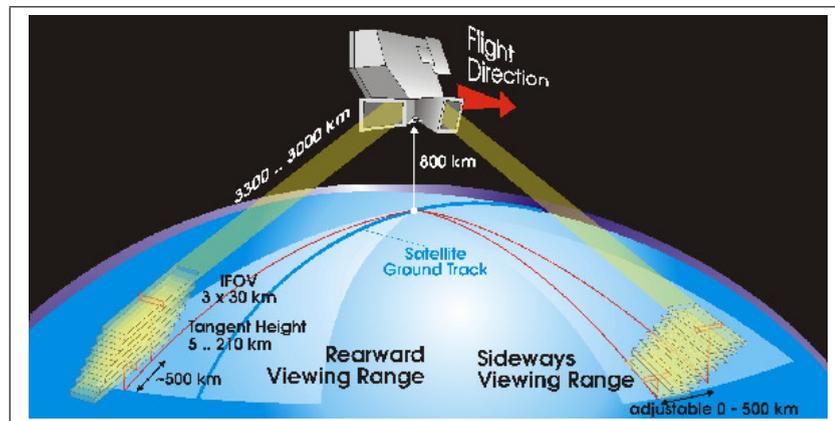


Abbildung 3.1: Beobachtungsgeometrie von MIPAS schematisch dargestellt, es sind Rückwärts- und Seitwärtsmessungen möglich (Quelle: ESA)

MIPAS in Horizontsondierung gemessen. Das bedeutet, der Sehstrahl führt durch die Atmosphäre tangential an der Erde vorbei. MIPAS hat thermische Emissionen der mittleren und oberen Atmosphäre (von ca. 8 km bis 68 km Höhe über der Erdoberfläche) gemessen, siehe Abbildung 3.1. Durch den sonnensynchronen Orbit sind alle Messungen von MIPAS nur zu zwei Zeiten gemessen worden, entweder 10 Uhr oder 22 Uhr Ortszeit.

Gemessen wird ein Interferogramm der entlang des Sehstrahls emittierten Strahldichte, wobei die atmosphärischen Emissionen aus verschiedenen Schichten der Atmosphäre stammen. Die Atmosphärenschicht, in welcher der Sehstrahl der Erde am nächsten ist, welche also tangential von ihm berührt wird, wird Tangentenhöhe genannt. Von dort stammt der größte Anteil der Strahldichte, aufgrund der höchsten Dichte der Luft an diesem Ort verglichen mit Luftdichten aus den höheren Schichten. Ein anderer Grund dafür ist, dass – wenn man sich die Erdatmosphäre als Luftschichten gleicher Dicke vorstellt wie in Abbildung 3.9 – der Teil des Sehstrahls in der Atmosphärenschicht mit der Tangentenhöhe als Untergrenze länger als jedes einzelne weitere Teilstück des Sehstrahls in anderen Schichten ist.

Durch einen Defekt am MIPAS-Gerät sind zwischen März 2004 und Dezember 2004 keine Messdaten vorhanden. Die Messgeometrien von vor dem Ausfall und danach unterscheiden sich voneinander (siehe unten, bzw. Anhang A).

Eine Messsequenz von MIPAS in der ersten Phase (genannt HR-Phase, von **H**igh **R**esolution) von MIPAS bis April 2004 begann im Standardmodus bei einer Tangentenhöhe von 68 km und wurde über die Höhen 60, 52, 47 und 42 km fortgesetzt, woraufhin es in Schritten von 3 km abwärts bis zu einer Höhe von 6 km weiterging. Damit ergaben sich über die gesamte Horizontsondierungssequenz 17 Tangentenhöhen. Eine vollständige Sequenz benötigte insgesamt etwa 81 Sekunden, während derer der Satellit eine Strecke von 500 km zurücklegte. Am Äquator sind zwei aufein-

ander folgende Orbits ungefähr 2800 km quer zur Flugrichtung voneinander entfernt (vergleiche Abbildung 3.2). MIPAS hat Strahlung aus einem Raumwinkel gemessen, welcher in der Tangentenhöhe ungefähr eine Höhe von 3 km und einer Breite von 30 km hatte. Die geringe vertikale Öffnung ermöglichte eine gute Höhenauflösung, und die größere horizontale Öffnung ließ mehr Strahlung in das Messgerät, was zu einem besseren Signal-zu-Rausch-Verhältnis führte. Maximal wurde bei der Ermittlung der Tangentenhöhe ein Fehler von 1,8 km gemacht (Kiefer et al., 2007). Beim Standardmodus während der zweiten Messphase (genannt RR-Phase, von **R**educed **R**esolution) von MIPAS – beginnend im Januar 2005, bis April 2012 – gab es bei einer Horizontsondierungssequenz 27 Tangentenhöhen. Die erste und oberste war bei einer Höhe von 70 km, die folgenden in einem Abstand von jeweils 4 km bis zu einer Höhe von 46 km, die nächsten in einem Abstand von je 3 km bis 31 km Höhe, die darauffolgenden in einem Abstand von jeweils 2 km bis in eine Höhe von 21 km und die untersten in einem Abstand von je 1,5 km bis 6 km Höhe.

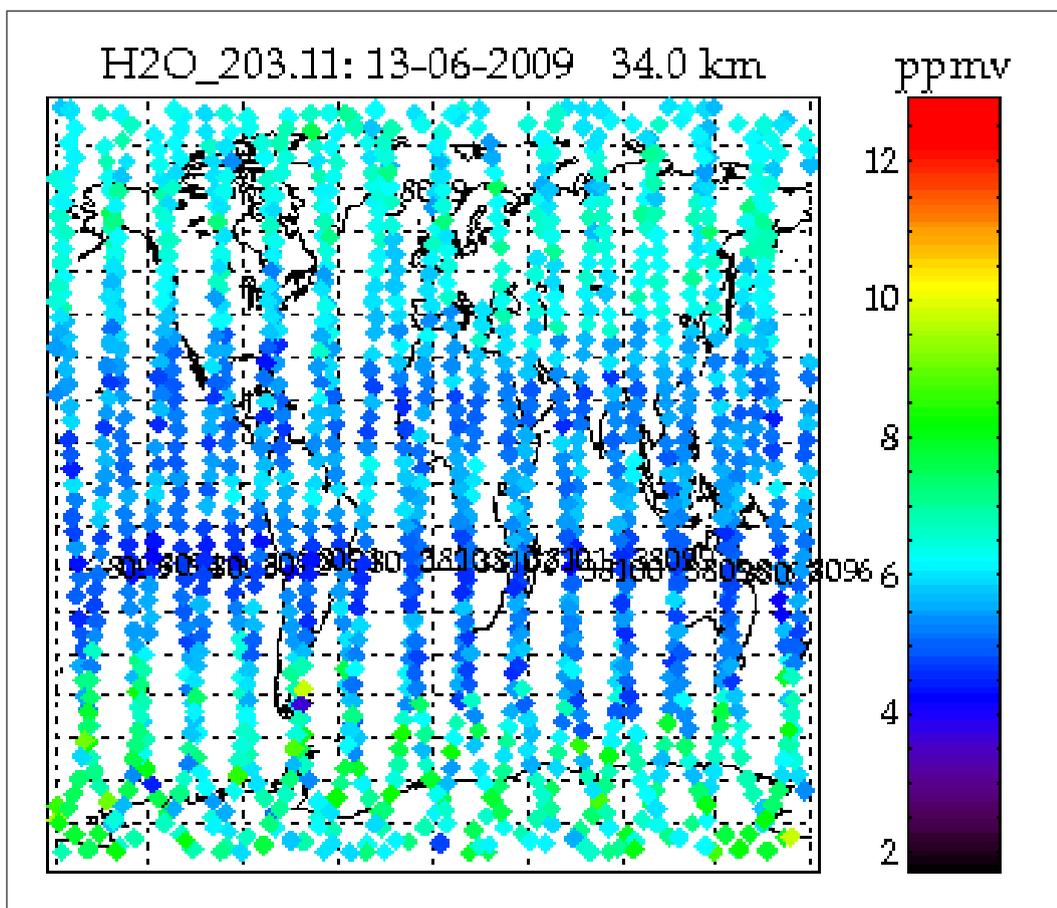


Abbildung 3.2: Beispiel von den Messungen von Wasserdampf in 34 km Höhe an einem Tag. Man erkennt die Geometrie der aufeinanderfolgenden Orbits von Envisat.

### 3.1.2 Messprinzip

Der spektrale Messbereich von MIPAS reicht von  $4,15 \mu\text{m}$  ( $685 \text{ cm}^{-1}$ ) bis  $14,6 \mu\text{m}$  ( $2410 \text{ cm}^{-1}$ ) (Abb. 3.3). In Abbildung 3.4 wird die prinzipielle Funktionsweise ei-

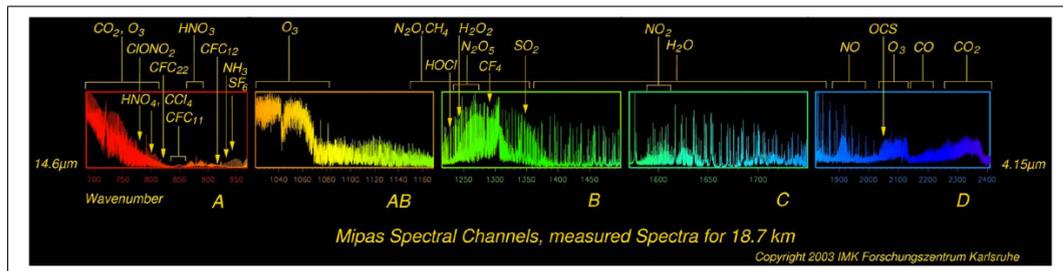


Abbildung 3.3: Spektraler Messbereich von MIPAS mit einem in 18,7 km Höhe aufgenommenen Spektrum. Einige Spektrallinien von Spurengasen sind markiert. Die fünf Messkanäle von MIPAS (A, AB, B, C, D), welche unterschiedliche Spektralbereiche abdecken, sind dargestellt (Quelle: Fischer et al., 2008)

nes Michelson Interferometers dargestellt. Die von der Quelle ausgehende Strahlung wird an dem Strahlteiler in zwei Teile mit optimalerweise gleicher Intensität aufgespaltet. Ein Teil der Strahlung trifft auf den Spiegel 1 und der andere auf Spiegel 2, wobei bei dem in der Abbildung dargestellten klassischen Michelson Interferometer einer der Spiegel entlang der Achse Spiegel-Strahlteiler beweglich ist. Um Platz zu

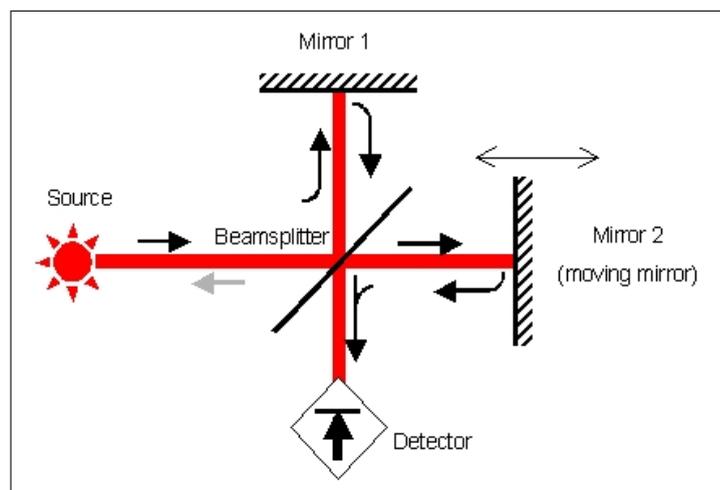


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung eines Michelson Interferometers (Quelle: ESA)

sparen, sind in MIPAS beide Spiegel beweglich, was aber nichts an der prinzipiellen Funktionsweise ändert. Von den beiden Spiegeln werden die beiden Strahlen zurück reflektiert und treffen wieder auf den Strahlteiler, wobei sich eine Zeitdifferenz zwischen dem Auftreffen der beiden Strahlen abhängig vom derzeitigen Abstand der

Spiegel zum Strahlteiler ergibt. Am Strahlteiler werden die beiden Teile wieder aufgespalten, wobei jeweils ein Teil des Strahls in Richtung der Quelle gerichtet ist und ein Teil zum Detektor gelangt. Die beiden Anteile der Strahlung, welche von den zwei Spiegeln zum Detektor kommen, überlagern sich dort und es kann bei passenden Weglängenunterschieden der beiden Strahlen zu konstruktiver oder destruktiver Überlagerung kommen. Trägt man die durch die verschiedenen Überlagerungen erzeugten Intensitätsschwankungen gegen die Wegdifferenz auf, spricht man von einem Interferogramm, welches spektrale Information enthält.

Ist die Differenz der Weglängen der Strahlen gleich null, nennt man das Nulldurchgang (Zero Path Difference (ZPD)), und es gibt in allen Wellenlängen konstruktive Interferenz. Das Gegenteil von der ZPD heißt maximale Weglängendifferenz (Maximum Path Difference (MPD)). Hier hängt die Interferenz von der betrachteten Wellenlänge ab. Der Detektor produziert ein Spannungssignal, welches abhängig von der Strahldichte der einfallenden Strahlung ist. Da der Weglängenunterschied kontinuierlich zwischen MPD und ZPD variiert und sich somit - wellenzahlabhängig - konstruktive Interferenz mit destruktiver abwechselt, erhält man ein so genanntes Interferogramm, bei dem die x-Achse den Weglängenunterschied mit der Dimension Länge darstellt, und die y-Achse proportional zur einfallenden Strahldichte ist. Die Kalibration des Instruments und somit die Bestimmung der Abhängigkeit der gemessenen Spannungswerte von der Strahldichte wird durch zwei Messungen bestimmt. Einerseits wird eine „kalte“, sogenannte „Offset-Messung“ gegen den Weltraum durchgeführt. Bei dieser Messung wird hauptsächlich die Eigenemission des Instruments gemessen, welche von der Temperatur des Instruments abhängig ist. Die Emissionen des Weltraums bei  $\sim 2,7$  K können vernachlässigt werden. Da die Instrumententemperatur über kurze Zeiträume variieren kann, wurde diese Messung jeweils nach vier Atmosphärenscans durchgeführt. Andererseits wurde jede Woche einmal eine „warme“, sogenannte „Gain-Messung“ gegen eine instrumenteninterne Strahlungsquelle durchgeführt, einen Schwarzkörper mit definierter Temperatur. Nach einer Fourier-Transformation dieser beiden Messungen erhält man ein Offset- und ein Gain-Spektrum, welchen man für jede Wellenzahl den Spannungswert für die Strahldichte entnehmen kann (Zweipunkt-Kalibrierung). Die Abhängigkeit zwischen diesen beiden Punkten ist der Theorie nach in erster Näherung linear. Jedoch hat sich in Labormessungen gezeigt, dass die Funktion der einfallenden Strahldichte von der gemessenen Spannung bei einer gegebenen Wellenzahl konvex, also rechtsgekrümmt ist. Diese wellenzahlabhängige Funktion wurde im Vorfeld der Mission mittels eines Polynoms gefittet, und durch die Kalibrationsmessungen wird der Faktor ermittelt, mit dem das gemessene Interferogramm skaliert werden muss, um den Fehler durch die Nicht-Linearität auszugleichen. Nachdem diese Korrektur vorgenommen wurde, wird die Kalibrierung durchgeführt.

Das Interferogramm kann anschließend mit Hilfe einer Fouriertransformation in

---

den Wellenzahlraum überführt werden. Die erreichbare Auflösung eines Fouriertransformationsspektrometers (FTS) wird durch die die MPD bestimmt:

$$\Delta\nu_{ideal} = \frac{1}{2 \cdot MPD}$$

Während der HR-Phase betrug die MPD von MIPAS 20 cm und die maximal erreichbare Auflösung damit  $0,025 \text{ cm}^{-1}$ , und während der RR-Phase war die MPD 8 cm und die maximal erreichbare Auflösung  $0,0625 \text{ cm}^{-1}$ . Die Beschränkung der Interferogramm-Messung auf den Bereich von -MPD bis +MPD entspricht der Multiplikation des im Prinzip unendlich ausgedehnten Interferogramms mit einer Stufenfunktion mit dem Wert 1 zwischen -MPD und +MPD und 0 außerhalb. Dies wird durch die Fouriertransformation zu einer Faltung des Spektrums mit der sinc-Funktion. Dadurch sind die Spektrallinien aufgeweitet und es tauchen unerwünschte Nebenmaxima auf. Um diese zu unterdrücken, wird das Spektrum mit einer Apodisierungsfunktion gefaltet. Bei MIPAS Spektren wird die Apodisierung nach Norton und Beer (1976) verwendet. Durch diese Apodisierung wird die tatsächlich erreichbare Auflösung herabgesetzt. Bei MIPAS beträgt die Auflösung nach Apodisierung etwa  $0,05 \text{ cm}^{-1}$ .

### 3.1.3 Wissenschaftliche Arbeiten

Eine Übersicht über die meisten mit MIPAS-Daten veröffentlichten Arbeiten befindet sich auf der Homepage des IMK ASF, für den Link siehe Literaturverzeichnis. MIPAS Spektren wurden bereits auf zahlreiche atmosphärische Größen ausgewertet. Als erstes wird eine möglichst genaue Tangentenhöhe und Temperatur benötigt, da davon alle weiteren zu bestimmenden Größen abhängen (von Clarmann et al., 2003).

Veröffentlichte Arbeiten, welche die Validierung von MIPAS-Wasserdampfdaten betreffen, finden sich zum Beispiel in: Milz et al. (2005), Carleer et al. (2008), Kiemle et al. (2008), Milz et al. (2009), Stiller et al. (2012a), Nedoluha et al. (2013b), Wetzell et al. (2013) und Hegglin et al. (2013).

Arbeiten, in denen mit atmosphärischen  $\text{H}_2\text{O}$ -Daten von MIPAS – und teilweise anderen Gasen – gearbeitet wurde sind zum Beispiel: Steinwagner et al. (2007), die HDO Messungen mit MIPAS untersuchen. In Ekström et al. (2008) werden  $\text{H}_2\text{O}$ -Klimatologien in den oberen Troposphärenschichten miteinander verglichen, welche von verschiedenen in der „limb-sounding“-Geometrie (siehe mittlere Darstellung in Abbildung 3.8, sowie die Bildunterschrift) messenden Satelliteninstrumenten stammen. Von Wrotny et al. (2010) wird das gesamte  $\text{H}_2$ -Budget in der oberen tropischen Stratosphäre untersucht. Kunze et al. (2010) behandeln die Einflüsse des Indischen Sommer-Monsuns auf Wasserdampf und Ozon Mischungsverhältnisse in der „UTLS“ (Upper Troposphere Lower Stratosphere). In Steinwagner et al. (2010)

werden Dehydratationsprozesse und ihre Relation zu den Jahregängen von gasförmigen Wasserisotopen untersucht. Nedoluha et al. (2013a) behandeln die Wasserdampfmischungsverhältnisvariationen in der mittleren Atmosphäre zwischen 2004 und 2013.

Zu folgenden Spurengasen wurden bereits veröffentlichte Auswertungen vorgenommen: ClO (Glatthor et al., 2004), ClONO<sub>2</sub> (Höpfner et al., 2004), N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (Mengistu Tsidu et al., 2004), NO und NO<sub>2</sub> (Funke et al., 2005b), O<sub>3</sub> (Gil-López et al., 2005) und (Glatthor et al., 2006), HNO<sub>3</sub> (Stiller et al., 2005), HOCl (von Clarmann et al., 2006), HO<sub>2</sub>NO<sub>2</sub> (Stiller et al., 2007), HDO (Steinwagner et al., 2007), CO (Funke et al., 2007), PAN und C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> (Glatthor et al., 2007), C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> (von Clarmann et al., 2007), H<sub>2</sub>CO (Steck et al., 2008), SF<sub>6</sub> (Stiller et al., 2008), CFC – 11 (Hoffmann et al., 2008), BrONO<sub>2</sub> (Höpfner et al., 2009), HCN (Glatthor et al., 2009), HCOOH (Grutter et al., 2010), CFC – 11, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (Versick et al., 2012), CFC – 12 (Kellmann et al., 2012) und SO<sub>2</sub> (Höpfner et al., 2013). Einige dieser Gase wie zum Beispiel NO oder CO konnten auch in der Mesosphäre gemessen werden, andere (z.B.: HCN, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>) hingegen in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre.

Eine Untersuchung des mittleren Luftalters und der Brewer-Dobson-Zirkulation ist in Stiller et al. (2012b) vorgenommen worden. Eine Studie über den direkten Transport von troposphärischer Luft in die Stratosphäre findet sich in Glatthor et al. (2013) und eine weitere Untersuchung von vertikalen Transportprozessen mit MIPAS-Daten findet sich in Funke et al. (2005a). Eine Studie der jährlichen Variabilität von N<sub>2</sub>O und O<sub>3</sub> Verteilungen und der Auswirkungen der QBO auf diese in der unteren tropischen Stratosphäre ist in Khosrawi et al. (2013) gemacht worden.

Neben Spurengasen konnten auch Partikel in der Atmosphäre gemessen werden (Höpfner et al., 2006). Eine Auswertung zu Cirruswolken erfolgte in Mendrok et al. (2007). Die meisten dieser Messungen wurden mit anderen Messungen verglichen und validiert (z.B.: Wang et al., 2007; Wetzels et al., 2007). Für die meisten Spurengase wurde eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den MIPAS Profilen und den Profilen aus anderen Messungen festgestellt.

---

## 3.2 HALOE/UARS

Das in Unterkapitel 2.8.1 erwähnte und zeitlich eingeordnete Halogen Occultation Experiment (HALOE, siehe Russell III et al. (1993)) war ein Messinstrument auf dem Upper Atmosphere Research Satellite (UARS), welcher bis zu seinem Absturz im September 2011 in einem Orbit mit einer Inklination von  $57^\circ$  in einer Höhe von 585 km flog. Die Messgeräte an Bord waren somit in der Lage, atmosphärische Daten aus einem Breitenband von  $\sim 80^\circ\text{S} - 80^\circ\text{N}$  zu liefern. HALOE hat Konzentrationen von diversen Gasen vom 11. Oktober 1991 bis zum 21. November 2005 gemessen. Pro Tag umrundete der Satellit die Erde  $\sim 15$  mal.

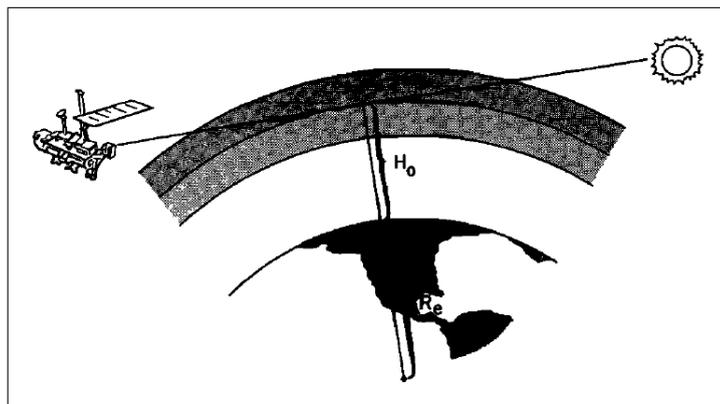


Abbildung 3.5: Messgeometrie der solaren Okkultation (Abbildung entnommen aus Russell III et al., 1993)

Im Gegensatz zu MIPAS' Messungen von thermalen Emissionen der Erdatmosphäre hat HALOE Sonnenokkultationsmessungen durchgeführt, bei welchen durch die Atmosphäre in die Sonne geblickt und die spektral aufgelöste Absorption bestimmt wird, wie auch in Abbildung 3.5 dargestellt. Diese Messgeometrie hat wegen der Notwendigkeit der Sonnenanpeilung zur Folge, dass einerseits vor allem in Polnähe starke jährliche Schwankungen in der Häufigkeit der Messungen auftreten, und andererseits die Anzahl der Messungen in hohen Breiten jene in niedrigen Breiten überwiegt, wie Abbildung 3.6 zeigt.

Das Ziel der HALOE-Mission war es, einerseits die Quantifizierung der zeitlichen und breitenbedingten Schwankung der globalen Ozonverteilung zu messen und andererseits die Erforschung der Auswirkungen von Fluorchlorkohlenwasserstoffen (FCKW) auf atmosphärisches Ozon. Die gemessenen Gase sind darauf abgestimmt, es wurden Mischungsverhältnisse von  $\text{O}_3$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}$  und  $\text{NO}_2$  bestimmt. Dieser Satz an Gasen kann unter optimalen Bedingungen auch dazu verwendet werden, die Mischungsverhältnisse von anderen Gasen abzuleiten, wie etwa das von  $\text{OH}$ . Diese Ableitung geschieht durch Verwendung der Mischungsverhältnisse

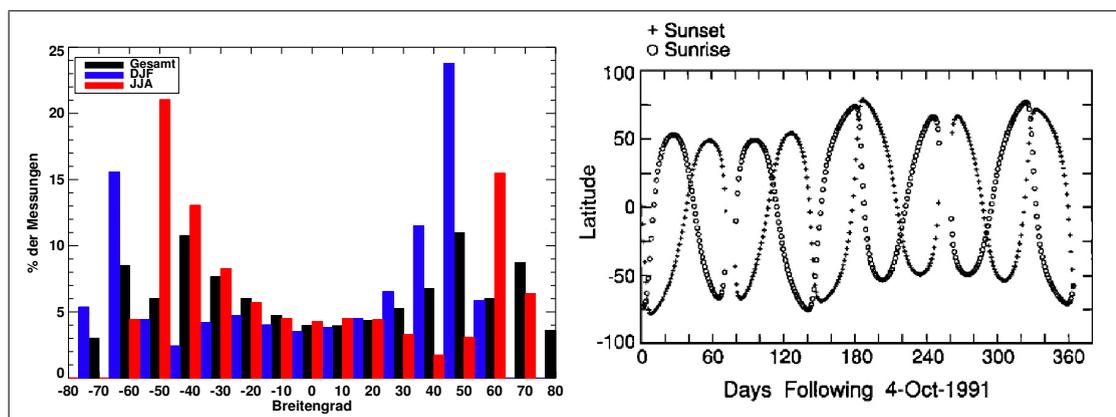


Abbildung 3.6: links: Verteilung der Messungen von HALOE in Abhängigkeit vom Breitengrad und der Jahreszeit. rechts: Messungsabdeckung von HALOE im Laufe eines Jahres (Quelle: Russell III et al., 1993).

von  $O_3$ ,  $CH_4$  und  $H_2O$ , oder das VMR von atomarem Cl und aus diesem wiederum ClO, unter Beachtung der Reaktionswahrscheinlichkeit von ClO mit  $O_3$ . Auch  $ClONO_2$  kann abgeleitet werden (Russell III et al., 1993).

Darüberhinaus lieferte HALOE auch Daten über die Extinktion - das heißt die Verringerung der Lichtintensität durch Absorption, Streuung, Beugung und Reflexion - des Sonnenlichts durch Aerosole, sowie Temperatur-Druck-Profile.

Das FOV in der Tangentenhöhe betrug 1,6 km und die Höhenabdeckung erstreckte sich von  $\sim 15$  km bis  $\approx 60$ -130 km (je nach Messkanal) (Russell III et al., 1993). Täglich wurden im Durchschnitt 30 Okkultationsmessungen durchgeführt, wobei bei 15 davon die Sonne im Osten angepeilt wurde („Sunrise“-Messungen, SR) und bei den anderen 15, welche auf der gegenüberliegenden Seite der Erde gemacht wurden, die Sonne im Westen stand („Sunset“-Messungen, SS). Pro Jahr ergaben sich damit rund 10800 Messungen. Etwa alle 4.5 Tage befand sich der Satellit wieder über demselben geographischen Ort. Der von HALOE gemessene Spektralbereich erstreckte sich von  $2,45 \mu\text{m}$  bis  $10,04 \mu\text{m}$ . Wie auch bei MIPAS gibt es in diesem spektralen Messbereich ausgewählte Kanäle (bei HALOE einige Breitband-Radiometrie-sowie vier Gasabsorptions-Kanäle), die verschiedene Abschnitte dieses Bereichs abdecken.

Abbildung 3.7 zeigt einen Ausschnitt aus diesem Spektrum, welcher für die Berechnung von HCl Konzentrationen verwendet wurde. Durch die Messung des starken Sonnensignals und der Absorption aus diesem Spektrum kann eine höhere vertikale Auflösung der Gasprofile erreicht werden als bei einer thermalen Emissionsmessung wie bei MIPAS. Die vertikale Auflösung von HALOE Wasserdampfdaten beträgt  $\sim 2$  km – 3 km (Russell III, 1995; Hegglin et al., 2013).

Im Laufe der 14 Jahre Messzeit von HALOE wurde das Instrument sehr häufig validiert und oft als Standard zu Vergleichen herangezogen. Beispiele betreffend der

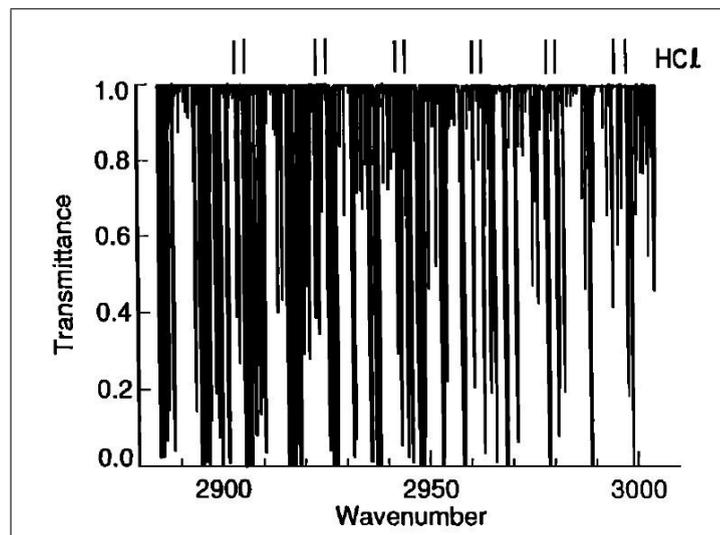


Abbildung 3.7: Absorptionsspektrum vom HCl-Kanal von HALOE in 30 km Tangen-  
tenhöhe. Die Positionen der HCl-Linien sind durch die vertikalen Striche am oben  
Rand der Graphik markiert, der Hauptanteil der Absorption entsteht in diesem  
Spektralbereich durch  $\text{CH}_4$  (Quelle: Russell III et al., 1993).

Validierung von Wasserdampf werden im Unterkapitel 4.2 gezeigt.

### 3.3 Strahlungsübertragung und Retrievaltheorie

In dem folgenden Unterkapitel 3.3.1 wird dargestellt, wie die mathematische Modellierung des Wegs der atmosphärischen Strahlung (Strahlungsübertragung) von ihrem Ursprung zu einem passiven - das heißt keine Strahlung aktiv aussendenden - Messgerät vorgenommen wird.

Diese Modellierung ist ein Schritt auf dem Weg, aus den von einem Fernerkundungsmessinstrument gemessenen Daten die Konzentrationen verschiedener Gase in der Atmosphäre berechnen zu können. Da die Lösung der Gleichungen der Strahlungsübertragung analytisch nicht möglich ist, muss sie in vom Computer verarbeitbare Schritte umgeschrieben werden, also eine numerische Lösung dieser Gleichungen vorgenommen werden. Dies wird in Unterkapitel 3.3.2 beschrieben. Die Methoden beim „Retrieval“ werden in Unterkapitel 3.3.3 beschrieben. Das Wort „Retrieval“ bedeutet in diesem Zusammenhang etwa die Ableitung der atmosphärischen Mischungsverhältnisprofile aus den gemessenen Interferogrammen.

In Unterkapitel 3.3.4 werden in einem Überblick die Prozessierungsschritte vorgestellt, welche von den unbehandelten Messdaten zu den Vertikalprofilen von Gaskonzentrationen, sowie anderen Größen wie etwa den Averaging Kernel Matrizen führen.

Das Unterkapitel 3.3.5 behandelt die Abschätzungen von verschiedenen Fehlern, welche zur Ungenauigkeit der Messung beitragen.

#### 3.3.1 Strahlungsübertragung in der Atmosphäre

Um von den Fernerkundungsdaten zu einem Vertikalprofil eines Gases zu gelangen sind mehrere Schritte notwendig, von denen ein sehr wichtiger die Kenntnis darüber ist, welches Verhalten Strahlung beim Durchgang durch die Erdatmosphäre zeigt. Eine erste mathematische Beschreibung dieses sogenannten Strahlungstransports geht auf Chandrasekhar (1960) zurück.

Die Absorption und die Emission von Strahlung geht immer mit quantenmechanischen Zustandsänderungen in Molekülen oder Atomen einher und ist deshalb bei Gasen mit diskreten Frequenzen bzw. Energien verbunden. Diese Zustände sind durch Quantenzahlen gekennzeichnet, welche sich auf Rotations-, Vibrations-Rotations-Zustände oder Energiezustände von Elektronen in den Atom- bzw. Molekülhüllen beziehen. Für jedes Gas in der Atmosphäre sind diese Frequenzen einzigartig und falls bekannt, lassen gemessene Frequenzen in einem Spektrum Schlüsse auf die Zusammensetzung der Atmosphäre zu. Die für die von MIPAS gemessenen Frequenzen relevanten Übergänge sind die Vibrations-Rotations-Übergänge von Molekülen, welche im mittleren Infrarot angesiedelt sind. Wird ein Photon durch einen bestimmten

---

Übergang in einem Luftmolekül emittiert, so besteht die Wahrscheinlichkeit, dass es wieder durch ein gleiches Molekül absorbiert werden kann, welches sich in dem niedrigeren Energiezustand bezüglich dieses Übergangs befindet. Nachdem die Absorption stattgefunden hat, kann es wieder zur spontanen oder stimulierten Emission eines Photons derselben Energie wie des ursprünglichen Photons kommen. Die Richtung, in welche dieses abgestrahlt wird, ist jedoch in beiden Fällen zufällig. Die Linienintensität eines Übergangs hängt unter anderem von der Temperatur der Luft ab.

Nach dem, was im letzten Absatz über die individuellen Frequenzen bei energetischen Übergängen in atmosphärischen Partikeln geschrieben wurde, würde man also erwarten, dass ein gemessenes Spektrum der Atmosphäre aus vielen, sauber voneinander energetisch getrennten Linien bestünde. Dies ist jedoch nicht der Fall. Jede der Linien unterliegt einer gewissen Verbreiterung, welche durch folgende Effekte zustande kommt:

1. Lorentzverbreiterung: Diese Verbreiterung von gemessenen Spektrallinien entsteht durch die Stoßwechselwirkung von Molekülen oder Atomen mit anderen Partikeln der Atmosphäre. Diese Art der Verbreiterung hängt vor allem vom Druck, aber auch von der Temperatur und von gasspezifischen Parametern ab.
2. Dopplerverbreiterung: Diese entsteht durch die zufallsbedingte Brown'sche Bewegung des Gases und hängt von der Frequenz der Linie, der Temperatur am zu messenden Ort und der Masse der die Strahlung aussendenden Teilchen ab.

In erster Näherung gilt, dass oberhalb von  $\approx 35$  km Höhe die Dopplerverbreiterung einen größeren Einfluss ausübt und unterhalb von  $\approx 20$  km die Lorentzverbreiterung dominiert, da die Wahrscheinlichkeit für intermolekulare Stöße hier sehr viel höher ist als in höheren atmosphärischen Schichten niedrigerer Dichte. Dies hängt aber im Einzelfall von der betrachteten Emissionslinie ab. Im Normalfall müssen beide Effekte berücksichtigt werden. Hierzu wird die Voigt-Funktion herangezogen, welche durch die Faltung der beiden Verbreiterungen entsteht. Diese wird üblicherweise in Strahlungsübertragungsgleichungen verwendet, um eine möglichst gute Beschreibung der Wirklichkeit zu geben.

Hauptsächlich wird der Weg der Strahlung durch die Atmosphäre von Extinktion und Emission beeinflusst, welche wiederum durch die Zusammensetzung der durchquerten Luft bestimmt werden. Die Extinktion ( $\hat{=}$  Abschwächung) besteht aus Absorption, Streuung, Beugung und Reflexion an atmosphärischen Gasmolekülen, Atomen oder Aerosolen. Bei den hier relevanten Frequenzen im infraroten Bereich kann jedoch die Streuung vernachlässigt werden, da die sogenannte Rayleigh-Streuung an

Partikeln mit kleinem Radius verglichen mit der Wellenlänge der streuenden Strahlung mit sinkenden Energien bzw. größeren Wellenlängen mit  $\propto(\frac{1}{\lambda^4})$  abnimmt. Wird Strahlung an Partikeln mit größeren Radien gestreut, so wird die verallgemeinerte Mie-Theorie zur Lösung des Streuproblems herangezogen (z. B. van de Hulst, 1957). Dies gilt etwa für Wasser- oder Eispartikel sowie für Aerosolpartikel mit genügend großen Radien. Auch hier wird bevorzugt Strahlung mit kleineren Wellenlängen bzw. höheren Energien gestreut.

Die Herleitung der Gleichung für die Strahlungsübertragung ergibt sich nach Flaud und Orphal (2011) wie im Folgenden gezeigt.

Die Gleichung für lokale Transmission von Strahlung durch eine Atmosphärenschicht der Dicke  $dl$  ist gegeben durch:

$$\frac{dI_{\tilde{\nu}}}{dl} = -\alpha_{\tilde{\nu}}(I_{\tilde{\nu}} - J_{\tilde{\nu}}), \quad (3.1)$$

wobei  $I_{\tilde{\nu}}$  die spektrale Strahldichte (typischerweise in  $[Wcm^{-2}sr^{-1}(cm^{-1})^{-1}]$ ),  $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$  die Wellenzahl (in  $[cm^{-1}]$ ,  $\lambda$  ist die Wellenlänge),  $l$  die Weglänge (in  $[cm]$ ),  $J_{\tilde{\nu}}$  die Quellfunktion (in  $[Wcm^{-2}sr^{-1}(cm^{-1})^{-1}]$ ) und  $\alpha_{\tilde{\nu}}$  der Absorptionskoeffizient (in  $[cm^{-1}]$ ) ist.

Die integrale Form dieser Gleichung kann geschrieben werden als:

$$I_{\tilde{\nu}}(l) = I_{\tilde{\nu}}(0) e^{-\delta_{\tilde{\nu}}(l,0)} + \int_0^l J_{\tilde{\nu}}(l') e^{-\delta_{\tilde{\nu}}(l,l')} \alpha_{\tilde{\nu}}(l') dl', \quad (3.2)$$

wobei die optische Dicke  $\delta_{\tilde{\nu}}(l, l')$  zwischen den Punkten  $l$  und  $l'$  definiert ist durch:

$$\delta_{\tilde{\nu}}(l, l') = \int_l^{l'} \alpha_{\tilde{\nu}}(l'') dl'' \quad (3.3)$$

Der erste Term in Gleichung 3.2 repräsentiert die die Propagation der Intensität von Strahlung, welche von außerhalb des Ortes „0“ kommt und in Richtung  $l$  geht. Der Abschwächungsfaktor aufgrund der Absorption ist hier:

$$T_{\tilde{\nu}}(l, 0) = e^{-\delta_{\tilde{\nu}}(l,0)} \quad (3.4)$$

Der zweite Term der Gleichung repräsentiert den Beitrag des differentiellen Längenelements  $dl'$  zu  $I_{\tilde{\nu}}$  am Ort  $l$ . Der Abschwächungsfaktor hier ist:

$$T_{\tilde{\nu}}(l, l') = e^{-\delta_{\tilde{\nu}}(l,l')} \quad (3.5)$$

Dieser letztere Abschwächungsfaktor kann mit Gleichung 3.3 umgeschrieben werden zu:

$$T_{\tilde{\nu}}(l, l') = e^{-\int_l^{l'} \alpha_{\tilde{\nu}}(l'') dl''} \quad (3.6)$$

woraus folgt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_{\bar{\nu}}(l, l')}{\partial l} &= -\alpha_{\bar{\nu}}(l)T_{\bar{\nu}}(l, l') \\ \frac{\partial T_{\bar{\nu}}(l, l')}{\partial l'} &= +\alpha_{\bar{\nu}}(l')T_{\bar{\nu}}(l, l')\end{aligned}\quad (3.7)$$

Mit den Gleichungen 3.6 und 3.7 kann die integrierte Strahlungsübertragungsgleichung 3.2 geschrieben werden als:

$$I_{\bar{\nu}}(l) = I_{\bar{\nu}}(0) T_{\bar{\nu}}(l, 0) + \int_0^l J_{\bar{\nu}}(l') \frac{\partial T_{\bar{\nu}}(l, l')}{\partial l'} dl' \quad (3.8)$$

Die zwei Terme in dieser Gleichung können je nach der Messgeometrie eines Satelliteninstruments verschieden stark zu der vom Instrument gemessenen Intensität beitragen. In Abbildung 3.8 sind die verschiedenen Szenarien bezüglich möglicher Messgeometrien dargestellt.

Bei der Absorptionsspektroskopie dominiert der erste Term dieser Gleichung, das heißt  $I_{\bar{\nu}}(0)$  ist hier sehr groß. Dies entspricht der untersten Darstellung in der Abbildung. Etwa bei HALOE ist dies der Fall, wo die Hintergrundstrahlungsquelle die Sonne ist. Bei Okkultationsmessungen wird in bestimmten zeitlichen Abständen (welche deutlich größer sind, als die Zeitabstände zwischen den Messungen zweier aufeinanderfolgender Profile ist) eine sogenannte „deep space“-Messung zur Normierung durchgeführt. Hierbei wird direkt die Sonnenemission gemessen, ohne dass dabei der Sehstrahl durch die Erdatmosphäre geht. Jedes ermittelte Spektrum einer Messung in Sonnenokkultationsgeometrie durch die Atmosphäre wird zur Normierung durch das in der deep space Messung aufgenommene Spektrum geteilt, so dass nur die Absorptionslinien der Atmosphäre übrig bleiben.

Bei der Emissionsspektroskopie (vergleiche die zweite Darstellung in Abbildung 3.8 sowie die Bildunterschrift), wie etwa bei dem limb-sounding Instrument MIPAS, dominiert der zweite Term.  $I_{\bar{\nu}}(0)$  besteht hier aus Beiträgen der kosmischen Hintergrundstrahlung und höheren Atmosphärenschichten. Auch hier wird eine Normierung mit dem Spektrum der direkt gemessenen kosmischen Hintergrundstrahlung durchgeführt.

In der Nadir Geometrie (erste Darstellung in der Abbildung) misst das Fernerkundungsmessinstrument eine Mischung aus den Emissionen der relativ zur Atmosphäre warmen Erdoberfläche und der von der Atmosphäre emittierten Strahlung. Die Emissionen der Erdoberfläche dominieren hier über die atmosphärischen Emissionen aufgrund der höheren Temperatur der Erdoberfläche und der geringen Dichten in den Schichten der Atmosphäre. Während des Strahlungstransports von der Oberfläche durch die Luft zum Messinstrument überwiegt daher die Absorption in der

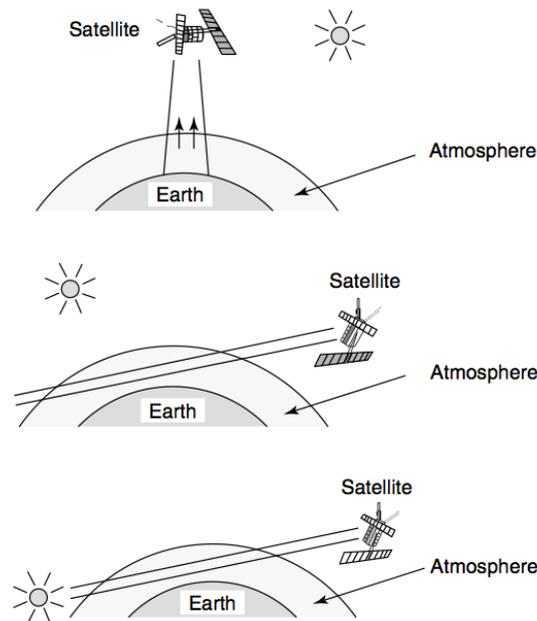


Abbildung 3.8: Schematische Darstellung der drei möglichen Geometrien bei Satellitenmessungen der Atmosphäre. Das obere Bild stellt die Nadir-Geometrie dar, wo das Instrument direkt zum Erdboden hin misst. Das mittlere Bild ist das sogenannte „limb-sounding“, bei welchem der Sehstrahl des Instruments an der Erdoberfläche vorbeigeht. Das untere Bild beschreibt die Sonnenokkultationsmessung, wo vom Instrument aus durch die Erdatmosphäre in die Sonne gemessen wird. Die Abbildung wurde entnommen aus: Flaud und Orphal (2011)

Atmosphäre über die Emission und es werden hauptsächlich Absorptionslinien im gemessenen Spektrum gesehen. Aufgrund des jedoch nicht zu vernachlässigenden Beitrags der Emission in der Atmosphäre zählt diese Geometrie auch zur Emissionsspektroskopie. Eine Normierung durch eine ausschließliche Messung von  $I_{\nu}(0)$  ist bei dieser Geometrie nicht möglich.

Die aus den gemessenen Daten berechneten Spektren können entweder kontinuierlichen Charakter haben und eine nur schwache Abhängigkeit von der Wellenzahl aufweisen („Kontinua“), oder es können einzelne Linien stark vertreten sein („Linienspektren“). Kontinua in Spektren werden unterteilt in zwei Kategorien. Einerseits gibt es die „unechten Kontinua“, welche durch die Überlagerung von Linienflanken weit entfernter Spektrallinien entstehen, oder durch nahe zusammenliegende Linien schwerer Moleküle entstehen. Andererseits gibt es die „echten Kontinua“, welche durch Absorption oder Emission von Strahlung durch feste oder flüssige Teilchen entstehen (von Clarmann, 2003). Bei einer Atmosphäre, welche keine Materie im festen oder flüssigen Zustand enthält und wo die Voigt-Profile der einzelnen Linien eine geringe Halbwertsbreite aufgrund niedrigen Drucks und Temperatur haben,

herrschen die Linienspektren vor. Eine Ausnahme ist das in dieser Arbeit betrachtete  $\text{H}_2\text{O}$ . Der Grund hierfür ist, dass bei der Berechnung der Lorentzverbreiterung die ideale Annahme eines instantanen Stoßes gemacht wird und dadurch die berechnete Linienform von der realen Linienform abweicht. In der Nähe des Linienzentrums wird die Stärke der Linie unterschätzt und der im Spektrum weiter entfernt liegende Anteil überschätzt. Deshalb werden von Strahlungsübertragungsmodellen wie etwa dem am IMK-ASF verwendeten Modell KOPRA (vergleiche Unterkapitel 3.3.4) die Verbreiterungen von  $\text{H}_2\text{O}$ -Linien nur bis  $\pm 25 \text{ cm}^{-1}$  um das Linienzentrum herum berechnet. In diesem Intervall liegt der Hauptanteil der zum Spektrum beitragenden Linie. Jedoch addieren sich die nicht in diesem Intervall liegenden Linienflanken der verschiedenen  $\text{H}_2\text{O}$ -Linien außerhalb dieses Intervalls zu einem nicht vernachlässigbaren Anteil am Spektrum auf. Dieses Problem existiert für alle am IMK-ASF abgeleiteten Gase, jedoch besitzt Wasserdampf eine außergewöhnlich starke Signatur, verglichen mit anderen Komponenten der Atmosphäre von denen Mischungsverhältnisse bestimmt werden (bis auf  $\text{CO}_2$ ), und die Auswirkungen auf das betrachtete Spektrum sind stärker als bei anderen Gasen. Aus diesen Gründen zählt man das vom Wasserdampf verursachte Kontinuum zu den unechten Kontinua.

Die Berechnung der in der Strahlungsübertragungsgleichung 3.8 auftretenden Größe der optischen Dicke kann für ein kontinuierliches Spektrum geschrieben werden als:

$$\delta_{\tilde{\nu}}(l, 0) = \sum_i \int_0^l \sigma_i(\tilde{\nu}, p(l'), T(l')) N_i(l') dl', \quad (3.9)$$

wobei  $i$  für die verschiedenen absorbierenden Partikel steht,  $N_i(l')$  für die lokale Dichte von Molekülen der Art  $i$  (in  $[\text{Moleküle cm}^{-3}]$ ),  $\sigma_i(\tilde{\nu}, p(l'), T(l'))$  für den Wirkungsquerschnitt der Absorption (in  $[\text{cm}^2 \text{ Moleküle}^{-1}]$ ) der Moleküle  $i$  bei der Wellenzahl  $\tilde{\nu}$  und  $p(l')/T(l')$  ist der Druck bzw. die Temperatur.

Für ein Linienspektrum, in welchem einzelne Linien von Übergängen stark vertreten sind, ergibt sich für die optische Dicke:

$$\delta_{\tilde{\nu}}(l, 0) = \sum_i \sum_j \int_0^l S_{\tilde{\nu}_j}^i(T(l')) \Phi(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_j, p(l'), T(l')) N_i(l') dl', \quad (3.10)$$

wobei  $S_{\tilde{\nu}_j}^i$  (in  $[\text{cm Molekül}^{-1}]$ ) die Intensität einer Linie  $\tilde{\nu}_j$  des Moleküls  $i$  ist und  $\Phi(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_j, p(l'), T(l'))$  das aus der Lorentz- und Dopplerverbreiterung berechnete Linienprofil ist.

In den spektroskopischen Datenbanken - wie zum Beispiel in der am IMK verwendeten Datenbank HITRAN (Rothman et al., 2005) - sind die Linienintensitäten  $S_{\tilde{\nu}_j}^i(T_{ref})$  bei einer vorgegebenen Referenztemperatur von Linien im Mikrowellenbereich bis zu Linien im sichtbaren und teilweise auch ultravioletten Bereich angegeben.

Diese können dazu verwendet werden, die Intensität einer Linie bei einer beliebigen Temperatur zu berechnen, falls das niedrigere Energieniveau des Übergangs  $E''$  bekannt ist. Die Formel für diese Berechnung ergibt sich durch:

$$S_{\tilde{\nu}_j}^i(T) = S_{\tilde{\nu}_j}^i(T_{ref}) \frac{Z(T_{ref})}{Z(T)} e^{-\frac{hcE''}{k} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)} \frac{1 - e^{-\frac{hc\tilde{\nu}_j}{kT}}}{1 - e^{-\frac{hc\tilde{\nu}_j}{kT_{ref}}}}, \quad (3.11)$$

wobei  $Z(T)$  die Zustandssumme ist,  $h$  die Planck-Konstante,  $c$  die Lichtgeschwindigkeit und  $k$  die Boltzmannkonstante ist. Neben den Linienintensitäten sind auch noch weitere Daten in den spektroskopischen Datenbanken vorhanden, welche nötig sind, um Zugang zu den nicht elementar berechenbaren Größen zu gewinnen, welche für das Retrieval von Profilen aus Messungen notwendig sind. Zu diesen Daten gehören zum Beispiel Absorptionsquerschnitte für Moleküle mit quasi-kontinuierlichen Spektren (wo individuelle Linien nicht getrennt auflösbar sind) und Brechungsindizes von Aerosolen (Rothman et al., 2005).

Die Quellfunktion  $J_{\tilde{\nu}}$ , welche im zweiten Term von Gleichung 3.8 vorkommt und die thermischen Emissionen der Atmosphäre beschreibt, ist bei lokalem thermodynamischen Gleichgewicht (Englisch: local thermodynamic equilibrium, LTE, liegt dann vor, wenn die Besetzung der Energieniveaus in den Atomen oder Molekülen der Boltzmann-Verteilung bei der herrschenden Temperatur entspricht) gegeben durch die Planck-Funktion (vergleiche zum Beispiel von Clarmann (2003)):

$$B(\tilde{\nu}, T) = \frac{2hc^2\tilde{\nu}^3}{e^{\frac{hc\tilde{\nu}}{kT}} - 1} \quad (3.12)$$

Die Abhängigkeit dieser Funktion von der Temperatur ist bei Fernerkundungsmessungen ein nützliches Hilfsmittel zur Temperaturbestimmung am Messort.

Sollte kein thermodynamisches Gleichgewicht vorliegen, dann wird die Quellfunktion angegeben als:

$$S(\tilde{\nu}, T) = \frac{2hc^2\tilde{\nu}^3}{e^{\frac{r_1}{r_2} \frac{hc\tilde{\nu}}{kT}} - 1}, \quad (3.13)$$

wobei  $r_j$  das Verhältnis der Bevölkerung des Zustandes  $j$  unter den gegebenen Bedingungen zur Bevölkerung dieses Zustandes bei lokalem thermodynamischem Gleichgewicht ist. Wasserdampf ist von non-LTE Effekten erst ab ca. 45 – 50 km Höhe betroffen und somit spielen diese keine Rolle für die Betrachtungen in dieser Arbeit.

### 3.3.2 Numerische Modellierung der Strahlungsübertragung

Diese Strahlungsübertragungsgleichung gilt für eine feste Wellenzahl  $\tilde{\nu}$ . Jedoch ist die Strahlung in der Atmosphäre ein kontinuierliches Spektrum. Außerdem sind das

Absorptionsvermögen sowie die Temperatur und die Absorberdichte variable kontinuierliche Funktionen über die Höhe. Um diese Probleme numerisch handhaben zu können, wird eine Diskretisierung sowohl des Spektrums als auch des Raums durchgeführt. Die Erdatmosphäre wird in annähernd kugelsymmetrische und homogene Schichten bestimmter Dicke unterteilt. Auf diese Weise kann der Weg emittierter thermischer Strahlung aus diesen verschiedenen Schichten zum Messgerät modelliert werden. Die Modellierung wird entlang des Sehstrahls des Gerätes vorgenommen. Der Sehstrahl wird dazu in sogenannte Teilsäulen unterteilt. Die Größen in diesen werden als homogen verteilte mittlere Größen angegeben. In jedem dieser Teilabschnitte wird der Betrag der beitragenden Strahldichte  $I_i(\tilde{\nu})$  berechnet und in der Folge zu der am Messgerät auftreffenden Gesamtstrahldichte aufsummiert. Ist in der  $i$ -ten Teilsäule die Temperatur  $T_i$  und die spektrale Transmission  $\tau_i$  in dem Wegsegment  $i$ , so kann die Gesamtstrahldichte von Säule 1 (am weitesten vom Messgerät entfernte Säule) bis zur Säule  $N$  über folgende Formel berechnet werden (Höpfner et al., 1998):

$$I(\tilde{\nu}) = B(T_{\text{hinterg}}) \prod_{i=1}^N \tau_i(\tilde{\nu}) + \sum_{i=1}^N [B(\tilde{\nu}, T_i)(1 - \tau_i(\tilde{\nu})) \prod_{k=i+1}^N \tau_k(\tilde{\nu})], \quad (3.14)$$

wobei die Transmission berechnet wird als:

$$\tau_i = e^{-\delta_i}, \quad (3.15)$$

mit der optischen Dicke  $\delta_i$  als:

$$\delta_i = \sum_{g=1}^G \left[ \sigma_{ig} + \sum_{b=1}^{B_g} \alpha_{igb} \sigma_{igb} \right] u_{ig}, \quad (3.16)$$

wobei  $\sigma_{ig}$  die Summe der Absorptionswirkungsquerschnitte für alle Linien von allen Vibrationsbändern von Gas  $g$  im LTE ist.  $\sigma_{igb}$  ist der LTE Absorptionswirkungsquerschnitt für ein Vibrationsband  $b$  von dem Gas  $g$ , in welchem non-LTE Effekte berücksichtigt werden sollen.  $u_{ig}$  ist der Säulengehalt von Gas  $g$  im Wegsegment  $i$ ,  $B_g$  die Anzahl von non-LTE Bändern von Gas  $g$ ,  $G$  die Anzahl an Gasen und  $\alpha_{igb}$  das Verhältnis von non-LTE zu LTE Absorptionswirkungsquerschnitten für das non-LTE Band von Gas  $g$ .

Der erste Summand in dieser Formel ist der Strahlungshintergrund und kann vernachlässigt werden, sofern der Weltraum mit seinen  $2,7 K$  als Hintergrund angenommen wird, da  $B(2,7 K, 680 \text{ cm}^{-1} < \tilde{\nu} < 2400 \text{ cm}^{-1}) \approx 0$ .

Abbildung 3.9 veranschaulicht diese Mess- bzw. Modellierungssituation. Die Größe  $z$  in dieser Abbildung wird als Tangentenhöhe bezeichnet. Aus dieser Höhe kommt

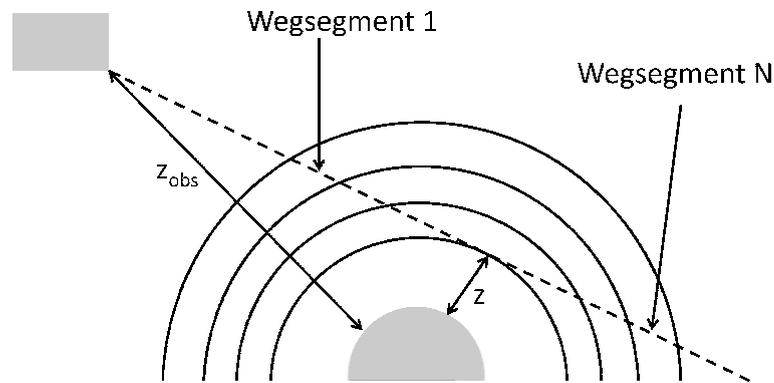


Abbildung 3.9: Schematischer Strahlungsverlauf bei einer Horizontsondierung

der Hauptteil des von einem Satellitenmessgeräts gemessenen Signals. Dies ist der Fall aufgrund der höheren Dichte in der Tangentialhöhe als in den darüberliegenden Schichten der Atmosphäre, welche der Sehstrahl durchquert (vergleiche auch Unterkapitel 3.1.1).

Die monochromatische Modellierung (**Line-by-Line (LBL)**) der Strahlungsübertragung wird von verschiedenen Modellen (wie etwa von dem am IMK entwickelten KOPRA (Stiller, 2000) für alle betrachteten spektralen Stützstellen durchgeführt. Hierbei wird ein möglichst feinaufgelöstes Spektrum mit einer Linienbreite  $\Delta\tilde{\nu}$  angestrebt, damit auch feine Strukturen erfasst werden können.

Die Strahlungsübertragung kann auch in Kurzschreibweise als

$$\vec{y} = \vec{F}(\vec{x}) \quad (3.17)$$

geschrieben werden. Hierbei ist  $\vec{y}$  ein Vektor mit den modellierten spektralen Strahldichten.  $\vec{x}$  ist ein Vektor im Parameterraum und enthält die variablen atmosphärischen Parameter. Das verwendete Strahlungsübertragungsmodell ist hier die Funktion  $\vec{F}$ . Ein solches Modell, welches die Spektren aus den atmosphärischen Parametern modelliert wird auch „Vorwärtsmodell“ genannt. Ausführliche Darstellungen der Strahlungsübertragung finden sich zum Beispiel in Liou (1980) und Zdunkowski et al. (2007).

### 3.3.3 Retrievaltheorie

Die Theorie zur Berechnung von Zustandsvariablen einer Atmosphäre, im weiteren Retrievaltheorie genannt, ist von Rodgers (2000) ausführlich beschrieben worden. Eine weitere Beschreibung, an welche die in dieser Arbeit kurz gefasste Beschreibung angelehnt ist, findet sich in von Clarmann (2003). Diese Theorie behandelt das umgekehrte Problem wie das Vorwärtsmodell, auch inverses Problem genannt. Hier sollen atmosphärische Größen aus den gemessenen Spektren abgeleitet werden.

Das durch die Retrievaltheorie zu lösende Problem besteht darin, aus dem Vektor der gemessenen Strahldichten  $\vec{y}_{Mess}$  auf den spektralen Stützstellen des vom Messgerät erfassten Spektrums den Vektor der atmosphärischen Zustandsvariablen  $\vec{x}$  abzuleiten. Das in dem Unterkapitel 3.3.2 erwähnte Vorwärtsmodell dient als Lösung des direkten Problems, welches die Modellierung des Vektors  $\vec{y}_{Mod}$  einer simulierten Messung aus einem angenommenen Vektor  $\vec{x}$  der atmosphärischen Variablen darstellt.

Sei der Messvektor  $\vec{y}_{Mess}$  von einer Dimension eines  $m_{max}$ -dimensionalen Strahldichtespektrums mit  $m_{max} = \frac{\Delta\tilde{\nu}_{tot}}{\Delta\tilde{\nu}}$ . Hierbei ist  $\Delta\tilde{\nu}_{tot}$  die gesamte Breite des betrachteten Spektrums und  $\Delta\tilde{\nu}$  die Gitterweite des Spektrums.

Das gemessene Signal wird neben dem gesuchten Vektor  $\vec{x}$  mit der Dimension  $n_{max}$  noch durch andere Parameter  $\vec{u}$  (Dimension  $n_u$ ) beeinflusst, welche als bekannt vorausgesetzt werden können und während des Retrievals konstant gehalten werden. Wenn ein Retrieval vorgenommen wird, muss entschieden werden, welche Variablen hierzu gezählt werden können. Dieser Vektor kann zum Beispiel Daten der Messgeometrie, gerätespezifische Parameter oder weitere atmosphärische Größen enthalten, wie zum Beispiel auch bekannte Konzentrationen von anderen Gasen als das Targetgas, welche aber Linien in der Nähe der Targetgaslinien besitzen.

$\vec{f}(\vec{x}, \vec{u})$  soll hier eine Funktion sein, welche sowohl die Strahlungsübertragung durch die Schichten der Atmosphäre als auch die Beeinflussung des gemessenen Spektrums durch das Messgerät selbst beinhaltet. Dann lässt sich der folgende Zusammenhang für die Modellierung von  $\vec{y}$  formulieren:

$$\vec{y}_{Mod} = \vec{f}(\vec{x}, \vec{u}) \quad (3.18)$$

Um das inverse Problem näherungsweise analytisch lösen zu können ist es nötig, die Funktion  $\vec{f}$  zu linearisieren, da zur Lösung dieses Problems das Newtonsche Iterationsverfahren verwendet wird, für welches dieser Schritt notwendig ist. Dieses Verfahren wird weiter unten in seinen Grundzügen beschrieben. Dies geschieht um den besten vorhandenen Schätzwert für den Vektor  $\vec{x}$  herum. Der Vektor mit diesen Schätzungen wird als  $\vec{x}_i$  bezeichnet. Die linearisierte Gleichung ergibt sich dann zu:

$$\vec{y}_{Mod} \approx \vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i, \vec{u}) + \frac{\partial \vec{f}(\vec{x}_i, \vec{u})}{\partial \vec{x}} (\vec{x} - \vec{x}_i) = \vec{y}(\vec{x}_i, \vec{u}) + \mathbf{K}_i (\vec{x} - \vec{x}_i), \quad (3.19)$$

wobei  $\mathbf{K}_i$  die  $m_{max} \times n_{max}$ -dimensionale Jacobi-Matrix darstellt, welche sich aus den partiellen Ableitungen  $\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{x}}$  an der Stelle  $\vec{x}_i$  zusammensetzt. Man beachte, dass in diesem Unterkapitel Matrizen durch fettgedruckte Großbuchstaben symbolisiert werden.

Im Normalfall gilt  $m_{\max} > n_{\max}$ , somit ist das Inversionsproblem überdeterminiert. Um die Gleichung zu minimieren, wird die quadratische Norm der Differenz zwischen  $\vec{y}_{Mod}$  und  $\vec{y}_{Mess}$  minimiert, welche mit der Inversen der Kovarianzmatrix der Messung  $\mathbf{S}_y$  gewichtet wird.

$$\min(\|\vec{y}_{Mess} - \vec{y}_{Mod}(\vec{x})\|_{\mathbf{S}_y^{-1}}^2) \approx \min(\|\vec{y}_{Mess} - [\vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i) + \mathbf{K}_i(\vec{x} - \vec{x}_i)]\|_{\mathbf{S}_y^{-1}}^2), \quad (3.20)$$

wobei die Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_y$  auf der Diagonalen die Varianzen der einzelnen Messungen und auf den Offdiagonalelementen Korrelationen zwischen den Messfehlern beinhaltet.

Im gewünschten Fall ergibt sich bei einem gut gewählten Vektor  $\vec{x}_i$  für diese Gleichung schon ein sehr kleiner Wert. Nun wird mithilfe des Newtonschen Iterationsverfahrens versucht, einen Vektor  $\vec{x}_{i+1}$  zu finden, welcher einen noch kleineren Wert als Ergebnis dieser Gleichung liefert. In diesem Verfahren werden Nullstellen einer Funktion gesucht, ausgehend von einem Schätzwert für eine Nullstelle. Die Funktion wird an der Stelle des Schätzwerts linearisiert und dann die Nullstelle dieser Tangente an die Funktion als neuer Schätzwert angenommen. Diese Iteration wird so lange weitergeführt, bis eine vorher festgelegte Schranke unterschritten wird, wobei der letzte Schätzwert dann als tatsächliche Nullstelle genommen wird.

Als Abschätzung des Zustandsvektors  $\vec{x}_{i+1}$  für den  $i + 1$ ten Zeitschritt ergibt sich hiermit folgende Gleichung:

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i)^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{Mess} - \vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i)) \quad (3.21)$$

Levenberg (1944) und Marquardt (1963) führten einen Dämpfungsterm ein, der bei einem - wie hier vorliegenden - stark nicht-linearen Gleichungssystem dazu führt, dass der gültige Bereich der linearen Approximation nicht verlassen wird, ohne jedoch die Lösung des Systems zu beeinflussen. Dieser Term besteht aus dem Produkt eines Dämpfungsparameters  $\lambda$  und der Einheitsmatrix  $\mathbf{I}$ . Unter Verwendung dieses Terms wird die Gleichung 3.21 zu:

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{Mess} - \vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i)) \quad (3.22)$$

Im Falle von Konvergenz wird  $\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{Mess} - \vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i)) = 0$  und dieser Term hat keinen Einfluss auf die Lösung, da dieser Beitrag dann wegfällt. Anstelle der Einheitsmatrix können auch andere Matrizen verwendet werden.

Wird die Lösung aufgrund eines zu starken Rauschfehlers (vgl. Unterkapitel 3.3.5) oder nahezu linear voneinander abhängiger bestimmender Gleichungen in Gleichungssystem 3.19 instabil, so kann eine Nebenbedingung

$$\mathbf{B}(\vec{x} - \vec{x}_0) = \vec{r} \quad (3.23)$$

gestellt werden, damit Gleichung 3.21 oder Gleichung 3.22 lösbar wird.  $\mathbf{B}$  ist hier eine  $n_{\max} \times n_{\max}$  dimensionale Matrix und  $\vec{r}$  ein  $n_{\max}$ -dimensionaler Vektor. Der Vektor  $\vec{x}_0$  ist ein a priori Satz an Zustandsgrößen, welcher frei gewählt werden kann, sowie auch  $\vec{r}$  frei gewählt werden kann.

Kombiniert mit Gleichung 3.20 ergibt die Nebenbedingung:

$$\min(\|\vec{y}_{Mess} - (\vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i) + \mathbf{K}_i(\vec{x} - \vec{x}_i))\|_{\mathbf{S}_y}^2 + \gamma \|\mathbf{B}(\vec{x} - \vec{x}_0) - \vec{r}\|^2) \quad (3.24)$$

Der Wert von  $\gamma$  reguliert hier die Stärke des Einflusses der Nebenbedingung. Für  $\vec{r}$  bietet sich in der Praxis oft  $\vec{r} = \vec{0}$  an. Diese Nebenbedingung kann verschiedene Effekte auf das gewonnene Höhenprofil ausüben, je nachdem welche Matrix  $\mathbf{B}$  gewählt wird (siehe unten).

Dies führt beim ersten Newtonschen Iterationsschritt zu:

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_0 + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} ((\vec{y}_{Mess} - \vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i)) - \mathbf{K}_i(\vec{x}_0 - \vec{x}_i)) \quad (3.25)$$

Wird diese Gleichung auf den Vektor  $\vec{x}_i$  anstelle von  $\vec{x}_0$  bezogen, so ergibt sich

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{Mess} - \vec{y}_{Mod}(\vec{x}_i)) + \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B}(\vec{x}_0 - \vec{x}_i)) \quad (3.26)$$

Die in Gleichung 3.24 eingeführte Nebenbedingung wird als Regularisierung bezeichnet. Es sind verschiedene Matrizen  $\mathbf{B}$  sinnvoll, wie etwa als einfachster Operator zur Regularisierung die Einheitsmatrix bei  $\vec{x}_0 = \vec{0}$  und  $\vec{r} = \vec{0}$ . Die Nebenbedingung von Gleichung 3.23 wird dann zu:

$$\mathbf{B}_1 \vec{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_{max}-1} \\ x_{n_{max}} \end{pmatrix} = \vec{0} \quad (3.27)$$

In diesem Fall würde die Nebenbedingung in Gleichung 3.26 dazu führen, dass die Lösung - also das gesuchte Höhenprofil eines Gases - insgesamt in Richtung Null gezogen würde, während in dem Fall  $\vec{x}_0 \neq \vec{0}$  die Lösung in Richtung des a priori Profils  $\vec{x}_0$  gezogen würde.

Oft verwendet wird die Regularisierung von Tikhonov (1963). Diese Nebenbedingung führt bei atmosphärischen Retrievals dazu, dass eine Glättung von Vertikalprofilen atmosphärischer Zustandsgrößen erzwungen wird, indem Differenzen zwischen

den Zustandsgrößen auf benachbarten Höhenstützstellen künstlich verringert werden. Bei  $\vec{x}_0 = \vec{0}$  und  $\vec{r} = \vec{0}$  sähe die Nebenbedingung dann folgendermaßen aus:

$$\mathbf{B}_2 \vec{x} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_{max}-1} \end{pmatrix} = \vec{0} \quad (3.28)$$

Neben diesen Beispielen gibt es noch weitere Optionen für die Wahl von  $\mathbf{B}$  (für Informationen über weiterführende Literatur siehe z. B. von Clarmann, 2003).

Unter Zuhilfenahme Bayes'scher Statistik und unter der Bedingung, dass die Lösung so nahe wie möglich bei der a priori Information sein soll, ergibt sich

$$\begin{aligned} \vec{x}_{i+1} = & \vec{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_{apriori}^{-1})^{-1} \times \\ & \times (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{Mess} - \vec{y}(\vec{x}_i)) - \mathbf{S}_{apriori}^{-1} (\vec{x}_0 - \vec{x}_i)), \end{aligned} \quad (3.29)$$

wobei  $\mathbf{S}_{apriori}$  die Kovarianzmatrix der Unsicherheiten der a priori Information über den a priori Parametervektor  $\vec{x}_0$  ist. Die Lösung ist hier das bestmöglich gewichtete Mittel aus Messergebnis und a priori Information.

### 3.3.4 Prozessierung der Messdaten

In diesem Unterkapitel werden die Prozessierungsschritte vorgestellt, welche von den ursprünglichen Messdaten von MIPAS zu atmosphärischen Spurengasprofilen führen.

Zunächst liegen die Level-0-Daten als zeitlich geordnete Rohdaten vor. Falls Daten fehlen, oder fehlerbehaftet sind, wird mit diesen Daten nicht weiter gearbeitet. Die Daten werden komprimiert vom Satelliteninstrument zum Boden geschickt. Hier werden dann die Interferogramme erzeugt, die sogenannten Level-1a-Daten. Dann folgt die Prozessierung zu den Level-1b-Daten. Diese sind kalibrierte Emissionsspektren und werden erzeugt durch Fourier-Transformation und Kalibration, wie zum Beispiel in Kleinert und Trieschmann (2007) beschrieben. Die Level-1b-Daten sind die Grundlage für die Level-2-Prozessierung.

Die Level-2-Daten sind die berechneten Vertikalprofile von Druck, Temperatur und die Mischungsverhältnisse der Spurengase, welche durch die in Unterkapitel 3.3.3 beschriebenen Methoden erzeugt werden. Es gibt an verschiedenen Orten Prozessoren, um die Level-2-Daten zu berechnen. In dieser Arbeit und in der SAT-Gruppe des IMK-ASF allgemein werden vom IMK Retrievalprozessor erzeugte Daten verwendet. Die von der ESA berechneten Level-1b-Daten sind die Eingangsdaten für die Prozessierung am IMK.

Das RCP (Retrieval Control Program) fungiert als die Steuerung des IMK Prozessors. Es beinhaltet das Strahlungsübertragungsmodell KOPRA (**K**arlsruhe **O**ptimized and **P**recise **R**adiative transfer **A**lgorithm), welches in Stiller (2000) beschrieben ist und den Inversionsalgorithmus INVERS. Die Retrievalgleichungen, welche in den folgenden Unterkapiteln gezeigt werden, dienen dazu, aus den gemessenen Spektren Vertikalprofile inklusive Fehleranalyse, Averaging Kernel, vertikale Auflösung und andere Größen zu berechnen.

### 3.3.5 Fehlerabschätzung

Die Ergebnisvektoren der Inversionsrechnung  $\vec{x}$  unterliegt mehreren Fehlerquellen. Zu dem Gesamtfehler tragen

1. der Rauschfehler durch spektrales Rauschen im gemessenen Spektrum
2. der Modell- und Parameterfehler etwa durch Näherungen oder numerische Effekte in dem Strahlungsübertragungsmodell oder der Modellierung der Effekte im Messgerät bzw. durch Unsicherheiten in dem am Anfang des Unterkapitels 3.3.3 eingeführten Vektor  $\vec{u}$
3. der Glättungsfehler durch die endliche räumliche Auflösung bei einer Messung

bei (Rodgers, 2000). Es gilt:

$$\mathbf{S}_x = \mathbf{S}_{x,Rauschen} + \mathbf{S}_{x,\vec{u}} + \mathbf{S}_{x,Glättung}, \quad (3.30)$$

wobei  $\mathbf{S}_{x,\vec{u}}$  die Kovarianzmatrix des Modell- und Parameterfehlers ist.

Da diese Darstellung für weitere Berechnungen am besten geeignet ist, werden hier alle Fehlerquellen durch ihre Kovarianzmatrizen repräsentiert. Die Diagonale beinhaltet die Varianzen  $\sigma_{x,n}^2$  (mit  $n \hat{=}$  Fehlerquelle) und außerhalb der Diagonalen stehen die Kovarianzen  $\sigma_{x_i,n} \times \sigma_{x_j,n}$ .

#### 3.3.5.1 Rauschfehler

Bei spektralen Messungen gibt es immer durch unterschiedliche Störeinflüsse ein zusätzliches zufallsbedingtes Signal, welches auch negative Werte annehmen kann. Dieses Signal wird spektrales Rauschen genannt. Ist dieser zufällige Messfehler  $\sigma_y$  bekannt, so überträgt sich dieser auf den Vektor  $\vec{x}$  durch

$$\sigma_{x,Rauschen} = \frac{\partial x}{\partial y} \sigma_y. \quad (3.31)$$

Nach von Clarmann (2003) wird die Kovarianzmatrix des Rauschfehlers im Vektor  $\vec{x}$  im Falle eines Retrievals ohne Regularisierung folgendermaßen berechnet:

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x},Rauschen} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K})^{-1}. \quad (3.32)$$

Wird eine Regularisierung vorgenommen, dann ändert sich diese Gleichung zu

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x},Rauschen} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1}, \quad (3.33)$$

wobei  $\mathbf{R}$  hier für den jeweiligen Regularisierungsterm steht, wie zum Beispiel  $\gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B}$  im Falle einer Tikhonov-Regularisierung wie in Gleichung 3.28. Die Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_{\mathbf{y}}$  der Werte im Spektrum ist eine Diagonalmatrix, falls die Einzelmessungen als statistisch unabhängig voneinander betrachtet werden, jedoch können gewisse Behandlungen im Rahmen der Prozessierung zu einer Abhängigkeit verschiedener Messungen führen (von Clarmann, 2003).

Rodgers (2000) definiert die sogenannte Gain-Matrix  $\mathbf{G}_{\mathbf{y}}$  als:

$$\mathbf{G}_{\mathbf{y}} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1}, \quad (3.34)$$

wodurch Gleichung 3.33 sich verkürzt darstellen lässt:

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x},Rauschen} = \mathbf{G}_{\mathbf{y}} \mathbf{S}_{\mathbf{y}} \mathbf{G}_{\mathbf{y}}^T. \quad (3.35)$$

### 3.3.5.2 Modell- und Parameterfehler

Die Fehler  $j$  (mit  $j = 1, 2, \dots, j_{max}$ , mit  $j_{max}$  als die Anzahl derartiger Fehler) im Modell oder in den Parametern, welche sich auf den Ergebnisvektor  $\vec{x}$  auswirken als eine Abweichung vom wahren Wert können approximiert werden durch:

$$\Delta \vec{x}_j = \begin{pmatrix} \Delta x_{1,j} \\ \Delta x_{2,j} \\ \vdots \\ \Delta x_{n_{max},j} \end{pmatrix} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} (\vec{y}_{gestört,j} - \vec{y}_{ungestört}). \quad (3.36)$$

Hierbei ist  $n_{max}$  die Anzahl der Ergebnisparameter, die durch diese Fehler beeinflusst werden,  $\vec{y}_{ungestört}$  das Resultat der Vorwärtsrechnung  $\vec{f}(\vec{x}, \vec{u})$  mit dem vorher berechneten Ergebnisvektor  $\vec{x}$  als Ausgangspunkt.  $\vec{y}_{gestört,j}$  ist das Resultat einer Vorwärtsrechnung, bei welcher der Parameter  $u_j$  um eine Standardabweichung gestört oder der physikalische Effekt  $u_j$  vernachlässigt wurde. Derartige Fehlerbeiträge können etwa Unsicherheiten in der Temperatur oder den Konzentrationen von das betrachtete Spektrum beeinflussenden Gasen, Fehler im Elevationswinkel, Vernachlässigung von Übergangskopplungen oder eine falsche Annahme eines lokalen

thermodynamischen Gleichgewichts sein (von Clarmann, 2003). Bei Vertikalprofilen atmosphärischer Größen können verschiedene fehlerbehaftete Parameter untereinander korreliert sein.

Nach von Clarmann (2003) ergibt sich der Parameterfehler als:

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x},\vec{u}} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K}_{\mathbf{u}} \mathbf{S}_{\mathbf{u}} \mathbf{K}_{\mathbf{b}}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1}, \quad (3.37)$$

wobei  $\mathbf{K}_{\mathbf{u}}$  eine Matrix der Dimension  $m_{max} \times j_{max}$  ist und die partiellen  $\frac{\partial \bar{f}}{\partial u}$  Ableitungen des Spektrums nach den  $j_{max}$  unsicheren Parametern  $u_j$  enthält.  $\mathbf{S}_{\mathbf{u}}$  ist die Kovarianzmatrix der Parameter  $u_j$ .

### 3.3.5.3 Glättungsfehler

Der Glättungsfehler ist der Fehler, welcher durch räumliche Verschmierung aufgrund der Regularisierung entsteht. Die Auflösungsmatrix (engl. averaging kernel matrix, AKM) beschreibt die räumliche Auflösung (Rodgers, 2000):

$$\mathbf{A} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{K} \quad (3.38)$$

Üblicherweise und im besten Falle sind auf der Diagonalen dieser Matrix die Maximalwerte konzentriert und die Werte nehmen ab, je weiter sie von der Diagonalen entfernt sind. Die Zeilen der Matrix geben an, wie stark verschiedene Orte in der Atmosphäre das Ergebnis des Retrievals auf einer Höhenstützstelle beeinflussen. Die Spalten geben an, wie der gesamte Ergebnisvektor  $\vec{x}$  des Retrievals auf eine Störung in einer einzelnen Höhe reagiert.

Aus der Auflösungsmatrix kann durch Bestimmung der Halbwertsbreite der Zeilen oder Spalten die vertikale Auflösung bestimmt werden (Rodgers, 2000). Wenn die Regularisierung gleich Null gesetzt würde, so wäre die Auflösungsmatrix gleich der Einheitsmatrix  $\mathbf{I}$  und das Ergebnis des Retrievals auf einer bestimmten Höhe wäre komplett unabhängig von jeder anderen Höhe, im Fall dass das Höhengitter des Retrievals mit den Tangentenhöhen übereinstimmen (abgesehen von dem Fall, dass der Elevationswinkel fehlerbehaftet ist).

Der gemittelte Rekonstruktionsfehler kann bei Kenntnis der typischen Höhenauflösung, welche hier durch die klimatologische Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_{\mathbf{x},\text{klim.}}$  repräsentiert ist, durch

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x},\text{Glättung}} = (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \mathbf{S}_{\mathbf{x},\text{klim.}} (\mathbf{A} - \mathbf{I})^T \quad (3.39)$$

angenähert bestimmt werden (von Clarmann, 2003), sollte die Regularisierung im bayesischen Sinne optimal gewählt worden sein.

# Kapitel 4

## Daten der Messgeräte

### MIPAS/Envisat und HALOE/UARS

#### 4.1 Wasserdampf-Retrieval von MIPAS und HALOE

Wie in Kapitel 3.3.3 beschrieben, müssen in jedem Retrieval einige Parameter gesetzt werden, sowie gewisse Entscheidungen getroffen werden, um die Ergebnisse des Retrievals zu optimieren. Die Güte der Optimierung wird üblicherweise daran gemessen, was physikalisch für Ergebnisse zu erwarten sind, sowie anhand von Vergleichen mit von ihrer Natur her genaueren Messinstrumenten, wie etwa in-situ Messungen von Sonden.

Im Falle von MIPAS mussten bei den Retrievals aller Gase und insbesondere beim Wasserdampf-Retrieval verschiedene Konfigurationen für die HR Phase (siehe Unterkapitel 3.1.1) vor dem Ausfall des Messgeräts – welcher eine Datenlücke zwischen April 2004 und Dezember 2004 erzeugt hatte – und für die RR Phase danach verwendet werden, wobei die generelle Konfiguration in den folgenden Paragraphen beschrieben ist und für beide Zeiträume Gültigkeit besitzt. Im Laufe dieser Arbeit wurden für die erste Messphase von MIPAS die von der ESA zur Verfügung gestellten Spektren der Version V3O durch eine neu entwickelte Version V5H ersetzt und gleichermaßen die für die zweite Messphase von MIPAS vorhandenen Spektren der Version V4O durch eine neue Version V5R. In dieser Arbeit wurden die Standard Wasserdampfdaten verwendet, welche aus den beiden neueren Spektrenversionen V5H und V5R stammen. Diese Wasserdampf-Datenversionen werden gekennzeichnet durch V5H\_H2O\_20 für die Daten der ersten Phase und V5R\_H2O\_220/221 für die Daten der zweiten Messphase von MIPAS.

Beim Wasserdampfretrieval von MIPAS wurde ein logarithmisches Retrieval angewandt, um negative VMR-Werte zu vermeiden und aufgrund der über Größenordnungen variierenden VMR-Werte von Wasserdampf. Bei dieser Art des Retrievals

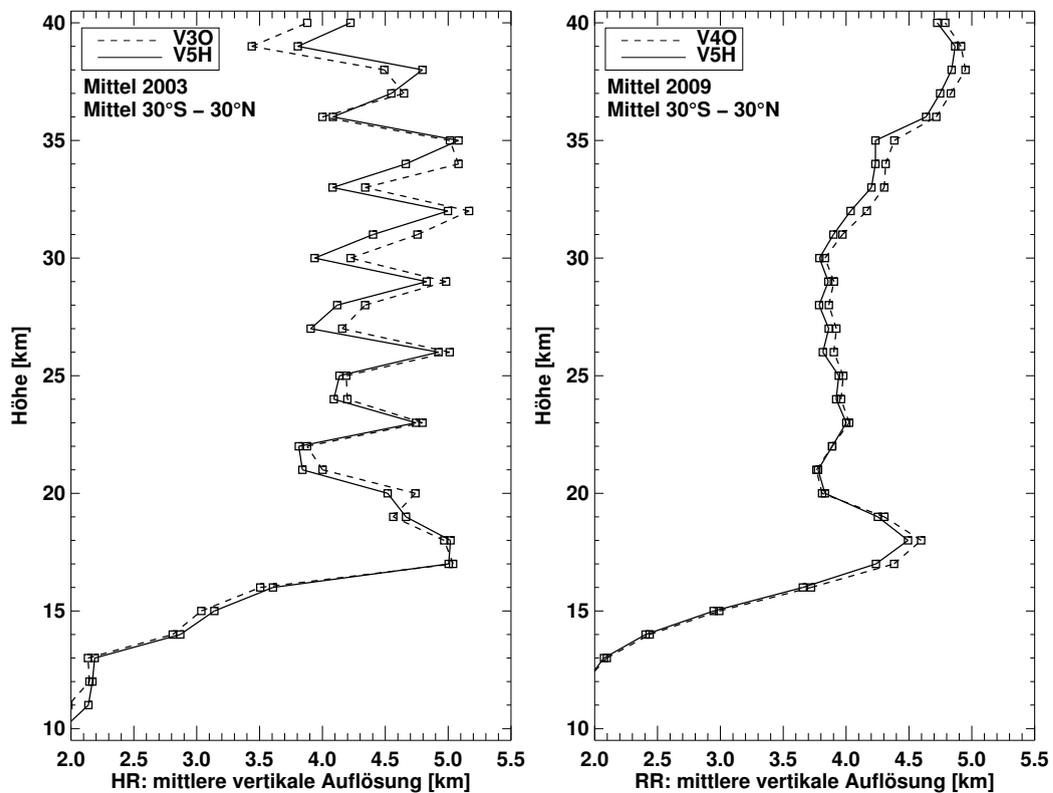


Abbildung 4.1: mittlere vertikale Auflösungen von MIPAS Wasserdampfmessungen zwischen 30°S und 30°N in einem Höhenbereich von 10 km bis 40 km. Die linke Darstellung zeigt die Auflösungen für HR-Messungen (alte Version: V3O, neue und hier verwendete Version: V5H) gemittelt über das Jahr 2003. Die rechte Darstellung zeigt die Auflösungen für RR-Messungen (alte Version: V4O, neue und hier verwendete Version: V5R) gemittelt über das Jahr 2009.

ist der Ergebnisvektor  $\vec{x}$  des inversen Problems (vergleiche Unterkapitel 3.3.3) der Logarithmus des Mischungsverhältnis eines Gases und wird dadurch gezwungen, keine negativen Werte anzunehmen. In der Stratosphäre findet man VMR-Werte von wenigen H<sub>2</sub>O-Teilchen pro Millionen Luftteilchen, während Wasserdampf in der Troposphäre bis zu ein paar Prozent der Luft ausmachen kann. Außerdem ist ein weiteres Argument für ein logarithmisches Retrieval der Jahresgang in der Höhenauflösung von atmosphärischen Fernmessgeräten in der kritischen Region der TTL, die von etwa 14 km Höhe bis 18,5 km Höhe reicht und ungefähr zwischen 30° Süd und 30° Nord liegt. Hauptsächlich in den Monaten Dezember, Januar und Februar ist es hier kalt und das Mischungsverhältnis des Wasserdampfs ist gering, womit eine schlechtere Höhenauflösung einhergeht und damit auch das gemessene Signal eine geringere Qualität aufweist.

Für die Glättung des Profils wurde die Tikhonov-Regularisierung (vergleiche Unterkapitel 3.3.3) so verwendet, dass eine unphysikalisch starke Änderung in dem Höhengradienten des Profils vermieden wird. Die mittlere Höhenauflösung aus den Reihen der Averaging Kernels (siehe Unterkapitel 3.3.3) der Standard MIPAS-Wasserdampfdaten (vergleiche Unterkapitel 3.1.1) ist in Abbildung 4.1 sowohl für den HR-Zeitraum (V3O- und V5H-Daten aus dem Jahr 2003) als auch für den LR-Zeitraum (V4O- und V5R-Daten aus dem Jahr 2009) gezeigt. Die verwendeten Daten wurden über einen Breitenbereich von 30°S bis 30°N gemittelt. In beiden Zeiträumen sind die Auflösungen besser unterhalb von etwa 17 km Höhe und liegen in etwa zwischen 2 km und 3,5 km. Oberhalb von 17 km liegen die Auflösungen in der HR-Zeit zwischen 4 km und 5 km und in der RR-Zeit im hauptsächlichen Höhenbereich zwischen 3,9 km und 4,5 km. Die mit den neuen Datenversionen V5H\_H2O\_20 und V5R\_H2O\_220/221 errechneten vertikalen Auflösungen unterscheiden sich nur gering von denen aus den alten Datenversionen V3O\_H2O\_13 und V4O\_H2O\_203.

In Milz et al. (2009) wurde die mittlere Höhenauflösung der V3O-Daten für den HR-Zeitraum generell in einem Bereich von 3,5 km - 4,5 km bestimmt und die der V4O-Datenversion im RR-Zeitraum ist unterhalb einer Höhe von 30 km in von Clarmann et al. (2009) in einem Bereich von 2 km - 4 km bestimmt worden. Laut einer weiteren Untersuchung (Tschanz et al., 2013) beträgt die mittlere Höhenauflösung für die V5R-Datenversion rund 2,3 km in 20 km Höhe und 6,9 km in 50 km Höhe.

Russell III et al. (1993) beschreiben das Retrieval von HALOE, welches mit der sogenannten „onion peeling“ Methode (vergleiche zum Beispiel Noël et al., 2010) durchgeführt wurde, bei welcher Schichtweise von außen nach innen die Mischungsverhältnisse von Gasen bestimmt werden. Die Gas-Profile werden an ihren oberen und unteren Enden stabilisiert von skalaren „optimalen Schätzwerten“ (Englisch: optimal estimation formulation). Die spektrale Abhängigkeit, inklusive der Doppler- und Lorentzverbreiterung wird explizit modelliert. Die thermalen und spektralen

---

Abhängigkeiten des Instruments selbst, wurden mithilfe eines umfangreichen Satzes von Transmissionstabellen modelliert. In dem SPARC Report N°2 (2000) wird über das HALOE Retrieval geschrieben, dass nach der Anwendung des Aerosolkorrekturalgorithmus die Unsicherheit in der Aerosolextinktion noch 7% beträgt, welche in das Wasserdampfretreival eingehen. Außerdem beträgt laut dieses Werks die vertikale Auflösung der Wasserdampfdaten der Version 19 von HALOE in etwa 2,3 km, in Übereinstimmung mit den zwischen  $\sim 2$  km – 3 km angegebenen Auflösungen in Russell III (1995).

## 4.2 Vergleich der beiden Instrumente

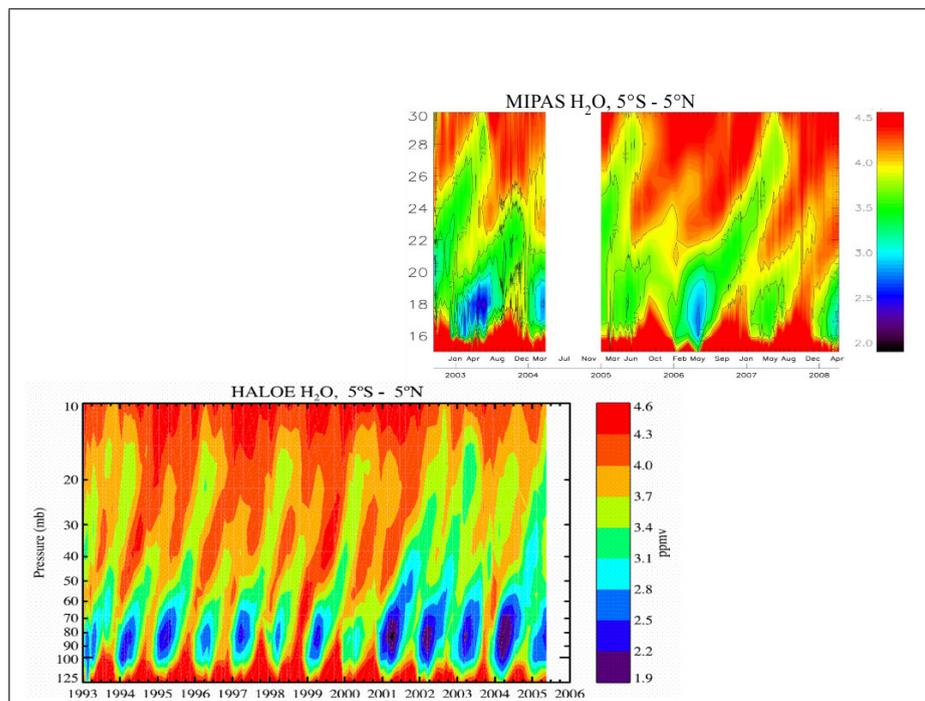


Abbildung 4.2: Vergleich der Messungen des „tape recorder“ von MIPAS und HALOE, letzteres entnommen aus Rosenlof und Reid (2008)

In Abbildung 4.2 werden die Messungen des tropischen „tape recorder“ (vergleiche hierzu Mote et al. (1996)) von HALOE und MIPAS verglichen. Der Name entstammt dem Phänomen, dass das Mischungsverhältnis von Wasserdampf in der Luft etwa in der Höhe der Tropopause festgesetzt wird und diese Luft dann mit diesem wie auf einem Magnetband gespeicherten Mischungsverhältnis von  $H_2O$  aufwärts transportiert wird. Wenn auch tendenziell die HALOE Daten etwas kleinere VMR-Werte aufweisen, stimmen die beiden Datensätze in der Geschwindigkeit des Aufwärtstransports des tape recorder Signals und der Stärke des jeweiligen Signals (man beachte

die Variation der geringsten VMR Werte in den Monaten DJF in den verschiedenen Jahren) recht gut überein.

Abbildung 4.3 zeigt einen Vergleich mittlerer Profile aus koinzidenten HALOE SR-Messungen und HALOE SS-Messungen mit MIPAS V5H und V5R Daten. Der maximale räumliche Abstand für eine Koinzidenz beträgt 800 km und die maximale Zeitdifferenz beträgt einen halben Tag.

Die beiden linken Darstellungen in der Abbildung bestehen jeweils aus den beiden gemittelten Profilen der koinzidenten Messungen. Die mittleren Darstellungen zeigen die mittlere Differenz der in die zwei Kurven der linken Darstellung eingehenden Profile der zwei Messgeräte. Die rechten Darstellungen sind wie die mittleren Darstellungen, allerdings relativ zu den HALOE VMR-Werten in Prozent. Die als gepunktete Linien gegebenen Unsicherheiten in den mittleren und rechten Darstellungen sind die Standardfehler.

Beide Vergleiche weisen oberhalb von 20 km eine prozentuale Abweichung von 5 % bis 10 % voneinander auf, wobei die Sunrise Messungen etwas näher als die Sunset Messungen an den MIPAS Messungen liegen. Hierbei weisen die MIPAS Messungen höhere VMR-Werte auf als die von HALOE.

Der Wert des Mischungsverhältnis von Wasserdampf der Hygropause wird von beiden Instrumenten ähnlich gemessen. In beiden Vergleichen ist jedoch die Hygropausenhöhe bei MIPAS in einer Höhe von 16 km gemessen und bei HALOE in einer Höhe von 17 km.

Unterhalb der Hygropause sind die prozentualen Unterschiede zwischen HALOE- und MIPAS-Messungen in beiden Vergleichen in den meisten gezeigten Höhen größer als 40 %, wobei auch in diesen Höhen HALOE weniger Wasserdampf in der Atmosphäre misst als MIPAS.

Ein weiterer systematischer Vergleich, bei welchem die MIPAS Daten aus den verschiedenen Messperioden der HR und der RR getrennt behandelt werden, findet sich in Unterkapitel 5.2, Abbildung 5.3, wo die mittleren Differenzen der beiden Instrumente in den sich überschneidenden Messzeiträumen dargestellt sind.

## 4.3 Vergleich mit anderen Messinstrumenten

### 4.3.1 MIPAS

Wie in Unterkapitel 4.1 erwähnt, waren aufgrund des Ausfalls von MIPAS, welcher eine Datenlücke von April 2004 bis Dezember 2004 zur Folge hatte, unterschiedliche Konfigurationen des Retrievals aufgrund der eingeschränkten spektralen Auflösung

---

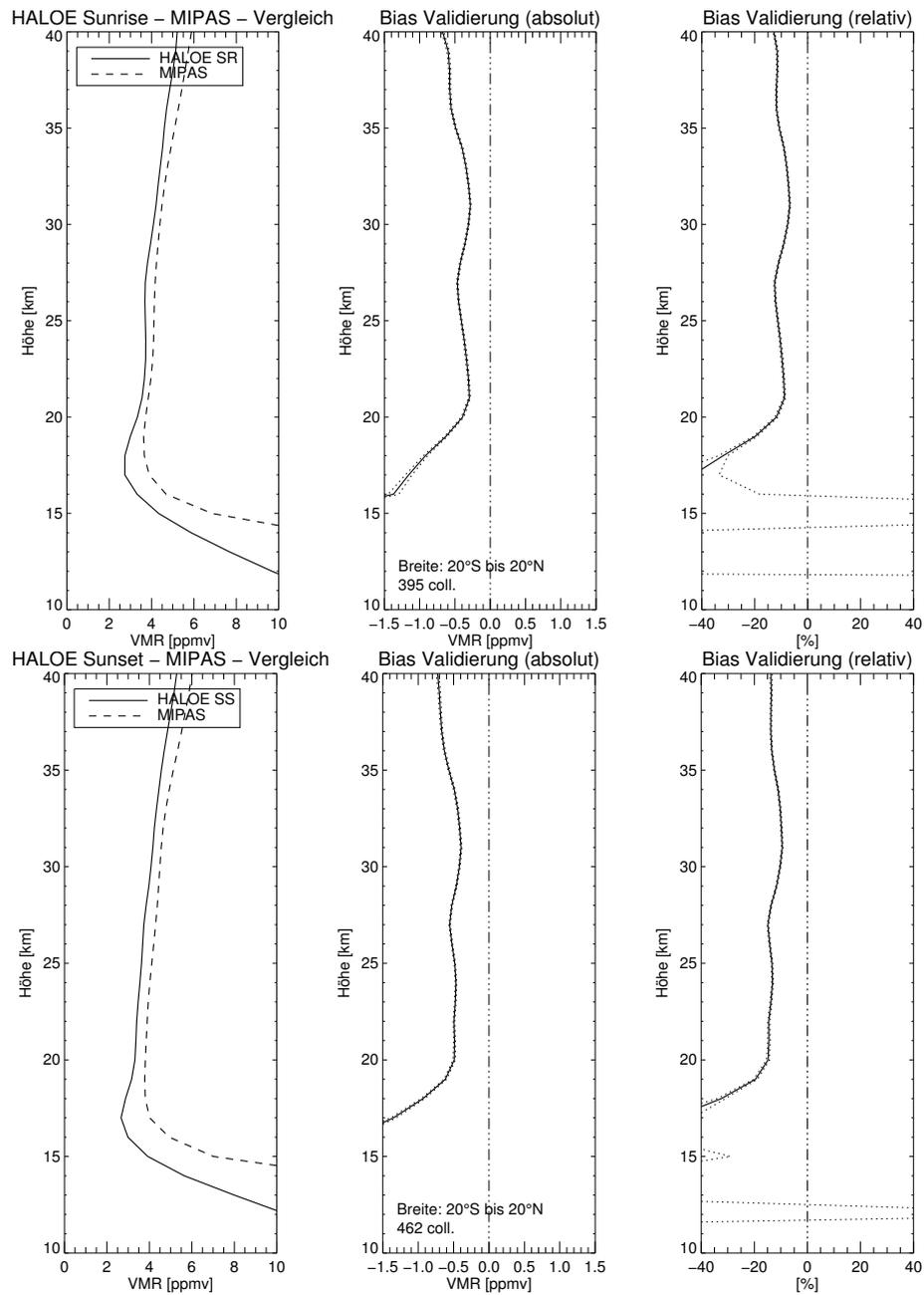


Abbildung 4.3: Vergleich der mittleren  $\text{H}_2\text{O}$ -Profile von Kollokationen zwischen  $20^\circ$  Süd und  $20^\circ$  Nord von HALOE SR Daten (oben) und HALOE SS Daten (unten) mit MIPAS. Die MIPAS V5H und V5R Daten sind beide in den Vergleich eingegangen.

nach dem Ausfall nötig. Aus diesem Grund wurden in diesem Unterkapitel die Daten dieser zwei verschiedenen Phasen der Messungen von MIPAS vor und nach dem Ausfall getrennt validiert.

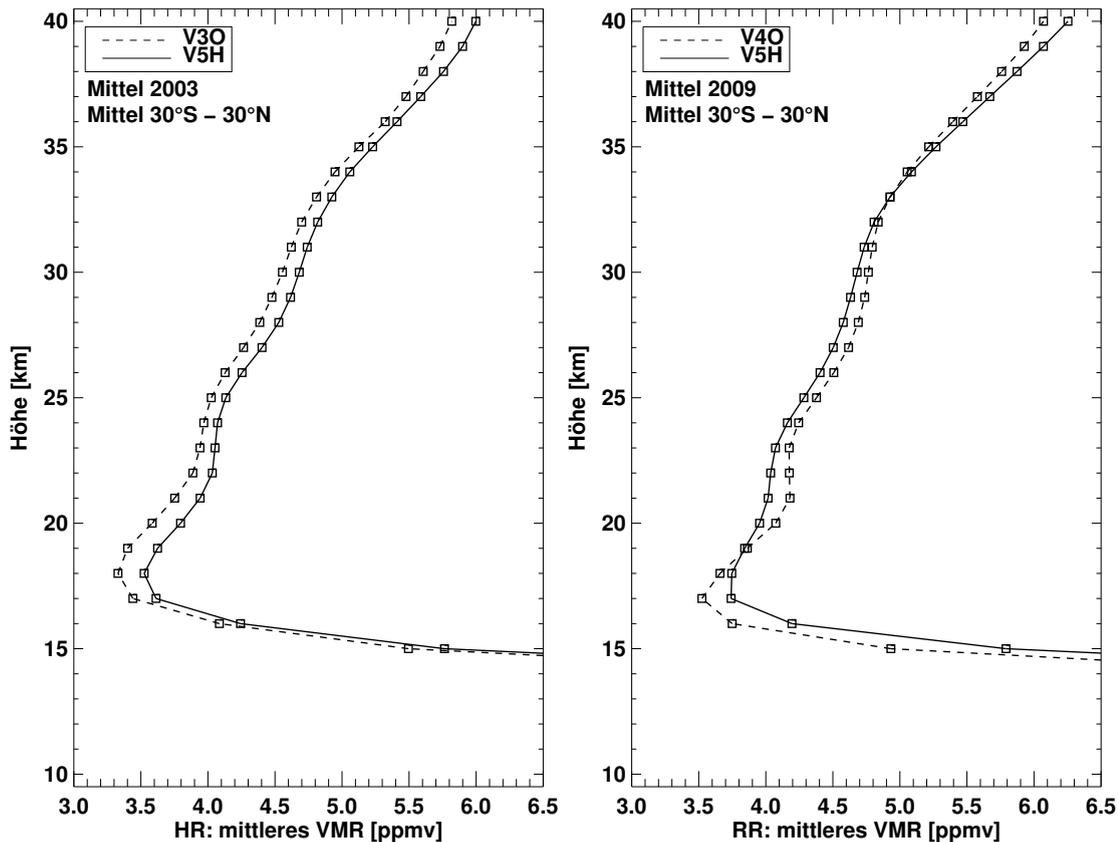


Abbildung 4.4: **Links:** Vergleich von MIPAS V30 mit MIPAS V5H Daten zwischen 30° Süd und 30° Nord im Jahr 2003. **Rechts:** Vergleich von MIPAS V40 mit MIPAS V5R Daten zwischen 30° Süd und 30° Nord im Jahr 2009.

Für jede dieser zwei Phasen gab es eine alte und eine neuere Version von Spektren, welche den Retrievals zugrunde lagen. Für die Retrievals aus der neueren Spektrenversion V5H für die HR Phase gibt es noch keine veröffentlichte Arbeit über die Validierung dieser Daten, und für die Retrievals aus der neueren Spektrenversion V5R für die RR Phase gibt es nur wenige. Daher wird in den Unterkapiteln 4.3.1.1 für die Vergleiche in der HR Phase und Unterkapitel 4.3.1.2 für die Vergleiche in der RR Phase, auch auf Arbeiten zu den Validierungen der älteren Wasserdampfprodukte von MIPAS, V30 (für die HR Phase) und V40 (für die RR Phase) verwiesen. Um einen Eindruck über die Veränderung durch die neu eingeführten Spektren auf die mittleren Profile von Wasserdampf zu gewinnen, ist in Abbildung 4.4 ein Vergleich der jeweils älteren und neueren Datenversion für beide Messphasen (links: HR, rechts: RR) zwischen 30°S und 30°N gezeigt.

Wie in der linken Darstellung der Abbildung zu erkennen ist, sind keine großen

Unterschiede zwischen den Versionen V3O\_H2O\_13 und V5H\_H2O\_20 zu sehen. Nur in der Tropopausenhöhe ist eine größere Abweichung bis zu  $\sim 0,2$  ppmv zu sehen, welche aber zur Stratosphäre hin abnimmt. Im Allgemeinen zeigen die V3O Daten etwas geringere Werte auf als die Daten der Version V5H.

Die in der rechten Darstellung der Abbildung gezeigten Vergleiche der Versionen V4O\_H2O\_203 und V5R\_H2O\_220/221 zeigen auch nur geringe Unterschiede in den Profilen auf. Die Daten der älteren Version V4O zeigen um  $\sim 0,1-0,2$  ppmv geringere Werte in Tropopausenhöhe auf als die von Version V5R, haben aber ab etwa 19 km um  $\sim 1$  ppmv höhere Werte, wobei der Unterschied nach oben hin abnimmt. Neben Verweisen auf Validierungen der Datenversion V4O\_H2O\_203 sind in Unterkapitel 4.3.1.2 auch diverse Vergleiche mittlerer Profile und den mittleren Differenzen der zu den mittleren Profilen beitragenden koinzidenten Messungen gezeigt.

#### 4.3.1.1 Version V5H

Die in dieser Arbeit verwendeten MIPAS-Daten der Retrievalversion V5H\_H2O\_20 sind ausschließlich für die Zeit vom Start der Messungen von MIPAS bis März 2004 gültig, als das Instrument für neun Monate ausgefallen ist. Vergleiche zwischen der älteren MIPAS-Retrievalversion (Version V3O) wurden in Milz et al. (2009) mit zahlreichen Messinstrumenten gemacht. Die MIPAS H<sub>2</sub>O-Daten wurden in dieser Veröffentlichung den Daten der Satelliteninstrumente HALOE, ACE-FTS, und POAM III, denen von dem am Boden stationierten Instrument MIAWARA, denen des Balloninstrumentes MIPAS-B und des Instruments AMSOS, welches von einem Flugzeug aus gemessen hat, sowie den Daten von mehreren in-situ (Messungen am Ort des Messgeräts wie bei z.B. Ballonsonden) messenden Instrumenten gegenübergestellt. Das Ergebnis dieser Studien war, dass weder eine offensichtliche Abweichung der von MIPAS gemessenen Wasserdampfprofile in der Stratosphäre zu geringeren noch zu höheren Werten hin festgestellt werden konnte. Die Messungen von MIPAS im Infrarotbereich zeigten tendenziell gegenüber den im Mikrowellenbereich messenden Geräten höhere VMR-Werte und gegenüber den im sichtbaren oder ultravioletten Spektrum messenden Geräten geringere VMR-Werte.

Bei einer groß angelegten Untersuchung wurden die Unterschiede in den H<sub>2</sub>O-Messungen von elf Satelliteninstrumenten (LIMS, SAGE II, SAGE III, UARS-MLS, HALOE, POAM III, SMR, MIPAS (V3O und V5R), SCIAMACHY, ACE-FTS, Aura-MLS) in Hegglin et al. (2013) bestimmt. Die zeitliche Abfolge und eine kurze Beschreibung dieser Instrumente ist in Unterkapitel 2.8.1 gegeben. Diese Vergleiche beruhen auf zonalen, monatlichen Mitteln, im Unterschied zu den Profil-zu-Profil-Vergleichen in den Unterkapiteln 4.2 und 4.3.1.2. MIPAS V3O H<sub>2</sub>O Daten wurden in den meisten Bereichen der Atmosphäre in  $\pm 5\%$  des MIM (multi-instrument mean) gefunden, außer in der UTLS Region, wo eine Abweichung von  $-25\%$  vom MIM

festgestellt wurde. Außerdem wurde festgestellt, dass die Jahresgangsamplitude in der tropischen Tropopausenhöhe zu gering ausfällt, was durch einen vom Zustand der Atmosphäre abhängigen Averaging Kernel erklärt werden kann. Wie man anhand der linken Darstellung von Abbildung 4.4 sehen kann, ist die Abweichung in der UTLS Region mit Einführung der neueren Datenversion V5H\_H2O\_20 geringer geworden.

#### 4.3.1.2 Version V5R

In diesem Unterkapitel werden Vergleiche von koinzidenten Messungen von MIPAS (V5R-Datenversion) und jeweils eines weiteren Messinstruments während einer sich überschneidenden Messzeit gezeigt.

Die hier verwendeten Wasserdampf messenden Satelliteninstrumente für diese Vergleiche waren EOS MLS (auch genannt Aura MLS, im Folgenden meist MLS), ACE-FTS, SAGE II, SAGE III, POAM III, SOFIE. Eine kurze Beschreibung dieser Instrumente findet sich in Unterkapitel 2.8.1.

Bei allen Instrumenten außer MLS und SOFIE waren hier die Koinzidenzkriterien mit MIPAS eine räumliche Entfernung von 1000 km und ein zeitlicher Abstand von 24 h. Bei dem Vergleich mit Daten von SOFIE wurden diese Kriterien aufgrund der zahlreichen Koinzidenzen auf 500 km und 6 h verringert und bei MLS 250 km und 6 h. Die Vergleiche wurden durchgeführt wie in Unterkapitel 4.2 bezüglich Abbildung 4.3 beschrieben.

In Abb. 4.5 ist der Vergleich zwischen MIPAS und dem MLS-Instrument gezeigt. Die verwendeten Kollokationen befinden sich zwischen 30° Süd und 30° Nord. Oberhalb von 16 km haben die verglichenen mittleren Profile nur einen prozentualen Fehler von  $< 5\%$ . Unterhalb von 17 km hat MIPAS eine positive Abweichung gegenüber MLS. Die Hygropause wird ähnlich aufgelöst. Die Statistik des Vergleichs ist sehr gut, da die Anzahl der Kollokationen deutlich größer ist als bei den anderen hier gezeigten Vergleichen. Deshalb geht die Unsicherheit der Abweichung gegen Null. In den anderen Abbildungen in diesem Unterkapitel ist die Unsicherheit der Abweichung sowie der relativen Abweichung durch eine gepunktete Linie dargestellt.

In Abb. 4.6 ist der Vergleich zwischen MIPAS und ACE-FTS auf dem Satelliten Scisat gezeigt. Die verwendeten Kollokationen befinden sich zwischen 30° Süd und 30° Nord. Die Übereinstimmung der beiden Profile zwischen 17 km und 30 km ist sehr gut mit einem prozentualen Fehler von  $< 5\%$ . Auch die Hygropause wird ähnlich aufgelöst. Oberhalb von 30 km und unterhalb von 17 km Höhe nimmt der Fehler zu, bis maximal rund 20%.

Die Abb. 4.7 zeigt den Vergleich des mittleren MIPAS-H<sub>2</sub>O-Profiles mit dem mittleren Profil des Instruments SAGE II ebenfalls zwischen 30° Süd und 30° Nord. Die

---

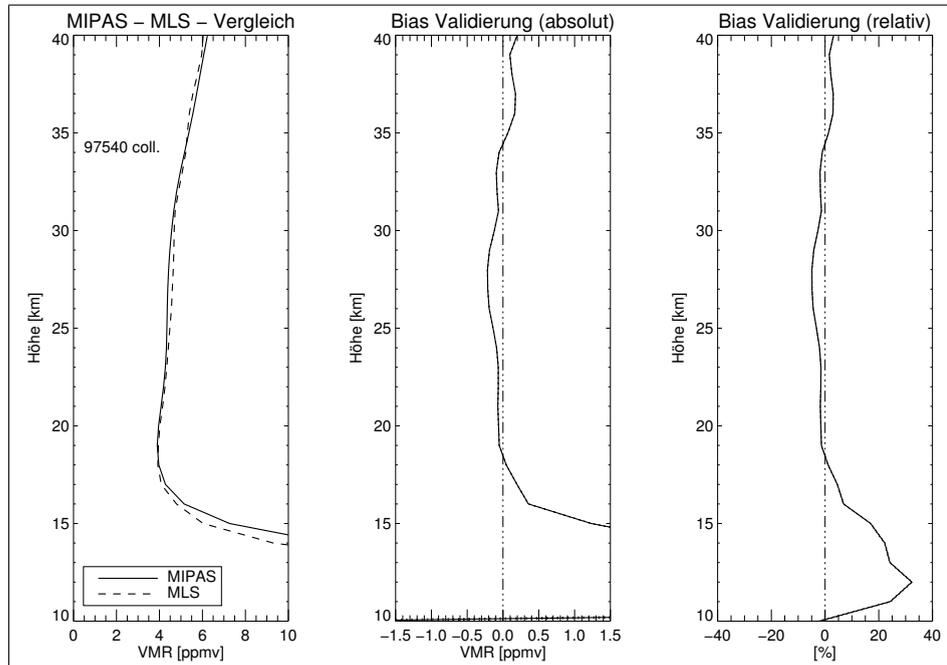


Abbildung 4.5: Vergleich von MIPAS V5R mit Aura MLS Daten zwischen 30° Süd und 30° Nord.

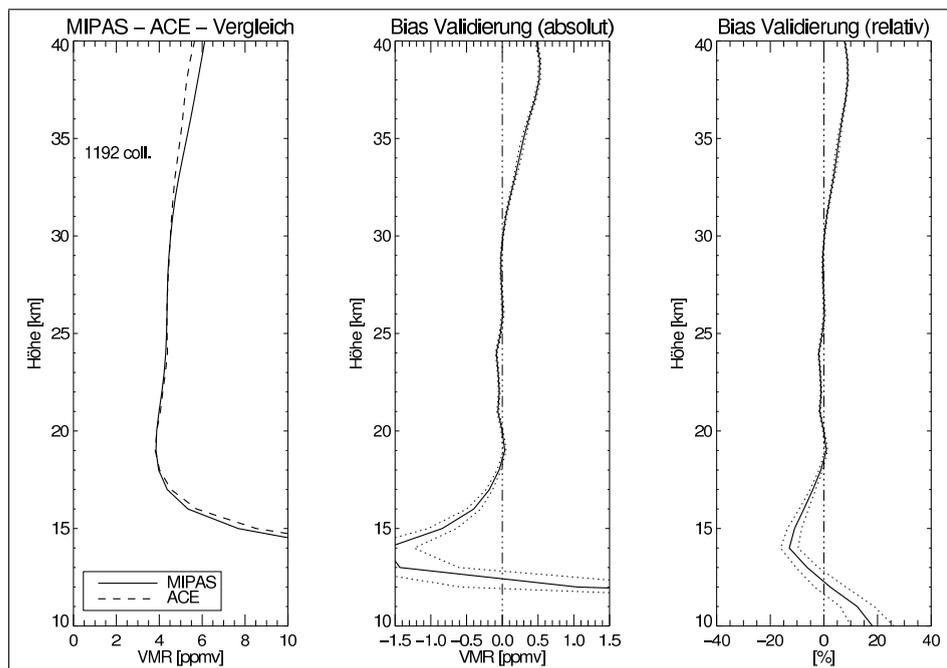


Abbildung 4.6: Vergleich von MIPAS V5R mit Scisat ACE-FTS Daten zwischen 30° Süd und 30° Nord.

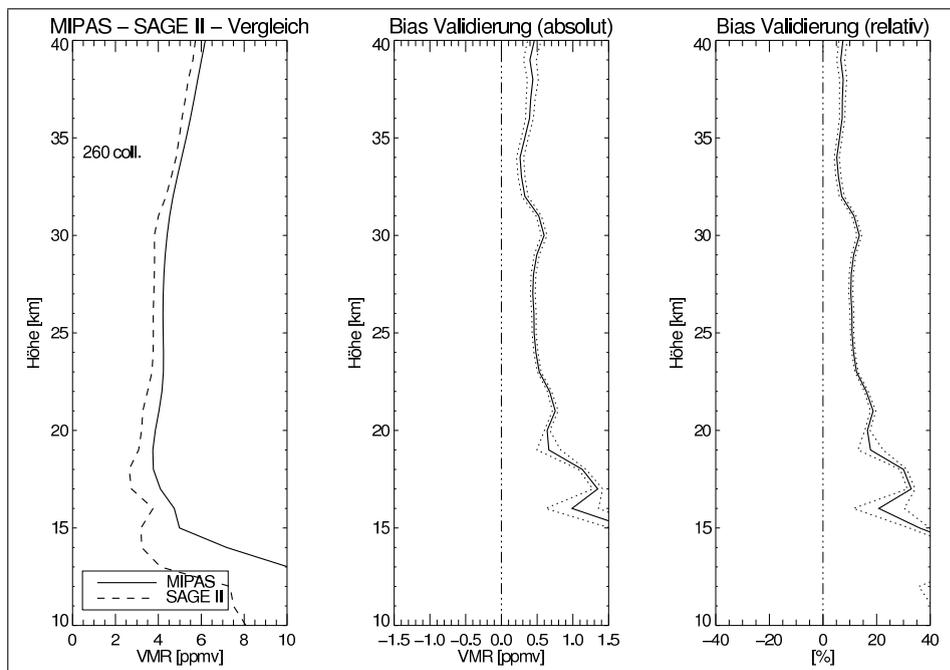


Abbildung 4.7: Vergleich von MIPAS V5R mit ERBS SAGE II Daten zwischen 30° Süd und 30° Nord.

prozentuale Abweichung ist am geringsten oberhalb von 20 km, wo er zwischen 5 % und 18 % schwankt. Unterhalb von 20 km wird der prozentuale deutlich größer und übersteigt unterhalb einer Höhe von 15 km 40 %.

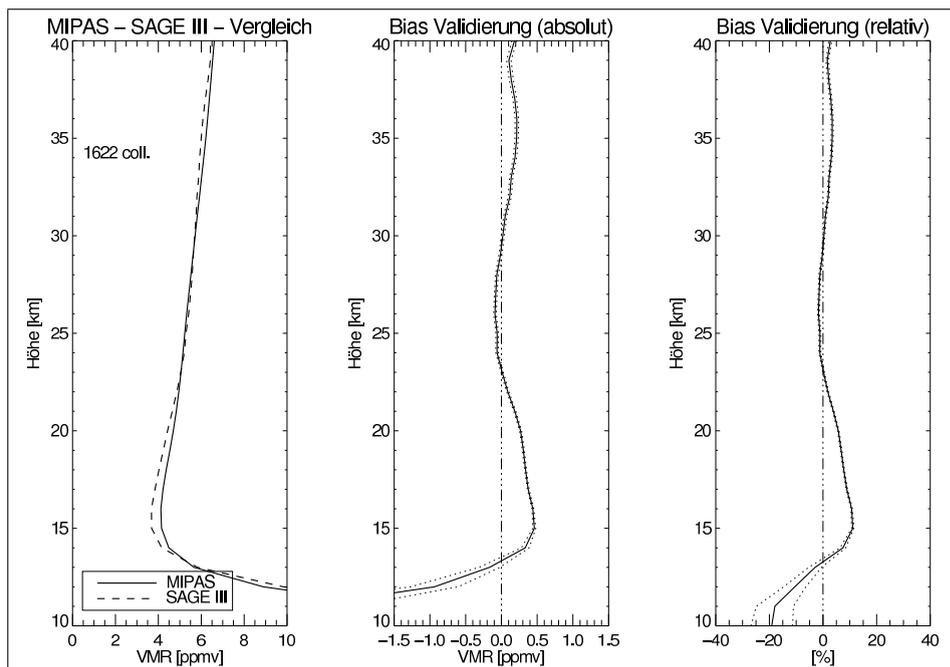


Abbildung 4.8: Globaler Vergleich von MIPAS V5R mit dem SAGE III Instrument auf dem Satelliten METEOR 3M. Zu Details siehe Abbildung 4.9.

Abb. 4.8 zeigt den globalen Vergleich mit SAGE III auf dem Satelliten METEOR 3M. Die Übereinstimmungen des mittleren Profils ist hier recht gut, mit Fehlern zwischen 10 km und 12 km bis zu ca. 20 %. SAGE III misst hier höhere Wasserdampfkonzentration als MIPAS. Bei 15 km misst SAGE III geringere Wasserdampfkonzentration als MIPAS und der Fehler beträgt rund 15 %. In größeren Höhen werden die prozentualen Fehler geringer und schwanken oberhalb von 23 km zwischen -5 % und 5 %.

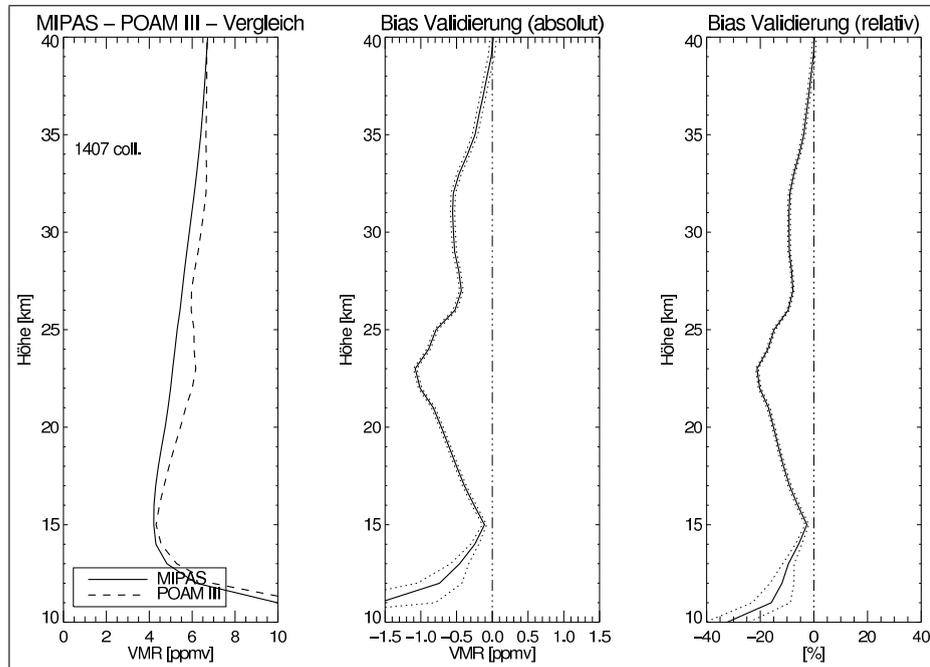


Abbildung 4.9: Vergleich von MIPAS V5R mit dem POAM III Instrument auf dem Satelliten SPOT 4. Hier sind globale Daten anstelle des 30° Süd bis 30° Nord Intervalls verwendet worden, aufgrund von mangelnden Koinzidenzen.

In der Abb. 4.9 werden POAM III Daten vom Satelliten SPOT 4 mit den MIPAS Daten verglichen. POAM III misst durchwegs etwas mehr Wasserdampf als MIPAS, wobei die größten Abweichungen bei ca. 23 km (etwa 20 % Fehler) und unterhalb von 15 km (rund 40 % Fehler) sind.

In Abb. 4.10 werden die mittleren H<sub>2</sub>O-Profile von MIPAS und SOFIE auf dem Satelliten AIM verglichen. MIPAS misst fast ausschließlich höhere Wasserdampfkonzentrationen als SOFIE. Unterhalb von 20 km ist die Abweichung groß und kann 40 % erreichen. Oberhalb hiervon ist die prozentuale Abweichung 0 - 5 %. Die Statistik ist hier ähnlich gut wie beim Vergleich von MIPAS mit MLS, da SOFIE und MIPAS ebenfalls sehr viele Kollokationen haben.

Bei der in Unterkapitel 4.3.1.1 erwähnten Untersuchung in Hegglin et al. (2013) wurden die in dieser Arbeit verwendeten MIPAS V5R H<sub>2</sub>O Daten genau wie die MIPAS V30 Daten in den meisten Bereichen der Atmosphäre in  $\pm 5\%$  des MIM

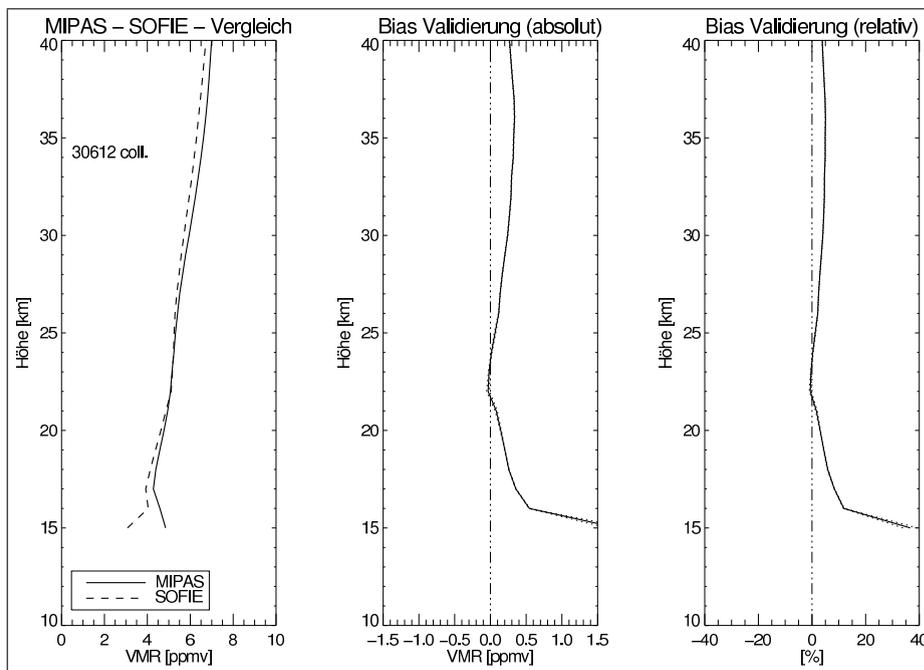


Abbildung 4.10: Vergleich von MIPAS V5R mit dem Instrument SOFIE auf dem Satelliten AIM. Zu Details siehe Abbildung 4.9.

(multi-instrument mean) bestimmt. Auch bei dieser Datenversion gab es in der UTLS Region eine Abweichung vom MIM, die mit etwa  $-10\%$  beziffert wurde. Die Jahresgangsamplitude in der tropischen Tropopausenhöhe aus diesen Daten zeigt sich, aus demselben Grund wie bei den MIPAS V30 Daten, als geringer als beim MIM.

Die beiden Unterkapitel 4.3.1.1 und 4.3.1.2 zusammenfassend, haben alle Untersuchungen zum Ergebnis, dass MIPAS Daten in der Stratosphäre eine gute Qualität mit Abweichungen  $\leq 10\%$  haben, es jedoch in der oberen Troposphäre zu größeren Abweichungen kommen kann. Dies zeigen sowohl die Profil-zu-Profil-Vergleiche, als auch die Vergleiche von zonalen Monatsmitteln in Hegglin et al. (2013).

### 4.3.2 HALOE

Die Wasserdampfmessungen von HALOE, wie auch die anderen von diesem Instrument gemessenen Daten, wurden im Laufe der Zeit sehr oft validiert. Für die  $\text{H}_2\text{O}$ -Daten der Version v19, welche in dieser Arbeit verwendet wurden, ist jedoch – bis auf die am Ende dieses Unterkapitels erwähnte Veröffentlichung – keine detaillierte Studie bezüglich der Validierung unternommen worden.

Harries et al. (1996) haben jedoch für eine Vorgängerversion (v17) von HALOE  $\text{H}_2\text{O}$ -Retrievals eine Validierung mit verschiedenen Instrumenten durchgeführt, sowie eine Fehlerabschätzung der Daten gegeben. Weiter unten werden in der Literatur

erwähnte Unterschiede zwischen der Versionen v17 und v19 beschrieben. Der erwartete totale Fehler von HALOE v17 H<sub>2</sub>O variiert von  $\pm 98\%$  bei 0.01 mbar bis zu  $\pm 14\%$  bei 1 – 4 mbar (siehe "Table 1" in diesem Paper). Die Druckniveaus, welche hier in der Arbeit betrachtet werden, reichen ungefähr von einem Wert von 100 mbar ( $\approx 16$  km Höhe) bis zu einem Wert von 10 mbar ( $\approx 31$  km Höhe). Der aus der Tabelle entnommene erwartete totale Fehler in diesem Bereich besitzt einen maximalen Wert von 27 % bei 100 mbar.

Desweiteren sind hier Vergleiche von mittleren HALOE H<sub>2</sub>O-Profilen gezeigt bei 40° Nord mit den auch in Unterkapitel 5.3.1 verwendeten FPH-(**F**rost-**P**oint **H**ygrometer)-Messungen über Boulder in Colorado, bei 34.4° Nord mit Messungen eines bodengebundenen Mikrowellenmessinstruments durch das Table Mountain Observatory in Kalifornien, bei 36.3° Nord mit FIRS Balloon (**F**ar-**I**nfrared **S**pectrometer) Messungen und zwischen 63° Nord und 68° Nord mit ATLAS-02/ATMOS (Fourier Transform Spectrometer von der Space Shuttle Mission ATLAS-02) Messungen. Die HALOE Messungen haben bezüglich der Ballonsondendaten sowie der Mikrowellendaten eine maximale Abweichung von ca. 1 ppmv und haben einen negativen Bias zwischen 15 % und 20 % über die gesamte Messhöhe bezüglich der ATMOS-Daten.

Es wurden zudem nahe 18° Nord HALOE Sunrise und HALOE Sunset Messungen verglichen, mit einer guten Übereinstimmung und prozentualen Abweichungen von maximal 5 % auf einem Druckniveau von 0.1 hPa und geringeren Abweichungen unterhalb dieses Druckniveaus.

Eine Regression zwischen CH<sub>4</sub>- und H<sub>2</sub>O-Messungen von HALOE wurde auch vorgenommen, um zu untersuchen, ob die Messungen von HALOE die in Unterkapitel 2.4 beschriebene, erwartete Relation zwischen CH<sub>4</sub> und H<sub>2</sub>O wiedergeben. Das Ergebnis hiervon ist, dass die Daten teilweise dieser Relation folgen und in manchen Regionen der Atmosphäre von dieser Relation abweichen, was aber erklärt werden kann.

In Dessler und Kim (1999) wird ein Kommentar zu den Veränderungen abgegeben, welche von v17 zu v19 vorgenommen wurden. Die Beiträge der Aerosole zur Strahlungsmessung wurden bei v17 überschätzt, was um einige Prozent zu geringe VMR-Werte in der Stratosphäre in niedrigen Breiten zur Folge hatte. Außerdem wird in diesem Paper erwähnt, dass die Fehler bei den Versionen v17 und v19 beide eine ähnliche Größe aufweisen.

Die schon in den vorangegangenen Unterkapiteln erwähnte Studie in Hegglin et al. (2013) ergab einen negativen Bias der HALOE v19 Daten im Großteil der Stratosphäre von ca. 5 % von dem MIM und die größte Abweichung von  $-20\%$  in der UTLS Region. Die von HALOE gemessene Jahregangsamplitude bei 200 hPa und darunter in den Tropen und Extratropen wird nicht richtig wiedergegeben, jedoch

stimmen Amplitude und Phase in den sonstigen Regionen, abgesehen von dem negativen Bias.

# Kapitel 5

## Kombinierte

## HALOE/MIPAS-Zeitserie

In diesem Kapitel wird gezeigt, wie die Zusammenführung der HALOE- und MIPAS-Daten vorgenommen wurde, um eine möglichst konsistente kombinierte Zeitserie aus den beiden Datensätzen zu erhalten. Diese Zeitreihe erlaubt einen Einblick in die Entwicklung der globalen Wasserdampfwerte über zwei Jahrzehnte.

In Unterkapitel 5.1 wird beschrieben, wie die HALOE-Daten an die MIPAS-Zeitserie angepasst wurde, indem die besser vertikal aufgelösten HALOE-Messungen an die Auflösung der MIPAS-Messungen angeglichen wurde. Unterkapitel 5.2 behandelt zwei Methoden, um die von MIPAS und HALOE gemessenen Wasserdampf-mischungsverhältnisse aneinander anzupassen, da in fast allen Bereichen der Stratosphäre die ppmv-Werte bezüglich  $\text{H}_2\text{O}$  im MIPAS-Datensatz höher sind als im HALOE-Datensatz. Aufgrund der lange als Referenz geltenden Wasserdampfzeitserie von HALOE, da von diesem Instrument einer der ersten Datensätze globaler Satellitenmessungen von Wasserdampf stammen, wurde die Anpassung so vorgenommen, dass die MIPAS Mischungsverhältnisse auf der ppmv-Skala in Richtung der HALOE-Werte verschoben wurden. Ein weiterer Grund war die Tatsache, dass so die Daten aus den beiden Phasen der Zeitserien der MIPAS-Messungen an die homogene Zeitserie von HALOE angepasst werden konnte, was intuitiver war als alternative Vorgehensweisen. Im darauf folgenden Unterkapitel 5.3 wird die kombinierte Zeitserie aus HALOE- und MIPAS-Daten mit den Messungen anderer Messinstrumente verglichen und das darauf folgende Unterkapitel 5.4 zeigt Vergleiche zwischen dem kombinierten  $\text{H}_2\text{O}$ -HALOE-MIPAS-Datensatz und Simulationsläufen von CCMs (Klima-Chemie-Modelle, Englisch: **C**hemistry **C**limate **M**odel), welche im Zuge des SHARP-Projekts (vergleiche Kapitel 1) durchgeführt wurden. Das Unterkapitel 5.5 zeigt die Ergebnisse der Anwendung von Regressionsanalysen auf die kombinierte Zeitserie. Hier wird ein Versuch gemacht, die Beiträge verschiedener at-

mosphärenphysikalischer Effekte, welche einen Einfluss auf die kombinierte Zeitserie haben, breiten- und höhenaufgelöst zu quantifizieren. Hierzu wurden verschiedene Versionen der Fitfunktion verwendet, welche der Regressionsanalyse zugrunde liegt, oder anders formuliert: es wurden verschiedene Regressionsmodelle für die Wasserdampfzeitserien verwendet. Angefangen mit einer einfachen Modellierung der atmosphärischen Effekte werden verschiedene zusätzliche Terme bzw. Effekte hinzugenommen, im Versuch, die bestmögliche Modellierung der Zeitserie zu erreichen. Am Ende dieses Unterkapitels steht eine Zusammenfassung der Ergebnisse der Analysen.

## 5.1 Faltung von HALOE-Daten mit MIPAS Averaging Kernels

Die verschiedenartige Beschaffenheit der beiden Messgeräte HALOE/UARS und MIPAS/Envisat hat zur Folge, dass die Höhenauflösungen sich unterscheiden. Während HALOE Auflösungen zwischen 2 km und 3 km aufweist, sind bei MIPAS in der HR-Phase Auflösungen von 3,5 km und 5 km zu erwarten, und in der RR-Phase zwischen 2 km bis 4 km (vgl. Kapitel 3.2 und Kapitel 4.1). Im Großteil des in dieser Arbeit betrachteten Höhenbereichs hat dieser Umstand im Mittel keine negativen Konsequenzen, wenn man die abgeleiteten Profile der beiden Instrumente vergleicht, da das  $\text{H}_2\text{O}$ -Profil in der Stratosphäre im Mittel langsam und stetig zunimmt. Jedoch kann es zu Unterschieden in dem Bereich um die Hygropause kommen. Wie zum Beispiel in Abbildung 4.3 zu sehen ist, führt die niedrigere Höhenauflösung von MIPAS in diesem Bereich dazu, dass die von MIPAS Messungen abgeleiteten  $\text{H}_2\text{O}$ -Werte größer sind, als die von HALOE mit der besseren Auflösung abgeleiteten Werte. Dieser Effekt kommt unabhängig von dem ohnehin vorhandenen negativen Bias von HALOE gegenüber MIPAS zustande. Deshalb wurde ein Versuch unternommen, die Auflösung der HALOE-Daten künstlich herunterzusetzen. Hierbei wurde ähnlich wie in Stiller et al. (2012a) vorgegangen.

Wie in Unterkapitel 3.3 beschrieben, kann anhand der Beschaffenheit der AKM eines Profils die Höhenauflösung in jeder Retrievalhöhe berechnet werden, wobei es unterschiedliche Definitionen für die Höhenauflösung gibt (siehe zum Beispiel Rodgers, 2000). In dieser Arbeit wurde die vertikale Auflösung einer Messung durch die Halbwertsbreite (Englisch: **F**ull **W**idth at **H**alf **M**aximum, FWHM) der Zeilen einer AKM bestimmt, wobei die  $n$ -te Zeile der Matrix für die  $n$ -te Retrievalhöhe steht. Die Höhenauflösung bzw. FWHM kann auch Werte zwischen Retrievalhöhen annehmen, da sie auf den exakten halben Wert des Maximums in der Zeile interpoliert wird.

Angenommen, es läge nun eine AKM eines Profils von Mischungsverhältnissen von einem Instrument mit einer niedrigen Höhenauflösung vor und gleichzeitig ein

---

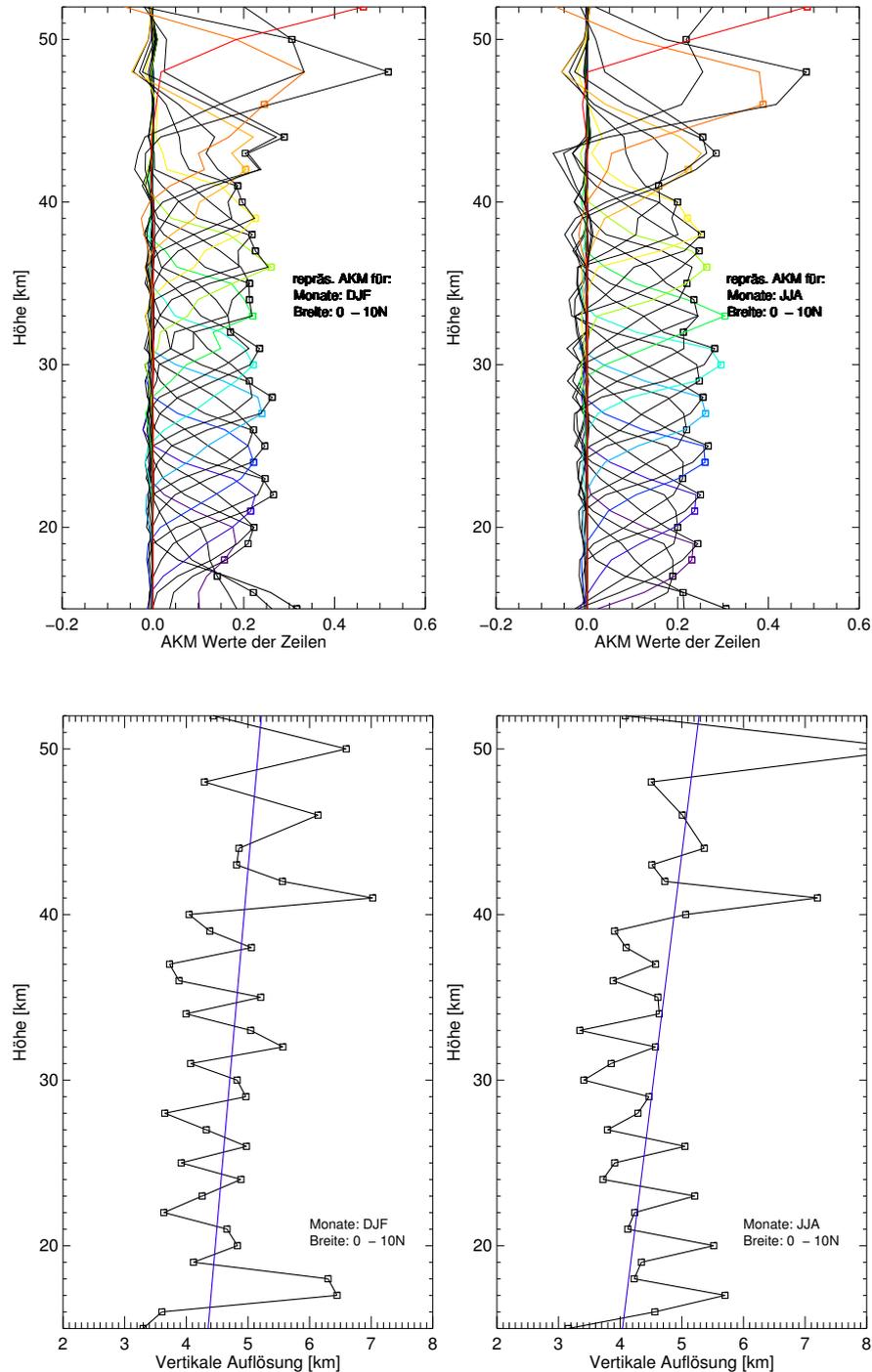


Abbildung 5.1: **Oben:** Abbildung der Zeilen der repräsentativen Averaging Kernel Matrix (AKM) von MIPAS HR für das Breiten-Bin  $0^\circ$  bis  $10^\circ$  Nord für den Zeitraum DJF (**links**) und JJA (**rechts**) auf den MIPAS-Retrievalhöhen. **Unten:** Vertikale Auflösung errechnet aus den Zeilen dieser AKM (schwarze Linie mit Quadraten). Zur Veranschaulichung wurde ein linearer Fit der Höhenauflösung mit abgebildet (blaue Gerade)

koinzidentes Profil, welches von einem Messgerät mit höherer Höhengauflösung gemessen wurde. Wird das höher aufgelöste Profil mit der AKM von der niedriger aufgelösten Messung gefaltet, so entsteht ein neues Mischungsverhältnisprofil mit einer niedrigeren Auflösung. Es wird also eine Anpassung eines gut aufgelösten Profils an die Auflösung eines schlechter aufgelösten Profils erreicht.

Im Falle von HALOE und MIPAS erhält man also nach der Faltung von HALOE H<sub>2</sub>O-Profilen mit MIPAS-AKM die Profile, welche von MIPAS gemessen würden, falls die durch HALOE ermittelten Profile den realen Mischungsverhältnissen des Gases entsprechen würden (vergleiche hierzu Unterkapitel 3.3.5.3). Dies erleichtert den Vergleich der beiden Messinstrumente.

Da es nicht zu jedem HALOE-Profil ein koinzidentes MIPAS-Profil gibt, wurden repräsentative AKM von MIPAS für die HR- und die RR-Zeit gesucht. Hierzu wurde jeweils der Median der Diagonalelemente der AKM für die beiden Zeiträume in 10°-Breitenintervallen auf jeder Höhenstützstelle genommen. Dann wurde diejenige AKM eines echten Profils ausgewählt, bei welchem der RMS-Wert der Differenz seiner Diagonalelemente mit den Medianwerten dieser AKM-Diagonalwerte in einem definierten Höhenbereich am kleinsten wurde. Die Mediane und RMS-Werte wurden nur von 15 km bis 18 km betrachtet. Der Grund hierfür ist, dass – wie schon etwas weiter oben erwähnt – die Höhengauflösung den größten Einfluss auf Wasserdampfmessungen im Bereich der Hygropause hat und die Anpassung für diesen Höhenbereich optimiert werden soll. Es wurde auch zwischen den Jahreszeiten unterschieden und verschiedene repräsentative AKM für die Monate DJF (Dezember, Januar und Februar), MAM (März, April und Mai), JJA (Juni, Juli und August) und SON (September, Oktober und November) bestimmt, da sowohl die H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnisse wie auch die Höhengauflösungen und somit die AKM sich in den verschiedenen Jahreszeiten unterscheiden. Mit diesen AKM wurden in der Folge die HALOE-Profile gefaltet. Sei  $AKM_{JZ_k, BI_j}$  die Menge aller AKM von MIPAS in der HR-Phase im Breitenintervall  $BI_j \in \{(75^\circ S \pm 5^\circ), (65^\circ S \pm 5^\circ), (55^\circ S \pm 5^\circ), (45^\circ S \pm 5^\circ), (35^\circ S \pm 5^\circ), (25^\circ S \pm 5^\circ), (15^\circ S \pm 5^\circ), (5^\circ S \pm 5^\circ), (5^\circ N \pm 5^\circ), (15^\circ N \pm 5^\circ), (25^\circ N \pm 5^\circ), (35^\circ N \pm 5^\circ), (45^\circ N \pm 5^\circ), (55^\circ N \pm 5^\circ), (65^\circ N \pm 5^\circ), (75^\circ N \pm 5^\circ)\}$  und in der Jahreszeit  $JZ_k \in \{DJF, MAM, JJA, SON\}$  und  $a$  sowie  $a_0$  ein Element einer dieser Mengen und sei  $H_i \in \{15\text{ km}, 16\text{ km}, 17\text{ km}, 18\text{ km}\}$  und  $AKM_{rep, JZ_k, BI_j}$  die gesuchte repräsentative AKM für die Jahreszeit  $JZ_k$  und das Breitenintervall  $BI_j$ , so ist die Formel für die Bestimmung der repräsentativen AKM nach der oben beschriebenen Vorgehensweise also:

$$\begin{aligned}
\text{AKM}_{\text{rep},\text{JZ}_k,\text{BI}_j} = & \{a \in \text{AKM}_{\text{JZ}_k,\text{BI}_j} \mid \\
& \left[ \sqrt{\frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 \left( a_{\text{Diag},\text{H}_i} - \text{MEDIAN}(\{a_{0,\text{Diag},\text{H}_i} \mid a_0 \in \text{AKM}_{\text{JZ}_k,\text{BI}_j}\}) \right)^2} \right] \\
& \text{minimal}\}, \tag{5.1}
\end{aligned}$$

Zwei Beispiele für diese repräsentativen AKM und die zugehörigen Höhenauflösungsprofile sind in Abbildung 5.1 gezeigt. In den beiden unteren Bildern ist die vertikale Auflösung gezeigt, die aus den Zeilen der repräsentativen AKM (siehe obere Darstellung) für die Monate DJF und JJA für das Breiten-Bin  $0^\circ - 10^\circ$  Nord berechnet wurde. Der Höhenbereich für diese Darstellungen reicht von 10 km bis 52 km Höhe. Der Wert auf der Diagonalen des AKM ist jeweils gekennzeichnet mit einem Quadrat. Dieses befindet sich in der Abbildung auf der Retrievalhöhe, zu welcher die Zeile der Matrix gehört. Zur leichteren Betrachtung sind die Zeilen der Matrix, welche zu einem Vielfachen von 5 km gehören, farbig dargestellt. Aus Gründen eines einfacheren Vergleichs wurde in den beiden unteren Bildern auch ein linearer Fit durch das Höhenauflösungsprofil gezeigt. Man beachte die leicht bessere Höhenauflösung in den Monaten JJA aufgrund der etwas wärmeren Bedingungen und größeren Mischungsverhältnissen von  $\text{H}_2\text{O}$ , vor allem für die Höhenbereiche unterhalb von 19 km und zwischen 24 km und 40 km.

Da alle HALOE-Profile in einem Breiten-Bin und in einer Jahreszeit gleich behandelt werden sollen, wurde die Faltung mit den repräsentativen AKM der Version V5H\_H2O\_20 für die MIPAS-HR Zeit durchgeführt, da die zeitliche Überschneidung von HALOE und MIPAS in der HR-Phase von MIPAS länger ist als die Überschneidung in der RR-Phase und somit der Zeitraum, in welchem beide Instrumente zu der kombinierten Zeitserie beitragen konsistenter ist. Außerdem ist die Höhenauflösung bei den V5H MIPAS  $\text{H}_2\text{O}$  Daten etwas geringer als bei den die zur RR-Phase gehörenden V5R\_H2O\_220/221 Daten. Der Unterschied in den  $\text{H}_2\text{O}$ -Profilen von HALOE und MIPAS, welcher durch die unterschiedliche Auflösung der Hygropause zustande kommt, ist also in der HR Phase etwas größer und HALOE sollte an diesen Fall angepasst sein.

Wie Abbildung 5.2 beispielhaft für ein Breiten-Höhen-Bin zeigt, führt die Faltung der HALOE-Daten mit den MIPAS AKM wie erwartet im Mittel zu einer Erhöhung der VMR-Werte in der tropischen Hygropause. Vor allem die niedrigen Werte im Frühjahr werden stark nach oben hin korrigiert. Die Amplitude des Jahresgangs in den Datensätzen von MIPAS und den gefalteten HALOE Daten zeigt eine deutlich bessere Übereinstimmung als bei den ursprünglichen HALOE Daten. Dadurch wird

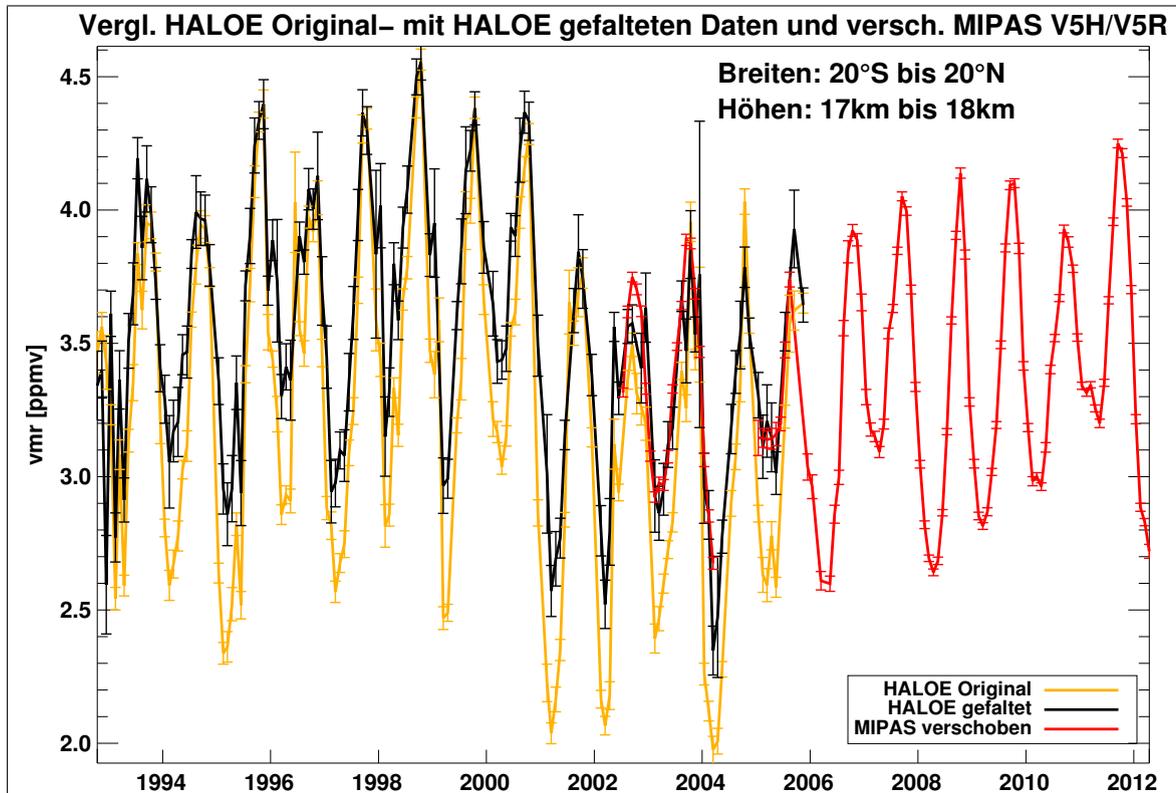


Abbildung 5.2: Vergleich zwischen gefalteten und originalen HALOE-Daten. Die einzelnen Datenpunkte wurden über einen Höhenbereich von 17 km - 18 km, einen Breitenbereich von  $-20^\circ$  bis  $20^\circ$  und über einen Monat gemittelt. Die Fehlerbalken bestehen aus den Standardfehlern der Mittel. Die rote Linie, welche die MIPAS-Daten darstellt, ist um einen gewissen Betrag auf der ppmv-Skala verschoben worden. Die Methode, mit der die Verschiebung bestimmt wurde, ist in Unterkapitel 5.2.2 beschrieben.

die kombinierte Zeitserie im Ganzen kohärenter. Bei allen im Folgenden gezeigten kombinierten H<sub>2</sub>O-Daten von HALOE und MIPAS sind deshalb die mit den repräsentativen V5H AKM gefalteten HALOE-Daten verwendet worden. Die einzige Ausnahme hiervon sind die mit der „Differenzenmethode“ erzeugten Abbildungen in Unterkapitel 5.2.1. Die diesen Abbildungen zugrundeliegenden Berechnungen wurden vor der Faltung der HALOE-Messwerte mit den MIPAS-AKM durchgeführt. Jedoch ändert das nichts an den Argumenten, die schlussendlich dazu geführt haben, die mit der in diesem Unterkapitel vorgestellten Methode erzeugte kombinierte Zeitserie nicht weiter zu verwenden und anstelle dessen mit der „Verschiebungsmethode“ erzeugte Zeitserie aus dem folgenden Unterkapitel 5.2.2 zu verwenden.

Da in den ersten fünf Monaten der zur Verfügung stehenden HALOE-Messungen viele der Daten, sowie auch deren monatliche Mittelwerte um einige ppmv von den folgenden monatlichen Mittelwerten abweichen, sind im Folgenden die ersten fünf Monate der kombinierten Zeitserie weggelassen worden. Der Grund für diese außergewöhnlichen Messwerte ist der Ausbruch des philippinischen Vulkans Pinatubo am 15. Juni 1991. Aerosole und schwefelhaltigen Gasmoleküle erreichten – im Vergleich zu anderen Vulkanen – große Höhen in der Atmosphäre und beeinflussten troposphärische sowie auch stratosphärische Messungen noch längere Zeit. Da die HALOE-Datenreihe nicht lange nach dem Ausbruch des Vulkans beginnt (vergleiche Unterkapitel 3.2), sind die ersten Monate der HALOE-Messungen bisweilen noch stark von dem Ausbruch beeinflusst. Da die ungewöhnlichen Messwerte nicht etwa unbedingt auf ein durch die Aerosole und andere emittierte Teilchen verändertes H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnis zurückzuführen sind, sondern die Messung selbst vor allem durch die Aerosole gestört wurde, sind diese Monate weggelassen worden.

## 5.2 Ansätze zur Kombination der H<sub>2</sub>O-Zeitserien von HALOE- und MIPAS

Um das Problem der Kombination der HALOE v19 H<sub>2</sub>O-Daten und verschiedener MIPAS H<sub>2</sub>O-Datenversionen zu lösen und dabei die breiten- und höhenabhängigen Unterschiede in den gemessenen mittleren Mischungsverhältnissen zwischen den beiden Instrumenten zu vermeiden, wurden verschiedene Methoden verwendet. Das Ziel war es, eine möglichst systematische Vorgehensweise anzuwenden, bei welcher die gewonnenen zwei Dekaden überstreichenden Zeitserien möglichst homogen und in sich konsistent sein sollten. Hier wurden zwei Ansätze versucht und im Folgenden der die genannten Kriterien besser erfüllende gewählt.

1. Der erste Ansatz ist die sogenannte Differenzenmethode, bei der mittlere Differenzen zwischen HALOE und MIPAS in Breiten-Höhen-Bins gebildet wurden.
2. Der zweite Ansatz ist die sogenannte Verschiebungsmethode. Hier wurden in denselben Breiten-Höhen-Bins die MIPAS Zeitserien auf der Mischungsverhältnisskala verschoben und die beste Übereinstimmung mit HALOE im Überlappzeitraum gesucht. Es stellte sich heraus, dass dieser Ansatz schlussendlich besser die Kriterien erfüllte.

Bei den beiden im Folgenden beschriebenen Ansätzen wurden die auf irregulären Höhengittern vorhandenen HALOE v19 Daten zunächst für die Differenzenmethode auf ein Höhengitter mit einem Abstand von 2,5 km, oder für die zweite Methode auf die MIPAS Retrievalhöhen interpoliert. Die Level 1b Daten (vergleiche Unterkapitel 3.3.4) von MIPAS liegen als zwei verschiedene Sätze von Spektren für jeweils den Zeitraum vor und nach dem Ausfall des Instruments vor, und die VMR-Profile sind die der Datenversionen V5H\_H2O\_20 (HR-Phase) und V5R\_H2O\_220/221 (RR-Phase, vgl. Unterkapitel 4.1).

### 5.2.1 Differenzenmethode

Der Wert, um den die MIPAS-Daten angepasst werden sollen, wird hier bestimmt durch mittlere Differenzen zwischen HALOE-Daten und MIPAS-Daten. Um diese Differenzen zu bestimmen wurde wie folgt vorgegangen:

In diesem Absatz wird ein erster Ansatz zur Bestimmung der Unterschiede beschrieben, welcher auf Profil-zu-Profil-Vergleichen (so wie bei den Vergleichen von Unterkapitel 4.2) beruht. Es wurde zunächst der Datensatz von HALOE in Bins von 10° Breite unterteilt, von 80° Süd bis 80° Nord. Zwischen 80° und 90° gibt es sowohl auf der nördlichen als auch auf der südlichen Hemisphäre nur sehr wenige

---

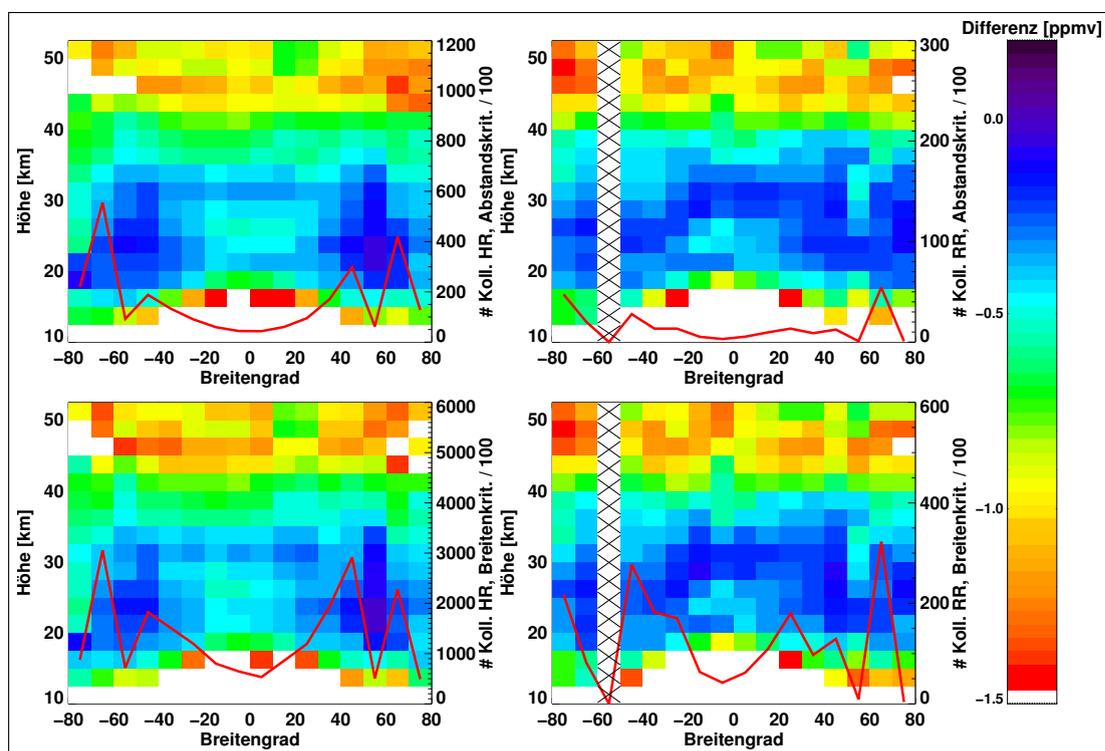


Abbildung 5.3: Differenzen zwischen HALOE und MIPAS in der HR- (**links**) und RR-Zeit (**rechts**). Die beiden oberen Abbildungen sind mit dem Abstandskriterium und die unteren mit dem Breitenkriterium erstellt. Die vertikale Position der farbigen Rechtecke bezieht sich auf die linke y-Achse. Im Breitenbereich von 60°S bis 50°S werden bei beiden Kriterien in der RR-Phase von MIPAS keine Kollokationen zwischen HALOE und MIPAS gefunden, das symbolisieren die Rechtecke mit den schwarzen Kreuzen. Weiße Bins sind Werte der Differenzen von  $\leq -1,5$  ppmv. Die rote Linie steht für die Anzahl der Kollokationen von HALOE mit MIPAS und bezieht sich jeweils auf die rechte Achse. Man beachte die verschiedenen Skalen in den rechten Achsen der Darstellungen.

HALOE Messungen. Zu diesen Geolokationen (Messorten, projiziert auf die Erdoberfläche) von HALOE wurden dann zuerst koinzidente Messungen von MIPAS gesucht. Als Kriterium für diese Koinzidenzen wurde ein räumlicher Abstand von 1000 km und eine Zeitdifferenz von drei Tagen gewählt. Dieses Kriterium wird in dieser Arbeit „Abstandskriterium“ genannt. Oft wird in der Literatur bei ähnlichen Verfahren ein kürzerer Zeitraum als Kriterium gefordert. Der größere Zeitraum bei dem Koinzidenzkriterium in dieser Arbeit war deshalb gewählt worden, weil es ansonsten zu wenige Daten für einen repräsentativen Vergleich der Datensätze oder auch Bins ganz ohne Koinzidenzen gegeben hätte. Es wurde ein Höhengitter von 2,5 km verwendet.

Als Alternative zu dem Ansatz im letzten Paragraphen wurde ein weiterer Ansatz verwendet, bei dem sich HALOE und MIPAS Messungen beide innerhalb desselben Breitenbins (wiederum Intervalle von 10° Breite zwischen 80° Süd und 80° Nord) und in einem zeitlichen Abstand von drei Tagen befinden. Dieses Kriterium wird in dieser Arbeit „Breitenkriterium“ genannt.

Die HALOE-Messungen wurden für beide Ansätze als Referenz verwendet. Bei beiden Methoden kommt es zu dem Fall, dass für ein HALOE-Profil mehrere MIPAS-Profile als koinzident anhand der Kriterien eingestuft werden. In diesem Fall werden diese MIPAS-Messungen gemittelt und die Differenz mit dem Mittelwert gebildet. Um die endgültige Differenz in einem Bin zu bestimmen, wird dann von allen so bestimmten Differenzen in einem Breiten-Höhen-Bin der Mittelwert gebildet.

Da die MIPAS Retrievals in der Zeit der Reduced Resolution sich von denen der High Resolution unterscheiden, wurden die Differenzen in den beiden Zeiträumen getrennt voneinander berechnet, als Mittel über den jeweiligen Zeitraum, wie in Abbildung 5.3 gezeigt. Sowohl mit dem Abstandskriterium als auch mit dem Breitenkriterium ergaben sich in dem RR-Zeitraum keine Koinzidenzen für das Breitenbin zwischen 60° Nord und 50° Nord, weswegen die entsprechenden Bins weiß dargestellt sind. Die Unterschiede reichen von  $< -2$  ppmv bis  $\sim 0,2$  ppmv. An der roten Linie in den Darstellungen sieht man, dass der Umfang an verglichenen Daten beim Breitenkriterium deutlich größer ist, als beim Differenzenkriterium. Der Nachteil der Breitenkriteriumsmethode gegenüber der Differenzenmethode ist jedoch, dass bei ihr auch viele Messungen verglichen und voneinander subtrahiert wurden, die räumlich weit voneinander entfernt sind und unter Umständen durch lokale Phänomene voneinander verschiedene Mischungsverhältnisprofile aufweisen können. Der Nachteil des Abstandskriteriums ist, dass aufgrund der deutlich geringeren Anzahl an Koinzidenzen die Statistik beim Vergleich leiden kann. Außerdem können durch das große zeitliche Koinzidenzkriterium bei schnellen Veränderungen des Mischungsverhältnisses Differenzen von unterschiedlichen Profilen in die Methode eingehen und das Ergebnis verfälschen. Hierdurch könnten später unter Umständen nicht die

---

optimalen Kombinationen der beiden Datensätze herauskommen, je nachdem wie die kombinierte Zeitserie verwendet wird und welche zeitlichen und räumlichen Mittelungen durchgeführt werden.

### 5.2.2 Verschiebungsmethode

Der Ansatz bei der Verschiebungsmethode zielt darauf ab, die Wurzel aus dem Mittelwert der aufsummierten quadratischen Abweichungen (RMS, siehe Gleichung 5.6) der beiden Wasserdampfzeitserien in dem Überlappzeitraum von HALOE und MIPAS zu minimieren. Dies geschieht durch sukzessives Verschieben der MIPAS-Zeitreihe in kleinen Schritten auf der Mischungsverhältnisskala, so lange bis der minimale Wert  $\text{RMS}_{\min}$  bei einer optimalen Verschiebung  $\Delta X_{\text{mess,H-M,min}}$  erreicht wird. Diese optimale Verschiebung wurde getrennt für den HR- und den RR-Zeitraum von MIPAS bestimmt.

Es wurden getrennt alle HALOE- und alle MIPAS-Zeitserien in Breitenbins von je  $10^\circ$  zwischen  $80^\circ$  Süd und  $80^\circ$  Nord auf den MIPAS-Retrievalhöhen (siehe Unterkapitel 3.1.1) in einem Monat gemittelt. Die Verschiebung wird auf die Zeitserien von MIPAS angewandt und über einen VMR-Wertebereich von 70 ppmv (-55 ppmv bis 15 ppmv, der große negative Wert ist deshalb gewählt worden, da in niedrigen Höhen in den Tropen die MIPAS Messungen um bis zu 55 ppmv höhere Werte als die HALOE Messungen aufweisen) in 0,01 ppmv-Schritten durchgeführt. Ein Beispiel für die Bestimmung des minimalen RMS-Werts der Unterschiede zwischen den HALOE-Daten und den verschobenen MIPAS-Daten ist in Abbildung 5.4 in der oberen Darstellung gezeigt. In der unteren Darstellung werden die verschiedenen Schritte von den ursprünglichen Datensätzen (bzw. im Fall von HALOE von den mit den repräsentativen MIPAS-AKM gefalteten Daten, vergleiche Unterkapitel 5.1) zu der kombinierten Zeitserie in einer Darstellung zusammengefasst. Die gefalteten HALOE-Messwerte bleiben unverändert, die MIPAS Daten werden um die mittels der in der oberen Darstellung veranschaulichten Methode verschoben und dann wird in einem letzten Schritt eine gewichtete Mittelung der HALOE- und MIPAS-Daten in jenen Monaten vorgenommen, in denen es Messwerte von beiden Instrumenten gibt. Bei dieser Mittelung sind die beiden Datensätze jeweils mit dem Inversen ihrer Standardfehler gewichtet worden.

Die bestimmten  $\Delta X_{\text{mess,H-M,min}}$ -Werte sind in Abbildung 5.5 dargestellt. Die kleinsten Verschiebungen ergeben sich zwischen 20 km und 30 km, vom Betrag her größere negative oberhalb von ca. 40 km. Vor allem im RR-Zeitraum kann man die Breitenstruktur der Tropopause noch bis zu rund 30 km in den Verschiebungsparametern wiederfinden. Die grundsätzliche Struktur in den Abbildungen 5.3 für die Differenzenmethode und 5.5 für die Verschiebungsmethode ist ähnlich. Da wir

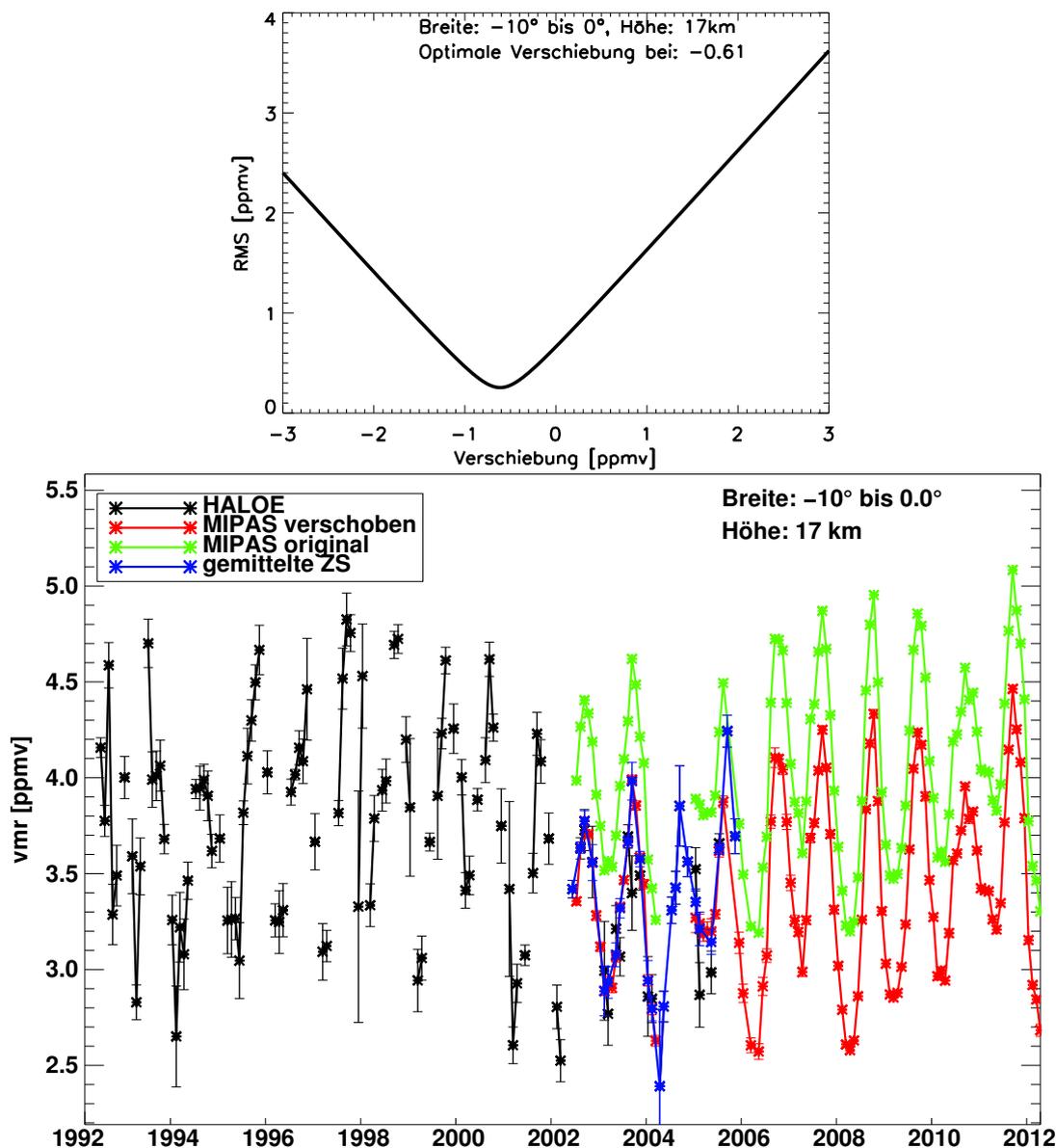


Abbildung 5.4: **Oben:** Beispiel für die Abhängigkeit des RMS-Wertes von der Verschiebung der MIPAS-Zeitserie gegenüber der HALOE-Zeitserie im Breitenbin  $-10^\circ$  bis  $0^\circ$  in einer Höhe von 17 km für die HR-Phase von MIPAS. **Unten:** Beispiel für die Teile der kombinierten Zeitserie im selben Breiten-Höhen-Bin wie im oberen Bild. Die Fehlerbalken bestehen aus den Standardfehlern (siehe Gleichung 5.5) der gemittelten Messwerte. Die gefalteten HALOE-Daten sind die schwarze Linie mit schwarzen Sternen, die originalen MIPAS-Daten gibt die grüne Linie wieder (Fehler wie bei den verschobenen MIPAS-Daten), die rote Linie sind die verschobenen MIPAS-Daten und die blaue Linie sind die gemittelten Daten aus HALOE- und MIPAS-Messwerten.

jedoch davon ausgehen, dass die kombinierte Zeitserie der beiden Messgeräte hauptsächlich in Monatsmitteln verwendet wird und durch die Minimierung von  $\chi^2$  bei

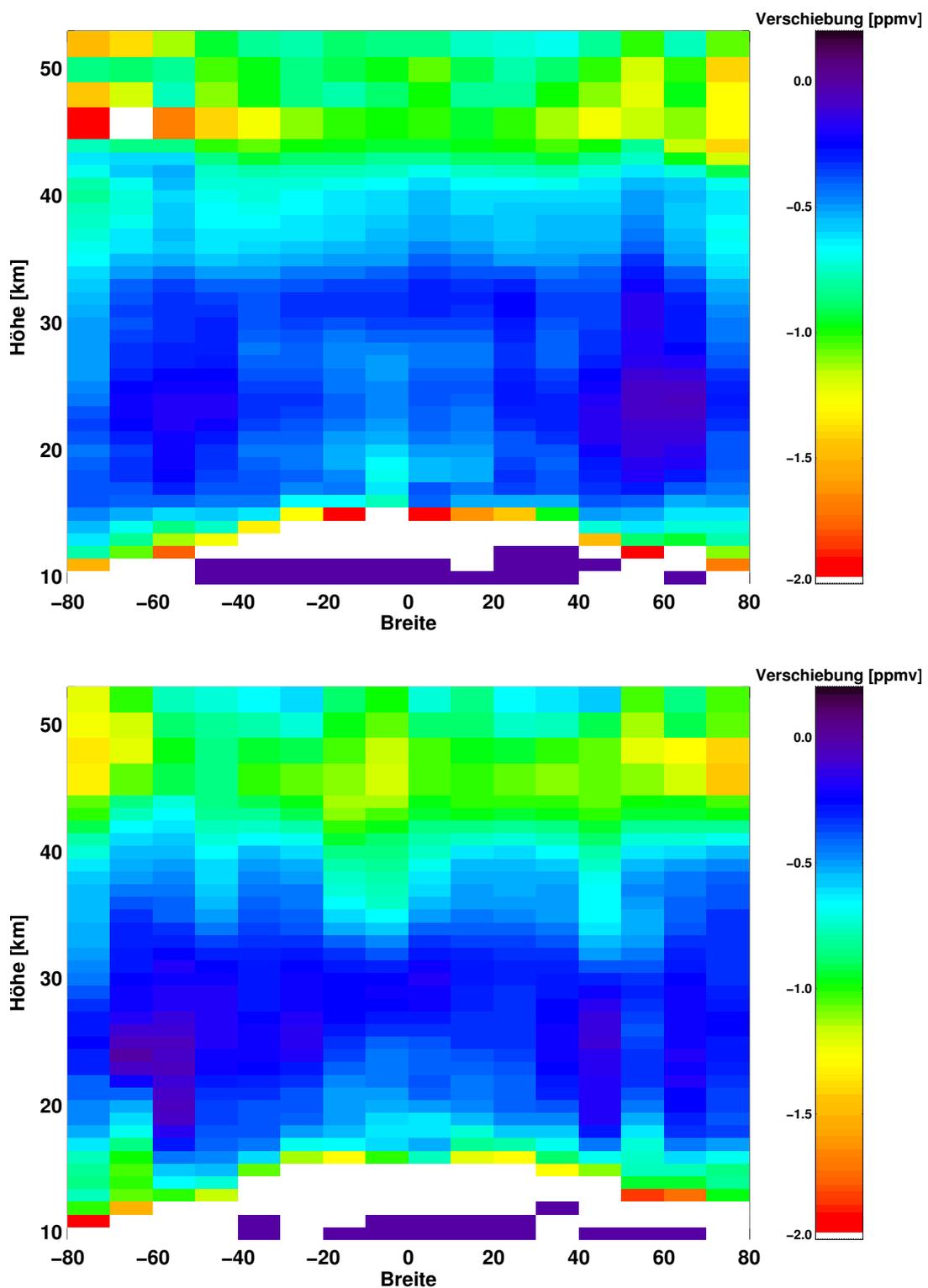


Abbildung 5.5: Ergebnisse für die optimale Verschiebung der MIPAS- bezüglich der HALOE-Zeitreihe für die HR-Zeit (**oben**) und die RR-Zeit (**unten**).

der Verschiebungsmethode eine optimale Kombination bezüglich der Monatsmittel gewährleistet ist, haben wir letztendlich diese Methode gewählt und die Zeitserie auf

monatliche Mittelwerte in jedem Breiten-Höhen-Bin beschränkt. Da in der Stratosphäre die longitudinale Variabilität von Gasmischungsverhältnissen allgemein gering ist, wurde die Zeitserie longitudinal nicht aufgelöst, sondern zonale Mittel verwendet. Außerdem ist die Datenmenge bezüglich der HALOE-Messungen zu gering, um die kombinierte Zeitserie bezüglich der Längengrade aufzulösen. Die im weiteren gezeigten Vergleiche und Fits der kombinierten Zeitserie sind die Ergebnisse der Verschiebungsmethode.

In Bezug auf die gezeigten Abbildungen zur Validierung von MIPAS Ergebnissen in Unterkapitel 4.3 ist die Verschiebung der in die kombinierte Zeitserie eingehenden MIPAS-Daten auf der ppmv-Skala zu beachten. Hierdurch würden sich bei Vergleichen der kombinierten Zeitserie mit den Instrumenten in diesem Unterkapitel zusätzliche Abweichungen ergeben.

---

## 5.3 Vergleiche mit anderen Instrumenten

Um die kombinierte Zeitserie von HALOE und MIPAS zu validieren, wurden Vergleiche mit anderen Messgeräten durchgeführt. Im folgenden Unterkapitel 5.3.1 ist ein Vergleich mit einer Zeitreihe aus Messungen von Frostpoint-Hygrometer-Ballonsonden über Boulder in Colorado gezeigt und in Unterkapitel 5.3.2 ist ein Vergleich von mehreren gemittelten Zeitreihen von Fernerkundungs-Messungen von Wasserdampf durch Satelliteninstrumente in tropischen Breitengraden in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre sowie Tropopausentemperaturen gezeigt.

### 5.3.1 Vergleich mit Boulder Frostpoint-Hygrometer Daten

In Abbildung 5.6 ist ein Vergleich gezeigt zwischen den HALOE-MIPAS-Daten und den Daten von Frostpoint-Hygrometer-Ballonsonden, welche vom NOAA Institut über Boulder in Colorado (Koordinaten ca. 40° Nord, 105° West) gesammelt wurden und in Hurst et al. (2011) beschrieben sind. Diese Sondenmessungen haben 1980 begonnen und dauern noch immer an. Damit ist dies die längste kontinuierliche Wasserdampf-Zeitserie ihrer Art. Die für den Vergleich in dieser Arbeit verwendeten Daten reichen von 1981 bis 2010. Der untere Plot der Abbildung zeigt die Zeitserien aus den Sondendaten in Höhen von 16 km–28 km in sechs Datenreihen, welche jeweils über 2 km Höhe und zeitlich mit einem laufenden Mittel über 24 Monate geglättet wurden.

In diesen Datenreihen haben die Autoren jeweils drei Zeitpunkte festgestellt, bei denen lineare Trendänderungen auftreten. Das Vorgehen war dabei derart, dass erst der Punkt für den Übergang von einem Anstieg im Wasserdampf zu dem Abfall Ende 2000 bzw. Anfang 2001 bestimmt wurde. Danach wurden die Residuen von linearen Regressionen analysiert und somit weitere Wendepunkte bestimmt. Die Zeitserien wurden hierdurch in 4 Phasen unterteilt.

In dem oberen Plot wurden dieselben Mittelungen auf die HALOE-MIPAS-Zeitreihe angewandt. Der einzige Unterschied in der Datenbehandlung ist der Ort von dem die Daten stammen, welcher aus Gründen höherer Datendichte nicht auf die Längen- und Breitengrade um Boulder herum beschränkt wurde, sondern aus einem 10° Breitenband um 40° Nord über die gesamten Längengrade stammen. Hier wurden ebenfalls – jedoch nur zu Vergleichszwecken und weniger systematisch – die Zeitserien in ähnliche Phasen unterteilt wie bei den Sondendaten.

Die HALOE-MIPAS-Daten zeigen bis auf in dem Höhenintervall von 16 km–18 km weniger Schwankungen auf als die Sondendaten. Generell auf allen Höhen haben die in situ gemessenen Daten bis zu ca. 0,5 ppmv höhere Konzentrationswerte als die Satellitendaten. Gründe für die Unterschiede in den Zeitserien sind sicher die nicht

---

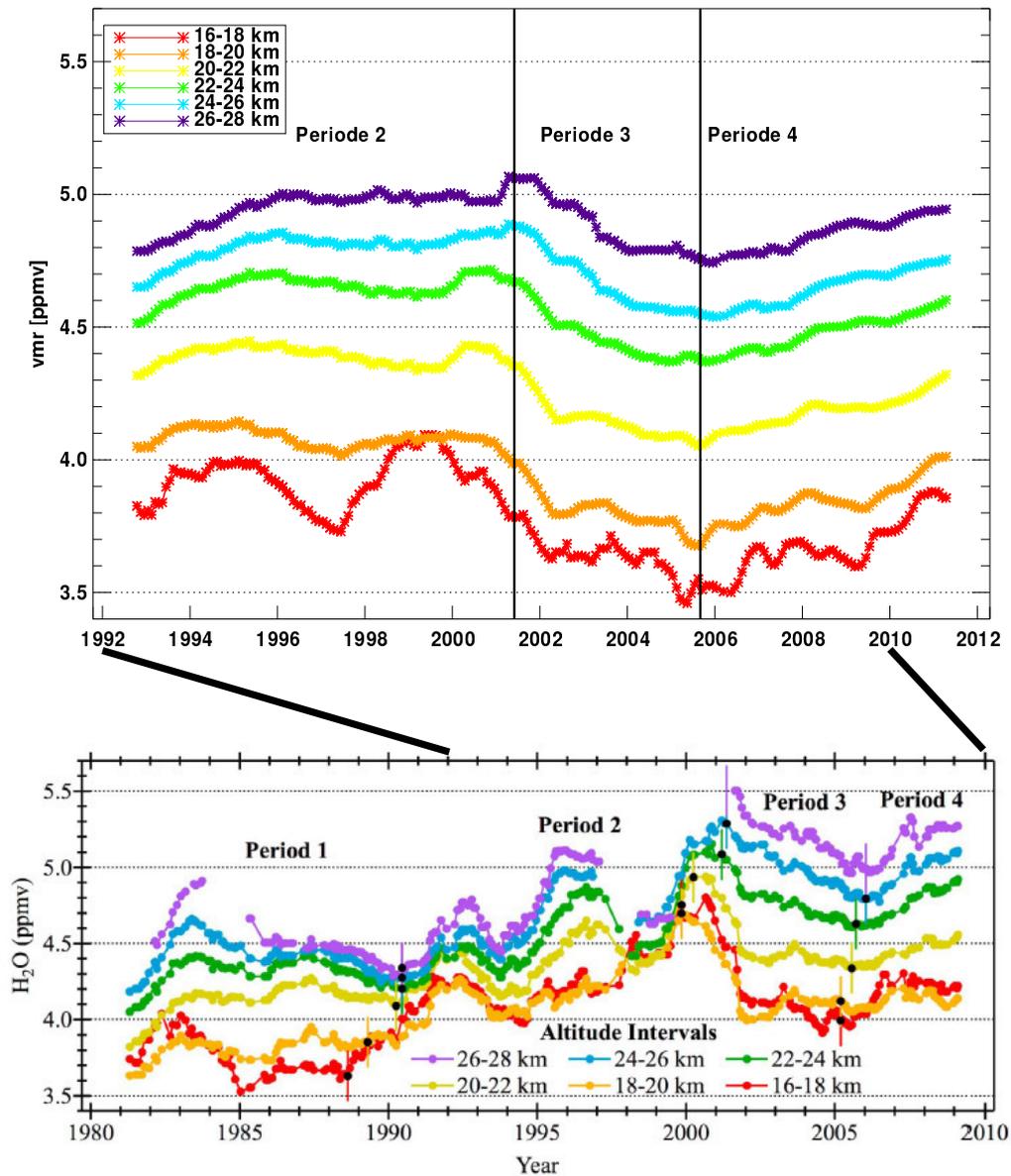


Abbildung 5.6: 24-monatige laufende Mittel von H<sub>2</sub>O-Messungen über Boulder in Höhen zwischen 16 km bis 28 km, jeweils über einen 2 km Höhenbereich gemittelt. **Oben:** kombinierte HALOE-MIPAS-Zeitreihe, gemittelt zwischen 35° – 45° über den gesamten Längsbereich. Die Einteilung in Perioden erfolgte grob nach der Einteilung in der unteren Abbildung. **Unten:** Messdaten von Frostpoint-Hygrometer-Sonden (FPH), die Abbildung ist Hurst et al. (2011) entnommen.

auf die Breiten- und Längengrade um Boulder räumlich beschränkten Satellitendaten, sowie die schlechtere vertikale Auflösung der Satellitendaten. In Hegglin et al. (2014) wird festgestellt, dass die lokalen Bedingungen bei der Boulder-Zeitserie eine Rolle spielen und diese Zeitserie nicht repräsentativ für die mittleren zonalen Wasserdampfwerte in den Breitengraden um Boulder herum ist. Außerdem hat die kombinierte Zeitserie durch die Anpassung an die HALOE Zeitserie die bekanntermaßen negative Abweichung bezüglich vieler anderer Instrumente übernommen (vgl. Unterkapitel 4.3.2).

### 5.3.2 Vergleich mit diversen Satelliteninstrumenten und der Zeitreihe der Tropopausen-Temperatur

In der Abbildung 5.7 sind Vergleiche der Anomalien von Temperatur- und Wasserdampfmessungen gezeigt und einander gegenübergestellt. Die Temperaturzeitreihen beinhalten Satellitendaten von MLS/Aura, MIPAS, CHAMP, GRACE, COSMIC/FORMOSAT-3, SAC-C und AIRS/Aqua, vergleiche hierzu Unterkapitel 2.8.2. Die Wasserdampfzeitreihen enthalten Daten von MLS/Aura, MIPAS, HALOE, SMR auf dem Satelliten Odin, SAGE II auf dem Satelliten ERBS und die kombinierte Zeitreihe aus den HALOE/MIPAS-Daten, vergleiche hierzu Unterkapitel 2.8.1.

Die Anomalien sind in beiden Fällen auf die gleiche Art und Weise aus Monatsmitteln von Daten der einzelnen Instrumente in einem Breitenintervall von 10°S und 10°N berechnet worden. Zur Vorgehensweise hierbei, siehe unten. Im Fall der H<sub>2</sub>O-Zeitreihe gehen in die zugrundeliegenden Mittelwerte für jedes Instrument jedoch alle Messungen innerhalb eines Druckniveaubereichs von 100 hPa bis 55 hPa ein und im Fall der T-Zeitreihe die „Cold Point Tropopause“ Temperatur (kälteste Temperatur in der TTL aus jedem gemessenen Profil der einzelnen Instrumente). Die Höhe, in der diese Temperatur vorherrscht, befindet sich in den betrachteten Breitengraden ungefähr auf einem Druckniveau von 100 hPa.

Der in der Abbildung als Korrelationskoeffizient zwischen der mittleren T- und H<sub>2</sub>O-Anomalie angegebene Wert ist der Pearson-Korrelationskoeffizient und wird für zwei Funktionen  $f(x)$  und  $g(x)$  berechnet durch

$$\rho(f(x), g(x)) = \frac{\text{cov}(f(x), g(x))}{\sigma(f(x)) \sigma(g(x))} \stackrel{\text{diskrete } x\text{-Werte}}{=} \frac{\sum_{i=1}^N \left( f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right) \left( g(x_i) - \overline{g(x_{j=1, \dots, N})} \right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \left( f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right)^2 \cdot \sum_{i=1}^N \left( g(x_i) - \overline{g(x_{j=1, \dots, N})} \right)^2}}, \quad (5.2)$$

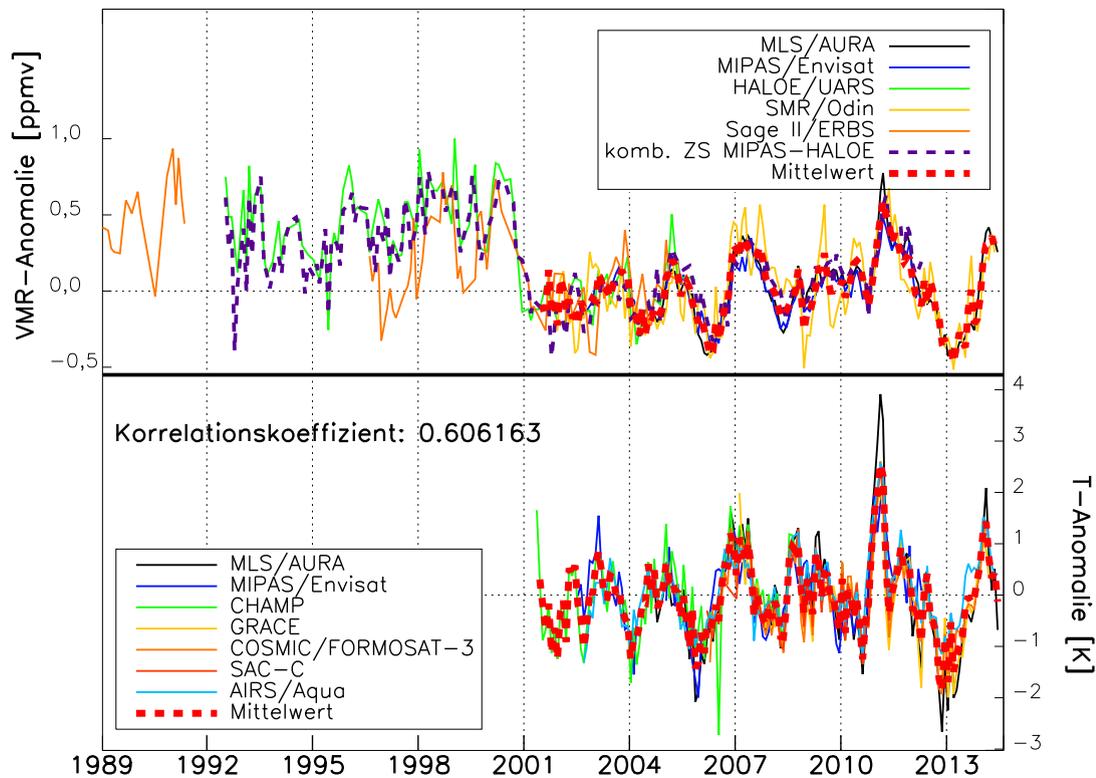


Abbildung 5.7: Beide Darstellungen dieser Abbildung zeigen monatliche Anomalien von Mittelwerten zwischen  $10^{\circ}\text{S}$  und  $10^{\circ}\text{N}$ . Die Art und Weise der Berechnung der Zeitreihe der Anomalien wird im Text und in Gleichung 5.3 beschrieben. Die gestrichelte rote Kurve in beiden Darstellungen sind die Mittelwerte aus allen in einem Monat vorliegenden Messwerte der verschiedenen Instrumente. Es sind nur Datenpunkte in den Monaten abgebildet, in denen sowohl in der  $\text{H}_2\text{O}$ - als auch in der T-Zeitreihe Daten vorhanden sind. Die kombinierte HALOE-MIPAS-Zeitreihe ist nicht in dieses Mittel eingeflossen. Der angegebene Korrelationskoeffizient (siehe Gleichung 5.2) quantifiziert die Korrelation zwischen diesen beiden laufenden Mitteln. **Obere Kurven:** Verschiedene  $\text{H}_2\text{O}$ -Fernerkundungsmessungen von Satellitenmessinstrumenten, gemittelt zwischen 100 hPa und 55 hPa. Die Anomalien der kombinierten HALOE-MIPAS-Zeitreihe sind als gestrichelte violette Linie dargestellt. **Untere Kurven:** Niedrigste Temperaturen in mittleren Profilen (Tropopause, üblicherweise in einer Höhe nahe der Hygropause, vergleiche Kapitel 1 bzw. Unterkapitel 2.1) von verschiedenen Satellitenmessinstrumenten. Man beachte, dass bis auf bei MLS und MIPAS gleiche Farben in den beiden Darstellungen nicht die gleichen Instrumente bedeuten.

wobei  $\overline{f(x_{j=1,\dots,N})}$  bzw.  $\overline{g(x_{j=1,\dots,N})}$  die Mittelwerte von  $f(x)$  bzw.  $g(x)$  über alle diskreten Werte  $x_i$  sind, also  $\overline{h(x_{j=1,\dots,N})} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N h(x_j)$ .

Um die Punkte des Höhengitters der kombinierten Zeitserie zu finden, welche zwischen 100 hPa und 55 hPa liegen, wurden monatliche Mittel aus den Druckdaten von HALOE und MIPAS in den Breiten-Höhen-Bins errechnet, in denen die Zeitserie vorliegt. In dem Zeitraum, in dem von beiden Instrumenten Druckdaten vorhanden waren, wurden die mittleren Druckwerte aus beiden Datensätzen verwendet. Bei der Mehrheit der Messungen wurden mit diesem Kriterium Höhen zwischen 17 km und 20 km verwendet.

Die Berechnung der Anomalien erfolgte so, dass für jeden Monat von Januar bis Dezember für jedes Messinstrument ein Mittelwert aller vorhandenen Messungen dieses Instruments in dem entsprechenden Monat jedes Jahres zwischen Januar 2002 und Dezember 2008 berechnet wurde. Dieser Mittelwert für einen bestimmten Monat wurde dann in der Folge von den Messungen dieses Instruments in allen gleichen Monaten aller Jahre abgezogen. Als Beispiel am Monat Januar ergäbe sich die Zeitreihe der Januar-Anomalien der Wasserdampfmeswerte  $\Delta\text{VMR}_{\text{Instr}_i,\text{Jan}}(t)$  des Instruments  $i$  als:

$$\Delta\text{VMR}_{\text{Instr}_i,\text{Jan}}(t) = \text{VMR}_{\text{Instr}_i,\text{Jan}}(t) - \text{MEAN}[\text{VMR}_{\text{Instr}_i,\text{Jan}}(t) | 1.1.2002 < t < 31.12.2008] \quad (5.3)$$

Man erkennt in dieser Abbildung deutlich den leichten zeitlichen Versatz der lokalen Extrema zwischen der Temperaturzeitreihe und der Wasserdampfzeitreihe, wobei die Extrema der ersteren immer etwas früher auftreten. Dies ist der Fall, da die Wasserdampfzeitserie auch Daten aus etwas größeren Höhen im Vergleich zu dem Höhenbereich der Temperaturzeitserie beinhaltet und die Luft einige Zeit braucht, um vom Cold Point aus dorthin transportiert zu werden. Jedoch ist ansonsten der zeitliche Verlauf der beiden atmosphärischen Größen sehr ähnlich, was auch anhand des hohen Korrelationskoeffizienten zwischen den beiden Zeitserien der Mittelwerte deutlich wird. Ein Grund dafür, warum die Korrelation nicht noch stärker ist, ist die zum Beispiel in Unterkapitel 6.4.2 beschriebene Abhängigkeit der Cold Point Temperaturen vom Längengrad und der überproportionale Anteil von Trajektorien aus der Troposphäre in die Stratosphäre, welche ihren kältesten Punkt in der Region der niedrigsten Cold Point Temperaturen haben. Die nichtsdestotrotz starke Korrelation ist ein deutlicher Hinweis auf die Wichtigkeit der in Unterkapitel 2.5 beschriebenen Transportprozesse von troposphärischer äquatornaher Luft in die Stratosphäre für die stratosphärischen Wasserdampfmischungsverhältnisse.

In der Wasserdampfanomaliezeitserie erkennt man deutlich ein rapides Absinken des  $\text{H}_2\text{O}$ -Gehalts in den Jahren 2000 und 2001. Dieser Abfall des Mischungsverhältnis

ist am ausgeprägtesten in der Stratosphäre zwischen  $-30^\circ$  und  $30^\circ$  zu sehen und sowohl der Beginn des Abfalls als auch die Dauer ist abhängig von Breitengrad und Höhe. Dieses Absinken wird auch „Millenium-Drop“ genannt, da eine Bezeichnung durch den Zeitpunkt aus Gründen der unterschiedlichen Startpunkte des Absinkens an verschiedenen Orten in der Stratosphäre nicht eindeutig wäre. Untersuchungen zu dem Ursprung dieses Abfalls in den Wasserdampfmischungsverhältnissen sind zum Beispiel in Randel et al. (2006) und in Rosenlof und Reid (2008) vorgenommen worden und werden in Unterkapitel 6.5 zusammengefasst.

Sowohl in der Wasserdampf- als auch in der Temperaturanomaliezeitreihe ist ein weiterer vergleichsweise starker Abfall der Werte in den Jahren 2011/2012 zu erkennen (vergleiche Urban et al., 2014). Von diesem Absinken des  $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnis in der unteren tropischen Stratosphäre ist in der kombinierten Zeitserie nur der Anfang zu erkennen, da die Messungen von MIPAS im April 2012 enden.

Die Anomalien aus der kombinierten Zeitserie aus HALOE- und MIPAS-Messungen unterscheiden sich nicht stark von den Anomalien der anderen betrachteten Messinstrumente, was dafür spricht, dass dieser Datensatz exemplarisch untersucht werden kann, um Erkenntnisse über  $\text{H}_2\text{O}$  in der betrachteten Region der Atmosphäre zu gewinnen.

---

## 5.4 Vergleiche mit Modellläufen

Im Zuge des SHARP-Projekts – für welches auch die Kombination aus den HALOE- und MIPAS-H<sub>2</sub>O-VMR-Werten erstellt wurde (vgl. Kapitel 1) – wurden verschiedene Modellläufe von CCMs durchgeführt, in denen auch Wasserdampfverteilungen und -entwicklungen berechnet wurden. Die verwendeten CCMs bestehen jeweils aus einem GCM (**G**eneral **C**irculation **M**odel), in welchem die Dynamik in der Atmosphäre auf Basis der thermodynamischen Gleichungen modelliert wird, und weiteren Modellen, welche für die Berechnung der chemischen Prozesse, Strahlung, Konvektion, Kopplung von modellierten Werten an Messwerte im Falle einer Modellierung der Vergangenheit (Englisch: „nudging“) und anderen Prozessen zuständig sind.

Hierbei wurden zwei verschiedene CCMs verwendet:

1. EMAC: Das verwendete GCM ist ECHAM5 (Roeckner et al., 2003, 2004), welches gekoppelt ist mit einem Modell namens MESSy (**M**odular **E**arth **S**ubmodel **S**ystem, siehe: MESSy Website, Link im Literaturverzeichnis), einer Plattform für verschiedene Untermodelle, welches gleichzeitig als Schnittstelle zwischen diesen Untermodellen selbst dient, sowie auch zwischen den Untermodellen und dem GCM.
2. E39-CA (ECHAM4.L39(DLR)/CHEM/ATTILA): In diesem am DLR (**D**eutsches Zentrum für **L**uft- und **R**aumfahrt) verwendeten CCM werden das GCM ECHAM4.L39(DLR) (Land et al., 2002), das Chemie-Modul CHEM (Steil et al., 1998) und das Lagrange-Advektions-Schema ATTILA (Reithmeier und Sausen, 2002) benutzt.

Mit diesen zwei CCMs wurden drei Läufe durchgeführt, welche den Spezifikationen von CCMVal (Chemistry Climate Model Validation Programme, siehe Eyring et al., 2010) bzw. der CCMI (**C**hemistry **C**limate **M**odel **I**nitiative, 40. Newsletter von SPARC (2013), siehe Literaturverzeichnis) genügen.:

1. REF-B1 Lauf (definiert im Zuge von CCMVal): Dieser ist ein transienter Lauf von 1960 (mit einer zehnjährigen Einschwingphase) bis 2006 (wenn möglich, allgemein bis zur Gegenwart). Alle treibenden Kräfte in dieser Simulation entstammen Messungen. Diese transienten Simulationen enthalten alle anthropogenen und natürlichen treibenden Kräfte basierend auf Veränderungen in Spurengasen, solarer Variabilität, Vulkanausbrüchen, QBO, SST sowie SIC (**S**ea **I**ce **C**ontent, zu deutsch etwa: Gehalt an Eis in den Meeren). Für Details siehe die oben angegebene Referenz.
2. REF-C1SD Lauf (definiert im Zuge der CCMI): Ähnlich wie beim REF-B1 Lauf werden auch hier die oben genannten treibenden Kräfte von Messdaten

oder empirischen Daten übernommen und werden zeitlich erweitert bis 2010, wobei die verwendeten Daten so viel wie möglich auf Messdaten basieren. Die Buchstaben „SD“ im Namen dieses Laufs stehen für **S**pecified **D**ynamics, was in diesem Fall bedeutet, dass bei diesem Lauf auch einige meteorologische Daten aus Beobachtungen übernommen sind, also ein „nudging“ an diese Werte vorgenommen wurde. Aus diesem Grund beginnen diese Läufe 1980, da ab etwa 1979 auch Satellitendaten in die im Modelllauf verwendeten Daten von Reanalysen eingehen und diese eine Diskontinuität in diesen Daten verursachen, die es zu vermeiden gilt. Diese Art von Simulationen kann besser mit Messdaten verglichen werden, da es eine bessere Übereinstimmung mit den Rahmenbedingungen gibt. Für Details siehe die oben genannte Referenz.

Der in der vorliegenden Arbeit zu Vergleichszwecken verwendete Lauf **E39CA** ist mit dem 2. Modell der ersten Liste am DLR durchgeführt worden (Daten dieses Laufs bis Ende 1999 sind verwendet worden in Garny, 2010) und ist ein REF-B1 Lauf. Viele der verwendeten Parameter in dieser Simulation sind also an gemessene Werte angepasst und eine Zahl von anderen Parametern, wobei hierzu auch Wasserdampf zählt, sind hiervon ausgenommen. Die Daten dieses Laufs reichen von Anfang 1980 bis Ende 2004.

Von den Läufen mit dem EMAC Modell sind in diesem Unterkapitel zwei gezeigt. Ein Lauf hiervon, **EMAC (FUB)** (auch verwendet in Meul, 2013; Oberländer, 2013), ist an der FUB durchgeführt worden und ist – wie der E39CA Lauf auch – ein REF-B1 Lauf. Die Ergebnisse des Modelllaufs überdecken einen Zeitraum von Januar 1980 bis Dezember 2005.

Der andere EMAC-Lauf, **EMAC (DLR)**, ist am DLR durchgeführt worden und ist ein REF-C1SD Lauf. Er reicht zeitlich von Januar 1980 bis Dezember 2012.

Die Ergebnisse dieser Läufe bezüglich Wasserdampf wurden als Monatsmittel mit den Mischungsverhältnissen von Wasserdampf aus der kombinierten Zeitserie von HALOE und MIPAS zwischen 30°S und 30°N auf verschiedenen Druckniveaus verglichen. Auf der linken Seite von Abbildung 5.8 sind die Vergleiche der Zeitserien auf 100 hPa und auf der rechten Seite sind Streudiagramme auf fünf Druckniveaus gezeigt. In der oberen Reihe sind Vergleiche der kombinierten Zeitserie mit EMAC (FUB) Daten, in der mittleren Vergleiche mit E39CA und in der unteren Reihe sind Vergleiche mit EMAC (DLR) gezeigt.

Sowohl der EMAC (FUB) als auch der E39CA Lauf zeigen im Mittel über alle rechts gezeigten Druckniveaus höhere VMR-Werte auf als die gemessenen Werte, während der EMAC (DLR) Lauf fast überall geringere VMR-Werte besitzt. Die als gestrichelte farbige Linien in den Streudiagrammen dargestellten linearen Fits auf einem Druckniveau können als Vergleich der Variabilität der Wasserdampf Datenreihen der kombinierten Zeitserie und des jeweiligen Modelllaufs interpretiert werden,

wobei die Variabilität gleich ist, sofern die gestrichelte Linie parallel zu der schwarzen durchgezogenen Linie ist.

Für die obere sowie mittlere rechte Darstellungen, das Streudiagramm der kombinierten Zeitreihe mit EMAC (FUB) und E39CA, ist die Variabilität von 115 hPa bis 70 hPa im Modell und den gemessenen Daten ähnlich groß, wird aber in den Modellen auf den Druckniveaus von 30 hPa und 15 hPa deutlich geringer als bei den Messwerten, was man an den orangen und roten gestrichelten Linien mit einer deutlich kleineren Steigung als der Steigung der Linie des optimalen Zusammenhangs erkennt. Im Fall des Vergleichs mit EMAC (FUB) ist die Variation mit der Zeit auf diesen Druckniveaus sogar derart phasenverschoben, dass im Mittel größere Messwerte mit kleineren Modellwerten einhergehen und umgekehrt.

Der Lauf EMAC (DLR) hat im Gegensatz zu den beiden anderen gezeigten Modelldaten kleinere VMR-Werte zum Ergebnis als die gemessenen Werte. Jedoch ist die zeitliche Variabilität bei diesem Modelllauf ähnlicher zu der Variabilität in der kombinierten Zeitreihe, was die zu der schwarzen durchgezogenen Linie ähnlichen Steigungen der linearen Fits durch die Datenpunkte auf den verschiedenen Druckniveaus zeigen, wie es aufgrund des „nudging“ in diesem REF-C1SD Lauf auch zu erwarten war. Auf dem Druckniveau von 70 hPa ist die Variabilität im Modell fast gleich wie bei den gemessenen Werten und auf den anderen Druckniveaus ist die Modellvariabilität etwas geringer als die der Messdaten, jedoch ist – im Gegensatz zu den beiden anderen gezeigten Modellläufen – selbst auf den Druckniveaus von 30 hPa und 15 hPa noch eine ähnliche Variabilität in den Modelldaten wie in den gemessenen Daten zu sehen.

Obwohl also alle Modellläufe an verschiedene gemessene Daten angepasst sind (Wasserdampfmessungen sind hiervon immer ausgenommen), wie es in den oben genannten Literaturreferenzen definiert ist, haben die Modelle unterschiedliche Ergebnisse zur Folge. Es ist bemerkenswert, dass die für die beiden REF-B1 Läufe verwendeten unterschiedlichen Modelle E39-CA und EMAC (FUB) einander ähnliche Mischungsverhältnisse produzieren als EMAC (DLR) und EMAC (FUB). Der REF-C1SD Lauf EMAC (DLR) besitzt noch eine zusätzliche Kopplung an meteorologische Messdaten, was ein Grund für die unterschiedlichen Ergebnisse sein mag. Zudem ist die Festlegung, welche Messdaten in die Modellierung eingehen, zu einem späteren Zeitpunkt festgelegt worden, als die Messdaten für den REF-B1 Lauf. Diese eingehenden Messdaten unterscheiden sich aus diesem Grund voneinander und können mit ein Grund für die Unterschiede in den Ergebnissen sein.

In Tabelle 5.4 werden die nach Gleichung 5.2 berechneten Korrelationskoeffizienten zwischen den Daten der kombinierten Zeitreihe und den Daten der verschiedenen Modelle auf den Druckniveaus der in der rechten Spalte von Abbildung 5.8 gezeigten Streudiagramme angegeben. Auch hier wird ersichtlich, dass EMAC (DLR) als

Druckniveau [hPa]	EMAC (FUB)	E39CA	EMAC (DLR)
115	0,74	0,73	0,80
100	0,75	0,72	0,82
70	0,57	0,58	0,78
30	-0,28	0,09	0,61
15	-0,21	0,08	0,71

Tabelle 5.1: Korrelationskoeffizienten zwischen den Daten der kombinierten HALOE-MIPAS-Zeitreihe und den drei Modellläufen auf fünf verschiedenen Druckniveaus.

REF-C1SD Lauf deutlich besser die Variabilität der gemessenen Daten reproduzieren kann als die beiden REF-B1 Läufe ohne „nudging“.

---

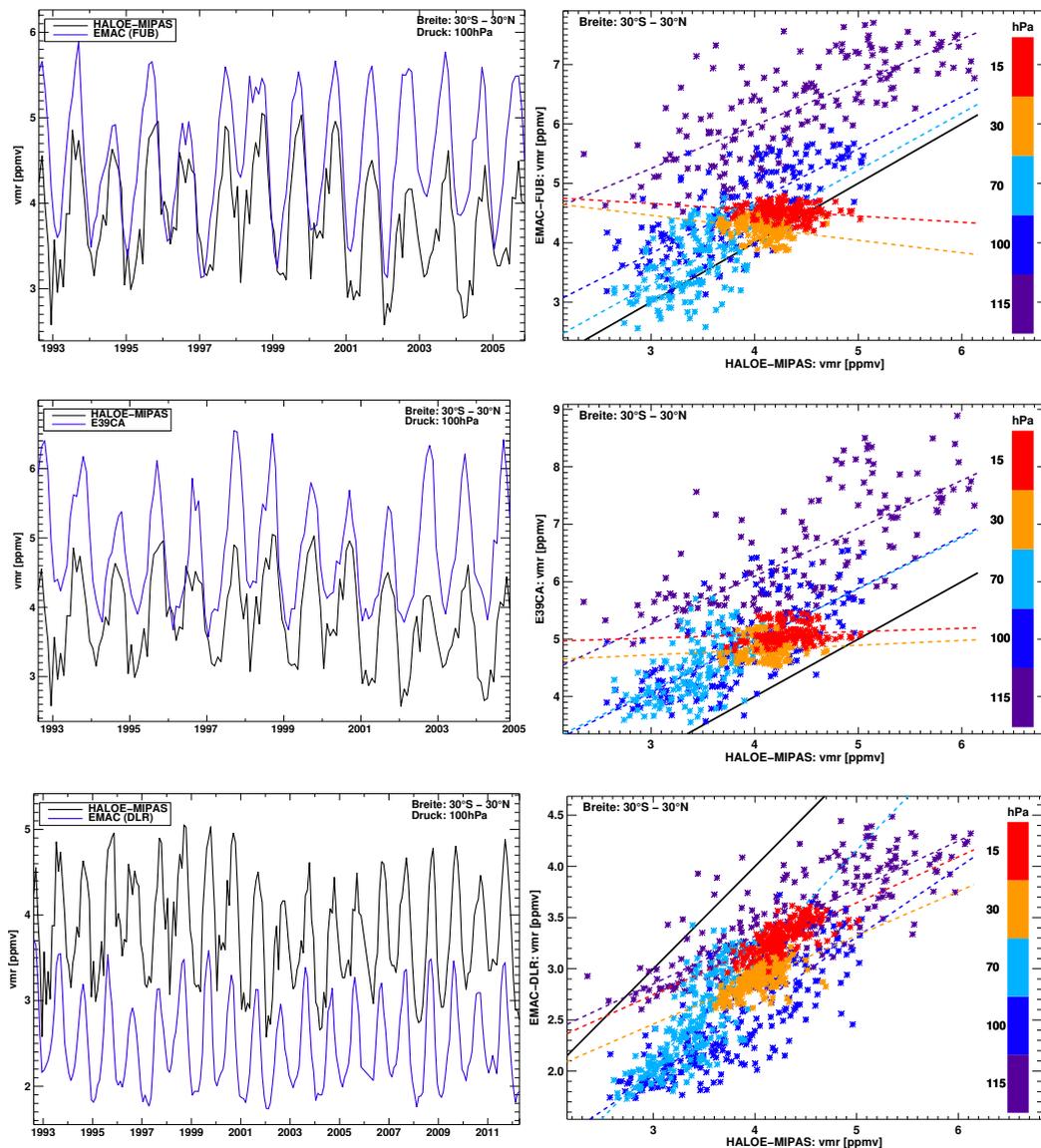


Abbildung 5.8: **Links:** Vergleiche der kombinierten HALOE-MIPAS-Zeitserie mit Zeitserien von Modellläufen im Zuge des SHARP-Projekts, jeweils gemittelt zwischen  $30^{\circ}\text{S}$  und  $30^{\circ}\text{N}$  auf einem Druckniveau von 100 hPa. Die Zeitserien, welche mit der kombinierten Zeitserie verglichen werden, sind (oben:) Modellergebnisse eines an der FUB durchgeführten EMAC-Laufs, (Mitte:) Ergebnisse eines Laufs des E39-CA Modells am DLR und (unten:) Ergebnisse eines am DLR durchgeführten EMAC-Laufs (für detailliertere Beschreibungen der Modelle siehe Text). **Rechts:** Streudiagramme auf fünf Druckniveaus von 115 hPa bis 15 hPa aus den Modelldaten (Anordnung wie in den Darstellungen links) und Daten aus der kombinierten Zeitserie. Die durchgezogenen schwarzen Linien kennzeichnen jeweils die Diagonale, auf der die optimalen Übereinstimmungen der beiden Datensätze lägen. Die gestrichelten farbigen Linien sind lineare Fits durch die Datenpunkte auf einem Druckniveau. Die y-Achsen der drei rechten Darstellungen unterscheiden sich voneinander.

## 5.5 Analyse der kombinierten Zeitreihe mittels multivariater Regression

Um die mehr als 20 Jahre umfassende Zeitserie aus den kombinierten Daten aus Wasserdampfmessungen von HALOE und MIPAS zu analysieren, wurde ein Fitprogramm verwendet, welches diverse atmosphärische Effekte mathematisch nachbildet. Dieses multivariate (auch genannt multiple) lineare Regressionsmodell ist eine abgewandelte Version des in von Clarmann et al. (2010) beschriebenen und zum Beispiel in Stiller et al. (2012c) angewendeten Programms. Es ist flexibel erweiterbar, falls die Fitfunktion weitere physikalische Effekte zusätzlich beschreiben soll.

Mit dieser Methode lässt sich für die kombinierte Zeitreihe einschätzen, wie stark sich die in der Fitfunktion beinhalteten Effekte auf den Wasserdampf in verschiedenen Breitenbereichen der Erde auswirken. In jedem Breiten-Höhen-Bin wurde mit diesem Modell versucht, die kombinierte HALOE-MIPAS-Zeitserie nachzubilden.

### 5.5.1 Generelle Beschreibung der Durchführung der Regression

Das Regressionsmodell wurde im Zuge der Untersuchungen wiederholt abgewandelt, um zusätzliche atmosphärische Effekte mit in den Fit eingehen zu lassen. Grundsätzlich wird eine Fitfunktion  $F(t)$  definiert, welche verschiedene und – bis auf den y-Abschnitt – zeitabhängige Terme enthält, welche mit zu bestimmenden Parametern  $\vec{A}$  multipliziert werden.

In diesem Regressionsmodell werden die verschiedenen Terme mit ihren Vorfaktoren aufsummiert. Es werden weder etwaige Kopplungen zwischen verschiedenen atmosphärischen Signalen beschrieben (ein hypothetisches Beispiel wäre, wenn die Auswirkung von der QBO auf Wasserdampf umso größer würde, je kleiner der ENSO-Index ist und umgekehrt), noch werden nicht-lineare Abhängigkeiten bezüglich der Fitparameter in Betracht gezogen (Voraussetzung für die multiple lineare Regression).

Aus Gründen der einfacheren Interpretierbarkeit wurden lineare Zusammenhänge zwischen den Wasserdampfmischungsverhältnissen und den Zeitreihen der eingehenden atmosphärischen Größen angenommen, was eine leicht zu interpretierende, jedoch eventuell nicht in jedem Fall die beste Herangehensweise sein muss, vergleiche hierzu Unterkapitel 6.

In Unterkapitel 5.5.1.1 werden die in allen verwendeten Fitfunktionen vorkommenden Terme vorgestellt. Im darauffolgenden Unterkapitel 5.5.1.2 werden allgemei-

---

ne Eigenschaften des Regressionsmodells und Methoden zur Bestimmung der Güte der Ergebnisse vorgestellt.

### 5.5.1.1 Terme in der Fitfunktion

In der folgenden Liste werden die Terme beschrieben, die in allen in dieser Arbeit verwendeten Fitfunktionen  $F(t)$  vorkommen. Im Allgemeinen gilt, dass  $F(t)$  gleich dem Vektor  $\vec{y}_{\text{Mod}}$  mit der Zeitreihe der modellierten Wasserdampf-VMR-Werte ist.

1. In jeder der in den verschiedenen Unterkapiteln verwendeten Fitfunktionen (Gleichungen 5.8, 5.10, 5.11 und 5.12) ist ein y-Abschnitt und ein linearer Term  $F_{\text{lin}}(t) = A_0 + A_1 t$  vertreten. In der Gleichung 5.10 in Unterkapitel 5.5.3 ist eine Erweiterung von diesen Termen vorgenommen worden.
2. Alle Gleichungen beinhalten zudem Oszillationen des Jahrgangs (Schwingungsdauer:  $T_1 = 1a$ , mit  $a = 1$  Jahr) und drei Oberschwingungen davon (Schwingungsdauern  $T_n = \frac{1a}{n}$ , mit  $n = 2, 3, 4$ ). Hierzu werden der Fitfunktion die Terme  $F_{\text{sin/cos}}(t) = \sum_{n=1}^4 A_{n,1} \sin\left(\frac{2\pi}{T_n} t\right) + A_{n,2} \cos\left(\frac{2\pi}{T_n} t\right)$  hinzugefügt. Die Amplituden  $A_{n,1}$  und  $A_{n,2}$  für den Sinus und den Cosinus sind die Fitparameter und regulieren Phase und Amplitude des resultierenden sinusförmigen Ergebnisses dieser Summe. Optional können mit diesem Programm auch andere atmosphärische Oszillationen wie die QBO oder der solare Zyklus als ein sinusförmiges Signal angenähert werden. Alternativ gibt es aber auch die Möglichkeit, gemessene Proxydaten für diese Signale zu verwenden.
3. Die QBO wird in den verwendeten Fitfunktionen durch Proxydaten repräsentiert. Der hier verwendete Proxydatensatz von Radiosondenmessungen beinhaltet Daten seit 1987 und besteht aus Windmessungen auf 14 (bzw. 15 seit 1997) Drucklevels von 100 hPa bis 10 hPa über Singapur (siehe Homepage vom Institut für Meteorologie der FUB, Link im Literaturverzeichnis). Es werden Messwerte für die QBO auf den Drucklevels 30 hPa und 50 hPa verwendet. Der Unterschied von ungefähr  $\frac{\pi}{2}$  in der Phase des QBO-Signals oder anders ausgedrückt, die ungefähre Orthogonalität der QBO-Signale auf diesen beiden Druckniveaus macht es annäherungsweise möglich, wie bei den oben beschriebenen Sinus-/Cosinus-Fits eine beliebige zeitliche Verschiebung des QBO-Signals in der Regression zuzulassen. Der zusätzliche Term in der Fitfunktion lautet  $F_{\text{QBO}}(t) = A_{\text{QBO},30} \text{QBO}(t, p = 30\text{hPa}) + A_{\text{QBO},50} \text{QBO}(t, p = 50\text{hPa})$ .
4. In allen Fitfunktionen wird das Signal der ENSO durch Werte aus einem Proxydatensatz (siehe Homepage des NOAA Earth System Research Laboratory,

Link im Literaturverzeichnis) namens MEI (**M**ultivariate **E**NSO **I**ndex) für die Stärke der ENSO beschrieben. Diese Werte werden aus sechs über dem tropischen Pazifik gemessenen Werten berechnet: Druck auf Meereshöhe, zonale und meridionale Komponenten des Oberflächenwinds, Temperaturen der Meeresoberfläche und der Luft an der Meeresoberfläche, sowie der prozentualen Wolkenbedeckung des Himmels. Der Datensatz liegt auf zwölf zweimonatigen Mitteln pro Jahr von 1950 bis heute vor. Da die Werte dieses Proxys sich auf eine Höhe an oder knapp oberhalb der Erdoberfläche beziehen, wurde eine zeitliche Verzögerung  $t_{V_{AOA}}(B, h)$  (mit  $B \hat{=}$  Breiten-Bin) des ENSO-Signals eingeführt, mit der dieses das betrachtete Breiten-Höhen-Bin erreicht. Diese Verschiebung wurde auf Basis von MIPAS Messungen von  $SF_6$ -Mischungsverhältnissen durchgeführt. Aus diesen Messungen lässt sich aufgrund der chemisch inerten Natur von  $SF_6$  das mittlere Luftalter („mean Age Of Air“, AOA) am Ort der Messung bestimmen (vergleiche z. B. Stiller et al., 2008). Für diese Arbeit wurden Werte für das mittlere Luftalter aus einem Zeitraum von 2002 bis 2010 verwendet (Stiller et al., 2012c) und in Breiten-Höhen-Bins gemittelt und auf ganze Monate gerundet, da die kombinierte HALOE-MIPAS-Zeitserie aus Monatsmitteln besteht und die Zeitskala für den Fit festlegt. In Abbildung 5.9 sind die Ergebnisse für das Luftalter aus diesen Berechnungen für die Breiten-Höhen-Bins der kombinierten Zeitserie gezeigt. Der Term für den Effekt des ENSO-Signals auf das Wasserdampf-mischungsverhältnis ist gegeben durch  $F_{ENSO}(t, t_{V_{AOA}}(B, h)) = A_{ENSO} ENSO(t + t_{V_{AOA}}(B, h))$ .

Anmerkung zur Berechnung der im Folgenden als „Amplituden“ angegebenen Werte für QBO und ENSO: für eine „Amplitude“ des Einflusses dieser beiden Größen auf Wasserdampf wurden in dieser Arbeit nicht die mittleren Beträge der lokalen Extrema der gefitteten Terme ( $F_{QBO}(t)$ ,  $F_{ENSO}(t, t_{V_{AOA}}(B, h))$ ), sondern die Hälfte der Differenz aus dem positivsten Wert des betrachteten Terms und dem negativsten Wert genommen. Bei einer Kombination eines Sinus und eines Cosinus gleicher Phasen entspräche das noch immer der Amplitude der daraus entstehenden verschobenen Sinuskurve, wie es zum Beispiel bei Punkt 2. der vergangenen Liste der Fall wäre. Bei der unregelmäßigen Kurve einer Zeitreihe aus Proxy-Daten dagegen entspricht dieser von der Regression abhängige Wert dem Mittel aus den Beträgen des am stärksten den modellierten Wasserdampf erhöhenden und dem am stärksten den modellierten Wasserdampf erniedrigenden Einfluss der betrachteten atmosphärischen Größe. Am Beispiel der QBO bedeutet das, die „Amplituden“ werden berechnet als  $\frac{1}{2} [\max(F_{QBO}(t)) - \min(F_{QBO}(t))]$ , mit  $\max(F_{QBO}(t))$  als dem positivsten Wert des Terms  $F_{QBO}(t)$  und  $\min(F_{QBO}(t))$  als dem negativsten Wert dieses Terms.

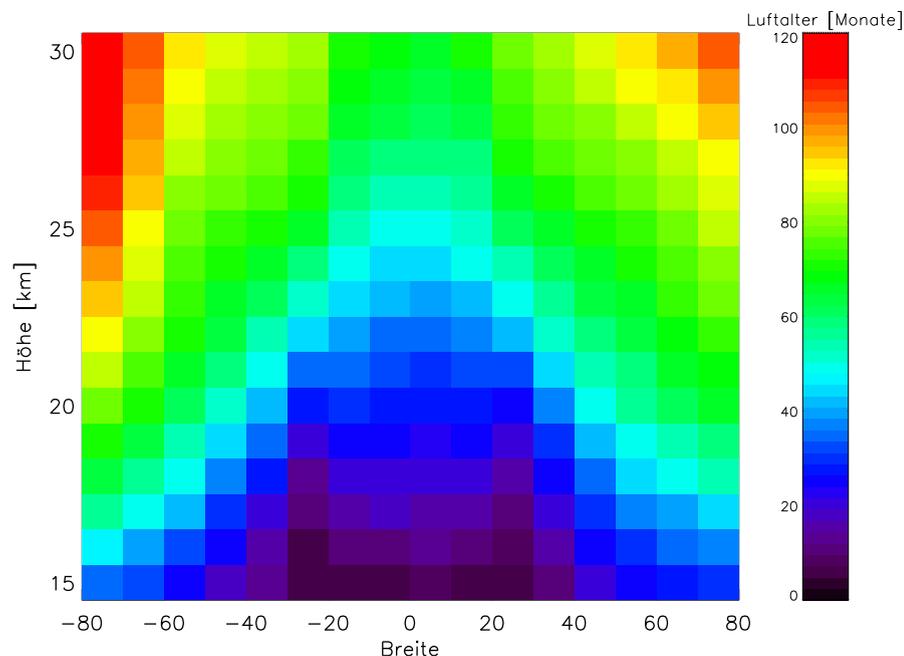


Abbildung 5.9: Aus MIPAS-SF<sub>6</sub>-Daten berechnetes Luftalter, gemittelt in den Breiten-Höhen-Bins der kombinierten HALOE-MIPAS-Zeitserie und auf ganze Monate gerundet, entspricht  $t_{\text{VAOA}}(\text{B}, h)$ .

### 5.5.1.2 Eigenschaften des Regressionsmodells und Methoden zur Beurteilung der Ergebnisse

Nach von Clarmann et al. (2010) wird für die Berechnung der Fitparameter  $A$  die folgende Gleichung zu Hilfe gezogen:

$$\chi^2 = \frac{(\vec{y}_{\text{Mess}} - \vec{y}_{\text{Mod}})^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{\text{Mess}} - \vec{y}_{\text{Mod}})}{N_{\text{Datenpunkte}} - N_{\text{Fitparameter}}}, \quad (5.4)$$

wobei  $\vec{y}_{\text{Mess}}$  ein Vektor mit der Zeitreihe der gemessenen VMR-Werte ist und

$$\vec{y}_{\text{Mod}} = \begin{pmatrix} F(t_1) \\ F(t_2) \\ \vdots \\ F(t_{\text{max}}) \end{pmatrix} \text{ ein Vektor mit der Zeitreihe der VMR-Werte aus der Regressi-}$$

on ist (hier repräsentieren die  $t_i$  die diskreten Zeitpunkte, an denen die Messwerte gegeben sind).  $\mathbf{S}_y^{-1}$  ist die Kovarianzmatrix der Regressionsanalyse (vergleiche Unterkapitel 3.3.3). Die Nichtdiagonalelemente sind normalerweise gleich Null und auf den Diagonalelementen stehen hier die quadrierten Standardfehler der Mittelwerte aller Messungen, die zu den Monatsmittelwerten in dem betrachteten Breiten-Höhen-Bin beigetragen haben. Der Standardfehler eines Ensembles an Messwerten

wird berechnet durch:

$$\frac{\sigma}{\sqrt{N}} = \sqrt{\frac{\frac{1}{N-1} \left[ \sum_{i=1}^N (\vec{y}_{\text{Mess},i} - \bar{y}_{\text{Mess}})^2 \right]}{N}}, \quad (5.5)$$

wobei  $\sigma$  die Standardabweichung und  $\bar{y}_{\text{Mess}}$  der Mittelwert der Messwerte ist.

Die Größen  $N_{\text{Datenpunkte}}$  (Anzahl an Datenpunkten) und  $N_{\text{Fitparameter}}$  (Anzahl an Fitparametern) in Gleichung 5.4 sind für die Normierung zuständig. Ist  $\frac{N_{\text{Datenpunkte}}}{N_{\text{Fitparameter}}} \gg 1$  und sind die Wurzeln der Einträge auf der Diagonalen der Kovarianzmatrix (also die Standardfehler) ähnlich groß wie die Abweichungen des Fits von den Messwerten, so ist  $\chi^2 \approx 1$ .

Wird Gleichung 5.4 partiell nach allen in  $\vec{y}_{\text{Mod}}$  enthaltenen Fitparametern abgeleitet und jede partielle Ableitung gleich Null gesetzt, so kann man aus dem entstehenden Gleichungssystem die Fitparameter berechnen.

Für jedes Breiten-Höhen-Bin bei allen Ansätzen mit verschiedenen Fitfunktionen wurden die Werte für das RMS des Fits bezüglich der ursprünglichen Zeitreihe berechnet. Der RMS-Wert wird berechnet durch

$$\text{RMS}(\vec{y}_{\text{Mess}}, \vec{y}_{\text{Mod}}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\vec{y}_{\text{Mess},i} - \vec{y}_{\text{Mod},i})^2}. \quad (5.6)$$

Sowohl RMS als auch  $\chi^2$  sind ein Maß für die Güte des Fits, wobei beim RMS jedes Element der Summe gleich gewichtet wird und beim  $\chi^2$  die Fehler der individuellen Werte in die Gewichtung der Elemente der Summe eingehen.

Da sehr oft bei der  $\chi^2$ -Berechnung die quadrierten Standardfehler in der  $\mathbf{S}_y$  Matrix zu klein sind im Vergleich zu den quadrierten Abweichungen des Fits von der Messung, nimmt zunächst das  $\chi^2$  Werte  $\gg 1$  an (vergleiche Abbildung 5.10). Dies passiert unter anderem, da das Regressionsmodell nicht alle relevanten physikalischen Effekte beinhaltet, welche sich auf die komplexe Entwicklung des Wasserdampfmischungsverhältnisses ausüben. Um dem entgegenzuwirken, wird ein iteratives Autokorrelationsverfahren angewandt. Bei diesem Verfahren wird zu der ursprünglichen Kovarianzmatrix eine weitere mit einem Faktor  $\gamma$  skalierte symmetrische Matrix  $\mathbf{S}_2^*$  addiert. Die Hauptdiagonale dieser Matrix enthält in jedem Eintrag den Korrelationskoeffizienten  $k_0$  der Zeitserie der Residuen mit einer zeitlich unverschobenen Zeitserie der Residuen, was einer Eins in jedem Eintrag entspricht. Die beiden Nebendiagonalen enthalten in jedem Eintrag den Korrelationskoeffizienten  $k_1$  der ursprünglichen Zeitserie der Residuen mit einer Zeitserie der Residuen, welche um einen Monat verschoben ist. Die weiteren Diagonalen enthalten entweder die Korrelationskoeffizienten  $k_n$  der ursprünglichen Residuenzeitserie mit einer um

n Monate verschobenen Residuenzeitserie, oder Nullen, falls der Korrelationskoeffizient negativ wird. Die aus der Summe erhaltene Matrix sieht dann folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\mathbf{y},2} &= \mathbf{S}_{\mathbf{y}} + \gamma \mathbf{S}_2^* = \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3^2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sigma_{N-1}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sigma_N^2 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 1 & k_1 & k_2 & \cdots & 0 & 0 \\ k_1 & 1 & k_1 & \cdots & 0 & 0 \\ k_2 & k_1 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & k_1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & k_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.7) \end{aligned}$$

wobei der Skalierungsfaktor  $\gamma$  so gewählt ist, dass  $\chi^2 \stackrel{!}{=} 1$  wird, in Gleichung 5.4 unter Verwendung von  $\mathbf{S}_{\mathbf{y},2}$  anstelle von  $\mathbf{S}_{\mathbf{y}}$ . Da – wie oben erwähnt – das Regressionsmodell nicht unbedingt alle physikalischen Effekte berücksichtigt, um eine gemessene Zeitserie adäquat zu reproduzieren, werden mit dieser Maßnahme die Residuen zwischen dem Fit und den Messungen als Modellfehler interpretiert. Diese so bestimmten Modellfehler sind die Wurzeln der Einträge der Matrix  $\gamma \mathbf{S}_2^*$ . Die Summe dieser Matrix mit  $\mathbf{S}_{\mathbf{y}}$  ergibt dann die Matrix  $\mathbf{S}_{\mathbf{y},2}$ , welche sich aus den Fehlern in der Messung und den Modellfehlern zusammensetzt.

Im nächsten Iterationsschritt werden neue Fitparameter  $A$  bei Ersetzen von  $\mathbf{S}_{\mathbf{y}}$  mit  $\mathbf{S}_{\mathbf{y},2}$  aus den partiellen Ableitungen von  $\chi^2$  berechnet. Ergibt sich mit diesen  $A$  ein  $\chi^2$  Wert zwischen 0,9 und 1,1 so endet die Iteration. Ist dies nicht der Fall, wird eine erneute Autokorrelation durchgeführt und eine neue Kovarianzmatrix durch  $\mathbf{S}_{\mathbf{y},3} = \mathbf{S}_{\mathbf{y},2} + \gamma \mathbf{S}_3^*$  berechnet. Dies wird solange weitergeführt bis ein  $\chi^2$ -Wert innerhalb der Grenzen herauskommt, oder die maximale Anzahl an Iterationen erreicht wird. Diese maximale Anzahl an Iterationen war in den meisten Fällen auf 20 festgelegt, wurde jedoch in Ausnahmefällen auf 50 erhöht, zum Beispiel bei den Regressionen in Unterkapitel 5.5.3. Diese Erhöhung geschah, um die Anzahl an konvergierten Regressionen zu erhöhen.

## 5.5.2 Ansatz mit einer grundlegenden Fitfunktion

Die als erster Ansatz verwendete Fitfunktion war gegeben durch

$$F(t, t_{\text{V}_{\text{AOA}}}(\text{B}, h)) = F_{\text{lin}}(t) + F_{\text{sin/cos}}(t) + F_{\text{QBO}}(t) + F_{\text{ENSO}}(t, t_{\text{V}_{\text{AOA}}}(\text{B}, h)), \quad (5.8)$$

wobei die einzelnen Terme in Unterkapitel 5.5.1.1 beschrieben sind.

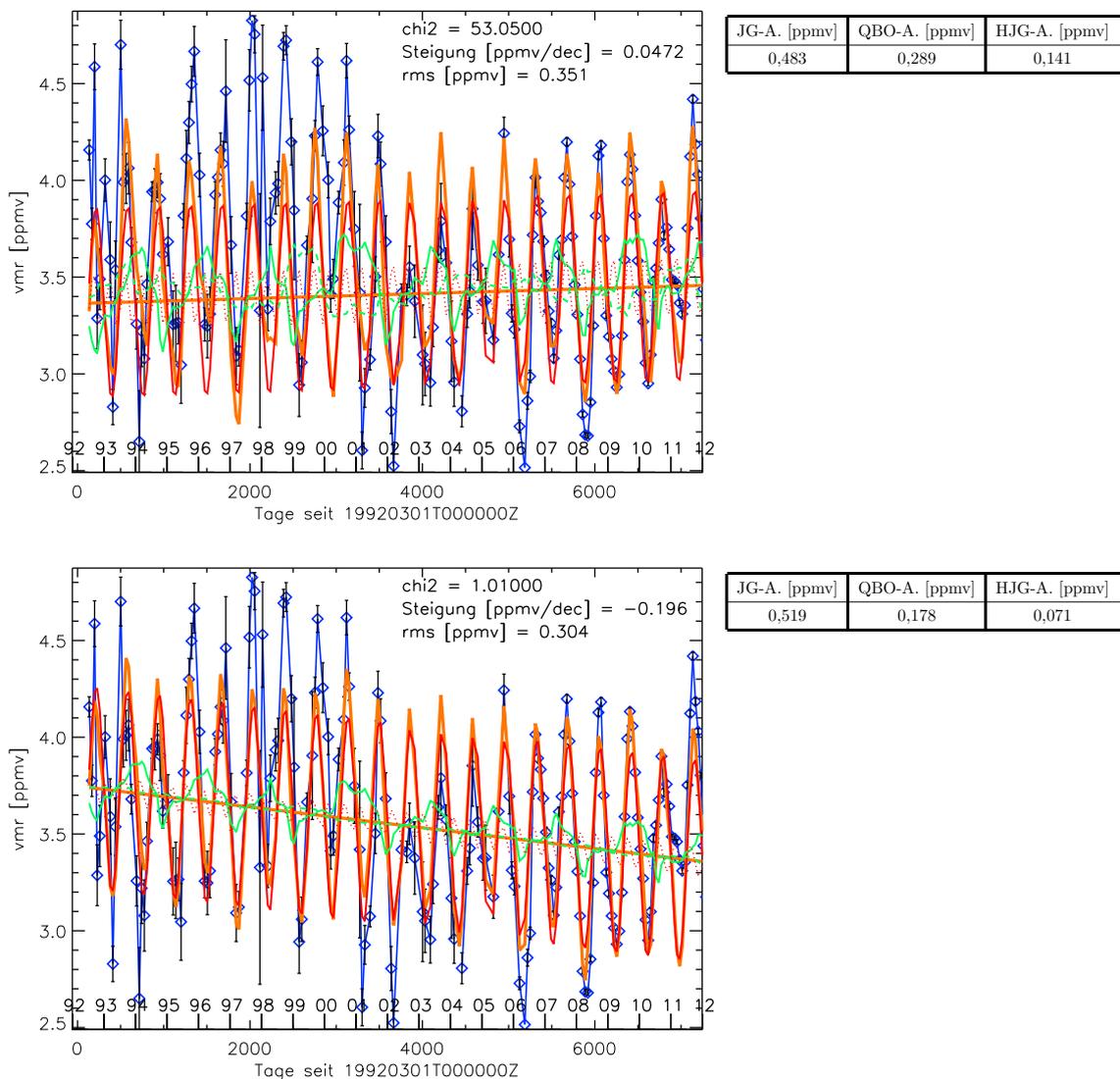


Abbildung 5.10: **Links:** Beispiel für einen Fit der kombinierten Zeitserie von HALOE und MIPAS zwischen  $10^{\circ}\text{S}$  und  $0^{\circ}$  in 17 km Höhe mit dem im Text beschriebenen Programm. In beiden Darstellungen sind die blauen Linien mit den Rauten und den schwarzen Fehlerbalken mit dem Standardfehler die monatlichen Werte der kombinierten Zeitserie. Die orangen oszillierenden Linien sind der gesamte Fit (siehe Gleichung 5.8) und die orangen geraden Linien der lineare Fit. Die folgenden gefitteten Linien in beiden Abbildungen sind sämtlich mit dem linearen Fits aufsummiert abgebildet: die roten Linien sind der Jahresgang, die grünen Linien sind die QBO, die grünen gestrichelten Linien sind ENSO, die roten gepunkteten Linien sind der Halbjahresgang. Die obere Abbildung ist die Regression ohne Autokorrelation, die untere mit Autokorrelation. **Rechts:** Tabellen mit den Amplituden des Jahresgangs (JG-A.), der QBO (QBO-A.) und des Halbjahresgangs (HJG-A.) der Fits links (vergleiche mit Tabellen in den Abbildungen 5.14 und 5.16).

Im gesamten Unterkapitel 5.5 und Kapitel 6 werden alle Größen, die sich auf Ergebnisse der Regression mit der Fitfunktion 5.8 beziehen, mit dem Subskript „0“ gekennzeichnet.

Ein Beispiel für einen Fit in dem Breiten-Höhen-Bin  $10^\circ$  Süd bis  $0^\circ$  auf 17 km Höhe ist in der oberen Darstellung in Abbildung 5.10 gezeigt, bevor die Autokorrelation durchgeführt wurde. In der unteren Darstellung ist derselbe Fit mit Autokorrelation (vergleiche Unterkapitel 5.5.1.2) gezeigt. Üblicherweise sind die Gesamtfits mit und ohne Autokorrelation sehr ähnlich zueinander, mit meistens etwas geringeren RMS-Werten bei der autokorrelierten Regression.

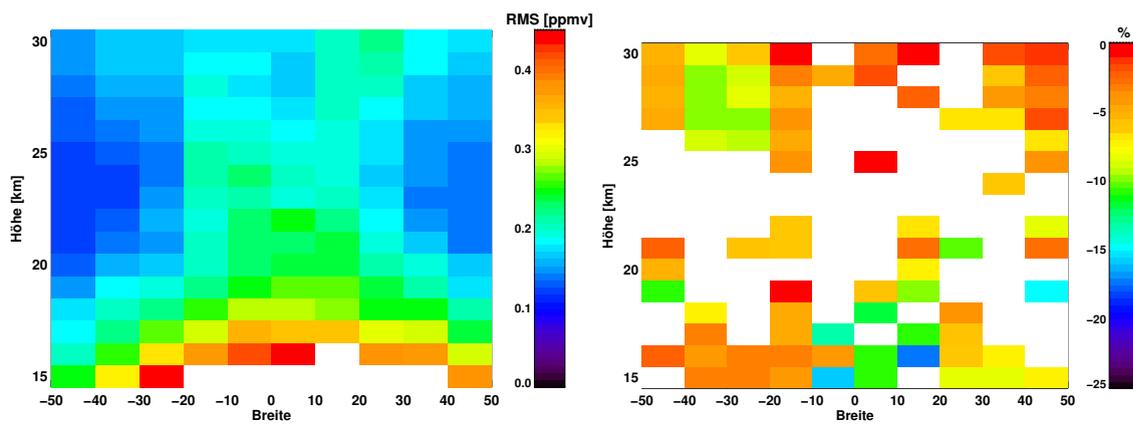


Abbildung 5.11: **Links:** RMS-Werte nach Gleichung 5.6 zwischen den kombinierten Zeitserien und der Regression mit der Fitfunktion 5.8 in Breiten-Bins zwischen  $50^\circ$ S und  $50^\circ$ N und in Höhen zwischen 15 km und 30 km. **Rechts:** Relative Differenzen  $\frac{\text{RMS}_{0,\text{Autokorr}} - \text{RMS}_0}{\text{RMS}_0}$  im gleichen Breiten-Höhen-Bereich zwischen Regressionen mit Autokorrelation und ohne Autokorrelation mit derselben Fitfunktion wie im linken Bild. Da die Legenskala nach oben hin bei 0% beschränkt ist, werden nur die Bins mit einer von weiß verschiedenen Farbe dargestellt, bei denen sich der RMS-Wert durch die Autokorrelation verbessert hat.

In Abbildung 5.11 sind RMS-Werte gezeigt, wie in der Bildunterschrift beschrieben. Die Werte in der linken Abbildung dienen als Referenz bei Vergleichen mit Ansätzen mit erweiterten Fitfunktionen in den Unterkapiteln 5.5.3 und 5.5.4. Die rechte Abbildung zeigt die Bins, in denen eine Verbesserung des RMS-Werts des Fits durch die Autokorrelation erreicht wurde. Die weißen Bins sind entweder Fits, bei denen während der Iterationen kein  $\chi^2$ -Wert zwischen 0,9 und 1,1 erreicht wurde – was ca. 74% der weißen Bins ausmacht –, oder wo sich der RMS-Wert durch die Autokorrelation verschlechtert hat. Unter Berücksichtigung der in den Abbildungen nicht dargestellten Bins mit  $|\text{Breite}| > 50^\circ$  ist bei 153 der 256 Bins eine Verbesserung eingetreten, 76 sind nicht konvergiert (es wurde also nicht der geforderte  $\chi^2$ -Wert erreicht) und bei 27 hat sich der RMS-Wert verschlechtert.

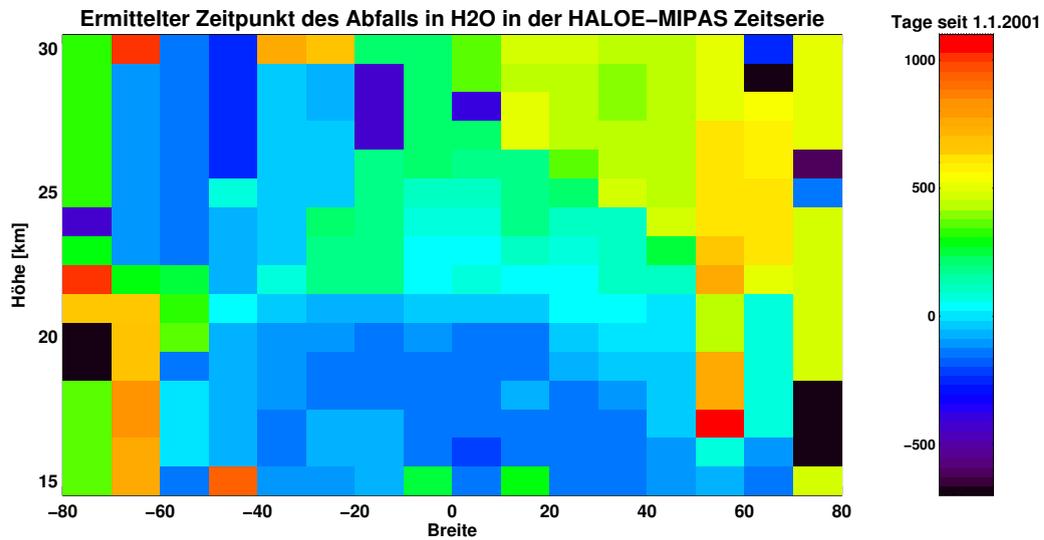
In manchen Bins, wie in dem in Abbildung 5.10 gezeigten, kann der Verlauf der Zeitserie durch die Fitfunktion aus Gleichung 5.8 recht gut beschrieben werden, jedoch hat sich gezeigt, dass in vielen Bins die Fitfunktion einer Erweiterung bedarf, um die Zeitserie ausreichend präzise beschreiben zu können. Der Millenium-Drop (vergleiche Unterkapitel 5.3.2) und auch scheinbare mittelfristige Trends, welche vielleicht aufgrund von in Fitfunktion 5.8 nicht beachteten atmosphärischen Oszillationen im stratosphärischem Wasserdampf nicht richtig von dem Regressionsmodell simuliert werden können, sind der Grund hierfür. Der exakte Zeitpunkt des Millenium-Drops hängt von Höhe und Breite ab, aus Gründen des im Vergleich zur Troposphäre langsamen Transports von Luft in der Stratosphäre. Um die Verbesserung des Fits zu erreichen, wurden zwei Ansätze verwendet:

1. Der erste Ansatz wird in Unterkapitel 5.5.3 beschrieben. Hier wird versucht, die mittelfristigen Trends vorerst ohne physikalische Interpretation nachzubilden, indem Punkte mit einem in diesem Unterkapitel näher erläuterten Verfahren bestimmt werden, an denen sich der lineare Trend ändert. Die Fitfunktion enthält somit anstelle des einfachen linearen Trends eine Aneinanderreihung von kürzeren linearen Trends und ansonsten dieselben Terme wie in Gleichung 5.8.
2. In einem zweiten Ansatz – erläutert in Unterkapitel 5.5.4 – wird das Signal des elfjährigen solaren Zyklus einerseits durch zwei Sinus-Cosinus-Fits (Schwingungsdauern  $T_{s,1} = 127$  Monate und  $T_{s,2} = 63$  Monate) beschrieben, und andererseits durch die Verwendung von Proxydaten für den solaren Zyklus. Abgesehen von diesen zusätzlichen Termen ist auch hier die Fitfunktion dieselbe wie in Gleichung 5.8.

### 5.5.3 Ansatz mit einer durch Bruchpunkte im linearen Trend erweiterten Fitfunktion

Es hat sich gezeigt, dass ein einzelner linearer Fit zusammen mit den atmosphärischen Oszillationen zumeist nicht ausreicht, um eine gute Annäherung des Fits an die Zeitreihe zu erreichen. Um den Fit zu verbessern, wurde in jedem Breiten-Höhen-Bin ein „Sprungpunkt“ (oder in diesem Fall „Sprungmonat“) mithilfe einer T-Serie bestimmt (für eine ausführliche Diskussion der Eigenschaften des Tests, vergleiche Alexandersson und Moberg, 1997), um den Millenium-Drop durch die Regression besser nachzubilden zu können.

Dieser Test dient dazu, eine graduelle Änderung des Mittelwerts einer Zeitserie festzustellen. Hierzu wird die Zeitserie in zwei Phasen unterteilt, wobei die Gren-



Höhe [km]	Breitengrade [°] in Bins $\pm 5^\circ$															
	-75	-65	-55	-45	-35	-25	-15	-5	5	15	25	35	45	55	65	75
30	-	-	-	-	-	-	-	x	-	x	x	x	x	-	-	-
29	-	-	-	-	-	-	-	x	-	x	x	x	x	-	-	-
28	-	-	-	-	-	-	-	x	-	x	x	x	x	-	-	-
27	-	-	-	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	-	-	-
26	-	-	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
25	-	-	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
24	-	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
23	-	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
22	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
21	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
20	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
19	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
18	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
17	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
16	-	-	-	-	x	x	x	x	x	x	x	x	x	-	-	-
15	-	-	-	-	x	x	x	-	x	-	x	x	x	-	-	-

Abbildung 5.12: **Abbildung:** Mit einer T-Serie ermittelter Zeitpunkt des Millenium-Drops in Breiten-Höhen-Bins. **Tabelle:** Übersicht über die Breiten-Höhen-Bins, in denen dieses Datum für die weitere Bestimmung von linearen Trends und den Bruchpunkten in linearen Trends verwendet wurde („x“) und in welchen nicht („-“).

ze zwischen den Phasen vom zweiten Datenpunkt bis zum vorletzten Datenpunkt wandert und der maximale Wert der folgenden Testserie gesucht:

$$T_{\max} = \max \{T_a\}_{1 \leq a \leq N-1} = \max \{a \bar{y}_{\text{mess},1}^2 + (N-a) \bar{y}_{\text{mess},2}^2\}_{1 \leq a \leq N-1}, \quad (5.9)$$

mit  $T_{\max}$  als Maximum der Werte der Testreihe  $T_a$ ,  $a$  als dem Zeitpunkt des Wechsels von der ersten zur zweiten Phase, der Anzahl an Datenpunkten  $N$  und  $\bar{y}_{\text{mess},i}^2$  als dem quadrierten Mittelwert der Mischungsverhältnisse in der ersten bzw. zweiten Phase.

Für diese Arbeit wurden die  $T_a$  für die gesamte Zeitserie berechnet und das Maximum  $T_{\max}$  zwischen Juli 1997 und Juli 2003 gesucht. Die so ermittelten räumlich aufgelösten Zeitpunkte des Millennium-Drops sind in Abbildung 5.12 in der oberen Darstellung gezeigt. Anhand dieser Abbildung zeigt sich, dass diese Methode nicht in allen Breiten-Höhen-Bins das erwartete Ergebnis liefert, jedoch in vielen Fällen gut funktioniert. Die Tabelle in dieser Abbildung gibt eine Übersicht darüber, in welchen Breiten-Höhen-Bins die Zeiten für den Sprungmonat im Weiteren verwendet wurden. Das Kriterium für die Verwendung des Sprungmonats in einem Breiten-Bin war eine nach oben hin zu späteren Monaten hin tendierende Verteilung, sowie auch nicht zu große zeitliche Abstände zu benachbarten Breiten-Bins in derselben Höhe.

Für weitere Änderungen im linearen Trend wurde eine Variation der CUSUM-Methode („Cumulative Sum“, kumulative Summe) verwendet, wie etwa in Reinsel et al. (2002) und Jones et al. (2009) angewandt und beschrieben. Diese Methode dient dazu, Zeitpunkte in Datenreihen zu bestimmen, bei denen sich deutliche Änderungen im linearen Trend ergeben. Diese Zeitpunkte werden im Folgenden „Bruchpunkte“ genannt.

In dieser Arbeit wurde diese Methode folgendermaßen umgesetzt:

1. Eine Gerade wird durch sukzessive mehr und mehr Datenpunkte der mit einem 24-monatigen laufenden Mittel geglätteten HALOE-MIPAS-Zeitserie gefittet, angefangen bei zwei Punkten.
  2. Diese Gerade wird zu späteren Zeitpunkten hin verlängert. Es wird die Summe aller Abweichungen des Fits von den Datenpunkten gebildet, angefangen beim ersten Datenpunkt bis vier Datenpunkte nach demjenigen Punkt, bis zu dem der lineare Fit gebildet wurde.
  3. Jedesmal wird überprüft, ob und wie oft diese aufsummierten Differenzen einen selbst festgelegten Grenzwert überschreiten (empirisch wurde dieser Wert als 0,5 ppmv festgelegt).
  4. Falls dies bei fünf oder mehr Werten der Fall ist, wird jener Punkt, bis zu dem gefittet wurde, als Bruchpunkt im linearen Trend eingestuft, also als ein Punkt an dem sich der lineare Trend ändert. Der Grund, warum der Grenzwert fünfmal überschritten werden muss und warum die aufsummierten Differenzen bis vier Punkte nach dem Punkt betrachtet werden, bis zu dem gefittet wurde, ist das Sicherstellen eines stabileren Ergebnisses bzw. von weniger zufälligen Bruchpunkten. Falls der Grenzwert bei einem Punkt nahe am Anfang zum Beispiel ein- oder zweimal überschritten wird, der lineare Fit aber später gut zu den Messdaten passt und der Grenzwert kein weiteres Mal überschritten wird, so wird dieser Punkt nicht als Bruchpunkt eingestuft.
-

5. Um eine zu sehr gestückelte Trendfolge zu vermeiden, wurden die weiteren Bedingungen gestellt, dass jeder lineare Trend mindestens 24 Monate andauern muss und dass zwölf oder weniger Monate vor Ende der Zeitserie bzw. vor einem Sprungpunkt kein Bruchpunkt sein darf.

Die einzige Ausnahme von dieser Art der Bestimmung von Trendänderungen ist der lineare Trend nach dem oben beschriebenen Sprungpunkt. Der Abfall in den Wasserdampferten war in manchen Breiten-Höhen-Bins so abrupt und stark, dass die Bedingung der Mindesttrenddauer ihren Sinn verfehlt hat. Die Vorgehensweise bei dieser Trendbestimmung ist wie folgt:

1. Ein Zeitraum von zwei Jahren nach dem Sprungpunkt wird in zwei Perioden unterteilt, in welchen jeweils ein linearer Fit an die Zeitreihe vorgenommen wird.
2. Dann wird die Summe aus dem RMS-Wert des linearen Fits bezüglich der originalen Zeitserie in der ersten Periode mit dem RMS-Wert des Fits bezüglich der originalen Zeitserie in der zweiten Periode gebildet.
3. Der Zeitpunkt, an dem die erste Periode endet und die zweite Periode beginnt, läuft über die gesamten zwei Jahre und bei jedem dieser Schritte wird die Summe der RMS-Werte gebildet.
4. Es wird letztlich derjenige Zeitpunkt gewählt, an dem die Summe der beiden RMS-Werte am kleinsten wird.

Eine Abbildung der RMS-Werte in Abhängigkeit des Zeitpunkts zwischen den zwei Perioden sähe ähnlich aus wie die obere Darstellung in Abbildung 5.4, wenn man auf der x-Achse die Verschiebung in ppmv durch den Zeitpunkt zwischen den beiden Perioden ersetzt.

Ein Beispiel für die Bruchpunktbestimmung innerhalb des Breiten-Bins von 10°S bis 0° auf 17 km Höhe ist in Abbildung 5.13 gezeigt. Die obere linke Darstellung zeigt die Werte für die kumulative Summe der Abweichungen des linearen Fits von dem laufenden Mittel über die kombinierte Zeitreihe. Die vielen Überschreitungen des Schwellenwerts vor dem Sprungpunkt (rote vertikale Linie) rühren von dem Kriterium her, dass zwölf Monate oder weniger vor einem Sprungmonat kein Bruchpunkt festgestellt werden darf und vorher (bei 13 Monaten oder mehr) weniger als fünfmal der Schwellenwert überschritten wurde. Die Werte in dieser Darstellung sind also die Differenzen der kumulativ aufsummierten linearen Fits und der geglätteten Zeitserie in der oberen rechten Abbildung. In der unteren Abbildung sind die gleichen linearen Fits wie in der oberen rechten Abbildung zusammen mit der kombinierten Zeitserie gezeigt.

---

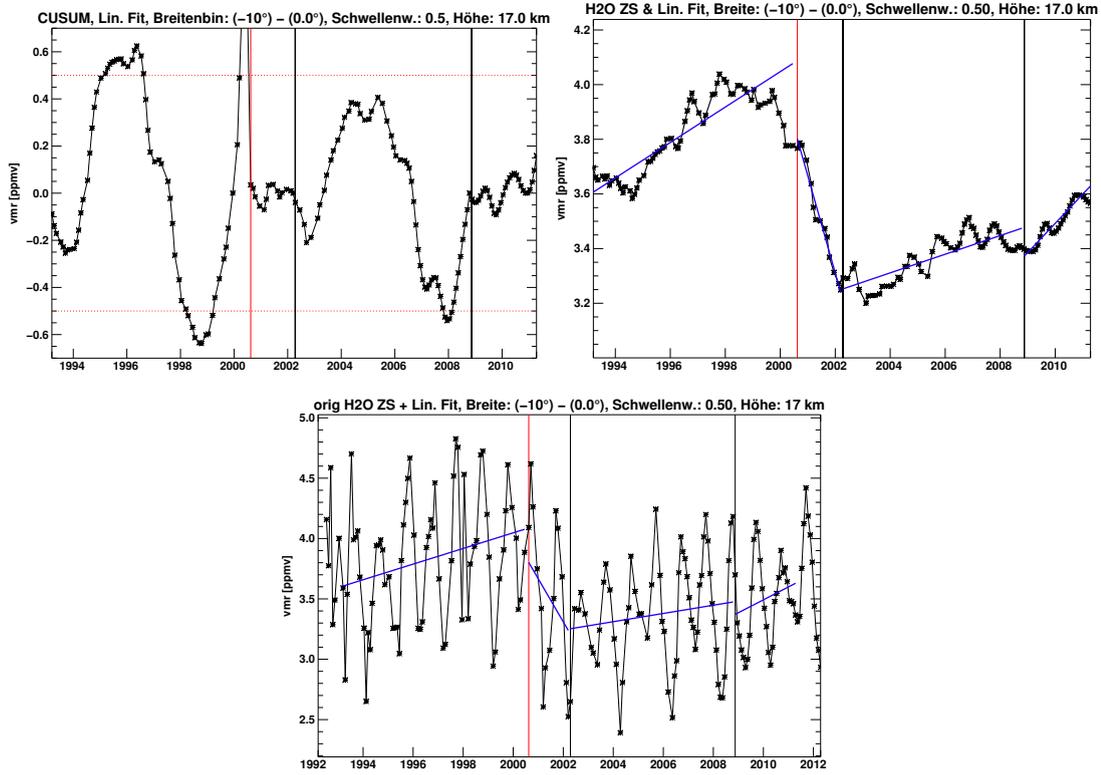


Abbildung 5.13: Beispiel für die Bruchpunktbestimmung in einem Breiten-Höhen-Bin, in dem auch ein Sprungmonat verwendet wird. **Oben links:** Darstellung der CUSUM-Reihe als schwarze Linie mit schwarzen Kreuzen. Die rote gepunktete horizontale Linie sind die Schwellenwerte für die CUSUM. In allen drei Darstellungen sind die schwarzen vertikalen Linien die Bruchpunkte und die rote vertikale Linie ist der Sprungmonat. **Oben rechts:** die schwarze Linie mit schwarzen Kreuzen ist ein 24-monatiges laufendes Mittel über die HALOE-MIPAS-Zeitserie in diesem Bin, die blaue Linie sind die abschnittswise linearen Fits, auch in der unteren Abbildung. **Unten:** HALOE-MIPAS-Zeitserie in diesem Bin als schwarze Linie mit schwarzen Kreuzen und abschnittswise lineare Fits.

Die Fitfunktion für den Fall der Regression inklusive Bruchpunkten und Sprungpunkt ist im Gegensatz zu den Darstellungen in Abbildung 5.13 so konstruiert, dass der Endpunkt einer abschnittswise Geraden immer der Anfangspunkt der nächsten Geraden ist. Bei der Regression wird ein Sprungpunkt gleich behandelt wie ein Bruchpunkt. Die Fitfunktion ergibt sich damit zu:

$$\begin{aligned}
 F(t, \vec{t}_{\text{BP}}, t_{V_{\text{AOA}}}(\text{B}, h)) &= F_{\text{lin,Bruch}}(t, \vec{t}_{\text{BP}}) + F_{\text{sin/cos}}(t) + F_{\text{QBO}}(t) + F_{\text{ENSO}}(t, t_{V_{\text{AOA}}}(\text{B}, h)) = \\
 &= A_0 + \left[ \sum_{n=1}^{N_{\text{BP}}(t)} A_n (t_{\text{BP},n} - t_{\text{BP},n-1}) \right] + A_{N_{\text{BP}}(t)+1} (t - t_{\text{BP},N_{\text{BP}}(t)}) + \\
 &+ F_{\text{sin/cos}}(t) + F_{\text{QBO}}(t) + F_{\text{ENSO}}(t, t_{V_{\text{AOA}}}(\text{B}, h)), \quad (5.10)
 \end{aligned}$$

wobei  $F_{\text{lin,Bruch}}(t, \vec{t}_{\text{BP}})$  die Terme für den linearen Fit der inklusive der Möglichkeit von Bruch- und Sprungpunkten enthält,  $\vec{t}_{\text{BP}}$  der Vektor der Zeitpunkte aller Bruchpunkte (sowie auch des Sprungpunkts) ist, inklusive eines Eintrags  $t_{\text{BP},0} = t_0$ , dem Zeitpunkt des Beginns der Zeitserie, um die Summation für  $n = 1$  im zweiten Term bzw. um den dritten Term – falls kein Bruchpunkt in der Zeitserie vorkommt und somit der zweite Term wegfällt – zu vervollständigen.  $N_{\text{BP}}(t)$  ist die Anzahl der zum Zeitpunkt  $t$  in der Zeitserie schon aufgetretenen Bruchpunkte (inklusive Sprungpunkt). Der Rest der Terme ist in Unterkapitel 5.5.1.1 aufgelistet.

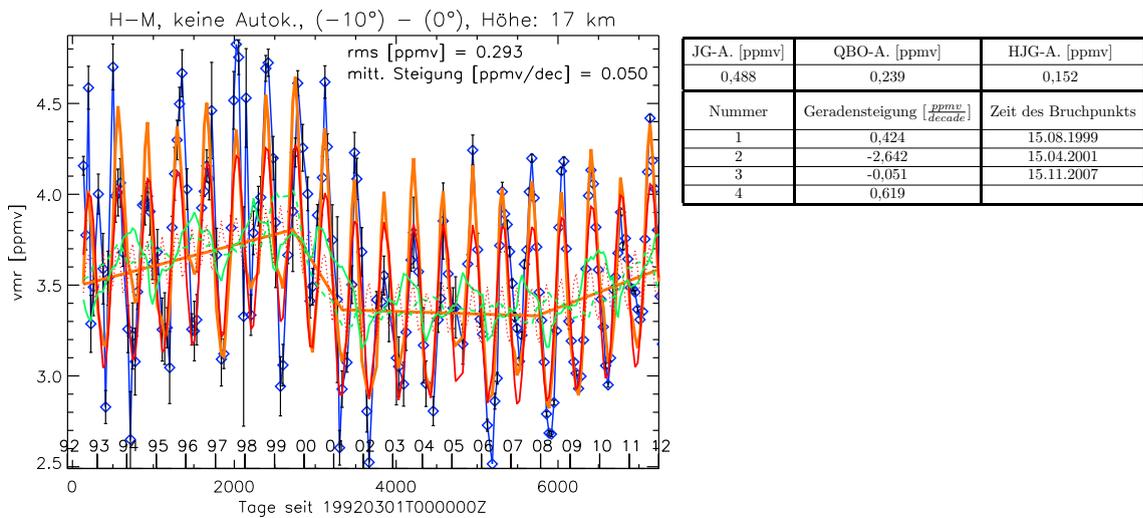


Abbildung 5.14: **Links:** Fit wie in Abbildung 5.10 und mit Bruchpunkten und einem Sprungpunkt wie in Abbildung 5.13. **Rechts:** Tabelle mit Amplituden von Jahresgangsamplitude (JG-A.), QBO-Amplitude (QBO-A.) und Halbjahresgangsamplitude (HJG-A.) von dem Fit links. Außerdem sind die Steigungen der einzelnen Geradenabschnitte, sowie die Zeitpunkte der Bruchpunkte aufgelistet (vergleiche mit Tabellen in den Abbildungen 5.10 und 5.16).

Ein Beispiel für einen Fit mit dieser Fitfunktion innerhalb eines Breiten-Höhen-Bins in den Tropen ist in Abbildung 5.14 gezeigt. Die verschiedenen Linien in dieser Abbildung haben dieselben Bedeutungen wie in Abbildung 5.10. Die Tabelle in der Abbildung listet die Amplituden des Jahresgangs (JG-A.), der QBO (QBO-A.) und des Halbjahresgangs (HJG-A.) auf, sowie die Steigungen der abschnittswisen Geraden und die Zeitpunkte der Bruchpunkte auf.

Im gesamten Unterkapitel 5.5 und Kapitel 6 werden alle Größen, die sich auf Ergebnisse der Regression mit der Fitfunktion 5.10 beziehen, mit dem Subskript „1“ gekennzeichnet.

In Abbildung 5.15 sind relative Differenzen von RMS-Werten der Fits mit Bruchpunkten bezüglich von RMS-Werten der ursprünglichen Fits nach Gleichung 5.8 gezeigt (die Gleichung hierfür ist in der Bildunterschrift gegeben). Der Fit mit Bruch-

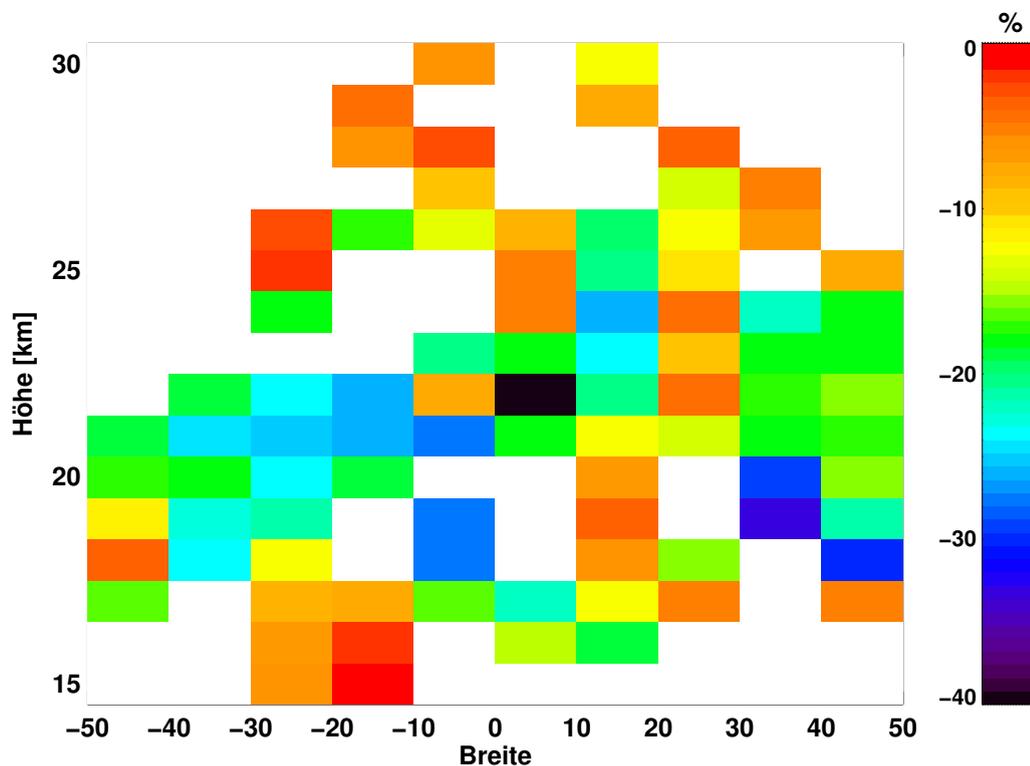


Abbildung 5.15: Relative Differenz  $\frac{\text{RMS}_{\text{Bruch}} - \text{RMS}_0}{\text{RMS}_0}$  der RMS-Werte der Regression mit Bruchpunkten in Bezug auf die RMS-Werte der Regression ohne Bruchpunkte (vergleiche Abbildung 5.11)

punkten ist also schlechter, wo die relativen Differenzen positiv sind. Die in der Abbildung weiß erscheinenden Bins enthalten entweder RMS-Werte von Regressionen mit Bruchpunkten, wo bei der Regression keine brauchbaren Fitparameter gefunden wurden (zum Beispiel treten bisweilen viel zu große Amplituden des Jahresgangs und der anderen Oszillationen auf, Bestimmung des Nullpunkts des linearen Fits und der linearen Fits selbst reproduzieren nicht den gemittelten Gang der Zeitserie, etc.), oder Regressionen mit Bruchpunkten, bei denen der RMS-Wert aus anderen Gründen größer ist als bei der Regression ohne Bruchpunkte. Bei insgesamt 121 der 256 Bins (inklusive der nicht dargestellten Breiten-Bins mit  $|\text{Breite}| > 50^\circ$ ) ist der RMS-Wert durch die Einführung der Bruchpunkte größer geworden und nur bei 94 Bins kleiner. In den Breitenbändern  $80^\circ\text{S}$  bis  $70^\circ\text{S}$  und  $70^\circ\text{N}$  bis  $80^\circ\text{N}$  sind nur sehr wenige HALOE-Daten vorhanden, und die CUSUM-Methode hat aus diesem Grund keine Bruchpunkte festgestellt. Dadurch ergibt sich in diesen 32 Höhenbins innerhalb dieser Breitenbereiche keine Veränderung zu der Regression ohne Bruchpunkte. In neun weiteren Breiten-Höhen-Bins (davon liegen vier im äquatornahen Breitenbereich zwischen  $30^\circ\text{S}$  bis  $30^\circ\text{N}$ ) sind zwar Bruchpunkte durch die CUSUM-Methode gefunden worden, aber von dem Regressionsmodell aus nicht bekannten Gründen nicht als solche umgesetzt worden und der lineare Fit ist wie im Fall von keinen

Bruchpunkten eine einzige Gerade. Auch in diesen Bins hat sich der RMS-Wert nicht verändert. Diejenigen Bins, welche in der Abbildung dargestellt sind und bei denen diese Situation zutrifft, wurden in der Abbildung weiß markiert, da hier die Methode nicht den gewünschten Effekt gebracht hat. Die Bruchpunktmethode hat sich jedoch innerhalb der Breitengrade  $30^{\circ}\text{S}$  und  $30^{\circ}\text{N}$  bewährt. Hier hat sich in rund 64% der Fälle der RMS-Wert durch die Einführung der Bruchpunkte verbessert. Dieses Breitenband um den Äquator herum ist, wie in Kapitel 2 (und dort vor allem in Unterkapitel 2.5) beschrieben, wichtig für das Verständnis des stratosphärischen Wasserdampfs.

Die Ermittlung von sinnvollen Fitparametern bei den Regressionen ohne Bruchpunkte nach Gleichung 5.8 ist deutlich zuverlässiger als bei denen mit Bruchpunkten nach Gleichung 5.10. Nichtsdestotrotz können in vielen Bins Fits an die kombinierte HALOE-MIPAS-Zeitserie durch die Einführung von Bruchpunkten verbessert werden. Es ist jedoch nicht intuitiv einsichtig, durch welche atmosphärischen bzw. chemisch-physikalischen Effekte derartige mittelfristige Trends verursacht werden könnten. Nur zu dem Millennium-Drop gibt es eingehende Studien und Erklärungsversuche (für Referenzen siehe oben).

#### 5.5.4 Ansatz mit einer durch eine Beschreibung des solaren Zyklus erweiterten Fitfunktion

Ein weiterer Ansatz, um das Problem der durch die Regression mit Fitfunktion 5.8 nicht beschreibbaren mittelfristigen Trends zu lösen, wurde durch die Aufnahme des solaren Zyklus als zusätzlichen Effekt mit Einfluss auf das Mischungsverhältnis von Wasserdampf in die Fitfunktion versucht. Der Grund für die Annahme, dass das Signal des solaren Zyklus Einfluss auf  $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnisse haben könnte, sind die zwei Perioden deutlich abnehmenden stratosphärischen Wasserdampfs, welche zum Beispiel in Abbildung 5.7 deutlich werden. Der erste dieser beiden starken Abfälle in Wasserdampf fand um das Jahr 2001 statt und der zweite im Jahr 2012, was einen Zusammenhang mit dem elfjährigen solaren Zyklus nahegelegt hat. Bei der Wahl des Terms, welcher den solaren Zyklus beschreibt, wurden zwei verschiedene Ansätze gewählt:

1. der solare Zyklus wird beschrieben durch Sinus-Cosinus-Terme mit einer Periodendauer von 127 Monaten und einer Periodendauer der Oberschwingung von 63 Monaten. Diese beiden Schwingungsdauern wurden in Cunnold et al. (2004) als die zwei hauptsächlich beitragenden Harmonischen zu der Zeitserie des F10.7 Index (s.u.) zwischen 1979 und 2003 identifiziert. Eine Fourier-Analyse der vorhandenen F10.7 Daten seit 1947 ergab dieselben beiden Schwingungs-

dauern als Hauptkomponenten, bzw. haben sowohl 63 als auch 64 Monate fast den gleichen Wert im Fourierspektrum der F10.7 Daten (Lossow, 2014).

2. der solare Zyklus wird durch den solaren Radioflussindex als Proxydatensatz in der Fitfunktion beschrieben. Für einen optimalen Fit wird dieser Datensatz zeitlich in Abhängigkeit vom Breiten-Höhen-Bin verschoben.

Der solare Radioflussindex (auch F10.7 Index genannt) ist die Strahlungsstärke der Sonne bei einer Frequenz von 2800 MHz, was einer Wellenlänge von 10,7 cm entspricht. Dieser Index ist proportional zur Sonnenaktivität, weswegen er sich gut dafür eignet, den solaren Einfluss auf jegliche atmosphärische Größen mittels einer Regression zu quantifizieren. Die hier verwendeten Proxy-Daten sind ein synoptischer Datensatz, welcher auf der Homepage des SOHO Projekts (**S**olar & **H**eliospheric **O**bservatory) zugänglich ist (Link im Literaturverzeichnis). Der Datensatz reicht zurück bis Februar 1947.

Die als „Amplituden“ der Effekte dieser beiden zusätzlichen Terme auf das modellierte Mischungsverhältnis von Wasserdampf angegebenen Werte werden berechnet, wie in der Anmerkung am Ende von Unterkapitel 5.5.1.1 auch für die „Amplituden“ von QBO und ENSO angegeben.

#### 5.5.4.1 Beschreibung des solaren Zyklus durch Sinus/Cosinus-Terme

Die Fitfunktion im ersten Fall ist gegeben durch:

$$F(t, t_{V_{AOA}}(B, h)) = F_{lin}(t) + F_{sin/cos}(t) + F_{QBO}(t) + F_{ENSO}(t, t_{V_{AOA}}(B, h)) + F_{SZ, sin/cos}(t), \quad (5.11)$$

wobei

$$F_{SZ, sin/cos}(t) = A_{127M,2} \sin\left(\frac{2\pi}{T_{127M}} t\right) + A_{127M,2} \cos\left(\frac{2\pi}{T_{127M}} t\right) + A_{63M,1} \sin\left(\frac{2\pi}{T_{63M}} t\right) + A_{63M,2} \cos\left(\frac{2\pi}{T_{63M}} t\right)$$

die vier Sinus- und Cosinus-Terme für den solaren Zyklus enthält, die Buchstaben  $A$  wie üblich die Fitparameter repräsentieren und  $T_{127M}$  bzw.  $T_{63M}$  Periodendauern von 127 Monaten bzw. 63 Monaten darstellen.

Im gesamten Unterkapitel 5.5 und Kapitel 6 werden alle Größen, die sich auf Ergebnisse der Regression mit der Fitfunktion 5.11 beziehen, mit dem Subskript „2“ gekennzeichnet.

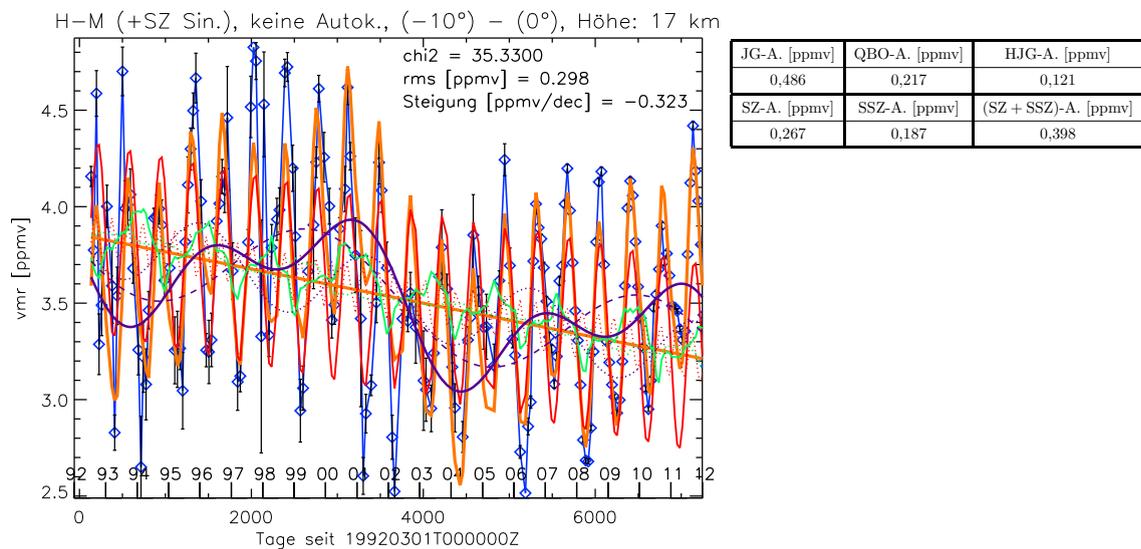


Abbildung 5.16: **Links:** Regression wie in Abbildung 5.10. Die violette gestrichelte Linie ist die Summe aus den beiden Sinus/Cosinus Termen und dem linearen Fit-Term mit einer Schwingungsdauer von 127 Monaten, welche den solaren Zyklus repräsentieren und die violette gepunktete Linie ist die erste Oberschwingung davon, mit einer Schwingungsdauer von 63 Monaten. Die dickere violette Linie ist die Summe aus beiden. **Rechts:** Tabelle mit Amplituden von dem Fit links: Jahresgangsamplitude (JG-A.), QBO-Amplitude (QBO-A.), Halbjahresgangsamplitude (HJG-A.), Amplitude des solaren Zyklus (SZ) mit einer Schwingungsdauer von 127 Monaten (SZ-A.), Amplitude des „semi solaren Zyklus“ (SSZ), den Sinus/Cosinus Termen mit einer Schwingungsdauer von 63 Monaten (SSZ-A.) und die Amplitude der Summe aus den SZ- und SSZ-Termen. (Vergleiche Tabellen in den Abbildungen 5.10 und 5.14)

In Abbildung 5.16 ist ein Beispiel für einen Fit mit der Fitfunktion 5.11 in der ersten Version mit den Sinus/Cosinus-Termen gezeigt. Hier kann man sehen, wie bei der Regression der Millenium-Drop mit den abfallenden Flanken von sowohl des Sinus/Cosinus-Terms mit der Schwingungsdauer von 127 Monaten als auch des Sinus/Cosinus-Terms mit der Schwingungsdauer von 63 Monaten nachgebildet wird.

Die Abbildung 5.17 zeigt die relativen RMS-Werte (Gleichung in Bildunterschrift) zwischen den Regressionen mit dem solaren Zyklus als Sinus/Cosinus-Terme und den ursprünglichen Regressionen nach Gleichung 5.8 im Breitenband von  $50^\circ\text{S}$  bis  $50^\circ\text{N}$ . Es sind hier nur die Bins dargestellt, in denen sich durch die Hinzunahme der Sinus/Cosinus-Terme für den solaren Zyklus in die Fitfunktion die RMS-Werte verbessert haben. Eine Verbesserung im Vergleich zum ursprünglichen Regressionsmodell ist durch den weiteren Term im gezeigten atmosphärischen Bereich bei 92,5% der Breiten-Höhen-Bins eingetreten.

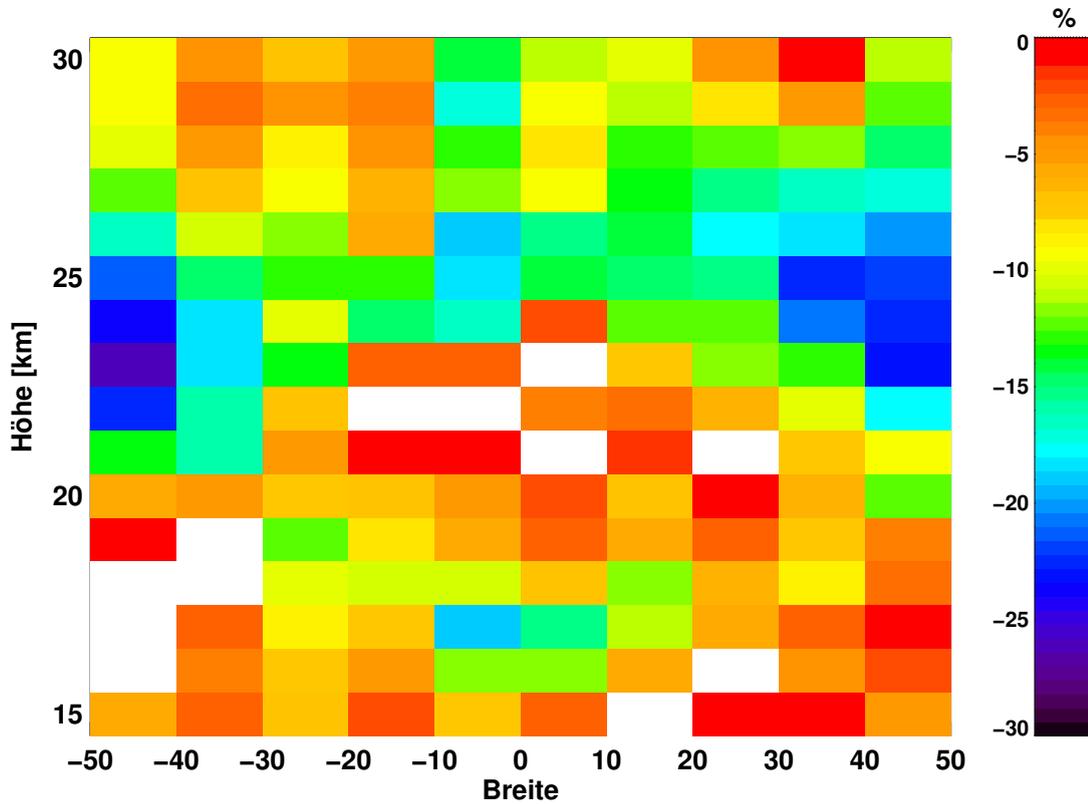


Abbildung 5.17: Relative Differenzen  $\frac{\text{RMS}_{\text{sol, sin}} - \text{RMS}_0}{\text{RMS}_0}$  der RMS-Werte der Regression mit der Fitfunktion 5.11 inklusive der den solaren Zyklus repräsentierenden Sinus-Cosinus-Funktionen in Bezug auf die RMS-Werte der ursprünglichen Regression mit Fitfunktion 5.8 (vergleiche Abbildungen 5.11 und 5.15)

#### 5.5.4.2 Beschreibung des solaren Zyklus durch solaren Radioflussindex

Im gesamten Unterkapitel 5.5 und Kapitel 6 werden alle Größen, die sich auf Ergebnisse der Regression mit der Fitfunktion inklusive des Terms 5.12 beziehen, mit dem Subskript „3“ gekennzeichnet.

Im zweiten Fall der Auflistung in 5.5.4 werden die den solaren Zyklus beschreibenden Sinus- bzw. Cosinusterme  $F_{\text{SZ, sin/cos}}(t)$  von Fitfunktion 5.11 durch einen Term

$$F_{\text{SZ, F10.7}}(t, t_{\text{Vsz}}(\text{B}, h)) = [A_{\text{F10.7}} \text{F10.7}(t + t_{\text{Vsz}}(\text{B}, h))] \quad (5.12)$$

ersetzt, wobei  $[\text{F10.7}(t + t_{\text{Vsz}}(\text{B}, h))]$  der zeitabhängige Proxydatensatz (vgl. Unterkapitel 5.5.4) für den solaren Zyklus ist, mit einer breiten- und höhenabhängigen zeitlichen Verschiebung des Proxys  $[t_{\text{Vsz}}(\text{B}, h)]$ . Diese Verschiebung ist von der Verschiebung des ENSO-Signals  $[t_{\text{V, AOA}}(\text{B}, h)]$  zu unterscheiden und wird wie folgt bestimmt.

Die breiten- und höhenabhängigen zeitlichen Verschiebungen  $[t_{\text{Vsz}}(\text{B}, h)]$  der F10.7-Proxydaten in Gleichung 5.12 sollen dafür ausgelegt sein, einen bestmöglichen Fit

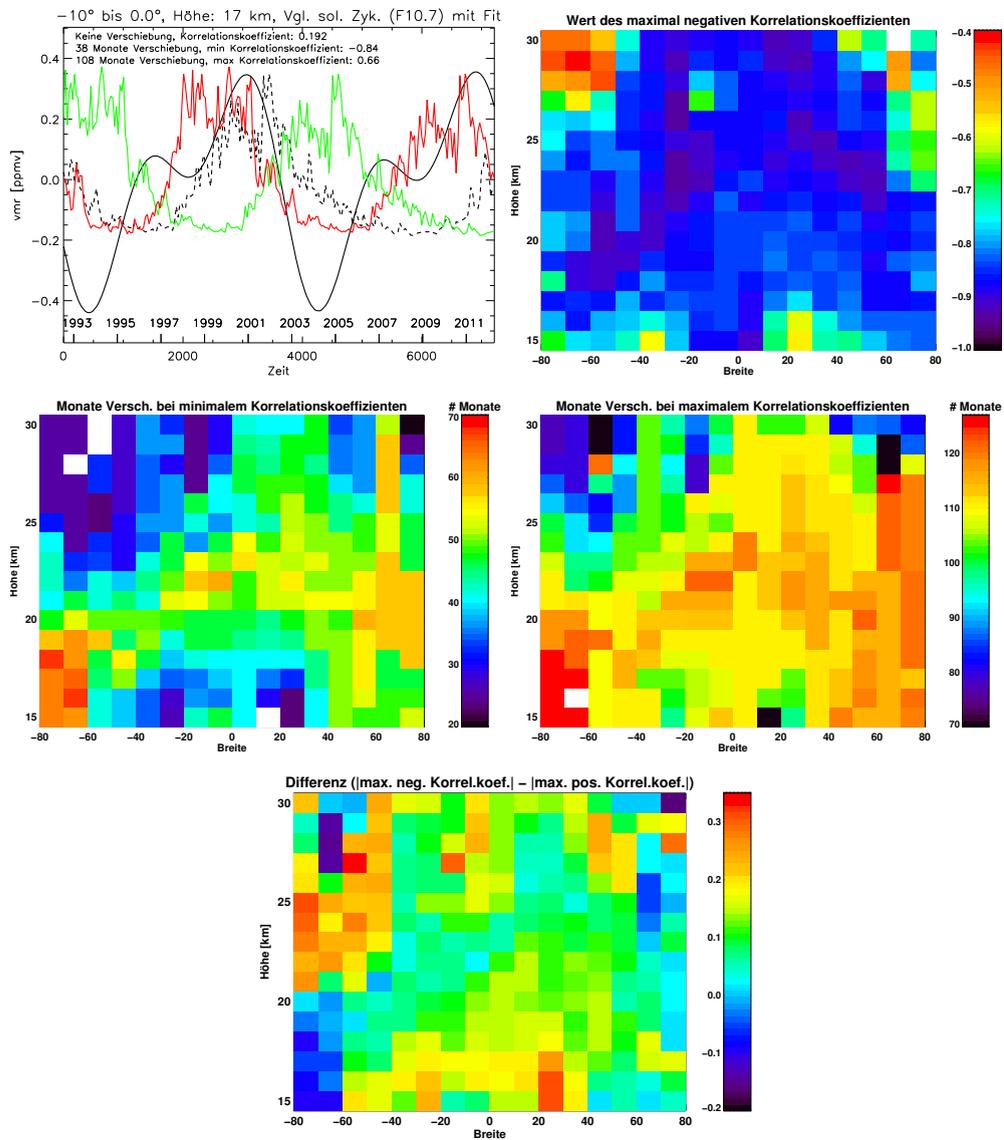


Abbildung 5.18: **Oben links:** Ein Beispielplot eines Vergleichs zwischen dem Sinus-Cosinus-Teil des Zeitserienfit der HALOE-MIPAS-Daten, welcher den solaren Zyklus nachbildet (durchgezogene schwarze Linie), und des tatsächlichen Signals des solaren Zyklus anhand des F10.7 Proxys (gestrichelte schwarze Linie). Das Proxysignal wird zeitlich solange verschoben, bis eine maximale negative Korrelation  $\rho_{(-,\max)}$  (grüne Linie) oder positive Korrelation  $\rho_{(+,\max)}$  (rote Linie) entsteht. **Oben rechts:**  $\rho_{(-,\max)}$  in jedem Breiten-Höhen-Bin bei der optimalen Verschiebung. **Mitte links:** Übersichtsplot über die optimalen Verschiebungen  $t_{\text{Versch},i_{(-,\max)}}$  in Monaten bei  $\rho_{(-,\max)}$ . **Mitte rechts:** Übersichtsplot über die optimalen Verschiebungen  $t_{\text{Versch},i_{(+,\max)}}$  in Monaten bei  $\rho_{(+,\max)}$ . **Unten:** Differenzen  $[|\rho_{(-,\max)}| - |\rho_{(+,\max)}|]$  der Beträge von  $\rho_{(-,\max)}$  und  $\rho_{(+,\max)}$ .

zu erreichen. Bei einem atmosphärischen Signal, welches durch einen Einfluss des

elfjährigen solaren Zyklus getriggert wurde, ist nicht unmittelbar klar, wo es seinen Anfang nimmt und wo der größte Einfluss des Signals herrscht. Man könnte sich etwa vorstellen, dass der hauptsächliche Effekt einer sich verändernden solaren Strahlung auf  $\text{H}_2\text{O}$  durch Veränderungen in der Methanoxidation in der Stratosphäre, durch Änderungen der ozeanischen Temperaturen oder durch Änderungen der Temperaturen in der TTL hervorgerufen sein könnte. In Unterkapitel 2.7 sind solche Mechanismen und Literatur dazu erwähnt.

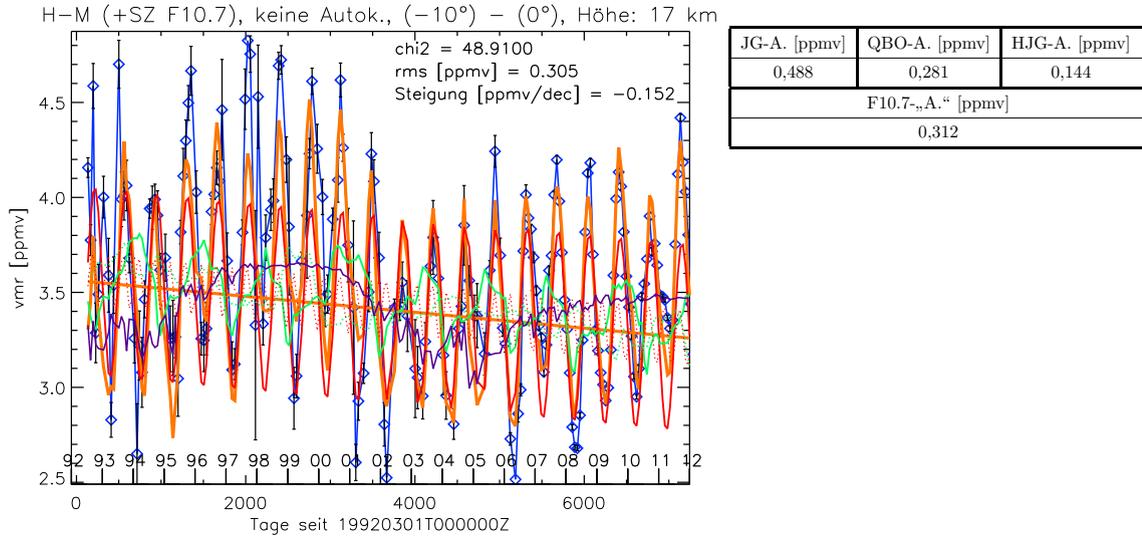


Abbildung 5.19: **Links:** Regression wie in Abbildung 5.10. Die violette Linie ist die Summe  $F_{\text{SZ},\text{F10.7}} + F_{\text{lin}}$  aus dem Fit der zur solaren Aktivität proportionalen F10.7-Daten und dem linearen Fit-Term. **Rechts:** Tabelle mit Amplituden von dem Fit links: Jahresgangsamplitude (JG-A.), QBO-Amplitude (QBO-A.), Halbjahresgangsamplitude (HJG-A.) und „Amplitude“ ( $F10.7 - \text{„A.“} = \frac{1}{2} \{ \max[F_{\text{SZ},\text{F10.7}}] - \min[F_{\text{SZ},\text{F10.7}}] \}$ ) des Fits der F10.7 Daten abzüglich des linearen Terms. (Vergleiche Tabellen in den Abbildungen 5.10, 5.14 und 5.16.)

Da es bei dieser Analyse der Wasserdampfzeitserien inklusive der F10.7-Proxydaten aber zunächst in erster Linie darum ging, einen optimalen Fit zu erreichen, wurde ein von diesen möglichen Effekten unabhängiger Ansatz verwendet, um die optimale Verschiebung zu bestimmen. Hierzu wurde in jedem Breiten-Höhen-Bin die Summe der Ergebnisse aus der Regression für die vier Terme der Fitfunktion 5.11 mit den Sinus/Cosinus-Funktionen mit Periodendauern von 127 Monaten und 63 Monaten aus dem letzten Unterkapitel (5.5.4.1) mit den Messdaten des F10.7 Proxy ( $F10.7(t)$ ) verglichen. Die Summe aus den durch die Regression bestimmten Sinus/Cosinus-Termen ist  $F_{\text{SZ},\text{sin/cos}}(t)$  (vergleiche Gleichung 5.11). Der ursprüngliche Proxydatensatz wurde monatsweise verschoben und bei jedem dieser Schritte wurde der Pearson-Korrelationskoeffizient  $\rho(f(x), g(x))$  (siehe Gleichung 5.2) zwischen  $F10.7(t+t_{\text{Versch},i})$

und  $F_{\text{SZ},\sin/\cos}(t)$  berechnet. Für die zeitliche Verschiebung  $t_{\text{Versch},i}$  um  $i$  Monate wurden nur Werte  $i \geq 0$  zugelassen, da ein kausaler Zusammenhang zwischen der solaren Aktivität und einem von ihr getriggerten atmosphärischen Effekt nur so bestehen kann. Es gab für die Bestimmung der optimalen Verschiebung zwei Möglichkeiten: die zeitliche Verschiebung, welche zu einem maximal negativen Korrelationskoeffizienten gehört, oder jene, welche zu einem maximal positiven Korrelationskoeffizienten gehört. Im ersten Fall hieße das, steigende solare Aktivität hätte (mit der hier bestimmten zeitlichen Verzögerung) sinkende  $\text{H}_2\text{O}$ -Werte zur Folge und im zweiten Fall wäre es umgekehrt. Wie in Unterkapitel 2.7 geschrieben, gibt es zwar Untersuchungen zu Effekten des solaren Zyklus auf das Mischungsverhältnis von Wasserdampf in der Atmosphäre, jedoch werden hier vorerst beide Möglichkeiten offengelassen.

Ergebnisse zu dieser Untersuchung sind in Abbildung 5.18 gezeigt. In der oberen linken Darstellung sind beispielhaft an einem Breiten-Höhen-Bin die Zeitserien von  $F_{\text{SZ},\sin/\cos}(t)$ ,  $\text{F10.7}(t)$ ,  $\text{F10.7}(t + t_{\text{Versch},i(-,\text{max})})$  und  $\text{F10.7}(t + t_{\text{Versch},i(+,\text{max})})$  gezeigt, mit  $t_{\text{Versch},i(-,\text{max})}$  als zum maximal negativen Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(-,\text{max})}$  gehörende zeitliche Verschiebung und  $t_{\text{Versch},i(+,\text{max})}$  als zum maximal positiven Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(+,\text{max})}$  gehörende zeitliche Verschiebung. Außerdem sind die Werte für die Korrelationskoeffizienten  $\rho_0$ ,  $\rho_{(-,\text{max})}$  und  $\rho_{(+,\text{max})}$  bei den zugehörigen zeitlichen Verschiebungen  $t_{\text{Versch},i} = t_{\text{Versch},0} = 0$ ,  $t_{\text{Versch},i} = t_{\text{Versch},i(-,\text{max})}$  und  $t_{\text{Versch},i} = t_{\text{Versch},i(+,\text{max})}$ , sowie diese zeitlichen Verschiebungen selbst angegeben.

In der oberen rechten Darstellung sind die Werte  $\rho_{(-,\text{max})}$  in jedem Breiten-Höhen-Bin gezeigt. In der Mehrheit der Fälle wird ein maximal negativer Korrelationskoeffizient von  $\rho_{(-,\text{max})} \lesssim -0,8$  erreicht. Die in der mittleren linken Darstellung gezeigten zeitlichen Verschiebungen  $t_{\text{Versch},i(-,\text{max})}$  in Monaten, gehören zu den  $\rho_{(-,\text{max})}$ . Die zeitlichen Verschiebungen sind hauptsächlich zwischen 20 und 60 Monaten bzw. zwei bis fünf Jahren. In der mittleren rechten Darstellung sind die zu den  $\rho_{(+,\text{max})}$  gehörenden zeitlichen Verschiebungen  $t_{\text{Versch},i(+,\text{max})}$  in Monaten gezeigt. Das Intervall, in welchem sich die meisten derartigen Verschiebungen befinden, reicht von 90 bis 120 Monaten bzw. 7,5 bis 10 Jahren (man beachte die vom mittleren linken Bild verschiedene Zeitskala der Verschiebungen). In diesen beiden letzten Abbildungen hat man den Eindruck, dass die ermittelten Verschiebungen sich von niedrigen Höhen in den Tropen aus nach oben und zu höheren Breiten hin langsam erhöhen, was auf einen Transportprozess hindeuten würde. Allerdings verliert sich dieser Effekt in dem Breitenband von  $10^\circ\text{S}$  bis  $10^\circ\text{N}$  oberhalb von 25 km Höhe und in höheren Breiten schon in niedrigeren Höhen. In dem unteren Bild sind die Differenzen  $[|\rho_{(-,\text{max})}| - |\rho_{(+,\text{max})}|]$  der Beträge von  $\rho_{(-,\text{max})}$  und  $\rho_{(+,\text{max})}$  dargestellt. In 233 der 256 Breiten-Höhen-Bins ( $\approx 91\%$ ) ist  $|\rho_{(-,\text{max})}| > |\rho_{(+,\text{max})}|$ . Außerdem wirken die zeitlichen Verschiebungen  $t_{\text{Versch},i(+,\text{max})}$  unrealistisch lange, für alle in Erwägung gezogenen hauptsächlich durch den solaren Zyklus beeinflussten Effekte, welche sich auf Wasserdampf in der Stratosphäre auswirken könnten. Aus diesen beiden Gründen wurde für die zeitlichen

Verschiebungen des F10.7-Datensatzes  $t_{\text{VSZ}}(B, h) = t_{\text{Versch}, i_{(-, \text{max})}}$  in Gleichung 5.12 verwendet und ein sinkendes Mischungsverhältnis von  $\text{H}_2\text{O}$  bei ansteigender solarer Strahlung angenommen und umgekehrt.

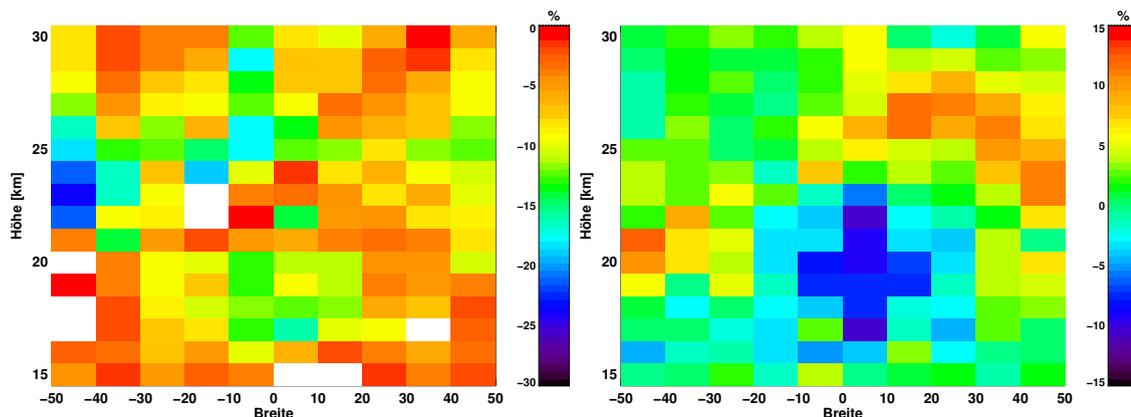


Abbildung 5.20: **Links:** Relative RMS-Werte nach Gleichung  $\frac{(\text{RMS}_{\text{sol},\text{F10.7}} - \text{RMS}_0)}{\text{RMS}_0}$ .  
**Rechts:** Relative RMS-Werte nach Gleichung  $\frac{(\text{RMS}_{\text{sol},\text{F10.7}} - \text{RMS}_{\text{sol},\text{sin}})}{\text{RMS}_{\text{sol},\text{sin}}}$ .

In Abbildung 5.19 ist ein Beispiel einer solchen Regression mit dem Term  $F_{\text{SZ},\text{F10.7}}$  anstelle von  $F_{\text{SZ},\text{sin}/\text{cos}}$  in Gleichung 5.11 gezeigt. Eine globale Übersicht der relativen RMS-Werte  $\frac{(\text{RMS}_{\text{sol},\text{F10.7}} - \text{RMS}_0)}{\text{RMS}_0}$  dieser Regressionen zu Regressionen nach Gleichung 5.8 zwischen  $50^\circ\text{S}$  und  $50^\circ\text{N}$  ist in Abbildung 5.20 in der linken Darstellung gezeigt. Man sieht, dass es fast in allen Bins eine Verbesserung der RMS-Werte gibt durch die Einführung des F10.7-Datensatzes, um den solaren Zyklus zu simulieren.

RMS-Werte  $\frac{(\text{RMS}_{\text{sol},\text{F10.7}} - \text{RMS}_{\text{sol},\text{sin}})}{\text{RMS}_{\text{sol},\text{sin}}}$  der Regressionen mit  $F_{\text{SZ},\text{F10.7}}$  relativ zu den Regressionen mit  $F_{\text{SZ},\text{sin}/\text{cos}}$  von Gleichung 5.11 in denselben Bins sind in der Darstellung rechts gezeigt. Die Verteilung in dieser Darstellung ist derart, dass zwischen  $20^\circ\text{S}$  und  $30^\circ\text{N}$  in einem Höhenbereich zwischen 16 km und 22 km die RMS-Werte der Regression mit dem F10.7-Datensatz fast alle geringer sind als die RMS-Werte der Regression mit den Sinus/Cosinus-Termen. Außerhalb dieses Bereichs sind jedoch die Regressionen mit den Sinus/Cosinus-Termen für den solaren Zyklus die präziseren.

### 5.5.5 Lineare Trends, Jahreszyklus, Halbjahreszyklus, QBO, ENSO und solarer Zyklus

In Abbildung 5.21 sind die mittels der Regressionen mit den vier verschiedenen Fitfunktionen bestimmten Steigungen – bzw. im Fall der Regression mit Bruchpunkten die mittlere Steigung  $F_{\text{lin,Bruch}}(t_{\text{Ende}}) - F_{\text{lin,Bruch}}(t_{\text{Anfang}})$ , mit  $t_{\text{Ende}}$  als Zeitpunkt des letzten Datenpunkts und  $t_{\text{Anfang}}$  als Zeitpunkt des ersten Datenpunkts der kombinierten Zeitserie – in Breiten zwischen  $50^\circ\text{S}$  und  $50^\circ\text{N}$  und Höhen von 15 km bis 30 km dargestellt.

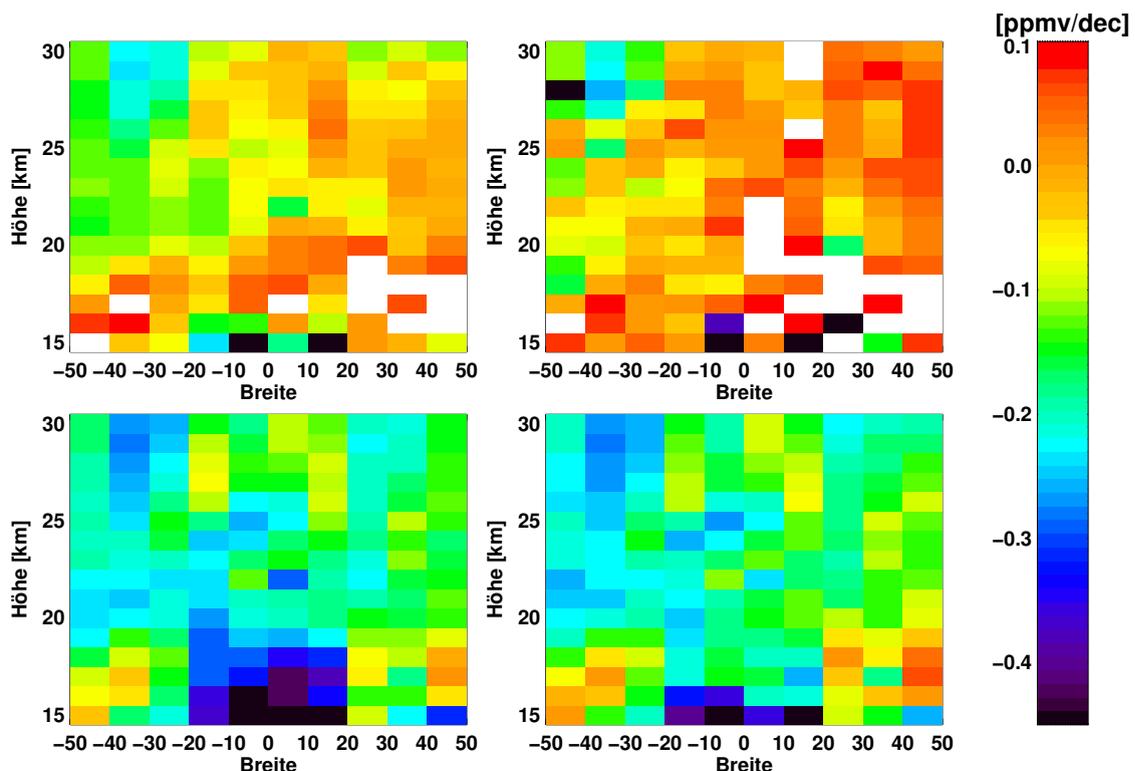


Abbildung 5.21: Übersicht über die Steigungen  $m_i(B, h)$  der linearen Fits  $F_{\text{lin}}$ , wobei  $i$  die verschiedenen vier Fitfunktionen kennzeichnet.  $m_i(B, h)$  entspricht  $A_1$  für alle Ansätze bis auf den Bruchpunktansatz (vergleiche erster Punkt in Unterkapitel 5.5.1.1). Bei letzterem ist die mittlere Steigung dargestellt (s.u.). Der Breitenbereich der Darstellungen reicht von  $50^\circ\text{S}$  bis  $50^\circ\text{N}$ . **Links oben:** Steigungen  $m_0(B, h)$  bei Regressionen mit der ursprünglichen Fitfunktion, siehe Gleichung 5.8. **Rechts oben:** Mittlere Steigungen  $\bar{m}_{\text{Bruch}}(B, h) = \frac{F_{\text{lin,Bruch}}(t_{\text{Ende}}) - F_{\text{lin,Bruch}}(t_{\text{Anfang}})}{t_{\text{Ende}} - t_{\text{Anfang}}}$  der Regression mit Bruchpunkten, siehe Gleichung 5.10. **Links unten:**  $m_{\text{sol,sin}}(B, h)$  der Regression mit solarem Zyklusfit als Sinus-/Cosinusterme, siehe Gleichung 5.11. **Rechts unten:**  $m_{\text{sol,F10.7}}(B, h)$  von Fitfunktion mit  $F_{\text{SZ,F10.7}}$ , vergleiche Gleichung 5.12.

In erster Linie ist auffällig, dass bei den beiden Regressionen, welche den solaren Zyklus beinhalten, die errechneten linearen Trends deutlich negativer sind, als bei

den Regressionen mit der ursprünglichen Fitfunktion und der Fitfunktion mit Bruchpunkten im linearen Trend. Ein Grund für dieses Ergebnis bei der Regression mit der ursprünglichen Fitfunktion aus Gleichung 5.8 könnte sein, dass die Standardfehler der HALOE-Messungen größer sind als die der MIPAS-Messungen und der Hauptteil der HALOE-Messungen vor dem Millennium-Drop gemacht wurden. Aus diesem Grund lässt die Regression größere Abstände zu den hohen ppmv-Werten vor dem H<sub>2</sub>O-Abfall um die Jahrtausendwende zu und nur geringere nach dem Abfall, wo hauptsächlich MIPAS-Messungen vorliegen. Ein Beispiel hierzu ist die Abbildung 5.10, wo sich durch Anwendung der Autokorrelation (vergleiche Unterkapitel 5.5.1.2) – also der Anpassung der in der Kovarianzmatrix enthaltenen Standardfehler in einer Art, dass das  $\chi^2$  (vergleiche Gleichung 5.4) zwischen 0,9 und 1,1 liegt – das Vorzeichen der Steigung des linearen Fits umdreht. Ein weiterer Grund, welcher sowohl für die Regression mit der ursprünglichen Fitfunktion als auch für die Regression mit der die Bruchpunkte enthaltenden Fitfunktion gilt, ist, dass die ppmv-Werte von H<sub>2</sub>O nach dem Millennium-Drop bis zum Ende der kombinierten Zeitserie wieder langsam auf das Niveau der Werte vor dem Abfall angestiegen sind und dadurch ein linearer Fit mit geringer oder teilweise auch positiven Steigungen eine gute Lösung ist. Wie man in Abbildung 5.16 für die Regression mit dem solaren Signal als Sinus/Cosinus-Funktionen und Abbildung 5.19 für die Regression mit den Proxydaten für den solaren Zyklus sieht, wird dieses Ansteigen nach dem Millennium-Drop zumindest teilweise durch ein Ansteigen in den Fit-Termen des solaren Zyklus simuliert und ermöglicht so eine negativere Steigung bei den linearen Fits. Die Steigungen in den oberen beiden Darstellungen ohne Berücksichtigung des solaren Zyklus in der Regression haben in den meisten Breiten-Höhen-Bins Werte zwischen -0,05 ppmv/dec und 0,05 ppmv/dec. Lediglich in den Bins zwischen 50°S und 20°S sind negativere Steigungen von zwischen -0,1 ppmv/dec und -0,25 ppmv/dec. In den unteren beiden Darstellungen mit jeweils einem Term für den solaren Zyklus betragen die Steigungen in den meisten Bins zwischen -0,1 ppmv/dec und -0,25 ppmv/dec. Bei der Regression mit  $F_{SZ,\sin/\cos}$  sind in der TTL-Region bis in eine Höhe von 18 km noch negativere Werte bis zu  $< -0,4$  ppmv/dec zu sehen. Bei der Regression mit  $F_{SZ,F10.7}$  sind solche negativen Werte nur in den untersten beiden betrachteten Höhen von 15 km und 16 km zu sehen.

In Abbildung 5.22 sind in der gleichen Anordnung wie in der vorangegangenen Abbildung 5.21 die Amplituden des Sinus/Cosinus-Fits des Jahresgangszyklus aus den verschiedenen Regressionsansätzen gezeigt. Bis auf wenige Ausnahmen, sind die Ergebnisse der verschiedenen Regressionen für diese Amplituden sehr ähnlich zueinander. Die Ausreißer treten vor allem bei den Regressionen mit Bruchpunkten auf und sind Bins, in denen keine sinnvollen Fitparameter berechnet werden konnten. Beispiele hierfür sind die grünen Bins mit Werten für die Amplitude von ca. 0,4 ppmv in der oberen rechten Darstellung zwischen 20°S und 10°S auf einer Höhe

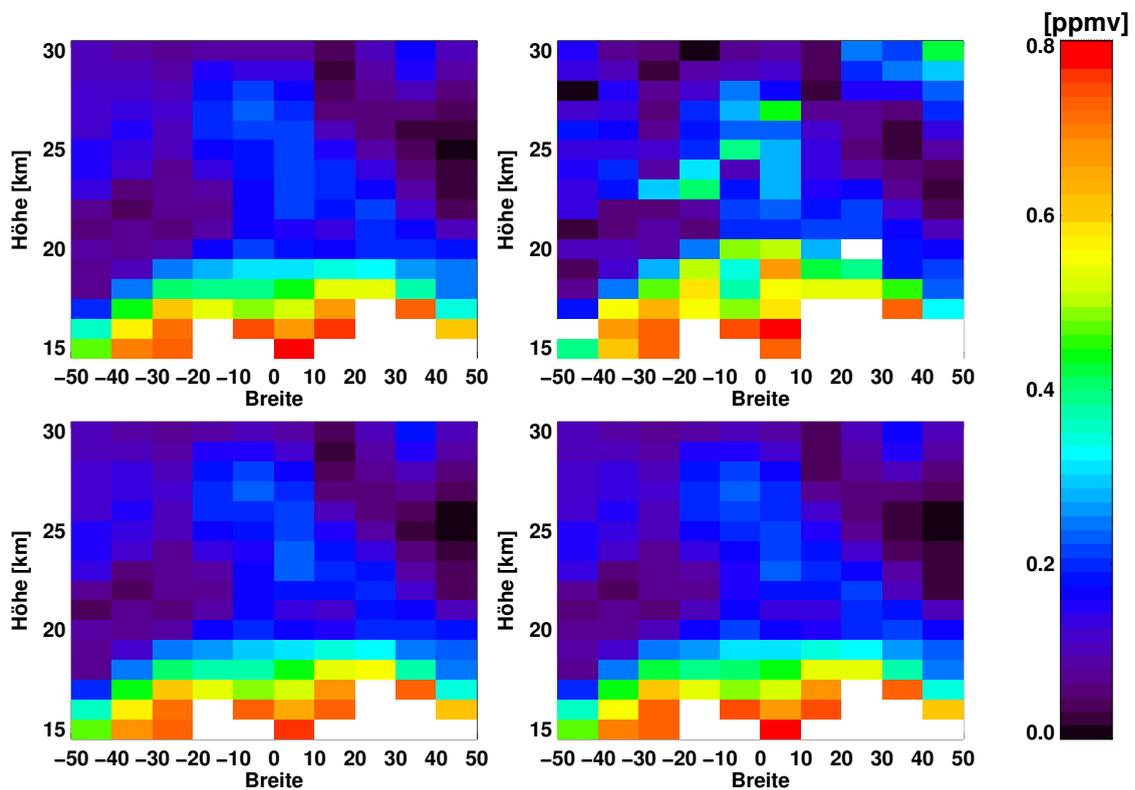


Abbildung 5.22: Globale Übersicht über die Jahreszyklusamplituden in den VMR-Werten von Wasserdampf zwischen 50°S und 50°N in den Regressionen mit **links oben:** der ursprünglichen Fitfunktion, siehe Gleichung 5.8, **rechts oben:** der Regression mit Bruchpunkten, siehe Gleichung 5.10, **links unten:** der Regression mit solarem Zyklusfit als Sinus-/Cosinusterme, siehe Gleichung 5.11, **rechts unten:** der Regression mit der Fitfunktion mit  $F_{SZ,F10.7}$ , vergleiche Gleichung 5.12.

von 23 km und die beiden anderen rechts davon und jeweils zwei Kilometer höher von dem letzten. Allerdings sind bei genauerer Betrachtung zum Beispiel die Jahressgangsamplituden zwischen 0° und 10°N in dem Höhenbereich von 22 km bis 25 km von der Regression mit Bruchpunkten besser erfasst worden, da die anderen drei Ansätze in diesen Bins zu kleine Amplituden zum Ergebnis haben.

Allgemein nehmen die Amplituden des Jahresgangs auf einem Höhenniveau bei allen vier verschiedenen Regressionen zwischen 30°S und 30°N in dem Höhenbereich von 15 km bis 17 km vom Äquator aus zu den Subtropen hin zu. Oberhalb von 17 km und bei betragsmäßig größeren Breiten als 30° ab dem untersten gezeigten Höhenniveau 15 km nehmen die gefitteten Amplituden in allen betrachteten Breiten zunächst nach oben hin ab. Auf der gesamten dargestellten Südhemisphäre und vom Äquator bis zu 20°N gibt es in den Höhenprofilen der angepassten Jahresgangsamplituden zwei Minima, wobei sich das erste in Höhen zwischen 20 km und 22 km befindet. Oberhalb dieses Minimums nehmen die Amplituden wieder zu. Dies geschieht wahr-

scheinlich aufgrund der verstärkten Methanoxidation bei erhöhter Sonneneinstrahlung unter Produktion von  $\text{H}_2\text{O}$  (vergleiche Abbildung 2.3). In noch größeren Höhen verliert sich dann der Einfluss des Jahresgangs auf die Zeitserie von Wasserdampf. Nördlich von  $20^\circ\text{N}$  gibt es nur noch ein einziges Minimum in den Höhenprofilen der Jahresgangsamplituden, welches zwischen 25 km und 27 km liegt.

Oberhalb von 17 km liegen die Amplituden des Jahreszyklus im Wasserdampf zwischen 0 ppmv und  $\sim 0,5$  ppmv, auf einer Höhe von 17 km und darunter sind die Werte zwischen  $20^\circ\text{S}$  und  $50^\circ\text{N}$  deutlich höher (bis  $> 0,8$  ppmv) als südlich von  $20^\circ\text{S}$  ( $\sim 0,65$  ppmv zwischen  $30^\circ\text{S}$  und  $20^\circ\text{S}$  und nach Süden hin abnehmend).

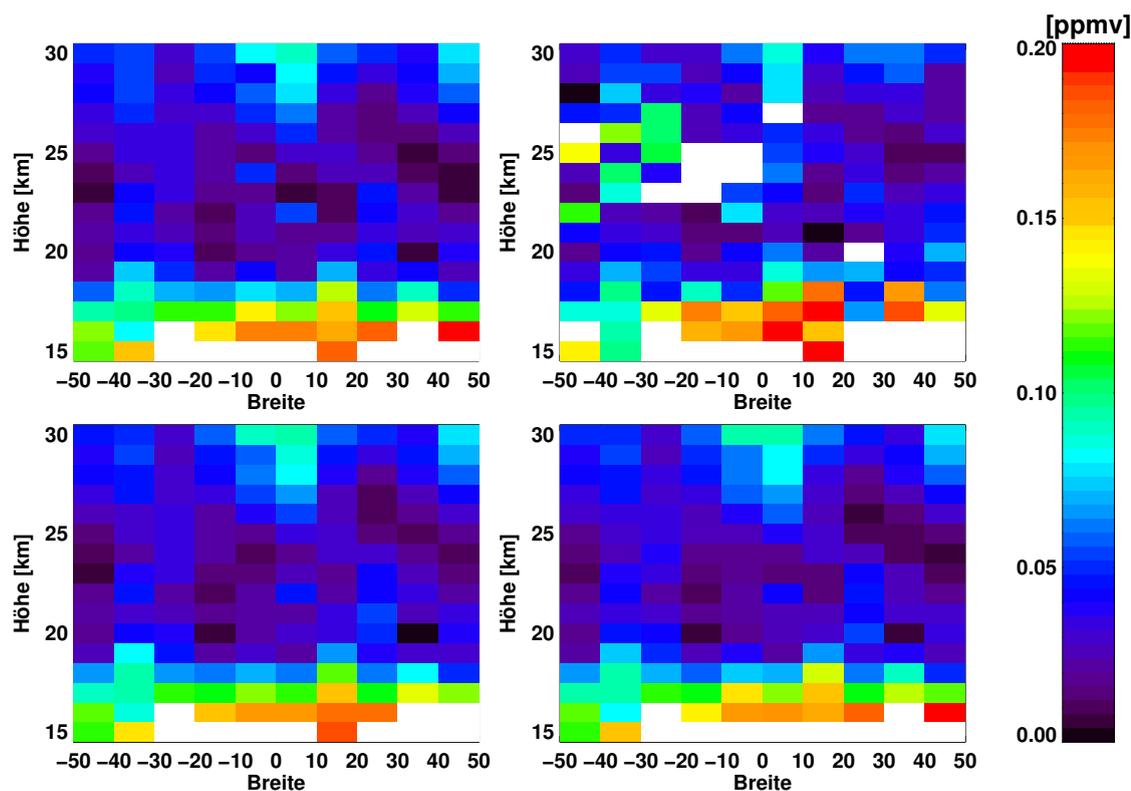


Abbildung 5.23: Globale Übersicht über die Halbjahreszyklusamplituden zwischen  $50^\circ\text{S}$  und  $50^\circ\text{N}$ . Anordnung wie in 5.22, jedoch mit anderer Farbskala.

Abbildung 5.23 zeigt dieselben Darstellungen wie Abbildung 5.22 für die Amplituden des Halbjahreszyklus. Wenn man von der Regression mit Bruchpunkten absieht, welche vor allem auf der Südhalbkugel zwischen 22 km und 27 km Ergebnisse liefert, welche stark von den anderen Regressionsansätzen abweichen, hat die SAO lediglich in dem Breitenband zwischen  $30^\circ\text{S}$  und  $30^\circ\text{N}$  einen merklichen Einfluss auf die durch die Regression reproduzierte Zeitserie. Und in diesen Breiten auch nur in Höhen zwischen 15 km und 18 km sowie oberhalb von 27 km. Der maximale Unterschied im Mischungsverhältnis von Wasserdampf bei dem Minimum der SAO und ihrem Maximum oberhalb von 27 km beträgt ca. 0,2 ppmv, bei ei-

nem mittleren Mischungsverhältnis von etwa 4,2 ppmv (berechnet aus ppmv-Werten der kombinierten Zeitserie zwischen  $0^\circ$  und  $10^\circ\text{N}$  in 30 km Höhe). Beim Vergleich der beiden Abbildungen für die aus der kombinierten Zeitserie abgeleiteten AO- und SAO-Amplituden ergeben sich in fast allen Breiten-Höhen-Bins kleinere Amplituden für die SAO als für die AO, bis auf in den erwähnten Bins oberhalb von 27 km in Äquatornähe. Ein Ergebnis aus Randel et al. (1998) bestätigt dies teilweise, da aus HALOE- $\text{H}_2\text{O}$ -Messungen abgeleitete AO und SAO Analysen ergeben haben, dass in Höhen bis zu 27 km die AO dominiert und oberhalb davon die SAO. In den durch die Regression berechneten Amplituden in den besagten Breiten-Höhen-Bins zeigt sich zwar keine Dominanz der SAO-Amplituden über die AO-Amplituden, jedoch sind die beiden Amplituden hier vergleichbar groß.

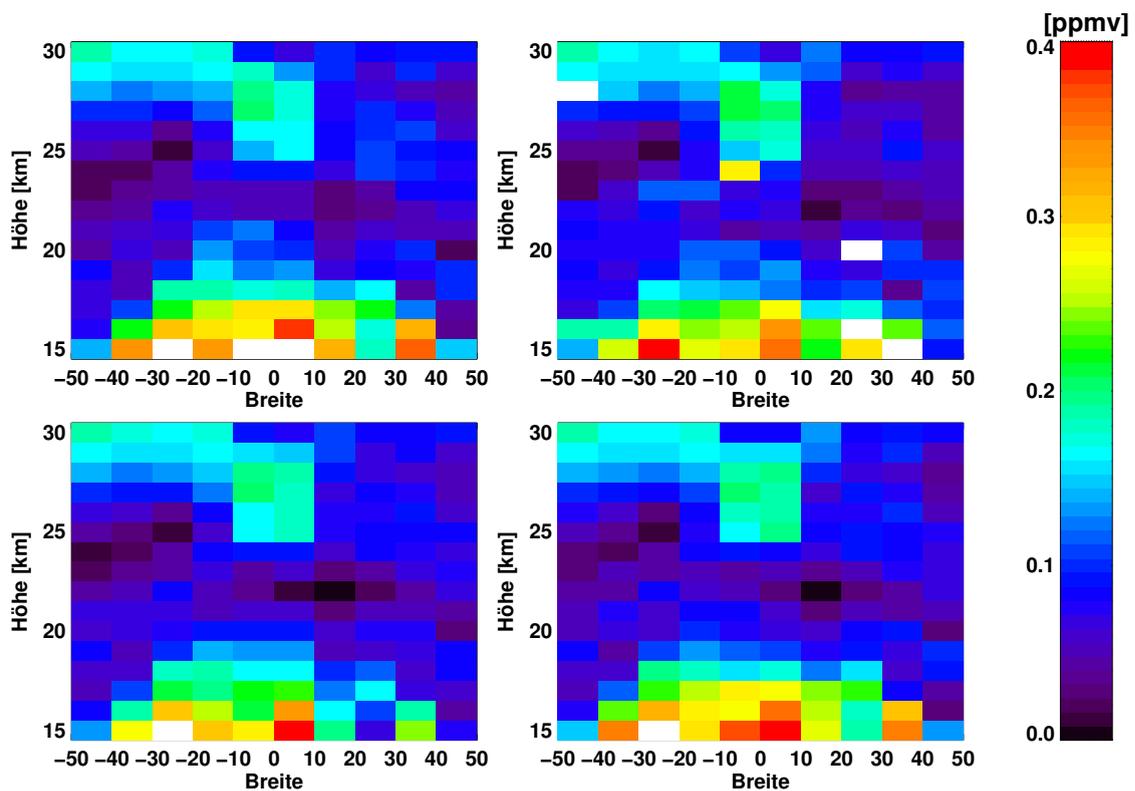


Abbildung 5.24: Globale Übersicht über die QBO-„Amplituden“  $\frac{1}{2} [\max(F_{\text{QBO}}) - \min(F_{\text{QBO}})]$  zwischen  $50^\circ\text{S}$  und  $50^\circ\text{N}$ . Anordnung wie in 5.22, jedoch mit anderer Farbskala.

In Abbildung 5.24 sind die durch die Regressionen mit den vier verschiedenen Fitfunktionen berechneten „Amplituden“ (Methode der Berechnung dieser Größe in der Bildunterschrift) der Auswirkung der QBO auf die kombinierte Wasserdampfzeitserie in der gleichen Anordnung wie in Abbildung 5.21 gezeigt. Die Ergebnisse sind auch hier bei allen vier unterschiedlichen Ansätzen ähnlich. Größere Amplituden bis zu  $\sim 0,4$  ppmv von  $F_{\text{QBO}}(t)$  sind hauptsächlich unterhalb von 18 km zu finden. Allerdings finden sich zwischen 25 km und 29 km in den Breiten von  $10^\circ\text{S}$  bis  $10^\circ\text{N}$

Amplituden von bis zu  $\sim 0,22$  ppmv. Damit sind die Amplituden für den Jahresgang und den QBO-Proxy in diesem Bereich der Atmosphäre ähnlich groß.

Außerdem befinden sich vergleichbar starke Amplituden zwischen  $50^\circ\text{S}$  und  $10^\circ\text{S}$  im Bereich von 28 km und 30 km Höhe. Hier ist der mittels der Regressionen berechnete Effekt der QBO auf den Wasserdampf stärker als der Effekt des Jahreszyklus. Dasgleiche lässt sich nicht für die symmetrisch zum Äquator gelegenen Bins auf der Nordhemisphäre sagen. Hier liegen die QBO-Amplituden in den entsprechenden Breiten-Höhen-Bins zwischen  $\sim 0,03$  ppmv und  $\sim 0,12$  ppmv.

Ein starker Einfluss der QBO auf Wasserdampf in Höhen zwischen 25 km und 35 km in einem Breitenbereich von  $15^\circ\text{S}$  und  $15^\circ\text{N}$  wurde auch von Baldwin et al. (2001) beschrieben (siehe Abb. 27 in dieser Veröffentlichung und die dazugehörige Beschreibung). Eine Erklärung für diese Effekte konnte in dieser Veröffentlichung nicht gegeben werden. Allerdings sind starke Einflüsse zwischen  $50^\circ\text{S}$  und  $10^\circ\text{S}$  im Bereich von 28 km und 30 km dort nicht erwähnt.

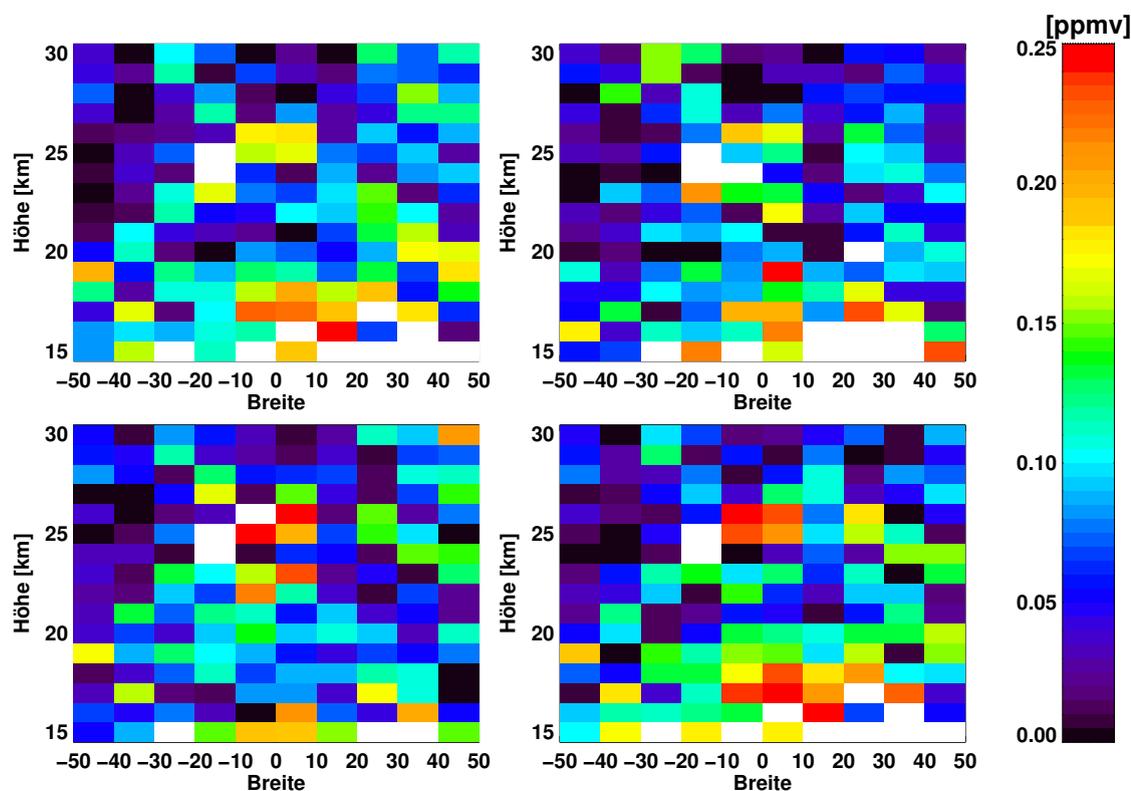


Abbildung 5.25: Übersicht über die ENSO-„Amplituden“  $\frac{1}{2} [\max(F_{\text{ENSO}}) - \min(F_{\text{ENSO}})]$  zwischen  $50^\circ\text{S}$  und  $50^\circ\text{N}$ . Anordnung wie in 5.22, jedoch mit anderer Farbskala.

Die in Abbildung 5.25 gezeigten „Amplituden“ der Größe  $F_{\text{ENSO}}(t)$  sind auf die gleiche Weise wie die Amplituden von  $F_{\text{QBO}}(t)$  berechnet worden und sind ein Maß für den Einfluss des atmosphärischen ENSO-Signals auf die kombinierte Wasser-

dampfzeitserie. Die Ergebnisse der Regressionen für die ENSO-Amplituden sind bei allen verwendeten Fitfunktionen ähnlich und haben keine erkennbare Struktur. Dies könnte ein Hinweis darauf sein, dass die verwendeten zeitlichen Verschiebungen  $t_{V_{AOA}}(B, h)$  des MEI-Proxies vielleicht nicht optimal die realen Auswirkungen von ENSO auf atmosphärischen Wasserdampf in den betrachteten Breiten-Höhen-Bins widerspiegeln. Eventuell könnten durch Wechselwirkungen eventuelle Effekte von ENSO auf Wasserdampf schon durch andere Terme in den Regressionen beschrieben worden sein und die fehlende Struktur in der Abbildung zur Folge haben.

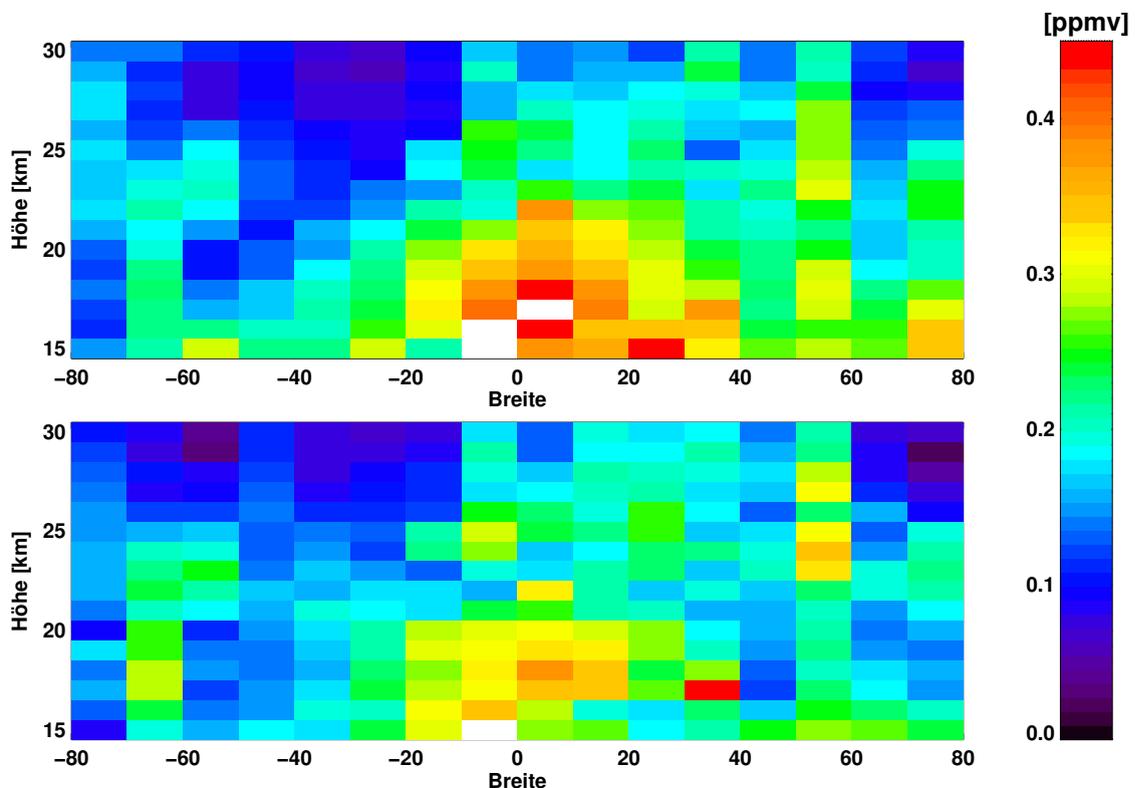


Abbildung 5.26: **Oben:** Globale Übersicht zwischen 80°S und 80°N über die „Amplituden“  $\left[\frac{1}{2} (\max(F_{SZ,\sin/\cos}) - \min(F_{SZ,\sin/\cos}))\right]$  des Fits des solaren Zyklus mit Sinus/Cosinus-Funktionen wie in Gleichung 5.11. **Unten:** Übersicht über die „Amplituden“  $\left[\frac{1}{2} (\max(F_{SZ,F10.7}) - \min(F_{SZ,F10.7}))\right]$  des Fits des solaren Zyklus mit dem solaren Radioflussindex als Proxy wie in Gleichung 5.11.

Die Amplituden der Fits von  $F_{SZ,\sin/\cos}$  (oben) und  $F_{SZ,F10.7}$  (unten) der jeweiligen Fitfunktionen 5.11 und 5.12 zwischen 80°S und 80°N sind in Abbildung 5.26 gezeigt. Die Ergebnisse für beide Amplituden sind von der Struktur bezüglich der Breiten-Höhen-Bins ähnlich. Lediglich zwischen 30°S und 30°N in einem Höhenbereich von 15 km bis 21 km sind die Amplituden bei einem Fit mit Sinus/Cosinus-Funktionen im Durchschnitt etwas größer als bei dem Fit mit den Proxydaten für den solaren Radioflussindex. Wie man in Abbildung 5.20 sieht, ist dies ein Bereich, wo die RMS-Werte unter Verwendung der Fitfunktion mit  $F_{SZ,F10.7}$  bis zu etwa 10-15 % besser

sind als bei Verwendung der Fitfunktion mit  $F_{SZ,\sin/\cos}$ .

Maximale Amplituden wurden in beiden Fällen in der TTL Region erreicht. Im Falle der Beschreibung des solaren Zyklus mit Sinus-/Cosinus-Funktionen werden Amplituden von  $\simeq 0,45$  ppmv erreicht und bei der Beschreibung des solaren Zyklus mit Proxydaten  $\lesssim 0,4$  ppmv. Auf der Nordhalbkugel scheint der Einfluss des solaren Zyklus im Mittel stärker zu sein als auf der Südhalbkugel. Mit zunehmendem Abstand von der TTL werden die Amplituden im Mittel geringer, mit Minima in den Amplituden von etwa 0,05 ppmv.

### 5.5.6 Test auf Einfluss von stratosphärischem Methan, der Stärke der Brewer-Dobson-Zirkulation, sowie vulkanischen Aerosolen auf die $H_2O$ -VMR-Werte der kombinierten Zeitreihe

Von den Einflüssen auf stratosphärischen Wasserdampf sind in den durchgeführten Regressionen drei bekanntermaßen beeinflussende Größen nicht berücksichtigt worden:

1. Die in der Stratosphäre mit der Höhe zunehmende Auswirkung der Oxidation von Methan auf Wasserdampf, welche dazu führt, dass das Wasserdampf-mischungsverhältnis oberhalb der Hygropause zunimmt (vergleiche Unterkapitel 2.4).
2. Die Modulation der Tropopausentemperatur durch die BDC. Bei schnellerem vertikalen Aufwärtstransport ist die Temperatur aufgrund der adiabatischen Ausdehnung der Luft geringer als bei langsamem Aufsteigen (vergleiche Unterkapitel 2.6), was zu niedrigeren Mischungsverhältnissen von Wasserdampf führt.
3. Die Beeinflussung der Tropopausentemperatur durch hoch aufsteigende vulkanische Aerosole (vergleiche Unterkapitel 2.7).

In den drei der Liste entsprechenden Unterkapiteln 5.5.6.1 bis 5.5.6.3 werden Untersuchungen bezüglich der Einflüsse dieser Größen auf Wasserdampf unternommen. Es werden Zeitserien von den Residuen ( $y_{\text{Mess}}(t) - y_{\text{Mod}}(t)$ ) aus zwei in dieser Arbeit verwendeten Regressionen („0“: ursprüngliche Regression und „3“: Regression mit dem Term  $[F10.7(t + t_{V_{SZ}}(B, h))]$ ) jeweils verglichen mit:

1. einer Zeitserie von Bodenmessungen von  $CH_4$ -Mischungsverhältnissen

2. einer Zeitserie der zu den vertikalen Aufstiegsgeschwindigkeiten in der BDC proportionalen diabatischen Heizraten
3. höhenabhängigen Zeitserien einer mit der Aerosolkonzentrationen gekoppelten Größe, welche von vulkanischer Aktivität abhängig ist.

Da die Residuen aus den Unterschieden zwischen den gemessenen und den modellierten Daten bestehen, enthalten sie Informationen über die nicht von der Fitfunktion modellierten Effekte. Aus diesem Grunde könnte die Suche nach Zusammenhängen zwischen potenziell zum H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnis beitragenden Größen und diesen Residuen aufschlussreich sein.

Die in die Untersuchung eingehenden Residuen wurden zwischen 30°S und 30°N gemittelt, und es wurde ein einjähriges laufendes Mittel über alle verwendeten Daten gebildet, da der Augenmerk dieser Untersuchung mehr auf langfristige Zusammenhänge zwischen H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnissen und den drei Größen gerichtet ist, als auf kurzfristige Schwankungen in der Größenordnung einer jährlichen Oszillation.

Die im folgenden Unterkapitel verwendeten Mischungsverhältnisse von Methan sind global gemittelte Messdaten aus dem CCGG-Netzwerk (siehe Homepage des Earth System Research Laboratory, Global Monitoring Division (NOAA)) am Erdboden.

Der im zweiten Unterkapitel über den Zusammenhang der Residuen der Regressionen mit der BDC verwendete Proxy für die BDC sind – ebenso wie in Davis et al. (2013) – zwischen 30°S und 30°N gemittelte Heizraten auf einem Druckniveau von 82 hPa aus der MERRA-Reanalyse (**M**odern-**E**ra **R**etrospective Analysis for **R**esearch and **A**pplications, siehe Rienecker et al., 2011). Diese sind mit dem vertikalen Transport von Luft korreliert und darüber (aufgrund der adiabatischen Ausdehnung beim Aufsteigen) mit der herrschenden Temperatur. Eine positivere Anomalie des normierten Index geht dabei mit niedrigen Tropopausentemperaturen einher und eine negativere Anomalie des normierten Index mit hohen Tropopausentemperaturen, da große positive Heizraten nur bei niedrigen Temperaturen auftreten (vergleiche Fueglistaler et al., 2009). Über die Tropopausentemperaturen werden wiederum die Mischungsverhältnisse von Wasserdampf in der Stratosphäre beeinflusst.

Eine Möglichkeit zur Quantifizierung des Ausmaßes an atmosphärischen Aerosolen ist die optische Dicke der Atmosphäre bei 550nm. Derartige Daten sind in Unterkapitel 5.5.6.3 für Vergleiche mit den Zeitreihen der Residuen verwendet worden. Werte von dieser Größe sind zu finden auf der Homepage der GISS, NASA (für den Link siehe Literaturverzeichnis).

## 5.5.6.1 Einfluss von Methan

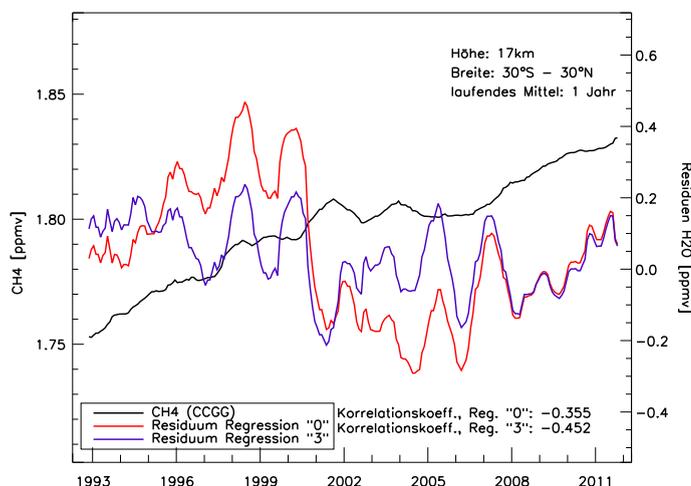


Abbildung 5.27: Vergleich der zwischen 30°S und 30°N gemittelten Residuen ( $y_{\text{Mess}}(t) - y_{\text{Mod}}(t)$ ) der Regressionen „0“ (rote Linie) und „3“ (blaue Linie) mit global gemittelten Messungen von CH<sub>4</sub> am Erdboden durch das CCGG-Netzwerk (schwarze Linie). Die Daten wurden in einer Höhe von 17 km verglichen und die drei gezeigten Zeitreihen wurden mit einem einjährigen laufenden Mittel geglättet. Die Korrelationskoeffizienten sind nach Gleichung 5.2 berechnet worden.

Wie in Unterkapitel 2.4 beschrieben, ist innerhalb der Stratosphäre Methan die Hauptquelle für Wasserdampf (unterhalb von 30 km ist der Beitrag aufgrund von H<sub>2</sub> noch nicht ausschlaggebend). Um den Einfluss von Methan auf die von HALOE und MIPAS gemessenen Daten zu untersuchen, wurden – wie beispielhaft auf einer Höhe von 17 km in Abbildung 5.27 gezeigt – global gemittelte Methanmessungen am Boden aus dem CCGG-Netzwerk (Referenz siehe Unterkapitel 5.5.6) verwendet.

Die Zeitserie der Mischungsverhältnisse von Methan an der Erdoberfläche steigt ab dem Beginn der HALOE Messungen in guter Näherung linear bis etwa 2002 an, bleibt dann ungefähr auf dem Wert von 2002 bis zum Jahr 2007 und steigt danach wieder in etwa linear an bis zum Ende der HALOE-MIPAS-Zeitserie. Da wie bei jeder chemischen Reaktion auch die Oxidation umso wahrscheinlicher wird, je größer die Konzentration bzw. das Mischungsverhältnis der Edukte ist, würde man erwarten, dass der in den Residuen enthaltene und von den Fitfunktionen nicht beschriebene Beitrag von Methan zum Mischungsverhältnis von Wasserdampf mit der Zeit aufgrund der höher werdenden Methan-Mischungsverhältnisse zunimmt, die Residuen also mit der Zeit zunehmen.

In beiden Zeitreihen der Residuen in der Abbildung ist jedoch deutlich der Millennium-Drop in den Wasserdampfmischungsverhältnissen zu erkennen, welcher in diesen Daten von ungefähr Anfang 2000 bis Ende 2001 andauert. Das gleiche Phänomen tritt

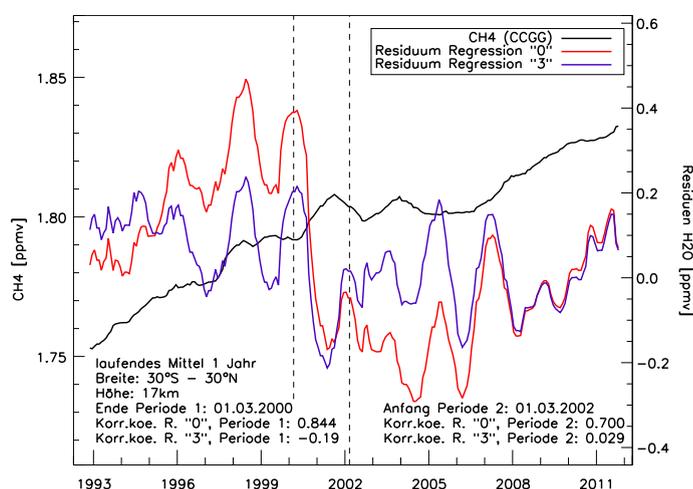


Abbildung 5.28: Vergleich wie in Abbildung 5.27 mit dem Unterschied, dass die Bestimmung der Korrelationskoeffizienten mit der Methan-VMR-Zeitreihe für beide Zeitserien von Residuen jeweils in zwei verschiedenen Phasen vor und nach dem Millennium-Drop durchgeführt wurde.

auch in den anderen betrachteten Höhen zwischen 15 km und 30 km auf. Ein Grund hierfür sind die in Unterkapitel 5.5.1 erwähnten Mankos in dem Regressionsmodell sowie eventuell fehlende Größen, welche auf das Mischungsverhältnis von Wasserdampf Einfluss nehmen.

Der in den Residuen enthaltene Millennium-Drop führt dazu, dass die ebenfalls in der Abbildung gezeigten Korrelationskoeffizienten (siehe Gleichung 5.2) von den beiden Zeitserien der Residuen mit der fast durchwegs ansteigenden Methan-VMR-Zeitserie beide negativ werden. Dieses Ergebnis spiegelt jedoch mit großer Wahrscheinlichkeit nicht die Wirklichkeit wider, da es keinen Grund zu der Annahme gibt, dass der Millennium-Drop etwas mit der zeitlichen Entwicklung von atmosphärischem Methan zu tun hat. Da jedoch dieser Abfall in den  $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnissen durch die Terme der Fitfunktionen nicht ausreichend im Zuge der Regressionen beschrieben wurde, findet sich das Absinken in den Residuen wieder. Um den Effekt auf die Korrelationskoeffizienten zu vermeiden, wurde bei deren Berechnung die Zeitserie in zwei Phasen eingeteilt. Die erste Phase geht bis zum Beginn des Millennium-Drops und die zweite Phase beginnt ab dem Ende desselben. Die Bestimmung der beiden Phasen ist empirisch vorgenommen worden. Als Vergleich zu der ersten Abbildung in diesem Unterkapitel ist diese Art der Bestimmung der Korrelationskoeffizienten in Abbildung 5.28 gezeigt.

Eine weitere Änderung bei den Vergleichen der Residuenzeitserien und der Methanzeitserie ist die zeitliche Verschiebung der Mischungsverhältnisse von Methan durch einen Term  $t'_{\text{V}_{\text{AOA}}}(h) = \overline{t_{\text{V}_{\text{AOA}}}(30^\circ\text{S} \leq B \leq 30^\circ\text{N})(h)}$ , wobei  $t_{\text{V}_{\text{AOA}}}(B, h)$  wie in Unterkapitel 5.5.1.1 definiert ist und wegen des Vergleichs mit den Residuen auf

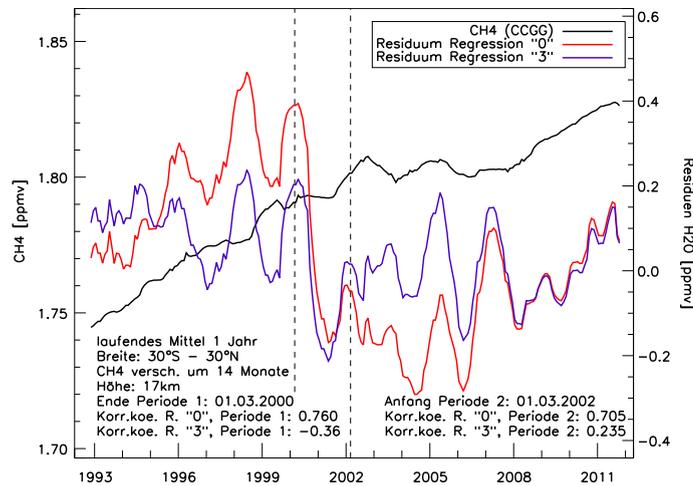


Abbildung 5.29: Vergleich wie in Abbildung 5.28 mit dem Unterschied, dass die Methanzeitserie um eine Zeit  $t'_{V_{AOA}}(17\text{ km}) = 14$  Monate zu späteren Zeitpunkten hin verschoben wurde (für die Definition von  $t'_{V_{AOA}}(h)$  siehe Text).

jedem Höhenniveau zwischen  $30^\circ\text{S}$  und  $30^\circ\text{N}$  gemittelt wurde. Dies soll die zeitliche Verzögerung simulieren, mit welcher sich die zeitliche Entwicklung von bodennahem Methan auf stratosphärischen Wasserdampf auswirkt. Die Größe  $t'_{V_{AOA}}(h)$  zwischen 15 km und 30 km Höhe ist in Tabelle 5.2 angegeben, außerdem sind in der Tabelle die Zeitpunkte  $T_1(h)$  des Endes der 1. Phase (Anfang des Millenium-Drops) und  $T_2(h)$  des Anfangs der 2. Phase (Ende des Millenium-Drops) aufgeführt, welche lediglich von den Residuenzeitreihen abhängen und sowohl für den Vergleich mit der unverschobenen  $\text{CH}_4$ -Zeitreihe (siehe Abbildung 5.28) als auch für den Vergleich mit der zeitlich um  $t'_{V_{AOA}}(h)$  verschobenen  $\text{CH}_4$ -Zeitreihe (siehe Abbildung 5.29) gelten. Der Unterschied zwischen  $T_1(h)$  und den in Unterkapitel 6.5.1 in der linken Spalte von Abbildung 6.4 gezeigten Zeiten des Beginns des Millenium-Drops liegt in der Glättung mit dem einjährigen laufenden Mittel von den hier verwendeten Residuenzeitreihen begründet, wodurch der Abfall früher als in den Originaldaten beginnt. Der gleiche Grund gilt auch für die Unterschiede zwischen den Dauern des Abfalls in den  $\text{H}_2\text{O}$ -VMR-Werten in der Tabelle, welche durch den Zeitraum zwischen  $T_1$  und  $T_2$  festgelegt sind und den in der rechten Spalte von Abbildung 6.4 gezeigten mittleren Dauern des Millenium-Drops.

In Abbildung 5.30 ist eine Übersicht über die Korrelationskoeffizienten zwischen den Residuen der Regressionen „0“ bzw. „3“ und den Mischungsverhältnissen von Methan gezeigt (linke Darstellung: unverschobene Methanzeitreihe, rechte Darstellung: verschobene Methanzeitreihe). Im Vergleich der Höhenprofile der Korrelationskoeffizienten bei zeitlich unverschobenen Mischungsverhältnissen von Methan mit zeitlich verschobenen Methan-Mischungsverhältnissen zeigt sich, dass die Verläufe der Höhenprofile aller Paare einander entsprechender Korrelationskoeffizienten sich

$h$ [km]	$T_1$	$T_2$	$t'_{V_{AOA}}(h)$ [Monate]
15	01.01.2000	01.01.2002	7
16	01.02.2000	01.02.2002	9
17	01.03.2000	01.03.2002	14
18	01.04.2000	01.04.2002	19
19	01.05.2000	01.05.2002	23
20	01.06.2000	01.06.2002	28
21	01.08.2000	01.08.2002	33
22	01.10.2000	01.10.2002	39
23	01.11.2000	01.11.2002	45
24	01.12.2000	01.12.2002	50
25	01.05.2001	01.05.2003	55
26	01.06.2001	01.06.2003	60
27	01.07.2001	01.07.2003	64
28	01.08.2001	01.08.2003	68
29	01.09.2001	01.09.2003	71
30	01.10.2001	01.10.2003	73

Tabelle 5.2: Bezüglich Abbildungen 5.28 und 5.29: Enddaten der 1. Phase  $T_1$  und Anfangsdaten der 2. Phase  $T_2$ . Nur bezüglich Abbildung 5.29: zeitliche Verschiebung in Monaten der Methan-VMR-Werte  $t'_{V_{AOA}}(h)$ .

lediglich im Detail unterscheiden, sich grundsätzlich aber sehr ähnlich sind.

In beiden Darstellungen dieser Abbildung schwanken die Profile der Korrelationskoeffizienten ohne Phaseneinteilung  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{CH}_4(t))}(h)$  zwischen -0,2 und -0,5. Auch die Profile von  $\rho^1_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t))}(h)$  und  $\rho^1_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t, t'_{V_{AOA}}(h)))}(h)$  befinden sich in einem großen Teil des betrachteten Höhenbereichs bei ähnlichen Werten.  $\rho^2_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t))}(h)$  bzw.  $\rho^2_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t, t'_{V_{AOA}}(h)))}(h)$ , also die Korrelationskoeffizienten zwischen der  $\text{CH}_4$ -VMR-Zeitreihe und den Residuen der Regressionen mit dem Term  $[F10.7(t + t_{V_{SZ}}(B, h))]$ , haben beide negative Werte in den geringsten und größten dargestellten Höhen, besitzen jedoch positive Werte bis zu  $\approx 0,61$  bzw.  $\approx 0,78$  in den Höhen dazwischen. Der durchschnittliche Wert dieser Korrelationskoeffizienten beträgt bei zeitlich unverschobenen Werten vom Methan-Mischungsverhältnis  $\approx 0,32$  und bei den unverschobenen Werten  $\approx 0,37$ .

Die Korrelationskoeffizienten  $\rho^n_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t))}(h)$  bzw.  $\rho^n_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t, t'_{V_{AOA}}(h)))}(h)$  zwischen den Residuen der ursprünglichen Regression „0“ mit  $\text{CH}_4$ -VMR-Werten unter Beachtung der beiden Phasen sind – sowohl von ihrem Mittelwert her als auch was ih-

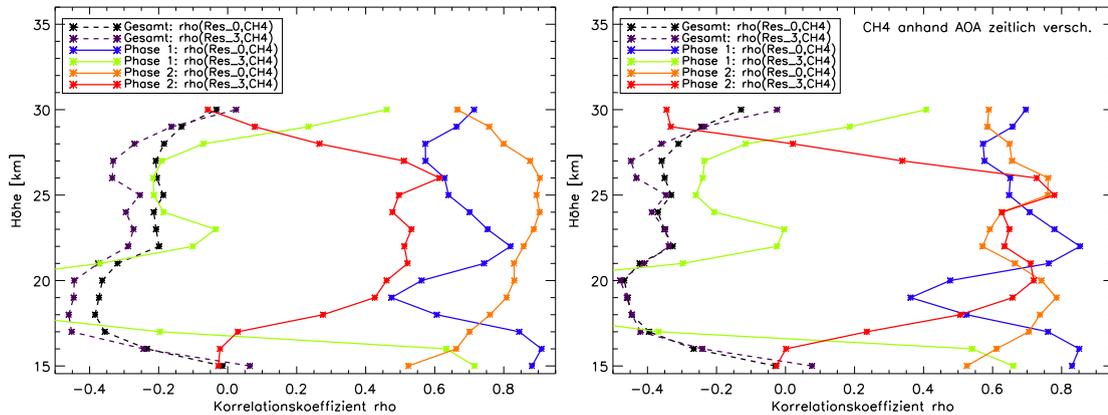


Abbildung 5.30: **Links:** Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{CH}_4(t))}(h)$  (mit  $i \in \{0, 3\}$ ) als Kennzeichnung für die beiden gezeigten Residuenzeitreihen für die zwei Regressionen) als gestrichelte Linien (vergleiche Legende in der Darstellung). Für die Korrelationskoeffizienten in den beiden Phasen der Zeitserie wird die Schreibweise  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{CH}_4(t))}^n(h)$  verwendet, wobei  $n \in \{1, 2\}$  die Phasen 1 bzw. 2 kennzeichnet. Die blaue bzw. orange Linie sind die Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t))}^1(h)$  bzw.  $\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t))}^2(h)$ . Die grüne bzw. rote Linie sind  $\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t))}^1(h)$  bzw.  $\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t))}^2(h)$ . **Rechts:** gleiche Darstellung wie links, allerdings mit Methanmischungsverhältnissen, welche durch den Term  $t'_{\text{V}_{\text{AOA}}}(h)$  zeitlich verschoben sind.

re Maximalwerte anbelangt – positiver als die Korrelationskoeffizienten ohne Beachtung der beiden Phasen und auch als die Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t))}^n(h)$  und  $\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t, t'_{\text{V}_{\text{AOA}}}(h)))}^n(h)$ . Die Werte für  $\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t))}^1(h)$  bzw.  $\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t, t'_{\text{V}_{\text{AOA}}}(h)))}^1(h)$  besitzen ein lokales Minimum in einer Höhe von 19 km mit Werten von ca. 0,47 bzw. 0,36 und ein lokales Maximum in einer Höhe von 22 km mit Werten von ca. 0,82 bzw. 0,85. Im Durchschnitt betragen diese Korrelationskoeffizienten 0,69 bzw. 0,67. Die entsprechenden Koeffizienten für die zweite Phase besitzen einen Mittelwert über den betrachteten Höhenbereich von 0,79 bzw. 0,66 für die unverschobenen bzw. verschobenen Methan-VMR-Werte. Die Maximalwerte betragen 0,90 bzw. 0,78.

Es sind also teilweise betragsmäßig große positive Korrelationskoeffizienten zu beobachten, falls man bei der Berechnung dieser Koeffizienten die Zeitreihen in zwei Phasen einteilt, wobei die erste Phase bis zum Anfang des Millennium-Drops geht und die zweite Phase am Ende des Millennium-Drops beginnt. Vor allem bei der Korrelation von Mischungsverhältnissen von Methan mit den Residuen der ursprünglichen Regressionen werden hohe positive Werte erreicht, und auch die Mittelwerte über die betrachteten Höhen haben recht hohe positive Werte. Bei der Korrelation der Methan-Zeitreihe mit Regression „3“ ergeben sich vor allem in der ersten Phase sehr geringe und teils negative Korrelationskoeffizienten. Wie schon erwähnt, liegt das

zum Teil sicher an dem ausgleichenden Effekt des Terms mit den Daten des solaren Radioflussindex in der Fitfunktion. Allerdings bliebe noch zu prüfen, wie die Ergebnisse der Regressionen aussähen, falls sowohl der Term mit dem Radioflussindex als auch ein Term mit der Methan-Zeitreihe in der Fitfunktion stehen würden. Da die RMS-Werte im Mittel bei den beiden Regressionsansätzen „2“ und „3“ am besten sind, sollte in diesem Unterkapitel das Augenmerk hauptsächlich auf dem Vergleich der Methan-VMR-Zeitserie und den Residuen der Regression „3“ liegen.

Es ist anzunehmen, dass ein Einbeziehen dieser Methan-Zeitreihe als Term in den Fitfunktionen der Regressionen Sinn machen würde, da es erstens von der Theorie her ein wichtiger Beitrag zu stratosphärischem Wasserdampf ist, zweitens die teilweise hohen Korrelationskoeffizienten zwischen den beiden Größen für eine Berücksichtigung des Effekts der CH<sub>4</sub>-Oxidation spricht (vor allem in der zweiten Phase) und drittens hierdurch die Residuen zwischen den modellierten und gemessenen Zeitreihen reduziert werden könnten. Um wirklich eine Verringerung der Residuen zu erreichen, müssten auch in den Regressionen der Beitrag von Methan getrennt in den Zeiträumen vor und nach dem Millennium-Drop behandelt werden.

Eine weiterführende Abschätzung für einen potenziellen Beitrag einer verstärkten Methan-Oxidation durch den Anstieg in atmosphärischem Methan und ein Vergleich mit anderen Arbeiten zu diesem Thema finden sich in Unterkapitel 6.2.

### 5.5.6.2 Einfluss der BDC

In den Fitfunktionen der Regressionen in dieser Arbeit ist kein Term enthalten, welcher direkt Daten über die Stärke der BDC enthält. Die Geschwindigkeit des Aufstiegs der Luft in und oberhalb der TTL (vgl. Unterkapitel 2.5) beeinflusst den stratosphärischen Wasserdampf über eine Modulation der Cold-Point-Tropopausentemperaturen, wobei eine starke BDC mit niedrigen Tropopausentemperaturen und damit niedrigen Mischungsverhältnissen von Wasserdampf einhergeht, und eine schwache BDC mit hohen Tropopausentemperaturen und mit hohen VMR von H<sub>2</sub>O einhergeht. Man erwartet also beim Vergleich der Zeitserien des BDC-Proxies und der Wasserdampfmischungsverhältnisse negative Korrelationskoeffizienten.

Die Untersuchung bezüglich des Zusammenhangs des in Unterkapitel 5.5.6 beschriebenen Proxys für die BDC mit Wasserdampf ist auf eine ähnliche Art und Weise durchgeführt worden, wie die Studie über den Vergleich der zeitlichen Entwicklungen von Methan und Wasserdampf im letzten Unterkapitel. Es wird ein Vergleich einer die Stärke der BDC repräsentierenden Zeitreihe mit zwei Residuenzeitreihen aus den Regressionen „0“ und „3“ vorgenommen. Alle verwendeten Zeitreihen sind gemittelt zwischen 30°S und 30°N und über alle verwendeten Zeitreihen wurde zur Glättung ein einjähriges laufendes Mittel gebildet.

Der Jahresgang in den Tropopausentemperaturen und hierdurch in den Mischungsverhältnissen von Wasserdampf in der entsprechenden Höhe entsteht durch den Jahresgang in der Stärke der BDC, welcher aufgrund einer Variation in der planetaren Wellenaktivität mit einer Periode von einem Jahr zustande kommt. Darüberhinaus wird sowohl die BDC als auch die Westwind-Phase der QBO von planetaren Wellen angetrieben, weswegen diese beiden atmosphärischen Signale nicht völlig unabhängig voneinander sind. In den verschiedenen Regressionen in dieser Arbeit ist jeweils sowohl ein Term für den Jahresgang als auch für die QBO enthalten. Insofern würde man bei der Untersuchung in diesem Unterkapitel lediglich erwarten, dass man einen Zusammenhang von dem Teil des BDC-Signals in Wasserdampf findet, welcher unabhängig vom Jahresgang und der QBO ist.

Die BDC-Proxydaten wurden einmal zeitlich unverschoben mit den Zeitserien aus den Residuen der beiden Regressionsmodelle verglichen und einmal durch einen Term  $t''_{V_{AOA}}(h) = t'_{V_{AOA}}(h) - t'_{V_{AOA}}(\overline{h(82\text{ hPa})})$  verschoben. Dieser Term wurde eingeführt, da – im Gegensatz zu der knapp oberhalb der Erdoberfläche gemessenen  $\text{CH}_4$ -Zeitreihe aus dem letzten Unterkapitel – die als Proxy für die BDC dienenden Heizraten auf einem Drucklevel von 82 hPa bestimmt wurden. Es wird bei diesem Ansatz davon ausgegangen, dass eine etwaige Auswirkung der BDC auf Wasserdampf, ausgehend von dem 82 hPa entsprechenden Höhengniveau, mit der aufsteigenden Luft nach oben transportiert würde. Wie am Anfang dieses Unterkapitels beschrieben, ist der kausale Zusammenhang zwischen der Stärke der BDC und VMR-Werten von  $\text{H}_2\text{O}$  bedingt durch die Auswirkung der BDC auf die Cold-Point-Tropopausentemperaturen. Theoretisch wird dieses Signal in Wasserdampf durch die BDC von der tropischen Tropopause aus nach oben transportiert und sollte sich in etwa mit dem mittleren AOA fortpflanzen. Der Proxy für die Stärke der BDC in 82 hPa ist zwar etwas oberhalb der Tropopause angesiedelt, jedoch kann davon ausgegangen werden, dass es keine großen Unterschiede zwischen der Stärke der BDC auf diesem Höhengniveau und auf dem Höhengniveau der Tropopause (etwa 100 hPa) gibt.  $\overline{h(82\text{ hPa})} \approx 17,8$  km ist der Mittelwert derjenigen Höhengniveaus zwischen  $30^\circ\text{S}$  und  $30^\circ\text{N}$ , welche einem Druckniveau von 82 hPa entsprechen. Diese Höhengniveaus wurden aus dem kombinierten Datensatz von HALOE- und MIPAS-Messungen mittels Interpolation vom Retrieval-Höhengitter von MIPAS auf den Logarithmus von 82 hPa bestimmt, wobei als Umrechnungsvektor die logarithmierten Druckmessungen der beiden Messinstrumente gedient haben. Die Größe  $t'_{V_{AOA}}(\overline{h(82\text{ hPa})}) \approx 17,9$  Monate wurde wiederum aus der Interpolation der Werte des gemittelten mittleren Luftalters zwischen  $30^\circ\text{S}$  und  $30^\circ\text{N}$   $t'_{V_{AOA}}(h)$  auf dieses Höhengniveau berechnet und dann auf ganze Monate gerundet ( $\approx 18$  Monate), da bei Berechnungen der Korrelationskoeffizienten zwischen zwei diskreten Zeitserien das Zeitgitter der beiden Datenreihen gleich sein muss.

Jeweils ein Beispiel auf einer Höhe von 19 km für diese Vergleiche und die Be-

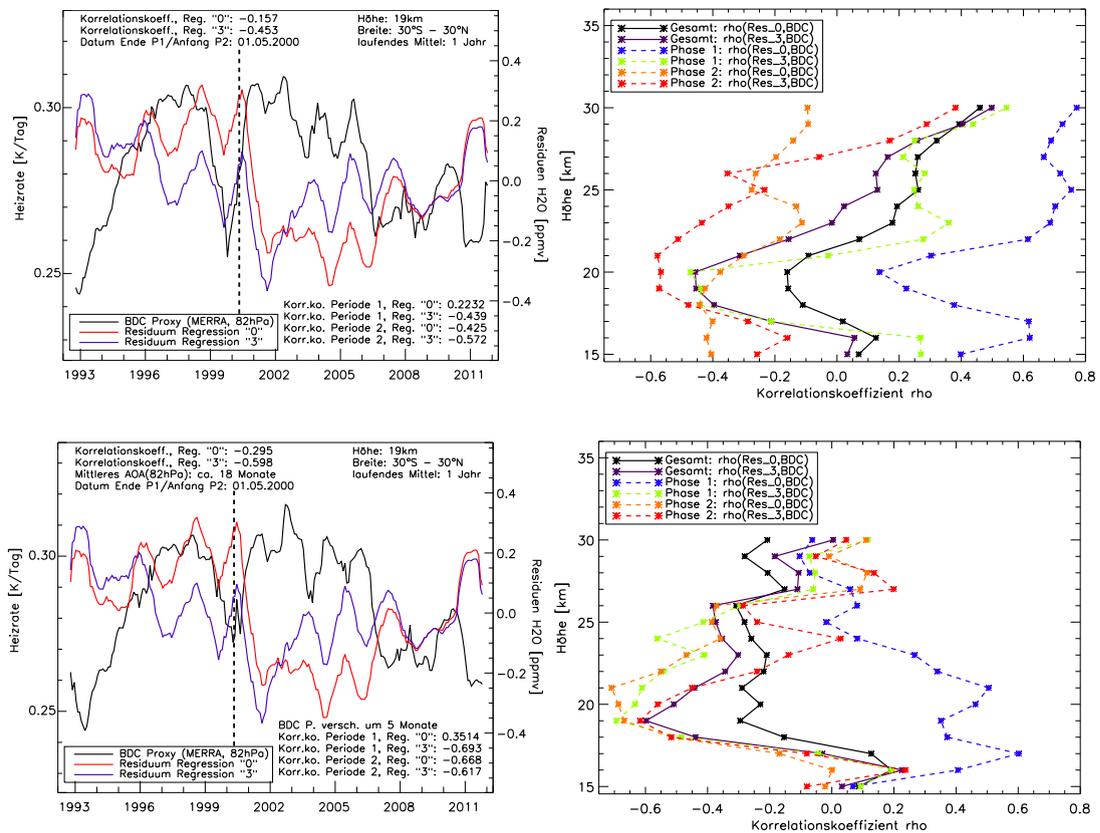


Abbildung 5.31: **Links:** Vergleiche des BDC-Proxies (MERRA Heizraten gemittelt zwischen  $30^{\circ}\text{S}$  und  $30^{\circ}\text{N}$  auf einem Drucklevel von 82 hPa. **Oben:** Zeitlich unverschobener BDC-Proxy. **Unten:** Zeitlich verschobener BDC-Proxy. Die Verschiebung wurde bezüglich des mittleren Luftalters auf einem Druckniveau von 82 hPa durchgeführt.) mit den Residuen von Regressionen „0“ und „3“ (vgl. Unterkapitel 5.5.6.1) auf einer Höhe von 19 km. Alle Kurven wurden mit einem laufenden Mittel von einem Jahr geglättet. Bei allen Vergleichen wurden Korrelationskoeffizienten berechnet, über den gesamten Zeitraum, vor dem Beginn des Millenium-Drops (Periode 1) und nach dem Beginn des Millenium-Drops (Periode 2). **Rechts:** Höhenprofile der Korrelationskoeffizienten aus den Vergleichen links. Die vertikale Anordnung der unterschiedlichen Vergleiche ist so wie in den Darstellungen links.

rechnungen der Korrelationskoeffizienten zwischen den Zeitreihen der Residuen und 1. den unverschobenen BDC-Proxy-Daten und 2. den um  $t''_{\text{V}_{\text{AOA}}}(h)$  verschobenen BDC-Proxy-Daten ist in der linken Spalte von Abbildung 5.31 gezeigt. Wie bei dem Vergleich zwischen den Residuen und  $\text{CH}_4$ -VMR-Werten im letzten Unterkapitel wurden auch hier die Zeitreihen auf jeder Höhe in zwei Phasen eingeteilt und – am Beispiel der unverschobenen Zeitreihe der Heizraten – Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{BDC}(t))}(h)$  (mit  $i \in \{0, 3\}$  für die Regressionen „0“ und „3“) für den gesamten gezeigten Zeitraum und  $\rho^n_{(\text{Res}_i(t), \text{BDC}(t))}(h)$  für die beiden Phasen  $n = 1$  bzw.  $n = 2$

berechnet. Gleiches gilt auch für die um  $t''_{V_{AOA}}(h)$  verschobene BDC-Proxy-Zeitreihe. In der rechten Spalte der Abbildung werden die Höhenprofile der Korrelationskoeffizienten gezeigt.

Da in diesem Fall ein Zusammenhang zwischen den Tropopausentemperaturen – welche von der Stärke der BDC beeinflusst werden – und dem Millenium-Drop in den Mischungsverhältnissen von Wasserdampf besteht, wird – anders als im letzten Unterkapitel – bei der Phaseneinteilung kein Zeitintervall ausgelassen. Die Einteilung in Phasen ist lediglich vorgenommen worden, um zu überprüfen, ob die Korrelationen zwischen den Residuen und den Heizraten gleichbleibend ist. Die erste Phase reicht vom Beginn der HALOE-Messungen bis zum Beginn des Millenium-Drops und die zweite Phase beginnt zum gleichen Zeitpunkt und endet am Ende der MIPAS-Messungen.

In den Darstellungen der Höhenprofile der Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{BDC}(t))}(h)$  und  $\rho^n_{(\text{Res}_i(t), \text{BDC}(t))}(h)$  bzw.  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{BDC}(t, t''_{V_{AOA}}(h)))}(h)$  und  $\rho^n_{(\text{Res}_i(t), \text{BDC}(t, t''_{V_{AOA}}(h)))}(h)$  zwischen den Residuenzeitreihen und den unverschobenen BDC-Proxy-Daten bzw. den um  $t''_{V_{AOA}}(h)$  verschobenen BDC-Proxy-Daten ist in jedem der gezeigten Höhenprofile ein lokales Minimum zwischen 19 km und 21 km Höhe zu sehen, also knapp oberhalb von  $\overline{h(82 \text{ hPa})} \approx 17,8$  km. Diese Minima besitzen Werte von maximal  $\rho^1_{(\text{Res}_0(t), \text{BDC}(t, t''_{V_{AOA}}(19 \text{ km}))}(19 \text{ km}) \approx 0,35$  bis minimal  $\rho^2_{(\text{Res}_0(t), \text{BDC}(t, t''_{V_{AOA}}(21 \text{ km}))}(21 \text{ km}) \approx -0,71$ . Die Korrelationen in der ersten Phase zwischen den Residuen der Regression „0“ und sowohl dem unverschobenen als auch dem um  $t''_{V_{AOA}}(h)$  verschobenen BDC-Proxy sind Ausreißer von der erwarteten negativen Korrelation aufgrund der niedrigen Tropopausentemperaturen bei starker BDC, welche zu niedrigen H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnissen führen müssten. Diese beiden Höhenprofile der Korrelationskoeffizienten sind in den meisten Höhen positiv. Die restlichen Höhenprofile besitzen in den meisten Höhen zumeist die erwarteten negativen Werte für die Korrelationskoeffizienten.

Im Mittel betragen die Werte der Korrelationen über den gesamten Zeitraum bei den unverschobenen BDC-Proxy-Daten  $\overline{\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{BDC}(t))}(h)} \approx 0,13$  und  $\overline{\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{BDC}(t))}(h)} \approx -0,02$ .

Die Mittel über die Korrelationen über den gesamten Zeitraum bei den um  $t''_{V_{AOA}}(h)$  verschobenen BDC-Proxy-Daten betragen  $\overline{\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{BDC}(t, t''_{V_{AOA}}(h)))}(h)} \approx -0,17$  und  $\overline{\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{BDC}(t, t''_{V_{AOA}}(h)))}(h)} \approx -0,24$ .

Im Großen und Ganzen sind die Korrelationen der Residuen mit dem BDC-Proxy nicht so stark, wie jene mit den CH<sub>4</sub>-Messungen. Die Tendenz zu negativeren Korrelationskoeffizienten bei Beachtung des Luftalters bezogen auf das Luftalter bei 82 hPa gibt jedoch Grund zu der Annahme, dass ein gewisser Zusammenhang be-

steht. Eine mögliche Ursache dafür, dass die Korrelationskoeffizienten betragsmäßig nicht noch größer sind, könnte der oben erwähnte Effekt sein, dass in den Fitfunktionen der Regressionen schon verschiedene Effekte enthalten sind, welche unter Umständen die BDC beeinflussen können oder mit ihr gekoppelt sind. Beispiele hierfür sind der Jahresgang oder die QBO. Falls dies der Fall ist, würden die Residuen das Fehlen der Beschreibung der BDC in der Fitfunktion nicht mehr im vollen Umfang widerspiegeln. Der Einfluss des Jahresgangs sollte allerdings durch die Glättung des BDC-Proxies in dem hier gezeigten Vergleich durch das einjährige laufende Mittel weitestgehend auch in den BDC-Daten verschwunden sein. Der Einfluss der QBO könnte jedoch in den Residuen fehlen und im BDC-Proxy noch vorhanden sein. Da die Antikorrelation zwischen dem Proxy für die BDC und den Residuen in dem Höhenbereich unmittelbar oberhalb der TTL am stärksten ist, könnte eine Einführung eines BDC-Proxies als Term in einem Regressionsmodell in dieser Region sinnvoll sein.

Eine Zusammenfassung und weitere Diskussion dieser Ergebnisse findet sich in Unterkapitel 6.3.

### 5.5.6.3 Zusammenhang von optischer Dicke bei 550nm aufgrund von Aerosolen mit H<sub>2</sub>O

Ein weiterer möglicher Einfluss auf stratosphärische Mischungsverhältnisse von Wasserdampf sind vulkanische Aerosole, welche teilweise weit in die Stratosphäre hinauf transportiert werden können. Es gibt zwei Möglichkeiten, wie die Messungen von H<sub>2</sub>O-VMR-Werten mit Satelliteninstrumenten durch diese Aerosole beeinflusst werden können:

1. Durch die Präsenz von Aerosolen in Höhe der Tropopause wird die Absorption von Sonnenlicht in dieser Region erhöht, was zu höheren Tropopausentemperaturen führt und aus diesem Grund zu höheren Wasserdampfgehalten in der Stratosphäre (Angell, 1997).
2. Die Messungen können aufgrund des Vorhandenseins von Aerosolen verfälscht werden (vergleiche Hervig et al., 1995).

Die in Unterkapitel 5.5.6 erwähnten Proxy-Daten für Aerosolkonzentrationen sind Werte für die optische Dicke der Atmosphäre bei 550 nm. Die Daten liegen auf 24 Breitengraden und in vier Höhengichten von je 5 km Dicke zwischen 15 km und 20 km, 20 km und 25 km, 25 km und 30 km, sowie 30 km und 35 km vor und sind ab 1850 – zur Zeit – bis September 2012 vorhanden.

In Abbildung 5.32 ist ein Vergleich zwischen diesen Proxydaten und den Residuen aus den Regressionen „0“ und „3“ gezeigt. Alle in dieser Abbildung gezeigten Zeitreihen wurden zwischen 30°S und 30°N gemittelt und mit einem einjährigen laufenden Mittel geglättet.

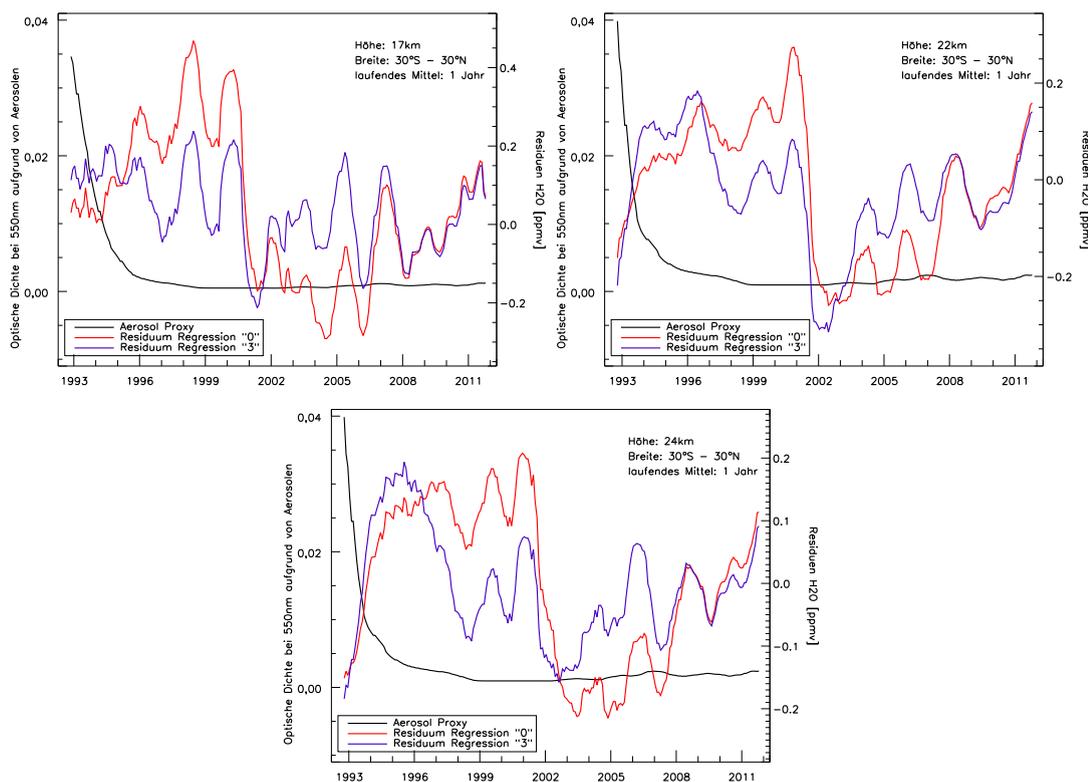


Abbildung 5.32: Vergleich des Proxies für den Aerosolgehalt der Atmosphäre mit den Residuen der Regressionen „0“ und „3“. Alle gezeigten Zeitreihen sind zwischen 30°S und 30°N gemittelt und mit einem einjährigen laufenden Mittel geglättet.

In der Anfangszeit der HALOE-Messungen sind durch den Ausbruch des Vulkans Pinatubo (15.06.1991) die Messdaten durch Aerosole in der Atmosphäre beeinflusst worden. Im gezeigten Vergleich der Residuen in 17 km ist kein großer Einfluss ersichtlich, jedoch ist anzunehmen, dass die stark ansteigenden Residuen bis ~1995 auf 22 km Höhe und bis ~1996 auf 24 km Höhe auf eine Auswirkungen der hohen Aerosolkonzentrationen in der Stratosphäre zurückzuführen sind. In Hervig et al. (1995) wird der Einfluss von Pinatubo auf die HALOE-Messungen verschiedener Gase (darunter auch H<sub>2</sub>O) untersucht und quantifiziert. Außerdem werden in dieser Veröffentlichung Korrekturen vorgeschlagen, um den Effekt der Aerosole auf die VMR-Werte der Gase herauszurechnen. In einer ein Jahr später veröffentlichten Arbeit über die Validierung von HALOE v17 Daten (Harries et al., 1996), ist erwähnt, dass in dieser Datenversion Aerosolkorrekturen mit eingeflossen sind, welche auch in den hier verwendeten v19-HALOE-Daten berücksichtigt sind. Diese haben sicher die Qualität der Daten verbessert, jedoch finden sich in den in dieser Arbeit betrach-

teten Monatsmitteln in vielen der betrachteten Breiten-Höhen-Bins stark von den anderen Werten abweichende Datenpunkte am Beginn der Zeitserien, obwohl die ersten sechs Monate der HALOE-Messungen weggelassen wurden. In SPARC Report N°2 (2000) wird erwähnt, dass die Fehler im Retrieval durch die atmosphärischen Aerosole von HALOE v19 Daten nach den erwähnten Aerosolkorrekturen noch 7% der Aerosolextinktion ausmachen.

Die Residuen werden als  $y_{\text{Mess}}(t) - y_{\text{Mod}}(t)$  berechnet. Unter der Voraussetzung, dass die Annahme korrekt ist, dass die stark ansteigenden Residuen am Beginn der Zeitreihe auf den Einfluss der vulkanischen Aerosole zurückzuführen ist, würde der Einfluss der Aerosole (zumindest in den hier gezeigten Daten auf 22 km und 24 km Höhe) zu niedrigeren VMR-Werten von  $\text{H}_2\text{O}$  in den HALOE-Messungen führen. Dies widerspräche dem ersten Punkt in der obigen Liste und lässt darauf schließen, dass der zweite Punkt – also eine Verfälschung der Messungen durch die Aerosole – der dominierende Effekt ist.

Es besteht die Möglichkeit, dass ein Term mit den hier verwendeten Proxydaten für vulkanische Aktivität in den Fitfunktionen der Regressionen die RMS-Werte verringern könnte. Ein anderer Ansatz wäre, die erste Zeit, bis zum Abklingen der stratosphärischen Aerosolkonzentrationen auf normale Werte nach dem Pinatubo Ausbruch in jeglichen Betrachtungen wegzulassen.

# Kapitel 6

## Ergebnisse der Studien und Diskussion

Dieses Kapitel gibt eine Übersicht über die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit und stellt diese in Zusammenhang mit Ergebnissen aus anderen Veröffentlichungen. In Unterkapitel 6.1 werden die aus den Regressionen ermittelten linearen Trends von stratosphärischem  $\text{H}_2\text{O}$  diskutiert. In den folgenden Unterkapiteln 6.2 und 6.3 wird der ermittelte Zusammenhang von Methan sowie der BDC mit der Entwicklung von Wasserdampf, und in Unterkapitel 6.4 werden mögliche Zusammenhänge zwischen dem elfjährigen solaren Zyklus und Mischungsverhältnissen von Wasserdampf diskutiert. In Unterkapitel 6.5 werden die Ergebnisse zum Millenium-Drop diskutiert, was den Zeitpunkt seines Auftretens und seine möglichen Ursachen betrifft.

Eine allgemeine Anmerkung zur Wahl der Terme in den Regressionen: aus Gründen der einfacheren Interpretierbarkeit wurden lineare Zusammenhänge zwischen den Wasserdampfverhältnisse und den Zeitreihen der eingehenden atmosphärischen Größen angenommen. Die Einflüsse der Signale dieser Größen auf Wasserdampf müssen jedoch nicht unbedingt so geartet sein. Es gibt die Möglichkeit im Zuge einer Regression, sowohl nicht-lineare Effekte als auch gekoppelte Effekte zwischen zwei Variablen über einen sogenannten Interaktionseffekt zu modellieren (vergleiche zum Beispiel Allison, 1977). Gekoppelte Effekte zwischen hier verwendeten atmosphärischen Größen sind nicht bekannt, jedoch wäre es noch zu prüfen, ob die Ergebnisse aus den Analysen durch ein Abweichen von der Annahme linearer Zusammenhänge zwischen den verwendeten Termen in den Regressionen und den Wasserdampf-mischungsverhältnissen verbessert werden können.

Um als Beispiel die QBO heranzuziehen: Diese transportiert abwechselnd Schichten von wärmerer und kälter Luft in der Stratosphäre von oben nach unten, welche die Tropopausentemperatur und damit das Mischungsverhältnis von Wasserdampf

beim Eintritt in die Stratosphäre beeinflussen<sup>1</sup>. Der verwendete Proxy besteht aus horizontalen Windgeschwindigkeiten. Es ist nun nicht offensichtlich, dass die Werte für die Windgeschwindigkeiten proportional zu den von ihnen verursachten Auswirkungen im Wasserdampfmischungsverhältnis bei Eintritt in die Stratosphäre sind, wie es momentan in den Regressionen angenommen wird. In diesem Fall könnte eine Einführung eines nicht-linearen Zusammenhangs zwischen den QBO-Proxy-Daten und Wasserdampf zu einer Verbesserung führen.

Falls bei zukünftigen Analysen nicht-lineare oder gekoppelte Zusammenhänge angenommen würden, müssten diese Zusammenhänge immer physikalisch begründbar sein.

## 6.1 Trends von H<sub>2</sub>O aus den Regressionen

Mit den vier unterschiedlichen Fitfunktionen aus den Unterkapiteln 5.5.2 bis 5.5.4 sind Steigungen für die Zeit zwischen März 1992 und April 2012 jeweils für jedes in der kombinierten Zeitserie von HALOE und MIPAS enthaltene Breiten-Höhen-Bin bestimmt worden. Eine Übersicht über diese Ergebnisse in den Bins zwischen 50°S und 50°N ist in Unterkapitel 5.5.5 in Abbildung 5.21 gegeben. Hier zeigen sich deutliche Unterschiede in den Ergebnissen für die Regressionen, welche den solaren Zyklus entweder durch den Term  $F_{SZ,\sin/\cos}(t)$  (vergleiche Unterkapitel 5.5.4.1) oder durch den Term  $F_{SZ,F10.7}(t, t_{V_{SZ}}(B, h))$  (vergleiche Unterkapitel 5.5.4.2) berücksichtigen, mit den beiden anderen Regressionen. Bei den Regressionen unter Berücksichtigung des solaren Zyklus sind die Steigungen im Mittel deutlich negativer als bei den beiden anderen Regressionen.

### 6.1.1 Vergleich von Trends aus der HALOE-MIPAS-Zeitreihe mit Trends aus anderen Daten

In Hegglin et al. (2014) werden Wasserdampfdaten von sieben der elf Satelliteninstrumente (inklusive HALOE und MIPAS) in der limb-sounding-Geometrie, welche in Hegglin et al. (2013) verglichen und validiert wurden, miteinander über eine „vermittelnde“ Zeitreihe von einem – bis auf Wasserdampfmischungsverhältnisse – Klima-Chemie-Modell (CMAM30, Canadian Middle Atmosphere Model 30, siehe Scinocca et al. (2008)) verbunden, welches eine Kopplung von modellierten Werten

---

<sup>1</sup>Dies ist nach Baldwin et al. (2001) eine der Theorien für die Beeinflussung von Wasserdampf durch die QBO. Das in Unterkapitel 5.5.5 gezeigte, durch die Regressionen bestimmte Auftreten eines lokalen Maximums des Einflusses der QBO auf Wasserdampf VMR-Werte in einem Höhenbereich zwischen ~25 km bis ~29 km zwischen 10°S und 10°N, kann durch diese Theorie jedoch nicht erklärt werden.

---

$i, n$	B	p [hPa]	H [km]	$m_i$ [ppmv/dec]	$m_{\text{Hegglin},n}$ [ppmv/dec]	$\Delta m_{i,n}$ [ppmv/dec]
0,1	$0^\circ \pm 20^\circ$	80	18	0,020	-0,064	0,084
1,1	$0^\circ \pm 20^\circ$	80	18	-0,004	-0,064	0,060
2,1	$0^\circ \pm 20^\circ$	80	18	-0,311	-0,064	-0,247
3,1	$0^\circ \pm 20^\circ$	80	18	-0,196	-0,064	-0,132
0,2	$0^\circ \pm 20^\circ$	100	16,5	-0,039	0,005	-0,044
1,2	$0^\circ \pm 20^\circ$	100	16,5	0,018	0,005	0,013
2,2	$0^\circ \pm 20^\circ$	100	16,5	-0,382	0,005	-0,387
3,2	$0^\circ \pm 20^\circ$	100	16,5	-0,236	0,005	-0,241
0,3	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	0,051	-0,023	0,074
1,3	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	n.a.	-0,023	n.a.
2,3	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	-0,187	-0,023	-0,164
3,3	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	-0,130	-0,023	-0,107
0,4	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	0,051	0,177	-0,126
1,4	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	n.a.	0,177	n.a.
2,4	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	-0,187	0,177	-0,364
3,4	$40^\circ \pm 5^\circ$	100	16,2	-0,130	0,177	-0,307

Tabelle 6.1: Steigungen  $m_i$  (im Falle von  $i = 1$  die mittlere Steigung, siehe Bildunterschrift von Abbildung 5.21) zwischen März 1992 und April 2012 aus Regressionen (siehe Unterkapitel 5.5) und Differenz  $\Delta m_{i,n} = m_i - m_{\text{Hegglin},n}$  zwischen  $m_i$  und den Steigungen  $m_{\text{Hegglin},n}$  (siehe Liste im Text) aus Hegglin et al. (2014). Hierbei steht  $i = 0$  für die ursprüngliche Regression mit Fitfunktion nach Gleichung 5.8,  $i = 1$  steht für die mit der Fitfunktion, welche Bruchpunkte berücksichtigt (Gleichung 5.10),  $i = 2$  für die mit Fitfunktion inklusive des Terms  $F_{\text{SZ},\sin/\cos}(t)$  und  $i = 3$  für die mit Fitfunktion inklusive des Terms  $F_{\text{SZ},F10.7}(t, t_{\text{V}_{\text{SZ}}}(\text{B}, h))$ . Für  $i = 1$  bei  $40^\circ \pm 5^\circ$  sind sowohl bei einer Höhe von 16 km als auch bei 17 km keine sinnvollen Fitparameter bei der Regression herausgekommen. In den Zeilen mit den Höhen von 16,5 km wurde ein Mittel aus den Trends bei 16 km und 17 km berechnet und in den Zeilen mit den Höhen von 16,2 km wurde ein gewichtetes Mittel  $0,8 m_i(16 \text{ km}) + 0,2 m_i(17 \text{ km})$  berechnet.

an gemessene atmosphärische Größen (Stichwort: nudging, vergleiche hierzu Unterkapitel 5.4) verwendete. Sowohl von den miteinander verbundenen Daten der Satelliteninstrumente als auch von den Modelldaten und von der Zeitserie der Boulder FPH-Sonden (vergleiche Unterkapitel 5.3.1) sind Trends in den Wasserdampf-anomalien in verschiedenen Zeiträumen und bei unterschiedlichen Breitengraden bzw. Breitengradintervallen berechnet worden. Die Methode zur Trendbestimmung war eine lineare Regression der Anomalien in Wasserdampf mit der Methode der kleinsten Quadrate. Exemplarische Trends  $m_{\text{Hegglin},n}$  ( $n \in \{1, 2, 3, 4\}$ ) aus den kombinierten Satellitenmessungen und den FPH-Sondendaten sind:

1. Daten: Satelliteninstrumente, Zeitraum: 1988-2010, Breitenband:  $20^\circ\text{S} - 20^\circ\text{N}$ , Drucklevel: 80 hPa, Veränderung: -0,14 ppmv, Trend:  $m_{\text{Hegglin},1} = -0,064$  ppmv/dec
2. Daten: Satelliteninstrumente, Zeitraum: 1988-2010, Breitenband:  $20^\circ\text{S} - 20^\circ\text{N}$ , Drucklevel: 100 hPa, Veränderung: 0,01 ppmv, Trend:  $m_{\text{Hegglin},2} = 0,005$  ppmv/dec
3. Daten: Satelliteninstrumente, Zeitraum: 1988-2010, Breite:  $40^\circ\text{N}$ , Drucklevel: 100 hPa, Veränderung: -0,05 ppmv, Trend:  $m_{\text{Hegglin},3} = -0,023$  ppmv/dec
4. Daten: Boulder FPH-Sonden, Zeitraum: 1988-2010, Breite:  $40^\circ\text{N}$ , Drucklevel: 100 hPa, Veränderung: 0,39 ppmv, Trend:  $m_{\text{Hegglin},4} = 0,177$  ppmv/dec

Nach den Druckmessungen von HALOE und MIPAS entsprechen 100 hPa zwischen  $20^\circ\text{S}$  und  $20^\circ\text{N}$  ungefähr einer Höhe von 16,5 km und 80 hPa in etwa einer Höhe von 18 km. Zwischen  $35^\circ\text{S}$  und  $45^\circ\text{N}$  entsprechen 100 hPa etwa 16,2 km. Tabelle 6.1 zeigt die durch Mittelungen der aus den Regressionen für die kombinierte HALOE-MIPAS-Zeitserie bestimmten entsprechenden Steigungen  $m_i$  (wie in der Tabellenunterschrift beschrieben) im Zeitraum von März 1992 bis April 2012. Die Ansätze ohne solaren Zyklus liefern im Mittel positivere Steigungen als  $m_{\text{Hegglin},n}$  und die anderen beiden Ansätze mit Beschreibung des solaren Zyklus negativere Steigungen. Ein Grund hierfür könnte der unterschiedliche Zeitraum sein, in dem die Trends bestimmt wurden. Zudem unterscheidet sich die Art und Weise der Bestimmung der Trends. Auf der einen Seite die Bestimmung der Trends aus den Wasserdampf-anomalien in Hegglin et al. (2014) und auf der anderen Seite die Regression, bei welcher  $F_{\text{lin}}(t)$  nur einer der angepassten Terme ist und die Steigung beinhaltet. Der Trend  $m_{\text{Hegglin},4}$  aus den FPH-Sonden ist deutlich positiver als sowohl  $m_{\text{Hegglin},3}$  aus den Satellitendaten und  $m_0$ ,  $m_2$  und  $m_3$  in dem Breitenband  $40^\circ \pm 5^\circ$  auf 100 hPa. Der Hauptgrund könnten hier – wie auch schon in Unterkapitel 5.3.1 erwähnt – lokale Unterschiede in den Wasserdampfmischungsverhältnissen oder ihrer Entwicklung sein, da die Satellitendatenreihen zonale Mittel sind und die FPH-Sonden direkt über Boulder messen.

Zusammenfassend kann man sagen, dass zwischen 20°S und 20°N bei 80 hPa sowohl für die kombinierte Zeitserie von HALOE und MIPAS als auch für  $m_{\text{Hegglin},1}$  negative Trends für Wasserdampfmischungsverhältnisse für eine ähnliche zeitliche Periode herauskommen. Allerdings wird bei  $m_{\text{Hegglin},2}$  innerhalb derselben Breitengrade der Trend positiver auf 100 hPa und bei der Mehrheit der Trends aus den Regressionen negativer. Im Allgemeinen sind die Trends für die zusammengeführten Satellitendaten  $m_{\text{Hegglin},n=1,2,3}$  betragsmäßig geringer (maximal  $|-0,064 \text{ ppmv/dec}|$ ) als vor allem die Trends aus den Regressionen, die den solaren Zyklus berücksichtigen (maximal  $|-0,382 \text{ ppmv/dec}|$ ). Man beachte – wie bereits oben erwähnt – die etwas unterschiedlichen Perioden, über welche die Trends bestimmt wurden.

Weitere Veröffentlichungen, in denen Trends in stratosphärischem Wasserdampf untersucht werden, sind zum Beispiel Oltmans et al. (2000) und Hurst et al. (2011). In ersterem werden deutlich positive Trends von etwa 0,5 ppmv/dec in Wasserdampfmessungen durch FPH-Sonden zwischen 1964 und 2000 über Boulder und Washington, D.C. festgestellt. In letzterem wird – wie schon in Unterkapitel 5.3.1 beschrieben – die Zeitreihe der Boulder-FPH-Messungen in verschiedene Phasen linearer Trends unterteilt und untersucht, sowie der Beitrag der  $\text{CH}_4$ -Oxidation zu den  $\text{H}_2\text{O}$ -Trends ermittelt.

### 6.1.2 Höhenprofile von Trends in $\text{H}_2\text{O}$

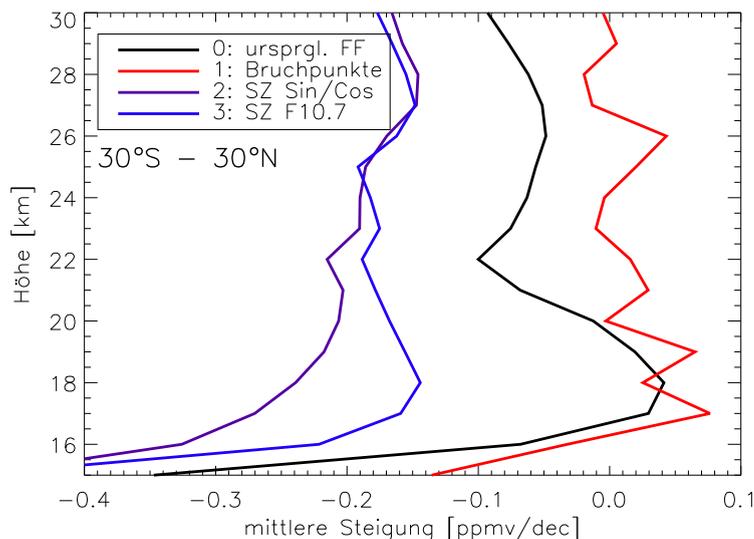


Abbildung 6.1: Höhenprofile der mittleren Steigungen (oder auch linearen zeitlichen Trends) zwischen 30°S und 30°N aus den vier verschiedenen Regressionsmodellen.

In Hurst et al. (2011) ist die Überlegung formuliert, dass bei Trends von Wasserdampf, die mit der Höhe positiver werden, eine Wasserdampfquelle eine Rolle spielen muss, welche im Ausmaß ihres Einflusses auf das  $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnis mit der

Höhe zunimmt, wie etwa die Oxidation von CH<sub>4</sub>. In Abbildung 6.1 ist untersucht worden, wie das Höhenprofil der in Abbildung 5.21 abgebildeten Steigungen der verschiedenen Regressionen zwischen 30°S und 30°N aussieht. Bei Regressionsansatz 1 ist ein Maximum der Steigung in einer Höhe von 17 km zu sehen und darüber nimmt es im Mittel leicht ab. Dieses Profil unterscheidet sich von den drei anderen Profilen und wird im Weiteren nicht in Betracht gezogen, da die einzelnen Steigungen bei diesem Ansatz gemittelte Steigungen der stückweise linearen Fits sind und nicht ein durchgehender Trend. Bei den Regressionsansätzen 0, 2 und 3 findet sich jeweils ein lokales Minimum bei 22 km. Der Anstieg der Steigungen oberhalb von 22 km könnte durch das mit der Zeit ansteigende Methan-Mischungsverhältnis und eine dadurch verstärkte Produktion von H<sub>2</sub>O kommen.

Die im letzten Unterkapitel erwähnten Trendbestimmungen von stratosphärischem Wasserdampf in Hegglin et al. (2014) zeigen ebenso wie hier festgestellt eine Tendenz zu mit der Höhe positiver werdenden Trends, vergleiche Abbildung 5a in dieser Veröffentlichung. Mehr zu der dort ebenso bestimmten Entwicklung des Beitrags der Methanoxidation zu stratosphärischem Wasserdampf findet sich in Unterkapitel 6.2.

## 6.2 Zusammenhang von CH<sub>4</sub> mit H<sub>2</sub>O

In Unterkapitel 5.5.6.1 wurden die Zusammenhänge zwischen Messungen von Methan an der Erdoberfläche aus dem CCGG-Netzwerk mit Zeitreihen von Residuen aus den Regressionen „0“ (mit der ursprünglichen Fitfunktion nach Gleichung 5.8) und „3“ (mit der Fitfunktion mit dem solaren Radioflussindex als Proxy für den solaren Zyklus nach Gleichung 5.12) untersucht. Bei der Berechnung der Korrelationskoeffizienten zwischen diesen beiden Zeitreihen wurde eine Einteilung der Daten in 2 Zeitperioden vorgenommen, um den vom Millenium-Drop verursachten Abfall in den Residuenzeitserien nicht in die Korrelation eingehen zu lassen. Der Grund für das Auslassen des Zeitraums des in den Residuen sichtbaren Abfalls im Wasserdampf-Mischungsverhältnis ist, dass mit großer Wahrscheinlichkeit der Millenium-Drop nicht durch Methan verursacht wurde, da in der Zeitserie der VMR-Werte von Methan zu dieser Zeit nichts Außergewöhnliches feststellbar ist.

Die Korrelationskoeffizienten  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{CH}_4(t))}^n(h)$  (für eine zeitlich unverschobene Zeitserie von Methan) und  $\rho_{(\text{Res}_i(t), \text{CH}_4(t, t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h)}))}^n(h)$  (für eine um den Term  $t'_{\text{V}_{\text{AOA}}}(h)$  (Definition siehe Unterkapitel 5.5.6.1) zeitlich verschobene CH<sub>4</sub>-VMR-Zeitreihe), mit  $i \in \{0, 3\}$  für die Regressionen „0“ und „3“ und  $n \in \{1, 2\}$  für die Phasen vor und nach dem Millenium-Drop, erreichen teils hohe positive Werte, wobei – vor allem in der ersten Phase, aber auch weniger ausgeprägt in der zweiten –  $\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t))}^n(h)$

und  $\rho_{(\text{Res}_0(t), \text{CH}_4(t, t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h))})}^n(h)$  größere Werte aufzeigen als die Korrelationskoeffizienten mit den Residuen aus Regression „3“. Eine Ursache hierfür ist, dass, wo in beiden Phasen die Anstiege der Residuen  $\text{Res}_0(t)$  zu hohen Korrelationskoeffizienten führen, der zusätzliche Term  $[\text{F10.7}(t + t_{\text{V}_{\text{SZ}}}(B, h))]$  in Regression „3“ einen Ausgleich herbeiführt, welcher die Anstiege von  $\text{Res}_3(t)$  und somit  $\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t))}^n(h)$  und  $\rho_{(\text{Res}_3(t), \text{CH}_4(t, t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h))})}^n(h)$  verringert. Ob ein Term zur Beschreibung des solaren Zyklus in den Regressionen Sinn macht, wird in Unterkapitel 6.4 näher erörtert.

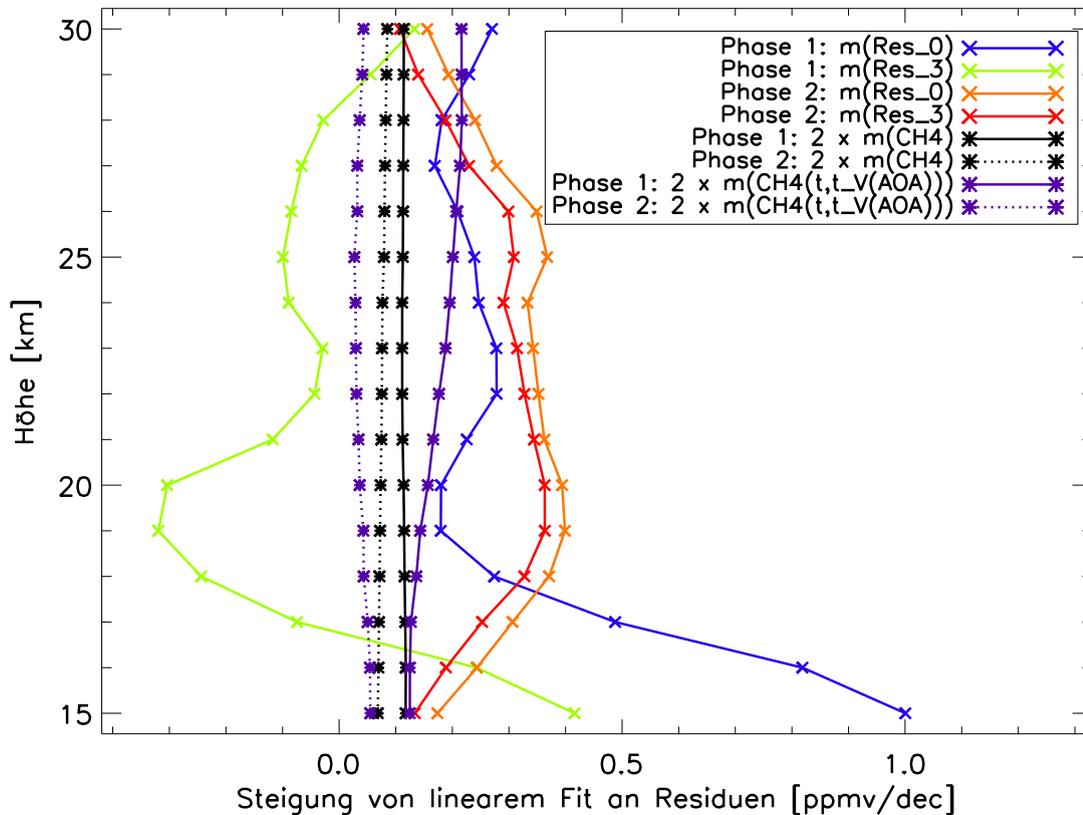


Abbildung 6.2: Steigungen  $m_{\text{Res}_i}^n(h)$  ( $i \in \{0, 3\}$  für Regression „0“ oder „3“ und  $n \in \{1, 2\}$  für die erste oder zweite Phase) von linearen Fits in den beiden Perioden vor bzw. nach dem Millenium-Drop an die Residuenzeitreihen aus den Regressionen „0“ und „3“. Die schwarzen und violetten Linien sind die verdoppelten Steigungen  $2 \cdot m_{\text{CH}_4(t)}^n(h)$  bzw.  $2 \cdot m_{\text{CH}_4(t, t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h)})}^n(h)$  von linearen Fits an die zeitlich unverschobene bzw. die zeitlich verschobene Methan-VMR-Zeitreihe, jeweils in den beiden Perioden.

Unter der Annahme, dass zumindest ein Teil der Residuen aufgrund der fehlenden Beschreibung des Einflusses der Methanoxidation auf  $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnisse zustande kommt, wird im Folgenden der Versuch einer Abschätzung der Änderung des Beitrags zu  $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnissen von der Methanoxidation bei steigenden Mischungsverhältnissen unternommen.

Um einen Eindruck von dieser potenziellen Änderung in der Methanoxidation

und hierdurch verursachten Änderung in den Mischungsverhältnissen von H<sub>2</sub>O zu gewinnen, wurden die Steigungen von linearen Fits an die Zeitreihe der Residuen in den beiden Phasen vor und nach dem Millenium-Drop bestimmt. Die Ergebnisse hiervon sind in Abbildung 6.2 gezeigt und werden mit den doppelten Steigungen  $2 \cdot m_{\text{CH}_4(t)}^n(h)$  bzw.  $2 \cdot m_{\text{CH}_4(t,t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h)})}^n(h)$  aus linearen Fits an die Methan-Mischungsverhältnisse in den verschiedenen Höhen verglichen. Man beachte hierbei, dass die CH<sub>4</sub>-VMR-Werte Mittelwerte aus Bodenmessungen sind und die Höhenabhängigkeit von  $m_{\text{CH}_4(t)}^n(h)$  der linearen Fits an die unverschobenen Methan-VMR-Zeitreihe lediglich durch die verschiedenen Zeiten des Millenium-Drops in unterschiedlichen Höhen zustande kommt und keine Daten aus größeren Höhen verwendet wurden. Die Höhenabhängigkeit von  $m_{\text{CH}_4(t,t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h)})}^n(h)$  linearer Fits an die verschobene CH<sub>4</sub>-VMR-Zeitreihe hängt zusätzlich noch von  $t'_{\text{V}_{\text{AOA}}}(h)$  ab. Bei einem Vergleich der Trends in den Residuen mit den in der Abbildung gezeigten Methan-VMR-Trends, mit dem Ziel, einen möglichen Beitrag der Methanoxidation zu den H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnissen abzuschätzen, wird implizit die Annahme gemacht, dass sich der Trend in den Methan-Mischungsverhältnissen von der Erdoberfläche bis in die Stratosphäre hinein nicht ändert. Dies muss nicht den Tatsachen entsprechen, da das Methanmischungsverhältnis vom Boden zur Tropopause hin abnimmt. Es ist aus den hier verwendeten Daten nicht ersichtlich, wie sich die Trends am Boden in größeren Höhen auswirken.

Was die Steigungen  $m_{\text{Res}_i}^n(h)$  angeht, sind bis auf  $m_{\text{Res}_3}^1(h)$  die Steigungen auf allen Höhenniveaus positiv, was mit der theoretischen Auswirkung eines Anstiegs im Mischungsverhältnis von Methan übereinstimmt. Nämlich man nun an, dass die am Boden bestimmten Steigungen der Mischungsverhältnisse von Methan sich in gleichbleibendem Ausmaß bis zur Stratosphäre hin fortpflanzten und dort pro Methan-Molekül durch Oxidation zwei Wasserdampf-Moleküle entstünden, dann wäre der zusätzliche Beitrag zu stratosphärischem Wasserdampf aufgrund von ansteigenden Methan-Mischungsverhältnisse so groß wie die in der Abbildung gezeigten Steigungen  $2 \cdot m_{\text{CH}_4(t)}^n(h)$  bzw.  $2 \cdot m_{\text{CH}_4(t,t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h)})}^n(h)$  im Mischungsverhältnis von CH<sub>4</sub>. Aber selbst diese obere Grenze für einen zusätzlichen Beitrag zu H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnissen würde nicht ausreichen, um die Steigungen in den Residuen  $m_{\text{Res}_i}^n(h)$  zu erklären, da – wie in der Abbildung zu sehen ist – in den meisten Höhen  $m_{\text{Res}_i}^n(h) > 2 \cdot m_{\text{CH}_4(t)}^n(h)$  bzw.  $m_{\text{Res}_i}^n(h) > 2 \cdot m_{\text{CH}_4(t,t'_{\text{V}_{\text{AOA}}(h)})}^n(h)$ .

In Abbildung 6.3 sind mittlere Profile von MIPAS-Messungen von Wasserdampf und Methan im Jahr 2009 zwischen 30°S und 30°N von 10 km bis 40 km Höhe gezeigt. Zudem sind die Steigungen der Mischungsverhältnisse beider Gase mit der Höhe zwischen 21 km und 31 km sowie zwischen 32 km und 40 km Höhe angegeben.

Man erkennt in dieser Abbildung, dass Methan in der Troposphäre ein näherungsweise konstantes Profil aufweist und nur sehr wenig von dem an der Erdoberfläche

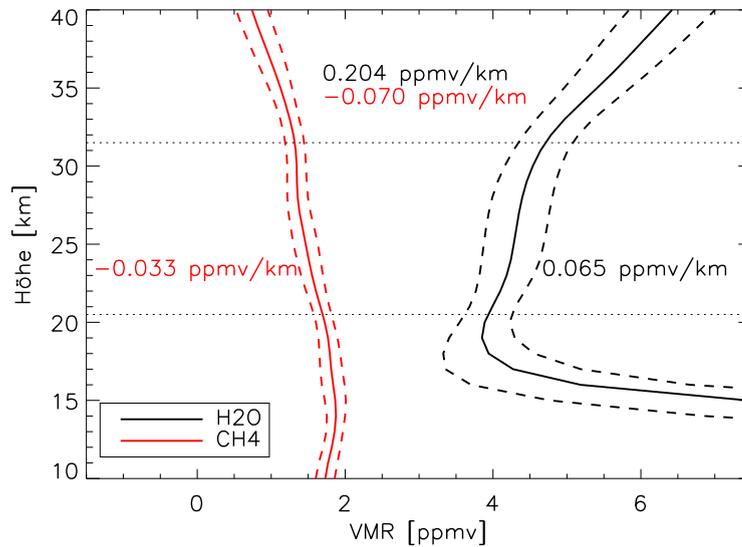


Abbildung 6.3: Mittlere Profile von MIPAS V5R\_CH4\_224- (vergleiche Plieninger et al.) und V5R\_H2O\_220-Daten, beispielhaft zwischen Januar 2009 und Dezember 2009, im Breitenbereich von 30°S und 30°N. Die gestrichelten Linien geben die Standardabweichungen in den Profilen an. Jeweils für Methan und Wasserdampf wurden die mittleren Steigungen der VMR-Werte der Gase mit der Höhe zwischen 21 km und 31 km sowie zwischen 32 km und 40 km angegeben, wobei sich die beiden Farben der gegebenen Steigungen jeweils auf das farblich entsprechende Gas beziehen.

emittierten Gas in diesen Höhenregionen durch chemische oder physikalische Einflüsse verloren geht (nach Stiller und Lossow (2014) sind die Mischungsverhältnisse von Methan in Tropopausenhöhe in tropischen Breiten im Mittel nur wenige Prozent geringer als am Erdboden). Da es in der mittleren Troposphäre keine Quellen für dieses Gas gibt, ist der leichte Anstieg von Methan zwischen 10 km und 14 km Höhe in der Abbildung auf Messungenauigkeiten oder auf Auswahleffekte aufgrund von nach unten hin begrenzten Gasprofilen wegen Wolkenbedeckung zurückzuführen. Oberhalb der Tropopause ( $\sim 17$  km) fängt die Methanoxidation erst langsam an. In größeren Höhen nimmt die Reaktionsgeschwindigkeit zu, was man sowohl an den Steigungen zwischen 21 km und 31 km bzw. 32 km und 40 km von Methan als auch an den entsprechenden Steigungen in Wasserdampf erkennt. Während der Höhengradient der Methan-VMR-Werte zwischen 21 km und 31 km  $m_{\text{CH}_4}(21 \text{ km} \rightarrow 31 \text{ km})$  ungefähr das erwartete Verhältnis von  $\frac{m_{\text{CH}_4}(21 \text{ km} \rightarrow 31 \text{ km})}{m_{\text{H}_2\text{O}}(21 \text{ km} \rightarrow 31 \text{ km})} \approx -1:2$  (Produktion von zwei  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekülen aus einem  $\text{CH}_4$ -Molekül) zu dem entsprechenden Höhengradienten der Wasserdampf-VMR-Werte  $m_{\text{H}_2\text{O}}(21 \text{ km} \rightarrow 31 \text{ km})$  aufzeigt, haben die beiden Steigungen oberhalb von 31 km Höhe ein Verhältnis von  $\frac{m_{\text{CH}_4}(32 \text{ km} \rightarrow 40 \text{ km})}{m_{\text{H}_2\text{O}}(32 \text{ km} \rightarrow 40 \text{ km})} \approx -1:2,9$ . Dies liegt – neben etwaigen Messfehlern – wahrscheinlich an der in diesen Höhen wichtiger werdenden Reaktion von  $\text{H}_2$  mit  $\text{OH}$ , was zu einer zusätzlichen Produktion von  $\text{H}_2\text{O}$  führt. Außerdem beeinflusst in diesen Höhen auch der Luftaustausch

mit höheren Breiten die VMR-Werte von Wasserdampf.

Obwohl in der Abbildung zu erkennen ist, dass die Methanmischungsverhältnisse in der Troposphäre fast konstant sind, wäre es sicher besser, in Abbildung 6.2 zonal zwischen 30°S und 30°N gemittelte Steigungen von CH<sub>4</sub>-Mischungsverhältnissen in Tropopausenhöhe zu verwenden. In der Höhe der Tropopause spielt die Oxidation von Methan noch eine untergeordnete Rolle und außerdem würde so das in der Troposphäre verlorene Methan gar nicht erst beachtet und man würde den Trend im VMR von Methan bei Eintritt in die Stratosphäre verwenden.

Bei den in Unterkapitel 6.1.1 beschriebenen Trendbestimmungen in Wasserdampf in Hegglin et al. (2014) werden solche VMR Werte von Methan bei Eintritt in die Stratosphäre verwendet und deren Beitrag zu der Entwicklung von Wasserdampf in der Stratosphäre bestimmt. Aufgrund der Darstellung in prozentualer Veränderung in Wasserdampf aufgrund der Zunahme von Methan können die von Methan verursachten Steigungen nicht mit der hier vorgenommenen Abschätzung für eine maximale Zunahme des Beitrags verglichen werden. Es ist jedoch in Abbildung 5b dieser Veröffentlichung eine Zunahme des Beitrags der Methanoxidation zu stratosphärischem Wasserdampf mit zunehmender Höhe ersichtlich.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Residuen der Regressionsanalyse der Wasserdampfzeitserien wohl zu einem gewissen Grad durch die nicht in den Fitfunktionen enthaltenen Beiträge der Methanoxidation in der Stratosphäre erklärt werden könnten. Die Abschätzung eines maximal möglichen Beitrags des Trends von Methan zu einem Trend in den Mischungsverhältnissen von Wasserdampf (vergleiche Abbildung 6.2) führt aber zu dem Ergebnis, dass lineare Trends in den Residuen aus den Regressionen bezüglich der kombinierten H<sub>2</sub>O-Zeitserie zu groß sind, um komplett durch den Anstieg in atmosphärischem Methan erklärt werden zu können. Der nicht erklärte Anteil an der Zunahme der Wasserdampf-Residuen mit der Zeit in den beiden Perioden muss aufgrund anderer in den Fitfunktionen der Regressionen nicht einbezogener atmosphärischer Einflüsse oder Messfehlern der Instrumente zustande kommen. Die in Abbildung 5.30 gezeigten teilweise (vor allem bei den Residuen der Regression „0“) dennoch hohen positiven Korrelationskoeffizienten zwischen der Methan-VMR-Zeitreihe und den Residuen, könnten zustande kommen aufgrund der Identitätsbeziehung  $\rho(f(x), c_1 + c_2 \cdot g(x)) = \rho(f(x), g(x))$ , mit  $c_1$  und  $c_2$  als beliebigen Parametern (für die Herleitung siehe Gleichung B.1 in Anhang B). Dies bedeutet also, dass insbesondere die Skalierung einer Funktion mit einem Vorfaktor keine Auswirkung auf das Ergebnis für den Korrelationskoeffizienten zwischen dieser Funktion und einer anderen auf dem gleichen x-Gitter vorgegebenen Funktion hat. Am Beispiel hier bedeutet dies, dass trotz der teils hohen Korrelationskoeffizienten dennoch ein quantitativer Zusammenhang nur teilweise gegeben sein kann.

### 6.3 Zusammenhang der BDC mit H<sub>2</sub>O

Die Ergebnisse bezüglich eines höhenabhängigen Vergleichs des zwischen 30°S und 30°N gemittelten Proxies für die BDC, welcher aus den Heizraten aus der MERRA Reanalyse auf einem Druckniveau von 82 hPa ( $\sim 17,8$  km) besteht, mit Residuen aus den Regressionen „0“ und „3“, sind in Unterkapitel 5.5.6.2 detailliert beschrieben.

Bei diesen Vergleichen wurden Antikorrelationen erwartet, da größere Heizraten mit schnellerem Aufstieg von Luft einhergehen, was wiederum Abkühlung durch adiabatisches Ausdehnen zur Folge hat. Dieser Effekt führt in Tropopausenhöhe zu Anomalien in den Tropopausentemperaturen, wodurch das Mischungsverhältnis von Wasserdampf bei Eintritt in die Stratosphäre kontrolliert wird. Wie in Unterkapitel 2.7 beschrieben, entstammt das Signal einer jährlichen Oszillation der Temperaturen in der TTL zum großen Teil den Schwankungen in der Stärke des Aufwärtstransports, also der BDC. Die BDC könnte außerdem mit der QBO gekoppelt sein, da beide zumindest zum Teil von den gleichen extratropischen Wellen angetrieben werden.

Die mittleren Korrelationskoeffizienten bei diesem Vergleich betragen für die Residuen aus Regressionsmodell „0“  $\sim -0,17$  und bei dem Vergleich mit den Residuen aus Regressionsmodell „3“  $\sim -0,24$ , jeweils bei dem Vergleich dieser Zeitreihen mit dem zeitlich verschobenen BDC-Proxy.

Es ist anzunehmen, dass ein Grund dafür, dass keine negativeren Korrelationskoeffizienten auftreten, die oben erwähnte Kopplung der BDC an die in den Regressionsmodellen enthaltene Beschreibung der QBO ist. Es wäre zu überlegen, ob man die Terme der jährlichen Oszillation und deren Oberschwingungen, durch einen Term für die BDC ersetzt, da die jährliche Oszillation in den Tropopausentemperaturen erst aufgrund der BDC entsteht. Auch könnte im Falle eines Terms für die BDC in einer Regression getestet werden, wie sich ein Weglassen des die QBO beschreibenden Terms in dem Höhenbereich ab der TTL bis etwa 22 km Höhe auswirken würde, aufgrund der oben erwähnten Kopplung dieser beiden atmosphärischen Phänomene.

### 6.4 Zusammenhang von solarem Zyklus und H<sub>2</sub>O

Aufgrund der deutlichen Verbesserung der RMS-Werte bei den Regressionen, welche Terme zur Beschreibung des elfjährigen Sonnenfleckenzyklus enthalten und des zusätzlichen Auftretens eines zweiten Abfalls in den Wasserdampfmischungsverhältnissen etwa elf Jahre nach dem Millennium-Drop, stellt sich die Frage, inwieweit der solare Zyklus diese Abfälle in den Mischungsverhältnissen beeinflusst und welche Mechanismen dabei eine Rolle spielen könnten.

---

### 6.4.1 Potentielle Auswirkungen des solaren Zyklus auf ENSO und darüber auf H<sub>2</sub>O

Bislang ist keine treibende Kraft bekannt, welche eine langfristige Vorhersage von ENSO-Ereignissen möglich machen würde, da die bekanntermaßen ENSO beeinflussenden Windströmungen über dem Pazifik nicht über einen längeren Zeitraum hinweg vorausgesagt werden können.

In Landscheidt (2000) wird jedoch ein möglicher Zusammenhang zwischen ENSO und dem solaren Zyklus erörtert, wobei entweder El Niño oder La Niña Ereignisse nach einem sich wiederholenden Muster zu dem Zeitpunkt eines Bruchteils von 0,39 der zunehmenden Phase (Dauer dieser Phase etwa 4,3 Jahre) des solaren Zyklus sowie der abnehmenden Phase (Dauer dieser Phase etwa 6,7 Jahre) des solaren Zyklus auftreten. Hierbei tritt immer dasselbe Ereignis – also entweder nur El Niño oder nur La Niña – zu diesen Zeitpunkten auf, bis zu markanten Zeitpunkten einer Störung in der zeitlichen Änderung des Drehmoments der Sonne bezüglich des Massenschwerpunkts vom Sonnensystem (Englisch: **P**erturbation in the **T**orque **C**ycle, PTC), welche quasi-periodisch im Mittel alle 35,8 Jahre auftreten. Zu diesen Zeitpunkten wechselt die Relation zwischen den besagten Zeitpunkten in den Phasen des Anstiegs und Absinkens des solaren Zyklus und dem einen Ereignis von ENSO zu dem jeweils anderen ENSO-Ereignis (also von El Niño zu La Niña bzw. umgekehrt). Eine Darstellung des Southern Oscillation Index (SOI, gibt den Druckgradienten zwischen West- und Ostpazifik an) zwischen 1950 und 2000 mit Markierungen zu den Zeiten der Bruchteile von 0,39 der Anstiegs- bzw. Absinkphase des solaren Zyklus, zeigt ein konsistentes Auftreten von La Niña Ereignissen bei diesen Markierungen zwischen 1950 und 1968. In letzterem Jahr trat die PTC ein. Zwischen 1968 und 2000 zeigen die Markierungen konsistent auf El Niño Ereignisse. In der Veröffentlichung wird eine Hypothese für den Grund aufgestellt, warum die ENSO-Ereignisse bei einem Wert von 0,39 des Bruchteils der Phase auftreten. Diese Hypothese besagt, dass starke Sonneneruptionen unter Lichtemission im Frequenzbereich von Röntgenstrahlung signifikant gehäuft in einem Intervall einer Größe von 23 % der normierten Dauern der ansteigenden und absinkenden Phasen des solaren Zyklus auftreten, wobei diese Häufung um die besagten 0,39 der verschiedenen Phasen des solaren Zyklus herum liegt und dass diese Eruptionen Einfluss auf ENSO ausüben könnten. Hierzu wurden Sonneneruptionen zwischen 1970 und 1998 untersucht. Im Weiteren wird geschrieben, es gäbe Indizien dafür, dass die starken solaren Protonenereignissen (Englisch: solar **p**roton event, SPE) sowie Auswurf koronaler Masse, welche nahezu immer mit den Sonneneruptionen mit Röntgenemission einhergehen, einen starken Effekt auf die Wolkenbedeckung über den Ozeanen haben könnte und dann die Hypothese aufgestellt, dass indirekt, über den Effekt auf die Wolkenbedeckung, die Druckverteilung in den Ozeanen und somit ENSO beeinflusst werden könnte.

---

Wäre dieser Zusammenhang tatsächlich gegeben, so könnte durch den Umweg über ENSO der stratosphärische Wasserdampf vom solaren Zyklus beeinflusst werden und unter Umständen durch das Auftreten von ENSO nicht zu den Zeitpunkten der Extrema des solaren Zyklus, sondern dazwischen, auch teilweise der Verschiebungsterm  $t_{V_{SZ}}(B, h)$  erklärt werden. Es ergeben sich jedoch einige Unstimmigkeiten bei dieser Erklärung:

1. Der ENSO-Term  $F_{\text{ENSO}}(t, t_{V_{\text{AOA}}}(B, h))$  ist in allen Regressionsansätzen enthalten und sollte – falls es einen nennenswerten Beitrag von ENSO und über ENSO von dem solaren Zyklus gibt – zum Beispiel schon bei der ursprünglichen Regression nach Gleichung 5.8 zu konsistenteren Ergebnissen führen. Wie man aber in Abbildung 5.25 sieht, ist bei keinem der Regressionsansätze ein Muster in den „Amplituden“ dieses Terms vorhanden, wie man es erwarten würde. Es kann sein, dass hierbei der Verschiebungsterm  $t_{V_{\text{AOA}}}(B, h)$  aufgrund des Luftalters die zeitlich verzögerten Auswirkungen von ENSO in den verschiedenen Breiten-Höhen-Bins nicht richtig widerspiegelt.
2. Laut den Ergebnissen von Landscheidt (2000) sollte der Effekt von ENSO im Mittel alle 5,5 Jahre in dieselbe Richtung gehen, falls keine PTC auftritt und damit sollte etwa bei der Regression mit  $F_{\text{SZ},\sin/\cos}(t)$  eher die Amplitude der Sinus-/Cosinusschwingung mit einer Periodendauer von 63 Monaten dominieren und nicht jene mit einer Periodendauer von 127 Monaten. Dies ist jedoch nicht der Fall. Es konnte allerdings nicht festgestellt werden, wann die nächste PTC nach derjenigen von 1968 aufgetreten ist. Nach der gegebenen Zeitdauer zwischen je zwei solcher Ereignisse von 35,8 Jahren sollte das etwa 2003/2004 passiert sein.
3. Sollte die im letzten Punkt erwähnte PTC etwa 2001 oder etwas später aufgetreten sein und würde dies einen Wechsel in dem Auftreten von El Niño und La Niña zu oben genannten Zeitpunkten während des Ansteigens und Absinkens des solaren Zyklus bedeuten, so wäre es möglich, dass in dem Zeitraum der HALOE- und MIPAS-Messungen aus diesem Grund in der Regression der 127 monatige Term dominiert. Dies geschähe aus dem in Unterkapitel 2.7 erwähnten Grund, dass der Effekt von ENSO auf den Wasserdampf in der TTL über eine Modulation der Cold Point Temperatur für El Niño und La Niña umgekehrt ist. Dies wäre allerdings weder ein Grund für den Millennium-Drop, noch für den Abfall der stratosphärischen  $\text{H}_2\text{O}$ -Werte 2011/2012.

Es stellt sich die Frage, warum bei allen vier Ansätzen für die Regressionen kein plausibler Zusammenhang von ENSO mit Wasserdampf herausgekommen ist. Der in Punkt 1. der Aufzählung genannte Grund, dass möglicherweise der Term  $t_{V_{\text{AOA}}}(B, h)$

die Verzögerung in dem Effekt von ENSO auf Wasserdampf nicht akkurat wiedergibt, könnte untersucht werden, indem man jeden Lauf einer Regression für ein Breiten-Höhen-Bin für eine Anzahl verschiedener monatlicher Verschiebungen macht und dann diejenige Verschiebung wählt, welche das geringste  $\chi^2$  bzw. RMS zwischen Fit und Messdaten zur Folge hat.

Alles in allem ist es unwahrscheinlich, dass eine indirekte Beeinflussung des stratosphärischen Wasserdampfs durch den solaren Zyklus über ENSO sowohl die Ergebnisse in den Regressionen bezüglich der ENSO-„Amplituden“ als auch den Millenium-Drop verursacht. Dazu ist die Breiten-Höhen-Verteilung der ENSO-„Amplituden“ zu wenig systematisch und bezüglich des H<sub>2</sub>O-Abfalls wäre außerdem ein extremes ENSO-Ereignis notwendig, um einen so drastischen und vor allem auch langanhaltenden Einfluss auf stratosphärischen Wasserdampf zu haben. Wie auch in Unterkapitel 6.5.2 geschrieben, zeigen Ergebnisse des Modells WACCM eine zeitliche Verzögerung der Auswirkung von El Niño Ereignissen in der unteren Stratosphäre (Abbildung 8a und 9 in Calvo et al. (2010)), welche zeitlich so abgestimmt sein könnte, dass eine Erhöhung des dortigen Wasserdampfs ungefähr zwischen zwölf und 24 Monaten nach dem Maximum des El Niño Ereignisses verursacht und danach eine negative Anomalie bewirkt wird.

Wenn man diese Modellergebnisse auf das El Niño Ereignis zwischen Mitte 1997 und Mitte 1998 überträgt, könnte der Übergang nach etwa 24 Monaten zur negativen Anomalie zum Millenium-Drop zumindest beitragen. Diese Modellergebnisse sind unabhängig vom solaren Zyklus, lassen also über den Weg von solarem Zyklus zu ENSO zu Wasserdampf keine Schlüsse zu. Als Schlussfolgerung aus diesen Ergebnissen kann man ziehen, dass Untersuchungen hinsichtlich eines verzögerten Effekts von ENSO-Ereignissen in der unteren Stratosphäre in Messdaten durchgeführt werden sollten. Darüber hinaus sollte noch eine unabhängige Untersuchung über einen Zusammenhang zwischen dem solaren Zyklus und ENSO-Ereignissen vorgenommen werden.

### 6.4.2 Beeinflussung der Cold Trap Temperatur durch den solaren Zyklus

Holton und Gettelman (2001) schreiben, dass selbst troposphärische Luft, welche in die TTL (für Definition und Höhenbereich der TTL, siehe Unterkapitel 2.5) über Breiten- und Längengraden eindringt, über denen der Cold-Point der Temperaturprofile eher warm ist, dennoch in Regionen transportiert werden kann, wo die Temperaturen deutlich kälter sind. Dies geschieht durch den – im Vergleich zum langsamen vertikalen Aufsteigen – schnellen horizontalen Transport der Luft in der TTL. Über der Region des „Warm Pool“ (Region in der Umgebung von Indonesien bzw.

---

allgemein der westliche Pazifik mit extrem hohen SST, vergleiche Unterkapitel 2.5) mit extrem niedrigen Tropopausentemperaturen („Cold Trap“) befindet sich für einen großen Teil der in die Stratosphäre transportierten troposphärischen Luft der kälteste Punkt ihrer Transportwege. Das Sättigungsmischungsverhältnis von gasförmigem H<sub>2</sub>O ist hier sehr gering und diese Luft besitzt nur noch ein geringes Mischungsverhältnis von Wasserdampf. Danach steigt diese Luft weiter in die Stratosphäre auf. Dies führt zu den extrem niedrigen H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnissen in der unteren Stratosphäre. Dies belegen die Autoren durch retrospektive Berechnung von Trajektorien von Luftpaketen durch die TTL aus Pfister et al. (2001). Diese Hypothese erklärt das vermeintliche Paradoxon der sehr niedrigen Wasserdampfmischungsverhältnisse in der unteren Stratosphäre, welche ungefähr dem Sättigungsmischungsverhältnis bei Cold Trap Temperaturen entsprechen, und der Tatsache, dass in der TTL oberhalb des Warm Pool die Luft im Mittel absinkt und somit ohne weiteren horizontalen Transport nicht in die Stratosphäre gelangen könnte.

In Krüger et al. (2008) werden mit opECMWF- (**o**perational analyses of the **E**uropean **C**entre for **M**edium **R**ange **W**eather **F**orecast, Simmons et al. (2005)) und ERA40-Daten (ECMWF Reanalyse über 40 Jahre, Uppala et al. (2005)) ähnliche Untersuchungen wie in der letztgenannten Veröffentlichung vorgenommen. Es werden aus der Lagrange-Perspektive Trajektorien von Luftpaketen in verschiedenen Zeiträumen zwischen 1962 und 2004 berechnet und damit Langzeitklimatologien von im Mittel drei Monate dauernden Transportprozessen durch die TTL zwischen 40°S und 40°N in 5° Längen-Bins bestimmt. Bei fünf verschiedenen Ansätzen mit unterschiedlich berechneten Feldern von vertikalen Windgeschwindigkeiten zeigt sich, dass ein großer Anteil (34 %, 51 %, 56 % 59 % und 63 % bei den fünf Ansätzen) der „Lagrange-Cold-Points“ (LCP: der Ort einer Trajektorie, an dem die kälteste Temperatur entlang des Wegs herrscht) zwischen 120° Ost und 180° Ost liegen. Dieses Ergebnis bestätigt die Aussagen von Holton und Gettelman (2001). Im Weiteren untersuchen Krüger et al. (2008) durch Analyse von LCP, welche mit ERA40-Daten (1962-2001) berechnet wurden, den Einfluss von natürlichen Signalen auf die LCP und finden unter anderem (vergleiche Unterkapitel 2.7) einen Zusammenhang zwischen dem solaren Zyklus und den LCP in einer Weise, dass die LCP beim Maximum des solaren Zyklus über dem westlichen Pazifik (also dem Warm Pool) um ca. 1 K unterhalb des Mittelwerts liegen und oberhalb des östlichen Pazifik um 2 K bis 3 K wärmer sind als der Mittelwert (vergleiche Unterkapitel 2.7). Ein gegensätzliches Signal findet sich beim Minimum des solaren Zyklus, mit etwas geringeren Temperaturunterschieden über dem westlichen und östlichen Pazifik. Als Grund für diese asymmetrische Auswirkung des solaren Zyklus auf die TTL wird eine Verschiebung der Walker-Zirkulation in westliche Richtung während des solaren Maximums in Betracht gezogen.

Es ergibt sich in den Studien von Krüger et al. (2008) ein Unterschied von etwa

---

2 K in der Cold Trap Temperatur bzw. in den LCP in der TTL oberhalb des Warm Pool, wobei bei solarem Maximum diese Temperatur um  $\sim 1$  K kälter und bei solarem Minimum um  $\sim 1$  K wärmer ist als der Mittelwert, was – unter Annahme einer annähernd sinusförmigen Auswirkung des solaren Zyklus auf die CPT – einer Amplitude von etwa 1 K entspricht. Dieses Ergebnis würde dem in Abbildung 5.18 gezeigten Ergebnis aus den Analysen der Regressionen entsprechen, dass die Proxydaten für den solaren Zyklus mit seiner Auswirkung auf den stratosphärischen Wasserdampf negativ korreliert sind. Allerdings lassen sich hiermit nur bedingt die in der gleichen Abbildung (Mitte links) gezeigten notwendigen zeitlichen Verschiebungen des Proxysignals erklären (mehr hierzu s. u.).

Nr.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{min}}$ [ppmv]	3,32	2,83	3,56	2,99	3,24	3,31	3,67	3,13	2,83
$\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{max}}$ [ppmv]	4,40	4,32	4,53	4,59	4,56	4,38	4,70	4,23	4,16
$\Delta\text{H}_2\text{O}$ [ppmv]	1,077	1,496	0,969	1,597	1,320	1,066	1,036	1,103	1,339
$T_{\text{CP},\text{min}}$ [K]	188,92	187,46	189,34	188,64	189,09	188,25	190,28	188,43	186,98
$T_{\text{CP},\text{max}}$ [K]	195,41	195,97	195,78	196,9	196,35	194,49	196,25	195,16	195,48
$\Delta T_{\text{CP}}$ [ppmv]	6,49	8,51	6,44	8,26	7,26	6,24	5,97	6,73	8,50
$\frac{\Delta\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}}{\Delta T_{\text{CP}}}$ [ $\frac{\text{ppmv}}{\text{K}}$ ]	0,166	0,176	0,150	0,193	0,182	0,171	0,174	0,164	0,158
$\frac{\Delta\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}}{\Delta T_{\text{CP}}}$ [ $\frac{\text{ppmv}}{\text{K}}$ ]	$0,170 \pm 0,013$								

Tabelle 6.2: Lokale Minima und Maxima von zonalen Mitteln zwischen 10°S und 10°N, beginnend 08/2004 bis 06/2014, von Zeitserien der H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnisse (zwischen 100 hPa und 55 hPa) und Tropopausentemperaturen (bzw. Cold Point Temperaturen) aus MLS/AURA-Daten. Die Spalten zählen die festgestellten lokalen Minima und Maxima in diesem Zeitraum.  $\Delta\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}$  und  $\Delta T_{\text{CP}}$  sind die Unterschiede zwischen Minimum und Maximum in jeder Spalte. Unter der Annahme keiner anderen Quelle für H<sub>2</sub>O in diesem Bereich der Atmosphäre als dem Transport aus der Troposphäre in die Stratosphäre ist  $\frac{\Delta\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}}{\Delta T_{\text{CP}}}$  die Änderung von  $\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}$  bezüglich der Änderung von  $T_{\text{CP}}$  zwischen dem jeweiligen Minimum und Maximum.  $\frac{\Delta\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}}{\Delta T_{\text{CP}}}$  ist das Mittel über diese Werte, wobei die Unsicherheit dieses Wertes mit einer Standardabweichung angegeben ist.

Um einen möglichen Effekt dennoch zumindest grob quantifizieren zu können, wurden jene MLS/AURA-Daten für das Wasserdampfmischungsverhältnis und die Temperatur verwendet, welche den MLS/AURA-Kurven in Abbildung 5.7 zugrunde liegen. Die MLS-Daten wurden in diesem Fall den MIPAS-Daten vorgezogen, da bekanntermaßen der Jahresgang in Tropopausenhöhe in den MIPAS-Daten eine kleiner Amplitude aufweist als die meisten anderen Instrumente, was für die folgende Abschätzung eine Rolle spielt. Wie in Tabelle 6.2 gezeigt, ist der mittlere Zusammenhang zwischen  $10^\circ\text{S}$  und  $10^\circ\text{N}$  von MLS- $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnissen (zwischen 100 hPa und 55 hPa, entspricht in diesen Breiten etwa 17 km bis 20 km Höhe) und MLS-Tropopausentemperaturen als  $\frac{\Delta\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}}{\Delta T_{\text{CP}}} = 0,170 \frac{\text{ppmv}}{\text{K}} \pm 0,013 \frac{\text{ppmv}}{\text{K}}$  bestimmt worden, das heißt im Mittel geht mit einer Änderung der mittleren Tropopausentemperaturen zwischen  $10^\circ\text{S}$  und  $10^\circ\text{N}$  von 1 K eine Änderung des Mischungsverhältnis von  $\text{H}_2\text{O}$  zwischen  $10^\circ\text{S}$  und  $10^\circ\text{N}$  und 100 hPa und 55 hPa von  $0,170 \text{ ppmv} \pm 0,013 \text{ ppmv}$  einher. Die Änderung der Cold Trap Temperatur von 2 K von solarem Minimum zu solarem Maximum hätte nach dem Wert von  $\frac{\Delta\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}}{\Delta T_{\text{CP}}}$  eine Änderung des Wasserdampfmischungsverhältnis von 0,34 ppmv zur Folge, was bei einer sinusförmigen Auswirkung des solaren Zyklus auf die VMR-Werte von  $\text{H}_2\text{O}$  einer Amplitude von  $A_{\text{SZ,schätz}} = 0,17 \text{ ppmv}$  entspräche. Die in Abbildung 5.26 dargestellten „Amplituden“ der Terme  $F_{\text{SZ,sin/cos}}(t)$  bzw.  $F_{\text{SZ,F10.7}}(t, t_{\text{V}_{\text{SZ}}}(\text{B}, h))$  aus den Regressionen, betragen zwischen 17 km und 20 km und zwischen  $10^\circ\text{S}$  und  $10^\circ\text{N}$  im Mittel  $A_{\text{SZ,sin/cos}} = 0,4 \text{ ppmv}$  bzw.  $A_{\text{SZ,F10.7}} = 0,33 \text{ ppmv}$ , sind also 2-2,5mal so groß, wie der Effekt nach den obigen Abschätzungen sein sollte. Allerdings ist der wahre Unterschied zwischen Abschätzung und den Ergebnissen aus der Regression sogar noch größer, da sich die Abschätzung von  $A_{\text{SZ,schätz}}$  auf ein zonales Mittel bezieht, und der Unterschied von 2 K lediglich in der Cold Trap Region auftritt, wo die Tropopausentemperaturen deutlich geringer sind als über anderen Breiten- und Längengraden.

Falls man von einer relativen Luftfeuchtigkeit über Eis von  $\text{RH}_i = 1$  ausgeht, sind die Auswirkungen einer Änderung  $\Delta T_{\text{CP}}$  auf  $\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}$  von der Ausgangstemperatur abhängig. Dies erkennt man anhand des Sättigungsdampfdrucks über Eis  $e_i$  in Abhängigkeit von der Temperatur, welcher mittels der Gleichung von Goff und Gratch (siehe für die Gleichung und weiterführende Literatur Website im Literaturverzeichnis, verfasst von Vömel (2011) oder in einer leichten Abwandlung in Murphy und Koop (2005)) berechnet werden kann:

$$\begin{aligned} \log_{10}(e_i) &= -9,09718 \left( \frac{273,16 \text{ K}}{T} - 1 \right) - 3,56654 \log_{10} \left( \frac{273,16 \text{ K}}{T} \right) + \\ &\quad + 0,876793 \left( 1 - \frac{T}{273,16 \text{ K}} \right) + \log_{10}(6,1071) \\ e_i &= 10^{\log_{10}(e_i)} \text{ hPa} \end{aligned} \quad (6.1)$$

Hieraus lassen sich unter Annahme eines Gesamtdrucks  $p_{\text{ges}} = 100 \text{ hPa}$  in Tropopausenhöhe durch die Relation  $\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{ges}}} 10^6 \text{ ppmv}$  zwischen dem Mischungsverhältnis von Wasserdampf  $\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O}}$ , dem Wasserdampfpartialdruck  $p_{\text{H}_2\text{O}}$  und  $p_{\text{ges}}$  das Sättigungsmischungsverhältnis  $\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{sätt},100 \text{ hPa}}(T)$  ableiten, wie in Tabelle 6.3 gezeigt.

T [K]	180	182	184	186	188	190	192	194
$\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{sätt},100 \text{ hPa}} \text{ [ppmv]}$ $\cong e_i \text{ [} 10^4 \text{ hPa]}$	0,538	0,781	1,127	1,612	2,290	3,227	4,516	6,279

Tabelle 6.3: Sättigungsmischungsverhältnis  $\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{sätt},100 \text{ hPa}}(T)$  nach Goff und Gratch über Eis für den Sättigungsdampfdruck über Eis  $e_i$  (siehe Gleichung 6.1), mit  $\text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{sätt},100 \text{ hPa}}(T) = \frac{e_i}{100 \text{ hPa}} 10^6 \text{ ppmv}$ .

Wie man an der Tabelle erkennt, werden die Differenzen  $\Delta \text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{sätt},100 \text{ hPa}}$  bei jedem der 2 K Temperaturschritte größer und daher ist der wirkliche Effekt der während des solaren Zyklus um 2 K schwankenden Cold Trap Temperatur kleiner als  $A_{\text{SZ,schätz}}$ . Dazu kommt noch, dass mit (im Mittel über die fünf Ansätze aus Krüger et al. (2008), siehe oben) knapp über 50 % der LCP zwar ein großer Anteil des Transports von Luft in die Stratosphäre durch die Cold Trap vonstatten geht, jedoch die andere Hälfte der Luft an anderen, wärmeren Orten der Atmosphäre den LCP während ihres Transports erreicht, wo der Effekt auf den Wasserdampf bei 2 K Unterschied in der Tropopausentemperatur zwar theoretisch größer wäre, aber wo das Signal des solaren Zyklus bezüglich  $T_{\text{CP}}$  laut Krüger et al. (2008) entweder keinen, oder sogar einen umgekehrten Einfluss (über dem östlichen Pazifik) auf die Tropopausentemperaturen ausübt.

Würde man  $\Delta \text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{sätt},100 \text{ hPa}}(\overline{T_{\text{CP,max}}}, \overline{T_{\text{CP,min}}})$  über die Gleichung von Goff und Gratch für die mittleren Werte für die Minima  $\overline{T_{\text{CP,min}}} = 188,599 \text{ K}$  und Maxima  $\overline{T_{\text{CP,max}}} = 195,754 \text{ K}$  der MLS- $T_{\text{CP}}$ -Messungen berechnen, so erhielte man  $\Delta \text{VMR}_{\text{H}_2\text{O},\text{sätt},100 \text{ hPa}}(\overline{T_{\text{CP,max}}}, \overline{T_{\text{CP,min}}}) = 8,34 \text{ ppmv} - 2,54 \text{ ppmv} = 5,8 \text{ ppmv}$  für den mittleren Jahresgang (unter Vernachlässigung anderer in dieser Höhe schwächerer Einflüsse wie SAO, QBO etc.). Hierbei vernachlässigt man aber sowohl die

Tatsache, dass ca. 50% der Trajektorien ihren LCP in der Cold Trap haben, als auch dass nicht alle in die Stratosphäre transportierten Luftpakete mit Wasserdampf gesättigt sein müssen.

Es besteht aber trotz allem die Möglichkeit, dass der in Krüger et al. (2008) beschriebene Effekt des solaren Zyklus auf  $T_{CP}$  in der Cold Trap sich stärker bemerkbar machen könnte. Der Effekt von  $\sim +1$  K bei solarem Minimum könnte sich mit dem Jahresgang überlagern und die in den Monaten JJA ohnehin schon höheren Temperaturen in der Tropopause weiter erhöhen. Genauso kann umgekehrt die um  $\sim 1$  K niedrigere Temperatur bei solarem Maximum die niedrigen DJF- $T_{CP}$  weiter senken, wodurch der Effekt weiter verstärkt würde.

Zusammenfassend kann man sagen, dass über die in Krüger et al. (2008) beschriebene Auswirkung des solaren Zyklus auf die Temperaturen bei den LCP von Trajektorien durch die Cold Trap, die Ergebnisse für Phase und Amplitude von  $F_{SZ,\sin/\cos}(B, h, t)$  bzw.  $F_{SZ,F10.7}(B, h, t, t_{V_{SZ}}(B, h))$  aus den Regressionen teilweise erklärt werden könnten. Dies gilt für die Phase insoweit, dass die „Richtung“ der Auswirkung des solaren Zyklus auf Wasserdampf in der unteren tropischen Stratosphäre übereinstimmt, also dass bei solarem Maximum  $H_2O$  niedriger wäre und bei solarem Minimum höher. Die zeitliche Verschiebung  $t_{V_{SZ}}(B, h)$  kann jedoch nur bedingt durch den langsamen Transport von Luft in die höhere Stratosphäre erklärt werden, da die Abbildungen 5.9 und die mittlere linke Darstellung in Abbildung 5.18 nur qualitativ, jedoch im Detail nicht quantitativ übereinstimmen. Vor allem in den Breiten-Höhen-Bins zwischen  $30^\circ S$  und  $30^\circ N$  in Höhen von 17 km bis 18 km betragen die Luftalter im Mittel etwas weniger als zwei Jahre, während  $t_{V_{SZ}}(30^\circ S \leq B \leq 30^\circ N, 17 \text{ km} \leq h \leq 18 \text{ km})$  im Mittel etwa drei bis vier Jahre beträgt.

Was die Amplitude der Auswirkung des solaren Zyklus auf  $H_2O$  angeht, ist es nicht auf eine triviale Art und Weise abzuschätzen, wie stark sich die Änderung von  $T_{CP}$  in der Cold Trap auf den Wasserdampf in der unteren Stratosphäre theoretisch auswirken müsste, da hierbei viele Faktoren eine Rolle spielen. Theoretisch wäre eine solche Untersuchung aber möglich, wenn man eine globale, auch längengrad aufgelöste, Zeitserie von  $H_2O$  in der TTL mit jahreszeitlichen Klimatologien von Breitengrad-Längengrad-Verteilung der LCP von Trajektorien, welche aus der Troposphäre in die Stratosphäre führen, gewichten und auf den Effekt des solaren Zyklus hin untersuchen würde. Ein Problem bei der Untersuchung von Auswirkungen des solaren Zyklus auf Gasmischungsverhältnisse in der Atmosphäre ist generell, dass durch die lange Schwingungsdauer von elf Jahren nur wenige volle solare Zyklen in die Zeit der systematischen globalen Atmosphärenmessung mittels Messungen von Satelliteninstrumenten fallen (1979 bis heute, bzw. verstärkt ab ca. 1990).

## 6.5 Zeitpunkt und Dauer des Millenium-Drops und Erklärungsansätze

In Unterkapitel 5.5.3 wird mithilfe einer T-Serie der Zeitpunkt des Beginns des Millenium-Drops ermittelt und ein Zeitpunkt danach bestimmt, an dem der Abfall in den H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnissen endet. Die Ergebnisse für den Beginn des Abfalls und seine Dauer in tropischen Breitengraden werden in Unterkapitel 6.5.1 gezeigt.

Ein Erklärungsansatz, wie dieses starke Absinken in den H<sub>2</sub>O-VMR zustande gekommen und warum die Werte auch danach niedrig geblieben sein könnten, wird in Unterkapitel 6.5.2 beschrieben.

Bisherige Untersuchungen des Ursprungs des Millenium-Drops in Randel et al. (2006) hatten zum Ergebnis, dass eine lange andauernde negative Temperaturanomalie an den geringen VMR-Werten von Wasserdampf beteiligt ist, welche wiederum von einer signifikanten Erhöhung der BDC sowie von niedrigen Ozonwerten in der TTL verursacht wurde, wobei letztere wiederum mit der stärkeren BDC über den verstärkten Transport ozonarmer Luft aus der Troposphäre in die Stratosphäre zusammenhängen.

In Rosenlof und Reid (2008) wurde bei einem Vergleich der SST-Anomalien im westlichen Pazifik und Temperaturanomalien der darüberliegenden Tropopause (Abbildung 5 in dieser Veröffentlichung) gefunden, dass – hauptsächlich in den Jahren 1999 bis zum Ende der in dieser Abbildung gezeigten Messungen Mitte 2005 – eine Antikorrelation der beiden Temperaturzeitreihen besteht. Außerdem zeigen die – in der gezeigten Zeit seit 1960 – durchwegs ansteigenden SST kurz vor dem Beginn des Millenium-Drops einen vergleichsweise steilen Anstieg.

### 6.5.1 Zeitpunkt und Dauer des Millenium-Drops

Die durch die T-Serie ermittelten Zeitpunkte in den Breiten-Höhen-Bins der HALOE-MIPAS-Zeitserie, zu denen der Millenium-Drop aufgetreten ist, sind in Abbildung 5.12 dargestellt. In der dazugehörigen Tabelle sind jene Bins mit einem „x“ markiert, bei denen man einen Transport des Signals des H<sub>2</sub>O-Abfalls sehen kann, wo also in Bins unterhalb ein früherer Zeitpunkt und in Bins oberhalb ein späterer Zeitpunkt festgestellt wurde. Ein weiteres Kriterium war, dass keine zu großen zeitlichen Abstände zu benachbarten Breiten-Bins in derselben Höhe vorlagen.

In Abbildung 6.4 in der linken Darstellung sind die durch die T-Serie berechneten Zeiten des Beginns des Millenium-Drop gemittelt zwischen 30°S und 30°N in Abhängigkeit von der Höhe aufgetragen. In der rechten Darstellung sind die Dauern des Millenium-Drops gezeigt, wobei das Ende desselben mit der in Unterkapitel 5.5.3

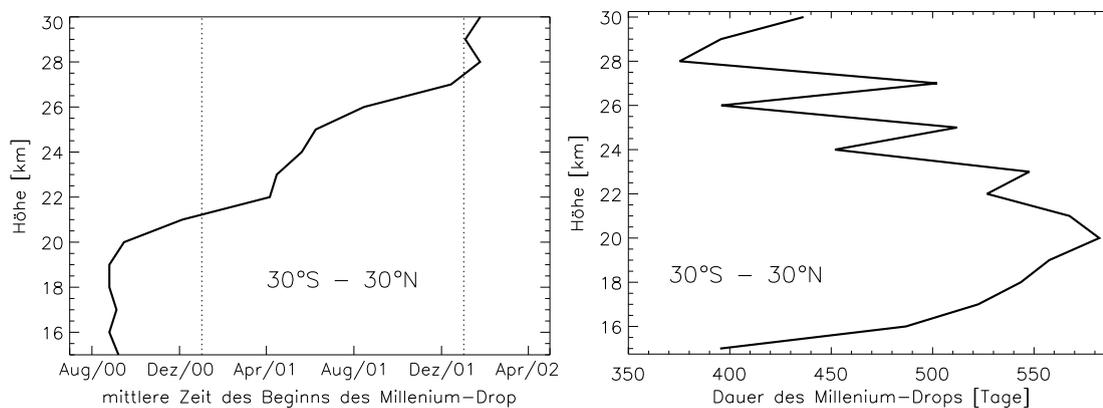


Abbildung 6.4: **Links:** Zwischen  $30^{\circ}\text{S}$  und  $30^{\circ}\text{N}$  gemittelte Zeitpunkte des Beginns des Millenium-Drop. Die gepunkteten vertikalen Linien kennzeichnen den Beginn der Jahre 2001 und 2002. **Rechts:** Im gleichen Breitenbereich gemittelte Dauer des Millenium-Drops.

beschriebenen Methode für die Bestimmung einer Trendänderung in der Zeit nach dem Sprungpunkt bestimmt wurde.

### 6.5.2 Zusammenhang mit QBO, ENSO und BDC

Aus Daten von Modellläufen des CCM EMAC (siehe z.B. Roeckner et al., 2003, 2004, und Referenzen darin) im Zuge des SHARP Projekts (vergleiche Kapitel 1) haben Dameris et al. abgeleitet, dass der Millenium-Drop von Wasserdampf in diesem Datensatz durch eine Überlagerung von Phasen der QBO und ENSO zustande kommt, welche beide zu niedrigen Wasserdampf-mischungsverhältnissen führen. Der Abfall im Wasserdampf-mischungsverhältnis im Modell ist zwar in seinem Ausmaß nicht so ausgeprägt wie in atmosphärischen Messungen, jedoch zeigt sich ein deutlicher Abfall in zonalen Mitteln von Anomalien der modellierten  $\text{H}_2\text{O}$ -Werte, sowohl in einer Zeitserie aus Daten zwischen  $60^{\circ}\text{S}$  und  $60^{\circ}\text{N}$  als auch zwischen  $15^{\circ}\text{S}$  und  $15^{\circ}\text{N}$ . Da den beiden starken Abfällen im Wasserdampf-mischungsverhältnis sowohl um das Jahr 2001 herum als auch 2011/12 ein verhältnismäßig starkes El Niño Ereignis vorausging, wird die Vermutung geäußert, dass ein Abfall im  $\text{H}_2\text{O}$ -Mischungsverhältnis eine typische Folgeerscheinung eines solchen Ereignis ist.

Aufgrund dieser Ergebnisse wurden Indizes von ENSO, QBO und BDC auf ihr relatives Verhalten zueinander zu den beiden Zeitpunkten der Abfälle in den Mischungsverhältnissen von  $\text{H}_2\text{O}$  untersucht.

Als Proxy für die QBO wurde – wie in Davis et al. (2013) – eine Differenz zwischen normierten, monatlich und zwischen  $10^{\circ}\text{S}$  und  $10^{\circ}\text{N}$  gemittelten zonalen Komponenten  $u_{\text{Druck}_i, \text{MERRA}}$  der Winde aus der MERRA-Reanalyse (vergleiche Unterkapitel

5.5.6) verwendet, wobei positive Werte westliche Winde und negative Werte östliche Winde bedeuten. Eine Darstellung der  $u_{\text{Druck}_i, \text{MERRA}}$  findet sich in der rechten Darstellung von Abbildung 6.5, wo gut das Abwärtswandern und die Abnahme der Amplitude der sich abwechselnden West- und Ostwinde zu sehen ist.

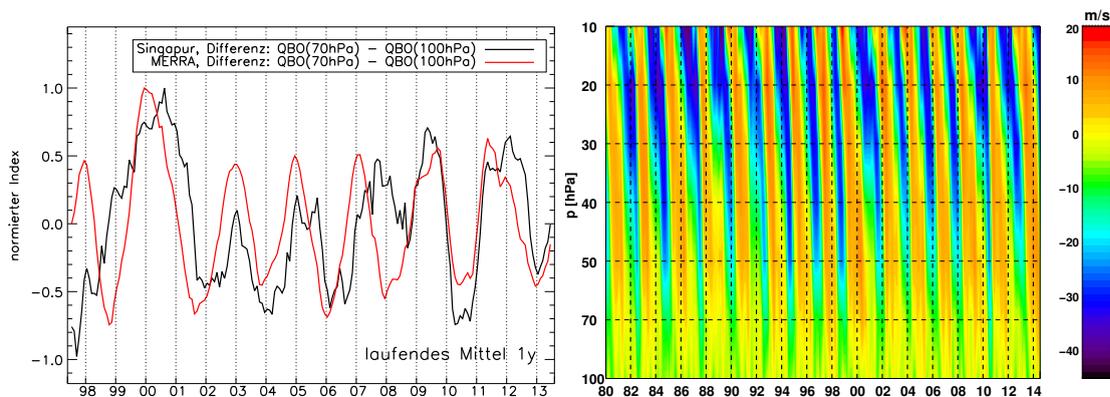


Abbildung 6.5: **Links:** Vergleich von  $\text{QBO}_{\text{MERRA}} = u_{70 \text{ hPa}, \text{MERRA}} - u_{100 \text{ hPa}, \text{MERRA}}$  und dem gleichen Wert für die Windmessungen über Singapur. Beide Zeitreihen sind normiert und mit einem laufenden Mittel von einem Jahr geglättet. **Rechts:** Zonale Winde  $u_{\text{Druck}_i, \text{MERRA}}$  aus MERRA Daten zwischen  $10^\circ\text{S}$  und  $10^\circ\text{N}$ , wobei positive Werte Westwind und negative Werte Ostwind bedeuten. Die y-Achse enthält die Drucklevel in unregelmäßigen Abständen. Oberhalb und unterhalb der horizontalen gestrichelten Linien ist eine Interpolation vorgenommen worden.

Die Differenz ist definiert als  $\text{QBO}_{\text{MERRA}} = u_{70 \text{ hPa}, \text{MERRA}} - u_{100 \text{ hPa}, \text{MERRA}}$  und ist ein Maß dafür, welche der abwärts wandernden Winde räumlich gesehen über welchen liegen, was wiederum Aussagen über die mit den Winden herabwandernde durch die QBO verursachte Temperaturanomalie zulässt, da laut Baldwin et al. (2001) der Zusammenhang zwischen zonalen stratosphärischen Ost-West-Winden und der Temperatur (in der Näherung für die Relation über dem Äquator) über die Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial z} \sim \frac{R}{H\beta} \frac{T}{L^2} \quad (6.2)$$

gegeben ist, wobei  $u$  der Wind in der obigen Definition ist,  $z$  die Höhe,  $R$  die Gas-konstante für trockene Luft,  $H = 7 \text{ km}$  die nominale (konstante) Skalenhöhe ist, welche bei logarithmischen Druckkoordinaten verwendet wird,  $\beta$  die Ableitung des Coriolis-Parameters nach der Breite und  $L$  die meridionale Skalenlänge ist. Für einen Wert von  $L \sim 1000 \text{ km}$  bis  $1200 \text{ km}$  ( $\sim 10^\circ$  Breite) konnten in Randel et al. (1999) die Profile von  $\frac{\partial u}{\partial z}$  und  $T$  in Einklang gebracht werden. Der Gleichung zufolge ist  $T$  also umso größer, je größer  $\frac{\partial u}{\partial z}$  ist, also je westlicher die Winde in größerer Höhe sind und je östlicher die Winde in geringeren Höhen sind.

Die linke Darstellung in der Abbildung zeigt einen Vergleich zwischen normierten Differenzen  $QBO_{MERRA}$  und  $QBO_{\text{Singapur}}$ , wobei letztere von dem Datensatz stammen, von welchem die Proxydaten für die QBO auf Druckniveaus von 50 hPa und 30 hPa für die Regressionen verwendet wurden (vgl. Unterkapitel 5.5.1.1). Der Unterschied ist, dass  $QBO_{\text{Singapur}}$  lokal eingeschränkt ist auf die Atmosphäre direkt über Singapur, wohingegen die MERRA-Daten einer Reanalyse entstammen, in welche Daten aus mehr Quellen zwischen 10°S und 10°N eingehen. Der grobe Verlauf der beiden Zeitserien ist ähnlich, und es zeigen sich größere Unterschiede lediglich in Details.

Der als Proxy für die QBO gegebene Wert  $QBO_{MERRA}$  kann aufgrund dieses in der Gleichung gegebenen Zusammenhangs als Maß für die durch die QBO verursachte Temperaturanomalie gesehen werden. Um die Indizes für QBO und ENSO zu vereinheitlichen, wurde  $QBO_{MERRA}$  mit einem laufenden Mittel über zwei Monate geglättet, so wie die Daten des MEI vorliegen.

Als Index für die BDC,  $BDC_{MERRA}$ , wurden wie schon in Unterkapitel 5.5.6.2 die Heizraten auf 82 hPa aus der MERRA Reanalyse verwendet, welche Einfluss auf die Tropopausentemperaturen nehmen. Ein hoher Index geht hierbei mit niedrigen und ein niedriger Index mit hohen Tropopausentemperaturen einher.

Für ENSO ist derselbe Index, MEI (siehe Unterkapitel 5.5.1.1), verwendet worden, welcher auch als Proxydatensatz in die vier verschiedenen Regressionsansätze eingeflossen ist. Anders als bei  $QBO_{MERRA}$  und dem Index für die BDC ist das Verhältnis von MEI zu den CP-Tropopausentemperaturen etwas komplizierter, da zwar erhöhte SST in tropischen Breiten im Ozean zu niedrigeren Tropopausentemperaturen oberhalb dieser Region führen, jedoch während ENSO die Anomalien in den SST über den Pazifik hinweg in Ost-West-Richtung verschoben werden. Also bedeuten positive SST-Anomalien im östlichen Pazifik negative SST-Anomalien im westlichen Pazifik und umgekehrt, wodurch auch eine entgegengesetzte Anomalie in der Tropopausentemperatur (aufgrund höher reichender Konvektion bei wärmeren SSTs mit einhergehend kälteren Lufttemperaturen) erzeugt wird, was aber keine unmittelbar klaren Konsequenzen für zonale Mittel der Tropopausentemperaturen oder Wasserdampfmischungsverhältnisse in der unteren Stratosphäre in Äquatornähe impliziert. Jedoch lässt sich bei genauerem Hinsehen eine Aussage über den Effekt von ENSO auf die mittleren LCP-Temperaturen von Trajektorien aus der Troposphäre in die Stratosphäre treffen. In Krüger et al. (2008) wurden Daten derartiger LCP-Temperaturen hinsichtlich deren Zusammenhang mit ENSO ausgewertet. Dies hatte zum Ergebnis, dass – wie in Unterkapitel 2.7 beschrieben – die LCP-Temperaturen dieser Trajektorien über dem westlichen Pazifik bei El Niño höher und bei La Niña niedriger sind als die mittleren dortigen LCP-Temperaturen. Jedoch zeigen Untersuchungen von zonal gemittelten Tropopausentemperaturen sowie Wasserdampfmi-

---

schungsverhältnissen über den Tropen einen umgekehrten diesbezüglichen Effekt, was in Calvo et al. (2010) (vergleiche Abbildungen 8 und 9) und Dameris et al. anhand von Modellstudien mit WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model, siehe z.B. Garcia et al. (2007)) und EMAC, respektive, sowie ERA-Interim Reanalysen (vergleiche Dee et al. (2011)) der atmosphärischen Temperaturen belegt wird. Während eines starken El Niño Ereignis steigt die mittlere Troposphärentemperatur an, jedoch erniedrigt sich die mittlere Tropopausentemperatur, was zu einem unmittelbaren Absinken in den Mischungsverhältnissen des unteren stratosphärischen Wasserdampfs führt. Beide Veröffentlichungen belegen eine dem El Niño Ereignis folgende Erwärmung der Tropopausentemperaturen und nach etwa 24 Monaten eine Abkühlung, wobei in Calvo et al. (2010) explizit ein damit einhergehendes Absinken des unteren stratosphärischen Wasserdampfs gezeigt wird. Sowohl beim Millenium Drop als auch bei dem Absinken in H<sub>2</sub>O 2011/2012 könnte dieser verspätete Effekt auf Wasserdampf nach einem El Niño Ereignis eine Rolle spielen. Was den Effekt auf Wasserdampf angeht, gibt es laut Calvo et al. (2010) jedoch noch keine Belege für einen derartigen Effekt in gemessenen Daten. Diesen Paragraphen zusammenfassend kann man also sagen, dass höhere MEI Werte auf im Mittel niedrigere Tropopausentemperaturen und damit niedrige Wasserdampfwerte in der unteren Stratosphäre hindeuten.

Zu einem ähnlichen Ergebnis bezüglich der Antikorrelation der Tropopausentemperatur und der SST kommen auch Rosenlof und Reid (2008), wenngleich hier wie in Krüger et al. (2008) der Effekt longitudinal aufgelöst betrachtet wird.

Eine Darstellung des relativen Verhaltens der Indizes für QBO, ENSO und BDC zueinander ist in Abbildung 6.6 gezeigt. Am Anfang des Millenium-Drops (linke grüne gestrichelte Linie, Anfang 2000) hat QBO<sub>MERRA</sub> den höchsten Wert in dem gezeigten Zeitraum, BDC<sub>MERRA</sub> hat ein lokales Minimum und MEI ist noch fast auf dem Wert seines lokalen Minimums (La Niña), welches wenige Monate zuvor war. Das alles spricht für eine hohe Tropopausentemperatur (siehe oben), was auch mit den meisten in Rosenlof und Reid (2008) gezeigten Temperaturzeitreihen übereinstimmt. Danach nimmt QBO<sub>MERRA</sub> ab, BDC<sub>MERRA</sub> steigt sehr schnell auf einen hohen Wert und bleibt in den folgenden drei Jahren auf einem Wert einer positiven Anomalie. MEI nimmt weiter zu, wobei letzterer in der ganzen Zeit des Abfalls keine außergewöhnlich hohen Werte annimmt, verglichen etwa mit dem El Niño Ereignis von 1998. So wie der normierte BDC Index bleibt auch der MEI in den Jahren nach 2001 bei positiven Werten. All dies spricht während der Zeit des Absinkens des H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnis wiederum für sinkende Tropopausentemperaturen, was auch von den Temperaturzeitreihen in der zuletzt genannten Veröffentlichung, sowie vom Anfang der Temperaturzeitserie in Abbildung 5.7, bestätigt wird. Die hohen Indizes für ENSO und BDC sprechen darüberhinaus auch für eine konstant niedrige Tropopausentemperatur und damit einhergehende geringere Wasserdampfmischungsver-

---

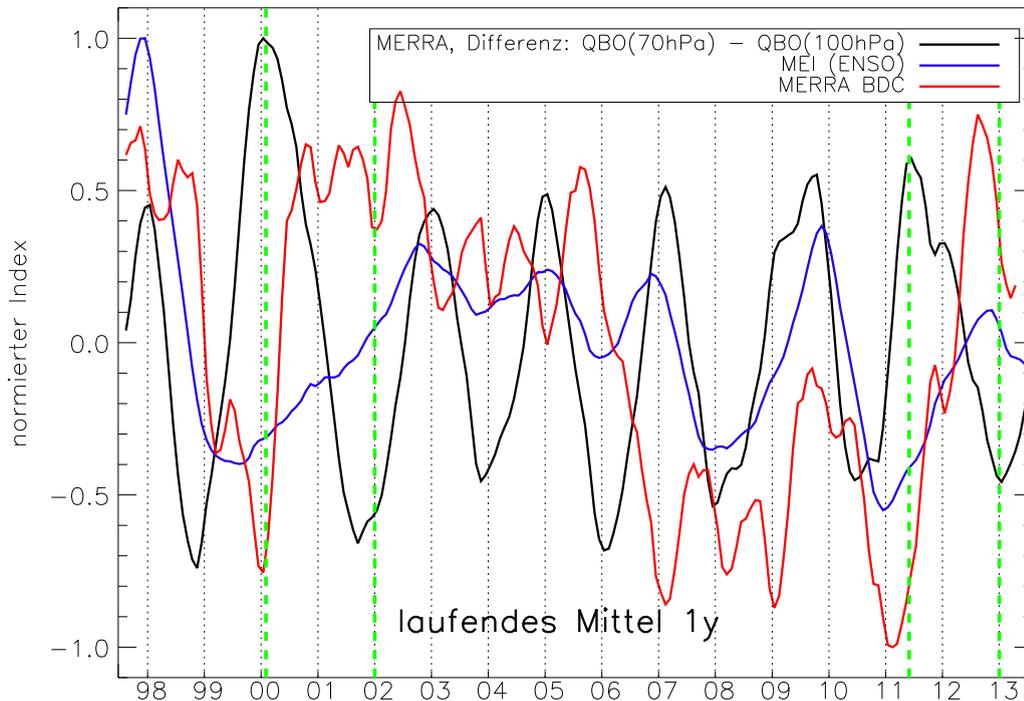


Abbildung 6.6: Vergleich zwischen normierten Indizes von ENSO (MEI),  $BDC_{MERRA}$  (aus MERRA Heizratenanomalien auf 82 hPa) und  $QBO_{MERRA}$  (Differenz  $u_{70\text{hPa},MERRA} - u_{100\text{hPa},MERRA}$ , siehe Text). Letzterer Index ist mit einem zwei-monatigen laufenden Mittel geglättet worden, so wie auch der MEI vorliegt. Die grünen gestrichelten Linien kennzeichnen die ungefähren Dauern der  $H_2O$ -Abfälle. Abbildung nach Davis et al. (2013)

hältnisse als vor dem Millenium-Drop.

Die Situation bezüglich der drei Indizes am Anfang und im Verlauf des Abfalls im  $H_2O$ -Mischungsverhältnis 2011/2012 (für die Temperaturkurve hierzu vergleiche wiederum Abbildung 5.7) ist sehr ähnlich zu dem Verhältnis der Indizes zueinander vor und während des Millenium-Drops. Der Anstieg von  $BDC_{MERRA}$  ist nicht so rapide wie beim Millenium-Drop, erreicht jedoch einen größeren Wert.  $QBO_{MERRA}$  fällt auf ein weniger negatives Niveau. Der MEI verhält sich sehr ähnlich wie bei dem vorangegangenen Absinken im Wasserdampfmischungsverhältnis kurz nach der Jahrtausendwende.

Das Zusammenspiel der drei betrachteten Indizes vor den beiden Abfällen im Wasserdampf ist also äußerst ähnlich zueinander und stimmt auch von der Theorie her mit einem Übergang von hohen zu niedrigen Tropopausentemperaturwerten bzw.  $H_2O$ -Mischungsverhältnissen in der unteren Stratosphäre überein. Es bleibt allerdings noch zu überprüfen, ob diese Konstellation von natürlichen atmosphärischen Signalen ausreichend ist, um in beiden Fällen den gesamten Rückgang im Wasserdampf zu erklären.

Es stellt sich nun noch die Frage, warum die in den vier Regressionsansätzen enthaltenen Terme für die QBO und ENSO nicht den Abfall in den Wasserdampf-mischungsverhältnissen beschreiben können. Ein Grund ist sicherlich, dass der in den Regressionen verwendete Proxy für ENSO kein kohärentes Ergebnis bezüglich der Amplituden  $\frac{1}{2} [\max(F_{\text{ENSO}}) - \min(F_{\text{ENSO}})]$  in den betrachteten Breiten-Höhen-Bins liefert (vgl. Abbildung 5.25). Dies könnte folgende Gründe haben:

1. Die Einbindung dieser Proxy-Daten weist nicht die richtige zeitliche Verzögerung auf, mit der das Signal von der Meeresoberfläche in den jeweiligen Höhen ankommt.
2. Die Auswirkung der MEI-Werte auf stratosphärische H<sub>2</sub>O-Werte ist nicht linearer Natur (hierbei ist mit „nicht linear“ nicht zeitlich gemeint, sondern bezüglich der individuellen Werte).
3. Die Auswirkung der MEI-Werte auf stratosphärische H<sub>2</sub>O-Werte ist mit einer anderen atmosphärischen Größe gekoppelt.

Der erste Punkt könnte zum einen mittels einer Vorgehensweise verbessert werden, bei welcher der MEI-Proxy in jedem Breiten-Höhen-Bin monatsweise verschoben wird, für jede Verschiebung eine lineare Regression durchgeführt wird und dann jene Verschiebung gewählt wird, welche zum geringsten Wert für  $\chi^2$  bzw. für das RMS führt. Zum anderen könnte eine Verwendung eines weiteren Terms mit einer zu der Zeitserie des MEI-Proxies orthogonalen Funktion zu einer Verbesserung des ersten Punkts führen, wie es zum Beispiel auch beim QBO-Proxy (zwei nahezu orthogonale Zeitserien) oder bei den verschiedenen Sinus- und Cosinus-Termen in den in dieser Arbeit durchgeführten Regressionen gemacht wurde (vergleiche Unterkapitel 5.5.1.1).

Der zweite Punkt könnte in dem hier verwendeten Modell (siehe Unterkapitel 5.5.1) umgesetzt werden, eine Untersuchung bezüglich der richtigen Abhängigkeit des Wasserdampfs vom MEI vorausgesetzt. Der Ausdruck „linear“ in „lineare Regression“ bezieht sich auf die Linearität in den Fitparametern.

Der dritte Punkt könnte auch in dem hier verwendeten Regressionsmodell umgesetzt werden, jedoch muss hier die Voraussetzung beachtet werden, dass alle Terme in der Fitfunktion untereinander nicht korreliert sein dürfen. Wie im vorangegangenen Paragraph müsste hier noch eine wahrscheinlich umfangreiche Studie über die Art der Korrelation vorgenommen werden. Eine solche Verknüpfung zweier Terme der Fitfunktion nennt sich Interaktionseffekt (Allison, 1977).

Wie in Unterkapitel 6.5 erwähnt, hatten auch die Untersuchungen in Randel et al. (2006) zum Ergebnis, dass die stärkere BDC Teil der Erklärung für die niedrigen

Temperaturen der Tropopause sind. Und die in den MEI eingehenden SST zeigen eine teilweise (in etwa zwischen 1999 bis zum Ende der Messungen Mitte 2005) Antikorrelation mit darüberliegenden Tropopausentemperaturen, wie in Rosenlof und Reid (2008) beschrieben wird. Diese beiden Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit der hier gezeigten Untersuchung.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Diese Doktorarbeit hat sich mit der Erstellung und Analyse einer zwanzigjährigen Zeitreihe aus Satellitenmessungen der Mischungsverhältnisse von stratosphärischem Wasserdampf befasst. Wasserdampf ist ein wichtiges Gas in der Atmosphäre, da es neben seiner Rolle für das Wetter und für die katalytischen Reaktionen beim Abbau von Ozon als ein starkes Treibhausgas auch für den Strahlungshaushalt der Erde eine bedeutende Rolle spielt. Aus diesem Grund und in Zeiten des Klimawandels ist es sinnvoll, sowohl die Trends in Wasserdampf als auch die Mechanismen zu studieren, welche dieses Gas beeinflussen.

Es wurden zwei verschiedene Datensätze verwendet, welche sich zeitlich überschneiden. Diese Daten bestanden aus den Messungen der Instrumente HALOE auf dem Satelliten UARS und MIPAS auf dem Satelliten Envisat. Die Zusammenführung dieser beiden Datensätze sollte einen möglichst konsistenten Datensatz erzeugen. Um dies zu erreichen, wurde eine Methode angewandt, bei welcher der RMS-Wert zwischen den aus Monatsmitteln bestehenden Zeitreihen der beiden Instrumente durch eine Verschiebung der MIPAS-Daten gegen die HALOE-Daten auf der Mischungsverhältnisskala minimiert wurde (vergleiche Unterkapitel 5.2.2).

Eines der Ziele dieser Arbeit war es, die physikalischen Zusammenhänge zwischen Wasserdampf und einigen atmosphärischen Variablen zu quantifizieren, welche bekanntermaßen Wasserdampf beeinflussen. Dies wurde hauptsächlich mittels multivariater linearer Regression der Zeitreihen gemacht, dessen Terme diese mathematisch modellierten atmosphärischen Größen enthielten. Obwohl es möglich ist, eine präzisere Modellierung der Zeitreihe mit zum Beispiel nicht-linearen Termen in der Regression zu erreichen, wurde in dieser Doktorarbeit eine einfachere, aber auch intuitiver interpretierbare Modellierung untersucht, welche lineare Beziehungen zwischen den Termen der Regression und den Wasserdampfmischungsverhältnissen voraussetzt, mehr siehe unten.

Vier verschiedene Ansätze für die Regressionen mit leicht unterschiedlichen Ter-

men wurden verwendet, um die Zeitserie global in den Regionen der Atmosphäre zwischen 15 km und 30 km Höhe zu untersuchen. Diese Regressionen enthielten die folgenden Terme:

1. ein linearer Trend, der angenommen sinusförmige Jahreszyklus und drei seiner Oberschwingungen, die QBO und ENSO,
2. wie 1., aber anstelle eines einfachen linearen Terms wurde ein linearer Term verwendet, welcher Änderungen in der Steigung bei mit vorher bestimmten Zeitpunkten zuließ,
3. wie 1., aber mit einer zusätzlichen mathematischen Beschreibung des elfjährigen solaren Sonnenfleckenzyklus (auch genannt: solarer Zyklus) mit Sinus- und Cosinustermen der zwei hauptsächlich beitragenden Periodendauern (127 Monate und 63 Monate),
4. wie 3., aber anstelle der Sinus- und Cosinusterme für den solaren Zyklus wurde ein zeitlich verschobener Proxy-Datensatz für den solaren Zyklus verwendet.

Ein Phänomen, welches in dieser Arbeit untersucht wurde, war der Millenium Drop, ein abruptes Absinken in den Mischungsverhältnissen von stratosphärischem Wasserdampf um das Jahr 2001 herum. Keiner der vier Regressionsansätze war in der Lage dieses Absinken adäquat zu reproduzieren. Die 2. Regression, mit den Brüchen in den Steigungen, beschrieb diesen zwar besser, jedoch war noch immer ein Absinken in den Residuen zu erkennen. Zudem konnten diese Brüche erstens nicht physikalisch interpretiert werden und zweitens waren die RMS-Werte zwischen den modellierten und gemessenen Zeitreihen bei den Regressionen 3. und 4. im Mittel geringer als die RMS-Werte bei der 2. Regression. Die Regressionen 3. und 4., welche eine Beschreibung des solaren Zyklus enthalten, konnten also den Millenium Drop besser beschreiben, als die beiden anderen Ansätze, siehe unten. Ein weiteres rapides Absinken im stratosphärischen Wasserdampf trat etwa elf Jahre nach dem ersten auf, um das Ende der kombinierten Zeitreihe herum (Urban et al., 2014). Es kann angenommen werden, dass ähnliche, rapide Abnahmen der  $\text{H}_2\text{O}$ -VMR-Werte auch in Zukunft wieder auftreten können und auch in der Vergangenheit vorkamen.<sup>1</sup> Obwohl nur der Anfang dieses zweiten Absinkens Teil der Zeitserie ist, bekräftigt das Auftreten dieses Phänomens die Richtigkeit der Entscheidung, den solaren Zyklus beschreibende Terme in die Regression mit aufzunehmen.

---

<sup>1</sup>In Fueglistaler et al. (2013) wird zum Beispiel auf einen Abfall der tropischen Tropopausentemperaturen zwischen 1983–1985 verwiesen, welcher allerdings mit einem vorangegangenen Anstieg der Temperaturen durch den Ausbruch von El Chichon zusammenhängen könnte. Allerdings gab es in dieser Zeit noch keine zuverlässigen Satellitenmessungen stratosphärischen Wasserdampfs.

---

---

Die Analysen ermöglichten die Quantifizierung der Beiträge des linearen Terms und der besagten atmosphärischen Signale zur Entwicklung von Wasserdampf. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Unterkapitel 5.5.5 zusammengefasst. Die Übereinstimmung der modellierten Zeitserie mit den gemessenen Werten ist fast überall in der Atmosphäre am besten bei den zwei Regressionsansätzen (3. und 4.), die eine Beschreibung des solaren Zyklus enthalten. Dies ist der Fall, da der Millenium Drop am besten von diesen Regressionsansätzen beschrieben wird.

Die bestimmten Trends liegen abhängig vom verwendeten Regressionsansatz und des Orts in der Atmosphäre zwischen  $\sim -0,35$  ppmv/Jahrzehnt und  $\sim 0,1$  ppmv/Jahrzehnt, wobei die zuletzt erwähnten beiden Ansätze zu deutlich negativeren Trends führen als die beiden anderen Ansätze.

Für den Einfluss des als sinusförmig angenommenen Jahresgangs (AO) auf Wasserdampf ergaben sich in der Stratosphäre Amplituden zwischen  $\sim 0,6$  ppmv in einer Höhe von  $\sim 17$  km– $18$  km und  $\sim 0,1$  ppmv zwischen  $20$  km und  $30$  km. Geringere Amplituden wurden in anderen Bereichen der Atmosphäre bestimmt. Für die halbjährliche Oszillation (SAO) wurden Amplituden der angepassten Terme in der Stratosphäre von  $\sim 0,17$  ppmv auf  $\sim 17$  km Höhe bestimmt, und in größeren Höhen über den Tropen ähnliche Amplituden wie für die AO erhalten. Außerhalb der Tropen wurden die Amplituden des Effekts der SAO auf Wasserdampf mit  $\sim 0,05$  ppmv bestimmt.

Der Einfluss des QBO-Signals auf Wasserdampf hat in guter Übereinstimmung mit anderen Untersuchungen (vergleiche Unterkapitel 5.5.5) ein lokales Maximum zwischen  $10^\circ\text{S}$ – $10^\circ\text{N}$  auf  $25$  km– $30$  km von  $\sim 0,18$  ppmv. Er besitzt jedoch auch bisher nicht gefundene, ähnlich hohe Werte in einem Breitenbereich von  $50^\circ\text{S}$ – $10^\circ\text{S}$  in einer Höhe von  $28$  km– $30$  km. Die Auswirkungen von ENSO auf Wasserdampf konnten von dem verwendeten Regressionsmodell nicht erfasst werden und hatten zufällig erscheinende Ergebnisse.

Bei den beiden Ansätzen, die den solaren Zyklus enthalten, wurden Effekte desselben auf Wasserdampf von bis zu  $\sim 0,4$  ppmv in der TTL bestimmt, was ein stärkerer als bisher in anderen Arbeiten festgestellter Effekt ist. Die den solaren Zyklus beschreibenden Terme waren die einzigen unter den oben genannten Termen der vier Regressionsansätze, welche den Millenium Drop zumindest teilweise reproduzieren konnten (abgesehen von den abschnittsweise linearen Termen, welche jedoch physikalisch nicht zu interpretieren sind), obgleich es noch zu klären blieb, ob ein plausibler Zusammenhang zwischen dem solaren Zyklus und der Entwicklung von Wasserdampf existiert. Ein geringerer Einfluss als in der TTL Region wurde an anderen Orten der Atmosphäre gefunden (für Details siehe Unterkapitel 5.5.5.).

Eine weitere Untersuchung des Millenium Drop betraf die Ursachen für dieses Absinken. Eine erste Hypothese, über einen möglichen Effekt des solaren Zyklus

---

auf ENSO und hierüber auf Wasserdampf, konnte in dieser Arbeit nicht bestätigt aber auch nicht verworfen werden. Eine zweite Hypothese zog den solaren Zyklus als Erklärungsmöglichkeit für rapides Absinken stratosphärischen Wasserdampfs heran, da – wie weiter oben erwähnt – die zwei Zeitpunkte zu denen die beiden Abfälle in stratosphärischem Wasserdampf begannen, etwa elf Jahre auseinanderlagen ( $\sim 2001$  und  $\sim 2012$ ). Diese Theorie baute auf einem in Krüger et al. (2008) festgestellten Zusammenhang zwischen dem kältesten Punkt in der TTL mit dem solaren Zyklus auf. Eine grobe Abschätzung des Einflusses des solaren Zyklus während seiner Extrema auf Wasserdampf wurde mit 0,17 ppmv bestimmt, also geringer als der in den Regressionen gefundene Zusammenhang. Dieser Effekt kann nicht ausgeschlossen werden. Jedoch wären weitere Untersuchungen mit umfangreichen Datensätzen von Temperatur- und Wasserdampfverteilungen nötig, um präzisere Ergebnisse für eine Abschätzung zu erhalten. Diese Theorie könnte auch möglicherweise generell das festgestellte Signal des solaren Zyklus in Wasserdampf erklären. Die Schwachpunkte dieser Theorie waren jedoch, dass die augenscheinliche Verzögerung des Signals des solaren Zyklus in Wasserdampf nur partiell durch die langsamen vertikalen Aufstiegs- geschwindigkeiten von Luft in der tropischen Stratosphäre erklärt werden kann. Für weitere Details über diese und die zuerst genannte Hypothese, siehe Unterkapitel 6.4.

Eine dritte Hypothese für die Ursache des Millenium-Drop ist das Zusammenspiel von QBO, BDC und ENSO in der Atmosphäre. Zu den beiden Zeitpunkten des Absinkens in stratosphärischem Wasserdampf haben diese drei Signale eine Konstellation zueinander, welche zu außergewöhnlich niedrigen Tropopausentemperaturen führt, was wiederum niedrige Wasserdampf Werte in der unteren Stratosphäre zur Folge hat. Die Effekte dieser Konstellation auf Wasserdampfmischungsverhältnisse sind in dieser Arbeit nicht quantifiziert worden, aber in einer Modellanalyse in Dameris et al. konnte das Ausmaß der absinkenden Mischungsverhältnisse etwa zur Hälfte reproduziert werden. Dies wurde detaillierter in Unterkapitel 6.5.2 beschrieben.

Beide Mechanismen aus der zweiten und dritten Hypothese (die erste Hypothese ist nicht ausgeschlossen, konnte aber nicht bestätigt werden) kommen als beitragende Effekte zum Millenium Drop und dem erneuten Absinken um das Jahr 2012 herum in Frage. Obwohl alle in diesen beiden Hypothesen enthaltenen Mechanismen Teil der durchgeführten Regressionen waren, inklusive des solaren Zyklus, konnten diese Regressionen den Millenium Drop nicht vollständig beschreiben. Dies impliziert, dass entweder andere Prozesse involviert sind, oder dass die Art und Weise der Umsetzung der Regressionen der Problemstellung nicht gerecht wurden.

Es ist wohlbekannt, dass atmosphärisches Methan ansteigt und ebenso, dass die Oxidation von Methan in der Stratosphäre zu einer Erhöhung in den Mischungsverhältnissen von Wasserdampf führt. Der Beitrag zur Entwicklung stratosphärischen

---

Wasserdampfs von einem angenommenen Anstieg der Methanoxidation aufgrund zunehmenden Methans wurde untersucht. Dies wurde mittels eines Vergleichs einer Zeitserie von Bodenmessungen mit den Residuen der Regressionsansätze 1. und 4. durchgeführt. Diese beiden Regressionen wurden ausgewählt, weil Regression 1. unabhängig vom Effekt des solaren Zyklus ist, dessen Effekt auf Wasserdampf Gegenstand der Untersuchungen in dieser Arbeit war. Der 4. Ansatz wurde gegenüber Ansatz 3. bevorzugt, da er gemessene Daten enthält, welche proportional zum solaren Zyklus waren und von daher möglicherweise präziser jegliche Wasserdampf beeinflussende Prozesse beschreibt als der Ansatz mit den Sinus- und Cosinustermen. Der Ansatz 2. wurde nicht verwendet, da er in weiten Teilen keine stabilen Ergebnisse produzierte und eine plausible physikalische Interpretation dieser Methode nicht vorhanden war. Es wurde festgestellt, dass keine eindeutige Aussage über das Ausmaß des ansteigenden Beitrag zu treffen ist, jedoch als obere Abschätzung hierfür ein Wert von  $\sim 0,02$  ppmv/Jahr bestimmt. Da Methan eine wichtige Quelle für stratosphärischen Wasserdampf ist und aufgrund der Ergebnisse in besagtem Unterkapitel, ist anzunehmen, dass die Berücksichtigung einer Zeitserie von Methanwerten in der TTL als Term in einer eventuellen zukünftigen Regressionsanalyse Sinn machen würde (für Details siehe Unterkapitel 5.5.6.1. und 6.2.).

Wie man an den zusammengestellten Ergebnissen in diesem Kapitel sieht, war die verwendete multivariate lineare Regression ein probates Mittel zur Untersuchung von Zeitserien stratosphärischen Wasserdampfs. Es konnten Beiträge verschiedener atmosphärischer Signale zur Entwicklung von Wasserdampf quantifiziert werden, welche Wasserdampf entweder direkt, oder über eine Modulation der Tropopausentemperatur beeinflussen.

Die Einflüsse dieser Signale auf Wasserdampf müssen jedoch nicht unbedingt so geartet sein, wie in der Regression angenommen. Es gibt die Möglichkeit im Zuge einer Regression, sowohl nicht-lineare Effekte als auch gekoppelte Effekte zwischen zwei Variablen über einen sogenannten Interaktionseffekt zu modellieren. Gekoppelte Effekte zwischen hier verwendeten atmosphärischen Größen sind nicht bekannt.<sup>2</sup> Es ist jedoch unklar, ob die Annahme linearer Zusammenhänge zwischen den verwendeten Termen in den Regressionen und den Wasserdampfmischungsverhältnissen gerechtfertigt ist.

Im Allgemeinen sollten bei einer Regression zunächst die physikalischen Zusammenhänge zwischen den beeinflussenden Variablen und der zu modellierenden Variablen bestimmt werden, oder aber es müssen die optimalen Relationen empirisch bestimmt und im Nachhinein überzeugend interpretiert werden.

---

<sup>2</sup>Es gibt zwar einen sehr ähnlichen Verlauf des MEI und des QBO-Index auf 100hPa, was auf eine Kopplung schließen lässt. Diese Korrelation verliert sich aber bei den in den Regressionen verwendeten Windgeschwindigkeiten in größeren Höhen als Proxy für die QBO.

---

Zusammenfassend kann man sagen, dass es mit den in dieser Arbeit verwendeten Methoden möglich war, die Prozesse besser zu verstehen, welche stratosphärischen Wasserdampf kontrollieren. Es bleiben jedoch noch Möglichkeiten für Verbesserungen dieser Methoden und es bleibt Raum für weitere, komplexere Ansätze, mit denen Wasserdampf in der Stratosphäre untersucht werden kann.

---

# Literaturverzeichnis

- H. Alexandersson und A. Moberg. Homogenization of Swedish temperature data. Part I: Homogeneity test for linear trends. *Int. J. of Climatology*, 17:25–34, 1997.
- P. D. Allison. Testing for interaction in multiple regression. *Amer. J. of Sociology*, 83:144–153, 1977.
- J. K. Angell. Stratospheric warming due to Agung, El Chichón, and Pinatubo taking into account the Quasi-Biennial Oscillation. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 102:9479–9485, 1997. doi: 10.1029/96JD03588.
- R. A. Anthes, D. Ector, D. C. Hunt, Y.-H. Kuo, C. Rocken, W. S. Schreiner, S. V. Sokolovskiy, S. Syndergaard, T.-K. Wee, Z. Zeng, P. A. Bernhardt, K. F. Dymond, Y. Chen, H. Liu, K. Manning, W. J. Randel, K. E. Trenberth, L. Cucurull, S. B. Healy, S.-P. Ho, C. McCormick, T. K. Meehan, D. C. Thompson, und N. L. Yen. The COSMIC/FORMOSAT-3 mission: Early results. *Bull. Amer. Met. Soc.*, 89: 313–333, 2008. doi: 10.1175/BAMS-89-3-313.
- H. H. Aumann, M. T. Chahine, C. Gautier, M. D. Goldberg, E. Kalnay, L. M. McMillin, H. Revercomb, P. W. Rosenkranz, W. L. Smith, D. H. Staelin, L. L. Strow, und J. Susskind. AIRS/AMSU/HSB on the Aqua mission: design, science objectives, data products, and processing systems. *IEEE Transact. Geos. Rem. Sens.*, 41(2):253–264, 2003. doi: 10.1109/TGRS.2002.808356.
- M. P. Baldwin, L. J. Gray, T. J. Dunkerton, K. Hamilton, P. H. Haynes, W. J. Randel, J. R. Holton, M. J. Alexander, I. Hirota, T. Horinouchi, D. B. A. Jones, J. S. Kinnnersley, C. Marquardt, K. Sato, und M. Takahashi. The Quasi-Biennial Oscillation. *Rev. Of Geoph.*, 39:179–229, 2001.
- F. T. Barath, M. C. Chavez, R. E. Cofield, D. A. Flower, M. A. Frerking, M. B. Gram, W. M. Harris, J. R. Holden, R. F. Jarnot, W. G. Kloezenan, G. J. Klose, G. K. Lau, M. S. Loo, B. J. Maddison, R. J. Mattauca, R. P. McKinney, G. E. Peckham, H. M. Pickett, G. Siebes, F. S. Soltis, R. A. Suttie, J. A. Tarsala, J. W. Waters, und W. J. Wilson. The Upper Atmosphere Research Satellite microwave

- limb sounder instrument. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 98(D6):10751–10762, 1993. doi: 10.1029/93JD00798.
- D. R. Bates und M. Nicolet. The photochemistry of water vapour. *J. Geophys. Res.*, 55:301–327, 1950.
- P. F. Bernath, C. T. McElroy, M. C. Abrams, C. D. Boone, M. Butler, C. Camy-Peyret, M. Carleer, C. Clerboux, P.-F. Coheur, R. Colin, P. DeCola, M. DeMazière, J. R. Drummond, D. Dufour, W. F. J. Evans, H. Fast, D. Fussen, K. Gilbert, E. J. Jennings, D. E. andLlewellyn, R. P. Lowe, E. Mahieu, J. C. McConnell, M. McHugh, S. D. McLeod, R. Michaud, C. Midwinter, R. Nassar, F. Nichitiu, C. Nowlan, C. P. Rinsland, Y. J. Rochon, N. Rowlands, K. Semeniuk, P. Simon, R. Skelton, J. J. Sloan, M.-A. Soucy, K. Strong, P. Tremblay, D. Turnbull, K. A. Walker, I. Walkty, D. A. Wardle, V. Wehrle, R. Zander, und J. Zou. Atmospheric Chemistry Experiment (ACE): mission overview. *Geophys. Res. Lett.*, 32, 2005. doi: doi:10.1029/2005GL022386.
- A. W. Brewer. Evidence for a world circulation provided by the measurements of helium and water vapour distribution in the stratosphere. *Quart. J. of R. Met. Soc.*, 75:351–363, 1949.
- N. Calvo, R. R. Garcia, W. J. Randel, und D. R. Marsh. Dynamical mechanism for the increase in tropical upwelling in the lowermost tropical stratosphere during warm ENSO events. *J. Atmos. Sci.*, 67:2331–2340, 2010. doi: 10.1175/2010JAS3433.1.
- M. R. Carleer, C. D. Boone, K. A. Walker, Bernath P. F., K. Strong, R. J. Sica, C. E. Randall, H. Vömel, J. Kar, M. Höpfner, M. Milz, T. von Clarmann, R. Kivi, J. Valverde-Canossa, C. E. Sioris, M. R. M. Izawa, E. Dupuy, C. T. McElroy, J. R. Drummond, C. R. Nowlan, J. Zou, F. Nichitiu, S. Lossow, J. Urban, D. Murtagh, und D. G. Dufour. Validation of water vapour profiles from the Atmospheric Chemistry Experiment (ACE). *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 8:4499–4559, 2008. doi: 10.5194/acpd-8-4499-2008.
- S. Chandrasekhar. *Radiative transfer*. Dover Publications, 1960.
- T. Corti, B. P. Luo, M. de Reus, D. Brunner, F. Cairo, M. J. Mahoney, G. Martucci, R. Matthey, V. Mitev, F. H. dos Santos, C. Schiller, G. Shur, N. M. Sitnikov, N. Spelten, H. J. Vössing, S. Borrmann, und T. Peter. Unprecedented evidence for deep convection hydrating the tropical stratosphere. *Geophys. Res. Lett.*, 35, 2008. doi: 10.1029/2008GL033641.
- D. M. Cunnold, E.-S. Yang, M. J. Newchurch, G. C. Reinsel, J. M. Zawodny, und J. M. Russell III. Comment on “Enhanced upper stratospheric ozone: Sign of
-

- recovery or solar cycle effect?" by W. Steinbrecht et al. *J. Geophys. Res.*, 109, 2004. doi: 10.1029/2004JD004826.
- M. Dameris, S. Brinkop, P. Jöckel, D. Cai, R. Eichinger, H. Garny, P. Graf, M. Righi, S. Lossow, und G. Stiller. The millennium water vapour drop in chemistry-climate model simulations. in Vorbereitung.
- E. F. Danielsen. In situ evidence of rapid, vertical, irreversible transport of lower tropospheric air into the lower tropical stratosphere by convective cloud turrets and by larger-scale upwelling in tropical cyclones. *J. Geophys. Res.*, 98:8665–8681, 1993.
- S. M. Davis, C. K. Liang, und K. H. Rosenlof. Interannual variability of tropical tropopause layer clouds. *Geophys. Res. Lett.*, 40:2862–2866, 2013. doi: 10.1002/grl.50512.
- D. P. Dee, S. M. Uppala, A. J. Simmons, P. Berrisford, P. Poli, S. Kobayashi, U. Andrae, M. A. Balmaseda, G. Balsamo, P. Bauer, P. Bechtold, A. C. M. Beljaars, L. van de Berg, J. Bidlot, N. Bormann, C. Delsol, R. Dragani, M. Fuentes, A. J. Geer, L. Haimberger, S. B. Healy, H. Hersbach, E. V. Hólm, L. Isaksen, P. Kållberg, M. Köhler, M. Matricardi, A. P. McNally, B. M. Monge-Sanz, J.-J. Morcrette, B.-K. Park, C. Peubey, P. de Rosnay, C. Tavolato, J.-N. Thépaut, und F. Vitart. The ERA-Interim reanalysis: configuration and performance of the data assimilation system. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 137(656):553–597, 2011. doi: 10.1002/qj.828.
- A. E. Dessler. Observations of climate feedbacks over 2000-10 and comparisons to climate models. *J. of Climate*, 26:333–342, 2013.
- A. E. Dessler und H. Kim. Determination of the amount of water vapor entering the stratosphere based on Halogen Occultation Experiment (HALOE) data. *J. Geophys. Res.*, 104(NO. D23):30605–30607, 1999.
- G. M. B. Dobson. Origin and distribution of the polyatomic molecules in the atmosphere. *Proc. of the Royal Soc. of London*, 236:187–193, 1956.
- J. R. Drummond, J. T. Houghton, G. D. Peskett, C. D. Rodgers, M. J. Wale, J. Whitney, und E. J. Williamson. The Stratospheric and Mesospheric Sounding on Nimbus 7. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 296(1418):219–241, 1980. doi: 10.1098/rsta.1980.0166.
- Earth System Research Laboratory, Global Monitoring Division (NOAA). Global greenhouse gas reference network. <http://www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/ggrn.php>.
-

- T. Egorova, E. Rozanov, V. Zubov, W. Schmutz, und T. Peter. Influence of solar 11-year variability on chemical composition of the stratosphere and mesosphere simulated with a chemistry-climate model. *Adv. Space Res.*, 35:451–457, 2005.
- D. H. Ehhalt und U. Schmidt. Sources and sinks of atmospheric methane. *Pure Appl. Geophys.*, 116:452–464, 1978.
- M. Ekström, P. Eriksson, W. G. Read, M. Milz, und D. P. Murtagh. Comparison of satellite limb-sounding humidity climatologies of the uppermost tropical troposphere. *Atmos. Chem. Phys.*, 8:309–320, 2008. doi: 10.5194/acp-8-309-2008.
- V. Eyring, D. Shepherd, und W. Waugh (Editoren). SPARC CCMVal report on the evaluation of chemistry-climate models, SPARC report no. 5. Technical report, WMO, 2010. zu finden auf: <http://www.atmosp.physics.utoronto.ca/SPARC>.
- J. C. Farman, R. J. Murgatroyd, A. M. Silnickas, und B. A. Thrush. Ozone photochemistry in the Antarctic stratosphere in summer. *Quart. J. of R. Met. Soc.*, 111:1013–1025, 1985. doi: 10.1002/qj.49711147006.
- H. Fischer und H. Oelhaf. Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb-emission spectrometers. *Applied Optics*, 35:2787–2796, 1996.
- H. Fischer, M. Birk, C. Blom, B. Carli, M. Carlotti, T. von Clarmann, L. Delbouille, A. Dudhia, D. Ehhalt, M. Endemann, J. M. Flaud, R. Gessner, A. Kleinert, R. Kopman, J. Langen, M. López-Puertas, P. Mosner, H. Nett, H. Oelhaf, G. Perron, J. Remedios, M. Ridolfi, G. Stiller, und R. Zander. MIPAS: an instrument for atmospheric and climate research. *Atmos. Chem. Phys.*, 8(8):2151–2188, 2008.
- J. M. Flaud und J. Orphal. *Spectroscopy of the Earth's atmosphere*. John Wiley & Sons, Ltd, 2011. ISBN 9780470749593. doi: 10.1002/9780470749593.hrs099.
- S. Fueglistaler, A. E. Dessler, T. J. Dunkerton, I. Folkins, Q. Fu, und P. W. Mote. Tropical Tropopause Layer. *Rev. Geophys.*, 47:1–31, 2009.
- S. Fueglistaler, Y.S. Liu, T.J. Flannaghan, P.H. Haynes, D.P. Dee, W.J. Read, E.E. Remsberg, L.W. Thomason, D.F. Hurst, J.R. Lanzante, und P.F. Bernath. The relation between atmospheric humidity and temperature trends for stratospheric water. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 118(2):1052–1074, 2013. doi: 10.1002/jgrd.50157.
- B. Funke, M. López-Puertas, S. Gil-López, T. von Clarmann, G. P. Stiller, H. Fischer, und S. Kellmann. Downward transport of upper atmospheric NO<sub>x</sub> into the polar stratosphere and lower mesosphere during the Antarctic 2003 and Arctic 2002/2003 winters. *J. Geophys. Res.*, 110:24308–24324, 2005a.
-

- B. Funke, M. López-Puertas, T. von Clarmann, G. P. Stiller, H. Fischer, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, und D. Y. Wang. Retrieval of stratospheric NO<sub>x</sub> from 5.3 and 6.2  $\mu\text{m}$  nonlocal thermodynamic equilibrium emissions measured by Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) on Envisat. *J. Geophys. Res.*, 110:D09302, 2005b. doi: 10.1029/2004JD005225.
- B. Funke, M. López-Puertas, D. Bermejo-Pantaleón, T. von Clarmann, G. P. Stiller, M. Höpfner, U. Grabowski, und M. Kaufmann. Analysis of nonlocal thermodynamic equilibrium CO 4.7  $\mu\text{m}$  fundamental, isotopic and hot band emissions measured by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding on Envisat. *J. Geophys. Res.*, 112:D11305, 2007. doi: 10.1029/2006JD007933.
- R. R. Garcia, D. R. Marsh, D. E. Kinnison, B. A. Boville, und F. Sassi. Simulation of secular trends in the middle atmosphere, 1950–2003. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 112(D9), 2007. doi: 10.1029/2006JD007485.
- Hella Garny. *Causes and impacts of changes in the stratospheric meridional circulation in a chemistry-climate model*. Doktorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, 2010.
- S. Gil-López, M. López-Puertas, M. Kaufmann, B. Funke, M. García-Comas, M. E. Koukouli, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, G. P. Stiller, und T. von Clarmann. Retrieval of stratospheric and mesospheric O<sub>3</sub> from high resolution MIPAS spectra at 15 and 10  $\mu\text{m}$ . *Adv. Space Res.*, 36:943–951, 2005. doi: 10.1016/j.asr.2005.05.123.
- J. Gille, J. Barnett, P. Arter, M. Barker, P. Bernath, C. Boone, C. Cavanaugh, J. Chow, M. Coffey, J. Craft, C. Craig, M. Dials, V. Dean, T. Eden, D. P. Edwards, G. Francis, C. Halvorson, L. Harvey, C. Hepplewhite, R. Khosravi, D. Kinnison, C. Krinsky, A. Lambert, H. Lee, L. Lyjak, J. Loh, W. Mankin, S. Massie, J. McInerney, J. Moorhouse, B. Nardi, D. Packman, C. Randall, J. Reburn, W. Rudolf, M. Schwartz, J. Serafin, K. Stone, B. Torpy, K. Walker, A. Waterfall, R. Watkins, J. Whitney, D. Woodard, und G. Young. High Resolution Dynamics Limb Sounder: Experiment overview, recovery, and validation of initial temperature data. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 113(D16), 2008. doi: 10.1029/2007JD008824.
- J. C. Gille, P. L. Bailey, und J. M. Russell. Temperature and composition measurements from the l.r.i.r. and l.i.m.s. experiments on Nimbus 6 and 7. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 296(1418):205–218, 1980. doi: 10.1098/rsta.1980.0165.
- GISS, NASA. Forcings in GISS climate model, stratospheric aerosol optical thickness. <http://data.giss.nasa.gov/modelforce/strataer/>.
-

- N. Glatthor, T. von Clarmann, H. Fischer, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, G. Mengistu Tsidu, D. Y. Wang, und B. Funke. Spaceborne ClO observations by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) before and during the Antarctic major warming in September/October 2002. *J. Geophys. Res.*, 109:D11307, 2004. doi: 10.1029/2003JD004440.
- N. Glatthor, T. von Clarmann, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, M. López-Puertas, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, und D.-Y. Wang. Retrieval of stratospheric ozone profiles from MIPAS/ENVISAT limb emission spectra: a sensitivity study. *Atmos. Chem. Phys.*, 6:2767–2781, 2006.
- N. Glatthor, T. von Clarmann, H. Fischer, B. Funke, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, M. Milz, T. Steck, und G. P. Stiller. Global peroxyacetyl nitrate (PAN) retrieval in the upper troposphere from limb emission spectra of the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *Atmos. Chem. Phys.*, 7:2775–2787, 2007.
- N. Glatthor, T. von Clarmann, G. P. Stiller, B. Funke, M. E. Koukouli, H. Fischer, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, und A. Linden. Large-scale upper tropospheric pollution observed by MIPAS HCN and C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> global distributions. *Atmos. Chem. Phys.*, 9:9619–9634, 2009.
- N. Glatthor, M. Höpfner, K. Semeniuk, A. Lupu, P. I. Palmer, J. C. McConnell, J. W. Kaminski, T. von Clarmann, G. P. Stiller, B. Funke, S. Kellmann, A. Linden, und A. Wiegele. The Australian bushfires of February 2009: MIPAS observations and GEM-AQ model results. *Atmos. Chem. Phys.*, 13:1637–1658, 2013. doi: 10.5194/acp-13-1637-2013.
- L. L. Gordley, M. E. Hervig, C. Fish, J. M. Russell III, S. Bailey, J. Cook, S. Hansen, A. Shumway, G. Paxton, L. Deaver, T. Marshall, J. Burton, B. Magill, C. Brown, E. Thompson, und J. Kemp. The solar occultation for ice experiment. *J. Atmos. Sol.-Ter. Phys.*, 71:300–315, 2008. doi: 10.1016/j.jastp.2008.07.012.
- L. J. Gray, J. Beer, M. Geller, J. D. Haigh, M. Lockwood, K. Matthes, U. Cubasch, D. Fleitmann, G. Harrison, L. Hood, J. Luterbacher, G. A. Meehl, D. Shindell, B. van Geel, und W. White. Solar influences on climate. *Rev. Of Geoph.*, 48:1–53, 2010.
- M. Grutter, N. Glatthor, G. P. Stiller, H. Fischer, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, und T. von Clarmann. Global distribution and variability of formic acid as observed by MIPAS-ENVISAT. *J. Geophys. Res.*, 115:D10303, 2010.
-

- A. Haefele, K. Hocke, N. Kämpfer, P. Keckhut, M. Marchand, S. Bekki, B. Morel, T. Egorova, und E. Rozanov. Diurnal changes in middle atmospheric H<sub>2</sub>O and O<sub>3</sub>: Observations in the Alpine region and climate models. *J. Geophys. Res.*, 113: D17303, 2008.
- G. A. Hajj, C. O. Ao, B. A. Iijima, D. Kuang, E. R. Kursinski, A. J. Mannucci, T. K. Meehan, L. J. Romans, M. de la Torre Juarez, und T. P. Yunck. CHAMP and SAC-C atmospheric occultation results and intercomparisons. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 109(D6), 2004. doi: 10.1029/2003JD003909.
- J. E. Harries, J. M. Russell III, A. F. Tuck, L. L. Gordley, P. Purcell, K. Stone, R. M. Bevilacqua, M. Gunson, G. Nedoluha, und W. A. Traub. Validation of measurements of water vapor from the Halogen Occultation Experiment (HALOE). *J. Geophys. Res.*, 101(NO. D6):10205–10216, 1996.
- M. I. Hegglin, S. Tegtmeier, J. Anderson, L. Froidevaux, R. Fuller, B. Funke, A. Jones, G. Lingenfelter, J. Lumpe, D. Pendlebury, E. Remsberg, A. Rozanov, M. Toohy, J. Urban, T. von Clarmann, K. A. T. Walker, R. Wang, und K. Weigel. SPARC data initiative: Comparison of water vapor climatologies from international satellite limb sounders. *J. Geophys. Res.*, 118:11824–11846, 2013. doi: 10.1002/jgrd.50752.
- M. I. Hegglin, D. A. Plummer, T. G. Shepherd, J. F. Scinocca, J. Anderson, L. Froidevaux, B. Funke, D. Hurst, A. Rozanov, J. Urban, T. von Clarmann, K. A. T. Walker, H. J. Wang, S. Tegtmeier, und K. Weigel. Vertical structure of stratospheric water vapour trends derived from merged satellite data. *Nat. Geos.*, 2014. doi: 10.1038/ngeo2236.
- M. E. Hervig, J. M. Russell III, L. L. Gordley, J. Daniels, S. R. Drayson, und J. H. Park. Aerosol effects and corrections in the Halogen Occultation Experiment. *J. Geophys. Res.*, 100:1067–1079, 1995. doi: 10.1029/94JD02143.
- M. H. Hitchman und C. B. Leovy. Estimation of the Kelvin wave contribution to the Semiannual Oscillation. *J. Atmos. Sci.*, 45:1462–1475, 1988.
- L. Hoffmann und M. J. Alexander. Retrieval of stratospheric temperatures from Atmospheric Infrared Sounder radiance measurements for gravity wave studies. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 114(D7), 2009. doi: 10.1029/2008JD011241.
- L. Hoffmann, M. Kaufmann, R. Spang, R. Müller, J. J. Remedios, D. P. Moore, C. M. Volk, T. von Clarmann, und M. Riese. Envisat MIPAS measurements of CFC-11: retrieval, validation, and climatology. *Atmos. Chem. Phys.*, 8:3671–3688, 2008.
-

- J. R. Holton und A. Gettelman. Horizontal transport and the dehydration of the stratosphere. *Geophys. Res. Lett.*, 28:2799–2802, 2001.
- J. R. Holton, P. H. Haynes, M. E. McIntyre, A. R. Douglass, R. B. Rood, und L. Pfister. Stratosphere-troposphere exchange. *Reviews of Geophysics*, 33:403–439, 1995.
- M. Höpfner, G. P. Stiller, M. Kuntz, T. von Clarmann, G. Echle, B. Funke, N. Glatthor, F. Hase, H. Kemnitzer, und S. Zorn. The Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm. Part II: Interface to retrieval applications. In J. Wang, B. Wu, T. Ogawa, und Z. Guan, Hrsg., *Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds, Beijing, China, 15–17 September 1998*, Band 3501, Seiten 186–195, 1998.
- M. Höpfner, T. von Clarmann, H. Fischer, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, D.-Y. Wang, und B. Funke. First spaceborne observations of Antarctic stratospheric ClONO<sub>2</sub> recovery: Austral spring 2002. *J. Geophys. Res.*, 109:D11308, 2004. doi: 10.1029/2004JD004609.
- M. Höpfner, B. P. Luo, P. Massoli, F. Cairo, R. Spang, M. Snels, G. Di Donfrancesco, G. P. Stiller, T. von Clarmann, H. Fischer, und U. Biermann. Spectroscopic evidence for  $\beta$ -NAT, STS, and ice in MIPAS infrared limb emission measurements of polar stratospheric clouds. *Atmos. Chem. Phys.*, 6:1201–1219, 2006.
- M. Höpfner, J. Orphal, T. von Clarmann, G. P. Stiller, und H. Fischer. Stratospheric BrONO<sub>2</sub> observed by MIPAS. *Atmos. Chem. Phys.*, 9:1735–1746, 2009.
- M. Höpfner, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, J. Orphal, G. Stiller, T. von Clarmann, B. Funke, und C. D. Boone. Sulfur dioxide (SO<sub>2</sub>) as observed by MIPAS/Envisat: temporal development and spatial distribution at 15–45 km altitude. *Atmos. Chem. Phys.*, 13:10405–10423, 2013. doi: 10.5194/acp-13-10405-2013.
- D. F. Hurst, S. J. Oltmans, H. Vömel, K. H. Rosenlof, S. M. Davis, E. A. Ray, E. G. Hall, und A. F. Jordan. Stratospheric water vapor trends over Boulder, Colorado: Analysis of the 30 year Boulder record. *J. Geophys. Res.*, 116, 2011. doi: 10.1029/2010JD015065.
- IMK ASF. Publikationen. <http://www.imk-asf.kit.edu/Publikationen.php>.
- Institut für Meteorologie der FUB. Die Quasi-Biennial-Oszillation (QBO) Datenreihe. <http://www.geo.fu-berlin.de/met/ag/strat/produkte/qbo/index.html>.
-

- A. Jones, J. Urban, D. P. Murtagh, P. Eriksson, S. Brohede, C. Haley, D. Degenstein, A. Bourassa, C. von Savigny, T. Sonkaew, A. Rozanov, H. Bovensmann, and J. Burrows. Evolution of stratospheric ozone and water vapour time series studied with satellite measurements. *Atmos. Chem. Phys.*, 9:6055–6075, 2009.
- M. D. H. Jones und A. Henderson-Sellers. History of the greenhouse effect. *Prog. Phys. Geogr.*, 14:1–18, 1990.
- S. Kellmann, T. von Clarmann, G. P. Stiller, E. Eckert, N. Glatthor, M. Höpfner, M. Kiefer, J. Orphal, B. Funke, U. Grabowski, A. Linden, G. S. Dutton, und J. W. Elkins. Global CFC-11 ( $\text{CCl}_3\text{F}$ ) and CFC-12 ( $\text{CCl}_2\text{F}_2$ ) measurements with the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS): retrieval, climatologies and trends. *Atmos. Chem. Phys.*, 12:11857–11875, 2012. doi: 10.5194/acp-12-11857-2012.
- F. Khosrawi, R. Müller, J. Urban, M. H. Proffitt, G. Stiller, M. Kiefer, S. Lossow, D. Kinnison, F. Olschewski, M. Riese, und D. Murtagh. Assessment of the interannual variability and influence of the QBO and upwelling on tracer-tracer distributions of  $\text{N}_2\text{O}$  and  $\text{O}_3$  in the tropical lower stratosphere. *Atmos. Chem. Phys.*, 13:3619–3641, 2013. doi: 10.5194/acp-13-3619-2013.
- M. Kiefer, T. von Clarmann, U. Grabowski, M. De Laurentis, R. Mantovani, M. Milz, und M. Ridolfi. Characterization of MIPAS elevation pointing. *Atmos. Chem. Phys.*, 7(6):1615–1628, 2007.
- C. Kiemle, M. Wirth, A. Fix, G. Ehret, U. Schumann, T. Gardiner, C. Schiller, N. Sitnikov, und G. Stiller. First airborne water vapor lidar measurements in the tropical upper troposphere and mid-latitudes lower stratosphere: accuracy evaluation and intercomparisons with other instruments. *Atmos. Chem. Phys.*, 8: 5245–5261, 2008. doi: 10.5194/acp-8-5245-2008.
- K. Kikuchi, T. Nishibori, S. Ochiai, H. Ozeki, Y. Irimajiri, Y. Kasai, M. Koike, T. Manabe, K. Mizukoshi, Y. Murayama, T. Nagahama, T. Sano, R. Sato, M. Seta, C. Takahashi, M. Takayanagi, H. Masuko, J. Inatani, M. Suzuki, und M. Shiotani. Overview and early results of the Superconducting Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES). *J. Geophys. Res. Atmos.*, 115(D23), 2010. doi: 10.1029/2010JD014379.
- D. B. Kirk-Davidoff, E. J. Hintsa, J. G. Anderson, und D. W. Keith. The effect of climate change on ozone depletion through changes in stratospheric water vapour. *Nature*, 402:399–401, 1999.
-

- A. Kleinert und O. Trieschmann. Phase determination for a Fourier transform infrared spectrometer in emission mode. *Appl. Opt.*, 46(12):2307–2319, 2007. doi: 10.1364/AO.46.002307. <http://ao.osa.org/abstract.cfm?URI=ao-46-12-2307>.
- K. Krüger, S. Tegtmeier, und M. Rex. Long-term climatology of air mass transport through the Tropical Tropopause Layer (TTL) during NH winter. *Atmos. Chem. Phys.*, 8:813–823, 2008.
- M. Kunze, P. Braesicke, U. Langematz, G. Stiller, S. Bekki, C. Brühl, M. Chipperfield, M. Dameris, R. Garcia, und M. Giorgetta. Influences of the Indian summer monsoon on water vapor and ozone concentrations in the UTLS as simulated by chemistry-climate models. *Amer. Met. Soc.*, 23:3525–3544, 2010. doi: 10.1175/2010JCLI3280.1.
- E. Kyrölä, J. Tamminen, G. W. Leppelmeier, V. Sofieva, S. Hassinen, J. L. Bertaux, A. Hauchecorne, F. Dalaudier, C. Cot, O. Korablev, O. Fanton d’Andon, G. Barrot, A. Mangin, B. Théodore, M. Guirlet, F. Etanchaud, P. Snoeij, R. Koopman, L. Saavedra, R. Fraisse, D. Fussen, und F. Vanhellemont. GOMOS on Envisat: an overview. *Adv. in Space Res.*, 33(7):1020–1028, 2004. doi: 10.1016/S0273-1177(03)00590-8.
- C. Land, J. Feichter, und R. Sausen. Impact of vertical resolution on the transport of passive tracers in the ECHAM4 model. *Tellus B*, 54:344–360, 2002. doi: 10.1034/j.1600-0889.2002.201367.x.
- T. Landscheidt. Solar forcing of El Niño and La Niña. In A. Wilson, Hrsg., *The solar cycle and terrestrial climate, solar and space weather*, Band 463 von *ESA Special Publication*, Seiten 135–140, 2000. <http://adsabs.harvard.edu/abs/2000ESASP.463..135L>.
- D. J. Lary. Catalytic destruction of stratospheric ozone. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 102:21515–21526, 1997. doi: 10.1029/97JD00912.
- H. Le Texier, S. Solomon, und R. R. Garcia. The role of molecular hydrogen and methane oxidation in the water vapour budget of the stratosphere. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 114:281–295, 1988.
- A. Levenberg. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. *Quart. Appl. Math.*, 2:164–168, 1944.
- K. N. Liou. *An introduction to atmospheric radiation*, Band 26. Academic Press Inc., 1980.
- S. Lossow. personal communication, 2014.
-

- R. L. Lucke, D. R. Korwan, R. M. Bevilacqua, J. S. Hornstein, E. P. Shettle, D. T. Chen, M. Daehler, J. D. Lumpe, M. D. Fromm, D. Debrestian, B. Neff, M. Squire, G. König-Langlo, und J. Davies. The Polar Ozone and Aerosol Measurement (POAM) III instrument and early validation results. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 104:18785–18799, 1999. doi: 10.1029/1999JD900235.
- D. W. Marquardt. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 11(2):431–441, 1963.
- L. E. Mauldin III, N. H. Zaun, M. P. McCormick, Jr., J. H. Guy, und W. R. Vaughn. Stratospheric Aerosol and Gas Experiment II instrument: A functional description. *Opt. Eng.*, 24, 1985. doi: 10.1117/12.7973473.
- J. Mendrok, F. Schreier, und M. Höpfner. Estimating cirrus cloud properties from MIPAS data. *Geophys. Res. Lett.*, 34:L08807, 2007. doi: 10.1029/2006GL028246.
- G. Mengistu Tsidu, T. von Clarmann, G. P. Stiller, M. Höpfner, H. Fischer, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, M. Milz, T. Steck, D.-Y. Wang, und B. Funke. Stratospheric N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> in the austral spring 2002 as retrieved from limb emission spectra recorded by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *J. Geophys. Res.*, 109:D18301, 2004. doi: 10.1029/2004JD004856.
- MESSy Website. The highly structured Modular Earth Submodel System (MESSy). <http://www.messy-interface.org/>.
- Stephanie Meul. *Ozon-Klima-Wechselwirkungen in Simulationen mit dem Klima-Chemie-Modell EMAC*. Doktorarbeit, Freie Universität Berlin, 2013.
- M. Milz, T. von Clarmann, H. Fischer, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, T. Steck, G. P. Stiller, B. Funke, M. López-Puertas, und M. E. Koukouli. Water vapor distributions measured with the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding on board Envisat (MIPAS/Envisat). *J. Geophys. Res.*, 110:D24307, 2005. doi: 10.1029/2005JD005973.
- M. Milz, T. von Clarmann, P. Bernath, C. Boone, S. A. Buehler, S. Chauhan, B. Deuber, D. G. Feist, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, A. Griesfeller, A. Haefele, M. Höpfner, N. Kämpfer, S. Kellmann, A. Linden, S. Müller, H. Nakajima, H. Oelhaf, E. Remsberg, S. Rohs, J. M. Russell III, C. Schiller, G. P. Stiller, T. Sugita, T. Tanaka, H. Vömel, K. Walker, G. Wetzels, T. Yokota, V. Yushkov, und G. Zhang. Validation of water vapour profiles (version 13) retrieved by the IMK/IAA scientific retrieval processor based on full resolution spectra measured by MIPAS on board Envisat. *Atmos. Meas. Tech.*, 2:379–399, 2009.
-

- P. W. Mote, K. H. Rosenlof, M. E. McIntyre, E. S. Carr, J. C. Gille, J. R. Holton, J. S. Kinnersley, H. C. Pumphrey, J. M. Russell, und J. W. Waters. An atmospheric tape recorder: The imprint of tropical tropopause temperatures on stratospheric water vapor. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 101(D2):3989–4006, 1996. doi: 10.1029/95JD03422.
- E. J. Moyer, F. W. Irion, Y. L. Yung, und M. R. Gunson. ATMOS stratospheric deuterated water and implications for troposphere-stratosphere transport. *Geophys. Res. Lett.*, 23:2385–2388, 1996.
- D. M. Murphy und T. Koop. Review of the vapour pressures of ice and supercooled water for atmospheric applications. *Quart. J. of R. Met. Soc.*, 131:1539–1565, 2005. doi: 10.1256/qj.04.94.
- H. Nakajima, M. Suzuki, A. Matsuzaki, T. Ishigaki, K. Waragai, Y. Mogi, N. Kimura, N. Araki, T. Yokota, H. Kanzawa, T. Sugita, und Y. Sasano. Characteristics and performance of the Improved Limb Atmospheric Spectrometer (ILAS) in orbit. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 107(D24), 2002. doi: 10.1029/2001JD001439.
- H. Nakajima, T. Sugita, T. Yokota, T. Ishigaki, Y. Mogi, N. Araki, K. Waragai, N. Kimura, T. Iwazawa, A. Kuze, J. Tanii, H. Kawasaki, M. Horikawa, T. Togami, N. Uemura, H. Kobayashi, und Y. Sasano. Characteristics and performance of the Improved Limb Atmospheric Spectrometer-II (ILAS-II) on board the ADEOS-II satellite. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 111(D11), 2006. doi: 10.1029/2005JD006334.
- G. E. Nedoluha, R. M. Gomez, D. R. Allen, A. Lambert, C. Boone, und G. Stiller. Variations in middle atmospheric water vapor from 2004 to 2013. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 118:11285–11293, 2013a. doi: 10.1002/jgrd.50834.
- G. E. Nedoluha, R. M. Gomez, H. Neal, A. Lambert, D. Hurst, C. Boone, und G. Stiller. Validation of long-term measurements of water vapor from the mid-stratosphere to the mesosphere at two Network for the Detection of Atmospheric Composition Change sites. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 118:934–942, 2013b. doi: 10.1029/2012JD018900.
- R. E. Newell und S. Gould-Stewart. A Stratospheric fountain? *J. Atmos. Sci.*, 38 (12):2789–2796, 1981.
- NOAA Earth System Research Laboratory. Multivariate ENSO index (MEI). <http://www.esrl.noaa.gov/psd/enso/mei/>.
- S. Noël, H. Bovensmann, J. P. Burrows, J. Frerick, K. V. Chance, A. P. H. Goede, und C. Müller. SCIAMACHY instrument on ENVISAT-1. In *Proc. SPIE*, Band 3498, Seiten 94–104, 1998. doi: 10.1117/12.333621.
-

- S. Noël, K. Bramstedt, A. Rozanov, H. Bovensmann, und J. P. Burrows. Water vapour profiles from SCIAMACHY solar occultation measurements derived with an onion peeling approach. *Atmos. Meas. Tech.*, 3:523–535, 2010. doi: 10.5194/amt-3-523-2010.
- H. Norton und R. Beer. New apodizing functions for Fourier spectrometry. *J. Opt. Soc. Am.*, 66(3):259–264, 1976.
- Sophie Oberländer. *Die Änderungen der Brewer-Dobson Zirkulation mit dem Klimawandel*. Doktorarbeit, Freie Universität Berlin, 2013.
- S. J. Oltmans, H. Vömel, D. J. Hofmann, K. H. Rosenlof, und D. Kley. The increase in stratospheric water vapor from balloonborne, frostpoint hygrometer measurements at Washington, D.C., and Boulder, Colorado. *Geophys. Res. Lett.*, 27: 3453–3456, 2000. doi: 10.1029/2000GL012133.
- L. Pfister, H. B. Selkirk, E. J. Jensen, M. R. Schoeberl, O. B. Toon, E. V. Browell, W. B. Grant, B. Gary, M. J. Mahoney, T. V. Bui, und E. Hintsä. Aircraft observations of thin cirrus clouds near the tropical tropopause. *J. Geophys. Res.*, 106: 9765–9786, 2001. doi: 10.1029/2000JD900648.
- J. Plieninger, A. Laeng, S. Lossow, T. von Clarmann, G. P. Stiller, U. Grabowski, N. Glatthor, S. Kellmann, A. Linden, F. Haenel, K. Walker, S. Noël, M. Herwig, M. McHugh, A. Lambert, und J. Urban. Recent improvements in retrieving methane and nitrous oxide from MIPAS-ENVISAT. in Vorbereitung.
- R. A. Plumb. A “tropical pipe” model of stratospheric transport. *J. Geophys. Res.*, 101:3957–3972, 1996.
- H. C. Pumphrey. Validation of a new prototype water vapor retrieval for the UARS Microwave Limb Sounder. *J. Geophys. Res.*, 104(D8):9399–9412, 1999.
- W. J. Randel, Fei Wu, J. M. Russell III, Aidan Roche, und J. W. Waters. Seasonal cycles and QBO variations in stratospheric  $CH_4$  and  $H_2O$  observed in UARS HALOE data. *J. Atmos. Sci.*, 55:163–185, 1998. doi: 10.1175/1520-0469(1998)055<0163:SCAQVI>2.0.CO;2.
- W. J. Randel, F. Wu, R. Swinbank, J. Nash, und A. O’Neill. Global QBO circulation derived from UKMO stratospheric analyses. *J. Atmos. Sci.*, 56:457–474, 1999. doi: 10.1175/1520-0469(1999)056<0457:GQCDFU>2.0.CO;2.
- W. J. Randel, F. Wu, H. Vömel, G. E. Nedoluha, und P. Forster. Decreases in stratospheric water vapor after 2001: Links to changes in the tropical tropopause and the Brewer-Dobson circulation. *J. Geophys. Res.*, 111, 2006. doi: 10.1029/2005JD006744.
-

- C. A. Reber, C. E. Trevathan, R. J. McNeal, und M. R. Luther. The Upper Atmosphere Research Satellite (UARS) mission. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 98(D6): 10643–10647, 1993. doi: 10.1029/92JD02828.
- G. C. Reid. Seasonal and interannual temperature variations in the tropical stratosphere. *J. Geophys. Res.*, 99:18923–18932, 1994.
- G. C. Reinsel, E. C. Weatherhead, G. C. Tiao, A. J. Miller, R. M. Nagatani, D. J. Wuebbles, und L. E. Flynn. On detection of turnaround and recovery in trend for ozone. *J. Geophys. Res.*, 107, 2002. doi: 10.1029/2001JD000500.
- C. Reithmeier und R. Sausen. ATTILA: atmospheric tracer transport in a Lagrangian model. *Tellus B*, 54:278–299, 2002. doi: 10.1034/j.1600-0889.2002.01236.x.
- E. E. Remsberg, M. Natarajan, G. S. Lingenfelser, R. E. Thompson, B. T. Marshall, und L. L. Gordley. On the quality of the Nimbus 7 LIMS Version 6 water vapor profiles and distributions. *Atmos. Chem. Phys.*, 9(23):9155–9167, 2009.
- M. M. Rienecker, M. J. Suarez, R. Gelaro, R. Todling, J. Bacmeister, E. Liu, M. G. Bosilovich, S. D. Schubert, L. Takacs, G.-K. Kim, S. Bloom, J. Chen, D. Collins, A. Conaty, A. da Silva, W. Gu, J. Joiner, R. D. Koster, R. Lucchesi, A. Molod, T. Owens, S. Pawson, P. Pegion, C. R. Redder, R. Reichle, F. R. Robertson, A. G. Ruddick, M. Sienkiewicz, und J. Woollen. MERRA: NASA’s Modern-Era Retrospective Analysis for Research and Applications. *J. of Climate*, 24:3624–3648, 2011. doi: 10.1175/JCLI-D-11-00015.1.
- M. Riese, F. Ploeger, A. Rap, B. Vogel, P. Konopka, M. Dameris, und P. Forster. Impact of uncertainties in atmospheric mixing on simulated UTLS composition and related radiative effects. *J. Geophys. Res.*, 117, 2012. doi: 10.1029/2012JD017751.
- A. E. Roche, J. B. Kumer, J. L. Mergenthaler, G. A. Ely, W. G. Uplinger, J. F. Potter, T. C. James, und L. W. Sterritt. The cryogenic limb array etalon spectrometer (CLAES) on UARS: Experiment description and performance. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 98(D6):10763–10775, 1993. doi: 10.1029/93JD00800.
- C. D. Rodgers. *Inverse methods for atmospheric sounding - theory and practice*, Band 2. World Scientific, 2000.
- E. Roeckner, G. Bäuml, L. Bonaventura, R. Brokopf, M. Esch, M. Giorgetta, S. Hagemann, I. Kirchner, L. Kornbluh, E. Manzini, A. Rhodin, U. Schlese, U. Schulzweida, und A. Tompkins. The atmospheric general circulation model ECHAM5. PART I: Model description. Technical report, Max Planck Institute for Meteorology, 2003. [http://www.mpimet.mpg.de/fileadmin/publikationen/Reports/max\\_scirep\\_349.pdf](http://www.mpimet.mpg.de/fileadmin/publikationen/Reports/max_scirep_349.pdf).
-

- E. Roeckner, R. Brokopf, M. Esch, M. Giorgetta, S. Hagemann, L. Kornblueh, E. Manzini, U. Schlese, und U. Schulzweida. The atmospheric general circulation model ECHAM5. PART II: Sensitivity of simulated climate to horizontal and vertical resolution. Technical report, Max Planck Institute for Meteorology, 2004. [http://www.mpimet.mpg.de/fileadmin/publikationen/Reports/max\\_scirep\\_354.pdf](http://www.mpimet.mpg.de/fileadmin/publikationen/Reports/max_scirep_354.pdf).
- K. H. Rosenlof und G. C. Reid. Trends in the temperature and water vapor content of the tropical lower stratosphere: Sea surface connection. *J. Geophys. Res.*, 113, 2008. doi: 10.1029/2007JD009109.
- L. S. Rothman, D. Jacquemart, A. Barbe, D. C. Benner, M. Birk, L. R. Brown, M. R. Carleer, C. Chackerian, Jr., K. Chance, L. H. Coudert, V. Dana, V. M. Devi, J.-M. Flaud, R. R. Gamache, A. Goldman, J.-M. Hartmann, K. W. Jucks, A. G. Maki, J.-Y. Mandin, S.T. Massie, J. Orphal, A. Perrin, C. P. Rinsland, M.A.H. Smith, J. Tennyson, R. N. Tolchenov, R. A. Toth, J. Vander Auwera, P. Varanasi, und G. Wagner. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 96:139–204, 2005.
- A. Rozanov, K. Weigel, H. Bovensmann, S. Dhomse, K.-U. Eichmann, R. Kivi, V. Rozanov, H. Vömel, M. Weber, und J. P. Burrows. Retrieval of water vapor vertical distributions in the upper troposphere and the lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements. *Atmos. Meas. Tech.*, 4(5):933–954, 2011.
- J. M. Russell III. HALOE Level 2 data description, 1995. [http://badc.nerc.ac.uk/browse/badc/haloe/doc/haloe\\_l2.sfdu](http://badc.nerc.ac.uk/browse/badc/haloe/doc/haloe_l2.sfdu).
- J. M. Russell III, L. L. Gordley, J. H. Park, S. R. Drayson, W. D. Hesketh, R. J. Cicerone, A. F. Tuck, J. E. Frederick, J. E. Harries, und P. J. Crutzen. The Halogen Occultation Experiment. *J. Geophys. Res.*, 98:10777–10797, 1993.
- J. M. Russell III, M. B. Scott, L. L. Gordley, D. W. Rusch, M. Horányi, M. E. Hervig, G. E. Thomas, C. E. Randall, D. E. Siskind, M. H. Stevens, M. E. Summers, M. J. Taylor, C. R. Englert, P. J. Espy, W. E. McClintock, und A. W. Merkel. The Aeronomy of Ice in the Mesosphere (AIM) mission: Overview and early science results. *J. Atmos. and Sol.-Terr. Phys.*, 71:289–299, 2009. doi: 10.1016/j.jastp.2008.08.011.
- J. F. Scinocca, N. A. McFarlane, M. Lazare, J. Li, und D. Plummer. Technical note: The CCCma third generation AGCM and its extension into the middle atmosphere. *Atmos. Chem. Phys.*, 8:7055–7074, 2008. doi: 10.5194/acp-8-7055-2008.
- SHARP. Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction. <http://www.geo.fu-berlin.de/en/met/sharp/index.html>.
-

- T. Shepherd. The middle atmosphere. *J. of Atmosph. and Sol.-Terr. Physics*, 62: 1587–1601, 2000.
- S. C. Sherwood und A. E. Dessler. On the control of stratospheric humidity. *Geophys. Res. Lett.*, 27:2513–2516, 2000.
- A. Simmons, M. Hortal, G. Kelly, A. McNally, A. Untch, und S. Uppala. ECMWF analyses and forecasts of stratospheric winter Polar Vortex breakup: September 2002 in the Southern Hemisphere and related events. *J. Atmos. Sci.*, 62:668–689, 2005. doi: <http://dx.doi.org/10.1175/JAS-3322.1>.
- C.E. Sioris, J. Zou, C.T. McElroy, C.A. McLinden, und H. Vömel. High vertical resolution water vapour profiles in the upper troposphere and lower stratosphere retrieved from MAESTRO solar occultation spectra. *Adv. in Space Res.*, 46(5): 642–650, 2010. doi: 10.1016/j.asr.2010.04.040.
- J. A. Smith, A. S. Ackerman, E. J. Jensen, und O. B. Toon. Role of deep convection in establishing the isotopic composition of water vapor in the tropical transition layer. *Geophys. Res. Lett.*, 33, 2006. doi: 10.1029/2005GL024078.
- SOHO Projekts. F10.7 Index Messdatensatz. [http://sohowww.nascom.nasa.gov/sdb/ydb/indices\\_flux\\_raw/Penticton\\_Observed/monthly/MONTHPLT.OBS](http://sohowww.nascom.nasa.gov/sdb/ydb/indices_flux_raw/Penticton_Observed/monthly/MONTHPLT.OBS).
- S. Solomon. The mystery of the Antarctic Ozone “Hole”. *Rev. Geophys.*, 26:131–148, 1988. doi: 10.1029/RG026i001p00131.
- SPARC. SPARC Newsletter No. 40. Technical report, WMO, 2013. zu finden auf: <http://www.sparc-climate.org/publications/newsletter/>.
- SPARC Report N°2. SPARC Report N°2: SPARC assessment of upper tropospheric and stratospheric water vapour. Technical report, WMO, 2000. zu finden auf: <http://www.sparc-climate.org/publications/sparc-reports/sparc-report-no2/>.
- T. Steck, N. Glatthor, T. von Clarmann, H. Fischer, J. M. Flaud, B. Funke, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, M. Milz, A. Perrin, und G. P. Stiller. Retrieval of global upper tropospheric and stratospheric formaldehyde (H<sub>2</sub>CO) distributions from high-resolution MIPAS-Envisat spectra. *Atmos. Chem. Phys.*, 8:463–470, 2008.
- B. Steil, M. Dameris, C. Brühl, P. J. Crutzen, V. Grewe, M. Ponater, und R. Sausen. Development of a chemistry module for GCMs: First results of a multiannual integration. *Ann. Geophysicae*, 16:205–228, 1998. doi: 10.1007/s00585-998-0205-8.
- J. Steinwagner, M. Milz, T. von Clarmann, N. Glatthor, U. Grabowski, G. P. Höpfner, M. Stiller, und T. Röckmann. HDO measurements with MIPAS. *Atmos. Chem. Phys.*, 7:2601–2615, 2007.
-

- J. Steinwagner, S. Fueglistaler, G. Stiller, T. von Clarmann, M. Kiefer, P.-P. Borsboom, A. van Delden, und T. Röckmann. Tropical dehydration processes constrained by the seasonality of stratospheric deuterated water. *Nat. Geos.*, 3:262–266, 2010. doi: 10.1038/ngeo822.
- G. P. Stiller, Hrsg. *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm (KOPRA)*, Band FZKA 6487 von *Wissenschaftliche Berichte*. Forschungszentrum Karlsruhe, 2000.
- G. P. Stiller und S. Lossow. personal communication, 2014.
- G. P. Stiller, G. Mengistu Tsidu, T. von Clarmann, N. Glatthor, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, R. Ruhnke, H. Fischer, M. López-Puertas, B. Funke, und S. Gil-López. An enhanced HNO<sub>3</sub> second maximum in the Antarctic mid-winter upper stratosphere 2003. *J. Geophys. Res.*, 110:D20303, 2005. doi: 10.1029/2005JD006011.
- G. P. Stiller, T. von Clarmann, C. Brühl, H. Fischer, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, P. Jöckel, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, M. López-Puertas, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, und B. Steil. Global distributions of HO<sub>2</sub>NO<sub>2</sub> as observed by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *J. Geophys. Res.*, 112:D09314, 2007. doi: 10.1029/2006JD007212.
- G. P. Stiller, T. von Clarmann, M. Höpfner, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, A. Kleinert, A. Linden, M. Milz, T. Reddman, T. Steck, H. Fischer, B. Funke, M. López-Puertas, und A. Engel. Global distribution of mean age of stratospheric air from MIPAS SF<sub>6</sub> measurements. *Atmos. Chem. Phys.*, 8:677–695, 2008.
- G. P. Stiller, M. Kiefer, E. Eckert, T. von Clarmann, S. Kellmann, M. García-Comas, B. Funke, T. Leblanc, E. Fetzer, L. Froidevaux, M. Gomez, E. Hall, D. Hurst, A. Jordan, N. N. Kämpfer, A. Lambert, I. S. McDermid, T. McGee, L. Miloshevich, G. Nedoluha, W. Read, M. Schneider, M. Schwartz, C. Straub, G. Toon, L. W. Twigg, K. Walker, und D. N. D. N. Whiteman. Validation of MIPAS IMK/IAA temperature, water vapor, and ozone profiles with MOHAVE-2009 campaign measurements. *Atmos. Meas. Tech.*, 5:289–320, 2012a. doi: 10.5194/amt-5-289-2012.
- G. P. Stiller, T. von Clarmann, F. Haenel, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, S. Lossow, und M. López-Puertas. Observed temporal evolution of global mean age of stratospheric air for the 2002 to 2010 period. *Atmos. Chem. Phys.*, 12:3311–3331, 2012b. doi: 10.5194/acp-12-3311-2012.
-

- G. P. Stiller, T. von Clarmann, F. Haenel, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, S. Lossow, und M. López-Puertas. Observed temporal evolution of global mean age of stratospheric air for the 2002 to 2010 period. *Atmos. Chem. Phys.*, 12:3311–3331, 2012c.
- B. D. Tapley, S. Bettadpur, M. Watkins, und C. Reigber. The gravity recovery and climate experiment: Mission overview and early results. *Geophys. Res. Lett.*, 31(9), 2004. doi: 10.1029/2004GL019920.
- F. W. Taylor, C. D. Rodgers, J. G. Whitney, S. T. Werrett, J. J. Barnett, G. D. Peskett, P. Venters, J. Ballard, C. W. P. Palmer, R. J. Knight, P. Morris, T. Nighthingale, und A. Dudhia. Remote sensing of atmospheric structure and composition by pressure modulator radiometry from space: The ISAMS experiment on UARS. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 98(D6):10799–10814, 1993. doi: 10.1029/92JD03029.
- L. W. Thomason und G. Taha. SAGE III aerosol extinction measurements: Initial results. *Geophys. Res. Lett.*, 30, 2003. doi: 10.1029/2003GL017317.
- A. Tikhonov. On the solution of incorrectly stated problems and method of regularization. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 151:501–504, 1963.
- B. Tschanz, C. Straub, D. Scheiben, K. A. Walker, G. P. Stiller, und N. Kämpfer. Validation of middle-atmospheric campaign-based water vapour measured by the ground-based microwave radiometer MIAWARA-C. *Atmos. Meas. Tech.*, 6:1725–1745, 2013. doi: 10.5194/amt-6-1725-2013.
- S. M. Uppala, P. W. Kållberg, A. J. Simmons, U. Andrae, V. Da Costa Bechtold, M. Fiorino, J. K. Gibson, J. Haseler, A. Hernandez, G. A. Kelly, X. Li, K. Onogi, S. Saarinen, N. Sokka, R. P. Allan, E. Andersson, K. Arpe, M. A. Balmaseda, A. C. M. Beljaars, L. Van de Berg, J. Bidlot, N. Bormann, S. Caires, F. Chevallier, A. Dethof, M. Dragosavac, M. Fisher, M. Fuentes, S. Hagemann, E. Hólm, B. J. Hoskins, L. Isaksen, P. A. E. M. Janssen, R. Jenne, A. P. McNally, J.-F. Mahfouf, J.-J. Morcrette, N. A. Rayner, R. W. Saunders, P. Simon, A. Ster, K. E. Trenberth, A. Untch, D. Vasiljevic, P. Viterbo, und J. Woollen. The ERA-40 re-analysis. *Quart. J. of R. Met. Soc.*, 131:2961–3012, 2005. doi: 10.1256/qj.04.176.
- J. Urban, N. Lautié, D. Murtagh, P. Eriksson, Y. Kasai, S. Lossow, E. Dupuy, J. de La Noë, U. Frisk, M. Olberg, E. Le Flochmoën, und P. Ricaud. Global observations of middle atmospheric water vapour by the Odin satellite: An overview. *Planet. Space Sci.*, 55(9):1093 – 1102, 2007.
- J. Urban, S. Lossow, G. Stiller, und W. Read. Another drop in water vapor. *Eos Trans. AGU*, 95:245–246, 2014. doi: 10.1002/2014EO270001.
-

- G. K. Vallis. *Atmospheric and oceanic fluid dynamics*. Cambridge University Press, 2008.
- H. C. van de Hulst. *Light scattering by small particles*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 1957. ISBN 9780486642284. <http://books.google.ch/books?id=PIHfPMVAFRcC>.
- S. Versick, G. P. Stiller, T. von Clarmann, T. Reddmann, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, R. Ruhnke, und H. Fischer. Global stratospheric hydrogen peroxide distribution from MIPAS-Envisat full resolution spectra compared to KASIMA model results. *Atmos. Chem. Phys.*, 12:4923–4933, 2012. doi: 10.5194/acp-12-4923-2012.
- H. Vömel. Saturation vapor pressure formulations, 2011. <http://cires.colorado.edu/~voemel/vp.html>.
- T. von Clarmann. *Zur Fernerkundung der Erdatmosphäre mittels Infrarotspektroskopie: Rekonstruktionstheorie und Anwendung*, Band FZKA 6928 von *Wissenschaftliche Berichte*. Forschungszentrum Karlsruhe, 2003.
- T. von Clarmann, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, D. Y. Wang, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López, und M. López-Puertas. Retrieval of temperature and tangent altitude pointing from limb emission spectra recorded from space by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *J. Geophys. Res.*, 108:4736, 2003. doi: 10.1029/2003JD003602.
- T. von Clarmann, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, H. Fischer, und B. Funke. Global stratospheric HOCl distributions retrieved from infrared limb emission spectra recorded by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *J. Geophys. Res.*, 111:D05311, 2006. doi: 10.1029/2005JD005939.
- T. von Clarmann, N. Glatthor, M. E. Koukouli, G. P. Stiller, B. Funke, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, M. Milz, T. Steck, und H. Fischer. MIPAS measurements of upper tropospheric C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> and O<sub>3</sub> during the southern hemispheric biomass burning season in 2003. *Atmos. Chem. Phys.*, 7:5861–5872, 2007.
- T. von Clarmann, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, S. Chauhan, B. Funke, U. Grabowski, N. Glatthor, M. Kiefer, T. Schieferdecker, G. P. Stiller, und S. Versick. Retrieval of temperature, H<sub>2</sub>O, O<sub>3</sub>, HNO<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O, ClONO<sub>2</sub> and ClO from MIPAS reduced resolution nominal mode limb emission measurements. *Atmos. Meas. Tech.*, 2:159–175, 2009. doi: 10.5194/amt-2-159-2009.
-

- T. von Clarmann, G. Stiller, U. Grabowski, E. Eckert, und J. Orphal. Technical note: Trend estimation from irregularly sampled, correlated data. *Atmos. Chem. Phys.*, 10:6737–6747, 2010.
- D. Y. Wang, M. Höpfner, C. E. Blom, W. E. Ward, H. Fischer, T. Blumenstock, F. Hase, C. Keim, G. Y. Liu, S. Mikuteit, H. Oelhaf, G. Wetzels, U. Cortesi, F. Mencaraglia, G. Bianchini, G. Redaelli, M. Pirre, V. Catoire, N. Huret, C. Vigouroux, M. De Mazière, E. Mahieu, P. Demoulin, S. Wood, D. Smale, N. Jones, H. Nakajima, T. Sugita, J. Urban, D. Murtagh, C. D. Boone, P. F. Bernath, K. A. Walker, J. Kuttippurath, A. Kleinböhl, G. Toon, und C. Piccolo. Validation of MIPAS HNO<sub>3</sub> operational data. *Atmos. Chem. Phys.*, 7:4905–4934, 2007.
- R.T. Wetherald und S. Manabe. Cloud feedback processes in a general circulation model. *J. Atmos. Sci.*, 45:1397–1415, 1988.
- G. Wetzels, A. Bracher, B. Funke, F. Goutail, F. Hendrick, J.-C. Lambert, S. Mikuteit, C. Piccolo, M. Pirre, A. Bazureau, C. Belotti, T. Blumenstock, M. De Mazière, H. Fischer, N. Huret, D. Ionov, M. López-Puertas, G. Maucher, H. Oelhaf, J.-P. Pommereau, R. Ruhnke, M. Sinnhuber, G. Stiller, M. Van Roozendaal, und G. Zhang. Validation of MIPAS-ENVISAT NO<sub>2</sub> operational data. *Atmos. Chem. Phys.*, 7:3261–3284, 2007.
- G. Wetzels, H. Oelhaf, G. Berthet, A. Bracher, C. Cornacchia, D. G. Feist, H. Fischer, A. Fix, M. Iarlori, A. Kleinert, A. Lengel, M. M. Milz, L. Mona, S. C. Müller, J. Ovarlez, G. Pappalardo, C. Piccolo, P. Raspollini, J.-B. Renard, V. Rizi, S. Rohs, C. Schiller, G. Stiller, M. Weber, und G. Zhang. Validation of MIPAS-ENVISAT H<sub>2</sub>O operational data collected between July 2002 and March 2004. *Atmos. Chem. Phys.*, 13:5791–5811, 2013. doi: 10.5194/acp-13-5791-2013.
- J. Wickert, C. Reigber, G. Beyerle, R. König, C. Marquardt, T. Schmidt, L. Grunwaldt, R. Galas, T. K. Meehan, W. G. Melbourne, und K. Hocke. Atmosphere sounding by GPS radio occultation: First results from CHAMP. *Geophys. Res. Lett.*, 28(17):3263–3266, 2001. doi: 10.1029/2001GL013117.
- J. E. Wrotny, G. E. Nedoluha, C. Boone, G. P. Stiller, und J. P. McCormack. Total hydrogen budget of the equatorial upper stratosphere. *J. Geophys. Res.*, 115, 2010. doi: 10.1029/2009JD012135.
- E. Yulaeva, J. R. Holton, und J. M. Wallace. On the cause of the annual cycle in tropical lower-stratospheric temperatures. *J. of the Atmos. Sciences*, 51:169–174, 1994.
- W. Zdankowski, T. Trautmann, und A. Bott. *Radiation in the atmosphere - a course in theoretical meteorology*. Cambridge University Press, 2007.
-

# Anhang A

## MIPAS Messmodi

<http://www.atm.ox.ac.uk/group/mipas/rrmodes.html>

Tabelle A.1: MIPAS modes

Mode	HR-Nominal	RR-Nominal	RR-UTLS-1 (old)
Horiz. Abstand	510 km	410 km	275 km
Sweeps/Scan	17	27	18
Scan Nr. 1	68	70	49
Scan Nr. 2	60	66	44
Scan Nr. 3	52	62	39
Scan Nr. 4	47	58	34
Scan Nr. 5	42	54	31
Scan Nr. 6	39	50	28
Scan Nr. 7	36	46	26
Scan Nr. 8	33	43	24
Scan Nr. 9	30	40	22
Scan Nr. 10	27	37	20.5
Scan Nr. 11	24	34	19
Scan Nr. 12	21	31	17.5
Scan Nr. 13	18	29	16
Scan Nr. 14	15	27	14.5
Scan Nr. 15	12	25	13
Scan Nr. 16	9	23	11.5
Scan Nr. 17	6	21	10
Scan Nr. 18		19.5	8.5
Scan Nr. 19		18	

*Fortsetzung auf nächster Seite*

---

*Fortsetzung von vorheriger Seite*

---

Mode	HR-Nominal	RR-Nominal	RR-UTLS-1 (old)
Scan Nr. 20		16.5	
Scan Nr. 21		15	
Scan Nr. 22		13.5	
Scan Nr. 23		12	
Scan Nr. 24		10.5	
Scan Nr. 25		9	
Scan Nr. 26		7.5	
Scan Nr. 27		6	

---

# Anhang B

## Identitätsbeweis

Hier wird der Beweis für die Identität  $\rho(f(x), c_1 + c_2 \cdot g(x)) = \rho(f(x), g(x))$  mittels einiger weniger algebraischer Umformungen gezeigt, wobei  $c_1$  und  $c_2$  beliebige Parameter sind und  $\rho(f(x), g(x))$  der Korrelationskoeffizient zwischen den Funktionen  $f(x)$  und  $g(x)$  ist, welche an diskreten Punkten  $x_i$  gegeben sind. Bei der Expansion nach dem ersten Gleichheitszeichen wurde Gleichung 5.2 aus Unterkapitel 5.3.2 verwendet.

$$\begin{aligned} \rho(f(x), c_1 + c_2 \cdot g(x)) &= \\ &= \frac{\sum_{i=1}^N \left[ \left( f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right) \left( c_1 + c_2 \cdot g(x_i) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (c_1 + c_2 \cdot g(x_j)) \right) \right]}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \left[ f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right]^2 \cdot \sum_{i=1}^N \left[ c_1 + c_2 \cdot g(x_i) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (c_1 + c_2 \cdot g(x_j)) \right]^2}} = \\ &= \frac{\sum_{i=1}^N \left[ \left( f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right) \left( c_1 + c_2 \cdot g(x_i) - c_1 - \frac{c_2}{N} \sum_{j=1}^N g(x_j) \right) \right]}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \left[ f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right]^2 \cdot \sum_{i=1}^N \left[ c_1 + c_2 \cdot g(x_i) - c_1 - \frac{c_2}{N} \sum_{j=1}^N g(x_j) \right]^2}} = \\ &= \frac{c_2 \cdot \sum_{i=1}^N \left[ \left( f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right) \left( g(x_i) - \overline{g(x_{j=1, \dots, N})} \right) \right]}{\sqrt{(c_2)^2 \cdot \sum_{i=1}^N \left[ f(x_i) - \overline{f(x_{j=1, \dots, N})} \right]^2 \cdot \sum_{i=1}^N \left[ g(x_i) - \overline{g(x_{j=1, \dots, N})} \right]^2}} = \\ &= \rho(f(x), g(x)). \end{aligned} \tag{B.1}$$

## Danksagung

Ich möchte mich hier noch bei allen bedanken, die zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben und einige Personen hierbei speziell hervorheben.

Zuallererst möchte ich mich bei meinem ursprünglichen Doktorvater Prof. Dr. Herbert Fischer bedanken, der zusammen mit Dr. Gabriele Stiller den Anstoß zu dieser Arbeit gegeben hat. Vielen Dank auch an meinen ursprünglichen Korreferenten PD Dr. Thomas von Clarmann für seine guten Ratschläge und die Zeit, die er sich für die Beantwortung meiner Fragen genommen hat. Außerdem danke ich ganz besonders Prof. Dr. Johannes Orphal für seine Bereitwilligkeit, als mein neuer Doktorvater die vorliegende Arbeit bis zum Ende zu begleiten. Gleiches gilt für PD Dr. Michael Höpfner, welcher sich bereitklärt hat, als mein Korreferent zu fungieren und der mir während der gesamten Dauer der Arbeit auf jegliche Fragen immer eine stichhaltige Antwort geben konnte.

Dank sagen möchte ich auch der SAT-Gruppe des IMK-ASF. Jeder in dieser Arbeitsgruppe war immer hilfreich bei der Beantwortung jedweder Fragen. Ein ganz besonderes Dankeschön hierbei gilt meiner Betreuerin, Dr. Gabriele Stiller, sowie Dr. Stefan Lossow, die sich beide sehr oft Zeit für ausführliche und fruchtbare Diskussionen über die Arbeit genommen haben und mir zahlreiche hilfreiche und fachkundige Tipps in einem mir zunächst fremden Fach gegeben haben.

Ich danke auch Mahesh Sha, Anika Menchen, Andreas Wiegele, Stefan Versick, Johannes Plieninger und Florian Haenel für ihre freundschaftliche Unterstützung, wann immer ich ihren Rat benötigt habe.

Zu guter Letzt will ich ganz besonders noch meiner Familie sowie meiner Freundin Hanna Plotka für ihre fortwährende Unterstützung danken. Dies hat entscheidend zur Fertigstellung meiner Arbeit beigetragen.

---