

Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft

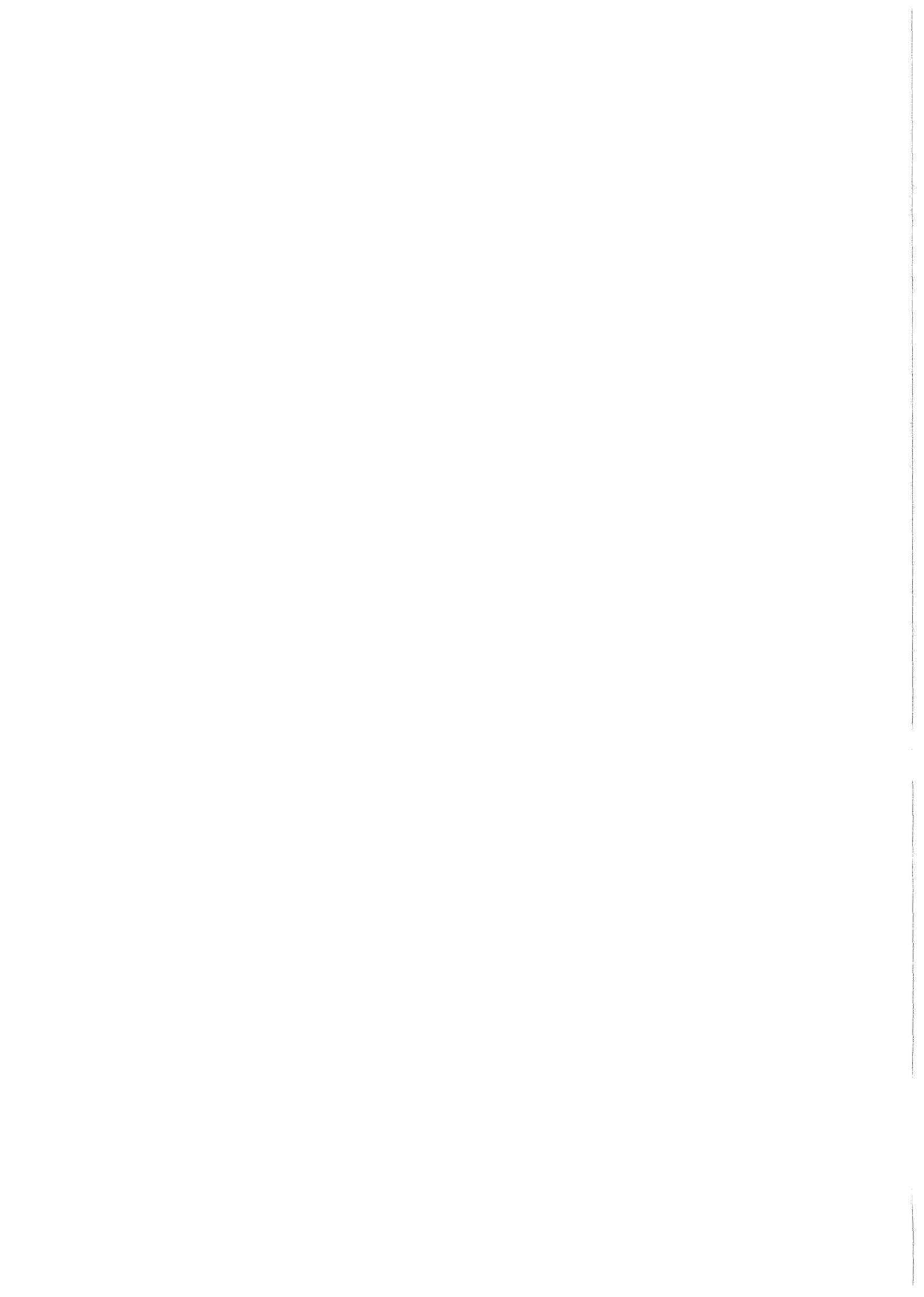
Wissenschaftliche Berichte
FZKA 6772

**Untersuchungen zur Messung
von Wasserdampf in der
tropischen Tropopausenregion
mit MIPAS/Envisat**

M. Milz

Institut für Meteorologie und Klimaforschung

Februar 2003



Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6772

**Untersuchungen zur Messung von Wasserdampf in der
tropischen Tropopausenregion mit MIPAS/Envisat***

Mathias Milz

Institut für Meteorologie und Klimaforschung

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
2003

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

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

ISSN 0947-8620

Zusammenfassung

Der atmosphärische Wasserdampf hat großen Einfluss auf den Strahlungshaushalt und den Wasserkreislauf der Erde. Der Wasserdampfgehalt der Atmosphäre wird durch andere Parameter, wie z.B. die Lufttemperatur, bestimmt. Im Zusammenhang mit dem anthropogenen Treibhauseffekt wird daher, mit den dadurch veränderten Bedingungen, auch der Wasserdampfgehalt modifiziert. Da in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre die Austauschprozesse über die Tropopause stattfinden und dort nur wenige regelmäßige und zuverlässige Messungen durchgeführt worden sind, sind zusätzliche Messungen notwendig, um die Rolle des Wasserdampfs in dieser Region besser zu erfassen. Satellitengetragene Messungen können dazu beitragen, regelmäßig ein Bild der globalen Wasserdampfverteilung zu erhalten.

Am 1. März 2002 startete der europäische Umweltsatellit Envisat. Eines der Experimente an Bord ist das „Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung“ (MIPAS). MIPAS misst mit hoher spektraler Auflösung die von der Atmosphäre emittierte Infrarot-Strahlung. Das Instrument verwendet hierzu die Geometrie der Horizontsondierung, wobei für 17 Tangentenhöhen zwischen 6 und 68 km Höhe Spektren der aus der Atmosphäre emittierten Infrarotstrahlung aufgenommen werden. Diese Spektren werden dann genutzt, um auf Vertikalverteilungen von Spurengasen und der Temperatur mit globaler Abdeckung und guter vertikaler Auflösung zu schließen.

In dieser Arbeit wird die Messbarkeit von Wasserdampfprofilen in der tropischen Tropopausenregion untersucht. Mit einem linearen Ansatz wird eine detaillierte Abschätzung für die zu erwartende Unsicherheit der Wasserdampfmessungen mit MIPAS durchgeführt. Die Ergebnisse werden mit einer entsprechenden Abschätzung für das satellitengetragene Radiometer des „High Resolution Dynamic Limb Sounder“ (HIRDLS) verglichen. Anhand ausgewählter Fallstudien werden die mit dem linearen Ansatz bestimmten charakteristischen Werte der erreichbaren Genauigkeit und Höhenauflösung für das MIPAS-Instrument durch nichtlineare Inversionsrechnungen auf Basis simulierter Messungen bestätigt.

Es wird eine Fehlerbetrachtung für verschiedene Ansätze zur Inversion der Wasserdampfprofile unternommen. Hierbei werden Messungen mit einem Abstand von 3 km zwischen den Tangentenhöhen betrachtet. Zusätzlich werden Messungen mit einem feiner abgestuften Messgitter mit 1,5 km Abstand zwischen den Tangentenstufen untersucht. Die Hauptbeiträge zum gesamten Fehler stammen hier vom sog. Glättungsfehler, der den Einfluss der Regularisierung auf das Ergebnis widerspiegelt. Die zweite bedeutende Fehlerkomponente wird durch unsichere, aber in der Inversion als bekannt angenommene Größen wie z.B. die Mischungsverhältnisse von Spurengasen, die Temperatur und die Kenngrößen der Messgeometrie verursacht und zusammenfassend als Parameterfehler bezeichnet. Das Rauschen des Messgerätes bewirkt eine Unsicherheit im Wasserdampfprofil von nur ca. 5 % und trägt damit am schwächsten zur Gesamtunsicherheit bei. Die Ableitung des Wasserdampfprofils ist für das grobe Messgitter mit einer gesamten Unsicherheit von unter 10 % in der unteren Stratosphäre und unter 25 % in der Tropopausenregion verbunden.

Wenn die Temperatur, deren *a priori* Unsicherheit mit 1,5 K angenommen wird, nicht als bekannte Größe verwendet und in der Inversionsrechnung konstant gehalten wird, sondern neben dem Mischungsverhältnis des Wasserdampfs aus den Messungen abgeleitet wird, reduziert sich die Unsicherheit im Wasserdampfprofil auf unter 10 % im Bereich des

II

Wasserdampfminimums in der unteren Stratosphäre. In der Tropopausenregion wird eine vertikale Auflösung von 2,5 bis 3 km erreicht. Wenn die Messungen mit einem vertikalen Tangentenhöhenabstand von 1,5 km statt den im Standard-Messszenario vorgesehenen 3 km durchgeführt werden, ist wie erwartet eine verbesserte vertikale Auflösung von 1,5 bis 2 km zu erreichen. An der Tropopause reduziert sich der Gesamtfehler, verglichen mit dem groben Tangentenhöhengitter für den simultanen Ansatz zur Inversion, auf unter 20 %. Der qualitative Vergleich mit einer Abschätzung der erwarteten Fehlerbeiträge für eine Wasserdampfmessung mit HIRDLS zeigt, dass unter den angenommenen atmosphärischen Bedingungen und den betrachteten Ansätzen zur Inversion tropischer Wasserdampfprofile die resultierenden Gesamtfehler vergleichbar groß sind.

In ausgesuchten Fallbeispielen werden die zur Ableitung tropischer Wasserdampfprofile aus MIPAS-Messungen notwendigen *a priori* Daten und Nebenbedingungen untersucht und optimiert. Mit bekannten Eingabegrößen werden Messungen simuliert, für die dann die Inversion von Wasserdampfprofilen durchgeführt wird. Aus dem Vergleich zwischen den Ergebnissen und den Eingabegrößen werden Aussagen über die Ableitbarkeit gemacht. Die Ergebnisse der betrachteten Fallbeispiele bestätigen die Ergebnisse aus der Fehlerabschätzung, wonach die simultane Ableitung von Wasserdampf und Temperatur das Wasserdampfprofil besser reproduziert. Die Verwendung eines feinen Retrievalgitters mit einer Abstufung von 1 km ermöglicht in der Tropopausenregion auch zwischen den Tangentenhöhen die Reproduktion des Profilverlaufs.

Abstract

Measurements of Water vapor in the tropical tropopause region with MIPAS/Envisat

Atmospheric water vapor is of great importance for the earth's radiative budget and hydrological cycle. The water vapor content of the air is strongly determined by other parameters, e.g. air temperature. In the context of the anthropogenic greenhouse effect, as a result of changing conditions, the water vapor content of the atmosphere is being modified. In the upper troposphere and lower stratosphere exchange processes across the tropopause take place but there are only few regular reliable measurements in this altitude range. Thus additional measurements are necessary in order to clearly define the role of water vapor in this region. Satellite-borne instruments provide global measurements of water vapor within this altitude range and can help to regularly get an overview of the global water vapor distribution.

On 1 March 2002 the European environmental satellite "Envisat" has been launched successfully. One of the experiments on board is the "Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding" (MIPAS). MIPAS measures the radiation emitted by the atmosphere in the mid-infrared with high spectral resolution. The instrument uses the limb sounding geometry and provides spectra for 17 tangent altitudes between 6 and 68 km. These spectra are used to retrieve vertical distributions of several atmospheric trace gases and the temperature with global coverage and good vertical resolution.

Within the scope of this work the retrievability of water vapor profiles in the tropical tropopause region is examined. A linear approach is used to undertake a detailed analysis for the expected uncertainties for water vapor measurements with MIPAS. The results will be compared to a corresponding assessment of the expected errors for measurement with the satellite-borne radiometer of the "High Resolution Dynamics Limb Sounder" (HIRDLS). With selected case studies the characteristic values of achievable accuracy and vertical resolution as assessed for MIPAS using a linear approach are confirmed by nonlinear inversions based on simulated measurements.

An error assessment for different approaches to retrieve tropic water vapor profiles is performed. For this purpose measurements with a distance of 3 km between the tangent altitudes are inspected. Additionally measurements on a finer grid using a width of 1.5 km between the tangent altitudes is observed. The major contribution to the resulting error originate from the so called smoothing error which reflects the influence of the regularisation on the result. Another important error source is the inaccurate knowledge of parameters which are assumed to be known for the inversion. Such parameters are for example volume mixing ratios of trace gases, temperature and characteristic values for the measurement geometry. Contributions of these uncertainties are combined in the so called parameter error. The noise of the instrument results in an uncertainty of water vapor of about 5 % and contributes weakly to the total uncertainty. With the coarse measurement grid Water vapor can be retrieved with a total accuracy of better than 10 % in the lower stratosphere and better than 25 % in the tropopause region.

If temperature, which is assumed to be known with an accuracy of 1.5 K, is not used as a known parameter and kept constant for the retrieval but is retrieved from the mea-

measurements beside the volume mixing ratios of water vapor the resulting total error for the retrieved water vapor profile is below 10 % in the hygropause region. In the tropopause region a vertical resolution of 2.5 to 3 km is achieved. If the measurements are performed on a finer measurement grid with a distance of 1.5 km between the tangent altitudes instead of the assigned distance of 3 km in the standard measurement mode the vertical resolution increases, as expected, to 1.5 to 2 km. Using the simultaneous retrieval approach together with the temperature the expected total error at the tropopause now is below 20 % for water vapor. A qualitative comparison with an error estimation made for a water vapor retrieval using the HIRDLS instrument shows that for the assumptions made for the atmospheric state and for the considered retrieval approaches the expected total errors are of the same size.

For selected case studies the *a priori* data and constraints for a successful retrieval of water vapor profiles from MIPAS measurements are examined and optimised. Measurements are simulated using known input-parameters. Subsequently retrievals are performed for these simulated measurements. The comparison of the retrieval results with the input data is used to give statements on the retrievability. The results of the considered case studies confirm the insights made with the error assessments, where the simultaneous fit together with the temperature improves the result for the water vapor profile and allows a good reflection of the profile characteristics. The application of the retrieval-grid with 1 km steps allows a good reproduction of the profile between the tangent altitudes.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Wasserdampf in der Atmosphäre	4
2.1	Hydrologischer Zyklus	4
2.2	Wasserdampf und der Strahlungshaushalt der Erde	6
2.3	Feuchtigkeitsmaße	8
2.4	Verteilung des Wasserdampfs	9
2.5	Stratosphären – Troposphären Austausch und strat. Zirkulation	12
2.6	Die Tropopausenregion	15
2.7	Langfristige Entwicklung der Wasserdampfverteilung	17
3	Strahlungsübertragung und Retrievaltheorie	23
3.1	Strahlungsübertragung in der Atmosphäre	23
3.1.1	Theorie	23
3.1.2	Numerische Lösung	25
3.2	Retrievaltheorie	27
3.3	Ansätze zur Fehlerabschätzung	31
3.3.1	Der Rauschfehler	32
3.3.2	Der Parameterfehler	32
3.3.3	Der Glättungsfehler	33
3.3.4	Der Gesamtfehler	34
4	Das MIPAS-Experiment	35
4.1	Das MIPAS-Instrument	35
4.1.1	Messgeometrie	35
4.1.2	Messprinzip	37
4.2	Die Verwendung ausgewählter Spektralintervalle	40
4.3	Auswertung der MIPAS-Spektren mit dem Retrievalprozessor des IMK	42
5	Das HIRDLS-Experiment	44
5.1	Das HIRDLS-Instrument	44
5.1.1	Messgeometrie	44
5.1.2	Messprinzip	45
5.1.3	Spektralkanäle	46

6	Untersuchung der Leistungsfähigkeit von MIPAS	49
6.1	Annahmen	49
6.2	Fehlerabschätzung für ein reines Wasserdampfretrieval	53
6.3	Fehlerabschätzung für ein Simultanretrieval von H ₂ O und T	61
6.4	Fehlerabschätzung für Retrieval im UT/LS-Modus	64
6.4.1	Wasserdampfretrieval im UT/LS-Modus	65
6.4.2	Wasserdampf- und Temperaturretrieval im UT/LS-Modus	65
6.5	Bewertung der unterschiedlichen Retrievalansätze	67
6.5.1	Vergleich des reinen H ₂ O-Retrievals mit dem simultanen H ₂ O- und T-Retrieval	67
6.5.2	Vergleich der Retrievals im Standard- und im UT/LS-Messszenario	68
6.6	Betrachtung der vertikalen Auflösung	69
6.7	Folgerungen aus der Fehlerabschätzung für MIPAS	71
7	Untersuchung der Leistungsfähigkeit von HIRDLS	73
7.1	Annahmen	74
7.2	Fehlerabschätzung für Kanal 18	77
7.3	Fehlerabschätzung für Kanal 20	80
7.4	Fehlerabschätzung für ein simultanes Retrieval mit den Kanälen 18 und 20	81
7.5	Folgerungen aus der Fehlerabschätzung	83
8	Vergleich der Leistungsfähigkeit von MIPAS und HIRDLS	85
9	Fallstudien für MIPAS-Retrievals	89
9.1	Messung im Standard-Messgitter	92
9.2	Messung im UT/LS-Messgitter	100
9.3	Bewertung der Retrievalstrategien	104
10	Schlussbetrachtung	106
	Literaturverzeichnis	109
A	In der Fehlerrechnung angenommene Unsicherheiten	117
B	Verwendete Symbole und Abkürzungen	119
B.1	Verwendete Symbole	119
B.2	Verwendete Abkürzungen	122
	Abbildungsverzeichnis	123
	Tabellenverzeichnis	125

Kapitel 1

Einleitung

Das Klima der Erde ist nicht konstant. Zahlreiche Wärmeperioden und Eiszeiten bestimmten nachweislich in der Vergangenheit das Leben auf der Erde. In den letzten Jahren hat man erkannt, dass der Mensch in den letzten 150 Jahren durch seine massiven Eingriffe in zahlreiche Bereiche der Natur möglicherweise das Klima aktiv beeinflusst. Durch intensive Nutzung fossiler Brennstoffe wurden und werden große Mengen Kohlenstoff in Form von Kohlendioxid (CO_2) und anderen Verbindungen freigesetzt. Durch die Industrialisierung wurden zahlreiche weitere Spurengase erzeugt, die erhebliche Auswirkungen auf die Chemie der Atmosphäre zeigen. In der Öffentlichkeit werden bei der Diskussion des anthropogenen Treibhauseffekts meist nur die Auswirkungen von CO_2 , Fluorchlorkohlenwasserstoffen (FCKWs), Methan (CH_4) und anderen Gasen diskutiert. Die Kohlendioxidkonzentration in der Atmosphäre hat im letzten Jahrhundert kontinuierlich zugenommen und es ist allgemein akzeptiert, dass dieser Anstieg eine Erwärmung der Troposphäre mit sich bringt. Auch die Methankonzentration in der Troposphäre hat zugenommen und trägt ebenfalls zum anthropogenen Treibhauseffekt bei.

Besonders aufmerksam wurde in der Vergangenheit die Zerstörung der polaren Ozonschicht verfolgt. Die ersten Beobachtungen eines „Ozonlochs“ über der Antarktis in den 80er Jahren des vorigen Jahrhunderts zogen das wissenschaftliche Interesse auf sich. Schon vor dieser Entdeckung wurde die homogene Chemie, die zum Abbau stratosphärischen Ozons führt, aufgezeigt [Crutzen, 1971]. Die Rolle der lange Zeit als Treibgas und Kühlmittel verwendeten FCKW-Verbindungen als Lieferant für Chlor und andere Halogene, die eine katalytische Ozonzerstörung herbeiführen, ist schon seit langem bekannt [Molina and Rowland, 1974]. Auch wenn die Verwendung von FCKW stark eingeschränkt wurde, wird es noch Jahrzehnte dauern, bis der Chlorgehalt der Stratosphäre soweit abgenommen hat, dass sich die Ozonschicht erholt.

In der Diskussion um den anthropogenen Einfluss auf das Klima darf die Rückkopplung auf andere Gase nicht vernachlässigt werden. Eines dieser Gase hat den größten Einfluss auf den Treibhauseffekt und trägt zu diesem stärker bei als CO_2 oder CH_4 : Wasserdampf. Obwohl nur etwa ein Hunderttausendstel des gesamten auf der Erde vorkommenden Wassers in der Atmosphäre ist, bestimmen der gasförmige Wasserdampf und das in Wolken vorhandene Wasser unser Leben durch vielfältige Einflüsse auf den Zustand der Atmosphäre und den Wasserkreislauf. Durch die Temperaturerhöhung steigt auch die Fähigkeit der Luft, Wasserdampf aufzunehmen. Eine Zunahme des atmosphärischen Wasserdampfs hat

Auswirkungen auf die Strahlungsbilanz und auf die dynamischen Vorgänge in der Atmosphäre. Die Variation der Wolkenbedeckung in der Atmosphäre führt zu einer veränderten Albedo und damit zu einer Veränderung des Strahlungshaushalts. Um die Auswirkungen eines veränderten Wasserdampfgehalts nachvollziehen und verstehen zu können, ist es notwendig, die Verteilung des Wasserdampfs in der Troposphäre und der Stratosphäre zu kennen.

Während viele Treibhausgase in der gut durchmischten Troposphäre annähernd homogen verteilt sind, ist die Verteilung von Wasserdampf einer hohen Variabilität unterworfen. Sowohl die örtliche als auch die zeitliche Verteilung unterliegt enormen Schwankungen. In der Troposphäre treten Wasserdampfmischungsverhältnisse auf, die sich um mehrere Größenordnungen unterscheiden können. In der Stratosphäre kommen dagegen nur geringe Wasserdampfgehalte vor, die jedoch einen deutlichen Einfluss auf den Strahlungshaushalt der Stratosphäre haben.

Wasserdampf ist in der Troposphäre und der unteren Stratosphäre weitgehend chemisch inert. Abgesehen von Phasenübergängen in den flüssigen und festen Zustand wird Wasserdampf nicht chemisch umgewandelt. Diese Eigenschaft legt nahe, Wasserdampf als sogenannten „Tracer“ zu verwenden, um anhand des Wasserdampfgehalts einer Luftmasse auf deren Ursprung und Transport zu schließen.

Es gibt verschiedene Wege, den Wasserdampf zu messen. In der unteren und mittleren Troposphäre liefern Radiosonden Messungen mit einer hohen vertikalen Auflösung. Vor allem in den mittleren Breiten der Nordhalbkugel liegt eine große Anzahl an Wasserdampfmessungen über einen verhältnismäßig langen Zeitraum vor. Es handelt sich hierbei um *in situ* Messungen, die den Wasserdampfgehalt entlang der Aufstiegsbahn der Sonde erfassen. Diese Aufstiege werden meist täglich zum selben Zeitpunkt durchgeführt. In der oberen Troposphäre sinkt die Qualität der Feuchtemessungen mit Radiosonden drastisch. Hier müssen andere Messmethoden angewandt werden, um die Luftfeuchte zu bestimmen. Aus der oberen Troposphäre und der Stratosphäre liegen verhältnismäßig wenig Messungen vor. *In situ* Experimente liefern meist nur Daten von einem Ort, die bei einer einzelnen Messung oder während einer kurzen Kampagne gemessen werden. Nur wenige Institute unternehmen regelmäßige *in situ* Messungen mit Ballons oder Flugzeugen, die einen Zeitraum von mehreren Jahren oder sogar Dekaden abdecken [Oltmans and Hofmann, 1995].

Der Einsatz von Fernerkundungsmethoden bietet die Möglichkeit, Messungen in Regionen der Atmosphäre zu machen, die nicht oder nur schwer für *in situ* Messungen zu erreichen sind. Es gibt verschiedene aktive und passive Fernerkundungsmethoden, die zur Beobachtung der Atmosphäre verwendet werden. Am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK), das gemeinsam von der Universität Karlsruhe und dem Forschungszentrum Karlsruhe GmbH betrieben wird, entwickelte man mit dem *Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung* (MIPAS) ein hochauflösendes Spektrometer, das die von der Atmosphäre emittierte Infrarotstrahlung misst [Fischer, 1992]. Das Konzept von MIPAS ermöglicht einen Einsatz vergleichbarer Geräte auf verschiedenen Plattformen. Das ballongetragene MIPAS-B2 (balloon) [Oelhaf et al., 1996] und das flugzeuggetragene MIPAS-STR (stratospheric aircraft) an Bord des hochfliegenden Forschungsflugzeugs *Geophysica* [Blom et al., 1999] messen mit der Horizontsondierung Vertikalprofile in der Stratosphäre und oberen Troposphäre. Beide Instrumente haben in mehreren Messkampagnen ihre Einsatzmöglichkeiten bewiesen.

Der Einsatz von satellitengetragenen Fernerkundungsexperimenten ermöglicht eine globale Abdeckung mit Messungen, unter anderem auch von Wasserdampf. Auf Betreiben des IMK entschied die europäische Weltraumorganisation ESA, neben anderen Instrumenten MIPAS als Instrument der Kernnutzlast auf dem Erderkundungssatelliten „Envisat“ einzusetzen [Fischer et al., 1988]. Nach dem erfolgreichen Start am 1. März 2002 soll MIPAS ab Herbst 2002 die gemessenen Daten von 14 Erdumläufen pro Tag zur weiteren Auswertung zur Erde senden. Diese Arbeit befasst sich mit der Leistungsfähigkeit des satellitengetragenen MIPAS auf Envisat zur Ableitung von Wasserdampfprofilen in der tropischen oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre.

In Kapitel 2 wird ein kurzer Überblick über die Bedeutung des Wasserdampfs in der Atmosphäre gegeben. Dabei wird besonders der Zusammenhang mit dem Austausch von Luftmassen zwischen Troposphäre und Stratosphäre (engl.: stratosphere – troposphere exchange, STE) und dem großräumigen Transport in der Stratosphäre aufgezeigt.

Im darauffolgenden Kapitel 3 wird die Strahlungsübertragungsrechnung in ihren Grundzügen vorgestellt. Es wird die numerische Umsetzung der integralen Strahlungsübertragung dargestellt sowie die Inversionstheorie, mit der man von den gemessenen Spektren auf die gesuchten atmosphärischen Parameter schließt. Abschließend werden in diesem Kapitel Wege zur Abschätzung der wichtigsten Fehlergrößen aufgezeigt.

Danach wird das MIPAS-Experiment mit dem Instrument, der Messgeometrie und dem verwendeten Auswertansatz kurz beschrieben. Im Anschluss daran wird der „High Resolution Dynamics Limb Sounder“ (HIRDLS) vorgestellt, dessen Leistungsfähigkeit mit der für MIPAS abgeschätzten verglichen wird.

In den Kapiteln 6 und 7 wird eine Abschätzung der zu erwartenden Fehler für MIPAS und HIRDLS gemacht. Für MIPAS werden verschiedene Mess- und Retrievalszenarien untersucht und bewertet. Die Betrachtung der Leistungsfähigkeit von HIRDLS erfolgt für ein vergleichbares Messszenario, jedoch werden hier vereinfachte Annahmen gemacht. Die Fehlerabschätzungen für beide Instrumente werden anschließend in Kapitel 8 miteinander verglichen.

Abschließend wird anhand von Fallstudien, die sich an den Szenarien aus Kapitel 6 orientieren, die Funktionalität der gewählten Retrievalansätze gezeigt und optimiert. Am IMK wurde unabhängig von anderen Institutionen ein eigener Algorithmus zur Auswertung der Daten von MIPAS entwickelt. Für ausgewählte Fälle werden mit dem Strahlungsübertragungsmodell „KOPRA“ Messungen simuliert und dann mit dem Prozessor Retrievals durchgeführt. Abgeschlossen wird die Arbeit mit einer Bewertung der Fallstudien und einer Zusammenfassung und Schlussbemerkung zur Auswertung von Wasserdampfmessungen mit MIPAS.

Kapitel 2

Rolle des Wasserdampfs in der Atmosphäre

In diesem Abschnitt soll die Bedeutung des atmosphärischen Wasserdampfs für den hydrologischen Kreislauf, den natürlichen und den anthropogenen Treibhauseffekt und die Chemie der Atmosphäre dargestellt werden. Desweiteren werden die Verteilung von Wasserdampf und Transportprozesse vor allem in der Region der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre (engl.: upper troposphere/lower stratosphere, UT/LS) beschrieben, deren Untersuchung den Gegenstand dieser Arbeit bilden.

2.1 Hydrologischer Zyklus

Der hydrologische Zyklus wird durch das Zusammenspiel von Wasserflächen, den Oberflächen der Kontinente und der Atmosphäre und dem zwischen diesen stattfindenden Wassertransport bestimmt. Den größten Teil des Wassers findet man in den Ozeanen, den Gletschern der Polarregionen und in den Gebirgen, sowie in grundwasserführenden Schichten, Flüssen und Seen. Der Wasseranteil in der Luft beträgt nur ein hunderttausendstel des gesamten Wasservorkommens auf der Erde. Dieser atmosphärische Wassergehalt verteilt sich auf den gasförmigen Wasserdampf und das in Wolken gebundene flüssige Wasser und Eis. Trotz des geringen Anteils ist das atmosphärische Wasser zusammen mit dem Grundwasser und den Süßwasserreservoirs in Flüssen und Seen für die Biosphäre lebenswichtig. In Abb. 2.1 ist der Wasserkreislauf schematisch dargestellt. Der Wassergehalt der Atmosphäre wird durch seine Quellen und Senken bestimmt. Durch Verdunstung an Meeres-, See- und Landoberflächen kommt der Wasserdampf in die Atmosphäre. Die Verdunstung ist die wichtigste Wasserdampfquelle in der Troposphäre. Andere Wasserdampfquellen, wie z.B. chemische Produktion, spielen hier nur eine untergeordnete Rolle. In der Atmosphäre findet durch die atmosphärische Zirkulation ein Transport des Wassers statt. Ein Teil des atmosphärischen Wassers fällt durch Niederschlag aus und wird so der Erdoberfläche und den Ozeanen wieder zugeführt. Über einigen Wasserflächen der Erde (vor allem über den Ozeanen) verdunstet mehr Wasser, als durch direkten Niederschlag wieder zurückgeführt wird. Folglich findet über die Atmosphäre ein Netto-Transport von den Meeres- zu den Landoberflächen hin statt. Auf der anderen Seite erhalten Landoberflächen im Mittel erheblich mehr Wasser durch Niederschlag, als durch Transport von den Ozeanen heran

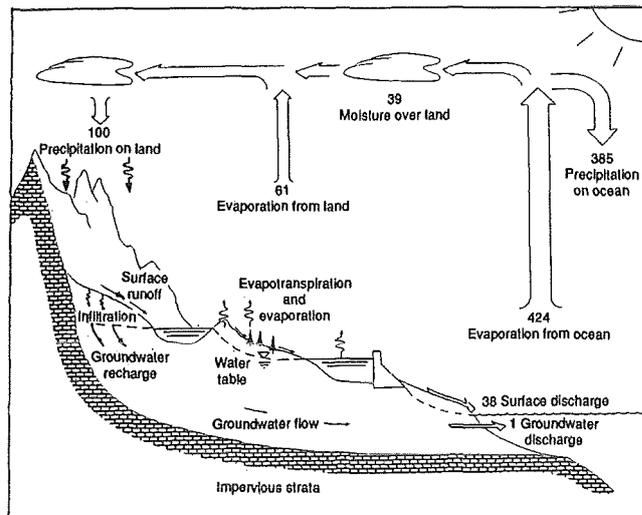


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des hydrologischen Kreislaufs. Die Einheit der Wasserflüsse ist 1000 km^3 pro Jahr. (Quelle: [Maidment, 1993])

transportiert wird. Ein großer Teil des Niederschlags kommt durch Verdunstung und Evapotranspiration aus der Biosphäre über den Landflächen zustande. Das Ungleichgewicht zwischen Niederschlagsmenge und Verdunstung wird durch den Abfluss des Wassers über Flüsse und grundwasserführende Schichten wieder ausgeglichen. Durch die atmosphärischen Transporte wird das Wasser großräumig über alle Regionen der Erde verteilt. Die Verteilung des Wassers ist trotzdem nicht ausgeglichen. Es gibt Regionen, in denen Wassermangel herrscht und Regionen, in denen ein Überschuss an Wasser gegeben ist. Die Transporte des in der Atmosphäre enthaltenen Wassers gleichen Überschüsse und Defizite aus. Sie beseitigen diese regionalen Unterschiede jedoch nicht, sondern schwächen sie nur ab.

Für den Übergang des Wassers aus dem flüssigen in den gasförmigen Zustand muss dem Wasser Energie zugeführt werden. Die spezifische Verdampfungswärme von Wasser ist temperaturabhängig und wird bestimmt über $l_{wv} = (2,5008 - 0.002372 t) \cdot 10^6 \text{ J/kg}$, wobei t die Temperatur in $^\circ\text{C}$ ist. Um 1 kg Wasser bei 100°C zu verdampfen müssen $2,260 \cdot 10^6 \text{ J}$ zugeführt werden. Für den Phasenübergang von der Eisphase in die flüssige Phase ist die spezifische Schmelzwärme $l_{ew} = 0.3337 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$ aufzuwenden. Die Verdampfungswärme wird dem Wasserdampf bei Verdunstung von flüssigem Wasser zugeführt. Bei Kondensation wird die Energie wieder freigesetzt. Die Verdunstung an der Erdoberfläche trägt maßgeblich zum Transport von Energie in die Atmosphäre bei. Während die Umsetzung der „fühlbaren Wärme“ mit einer Temperaturänderung verbunden ist, wird die im Wasserdampf gespeicherte Wärme als „latente Wärme“ bezeichnet. Der Wasserdampf wird durch turbulente Transporte aus der bodennahen Schicht in die Atmosphäre gebracht. Hier ergibt sich durch den Transport des Wasserdampfs mit der atmosphärischen Zirkulation ein bedeutender Energietransport. An anderer Stelle, nach dem Transport, wird diese Energie bei der Kondensation in Wolken oder an Oberflächen wieder freigesetzt. Betrachtet man die enorme und z.T. zerstörerische Energie, die in Gewitterwolken und besonders in tropi-

schen Wirbelstürmen durch die Kondensation des Wasserdampfs freigesetzt wird, so sieht man, welche Bedeutung die Energietransporte durch den atmosphärischen Wasserdampf besitzen.

2.2 Wasserdampf und der Strahlungshaushalt der Erde

Neben seiner Eigenschaft, durch Phasenübergänge Energie aufzunehmen und abzugeben, besitzt Wasserdampf im infraroten Spektralbereich starke Absorptionsbanden. Bei Wellenlängen zwischen 25 und 200 μm (50 bis 400 cm^{-1}) liegt die intensive Rotationsbande. Einen weiteren wichtigen Beitrag zum Einfluss des Wasserdampfs auf den Strahlungshaushalt liefert die ν_2 -Bande, eine Rotations-Schwingungsbande, die bei etwa 6,3 μm (1590 cm^{-1}) im mittleren Infrarot liegt. Zusätzlich findet noch eine breitbandige Absorption bzw. Emission durch das Wasserdampfkontinuum statt, das sich über weite Teile des infraroten Spektrums, besonders jedoch in der Fensterregion zwischen 8,0 und 12,5 μm , auswirkt. Dieses Kontinuum ergibt sich aus dem Einfluss der Linienflügel weit entfernter Wasserdampflinien, die außerhalb des betrachteten Spektralbereichs liegen. Solche Beiträge einzelner Linien überlagern sich und ergeben das beschriebene Kontinuum. Durch seine starken Absorptionsbanden gilt Wasserdampf als das wichtigste Treibhausgas. Im Bereich der beiden starken Banden absorbiert Wasserdampf nahezu die gesamte Strahlung, die von der Erdoberfläche in diesen Spektralbereichen emittiert wird.

Im Gegensatz zu einigen anderen Gasen in der Atmosphäre ist die Verteilung von Wasserdampf in der Atmosphäre sehr inhomogen. In der Stratosphäre treten Volumenmischungsverhältnisse (engl.: volume mixing ratio, vmr) von wenigen ppmv (engl.: parts per million by volume, ppmv) auf, während in der unteren Troposphäre der Tropen Volumenmischungsverhältnisse von über 10^4 ppmv beobachtet werden. Die große Variabilität des Wasserdampfgehalts in der Atmosphäre, sowohl im Hinblick auf zeitliche Schwankungen als auch auf die räumliche Verteilung, erschwert die Abschätzung des Einflusses von Wasserdampf auf den Strahlungshaushalt der Erde.

In Abb. 2.2 ist die mittlere Strahlungsbilanz der Erde dargestellt. Die an der Erde ankommende Solarstrahlung wird zu etwa 70 % in der Atmosphäre und an der Erdoberfläche absorbiert. Der Rest wird an Erdoberfläche, an Wolken, Molekülen und Aerosolen zurück ins Weltall reflektiert. Durch die Absorption des Lichts im kurzwelligen ultravioletten und sichtbaren Spektralbereich nehmen Atmosphäre und Erdboden Energie auf, was zu einer Aufheizung führt. Die Erdoberfläche und bodennahe Luftschicht erreichen durch diese Absorption Temperaturen, die im globalen Mittel bei etwa 15°C liegen. Die Emission von Erdoberfläche und Atmosphäre findet entsprechend ihrer Temperatur vorwiegend im Infraroten statt. Diese langwellige Wärmestrahlung wird, ihrem Ursprung entsprechend, „terrestrische Strahlung“ genannt.

Der größte Anteil der vom Erdboden emittierten Strahlung wird in der darüberliegenden Atmosphäre absorbiert. Kohlendioxid, Wolken und andere Spurengase stellen neben Wasserdampf die stärksten Absorber in der Atmosphäre dar. Ein geringer Teil der emittierten Strahlung wird direkt ins Weltall abgegeben. Diese Abstrahlung geschieht vor allem im sogenannten atmosphärischen Fenster zwischen 8 und 12,5 μm . Die Atmosphäre emittiert ihrerseits auch Strahlung. Diese Strahlung ist sowohl nach unten, zum Erdboden, als auch nach oben, ins Weltall, gerichtet.

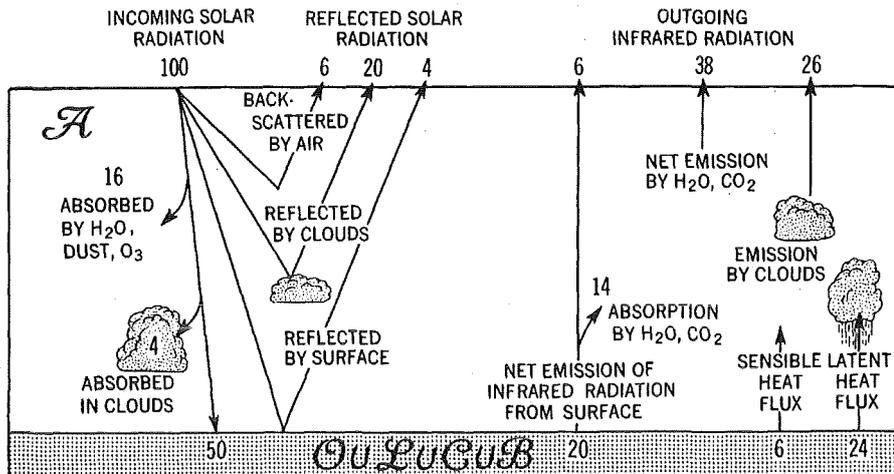


Abbildung 2.2: Der Strahlungshaushalt der Erde. Die Einstrahlung der Sonne wird auf 100 festgelegt. Dadurch sind alle Zahlenangaben als prozentualer Teil relativ zur Sonnenstrahlung gegeben (Quelle: [Peixoto and Oort, 1992])

Der natürliche Treibhauseffekt bestimmt die Temperatur auf der Erde. Er hält diese auf einem Niveau durch das das Leben auf der Erde ermöglicht wird. Der natürliche Treibhauseffekt wird zu etwa 60 % durch den Einfluss von Wasserdampf hervorgerufen. Kohlendioxid trägt mit etwa 20 % dazu bei. Der Einfluss des Wasserdampfs auf den Treibhauseffekt wird deutlich, wenn man die Auswirkung einer Variation im Wasserdampfprofil auf das Strahlungsbudget mit einer Variation im CO₂-Gehalt der Atmosphäre vergleicht, die notwendig ist um den gleichen Effekt zu erhalten. Brindley und Harris zeigen, dass in den Tropen ein Anstieg von ca. 12 % im Wasserdampfgehalt vergleichbare Auswirkungen hat wie eine Verdoppelung des Kohlendioxidgehalts [Brindley and Harries, 1998]. In höheren Breiten wird unter Bedingungen des subarktischen Winters der gleiche Effekt mit einer Erhöhung des Wasserdampfgehalts um 25 % erreicht.

Die Wasserdampf-Rotationsbande im fernen Infrarot ($50 - 400 \text{ cm}^{-1}$) spielt eine sehr bedeutende Rolle in der Abstrahlung aus der mittleren und oberen Troposphäre ins Weltall. Die damit verbundene Abkühlung ist wichtig, um die Energiebilanz auszugleichen [Brindley and Harries, 1998]. Die genaue Kenntnis des Wasserdampfgehalts in der oberen Troposphäre ist daher von großer Bedeutung, um die Strahlungsbilanz richtig zu erfassen.

Die Kondensation von Wasserdampf in Form von Wolken bestimmt die Albedo der Erdoberfläche. Wolken reflektieren einen Teil der kurzwelligeren solaren Strahlung zurück ins Weltall. Sie tragen gleichzeitig durch starke Absorption und Emission im infraroten Spektralbereich zum Strahlungshaushalt bei. Die Verteilung von Wolken wirkt sich direkt auf die Strahlungsbilanz aus.

Der stratosphärische Wasserdampf hat einen großen Einfluss auf den Strahlungshaushalt. Er trägt entscheidend zur Erwärmung der Troposphäre und zur Abkühlung der Stratosphäre bei. In der Stratosphäre sind der Wasserdampfgehalt und die Temperatur eng miteinander verbunden. Ein Anstieg im stratosphärischen Wasserdampfgehalt verändert dort das Strahlungsfeld und führt zu einer Abkühlung in der Stratosphäre

[de F. Forster and Shine, 1999].

2.3 Feuchtigkeitsmaße

Der Wassergehalt der Luft wird auch als Luftfeuchtigkeit bezeichnet. In der Meteorologie gibt es verschiedene Maße für die Luftfeuchte, die für unterschiedliche Betrachtungen der Atmosphäre verwendet werden. Ist eine dieser Größen bekannt, so kann, unter Zuhilfenahme der Temperatur und des Luftdrucks, jedes andere Feuchtemaß daraus berechnet werden.

Der Inhalt eines Luftvolumens besteht aus einem Gemisch aus Wasserdampf und trockener Luft. Nach dem Dalton'schen Gesetz ist der Gesamtdruck eines Gasgemischs gleich der Summe der Partialdrücke seiner Komponenten. Der Druck p im Luftvolumen setzt sich aus dem Partialdruck der trockenen Luft und dem Partialdruck des Wasserdampfs, dem Dampfdruck e , zusammen. Der maximal erreichbare Wasserdampfgehalt ist durch den Sättigungsdampfdruck E gegeben, der in hPa angegeben wird. Dieser kann über die empirische *Magnusformel*, die sich aus der Clausius-Clapeyron-Gleichung ergibt, bestimmt werden:

$$E(t) = 6.107 \cdot \exp \left\{ \frac{a \cdot t}{b + t} \right\} \quad (2.1)$$

wobei die Temperatur t in °C gegeben ist. Bei Sättigung über Wasser gilt für die Konstanten $a = 17,15$ und $b = 234,9$ °C. Für Sättigung über Eis gilt $a = 21,88$ und $b = 265,5$ °C. Der Sättigungsdampfdruck E hängt nur von der Temperatur ab.

Die Temperatur t_d , bei der der Dampfdruck e gleich dem Sättigungsdampfdruck E ist ($e = E(t_d)$) wird *Taupunkt* genannt.

Das Verhältnis von tatsächlichem Dampfdruck zu Sättigungsdampfdruck ist die *relative Feuchte*

$$r = 100 \cdot \frac{e}{E}, \quad (2.2)$$

die in Prozent (%) angegeben wird. Dieses Feuchtemaß ist temperaturabhängig.

Eine weitere Größe zur Darstellung der Luftfeuchte ist die Dichte des Wasserdampfs

$$\rho_w = \frac{m_w e}{R^* T}, \quad (2.3)$$

mit dem Molekulargewicht von Wasser $m_w = 18,016$ kg kmol⁻¹, der Temperatur T in K und der universellen Gaskonstante $R^* = 8,3143 \cdot 10^3$ J kmol⁻¹ K⁻¹. Die Dichte wird in SI-Einheiten in kg/m³ angegeben. In der Meteorologie wird gewöhnlich die *absolute Feuchte* $a = 10^3 \cdot \rho_w$ verwendet, die in g/m³ angegeben wird.

Sowohl die relative Feuchte als auch die absolute Feuchte hängen von der Temperatur T , dem Luftdruck p und dem betrachteten Volumen ab. Es ist vorteilhaft, Größen zu verwenden, die sich bei Vertikalbewegungen des betrachteten Luftvolumens nicht ändern, solange kein Austausch mit der Umgebung stattfindet. Die beiden Feuchtigkeitsbegriffe *spezifische Feuchte* q und *Mischungsverhältnis* m bieten diesen Vorteil.

Die *spezifische Feuchte* ist das Mischungsverhältnis der Wasserdampfdichte zur Dichte der feuchten Luft

$$q = \frac{\rho_w}{\rho} = \frac{m_w}{m_l} \frac{e}{p - (1 - \frac{m_w}{m_l})e}, \quad (2.4)$$

wobei $\rho = \rho_w + \rho_l = \frac{1}{R^*T}(m_l p - (m_l - m_w)e)$ die Dichte der feuchten Luft ist und $m_l = 28,96 \text{ kg kmol}^{-1}$ das mittlere Molekulargewicht von trockener Luft.

Das *Mischungsverhältnis* des Wasserdampfs ist das Verhältnis der Dichte des Wasserdampfs zur Dichte trockener Luft:

$$m = \frac{\rho_w}{\rho_l} = \frac{m_w}{m_l} \frac{e}{p - e}, \quad (2.5)$$

mit der Dichte trockener Luft $\rho_l = \frac{m_l p - e}{R^* T}$.

Unter der Annahme, dass der Dampfdruck e nur einen sehr geringen Beitrag zum gesamten Luftdruck p liefert und mit $\frac{m_w}{m_l} = 0,622$ kann man folgende Näherung verwenden:

$$q \approx m \approx 0,622 \cdot \frac{e}{p}. \quad (2.6)$$

Bei der *spezifischen Feuchte* und dem *Mischungsverhältnis* handelt es sich um Maße, die in der Meteorologie verwendet werden. Diese Begriffe sind etwas irreführend. Das Massenmischungsverhältnis zwischen Wasserdampf und feuchter Luft wird durch die *spezifischen Feuchte* wiedergegeben, während das *Mischungsverhältnis* das Verhältnis von Wasserdampf zu trockener Luft darstellt. In der atmosphärischen Chemie wird häufig das Volumenmischungsverhältnis verwendet. Hierbei wird das Teilvolumen, das vom betreffenden Gas eingenommen wird, auf das Gesamtvolumen bezogen.

Nach dem Dalton'schen Gesetz gilt $\frac{p_i}{p} = \frac{v_i}{v}$, wobei v_i das spezifische Volumen der Größe i ist. Für Wasserdampf ist das Volumenmischungsverhältnis gleich dem Verhältnis von Dampfdruck e zum Luftdruck p . Es gilt also:

$$vmr(\text{H}_2\text{O}) = \frac{e}{p}. \quad (2.7)$$

Da die Spurengase meist nur in geringen Mengen vorkommen, wird das Volumenmischungsverhältnis in ppmv angegeben. Für Spurengase mit geringeren Anteilen werden auch Milliardstel (ppbv) und Billionstel (pptv) Anteile verwendet. Im weiteren Verlauf wird der Wasserdampfgehalt wenn möglich mit dem Volumenmischungsverhältnis angegeben. In Fällen, in denen ein anderes Maß angemessen erscheint, wird dieses verwendet.

2.4 Verteilung des Wasserdampfs

Die Auswirkungen des Wasserdampfs auf die Strahlungsbilanz der Atmosphäre hängen von der Verteilung des Wasserdampfs und den Umgebungsbedingungen, wie z.B. der Temperaturverteilung, ab. Der Einfluss auf die Strahlungsbilanz wird durch die horizontale und vertikale Verteilung des Wasserdampfs bestimmt. In Abb. 2.3 ist eine globale Verteilung des mittleren Wasserdampfsäulengehalts der Jahre 1988 bis 1992 dargestellt. Man sieht sehr gut, dass der Gesamtgehalt der Luftsäule an Wasserdampf große zonale und auch regionale Unterschiede aufweist.

Auffällig ist die zonale Struktur mit hohen Säulengehalten in den warmen und feuchten Tropen und den abnehmenden Werten zu höheren Breiten hin. Man sieht auch, wie die Land-See-Verteilung die Wasserdampfgesamtsäulen beeinflusst. Lee-Effekte sorgen

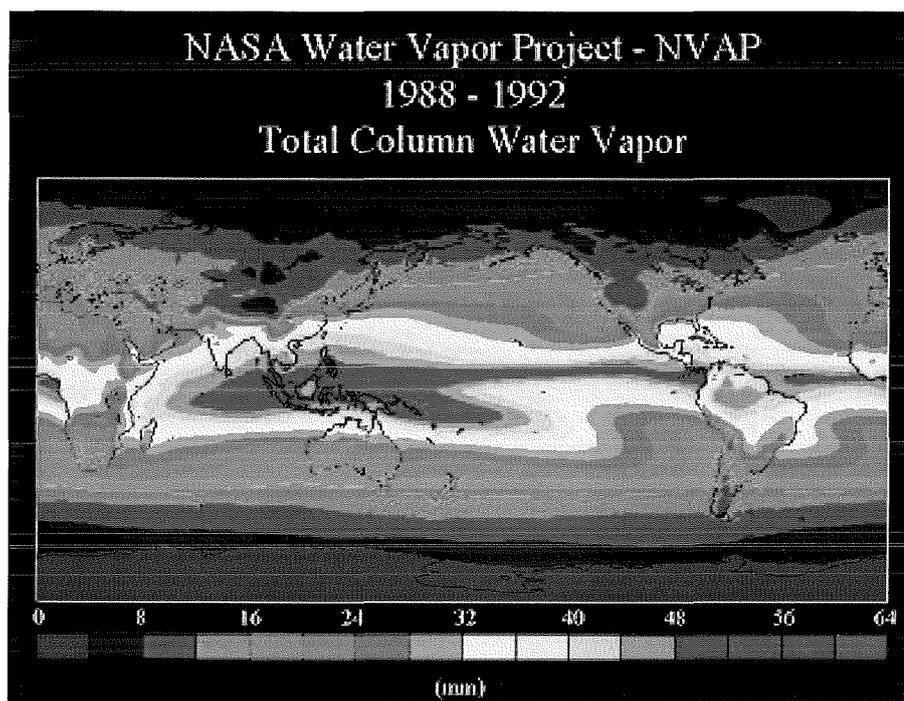


Abbildung 2.3: Globale Verteilung der mittleren Wasserdampfgesamtsäulen für die Jahre 1988 bis 1992 (Quelle: [Randel et al., 1996])

beispielsweise über Zentralasien und dem Westen Nordamerikas, im Lee der großen Gebirgszüge des Himalaja und der Rocky Mountains, für geringere Wasserdampfgesamtsäulengehalte. Im südostasiatischen Raum zeichnet sich ein sehr großer Bereich mit hohem Wasserdampfgehalt ab. Dieser ist mit der hohen Monsunaktivität in dieser Region in Verbindung zu bringen.

Die vertikale Verteilung des Wasserdampfs wird in der Troposphäre durch das Temperaturprofil und die Menge des zur Verdunstung an der Erdoberfläche zur Verfügung stehenden Wassers bestimmt. In einer gut durchmischten Atmosphäre bleibt das Volumenmischungsverhältnis mit der Höhe konstant, solange keine Kondensation, Verdunstung oder Durchmischung mit Luftpaketen mit anderem Wasserdampfgehalt auftreten.

Durch die Abnahme der Temperatur mit der Höhe mit einem mittleren Gradienten von etwa 6,5 (pseudo-adiabatisch) bis 10 K/km (trocken-adiabatisch) sinkt der Sättigungsdampfdruck des Wasserdampfs mit der Höhe. In der Atmosphäre tragen beim Aufsteigen der Luft Wolkenbildung und Niederschlag dazu bei, dass Wasserdampf aus der Atmosphäre entfernt wird. Tritt in der Atmosphäre Sättigung auf, so nimmt das Volumenmischungsverhältnis von Wasserdampf mit der Höhe ab. Wird das kondensierte Wasser nicht wieder durch Verdunstung in Wasserdampf überführt, sondern aus der Atmosphäre durch Niederschlag oder Transporte entfernt, so bleibt das Wasserdampfprofil mit einer Abnahme des Volumenmischungsverhältnisses mit der Höhe zurück.

Der Wasserdampfgehalt der mittleren und oberen Troposphäre ist teilweise von den Quellen am Boden entkoppelt. Bei fehlender Durchmischung findet nur ein schwacher Transport aus den bodennahen Schichten, in denen die troposphärischen Wasserdampfquellen liegen, in höhere Luftschichten statt. In diesem Fall bleibt die Abnahme des Vo-

lumenmischungsverhältnisses von Wasserdampf mit der Höhe bestehen. Zusätzlich kann durch Mischung von Luftmassen unterschiedlicher Herkunft der vertikale Verlauf des Wasserdampfprofils verändert werden.

Im Mittel ist in der Troposphäre eine exponentielle Abnahme des Volumenmischungsverhältnisses des Wasserdampfs mit der Höhe zu beobachten. In Bodennähe werden Werte von bis zu 4×10^4 ppmv in den Tropen beobachtet. Das Wasserdampfprofil findet sein Minimum in der sogenannten *Hygropause*, die an der Tropopause oder etwas darüber liegt [Kley et al., 1979]. In den Tropen ist dieses Minimum mit Volumenmischungsverhältnissen von 2 – 4 ppmv am stärksten ausgeprägt. Als Hauptgrund gilt hier die äußerst kalte Tropopause, in der die Luft aufgrund des geringen Sättigungsmischungsverhältnisses einen großen Teil des Wasserdampfs bei ihrem Aufstieg durch Kondensation verliert.

In der Stratosphäre nimmt das *vmr* mit der Höhe wieder zu. Diese Zunahme ist schwächer als die Abnahme des *vmr* mit der Höhe in der Troposphäre. Das Profil erreicht in der oberen Stratosphäre ein Maximum mit etwa 5 – 6 ppmv. In diesen Höhen befindet sich eine Wasserdampfquelle, da dort durch Oxidation von Methan Wasserdampf entsteht [Brasseur and Solomon, 1986]. Das zur Oxidation benötigte Methan wird aus der Troposphäre in die Stratosphäre transportiert. Die Oxidation findet erst in der Stratosphäre statt, da dort entsprechend kurzwellige Strahlung mit energiereichen Photonen vorhanden ist, damit CH_4 durch Photolyse zerstört werden kann. Erst nach der Zersetzung von CH_4 ist, mit den dabei entstehenden Bruchstücken, der Ablauf mehrerer Reaktionen möglich, bei denen schließlich aus einem CH_4 -Molekül 2 Wasserdampfmoleküle entstehen. Die Produktion von Wasserdampf aus Methan ist von der Intensität der Sonneneinstrahlung und damit von der Höhe und der geographischen Breite abhängig. Im Mittel kann man in der Stratosphäre die Summe $2 \cdot \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$ als konstant annehmen. Diese Annahme gilt nicht für Regionen, die durch ausgeprägte Dehydration oder vom Einfluss einer deutlich saisonalen Abhängigkeit der Tropopausentemperatur beeinflusst sind. Ein Teil des Wasserdampfs wird in der Stratosphäre photolysiert. Dabei entsteht das Hydroxyl-Radikal (OH), das für die chemischen Abläufe in der Atmosphäre von großer Bedeutung ist.

Die horizontale Verteilung des Wasserdampfgehalts der Atmosphäre wird durch dynamische Vorgänge und damit verbundene Transporte bestimmt. In der Troposphäre wird dieser Einfluss am Beispiel der Hadley-Zirkulation sofort sichtbar. In den Tropen steigt die warme und durch Verdunstung an der Oberfläche sehr feuchte Luft auf. Die starke Konvektion transportiert die feuchte Luft bis in große Höhen der Troposphäre, wobei ein großer Teil des Wasserdampfs kondensiert und als Niederschlag ausfällt. In der oberen Troposphäre fließt die trockenere Luft zu höheren Breiten ab und sinkt in den Subtropen ab. Der niedrige Wasserdampfgehalt und die Absinkbewegung führen dazu, dass in diesen Breiten geringere Niederschlagsmengen auftreten und somit auch die untere Troposphäre trockener ist (siehe Abb. 2.3). In den Breiten der Subtropen befinden sich in dieser, durch großräumiges Absinken geprägten Region unter anderem die großen ariden Gebiete der Sahara und der Kalahari auf dem afrikanischen Kontinent und der größte Teil der Wüsten Australiens.

Andere Beispiele für den Einfluss der Zirkulation auf den Wasserdampfgehalt sind Luv- und Lee-Effekte an Gebirgen, wie oben schon angedeutet. An den Gebirgsseiten, die seeseitig dem auftreffenden Wind ausgesetzt sind, werden die feuchten Luftmassen

zum Aufstieg gezwungen. Durch die damit verbundene adiabatische Abkühlung kommt es häufig zur Kondensation und im weiteren Verlauf zu Niederschlag. Nach dem Abregnen überströmt die trockene Luft das Gebirge und bewirkt auf der Lee-Seite trockenere Bedingungen.

Durch die Zirkulation und das Wettergeschehen wird Wasser aus feuchten in trockene Regionen transportiert und steht dort zur Verfügung. Diese Umverteilung gleicht die Defizite, die durch die ungleichmäßige Verteilung der Wasser- und Landflächen hervorgerufen wird, aus. Andererseits hat allerdings auch der Wasserdampfgehalt einen großen Einfluss auf die Dynamik der Atmosphäre. Ohne den Wasserdampf würde sich die thermische Schichtung der Troposphäre von den herrschenden Bedingungen unterscheiden. Die Rolle des Wasserdampfs auf die Entstehung und besonders die Entwicklung von Stürmen ist sehr wichtig. Beispielsweise erfolgt ein bedeutender Teil der Intensivierung tropischer Zyklonen als Folge der Kondensation von Wasserdampf und der dadurch freigesetzten Energie.

Trotz seiner geringen Volumenmischungsverhältnisse ist auch der stratosphärische Wasserdampf von großer Bedeutung für den Strahlungshaushalt der Atmosphäre. Seine Verteilung wird durch die großräumige Zirkulation in der Stratosphäre bestimmt. Die Hauptquelle für Wasserdampf in der unteren Stratosphäre ist der Eintrag aus der Troposphäre. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Tropopausenregion, durch die dieser Transport stattfindet. Im Folgenden sollen die wichtigsten Erkenntnisse über die Verteilung des Wasserdampfs in der Stratosphäre und über seinen Weg durch die Tropopause kurz dargestellt werden. Dazu wird ein kurzer Überblick über den Austausch von Luftmassen zwischen Troposphäre und Stratosphäre und den meridionalen Transport in der Stratosphäre gegeben werden. Diese Prozesse sind eng mit der Wasserdampfverteilung verknüpft.

2.5 Stratosphären – Troposphären Austausch und meridionale Zirkulation in der Stratosphäre

Bereits in den 40er Jahren des letzten Jahrhunderts stellten Brewer und Dobson eine Theorie auf, die die großräumige Zirkulation in der Stratosphäre beschreibt [Brewer and Dobson, 1949], [Dobson et al., 1946]. Durch die starke Konvektion angetrieben steigen Luftmassen in den tropischen Breiten auf. Durch dynamische Prozesse in der Stratosphäre, werden die Luftmassen in der Tropopausenregion zum Aufstieg gezwungen [Holton et al., 1995]. Sie durchdringen die Tropopause (Definition: siehe Abschnitt 2.6), an der die feuchte Luft durch die niedrigen Temperaturen kondensiert und der Wasserdampfgehalt abnimmt. Die Luft steigt in der Stratosphäre weiter auf. In der mittleren und oberen Stratosphäre fließt die Luft zu höheren Breiten ab. In hohen und polaren Breiten herrscht dagegen großräumiges Absinken. Grundsätzlich ist diese Vorstellung der meridionalen Zirkulation immer noch gültig, jedoch wurde diese Modellvorstellung im Lauf der Zeit durch Berücksichtigung weiterer dynamischer Vorgänge verfeinert. Angetrieben durch Wellenbewegung der stratosphärischen Dynamik findet der Transport aus den Tropen in die Subtropen statt (siehe Abb. 2.4). Dieser Transport von Luftmassen aus der tropischen Stratosphäre heraus wird durch verstärkten Nachschub aus der tropischen Troposphäre kompensiert. Holton verwendet für diesen Transport den Vergleich mit einer dynamisch angetriebenen Pumpe, die für den Aufstieg von Luftmassen in den Tropen mit

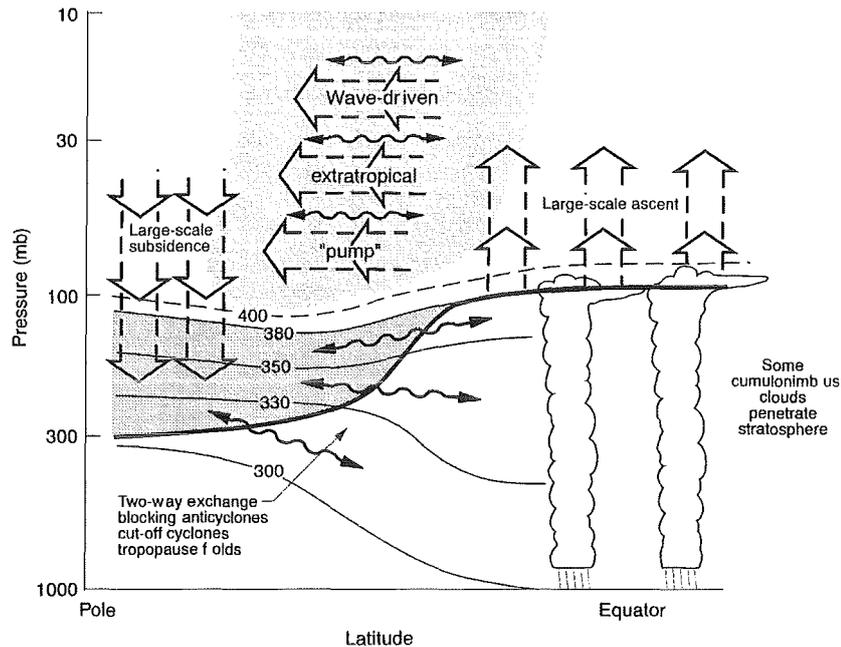


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Austauschprozesse zwischen Stratosphäre und Troposphäre und zwischen der tropischen und extratropischen Stratosphäre (Quelle: [Holton et al., 1995])

verantwortlich ist [Holton et al., 1995].

Der beschriebene Aufwärtstransport von Luft in der tropischen Stratosphäre wird durch das Modell der „Tropical Pipe“ erweitert [Plumb, 1996]. In dieser Modellvorstellung besteht in den Tropen ein isolierter Bereich, in dem die Luftmassen in die obere Stratosphäre transportiert werden. In den außertropischen Breiten findet auf Isentropenflächen eine Durchmischung statt. Das Modell beschreibt qualitativ die Verteilung von Wasserdampf und anderen Spurengasen. Dieses Modell lässt jedoch nur geringen Austausch mit den mittleren Breiten zu. Modellrechnungen und Messungen widerlegen die Annahme der starken Barriere; es findet ein Austausch zwischen Tropen und Außertropen statt (s. z.B. [Volk et al., 1996], [Holton et al., 1995]). Der Transport von Luftmassen aus der subtropischen in die tropische Stratosphäre auf diesem Weg verläuft wesentlich langsamer als der Eintrag aus der Troposphäre und die Hebungsprozesse in der Stratosphäre.

Ein großer Teil des Transports von Luftmassen aus der Troposphäre in die Stratosphäre erfolgt über die tropische Tropopause. In Abb. 2.5 ist die mittlere Verteilung des stratosphärischen Wasserdampfs in einem meridionalen Mittel dargestellt. Oberhalb der Tropopause weist das Wasserdampf-mischungsverhältnis in den Tropen im Mittel einen starken vertikalen Gradienten auf. In den Tropen findet man in etwa 17 bis 20 km Höhe die *Hygropause*. Die *Hygropause* erstreckt sich wie ein Band beiderseits des Äquators bis in hohe Breiten. Oberhalb der tropischen *Hygropause* nimmt der Wasserdampf wieder zu. In 50 km werden 6,0 bis 6,5 ppmv erreicht. Auf beiden Seiten des Äquators nimmt das Volumenmischungsverhältnis polwärts zu. Diese Verteilung lässt sich mit dem Zirkulationsmuster von Brewer erklären. In der oberen Stratosphäre steigt der Wasserdampfgehalt aufgrund der Produktion durch Methan-Oxidation wieder an. Die feuchte Luft breitet sich

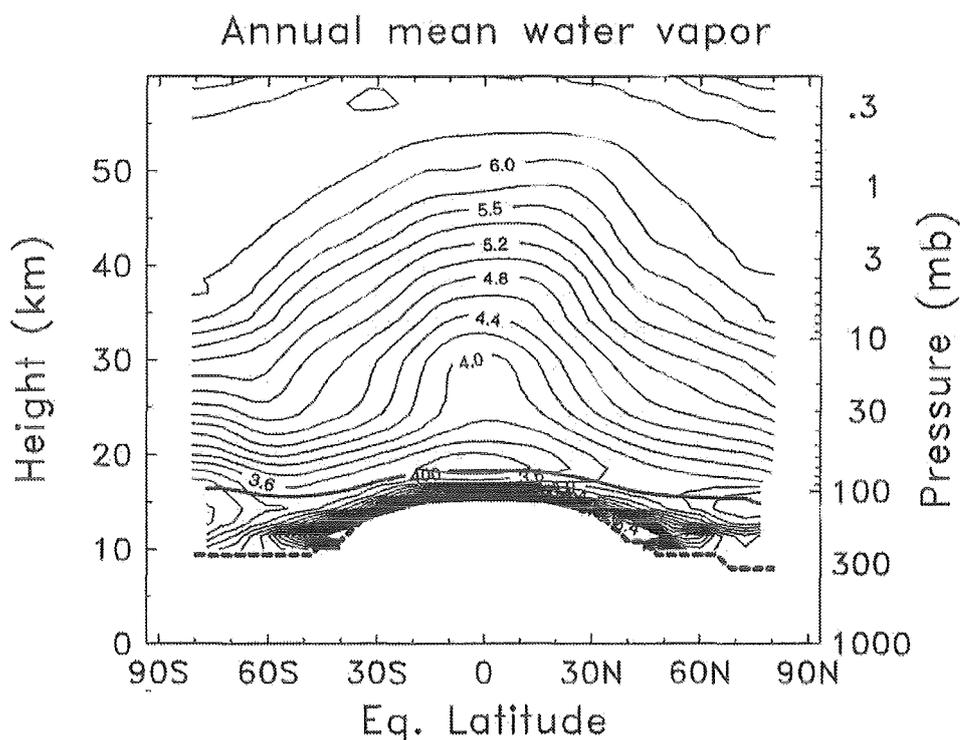


Abbildung 2.5: Mittlere jährliche zonale Wasserdampfverteilung in der Stratosphäre aus Messungen von HALOE und MLS. Dargestellt ist die Verteilung über die Höhe und die äquivalente Breite. Die Konturlinien sind im Abstand von 0,2 ppmv gezeichnet. Die Tropopause ist gestrichelt eingezeichnet. Die dicke durchgezogene Linie stellt die $\Theta = 400$ K-Fläche dar. (Quelle: [SPARC, 2000])

zu höheren Breiten aus und sinkt dort wieder ab, wobei das Volumenmischungsverhältnis erhalten bleibt.

Wasserdampf ist in der Troposphäre und der unteren Stratosphäre chemisch nahezu inert. Er eignet sich daher sehr gut als chemischer Tracer, um die stratosphärische Zirkulation zu untersuchen. Die in Abb. 2.5 dargestellte Wasserdampfverteilung unterstreicht die Eignung von Wasserdampf als Tracer für Transportprozesse in der Stratosphäre und für Transporte, die in beiden Richtungen über die Tropopause hinweg ablaufen.

Die jahreszeitliche Variabilität der mittleren Tropopausentemperatur spiegelt sich in den Wasserdampfmischungsverhältnissen der in die Stratosphäre eingebrachten Luftpakete wieder. In den Wintermonaten (Dezember – Januar – Februar) ist die tropische Tropopause kälter [Highwood and Hoskins, 1998]. Die Luft enthält weniger Wasserdampf als in den Sommermonaten (Juni – Juli – August). Der Aufstieg in der Stratosphäre findet erheblich langsamer statt als in der Troposphäre. Kennt man die Hebungsgeschwindigkeit der Luftmassen in der Stratosphäre und das Volumenmischungsverhältnis eines Luftpakets, so kann man daraus die Zeit abschätzen, die es seit dem Eintritt in die Stratosphäre in dieser verbracht hat. Mote bezeichnet diese Erscheinung als „tape-recorder-effect“ [Mote et al., 1996]. Diese Beobachtung unterstützt die Bedeutung von Wasserdampf als Tracer

für STE-Prozesse (engl.: stratosphere – troposphere exchange, STE: Austausch zwischen der Stratosphäre und Troposphäre).

2.6 Die Tropopausenregion

Die Tropopause stellt keinen abrupten Übergang zwischen den beiden Atmosphärenbereichen dar, auch wenn durch die Definition der Tropopause diese in einer bestimmten Höhe festgelegt wird. Die Definition der WMO legt die Tropopause in die Höhe, in der der vertikale Temperaturgradient über einen Höhenbereich von mindestens 2 km kleiner ist als 2 K/km (engl.: lapse-rate tropopause, LRT). Eine andere Definition verwendet dagegen das Minimum im Temperaturprofil als Tropopause (engl.: cold point tropopause, CPT). Diese Definitionen lassen eine leichte Bestimmung der Tropopausenhöhe aus Messungen zu. In den Tropen liegen die CPT und die LRT meist sehr nahe beisammen ($\Delta h < 500 \text{ m}$). In der Modellierung atmosphärischer Vorgänge wird häufig die Definition mit Hilfe der potentiellen Temperatur Θ oder der potentiellen Vorticity verwendet. In den Tropen stellt die Höhe, in der die potentielle Temperatur $\Theta \approx 380 \text{ K}$ beträgt, die Tropopause dar. Außerhalb der Tropen ist die Definition über die potentielle Temperatur nicht so gut geeignet, da die Höhe der Tropopause stark abnimmt und hierbei die Isentropenflächen schneidet. Außerhalb der Tropen kann die Tropopause durch eine Fläche angenähert werden, auf der die potentielle Vorticity etwa 2 PVU beträgt (1 PVU = 1 potential vorticity unit = $10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ kg}^{-1} \text{ K}$) [Holton et al., 1995]. Eine Möglichkeit zur Definition in den Tropen orientiert sich an der Erwärmungsrate. Die CSRT (engl.: clear-sky radiative tropopause) ist die Höhe, in der die Erwärmungsrate gleich Null ist. Oberhalb der CSRT findet im Mittel eine Hebung statt, darunter findet, außerhalb konvektiver Bewölkung, ein mittleres Absinken statt. Konvektive und dynamische Prozesse gleichen diese mittleren Transporte von Luftmassen aus. In einer neueren Sichtweise der tropischen oberen Troposphäre als Übergangsbereich zwischen Troposphäre und Stratosphäre bietet diese Definition Vorteile. Betrachtet man die chemischen Eigenschaften der Troposphäre und der Stratosphäre, so gibt es noch weitere Definitionsmöglichkeiten für die Tropopause anhand der Änderung der chemischen Parameter. Beispielsweise der Übergang von niedrigen Ozonwerten in der Troposphäre zu höheren Volumenmischungsverhältnissen in der Stratosphäre oder die *Hygropause* können als Definition für eine chemische Tropopause verwendet werden.

Beobachtungen haben in den letzten Jahren für die Tropopause in den Tropen neue Erkenntnisse ergeben. Lange Zeit ging man davon aus, dass die hochreichende Konvektion der innertropischen Konvergenzzone (ITKZ) bis an die Tropopause reicht und ein Teil der Wolken bis in die untere Stratosphäre „überschießt“. Beobachtungen und Modellrechnungen deuten jedoch darauf hin, dass es in der oberen Troposphäre einen Übergangsbereich gibt. Die Konvektion reicht meist nur bis Höhen zwischen 13 und 15 km. Darüber wird kaum Konvektion beobachtet. Der konvektive Massenfluss nimmt oberhalb von etwa 12 km stark ab. Zwischen der Obergrenze der Konvektion und der Tropopause ergibt sich dadurch eine Schicht, die sich durch bestimmte Eigenschaften von der Troposphäre unterscheidet. Sie wird als tropische Tropopausenschicht (engl.: tropical tropopause layer, TTL) oder als tropische Übergangsschicht (engl.: tropical transition layer, TTL) bezeichnet. Der Betrag des Temperaturgradienten nimmt in der TTL ab und es tritt eine zunehmende Stabilisierung ein, wobei im Allgemeinen der Gradient noch höher ist, als dass die Definition

der thermischen Tropopause greifen könnte [Atticks and Robinson, 1983]. Die chemische Zusammensetzung der TTL deutet darauf hin, dass hier sowohl troposphärische als auch stratosphärische Prozesse ablaufen [A. Tuck et al., 1997]. In der TTL beginnt der Ozonanstieg deutlich unterhalb der Tropopause (CPT) [Fujiwara et al., 2000], wobei nicht klar ist, ob es sich hierbei um chemische Prozesse oder um Mischungsvorgänge handelt. Der Strahlungshaushalt verändert sich in der TTL mit der Höhe und wirkt sich auf die Prozesse in dieser Übergangsregion aus. Durch Absorption von Strahlung durch CO_2 , und zu einem geringen Teil auch durch Ozon, kommt es zu Erwärmung in dieser Region. Andererseits hat das Auftreten von Zirrusbewölkung über der konvektiven Bewölkung wiederum eine abkühlende Wirkung.

Die Sättigung über Eis lässt für die herrschenden Temperaturen in der tropischen Tropopause Volumenmischungsverhältnisse von etwa 4,5 ppmv für Wasser zu. In der unteren Stratosphäre werden dagegen zum Teil erheblich kleinere Werte beobachtet. Es muss also weitere Faktoren geben, die zur Austrocknung der Luft beitragen. Der abkühlende Einfluss dünner Zirrusbewölkung kann dazu beitragen, dass in die Stratosphäre aufsteigende Luft zusätzlich getrocknet wird [Hartmann et al., 2001]. Gerade in der TTL treten häufig sehr dünne Zirruswolken auf. Diese sind zum Teil optisch so dünn, dass sie im visuellen Spektralbereich kaum Auswirkungen auf das einfallende Sonnenlicht haben (engl.: sub-visible cirrus clouds). Diese Wolken deuten auf Hebungsvorgänge der Luftmassen in der TTL hin. Im Zusammenhang mit der Beobachtung von noch dünneren Zirren (engl.: ultra-thin tropical Cirrus, UTTC) wird die Möglichkeit eingeräumt, dass die Zirrusbewölkung in den Tropen an der Dehydration der Luft auf ihrem Weg in die Stratosphäre beteiligt sind [Peter, 2000].

Eine andere Theorie geht davon aus, dass ein großer Teil des Transports in die Stratosphäre über dem Westpazifik stattfindet. Hier werden die niedrigsten Tropopausentemperaturen beobachtet, die beim Transport durch die Tropopause eine ausreichend starke Austrocknung der Luft ermöglichen. Die bei diesen niedrigen Temperaturen möglichen Sättigungsmischungsverhältnisse über Eis entsprechen den niedrigen Wasserdampf volumensmischungsverhältnissen, die in der tropischen Stratosphäre beobachtet werden. Es gibt noch weitere Ansätze, die Transportwege in die tropische Stratosphäre aufzeigen, wie z.B. der Einfluss von Kelvin-Wellen [Fujiwara et al., 1998], auf die hier jedoch nicht näher eingegangen wird.

Die Temperatur und Wasserdampfverteilung in der TTL und der tropischen Tropopause zeigen eine hohe Variabilität. Diese wird zum einen durch jahreszeitliche Variationen hervorgerufen, zum anderen durch die Land-See-Verteilung und deren Einfluss auf die Dynamik der Atmosphäre. Während des Winters auf der Nordhalbkugel ist die Tropopausentemperatur um etwa 4 bis 8 K niedriger als in den Sommermonaten. Hierbei befindet sich in der westpazifischen Region ein Gebiet mit vergleichsweise niedrigen Tropopausentemperaturen und einer Anhebung der Tropopausenhöhe. In den Sommermonaten befindet sich dagegen über Indien ein ausgeprägtes Temperatur- und Druckminimum der Tropopause. Weitere Temperaturminima finden sich über den östlichen tropischen Regionen von Afrika und Südamerika. Zu den Polen hin nimmt die Tropopausentemperatur zu und gleichzeitig sinkt die Tropopause hier ab [Highwood and Hoskins, 1998].

Nach der Modellvorstellung von Brewer und Dobson sinken stratosphärische Luftmassen in höheren Breiten ab und es ergibt sich ein Transport von der Stratosphäre in die Tro-

osphäre (siehe Abb. 2.4). Die dynamischen Vorgänge mit mesoskaliger und kleinräumiger Ausdehnung sorgen in mittleren Breiten größtenteils für Transporte zwischen Stratosphäre und Troposphäre. Tropopausenbrüche im Bereich des subpolaren Strahlstroms und abgeschlossene Tiefdruckgebiete im Zusammenhang mit „Kaltlufttropfen“ sorgen für regional begrenzte Austauschprozesse mit vorwiegendem Transport stratosphärischer Luft in die Troposphäre.

Messungen zeigen, dass außerhalb der Tropen die unterste Stratosphäre zwischen der Tropopause (LRT) und näherungsweise der $\Theta = 380$ K-Isentropenfläche andere Eigenschaften zeigt als die darüberliegende Stratosphäre. Diese Region wird als „lowermost stratosphere“, als unterste Stratosphäre bezeichnet (siehe Abb. 2.4). Die beobachteten Eigenschaften in dieser untersten Stratosphäre deuten darauf hin, dass es sich hier um einen Übergangsbereich, ähnlich wie die TTL in den Tropen, handelt. Die Tropopause schneidet im Übergangsbereich zwischen den Tropen und den polaren Breiten die Isentropenflächen. In dieser Region finden durch die Dynamik angetriebene Transportprozesse statt, die vor allem mit den großskaligen Wellenbewegungen der Atmosphäre zusammenhängen. Aufgrund der Wellenstruktur ist davon auszugehen, dass der Austausch zwischen Stratosphäre und Troposphäre in beiden Richtungen stattfindet. Das erklärt, dass in der untersten Stratosphäre z.B. höhere Wasserdampf-mischungsverhältnisse gemessen werden, als in der darüberliegenden Stratosphäre.

Isentrope Mischungsvorgänge werden auch mit Transporten aus der oberen Troposphäre der Tropen in die untere Stratosphäre der Subtropen in Verbindung gebracht. Diese können die vergleichsweise hohen Volumenmischungsverhältnisse des Wasserdampfs in der subtropischen untersten Stratosphäre erklären.

In den winterlichen Polargebieten, vor allem in der kälteren unteren Stratosphäre über der Antarktis kann es im Winter durch die extrem niedrigen Temperaturen zu Wolkenbildung in der Eisphase kommen. Die gebildeten Eispartikel fallen aus und sorgen hier für eine starke Dehydration der polaren Atmosphäre. Die untere Stratosphäre über dem winterlichen Nordpol ist in der Regel wärmer als über der Antarktis. Daher kommt es dort seltener zu dem beschriebenen Wasserdampfverlust.

2.7 Langfristige Entwicklung der Wasserdampfverteilung

Im Zusammenhang mit der Diskussion um den anthropogenen Treibhauseffekt und die damit verbundene Veränderung unseres Klimas ist auch die Betrachtung der Wasserdampfverteilung über einen längeren Zeitraum von Interesse. Obwohl seit vielen Jahren Messungen von Wasserdampf stattfinden, ist eine Verwendung der Daten zur Untersuchung eines möglichen Trends schwierig. Zur Unterstützung der synoptischen Meteorologie und der Untersuchungen der unteren und mittleren Troposphäre liegen Radiosondenmessungen für viele Stationen vor. Unterschiedliche Instrumente erschweren einen quantitativen Vergleich zwischen unterschiedlichen Stationen und auch innerhalb einer Zeitreihe, z.B. bei Gerätewechsel. Dennoch ist für die Betrachtung des Trends in der mittleren und unteren Troposphäre eine große Zahl an Messungen vorhanden.

Die Auswertung langjähriger Messreihen in der Troposphäre deuten auf einen Anstieg des Wasserdampfgehalts in der unteren Troposphäre hin. In weiten Gebieten Nordamerikas ergibt sich aus der Auswertung von Radiosondendaten der Jahre 1973 bis 1995 ein Anstieg

des integrierten Wasserdampfs zwischen Erdboden und der 500 hPa-Druckfläche [Ross and Elliot, 1996]. Auch über China und den pazifischen Inseln wird ein positiver Trend beobachtet. Über China ergeben sich Trends zwischen 1 und 3 % pro Dekade für den Wassergehalt [Gutzler, 1992]. Dagegen wird in den übrigen Regionen des eurasischen Kontinents eine uneinheitliche Verteilung von positiven und negativen Veränderungen beobachtet. In Osteuropa und Westrussland zeigt sich eine Tendenz zur Wasserdampfabnahme. Die Wasserdampfgesamtsäule zeigt eine starke Korrelation mit der global gemittelten troposphärischen Temperatur. Auch Messungen mit Satelliteninstrumenten unterstützen die Annahme, dass der troposphärische Wasserdampfgehalt einem positiven Trend unterliegt. Messungen mit dem Special Sensor Microwave Imager (SSM/I) zeigen eine globale Zunahme von 2,2 % pro Dekade [Wentz and Schabel, 2000]. Im Gegensatz zu den Radiosondennmessungen sind Satellitendaten aus einem erheblich kürzeren Zeitraum verfügbar.

Radiosonden sind zur Wasserdampfmessung in der oberen Troposphäre und in der unteren Stratosphäre aufgrund der großen Fehler schlecht geeignet. Um langfristige Entwicklungen in der oberen Troposphäre zu betrachten, bieten sich Messungen mit satellitengetragenen Instrumenten an. Hier wird zur Darstellung oft das Maß der relativen Luftfeuchte (engl.: upper tropospheric humidity, UTH) verwendet. Messungen mit dem Microwave Limb Sounder (MLS) und HIRS zeigen in der oberen Troposphäre keinen signifikanten Trend. Messungen mit MLS zeigen eine starke Abnahme der UTH zwischen 1992 und 1995 mit einem deutlich Minimum in den Jahren 1994/95. Anschließend steigt der Wasserdampfgehalt jedoch wieder an. Ein Zusammenhang mit dem starken El-Niño-Ereignis Anfang der 90er Jahre und dem Ausbruch des Mt. Pinatubo 1991 kann bei diesen kurzen Zeitreihen nicht ausgeschlossen werden. Die Messungen der UTH zeigen einen mittleren Trend von etwa 0,1 %/a in den Tropen zwischen 10° N und 10° S und einen Trend von -0,1 %/a zwischen 30° S und 60° S. In den beschriebenen Regionen ist der Trend signifikant, jedoch aufgrund der kurzen Zeitreihe von 1980 bis 1997 mit einer gewissen Vorsicht zu betrachten. Obwohl der Wasserdampf in der oberen Troposphäre für den Strahlungshaushalt von sehr großer Bedeutung ist, können aus den vorliegenden Ergebnissen keine Aussagen getroffen werden, ob tatsächlich eine Veränderung stattgefunden hat.

In der Stratosphäre sind nur wenige Messungen über größere Zeiträume vorhanden. Die längste Zeitreihe bilden die Messungen mit Ballonaufstiegen über Boulder (Colorado, USA), die seit 1981 regelmäßig durchgeführt werden [Oltmans and Hofmann, 1995]. Die *in situ* Messungen mit Frostpunkt-Hygrometern über Boulder zeigen einen linearen Trend von etwa 1 % pro Jahr, der oberhalb von 16 km Höhe signifikant ist. Für Messungen in den Wintermonaten liegt der Trend etwas höher, während er in den Monaten April bis Juli bei etwa 0,5 % liegt. In den Wintermonaten tritt ein deutliches Wasserdampfminimum in der unteren Stratosphäre auf, das mit Transporten aus der tropischen Stratosphäre erklärt wird.

Auch satellitengetragene Messungen mit dem „Halogen Occultation Experiment“ (HALOE) zeigen zwischen Oktober 1991 und Dezember 1996 in allen Breiten Anstiege im Wasserdampfmischungsverhältnis von etwa 0,1 bis 0,15 ppmv pro Jahr in den Höhen zwischen 30 und 70 km [Randel et al., 1999], [Nedoluha et al., 1998]. In den Messungen von HALOE ist jedoch nach 1996 keine Zunahme im stratosphärischen Wasserdampfgehalt zu erkennen. Hier ist der Trend möglicherweise durch den Einfluss des Vulkanausbruchs des

Mt. Pinatubo gestört. Das langfristige Verhalten ist von kurzzeitigeren Variationen überlagert. Es gibt für den beobachteten Trend in der Stratosphäre verschiedene Erklärungsansätze. Neben den oben beschriebenen möglichen Einflüssen durch Vulkanausbrüche und Klimavariabilitäten, ist eine Reaktion des Wassergehalts auf die Sonnenaktivität denkbar. Aus den HALOE-Messungen der ersten fünf Jahre kann nicht auf einen Trend geschlossen werden.

Die beschriebenen Trends im Wasserdampfgehalt werden durch Vergleiche mit Messungen, die bis in die 50er Jahre des vergangenen Jahrhunderts zurückreichen, bestätigt. Aus diesen Messungen kann jedoch kein genauer Trend abgeleitet werden, da keine kontinuierlichen Messungen mit einheitlichen Instrumenten vorhanden sind.

Von großer Bedeutung ist der Trend der Temperatur in der tropischen Tropopause, durch die der größte Teil des Eintrags von Luftmassen in die Stratosphäre stattfindet. In der Tropopause verändert sich der Sättigungsdampfdruck von Wasserdampf bei einer Änderung der Lufttemperatur um 1 K um etwa 15 bis 20 %. Das bedeutet, dass schon eine geringe Temperaturänderung eine enorme Wasserdampfvariation hervorrufen kann. Ein langfristiger Anstieg der Tropopausentemperatur kann also einen Anstieg im stratosphärischen Wassergehalt unterstützen. Untersuchungen der Temperatur-Trends im 100 hPa-Niveau der Tropen zeigen uneinheitliche Trends zwischen einer Erwärmung um 0,3 K pro Dekade und einer Abkühlung von bis zu 0,5 K pro Dekade. Aus Analysen des Europäischen Zentrums für Mittelfristige Wettervorhersage (EZMW) ermittelte Simmons eine Abkühlung von etwa 0,6 K pro Dekade für die Jahre 1979 bis 1998 [Simmons et al., 1999]. Ein ähnlicher Trend mit einer Abkühlung von 0,57 K pro Dekade ergibt sich auch aus Analysen des Trends der Temperatur der tropischen CPT [Zhou et al., 2001]. Die Trends der Tropopausentemperatur sind nicht eindeutig. Das deutet darauf hin, dass eine Veränderung der Tropopausentemperatur nicht als Hauptursache für den Anstieg des stratosphärischen Wasserdampfs gesehen werden kann. Veränderungen in der Verteilung und Aktivität der konvektiven Gebiete und der Zirkulation in den Tropen können zu einem Anstieg des stratosphärischen Wasserdampfs führen.

Verkehrsflugzeuge bewegen sich meist in der Tropopausenregion und zum Teil auch in der unteren Stratosphäre. Ein großer Teil der beim Verbrennungsprozess entstehenden Abgase wird in Form von Wasserdampf abgegeben. Je nach Tropopausendefinition werden bis zu 40 % der Wasserdampfemissionen aus Flugzeugabgasen in der Stratosphäre emittiert [Gettelman and Baughcum, 1999]. Da die meisten Emissionen in der untersten Stratosphäre der mittleren Breiten stattfinden, wird der größte Teil der Emissionen schnell wieder in die Troposphäre zurückgeführt. Modellrechnungen ergeben für 40° N einen Wasserdampfanteil aus Flugzeugemissionen von etwa 0,055 ppmv in 10 km Höhe und 0,012 ppmv in 24 km Höhe [Oltmans and Hofmann, 1995]. Verglichen mit den mittleren Volumenmischungsverhältnissen des Wasserdampfs in der Stratosphäre ist dieser Anteil gering. Auch die Zunahme der Flugzeugemissionen in den letzten Jahren führt nur zu einem geringen Anstieg des Wasserdampfgehalts. Der verstärkte Einsatz von hochfliegenden Überschallflugzeugen hätte dagegen einen deutlich stärkeren Einfluss auf den stratosphärischen Wassergehalt, da die Emissionen in Höhen stattfinden, in denen kein rascher Austausch mit der Troposphäre stattfindet.

Der Anstieg der Methanemissionen in der Troposphäre, der zu einem großen Teil anthropogenen Ursprungs ist, ist deutlich erkennbar. Dies belegen Messungen, die einen mitt-

lere Anstieg von 0,7 bis 1,1 % pro Jahr in der CH₄-Gesamtsäule ergeben [Zander et al., 1989], [Rinsland et al., 1985]. Der sich hieraus ergebende Anstieg im Wasserdampfgehalt in der unteren Stratosphäre ist mit weniger als 0,02 ppmv/a geringer als der beobachtete Trend von 1 bis 2 % pro Jahr. Der Anstieg des Methaneintrags in die Stratosphäre trägt zum Trend des stratosphärischen Wasserdampfs bei. Er ist jedoch nur einer von mehreren Faktoren, die den Wasserdampf der unteren Stratosphäre beeinflussen.

Die Veränderung von Transportprozessen kann zu einem Teil des beobachteten Anstiegs im stratosphärischen Wasserdampf beitragen. Ein verringerter Transport von trockenen Luftmassen aus der unteren Stratosphäre der Tropen oder ein verstärkter Eintrag feuchter Luft aus der oberen Troposphäre könnte hier einen Einfluss ausüben. Aus HALOE-Messungen ergibt sich für den Anstieg ein möglicher Zusammenhang mit erhöhten Wasserdampfwerten in der oberen Troposphäre während des Herbsts auf der Nordhalbkugel. Diese Veränderungen hängen möglicherweise mit Veränderungen im asiatischen Monsun zusammen [Smith et al., 2000]. Eine mögliche Ausweitung der Zone, in der eine großräumige Hebung auftritt, von den Tropen zu höheren Breiten, in denen die Tropopausentemperaturen wieder ansteigen, könnte zu einem verstärkten Eintrag von Wasserdampf in die Stratosphäre führen [Zhou et al., 2001]. Veränderungen in der Stärke und der Verteilung von Transporten können einen Einfluss auf den stratosphärischen Wasserdampfgehalt haben.

Der beobachtete vermutliche Anstieg von 1 bis 2 % pro Jahr kann durch die oben beschriebenen Mechanismen nicht vollständig erklärt werden. Auch wenn einzelne Beiträge nachvollziehbar sind, ist ein großer Teil der Zunahme noch nicht verstanden. Aus den beobachteten Trends kann keine Aussage für die zu erwartende Entwicklung in den nächsten Jahren gemacht werden. Aus der langfristigen Entwicklung seit den 50er Jahren des zwanzigsten Jahrhunderts kann man jedoch davon ausgehen, dass auch in den nächsten Jahren ein Anstieg im stratosphärischen Wasserdampf zu erwarten ist.

Die Auswirkungen einer Veränderung des stratosphärischen Wasserdampfs haben einen starken Einfluss auf den Strahlungshaushalt zur Folge. Durch einen Anstieg müsste sich eine deutliche Abkühlung in der Stratosphäre ergeben. Besonders in den Polargebieten sind durch den Wasserdampfanstieg sinkende Temperaturen zu erwarten [de F. Forster and Shine, 1999]. Diese Abkühlung in der polaren Stratosphäre kann zu verstärktem Ozonabbau führen. Durch niedrigere Temperaturen sinkt der Sättigungsdampfdruck von Wasserdampf. Es kann somit zu einem vermehrten Auftreten von polaren Stratosphärenwolken (engl.: polar stratospheric cloud, PSC) kommen, die bei Temperaturen von unter 195 K entstehen. Diese PSCs haben einen erheblichen Einfluss auf die Chemie in der Stratosphäre. Die auf PSC-Teilchen ablaufende heterogene Chemie beschleunigt einige der an der Ozonchemie beteiligten Reaktionen. Wolken in der polaren Stratosphäre binden während der Polarnacht Salpetersäuremoleküle (HNO₃), die ein nichtreaktives Reservoir für die reaktiven Stickoxide NO und NO₂ darstellen. Sinken die Wolkenteilchen ab, so gehen die Stickstoffverbindungen in dieser Höhe verloren und stehen nicht mehr zur Verfügung. Zum Ende der Polarnacht kann die einsetzende Chloraktivierung nicht durch Stickstoffverbindungen gepuffert werden und es kann zu einem verstärkten Ozonabbau kommen.

Durch den Anstieg von Wasserdampf kann nicht nur der Abbau von Ozon unterstützt werden. Die Erholung der Ozonschicht kann durch erhöhte Wasserdampfgehalte verzögert

werden [Jucks and Salawitch, 2000]. Desweiteren ist es möglich, dass die resultierende Veränderung des Strahlungshaushalts als Folge eines Anstiegs des stratosphärischen Wasserdampfs den Treibhauseffekt in der Troposphäre verstärkt [Shindell, 2001].

In der Troposphäre trägt ein erhöhter Wasserdampfanteil deutlich zum Strahlungshaushalt bei. Wasserdampf zeigt ein starkes positives Feed-back auf den Anstieg anderer Treibhausgase. Der Wasserdampfanstieg infolge eines Temperaturanstiegs durch die Zunahme anderer Treibhausgase führt seinerseits wieder zu einem Temperaturanstieg. In der oberen Troposphäre sorgt eine erhöhte Luftfeuchte für eine verstärkte Abstrahlung ins Weltall. Diese findet vor allem im Bereich der Rotationsbande im fernen Infrarot statt [Brindley and Harries, 1998]. Da durch einen Anstieg der UTH die Opazität der Atmosphäre ansteigt, findet die Emission in höheren und damit kälteren Schichten statt. Die Anhebung des Niveaus der emittierenden Luftschicht sorgt dafür, dass die erhöhte Emission ins All als Folge des Wasserdampfanstiegs weniger stark ansteigt als erwartet [Harries, 1996], [Slingo and Webb, 1997].

Eine Veränderung des Wasserdampfgehalts in der mittleren und oberen Troposphäre wirkt sich auch auf die Verteilung und Häufigkeit von Bewölkung aus. Wolken haben einen sehr großen Einfluss auf den Strahlungshaushalt. Zum einen erhöhen Wolken die Albedo, zum anderen verhindern sie die Abstrahlung aus den unteren Schichten der Atmosphäre und vom Erdboden. Welchen Einfluss Wasserdampfveränderungen auf die Entstehung und Verteilung von Wolken haben, ist wenig erforscht. In der Klimamodellierung werden Wolken nicht oder nur ansatzweise mitgerechnet. Das heisst, die Reaktion der globalen Bewölkung auf eine Veränderung im Wasserdampfgehalt wird in Klimamodellen nicht detailliert behandelt.

Fasst man die beschriebenen Auswirkungen, die ein Anstieg von Wasserdampf in der Atmosphäre hat, zusammen, so ergibt sich ein komplexes Bild der Auswirkungen auf die Strahlungsbilanz der Atmosphäre. Das Zusammenspiel der beschriebenen Reaktionen der Troposphäre auf einen veränderten Wasserdampfgehalt ist kompliziert und schwierig zu erfassen. Einige Effekte der unteren und oberen Troposphäre wirken gegenläufig, während sich andere verstärken. Eine genaue Aussage über die relative Bedeutung der einzelnen Effekte auf die resultierende Änderung der Strahlungsbilanz kann nicht gemacht werden.

Die Bedeutung des Wasserdampfs für die Strahlungsbilanz, den Wasserkreislauf und die Wolkenbildung ist sehr komplex. Um die zukünftigen Veränderungen zu modellieren und damit Prognosen zu erstellen, müssen die Zusammenhänge zwischen Wasserdampf und Klima genau bekannt sein und in die verwendeten Klimamodelle integriert werden.

In diesem Kapitel wurde die Bedeutung des Wasserdampfs als Energieträger und Mittel zur Ausbreitung des ungleichmäßig verteilten Wassers dargestellt. Die Bedeutung des Wassers für die Dynamik in der Troposphäre wurde kurz gezeigt. Da diese Arbeit sich vor allem auf die obere Troposphäre und die Stratosphäre bezieht, wurden die Transportwege von Wasserdampf in die Stratosphäre hinein und innerhalb dieser vorgestellt. Seine Bedeutung als Tracer und als wichtiges Element im Strahlungshaushalt wurde dargestellt.

Gerade die Rolle des Wasserdampfs in der UT/LS-Region für die Transporte und den Strahlungshaushalt zeigt, wie wichtig eine gute Kenntnis der Wasserdampfverteilung ist. Anhand verschiedener publizierter Modellstudien wurden die Auswirkungen von Wasserdampfveränderungen untersucht. Auch wurden verschiedene Reaktionen des Wasserdampfgehalts auf Veränderungen bei anderen atmosphärischen Größen wie Dynamik und

Temperatur kurz umrissen. Gerade in der oberen Troposphäre und der Stratosphäre ist nur eine begrenzte Anzahl an Wasserdampfmessungen vorhanden, die eine globale Abdeckung bieten und über längere Zeiträume aufgenommen wurden. Um die Fragen, die bezüglich des Wasserdampfs in der UT/LS-Region noch offen sind, zu klären, sind zahlreiche Messungen nötig. Satellitengetragene Instrumente wie HIRDLS und MIPAS sollen mit ihren Messungen dazu beitragen, einige der offenen Probleme zu lösen.

Kapitel 3

Grundlagen der Strahlungsübertragung, der Retrievaltheorie und der Fehlerabschätzung

In diesem Kapitel wird die Modellierung der Strahlungsübertragung in der Atmosphäre und der Weg von den Strahldichten, die vom Instrument gemessen werden, zu Vertikalprofilen der gesuchten Größen dargelegt. Zu Beginn wird in Kapitel 3.1 die Zusammensetzung der gemessenen Strahldichte und die Modellierung des spektral aufgelösten Strahlungstransfers aus den einzelnen Atmosphärenschichten bis zum Messgerät beschrieben. Diese ist ein wichtiger Bestandteil der anschließend in Kapitel 3.2 beschriebenen Inversionstheorie, welche den Weg vom gemessenen Spektrum zum Vertikalprofil unter Verwendung eines statistischen Ansatzes beschreibt. Aus dem iterativ an die Messung approximierten modellierten Spektrum wird mit Hilfe von Inversionsmethoden auf den atmosphärischen Zustand geschlossen. Der Abschnitt 3.3 schließt mit der Vorstellung von Analysemethoden zur Bewertung der Güte der abgeleiteten Profile ab. Die Auflösungsmatrix wird zur Bestimmung der vertikalen Auflösung verwendet. Desweiteren werden Methoden zur Abschätzung der Beiträge von Messgeräterauschen, Unsicherheiten bei verwendeten *a priori* Daten und eingeschränktem geometrischen Auflösungsvermögen zum Gesamtfehler der Inversion vorgestellt.

3.1 Strahlungsübertragung in der Atmosphäre

3.1.1 Theorie

Eine erste physikalische Beschreibung der Strahlungsübertragung in der Erdatmosphäre stammt von Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1960]. Der Weg der Strahlung entlang eines einzelnen Strahls durch die Atmosphäre wird bestimmt durch Extinktion und Emission von Strahlung in einzelnen Atmosphärenschichten. Extinktion und Emission auf einem Wegstück ds hängen von der Zusammensetzung der Luft in dem durchstrahlten Luftpaket ab: Gasatome und -moleküle sowie Aerosolpartikel mit verschiedenen Eigenschaften verändern den Betrag der Strahlung auf ihrem Weg durch das Luftpaket. Im infraro-

ten Spektralbereich kann die Streuung der Strahlung an Atomen und Molekülen vernachlässigt werden. Dieser Schritt ist zulässig, da hier die Rayleigh-Streuung mit ihrer hohen Abhängigkeit von der Wellenlänge ($\sim 1/\lambda^4$) für die sehr kleinen Gasmoleküle nur eine untergeordnete Rolle spielt. Die Mie-Streuung der Strahlung an Aerosolpartikeln kann zwar nicht immer vernachlässigt werden, jedoch sollen Streueffekte an Aerosolpartikeln in dieser Arbeit vernachlässigt werden

In der Troposphäre und Stratosphäre kann man in großen spektralen Bereichen von einem lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (engl: local thermodynamic equilibrium/LTE) ausgehen. Dann entspricht die Besetzungsverteilung der molekularen Zustände einer Boltzmannverteilung mit der kinetischen Temperatur. Für hohe Atmosphärenschichten und einige Gase in der mittleren Atmosphäre (z.B. NO) gilt diese Annahme nicht [Funke, 2000]. Für den Wasserdampf in der UT/LS-Region, auf den in dieser Arbeit der Schwerpunkt gelegt wird, spielen diese sogenannten „non-LTE“-Bedingungen keine Rolle. Daher wird im weiteren Verlauf stets von LTE-Bedingungen ausgegangen.

Die in einem Luftpaket der Dicke ds emittierte monochromatische Strahldichte $dI_{em}(\nu)$ bei der Wellenzahl ν ergibt sich aus dem Produkt von Absorptions- bzw. Emissionskoeffizienten $k(\nu, s)\rho(s)$ und der Planck-Funktion $B(\nu, T)$:

$$dI_{em}(\nu) = k(\nu, s)\rho(s)B(\nu, T)ds. \quad (3.1)$$

In der Wellenzahlschreibweise lautet die Planckfunktion für eine diskrete Stützstelle ν

$$B(\nu, T) = \frac{2hc^2\nu^3}{\exp\left\{\frac{hc\nu}{kT}\right\} - 1}, \quad (3.2)$$

wobei h die Planck'sche Konstante, k die Boltzmann-Konstante und c die Vakuum-Lichtgeschwindigkeit ist. Die Transmission eines einzelnen Gases g entlang der Wegstrecke ds ist gegeben durch:

$$\tau(\nu, s_0, s_1, g) = \exp\left\{-\int_{s_0}^{s_1} k(\nu, s, g)\rho_a(s, g)ds\right\} = \exp\{-\delta_g\}. \quad (3.3)$$

Das Produkt aus Absorptionskoeffizienten $k(\nu, s)$ und Absorberdichte $\rho_a(s)$ im betrachteten Volumen, integriert über die Weglänge des Strahls durch das betrachtete Volumen, ergibt die optische Dicke δ . Die Transmission τ ist dann gegeben durch eine Exponentialfunktion, deren Exponent $-\delta$ ist. Für ein Gasgemisch, wie die Atmosphäre, kann die optische Dicke in Gl. (3.3) als Summe über die Einzelbeiträge aller N_g bekannten Gase geschrieben werden:

$$\delta(\nu, s) = \int_{s_0}^{s_1} k(\nu, s)\rho_a(s)ds = \int_{s_0}^{s_1} \sum_{g=1}^{N_g} k(\nu, s, g)\rho_a(s, g)ds. \quad (3.4)$$

Die Absorptionskoeffizienten $k(\nu, s, g)$ werden für jedes zu berücksichtigende Gas getrennt berechnet. Es wird die Form jeder einzelnen Emissionslinie, deren Zentrum an einer bestimmten Position ν_0 im Spektrum liegt, mit Hilfe von spektroskopischen Liniendaten [Rothman et al., 1998], Druck- und Temperaturprofilen berechnet. Der Beitrag einer Emissionslinie zum Absorptionskoeffizienten am Spektralpunkt ν ergibt sich aus dem

Abstand $(\nu - \nu_0)$ vom Linienzentrum. Zwei Funktionen beschreiben die Form einer Spektrallinie: Die Dopplerverbreiterung und die Druck- oder Lorentzverbreiterung. Die Dopplerverbreiterung beschreibt die Verbreiterung der Linie als Folge der zufällig verteilten Translationsbewegungen der emittierenden Moleküle, die jeweils eine Dopplerverschiebung der von den Molekülen emittierten Frequenz zur Folge haben. Die Dopplerverbreiterung hängt von der Temperatur und der molekularen Masse des Gases ab. Die Lorentzverbreiterung beschreibt die Veränderung der Linienform durch Stoßwechselwirkungen. Sie hängt neben der Temperatur vor allem vom Druck und von gasspezifischen Parametern ab. In der Erdatmosphäre wird unterhalb von etwa 20 km die Linienform durch die Lorentzverbreiterung dominiert, während sie oberhalb von etwa 35 km durch die Dopplerverbreiterung beschrieben wird. Um eine exakte Berechnung der Linienform zu ermöglichen, müssen beide Linienformen zumindest im Übergangsbereich berücksichtigt werden. Die Faltung der Dopplerfunktion mit der Lorentzfunktion ergibt die Voigt-Funktion. Diese wird in der Strahlungsübertragungsrechnung verwendet, um beide Linienformen bei der Berechnung der Absorptionskoeffizienten zu berücksichtigen.

Ein Luftpaket emittiert nicht nur Strahlung, es schwächt auch die eintreffende Strahlung $I_0(\nu)$ auf dem Weg durch das Volumen ab. Nach dem „Kirchhoff’schen Gesetz“ ist das Absorptionsvermögen gleich dem Emissionsvermögen. Die Änderung der Strahldichte beim Durchgang durch das betrachtete Luftpaket ist dann

$$dI_{abs}(\nu, s) = -I_0(\nu)k(\nu, s)\rho(s)ds. \quad (3.5)$$

Die Gesamtänderung der Strahldichte beim Durchgang durch die betrachtete Luftschicht der Dicke ds ergibt sich aus der Summe der einzelnen Änderungen:

$$dI(\nu, s) = dI_{abs}(\nu, s) + dI_{em}(\nu, s) = (-I_0(\nu) + B(\nu, T))k(\nu, s)\rho(s)ds. \quad (3.6)$$

Diese Gleichung wird auch *Schwarzschild-Gleichung* genannt.

Integration von Gl. (3.6) über die durchstrahlte Schicht zwischen den Grenzen s_0 und s_1 liefert die Strahlungsübertragungsgleichung (SÜG) in integrierter Form:

$$I(\nu, s_1) = I(\nu, s_0)\tau(\nu, s, s_1) + \int_{s_0}^{s_1} B(T(s))k(\nu, s)\rho_a(s)\tau(\nu, s, s_1)ds. \quad (3.7)$$

3.1.2 Numerische Lösung

Die oben beschriebene Modellvorstellung der Strahlungsübertragung gilt für den monochromatischen Fall bei einer festen Wellenzahl ν . In der Realität ist das gemessene Spektrum eine kontinuierliche Funktion im Wellenzahlraum. Ebenso sind auch die eingehenden atmosphärischen Größen kontinuierliche Funktionen der Höhe. Zur Vereinfachung der Berechnung werden sowohl das Spektrum als auch die in das Modell einfließenden atmosphärischen Profile auf einem diskreten Gitter vorgegeben. Die Atmosphäre wird in einzelne Schichten aufgeteilt, die jeweils als homogen angesehen werden. Das gesamte gemessene Signal an der spektralen Stützstelle ν setzt sich aus den Einzelemissionen der einzelnen, vom Sehstrahl durchquerten Luftschichten zusammen.

Für die Modellierung der Strahlungsübertragung entlang des Sehstrahls wird dieser in kleinere Abschnitte, sogenannte Teilsäulen, unterteilt. Die Größen in diesen Teilsäulen

werden als homogen verteilt angesehen. Für jeden dieser Teilabschnitte wird der Strahldichtebeitrag $I_i(\nu)$ durch Emission bzw. Absorption berechnet. Anschließend werden alle Einzelbeiträge zur gesamten, am Gerät ankommenden, Strahldichte $I(\nu)$ zusammengefasst.

Ordnet man jedem dieser Wegstücke eine mittlere Temperatur T_i und eine spektrale Transmission τ_i zu, so kann die Gesamtstrahldichte für die Säule von der am weitesten vom Beobachter entfernten Teilsäule 1 bis zu der, dem Beobachter am nächsten liegenden, Teilsäule N geschrieben werden als [Höpfner et al., 1998]:

$$I(\nu) = B(T_{backgr}) \prod_{i=1}^N \tau_i(\nu) + \sum_{i=1}^N [B(\nu, T_i)(1 - \tau_i(\nu)) \prod_{j=i+1}^N \tau_j(\nu)]. \quad (3.8)$$

Bei Verwendung des Weltalls als Strahlungshintergrund wird der erste Term dieser Gleichung vernachlässigt, da im Infraroten der Strahldichtebeitrag durch die Hintergrundstrahlung des kalten Weltalls mit $B(2,7 \text{ K}) \approx 0$ keinen Einfluss auf das Ergebnis hat.

Die oben beschriebene monochromatische Modellierung wird von Strahlungsübertragungsmodellen wie KOPRA [Stiller, 2000], GENLN2 [Edwards, 1992], FASCOD3 [Clough et al., 1989] usw. für jede diskrete spektrale Stützstelle im betrachteten Spektralbereich durchgeführt. Die Modellierung erfolgt mit einer sehr hohen Auflösung, um auch feine spektrale Strukturen und schmale Linien zu modellieren und zu erfassen. Entsprechend der gewünschten spektralen Auflösung des berechneten Spektrums wird ein spektrales Intervall der Breite $\Delta\nu$ festgelegt. Diesem Spektralbereich wird ein Strahldichtewert $I_{\Delta\nu}(\nu_0)$ zugeordnet. Dieser Strahldichtewert setzt sich aus den hoch aufgelöst gerechneten Strahldichtewerten zusammen, die über das betrachtete Intervall integriert werden:

$$I_{\Delta\nu}(\nu_0) = \int_{\nu_0 - \frac{\Delta\nu}{2}}^{\nu_0 + \frac{\Delta\nu}{2}} f(\nu - \nu_0) I(\nu) d\nu. \quad (3.9)$$

Die spektrale Filterfunktion $f(\nu - \nu_0)$ bestimmt die Wichtung der individuellen Strahldichten $I(\nu)$ im Intervall $\Delta\nu$ um den Spektralpunkt ν_0 . Im Folgenden wird für einen Spektralpunkt ν_0 , dem der integrierte Strahldichtewert $I_{\Delta\nu}(\nu_0)$ zugewiesen wird, der Begriff spektrale Stützstelle verwendet. Fasst man die berechneten Strahldichtewerte der diskreten spektralen Stützstellen in einem Vektor zusammen, so kann die Modellierung der Strahlungsübertragung allgemein geschrieben werden als:

$$\vec{y} = \vec{F}(\vec{x}). \quad (3.10)$$

In dieser Schreibweise enthält der Vektor \vec{y} die Spektralwerte. \vec{y} ist im „Spektralraum“ definiert und hat die Dimension m , wobei m die Anzahl aller verwendeter Werte im Spektrum ist. Bei Messungen in mehreren Höhen enthält er die gemessenen Spektralwerte aus allen Höhen. Im Parameterraum enthält der Vektor \vec{x} die variablen atmosphärischen Parameter, die das Ergebnis der SÜG bestimmen. Der Vektor \vec{x} besitzt die Dimension n . Das Strahlungsübertragungsmodell wird durch die Funktion \vec{F} repräsentiert. Diese Funktion berücksichtigt die gesamte bekannte Physik. Näheres zur Modellierung hochauflöser Infrarot-Spektren findet man z.B. bei Stiller [Stiller, 2000].

3.2 Von der gemessenen Strahldichte zur atmosphärischen Zustandsgröße – Retrievaltheorie

Ein Instrument misst die in der Erdatmosphäre emittierte und auf dem Weg durch die Atmosphäre zum Gerät modifizierte Strahlung. Die Theorie zur Ableitung atmosphärischer Zustandsgrößen, im weiteren Retrievaltheorie genannt, wie sie von Rodgers [Rodgers, 1976] beschrieben wird, beschäftigt sich mit der Frage, wie aus den gemessenen Strahldichtewerten auf eine bestimmte atmosphärische Zustandsgröße geschlossen werden kann. Aus den gemessenen Strahldichtewerten, deren Beiträge in verschiedenen Höhen, durch Extinktion oder Emission verändert werden, soll auf die Vertikalprofile oder Gesamtgehalte verschiedener atmosphärischer Größen geschlossen werden.

Das gemessene Signal setzt sich aus verschiedenen Beiträgen zusammen. Neben den Beiträgen der gesuchten atmosphärischen Größe \vec{x} , auch Zielgröße genannt, werden noch zusätzliche Parameter benötigt, um die SÜG zu lösen. Zusätzlich zu dem in Gl. (3.10) eingeführten Parametervektor \vec{x} wird der Vektor \vec{b} eingeführt. Dieser enthält die Parameter, die zur Lösung der SÜG benötigt werden, aber als konstant angenommen werden. In \vec{b} sind z.B. weitere atmosphärische Größen, gerätespezifische Parameter, Daten der Messgeometrie usw. enthalten. Der Vektor \vec{b} besitzt die Dimension n_b . Das Rauschen der Messung, das nicht modelliert werden kann, wird durch Einführung des Vektors $\vec{\epsilon}_y$, der die Dimension m besitzt, berücksichtigt. Damit kann man Gl. 3.10 umformulieren. Das gemessene Signal \vec{y}_{mess} kann dann mit

$$\vec{y}_{mess} = \vec{F}(\vec{x}, \vec{b}) + \vec{\epsilon}_y \quad (3.11)$$

beschrieben werden.

Die im letzten Abschnitt vorgestellte SÜG stellt ein nichtlineares Problem dar. Um die SÜG lösbar zu machen, wird diese daher linearisiert. Der funktionale Zusammenhang $\vec{F}(\vec{x}, \vec{b})$ zwischen gemessener Strahlung und Parametervektor \vec{x} wird durch Einführung der sogenannten Jacobimatrix linear approximiert:

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \vec{F}(\vec{x}, \vec{b})}{\partial \vec{x}} = \nabla_{\vec{x}} \vec{F}(\vec{x}, \vec{b}). \quad (3.12)$$

Sie gibt die Sensitivität der Strahldichtewerte auf Variationen der Größe \vec{x} im Parameterraum wieder und besitzt die Dimension $m \times n$. Damit lässt sich, mit $\vec{y}_0 = \vec{F}(\vec{x}_0, \vec{b})$, die linearisierte SÜG schreiben als

$$\vec{y}_{mess} = \vec{y}_0 + \mathbf{K}(\vec{x} - \vec{x}_0) + \vec{\epsilon}_y \quad (3.13)$$

wobei \vec{x}_0 und damit auch \vec{y}_0 konstant sind. Hier stellt sich die Frage, wie man von den gemessenen Strahldichten \vec{y}_{mess} zu den gesuchten Parametern in \vec{x} kommt. Die naheliegende Operation

$$\vec{x} - \vec{x}_0 = \mathbf{K}^{-1}(\vec{y}_{mess} - \vec{y}_0) \quad (3.14)$$

ist in der Regel nicht möglich, da \mathbf{K} nur in Ausnahmefällen invertierbar ist. Man spricht daher von einem *inversen Problem*. Im Folgenden wird ein Weg zur Lösung dieses *inversen Problems* gezeigt.

Für eine verrauschte Messung kann mit Mitteln der Wahrscheinlichkeitsrechnung der wahrscheinlichste Wert der Messung bestimmt werden. Hierbei kann die Annahme gemacht werden, dass die Fehler einer Gauß-Verteilung folgen.

Für eine Vektorgröße \vec{x} kann die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P(\vec{x})$ für eine angenommene Gauß-Verteilung folgendermaßen dargestellt werden:

$$P(\vec{x}) = \left[(2\pi)^{n/2} \det(\mathbf{S})^{1/2} \right]^{-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\vec{x} - \vec{x}_0)^T \mathbf{S}^{-1} (\vec{x} - \vec{x}_0) \right\}. \quad (3.15)$$

Hier ist n die Dimension von \vec{x} . $\vec{x}_0 = E(\vec{x})$ ist der Erwartungswert des Ereignisses und $\mathbf{S} = E\{(\vec{x} - \vec{x}_0)(\vec{x} - \vec{x}_0)^T\}$ ist die dem Ereignis zugeordnete Kovarianzmatrix. Die Funktion P gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der \vec{x} einen bestimmten Wert annimmt.

Das „Bayes'sche Theorem“ behandelt den Fall der sogenannten bedingten Wahrscheinlichkeit. Es liefert die Wahrscheinlichkeit $P(\vec{x} | \vec{y})$, mit der sich das Ereignis \vec{x} unter der Voraussetzung, dass das Ereignis \vec{y} eingetreten ist, einstellt. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ergibt sich dann wie folgt:

$$P(\vec{x} | \vec{y}) = \frac{P(\vec{y} | \vec{x})P(\vec{x})}{P(\vec{y})}. \quad (3.16)$$

Übertragen wir diesen Ausdruck auf die Lösung des *inversen Problems*, so gibt das „Bayes'sche Theorem“ die Wahrscheinlichkeit wieder, mit der ein bestimmtes atmosphärisches Profil \vec{x} einem gemessenen Spektrum \vec{y} zugeordnet werden kann.

Das gesuchte Ergebnis ist der Vektor \vec{x} , für den die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P(\vec{x} | \vec{y})$ maximal wird. Die einzige bekannte Größe ist der Vektor des Spektrums \vec{y} . Unter der Annahme, dass nichts über den Ergebnisvektor \vec{x} bekannt ist, also jedes mögliche Ergebnis mit derselben Wahrscheinlichkeit eintritt, nimmt die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P(\vec{x})$ einen konstanten Wert an. Um das Ergebnis mit der höchsten Wahrscheinlichkeit, $\hat{\vec{x}}$, zu erhalten, maximieren wir Gl. (3.16) hinsichtlich des Vektors \vec{x} . $P(\vec{y})$ ist unabhängig von \vec{x} und kann als konstant angesehen werden. Es gilt also die Funktion $P(\vec{y} | \vec{x})$ zu maximieren [Rodgers, 2000] (Es gilt: $\vec{F}(\vec{x}) = \vec{F}(\vec{x}_0) + \mathbf{K}(\vec{x} - \vec{x}_0)$):

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} (-2 \ln P(\vec{y} | \vec{x})) = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left((\vec{y} - \mathbf{K}\vec{x})^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y} - \mathbf{K}\vec{x}) \right) = 0. \quad (3.17)$$

\mathbf{S}_y ist die Kovarianzmatrix der Messung mit der Dimension $m \times m$. Damit ergibt sich für die Schätzung des Ergebnisvektors:

$$\hat{\vec{x}} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y} - \mathbf{K}\vec{x}_0) + \vec{x}_0. \quad (3.18)$$

Diese Lösung existiert nur, wenn die Kovarianz $\hat{\mathbf{S}}_x = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})^{-1}$ nicht singulär ist. Für „reelle“ Problemstellungen in der atmosphärischen Fernerkundung kann es vorkommen, dass die Matrix $\hat{\mathbf{S}}_x$ nicht invertierbar ist. So kann zum Beispiel die Tatsache, dass die Anzahl der spektralen Messwerte größer ist als die Dimension des gesuchten Parametervektors \vec{x} , dazu führen, dass die Zeilen von \mathbf{K}^T nahezu linear abhängig sind. Die Wahl eines Gitters im Parameterraum, das feiner ist als das Messgitter kann zu Problemen bei der Inversion der Matrix $\hat{\mathbf{S}}_x$ führen. Man versucht, mehr Höheninformation aus den Messungen zu erhalten, als durch die vorhandenen Messungen auf den Stützstellen des Messgitters gegeben sind. Man spricht dann von einem schlecht gestellten Problem.

Ist das Problem also schlecht gestellt, so ist es sinnvoll, die Lösung von bestimmten Nebenbedingungen abhängig zu machen, die eine eindeutige Lösbarkeit des Gleichungssystems ermöglichen. Es gibt verschiedene Nebenbedingungen, die angewandt werden können, um die Lösung des *inversen Problems* zu ermöglichen. Setzt man für diese Nebenbedingung einen zunächst nicht näher definierten Regularisierungsterms R ein, so kann Gl. (3.18) wie folgt umgeschrieben werden:

$$\hat{\vec{x}} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + R)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y} - \mathbf{K} \vec{x}_0) + \vec{x}_0 = \mathbf{G}_y (\vec{y} - \mathbf{K} \vec{x}_0) + \vec{x}_0. \quad (3.19)$$

\mathbf{G}_y ist die verallgemeinerte Inverse der Jacobimatrix \mathbf{K} . Da die Lösung der Retrievalgleichung oft ein nichtlineares Problem darstellt, bietet es sich an, die Gleichung iterativ zu lösen. In einem Iterationsverfahren, wie beispielsweise dem Verfahren nach Gauß-Newton, wird das Ergebnis in Schritten approximiert, wobei für die einzelnen Iterationsschritte die Annahme der Linearität gültig ist. Somit erhält man die Retrievalgleichung für die iterative Lösung [Rodgers, 2000]:

$$\hat{\vec{x}}_{i+1} = \hat{\vec{x}}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + R)^{-1} (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{mess} - \vec{y}_{calc}(\hat{\vec{x}}_i)) - R(\vec{x}_a - \hat{\vec{x}}_i)). \quad (3.20)$$

Der in der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion verwendete Vektor \vec{y} wird durch den Messvektor \vec{y}_{mess} ersetzt. Der Vektor $\vec{y}_{calc} = \vec{F}(\vec{x}, \vec{b})$ ersetzt den Term $\mathbf{K} \vec{x}_0$. Er stellt das vom Strahlungsübertragungsmodell berechnete Spektrum dar. Der Vektor \vec{x}_a ist ein festgelegter *a priori* Wert des gesuchten Parametervektors \vec{x} und $\hat{\vec{x}}_i$ ist das Ergebnis nach dem i -ten Iterationsschritt. Es ist wichtig, die Nebenbedingung R bei den einzelnen Iterationen im Term $R(\vec{x}_a - \hat{\vec{x}}_i)$ „nachzuführen“, da sie sonst im Laufe der Iterationen verschwindet und nur eine iterationsdämpfende Wirkung besitzt. Die Nebenbedingung R hat die Aufgabe, für Fälle, in denen $(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})$ nicht invertierbar ist, die Matrix so zu verändern, dass die resultierende Matrix $(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + R)$ invertierbar und das Ergebnis sinnvoll wird. Es findet eine Gewichtung des *a priori* Profils statt, die das Ergebnis mehr oder weniger stark beeinflusst, je nachdem wie gut oder schlecht die zu lösende Gleichung gestellt ist. Es gibt verschiedene Wege, die Nebenbedingung in Form des Regularisierungsterms R zu formulieren. Im Folgenden sollen zwei oft verwendete Formulierungen dargestellt werden.

Häufig wird nach Tikhonov [Tikhonov, 1963] oder Phillips [Phillips, 1962] eine Nebenbedingung der Form

$$\mathbf{L}(\vec{x} - \vec{x}_a) = \vec{r} \quad (3.21)$$

verwendet. Der Vektor \vec{r} zur Bestimmung der Nebenbedingung wird dabei meist mit $\vec{r} = \vec{0}$ gewählt. Die quadratische Norm dieser Gleichung ist

$$\|\mathbf{L}(\vec{x} - \vec{x}_a)\|^2 = (\vec{x} - \vec{x}_a)^T \mathbf{L}^T \mathbf{L} (\vec{x} - \vec{x}_a). \quad (3.22)$$

\mathbf{L} wird als Regularisierungsoperator bezeichnet. Minimierung der quadratischen Norm bezüglich \vec{x} und Einsetzen in Gl. (3.18) ergibt dann, analog zu Gl. (3.19)

$$\hat{\vec{x}} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \gamma \mathbf{L}^T \mathbf{L})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{mess} - \vec{y}_{calc}) + \vec{x}_0 = \mathbf{G}_y (\vec{y}_{mess} - \vec{y}_{calc}) + \vec{x}_0. \quad (3.23)$$

Hier ist γ der Regularisierungsparameter, der vorgibt wie stark der Einfluss der Nebenbedingung auf das Ergebnis ist. Die iterative Lösung der Retrievalgleichung nimmt dann die Form

$$\hat{\vec{x}}_{i+1} = \hat{\vec{x}}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \gamma \mathbf{L}^T \mathbf{L})^{-1} (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{mess} - \vec{y}_{calc}(\hat{\vec{x}}_i)) - \gamma \mathbf{L}^T \mathbf{L} (\vec{x}_a - \hat{\vec{x}}_i)) \quad (3.24)$$

an.

Der Regularisierungsoperator \mathbf{L} kann verschieden formuliert werden, je nachdem welcher Einfluss auf das System gewünscht wird. Die einfachste Form ist die Verwendung der Einheitsmatrix:

$$\mathbf{L}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

\mathbf{L}_0 wird als Regularisierungsoperator nullter Ordnung bezeichnet. Die Nebenbedingung $\mathbf{L}(\vec{x}_i - \vec{x}_a) = \vec{0}$ bindet damit die Lösung $\hat{\vec{x}}$ an das *a priori* Profil \vec{x}_a . Liefert also $(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})$ nur wenig Information für Elemente von $\hat{\vec{x}}$, so werden die Werte der betroffenen Elemente entsprechend stärker durch das *a priori* Profil gewichtet. Ist beispielsweise $\vec{x}_a = 0$, so wird bei fehlender Information der Parametervektor gegen Null gehen.

Sehr oft wird die Glättebedingung erster Ordnung verwendet. Die Glattheit eines Profils wird dadurch erzwungen, dass die Differenzen benachbarter Profilverpunkte minimal werden sollen. Mit

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} -1 & +1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & +1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & +1 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

wird die Lösung an die Steigung des *a priori* Profils \vec{x}_a gebunden. Für die Untersuchungen zur Ableitung von Wasserdampfprofilen wird eine Nebenbedingung angewendet, die sich am Tikhonov-Phillips-Operator 1. Ordnung (siehe Gl. (3.25)) orientiert.

Der verwendete Ansatz für die Nebenbedingung unterscheidet sich vom Tikhonov-Phillips Ansatz dadurch, dass der Regularisierungsoperator \mathbf{L} mit einer Gewichtsmatrix \mathbf{W} multipliziert wird. Der Regularisierungsterm nimmt dann die Form

$$\gamma \mathbf{W}^T \mathbf{L}^T \mathbf{L} \mathbf{W} \quad (3.26)$$

an. Durch die Verwendung von \mathbf{W} erhält man eine höhenabhängige Gewichtung der Nebenbedingung. Für \mathbf{W} wird eine Diagonalmatrix gewählt, deren Diagonalelemente entsprechend der gewünschten Höhenabhängigkeit belegt werden. Werden die Diagonalelemente von \mathbf{W} proportional zu $\frac{1}{v_{mr}(z)}$ des gesuchten Profils gewählt, so wird die Verteilung des relativen Fehlers, der die Inversion begleitet, anders gewichtet [Steck and von Clarmann, 2001]. Ausschlaggebend für die Wahl dieses Ansatzes in dieser Arbeit ist die große Dynamik im Profil der Zielgröße Wasserdampf, deren Wertebereich sich in der Troposphäre über mehrere Größenordnungen erstreckt.

Eine andere Möglichkeit für die Wahl der Nebenbedingung ist der „Optimal Estimation“-Ansatz (auch „Maximum a posteriori“-Lösung) [Rodgers, 2000]. Der Grundgedanke dieses Ansatzes ist, dass das Ergebnis nicht zu stark vom *a priori* Profil abweicht. In Gl. (3.16) wird für $P(\vec{x})$ eine normalverteilte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die das Vorwissen über den Zustand von \vec{x} beschreibt, verwendet. Diese kann mit

$$-2 \ln P(\vec{x}) = (\vec{x} - \vec{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\vec{x} - \vec{x}_a) \quad (3.27)$$

dargestellt werden. Hier ist \vec{x}_a der Parametervektor des bekannten *a priori* Wissens über den Zustand von \vec{x} und \mathbf{S}_a die zugehörige Kovarianzmatrix. Damit ergibt sich aus Gleichung (3.16) die zu lösende Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} (-2 \ln P(\vec{y} | \vec{x})) = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left((\vec{y} - \mathbf{K}\vec{x})^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y} - \mathbf{K}\vec{x}) + (\vec{x} - \vec{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\vec{x} - \vec{x}_a) \right) = 0. \quad (3.28)$$

Mit der Nebenbedingung des *a priori* Wissens ergibt sich die Lösung dieser Gleichung wie folgt:

$$\hat{\vec{x}} = \vec{x}_a + (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y} - \mathbf{K}\vec{x}_a). \quad (3.29)$$

Diese Gleichung ist äquivalent zu Gl. (3.19) wobei hier R durch \mathbf{S}_a^{-1} ersetzt wird. Aus der Ähnlichkeit der Gleichungen (3.23) und (3.29) ist es naheliegend eine Verbindung zwischen dem Regularisierungsterm $\gamma \mathbf{W}^T \mathbf{L}^T \mathbf{L} \mathbf{W}$ und der *a priori* Kovarianz \mathbf{S}_a^{-1} zu suchen. Steck und von Clarmann zeigen einen Weg, diese beiden Regularisierungsterme miteinander zu verbinden [Steck and von Clarmann, 2001]. Der Retrievalansatz nach der „Maximum a posteriori“-Lösung wird als Nebenbedingung bei der Fehlerbetrachtung für das HIRDLS-Experiment (siehe Kap. 5 und 7) verwendet.

Die Nebenbedingung der „Maximum a posteriori“-Lösung erfordert neben dem Vorwissen über den Verlauf des *a priori* Profils auch die Informationen über dessen Varianzen und Kovarianzen. Diese sind meist unbekannt oder nur mit großem Aufwand zu erhalten. Im Gegensatz dazu ist bei der Tikhonov-Phillips-Regularisierung nur die Regularisierungsstärke γ von Fall zu Fall variabel und teilweise mit Hilfe von objektiven Kriterien, wie dem L-Kurven-Kriterium nach Hansen [Hansen, 1992] zu bestimmen. Je nach Sichtweise bietet „Optimal Estimation“ den Vor- oder Nachteil, dass es bei der Inversionsrechnung immer ein Ergebnis gibt: Man erhält bei Messungen mit viel Information aus der Messung das tatsächliche Profil und bei Messungen mit geringem Informationsgehalt das *a priori* Profil!

Nähere Details zu den verwendeten Nebenbedingungen und jeweils gemachten Annahmen werden in den entsprechenden Abschnitten dieser Arbeit behandelt.

3.3 Ansätze zur Fehlerabschätzung

Wie bei jeder Messung einer Größe ist auch das Ergebnis der Inversion atmosphärischer Zustandsgrößen mit gewissen Fehlern behaftet. Der gesamte zu erwartende Fehler setzt sich aus Einzelbeiträgen unterschiedlicher Fehlerquellen zusammen. Die einzelnen Fehlerbeiträge sind:

- **Rauschfehler** $\vec{\epsilon}_n$: Der Rauschanteil der Messung, der durch die Inversion vom Spektralraum in den Parameterraum übertragen wird.
- **Parameterfehler** $\vec{\epsilon}_b$: Die Unsicherheit im Ergebnis, die durch die unzureichende Kenntnis von Parametern im Vektor \vec{b} , die in das Strahlungsübertragungsmodell einfließen und dort als bekannt angenommen werden, hervorgerufen wird.
- **Glättungsfehler** $\vec{\epsilon}_g$: Dieser Fehler berücksichtigt die Folgen der Regularisierung auf das Ergebnis.

Die Berechnung des erwarteten Gesamtfehlers erfolgt separat für jede Fehlerquelle. Ausgehend von individuellen, möglichst realistischen Annahmen, wird die Fehlerkovarianzmatrix des Ergebnisses \vec{x} , hervorgerufen durch die jeweilige Fehlerquelle, berechnet. Diese Kovarianzmatrizen werden dann summiert. Die Quadratwurzeln der Diagonalelemente der so erhaltenen Matrix geben den geschätzten Fehler in der entsprechenden Höhe wieder. Analog stellt der Vektor mit den Quadratwurzeln der Diagonalelemente der Kovarianzmatrix des Einzelfehlers die Schätzung für die jeweilige Fehlerquelle dar. Im Folgenden wird die Berechnung der Kovarianzmatrizen der einzelnen Fehlerquellen gezeigt.

3.3.1 Der Rauschfehler

Der Rauschfehler ist der offensichtlichste Fehler. Er ist leicht abzuschätzen, da zu den in der Inversionsgleichung benötigten Daten keine weiteren Informationen einfließen. Das Rauschen der Messung wird als normalverteilt angesehen.

Die Kovarianzmatrix des Rauschfehlers bestimmt man durch [Rodgers, 2000]:

$$\mathbf{S}_n = \mathbf{G}_y \mathbf{S}_y \mathbf{G}_y^T. \quad (3.30)$$

3.3.2 Der Parameterfehler

In die Inversionsrechnung fließt die Berechnung der Strahlungsübertragung mit Hilfe eines Modells ein. Neben den gesuchten Parametern im Vektor \vec{x} hängt die Strahlungsübertragungsrechnung noch von zahlreichen weiteren Parametern ab, die den Zustand der Atmosphäre, den Einfluss von Eigenschaften des Messgeräts und andere zur SÜG beitragende Größen darstellen. Diese Parameter werden im Vektor \vec{b} zusammengefasst. Sie werden in der Strahlungsübertragungsrechnung als bekannt vorausgesetzt und im Modell wie konstante Größen behandelt. In der Realität sind die Elemente des Vektors \vec{b} nicht exakt bekannt. Messungen und klimatologische Daten, die als Parameter an das Modell übergeben werden, besitzen die Unsicherheit der zugrundeliegenden Messung bzw. die natürliche Schwankungsbreite klimatologischer Daten. Diese Unsicherheit von \vec{b} wirkt sich über das Strahlungsübertragungsmodell auf die Qualität der berechneten Spektren und als weitere Folge auf die Güte des Retrievalergebnisses aus.

Fehlerbeiträge im Ergebnis, die eine ungenaue Kenntnis der im Modell berücksichtigten Eigenschaften des Messgeräts hervorrufen, werden hier nicht betrachtet. Die hier beschriebene Fehlerabschätzung zielt auf die Beiträge aus unzureichend bekannten Profilen atmosphärischer Zustandsparameter ab, die im Modell wie bekannte Größen verwendet werden.

Nach Rodgers [Rodgers, 2000] kann die Kovarianz des Parameterfehlers mit folgender Gleichung abgeschätzt werden:

$$\mathbf{S}_p = \mathbf{G}_y \mathbf{K}_b \mathbf{S}_b \mathbf{K}_b^T \mathbf{G}_y^T. \quad (3.31)$$

Hier sind $\mathbf{K}_b = \nabla_{\vec{b}} \vec{F}(\vec{x}, \vec{b})$ die Jacobimatrix des Spektrums bezogen auf den Modellparametervektor \vec{b} und $\mathbf{S}_b = E\{(\vec{b} - \bar{\vec{b}})(\vec{b} - \bar{\vec{b}})^T\}$ die Kovarianz des Modellparametervektors \vec{b} .

In Kap. 5 und 7 wird dieser Ansatz zur Abschätzung des Parameterfehlers der atmosphärischen Zustandsgrößen am Beispiel des HIRDLS-Instruments verwendet. Für den

Fall eines hochauflösenden Spektrometers, wie MIPAS, ist die Formulierung nach Gl. (3.31) schwierig umzusetzen. Die Matrizen \mathbf{K}_b und \mathbf{S}_b nehmen hier Dimensionen an, die einen erheblichen Rechenzeit- und Speicherplatzbedarf beanspruchen. Daher wird hier noch ein Ansatz vorgestellt, bei dem die Jacobimatrix \mathbf{K}_b auf einen Vektor $\Delta\vec{y}_i = \mathbf{K}_b\Delta\vec{b}_i$ reduziert wird. $\Delta\vec{y}_i$ repräsentiert die Sensitivität des Spektrums auf eine skalare Störung im Profil \vec{b}_i der Zustandsgröße i um 1σ . Der Teilvektor \vec{b}_i repräsentiert eine bestimmte Größe i , wie z.B. das Profil eines einzelnen Störgases oder der Temperatur oder andere gerätespezifische Größen, die in der Strahlungsübertragungsmodellierung als bekannt und konstant angenommen werden. Dieser Ansatz wird für die Fehlerabschätzung bei MIPAS angewandt [von Clarmann and Echle, 1998b].

3.3.3 Der Glättungsfehler

Der Glättungsfehler ist wenig offensichtlich, aber bei näherem Hinsehen einleuchtend. Er gibt den Fehler wieder, der im Retrieval durch die Regularisierung gemacht wird. Die Bindung des Ergebnisses an das *a priori* Wissen verändert das Ergebnis und hat eine glättende Wirkung.

Zur Abschätzung der erreichbaren vertikalen Auflösung eines Retrievalergebnisses wird häufig die sogenannte Auflösungsmatrix (engl.: averaging kernel matrix) \mathbf{A} herangezogen. Sie ergibt sich aus der verallgemeinerten Inversen und der Jacobimatrix einer Messung:

$$\mathbf{A} = \mathbf{G}_y \mathbf{K}. \quad (3.32)$$

Im Normalfall handelt es sich bei \mathbf{A} um eine Matrix mit Maximalwerten entlang der Hauptdiagonalen. Die Werte nehmen zu den Nebendiagonalen hin ab. Betrachtet man die Zeilen dieser Matrix, so geben diese an, wieviel die einzelnen Bereiche der Atmosphäre zum Ergebnis des Retrievals in der entsprechenden Höhe beitragen. Umgekehrt zeigen die Spalten, wie das Retrieval auf eine Störung in einer Höhe reagiert. Die Halbwertsbreite des Maximums in einer Zeile ergibt einen Schätzwert für die vertikale Auflösung an diesem Punkt [Carli et al., 1998]. Im Fall einer Inversion ohne Glättung ist die Auflösungsmatrix eine Einheitsmatrix \mathbf{I} , d.h. eine atmosphärische Struktur wird nur in der Höhe gesehen, in der sie wirklich vorhanden ist.

Mit der Auflösungsmatrix aus Gl. (3.32) kann die Kovarianz des Glättungsfehlers berechnet werden:

$$\mathbf{S}_s = (\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{S}_{x_e}(\mathbf{A} - \mathbf{I})^T. \quad (3.33)$$

Die Matrix \mathbf{S}_{x_e} stellt die Kovarianz der gesuchten Größe im Parameterraum dar. Bei atmosphärischen Anwendungen kann diese Kovarianz aus einem Ensemble von Vergleichsmessungen bestimmt werden, die den Zustand der Atmosphäre hinreichend genau wiedergeben. Naheliegend ist der Einsatz von klimatologischen Datensätzen oder von hochaufgelösten *in situ* Messungen unter ähnlichen Bedingungen.

Für theoretische Untersuchungen hat sich eine Matrix als geeignet erwiesen, bei der die Elemente von \mathbf{S}_{x_e} mit Hilfe einer Exponentialfunktion belegt werden:

$$S_{x_e,i,j} = \sigma_{x_e,i}\sigma_{x_e,j} \exp\left\{-\frac{|z_i - z_j|}{l_j}\right\}. \quad (3.34)$$

Sie gibt den Einfluss benachbarter Retrievalgitterpunkte wieder. z_i, z_j ist hier die zugehörige Höhe des i -ten bzw. j -ten Elements im Parametervektor \vec{x}_a . Die Korrelationslänge l gibt an, wie breit das Maximum in der Diagonalen der Matrix aufgeweitet wird. Sie regelt, wie stark benachbarte Schichten von der Varianz $\sigma_{x_e, i}$ beeinflusst werden.

3.3.4 Der Gesamtfehler

Der Gesamtfehler setzt sich aus allen Einzelbeiträgen zusammen. Die Summe der Kovarianzmatrizen aller Einzelfehler ergibt die Kovarianz des Gesamtfehlers:

$$\mathbf{S}_{tot} = \mathbf{S}_n + \mathbf{S}_p + \mathbf{S}_s. \quad (3.35)$$

Die Abschätzung des Gesamtfehlers für jeden Parameter x_n ist dann die Quadratwurzel des n -ten Elements der Hauptdiagonalen.

In diesem Abschnitt wurde die Strahlungsübertragung in der Erdatmosphäre und die numerische Berechnung kurz vorgestellt. Die Retrievaltheorie, die den Weg beschreibt, wie man aus den gemessenen Strahldichten auf die atmosphärischen Zustandgrößen schließen kann, wurde vorgestellt. Abschließend wurden Werkzeuge präsentiert, mit deren Hilfe die zu erwartenden Fehlerbeiträge aus unterschiedlichen Quellen abgeschätzt werden können.

Kapitel 4

Das MIPAS–Experiment

Der „Environmental Satellite“ (Envisat) umrundet in ca. 800 km mittlerer Höhe die Erde auf einer kreisförmigen Umlaufbahn. Sein Orbit weist eine Inklination von $98,55^\circ$ auf und ermöglicht dadurch eine sonnensynchrone Umlaufbahn mit einer Umlaufdauer von etwa 101 min pro Orbit. Der Satellit kreuzt den Äquator im absteigenden Knoten auf der Tagseite um 10.00 Uhr Ortszeit. Der Wiederholungszyklus eines Orbits beträgt 35 Tage.

Eines der Hauptexperimente der ESA an Bord von Envisat ist das Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung (MIPAS) [Fischer and Oelhaf, 1996]. Es arbeitet mit der Messgeometrie der Horizontsondierung, wobei die am Messinstrument auftreffende, von der Erdatmosphäre emittierte Strahlung spektral aufgelöst gemessen wird. Das aus der Messung resultierende Spektrum wird benutzt, um auf das Profil der Temperatur und die vmr-Profile mehrerer Spurengase in der Atmosphäre zu schließen. Im Folgenden soll kurz auf die Messgeometrie, die Funktionsweise des Instruments und die Verwendung ausgewählter Spektralbereiche zur Auswertung eingegangen werden.

4.1 Das MIPAS–Instrument

4.1.1 Messgeometrie

Das Instrument MIPAS misst in der so genannten Horizontsondierungsgeometrie. Das Instrument blickt dabei tangential an der Erdkugel vorbei durch die Atmosphäre. Am Instrument wird die Strahldichte gemessen, die von der Atmosphäre entlang des Strahlengangs emittiert wird. MIPAS blickt durch die Atmosphäre gegen das kalte Weltall. Mit einer Strahlungstemperatur von ca. 2,7 K kann die emittierte Strahldichte des Weltalls im Infraroten mit $I_{backgr} \approx P(2,7 K) \approx 0$ vernachlässigt werden. Das heißt, die gesamte gemessene Strahldichte wird in der Atmosphäre emittiert. Beim Durchgang durch die Atmosphäre findet der Strahlengang in der so genannten Tangentenhöhe h_t , in der er die unterste, tangential berührte Atmosphärenschicht erreicht, den erdnächsten Punkt. In Abb. 4.1 ist der Strahlengang durch die Erdatmosphäre schematisch dargestellt. Man sieht, dass aufgrund der sphärischen Anordnung der Atmosphärenschichten, die längsten Wegstücke vom Strahlengang in der Schicht im Bereich des Tangentenpunkts zurückgelegt werden. Da zudem oberhalb der erdnächsten durchstrahlten Schicht (Tangentenschicht) die Luftdichte und damit meist auch die Dichte der an dieser spektralen Position emittierenden Moleküle abnimmt, ist zu erwarten, dass der größte Teil der empfangenen Strahldichte aus

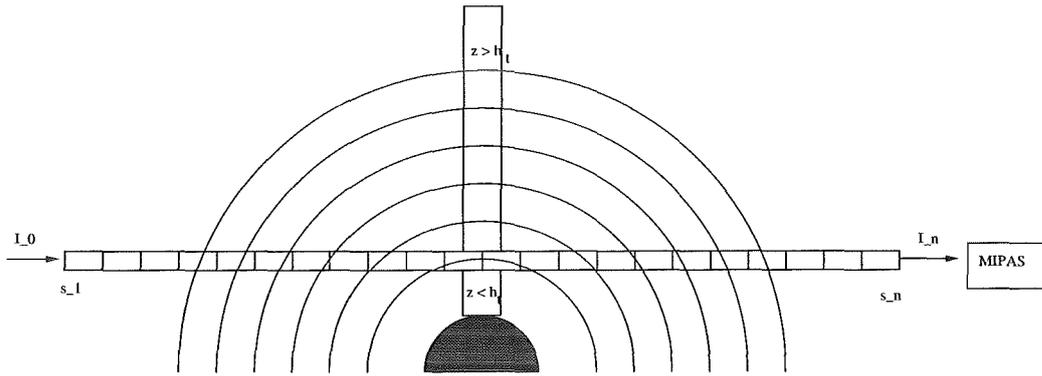


Abbildung 4.1: Schema der Einzelbeiträge der auf dem Weg durch die Atmosphäre durchstrahlten Schichten zur gesamten, am Messgerät gemessenen Strahldichte. Der infinitesimal Breite Sehstrahl von s_1 bis s_n ist in n Teilsäulen s_i unterteilt, in denen jeweils die Strahlung durch Emission und Extinktion modifiziert wird.

den Schichten nahe der Tangentialhöhe stammt. Ausnahmen bilden hier niedrige Tangentialhöhen für Messungen von Gasen, wie z.B. Ozon, deren Vertikalprofil ein ausgeprägtes Maximum über der betrachteten Tangentialhöhe aufweisen. Hier kann es vorkommen, dass ein bedeutender Teil des gemessenen Signals nicht aus der Tangenschicht, sondern aus darüberliegenden Bereichen der Atmosphäre emittiert wird.

Die Auslegung des Instruments ermöglicht eine Abdeckung des Höhenbereichs von etwa 5 bis 150 km. Um die Messungen bezüglich der Datenmengen und der horizontalen und vertikalen Abdeckung sinnvoll zu gestalten, werden unterschiedliche Messmodi verwendet, um ausgewählte Aufgabenstellungen zu erfüllen. Hier soll nur auf zwei der vielen unterschiedlichen Modi eingegangen werden, die für diese Arbeit von besonderem Interesse sind.

Der so genannte Standardmodus soll bei einer Blickrichtung entgegen der Flugbahn einen Höhenbereich von 6 bis 68 km abdecken. Es wird in 17 Tangentenstufen gemessen, die in Dreikilometerschritten von 6 bis 42 km und zusätzlich noch in 47, 52, 60 und 68 km Tangentialhöhe Spektren erfassen. Die Aufnahme eines kompletten Satzes Spektren in allen Tangentialhöhen dauert, inklusive Rückführung des Spiegels, der den Elevationswinkel festlegt, in die Ausgangsposition ca. 75 s. Geht man von einer Fluggeschwindigkeit des Satelliten von etwa 7,45 km/s aus, so erhält man im Standardmodus Messungen über alle Höhenstufen im Abstand von etwa 550 km. Der nachfolgende Orbit ist am Äquator um etwa 2700 km versetzt. Der benachbarte Orbit wird nach 3 Tagen überflogen und die Wiederholungsrate eines Orbits liegt bei 35 Tagen. Durch die Kenndaten der Flugbahn, der Tangentenstufen und des Blickfelds (engl.: field of view, FOV) wird die horizontale und vertikale Auflösung von MIPAS im Standardmodus bestimmt. Der Standardmodus soll für mehr als 80 % aller Messungen angewandt werden. In Abb. 4.2 sind die wichtigsten Kenndaten des MIPAS-Instruments bezüglich der Messgeometrie und Flugparameter anhand einer schematischen Darstellung des Instruments zusammengefasst. Die Öffnung des Instruments zur Aufnahme der Strahlung spannt ein Gesichtsfeld (FOV) auf, das am Tangentialpunkt eine Ausdehnung von ca. 3 km vertikal und 30 km horizontal besitzt. Die geringe vertikale Ausdehnung ermöglicht eine hohe vertikale Auflösung. Durch die

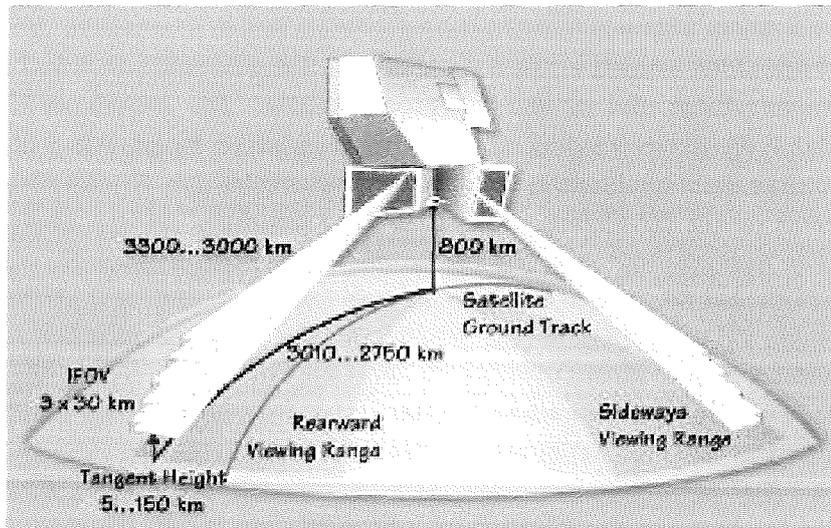


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des MIPAS-Instruments im Orbit. Dargestellt sind die wichtigsten Daten zu Flugbahn und Messgeometrie (Quelle: ESA).

große horizontale Erstreckung des FOV ist gewährleistet, dass ausreichend Strahlung auf die Detektoren auftrifft, um ein gutes Signal-zu-Rausch-Verhältnis bei der Messung zu erreichen.

Die am Instrument ankommende emittierte Strahlung der Atmosphäre kann durch zwei verschiedene trichterförmige Öffnungen am Instrument ins Innere geleitet werden. Die Öffnungen sind so positioniert, dass das Instrument während der Messung wahlweise antiparallel zur Flugbahn oder senkrecht zu dieser blicken kann.

Zusätzlich zum Standardmodus soll hier noch der Spezialmodus zur Erkundung der Tropopausenregion (im Folgenden UT/LS-Modus) vorgestellt werden. Er unterscheidet sich vor allem durch ein feineres Messgitter in der oberen Troposphäre und der unteren Stratosphäre. Es wird in 14 Tangentenstufen gemessen. Von 5 bis 20 km in 1,5 km-Schritten und zusätzlich noch in 25, 30 und 40 km Tangentenhöhe. Für die Abtastung eines kompletten Profils im UT/LS-Modus benötigt MIPAS etwa 65 s. Entlang der Flugbahn erhält man Profile im Abstand von etwa 410 km.

MIPAS besitzt auch die Möglichkeit, Messungen durchzuführen, bei denen das Instrument senkrecht zur Flugrichtung zur Seite blickt. Mit dieser Option können für lokal begrenzte Ereignisse, wie z.B. Vulkanausbrüche oder Ozonloch-Episoden, zusätzliche Messungen gemacht werden, um deren zeitlichen Verlauf besser verfolgen zu können.

4.1.2 Messprinzip

MIPAS ist ein Michelson Interferometer. Die am Instrument auftreffende Strahlung wird nicht direkt auf einen Detektor geleitet, sondern der ankommende Strahl wird in zwei Strahlen aufgeteilt und zur Interferenz gebracht. Hierbei wird die Möglichkeit genutzt, aus dem Interferenzmuster (Interferogramm) der überlagerten Lichtstrahlen auf das Spektrum zu schließen. Im Folgenden soll kurz die Funktionsweise eines Michelson Interferometers anhand von Abb. 4.3 dargestellt werden.

Die am Instrument ankommende Strahlung wird an einem Strahlteiler geteilt. Die zwei getrennten Teilstrahlen werden an zwei beweglichen Spiegeln reflektiert und anschließend wieder zusammengeführt und zu den Detektoren geleitet. Die getrennten Teilstrahlen 1 und 2 legen dabei die unterschiedlichen und zeitlich variablen Wegstrecken $2l_1$ und $2l_2$ auf dem Weg zwischen dem Strahlteiler, dem Spiegel und wieder zum Strahlteiler zurück. Am Detektor kommt es zur Interferenz der beiden Einzelstrahlen. Ist der Abstand zwischen den beweglichen Spiegeln und dem Strahlteiler für beide Spiegel gleich ($l_1 = l_2$) so ist der Lauflängenunterschied der beiden Strahlen $\Delta l = 0$. Diese Position wird als Nulldurchgang bezeichnet (engl.: Zero Path Difference (ZPD)). Ist die Differenz zwischen l_1 und l_2 maximal, so bezeichnet man diese Differenz als *maximale Weglänge* (engl.: Maximum Path Difference (MPD)). Die kontinuierliche Variation der unterschiedlichen Lauflänge der geteilten Strahlen von ZPD bis MPD erzeugt Interferenzerscheinungen, die am Detektor in Form von Intensitätsschwankungen registriert werden. Die gemessenen Intensitätsvariationen in Abhängigkeit von der Wegdifferenz Δl stellen ein Interferogramm dar.

Das gemessene Interferogramm wird anschließend mit Hilfe einer Fouriertransformation in den Wellenzahlraum überführt. Für ein symmetrisches Interferogramm ist das Ergebnis ein Spektrum im realen Zahlenraum. Treten phasenverschobene Strahlungsanteile auf, so ist das Ergebnis dieser Transformation ein Spektrum im komplexen Zahlenraum.

Die erreichbare Auflösung eines Fouriertransformationsspektrometers (FTS) wird durch MPD bestimmt. Für ein ideales Michelson Spektrometer ist die erreichbare Auflösung bestimmt durch

$$\Delta\nu_{ideal} = \frac{1}{2 \text{ MPD}} . \quad (4.1)$$

Sie gibt den Abstand zwischen dem Zentrum der *sinc*-Funktion und dem ersten Nulldurchgang an. Für das satellitengetragene MIPAS ergibt sich also mit $\text{MPD} = 20 \text{ cm}$ eine ideale Auflösung von $\Delta\nu_{ideal} = \frac{1}{2 \cdot 20 \text{ cm}} = 0.025 \text{ cm}^{-1}$. Das aufgenommene Interferogramm wird durch die Weglänge beschränkt. Ein Interferogramm kann theoretisch bis ins Unendliche fortgesetzt werden. Dadurch würde man dementsprechend eine perfekte Auflösung des Spektrums erhalten, die einer kontinuierlichen Messung entspricht. Die Beschränkung des Interferogramms auf den Bereich $[-\text{MPD}; \text{MPD}]$ gleicht einer Multiplikation des unbegrenzten Interferogramms mit einer Rechtecksfunktion, die außerhalb der Grenzen den Wert Null und innerhalb der Grenzen des Interferogramms den Wert 1 annimmt. Im Spektrum resultiert diese Beschränkung im Interferogramm in einer Faltung des Spektrums mit der *sinc*-Funktion, die die Spektrallinien aufweitet und unerwünschte Nebenmaxima im Spektrum erzeugt. Um die ausgeprägten Nebenmaxima der *sinc*-Funktion im Spektrum zu unterdrücken kann eine Apodisierung angewendet werden. Bei MIPAS Spektren wird die „starke“ Apodisierung nach Norton und Beer [Norton and Beer, 1976] verwendet werden, um den Einfluss des begrenzten Interferogramms auf das Spektrum gering zu halten. Durch die Apodisierung wird die tatsächlich erreichbare Auflösung etwas herabgesetzt.

Im Fall von atmosphärischen Sondierungen, wie sie mit MIPAS durchgeführt werden, hängt das gemessene Interferogramm und dadurch auch das resultierende Spektrum neben der am Gerät auftreffenden Strahlung auch von den Eigenschaften des Messgeräts ab. Das Messgerät liefert aufgrund seiner Eigentemperatur einen Beitrag zur gemessenen Strahlendichte. Diese Hintergrundstrahlung wird durch die Kalibrierung mit Hilfe von ungestörten Messungen gegen das kalte Weltall (so genannte Deep-Space-Messungen) bestimmt und

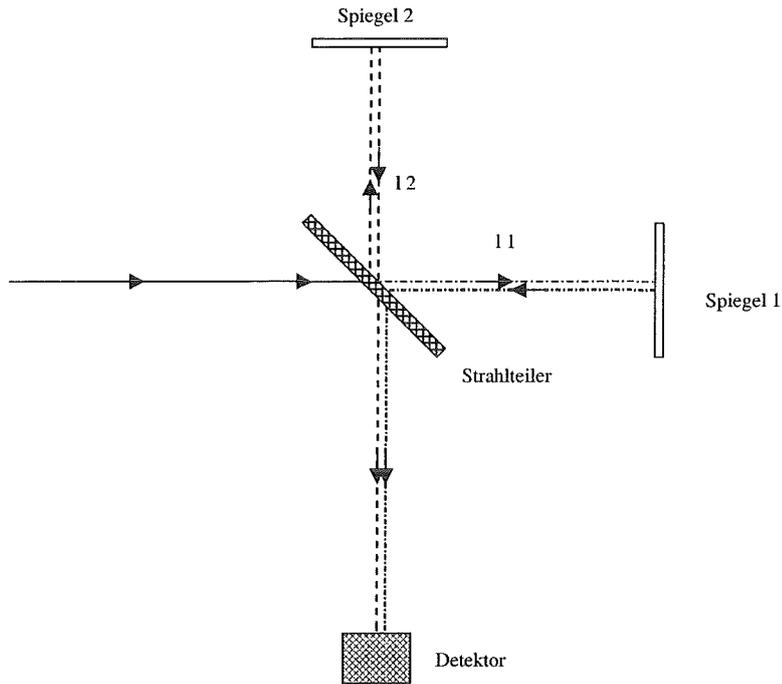


Abbildung 4.3: Schema eines Michelson Interferometers

aus den gemessenen Spektren herausgerechnet, so dass nur noch atmosphärische Signale im Realteil des Spektrums enthalten sind. Zur Ableitung der atmosphärischen Zustandsgrößen wird nur der Realteil des Spektrums verwendet. Im weiteren Verlauf wird mit Spektrum immer der Realteil des Spektrums bezeichnet. Optische Eigenschaften des Instruments wie z.B. das FOV und dessen Projektion auf den Detektor oder unvollständige Überlagerung der Teilstrahlen sorgen zusätzlich zur Apodisierung für eine Verbreiterung der Linienform im Spektrum. Die charakteristische Funktion, um diese Variation der Linienform zu beschreiben, wird als Instrumentenfunktion (engl.: instrumental line shape, ILS) bezeichnet [Hase et al., 1999].

MIPAS besitzt 8 Detektoren mit unterschiedlichen spektralen Sensitivitätsbereichen, die die einfallende Strahlung im Spektralbereich zwischen 685 und 2410 cm^{-1} erfassen. Die aus den Interferogrammen der Detektoren berechneten Spektren werden in fünf Kanälen zusammengefasst [Endemann et al., 1993], [Endemann, 1999], [Lachance, 1999]. In Tab. 4.1 sind die Kanäle und ihre spektralen Grenzen aufgelistet. Die spektrale Verteilung des nicht apodisierten Rauschens ist in Abb. 4.4 dargestellt.

Kanal	Spektralbereich
A	$685 - 970 \text{ cm}^{-1}$
AB	$1020 - 1170 \text{ cm}^{-1}$
B	$1215 - 1500 \text{ cm}^{-1}$
C	$1570 - 1750 \text{ cm}^{-1}$
D	$1820 - 2410 \text{ cm}^{-1}$

Tabelle 4.1: Spektrale Grenzen der einzelnen MIPAS-Kanäle

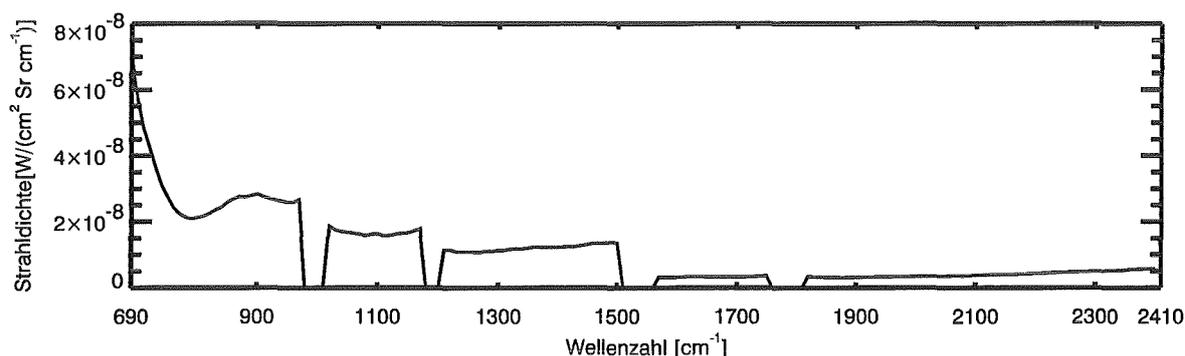


Abbildung 4.4: Verlauf des angenommenen nicht apodisierten Rauschens in den Spektralkanälen von MIPAS

4.2 Die Verwendung ausgewählter Spektralintervalle

Die hochaufgelösten Spektren stellen eine enorme Datenmenge dar, die einer Auswertung zur Verfügung stehen. Das gemessene Spektrum einer Tangentenstufe besteht aus über 50.000 Werten. Für 17 Tangentenhöhen erhält man folglich über 850.000 Werte. Die Auswertung dieser Datenmenge ist auch mit leistungsfähigsten Rechnern nur mit einem erheblichen Zeitaufwand zu bewältigen. Es ist daher ratsam, die erforderliche Datenmenge zu reduzieren, um ein Retrieval mit angemessenem Rechen- und Zeitaufwand zu ermöglichen.

Die Beiträge der emittierenden Gase sind im gemessenen Spektrum unterschiedlich verteilt. Die meisten Gase besitzen Spektrallinien, die über weite Bereiche des gemessenen Spektrums verteilt sind. Jedoch sind oft nicht alle dieser Signaturen geeignet, um sie zum Retrieval des betreffenden Gases zu verwenden. Liegt eine schwache Linie des gesuchten Gases in der Flanke oder der nahen Umgebung von starken Emissionslinien anderer Gase, so kann diese von den anderen Linien nicht deutlich separiert werden. Die spektrale Information dieser Linie kann nicht genutzt werden. Eine isolierte oder deutlich von anderen Signaturen separierbare Linie kann nur bedingt zur Auswertung geeignet sein, wenn sie aufgrund ihrer spektralen Eigenschaften nur eine geringe Sensitivität gegenüber Variationen der gesuchten Größe in der Atmosphäre zeigt.

Ein möglicher Weg, um die Anzahl der berücksichtigten spektralen Stützstellen im Retrieval zu reduzieren, ist die Verwendung von ausgewählten Spektralintervallen, die eine oder mehrere Emissionslinien des gesuchten Gases beinhalten und die ausreichend sensitiv auf die Größe reagieren. Diese Auswertefenster im Spektrum werden auch als „Microwindows“ bezeichnet [von Clarmann and Echle, 1997]. Die Größe eines solchen Auswertefensters wird durch zwei wichtige Faktoren bestimmt. Je größer ein Auswertefenster ist, umso mehr spektrale Information liefert es über die gesuchten Parameter und umso genauer wird das Retrieval der Größe. Mit der Größe eines solchen Spektralintervalls steigt andererseits wiederum der Einfluß durch spektrale Signaturen anderer Gase. Die unbekannte Variabilität dieser Störgase verschlechtert das Ergebnis. Ein Auswertefenster muss also groß genug sein, um möglichst viel Information über die gesuchten Parameter zu liefern und gleichzeitig sollte es klein genug gewählt werden, um die störenden Signale anderer Gase und Parameter minimal zu halten.

Die Auswahl solcher Auswertefenster kann individuell durch den Wissenschaftler geschehen. Dieses Verfahren setzt jedoch Erfahrung im Umgang mit Spektren und die Kenntnis der in Frage kommenden Bereiche im Spektrum voraus. Es ist zeitaufwendig und daher nur für Experimente sinnvoll, deren Daten für einzelne, wenige Messungen erfasst werden. Für ein Experiment wie MIPAS auf Envisat, das vertikale Abtastungen der Atmosphäre bei unterschiedlichen Bedingungen durchführt und zahlreiche verschiedene Parameterprofile liefern soll, ist eine solche Auswahl sehr aufwendig. Die verwendeten Auswertefenster müssen jeweils den aktuellen Messbedingungen angepasst werden.

Mit dem Ziel einer automatisierten Auswahl geeigneter Auswertefenster für das Retrieval atmosphärischer Profile haben von Clarmann und Echle einen Algorithmus entwickelt, der anhand von objektiven Kriterien Spektralintervalle festlegt [von Clarmann and Echle, 1998b].

Die Auswahl der Auswertefenster findet getrennt für jede Tangentenhöhe statt. Für die Auswahl eines Auswertefensters in einer bestimmten Messstufe werden der abgeschätzte Rauschfehler, der Parameterfehler und, falls bekannt, der Modellfehler berücksichtigt. Der Glättungsfehler, der vor allem das Ergebnis der Regularisierung ist, wird nicht berücksichtigt, da man annimmt, dass die Auswahl der Auswertefenster nicht von diesem abhängt. Für eine einzelne Tangentenhöhe ist keine Regularisierung erforderlich. Dann nimmt die Fehlerkovarianz des Rauschfehlers folgende Form an:

$$\mathbf{S}_x = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})^{-1}. \quad (4.2)$$

Die Kovarianz der Messung \mathbf{S}_y^{-1} wird im Spektralraum berechnet. Die Elemente der Matrix werden unter Verwendung des apodisierten Apparateprofils (engl.: apodised instrumental line shape, AILS) und der Größe des nicht apodisierten Rauschens der Messung (engl.: noise-equivalent spectral radiance, NESR) berechnet:

$$s_{i,j} = NESR^2 \sum_{k=1}^m \Delta\nu^2 [\text{AILS}_k \times \text{AILS}_{k-(|i-j|)}]. \quad (4.3)$$

Die Elemente werden unter Verwendung aller m im betrachteten Spektralbereich verfügbaren spektralen Stützstellen berechnet. Für die Instrumentenfunktion AILS wird die starke Apodisierfunktion nach Norton und Beer [Norton and Beer, 1976] eingesetzt. Der Einfluss von Parameterfehlern auf das Ergebnis wird mit Gl. (3.31) abgeschätzt.

Die resultierende Unsicherheit aus allen einfließenden Fehlergrößen im Ergebnis der gesuchten Größe x_i wird abgeschätzt mit

$$\Delta x_i = \left[\sigma_i^2 + \left(\sum_{l=1}^{l_{max}} \Delta x_{i,l} \right)^2 + \sum_{j=1}^{j_{max}} (\Delta x_{i,l})^2 \right]^{1/2}, \quad (4.4)$$

wobei σ_i^2 das i -te Diagonalelement der Matrix \mathbf{S}_x ist. l_{max} ist die Anzahl der berücksichtigten korrelierten Fehlergrößen, wie z.B. Modellfehler. j_{max} ist die Gesamtzahl der unkorrelierten Parameterfehler, wie Unsicherheiten bei Temperatur, Volumenmischungsverhältnissen der Störgase und bei der Blickrichtungsbestimmung des Instruments. Die Eigenschaften der korrelierten Fehlergrößen werden durch lineare Addition berücksichtigt, die Eigenschaften der unkorrelierten Fehlerbeiträge durch quadratische Addition. Die

Größe Δx_i stellt ein objektives Kriterium dar, um die Position und die Breite eines Auswertefensters im Spektrum zu bestimmen [von Clarmann and Echle, 1997]. Die Breite eines Auswertefensters wird so festgelegt, dass das Fenster einerseits groß genug ist, um den Rauschfehler klein zu halten und andererseits klein genug, um den Fehler durch unbekannte Störgrößen minimal zu halten.

Mit Hilfe dieses Auswahlverfahrens werden geeignete Auswertefenster im gesamten Spektrum und für alle Tangentenhöhen ausgewählt. Aus der gesamten Anzahl dieser objektiv und unabhängig voneinander ausgewählten Auswertefenster werden mit Hilfe eines Optimierungsalgorithmus dann für jede Tangentenhöhe diejenigen Auswertefenster zusammengefasst, die im Ergebnis den geringsten Gesamtfehler ergeben. Hierbei werden die Auswertefenster in allen Tangentenhöhen so kombiniert, dass höhenunabhängige Haupt-Auswertefenster entstehen. Für eine wählbare maximal zulässige Größe der Haupt-Auswertefenster werden die zuvor gewählten Auswertefenster höhenunabhängig zusammengefasst. Die in diesen Haupt-Auswertefenstern enthaltenen Auswertefenster der einzelnen Tangentenhöhen werden als Teil-Auswertefenster (Sub-Microwindows) bezeichnet. Die Belegung der Haupt-Auswertefenster ist höhenabhängig und richtet sich nach den optimalen Auswertefenstern in den jeweiligen Tangentenhöhen, die sich durch verschiedene Faktoren, wie z.B. interferierende Gase, Sättigung, Linienintensität o.ä., in den verschiedenen Höhen unterscheiden können. Durch den Einsatz der Haupt-Auswertefenster soll die Anzahl der auszuwertenden Auswertefenster so gering wie möglich gehalten werden. Die Verteilung der so ausgewählten Auswertefenster in den Spektralkanälen und in den Tangentenhöhen kann in einer Belegungs- oder Okkupationsmatrix für unterschiedliche Zielgrößen und Retrievalsznarien festgehalten werden [von Clarmann and Echle, 1998a].

4.3 Auswertung der MIPAS-Spektren mit dem Retrievalprozessor des IMK

Am IMK ist eine wissenschaftliche Auswertung der MIPAS-Spektren vorgesehen, bei der eine Vielzahl weiterer atmosphärischer Zustandsgrößen zusätzlich zu den Hauptgasen abgeleitet werden sollen. Die Anforderungen der vom IMK verfolgten wissenschaftlichen Fragestellungen erforderten die Entwicklung eines eigenständigen Retrievalprozessors. Neben der Flexibilität bezüglich unterschiedlicher wissenschaftlicher Problemstellungen wurde bei der Entwicklung auch darauf geachtet, dass die in Kap. 3 dargestellten Retrievalgleichungen in unterschiedlichen Varianten eingesetzt werden können. Die Anwendung sollte nicht auf ein einziges Instrument begrenzt sein, sondern auch die Auswertung anderer Messprinzipien und Messgeometrien, wie z.B. Okkultationsmessungen gegen die Sonne oder Nadir-Sondierungen im infraroten Spektralbereich ermöglichen.

Den Kern dieses Prozessors bilden der Strahlungsübertragungsalgorithmus KOPRA [Stiller, 2000] und der Inversionsalgorithmus „INVERS“ [Grabowski, 2001]. Beide Programmteile werden über ein Kontrollprogramm, „RCP“, gesteuert. Eingebettet ist dieser Retrievalprozessor in ein komplexes Prozessorkonzept, das den Weg von den gemessenen Spektren über die Definition des gewünschten Retrievalszenarios mit den dazu erforderlichen Daten bis hin zur Fehleranalyse, Visualisierung und Speicherung der Ergebnisse begleitet und einen operationellen Betrieb ermöglicht [von Clarmann et al., 2001]. In Abb. 4.5 ist das Konzept des IMK-Prozessors dargestellt. Für die simulierten Retrievaldurchläufe,

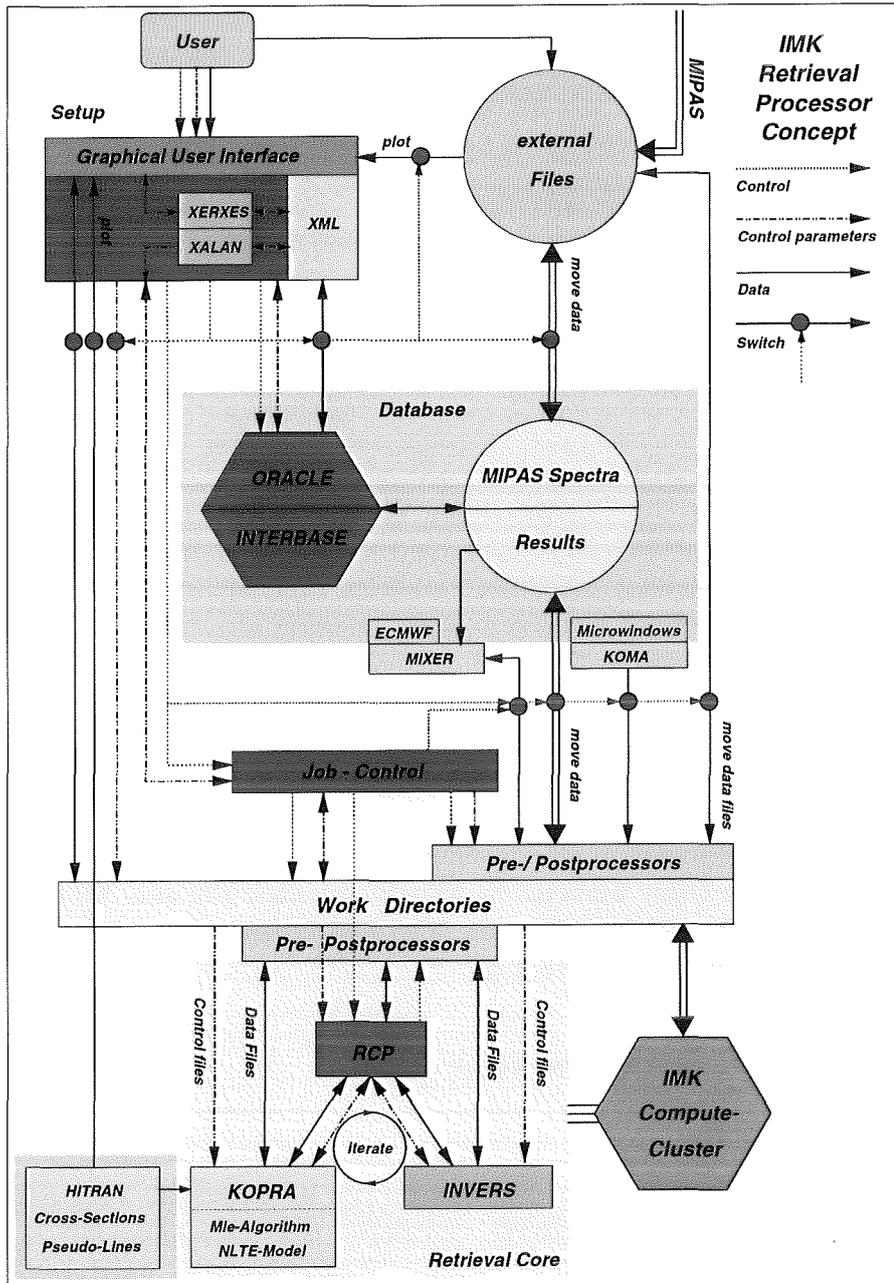


Abbildung 4.5: Konzept des IMK-Retrievalprozessors (Quelle: [Grabowski, 2001])

die für die Fallstudien in Kap. 9 gemacht werden, wird der IMK-Retrievalalgorithmus „RCP“ benutzt.

Kapitel 5

Das HIRDLS–Experiment

Gemeinsam von britischen und amerikanischen Wissenschaftlern wurde der „High Resolution Dynamic Limb Sounder“ (HIRDLS) geplant und entwickelt [Gille and Barnett, 1992]. Dieses Instrument besitzt zahlreiche Parallelen zum satellitengetragenen MIPAS–Experiment, die einen Vergleich nahelegen. Unter anderem messen beide Geräte mit der Horizontsondierung und beide Instrumente nutzen die Emissionen von Spurengasen im infraroten Spektralbereich. HIRDLS wird auf dem NASA–Satelliten „EOS–Aura“ in einer sonnensynchronen Umlaufbahn die Erdatmosphäre erkunden. „EOS–Aura“ ist Bestandteil einer Serie von unterschiedlich bestückten Satelliten der EOS–Reihe, die die Erde wissenschaftlich beobachten und untersuchen sollen (EOS, engl.: Earth Observing Satellites). „EOS–Aura“ wird wie Envisat in einer sonnensynchronen Umlaufbahn in etwa 705 km Höhe fliegen. Für einen Orbit benötigt der Satellit ungefähr 100 min. Im aufsteigenden Knoten soll die Flugbahn den Äquator um 13.45 Uhr Ortszeit kreuzen. Der Wiederholungszyklus für einen Orbit beträgt 16 Tage.

5.1 Das HIRDLS–Instrument

5.1.1 Messgeometrie

HIRDLS arbeitet, wie MIPAS, nach dem Prinzip der Horizontsondierung und misst in der Atmosphäre die entlang des Sehstrahls emittierte Infrarotstrahlung mit 21 Spektralkanälen. Das Radiometer HIRDLS ist so ausgelegt, dass es die Ableitung von Vertikalprofilen der Temperatur, mehrerer Spurengase und von Aerosol–Parametern von der oberen Troposphäre bis in die Mesosphäre ermöglicht.

Wie auch das MIPAS–Instrument zeigt die Blickrichtung des Instruments entgegen der Flugrichtung nach hinten. Anders als bei MIPAS ermöglicht ein 2–Achsen–Spiegel die vertikale und horizontale Abtastung der Atmosphäre. Der Azimutwinkel kann um über 60° – zwischen 21° auf der einen Seite (in Flugrichtung links) und 43° auf der anderen Seite der Flugbahn (in Flugrichtung rechts) – variiert werden. Der vertikale Abtastbereich erstreckt sich über einen Winkel von 3° und deckt dabei einen Höhenbereich zwischen 8 und 80 km ab. Mit einer kontinuierlichen Spiegelbewegung von $0,3^\circ/\text{s}$ wird die Atmosphäre innerhalb von 10 s vertikal abgetastet [Gille and Barnett, 1992]. Die Aufnahme der Strahldichten wird so diskretisiert, dass der Abstand einzelner Tangentenpunkte ca. 0,2 km beträgt. Das vertikale Gesichtsfeld (FOV) des Sehstrahls beträgt am Tangentenpunkt etwa 1 km.

Trotz der feinen Diskretisierung des Messgitters ergibt sich, durch das FOV, eine große Überlappung. Die vertikale Auflösung die das Abtastgitters ermöglicht, wird durch das FOV etwas herabgesetzt.

Im nominellen Beobachtungsmodus von HIRDLS wird ein Abtastmuster verwendet, das den gesamten Azimutbereich abdeckt. Hierzu wird nach jeder Vertikalabtastung der Azimuth so variiert, dass der Tangentenpunkt des neuen Profils ca. 5 Längengrade (ca. 500 km in Äquatornähe) quer zur Flugrichtung versetzt ist. Dann wird die nächste Vertikalabtastung durchgeführt. Dieser Vorgang wird sechs mal durchgeführt, wobei der gesamte LOS-Azimuth von -21° bis $+43^\circ$ abgetastet wird. Für einen kompletten Durchlauf dieses Abtastmusters werden 66 s benötigt. In dieser Zeit legt das Instrument eine Strecke zurück, die etwa 500 km (ca. 5 Breitengrade) entlang der Flugrichtung entspricht. Daraus ergibt sich die Verteilung der Tangentenpunkte, die ein Gitter mit jeweils etwa 500 km Gitterpunktsabstand aufspannt.

Zusätzlich zu dem oben beschriebenen Standard-Beobachtungsmodus sind noch weitere spezielle Messszenarien vorgesehen, die besondere Aufgabenstellungen lösen sollen: Im „Fine Horizontal Spacing Mode“ werden Profile mit einer deutlich höheren horizontalen Auflösung abgetastet. Bei mittlerer Auflösung werden die Messungen auf einem $2.5^\circ \times 2.0^\circ$ -Gitter (250 km \times 200 km) aufgenommen. Im hochauflösenden Messbetrieb liegen die Profile sogar auf einem $1^\circ \times 1^\circ$ -Gitter (100 km \times 100 km) vor. Hierbei ist allerdings keine komplette Abdeckung durch aufeinanderfolgende Orbits möglich. Beim „Schwerewellen-Modus“ und beim „STE-Modus“ wird, ähnlich wie bei MIPAS, in den betreffenden Höhenstufen mit einer deutlich feineren vertikalen Abstufung gemessen, um Messungen mit einer höchstmöglichen Vertikalauflösung zu erhalten.

5.1.2 Messprinzip

Der grundlegende Unterschied zum hochauflösenden Spektrometer MIPAS ist das zugrundeliegende Prinzip eines Radiometers. Die am Gerät auftreffende Strahlung wird durch ein Teleskop und zwei Filtersysteme zur Brennebene mit den Detektoren geführt. Die spektrale Antwort der Detektoren wird durch die beiden Filtersysteme, die die Spektralkanäle des Instruments festlegen, bestimmt. Diese sollen die Strahlung so einschränken, dass keine unerwünschten Beiträge aus anderen Spektralbereichen und aus Bereichen, die außerhalb der Sichtlinie liegen, die gemessene Strahldichte verändern. Die Kalibration der Detektoren erfolgt durch regelmäßige Messungen gegen das kalte Weltall und einen internen Schwarzkörper mit einer bekannten Temperatur.

HIRDLS misst für fest vorgegebene Kanäle Strahldichten, die über die jeweils festgelegten Spektralbereiche integriert werden. Die Kanäle können keine feinen spektralen Strukturen wie z.B. einzelne Linien auflösen. Sie besitzen jeweils eine Ausdehnung zwischen 15 und 120 cm^{-1} , je nach Zielgröße des Kanals und verwendetem Spektralbereich. Für jeden Kanal erhält man einen Strahldichtewert pro Tangentenhöhe. Aus diesem Messwert schließt man auf die, dem jeweiligen Kanal entsprechende, Zustandsgröße in dieser Höhe.

Die Anforderungen, die sich aus den erwarteten Ergebnissen ergeben, erfordern eine hohe Genauigkeit in der LOS-Bestimmung von weniger als 1 Bogensekunde Unsicherheit und ein niedriges Detektorrauschen mit wenigen $10^{-4} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ sr})$. Näheres zum Instrument findet man z.B. in [Gille and Barnett, 1996].

5.1.3 Spektralkanäle

HIRDLS misst in 21 festen Kanälen, die den infraroten Wellenzahlbereich von ca. 560 cm^{-1} bis ca. 1630 cm^{-1} ($6 \mu\text{m}$ bis $18 \mu\text{m}$) abdecken. Die Positionen der einzelnen Kanäle im Spektrum ergeben sich aus der Anforderung, Informationen über bestimmte atmosphärische Parameter abzuleiten. Für die Ableitung des Profils eines bestimmten Parameters (z.B. Spurengas) ist mindestens ein Kanal notwendig. Ähnlich wie bei der beschriebenen Auswahl von Auswertefenstern, wie sie für MIPAS angewendet wird, ist ein Kanal breit genug gewählt, um maximale spektrale Information über die gesuchte Größe zu liefern und gleichzeitig ist er schmal genug, um den störenden Einfluss spektraler Beiträge anderer Gase so gering wie möglich zu halten [Edwards et al., 1995]. Anders als bei einem Spektrometer misst ein Radiometer wie HIRDLS nur integrierte Strahldichten in dem jeweiligen Kanal. Es steht also für jeden Kanal nur ein Messwert pro Tangentenhöhe zur Verfügung. Die Position des Kanals ist so gewählt, dass der Strahldichtewert zum größten Teil vom gesuchten Parameter und von bekannten Störgrößen (z.B.: CO_2 , T, Druck, etc.) abhängt.

In den Abbildungen 5.1, 5.2 und 5.3 sind die Positionen der HIRDLS-Kanäle im Infrarot-Spektrum dargestellt. Gleichzeitig sind hier noch die Signaturen der wichtigsten Gase für eine simulierte Messung in einer Tangentenhöhe von 25 km am 21. März, für 40° N eingezeichnet [Edwards et al., 1995].

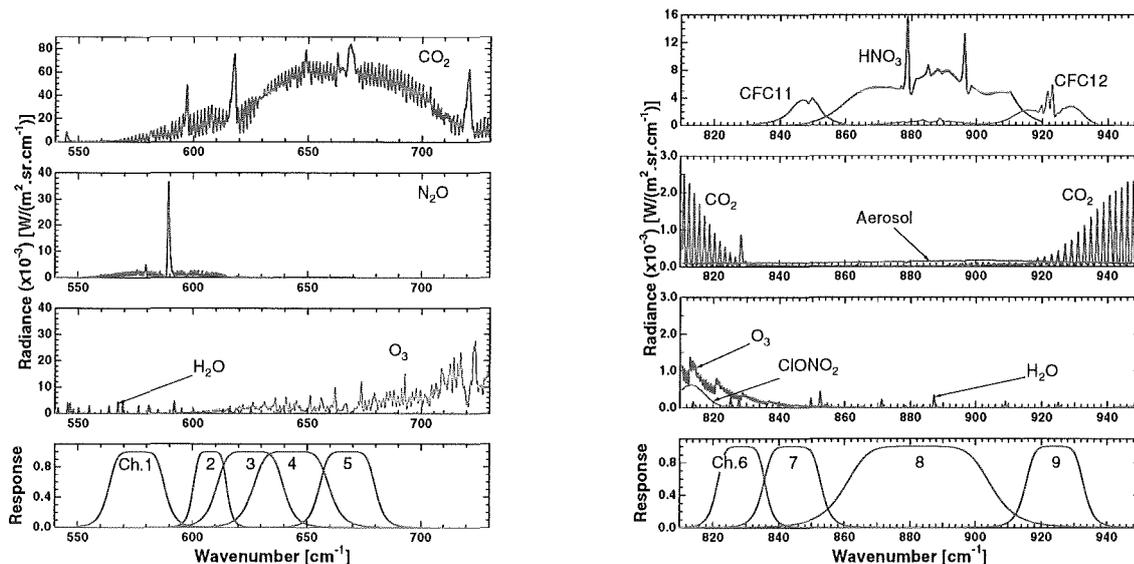


Abbildung 5.1: Spektren der am stärksten beitragenden Gase für die HIRDLS Kanäle 1 – 5 und 6 – 9. Die Spektren wurden für eine Horizontsondierungsgeometrie mit einer Tangentenhöhe von 25 km berechnet. Als Eingangsprofil wurde ein gemittelttes Profil aus mittleren Breiten (40° N) am 21. März angenommen. Das unterste Bild zeigt die idealisierten Sensitivitätsfunktionen der Kanäle. (Quelle: [Edwards et al., 1995])

Für Gase mit großen Mischungsverhältnissen und einer größeren Zahl an verwertbaren Banden, wie z.B. Ozon, Wasserdampf oder Kohlendioxid, wurden mehrerer Kanäle ausgewählt. Die Maxima der Gewichtsfunktionen ($\frac{\partial r(z)}{\partial z}$) für ein Gas liegen für unterschiedliche

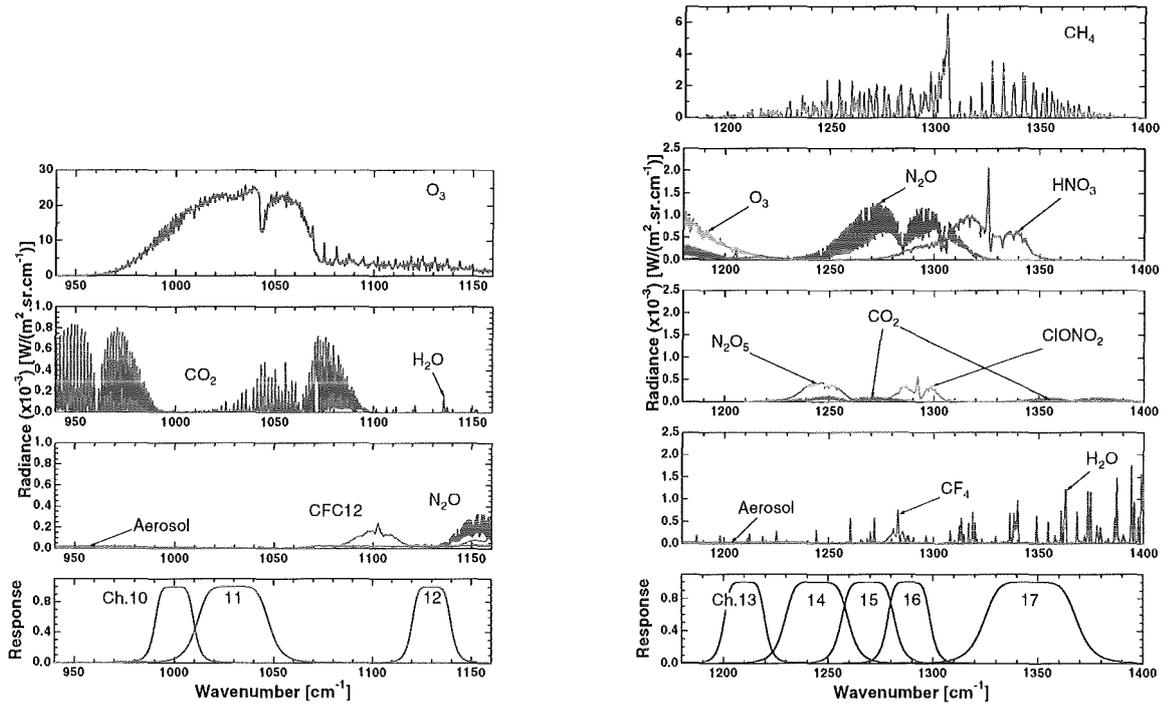


Abbildung 5.2: Wie Abb. 5.1 aber für die Kanäle 10 – 12 und 13 – 17. (Quelle: [Edwards et al., 1995])

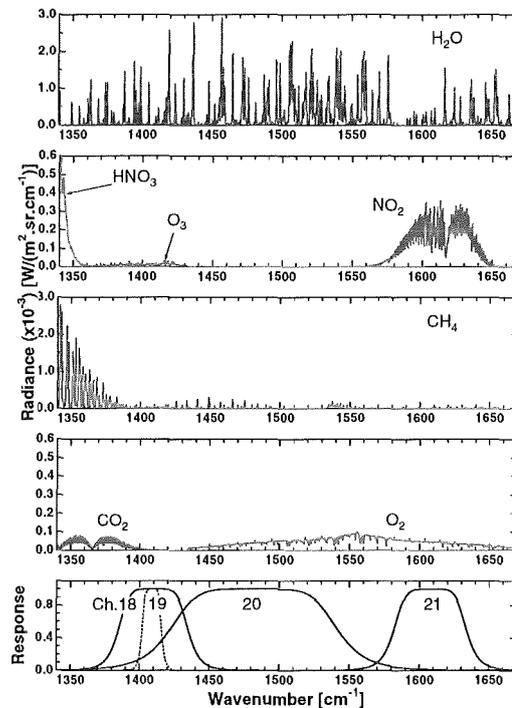


Abbildung 5.3: Wie Abb. 5.1 aber für die Kanäle 18 – 21. (Quelle: [Edwards et al., 1995])

Spektralbereiche in verschiedenen Höhen z . Durch geschickte Wahl der spektralen Position der Kanäle kann diese Eigenschaft genutzt werden, um für die gesuchten Parameter eine hohe Ausbeute an Information über große Höhenbereiche zu erlangen.

Der Kohlendioxidgehalt der Luft ist durch Messungen am Boden sehr genau bestimmbar. Die vertikale Durchmischung der Atmosphäre sorgt für nahezu konstante CO_2 -Mischungsverhältnisse bis in Höhen von 80 km. Auch darüber ist der Profilverlauf einigermaßen gut bekannt und die Teilsäule trägt kaum zum CO_2 -Gesamtgehalt bei. Die Variation der CO_2 -Signaturen hängt also nur von Druck- und Temperaturvariationen ab. Diese Tatsache wird bei den Kanälen mit CO_2 -Signaturen benutzt, um aus den Strahldichten Temperatur- und Druckprofile zu gewinnen.

Die Bestimmung von Wasserdampfprofilen geschieht mit Hilfe der Kanäle 18 und 20. Die Ableitung des troposphärischen Wasserdampfs soll mit Kanal 18 durchgeführt werden, während Kanal 20 eine höhere Sensitivität in der Stratosphäre aufweist. In Kapitel 7 wird näher auf die Auswertung der Wasserdampfkanäle eingegangen.

Informationen und Profile, die aus der Auswertung von Kanälen mit „starken“ Gasen (H_2O , O_3 , N_2O , CH_4 , etc.) gewonnen werden, werden als Hintergrundinformation für die Ableitung von Gasen mit schwachen Signaturen verwendet [Edwards et al., 1995].

Die Kanäle für FCKW-11, FCKW-12 und HNO_3 (Kanäle 7, 8 und 9) liegen im Fensterbereich bei $820 - 940 \text{ cm}^{-1}$. Diese Banden treten sehr deutlich hervor und jeder Kanal erfasst die entsprechende Emissionsbande. Der Einfluss interferierender Gase ist hier gering.

In einigen der ausgewählten Spektralkanäle liegen die Signaturen verschiedener Gase sehr dicht beieinander. Hier ist es schwierig, einzelne Kanäle auszuwählen, die zur Auswertung eines einzelnen Gases geeignet sind. Die einzelnen Kanäle wurden so gewählt, dass sie zwar die maximale Information für eine bestimmte Größe liefern, die spektralen Signaturen verschiedener Störgase jedoch zwangsläufig noch stark zur gemessenen Strahldichte beitragen. Hier wird die Auswertung mit dem Ansatz eines simultanen Retrievals aller Spurengase unter Verwendung aller betroffenen Kanäle durchgeführt. Die Vertikalverteilungen der Gase N_2O_5 , N_2O , ClONO_2 und CH_4 sollen mit Hilfe der Kanäle 14, 15, 16 und 17 gleichzeitig abgeleitet werden.

Spektralbereiche, die nur eine geringe Absorption durch Gase aufweisen, werden verwendet um die Aerosol-Extinktion zu bestimmen. Die HIRDLS-Kanäle 1, 6, 13 und 19 wurden zu dem Zweck ausgewählt, die breitbandige Aerosol-Absorption abzuleiten und diese in den Retrievals der anderen Größen zu berücksichtigen.

Kapitel 6

Untersuchung der Leistungsfähigkeit des MIPAS-Experiments hinsichtlich der Ableitung von Wasserdampfprofilen

Die Ableitung von Spurengasprofilen aus hochaufgelösten Spektren, die bei der Horizontsondierung in unterschiedlichen Tangentenhöhen gemessen werden, hängt von zahlreichen Parametern ab. Wie schon in Kap. 3 beschrieben, führen die Unsicherheiten der in ein Retrieval einfließenden Parameter zu Fehlern im Ergebnis. Dieses Kapitel behandelt die Fehlerabschätzung für die Ableitung von Wasserdampfprofilen unter tropischen Bedingungen. Nach der Darstellung der Annahmen, die für die Fehlerabschätzung gemacht werden, wird der Fall betrachtet, dass Wasserdampf die einzige gesuchte Größe ist. Anschließend wird die Fehlerbilanz für ein simultanes Retrieval von Wasserdampf und Temperatur gemacht. Schließlich wird noch der Fall einer Messung im höher aufgelösten Messgitter des UT/LS-Modus betrachtet. Abschließend werden die Ergebnisse der Fehlerbetrachtung zusammengefasst und bewertet.

6.1 Annahmen

Eine Fehlerabschätzung soll eine Aussage darüber ermöglichen, wie stark einzelne Fehlerkomponenten das Endergebnis beeinflussen. Hierzu werden die in das Retrieval einfließenden Parameter bewusst mit einer bekannten und realistischen Unsicherheit gestört, um aus dem Ergebnis die Reaktion des Retrievals auf diese Variation der Parameter abzuschätzen.

Die Fehlerabschätzung wird für Sätze von Auswertefenstern durchgeführt, die speziell für das Szenario eines Wasserdampfretrievals in der Tropopausenregion einer tropischen Atmosphäre ausgewählt werden. Bei der Auswahl werden keine Beschränkungen bezüglich der Gesamtzahl der verwendeten Auswertefenster und spektralen Stützstellen gemacht. Mit dem Ziel der größtmöglichen erreichbaren Genauigkeit werden beliebig viele Auswertefenster zugelassen. Die Spektren dieser ausgewählten Auswertefenster aus allen

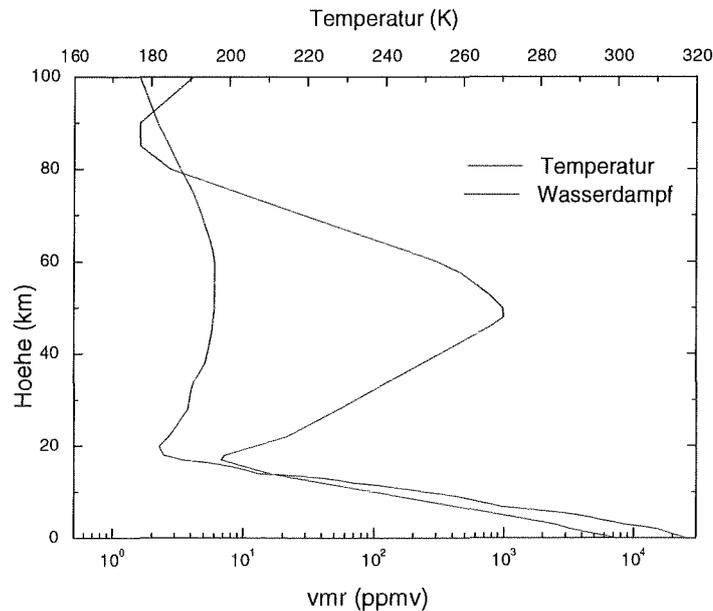


Abbildung 6.1: Vertikalprofile von Temperatur (rote Kurve) und Wasserdampf (blaue Kurve) unter den angenommenen tropischen Bedingungen

Tangentenhöhen werden im Messvektor \vec{y} zusammengefasst. Die Auswertefenster werden für einen Tangentenhöhenbereich von 5 bis 26 km ausgewählt. Dieser Bereich umfasst die Tropopausenregion und die umliegenden Höhenschichten.

Die Bedingungen der untersuchten tropischen Atmosphäre sollen den typischen Zustand in diesen Breiten widerspiegeln. Die thermische Tropopause liegt im verwendeten Profil in 17 km Höhe. Die Höhe der *Hygropause* liegt in 20 km Höhe [Echle, 1998]. Die Profile der Temperatur und des Wasserdampfmischungsverhältnisses sind in Abb. 6.1 dargestellt. Die Profile der weiteren, im Retrieval berücksichtigten Gase geben zum großen Teil ebenfalls die tropischen Bedingungen wieder. Bei Gasen, für die keine Profile unter tropischen Bedingungen zur Verfügung stehen, werden die Profile für mittlere Breiten mit einer angenommenen Tropopausenhöhe von 11 km durch vertikale Streckung des Profils an die Tropopausenhöhe in den Tropen angepasst.

Die Fehlerabschätzung wird für ein Retrievalsszenario gemacht, wie es mit dem IMK-Retrievalprozessor vorgesehen ist. Unabhängig vom Messgitter, das durch die Tangentenhöhen definiert ist, wird ein festes Retrievalgitter mit einem Gitterabstand von 1 km gewählt. Das feste Gitter verhindert, dass für jede Vertikalabtastung ein eigenes, am aktuellen Messgitter orientiertes Retrievalgitter gewählt werden muss. Da im Normalfall die Tangentenhöhen nicht exakt mit den Retrievalstufen zusammenfallen, wird dadurch sichergestellt, dass eine Tangentenstufe nicht weiter als 500 m von der nächsten Retrievalhöhe entfernt ist. Der aus der Differenz zwischen Messgitter und Retrievalgitter resultierende Fehler wird dadurch gering gehalten. Zusätzlich besteht durch das feine Retrievalgitter die Möglichkeit, dass auch Strukturen im Profil der gesuchten atmosphärischen Zustandsgröße, die höher aufgelöst sind als das Messgitter, im Ergebnis dargestellt werden können.

Zusätzlich zum Profil des gesuchten Wasserdampfs wird in jedem Auswertefenster eine nicht näher spezifizierte Kontinuumsstrahlung angepasst. Diese zusätzlichen Parameter sollen breitbandige Strukturen im Spektrum nachbilden, die nicht durch die Modellierung der Spektrallinien aller beteiligter Gase simuliert werden können. Hierzu wird für jedes Auswertefenster ein Profil mit Aerosol-Extinktionskoeffizienten gesucht. Der Parametervektor \vec{x} wird um die entsprechende Anzahl an Elementen erweitert. Die Ergebnisse dieses Kontinuumsretrievals stellen keinen physikalischen Zustand der Atmosphäre im Sinne eines Aerosolretrievals dar, sondern dienen hauptsächlich dazu, die Anpassung des unvollständig modellierten Spektrums an das gemessene zu optimieren.

Die Unsicherheit der Messung wird über die Kovarianz S_y in der Lösung der Retrievalgleichung berücksichtigt. Die Annahme einer Matrix mit einer Blockstruktur, in der entlang der Hauptdiagonalen quadratische Blockmatrizen stehen, erweist sich als sinnvoll. Die Belegung dieser Matrix orientiert sich an der Struktur des Messvektors \vec{y} mit den Auswertefenstern. Die Dimension jeder Blockmatrix ist gleich der Anzahl der Stützstellen des entsprechenden Auswertefensters im Quadrat. Die Elemente der Blockmatrizen werden mit Gleichung (4.3) berechnet, wobei der entsprechende Wert des NESR aus den tabellierten Rauschwerten für MIPAS auf die mittlere Wellenzahl des Spektralintervalls interpoliert wird. In Abb. 4.4 ist der Verlauf des nicht apodisierten Rauschens im Spektralbereich der MIPAS Kanäle dargestellt.

Für die Fehlerabschätzung wird die Jacobimatrix \mathbf{K} um den Referenzwert von \vec{x} entwickelt. Die Fehlerabschätzung erfolgt nach einem Iterationsschritt, so dass man die direkte Reaktion des Retrievals auf eine Unsicherheit erhält. Dies betrifft vor allem die Untersuchung des Parameterfehlers, bei dem ein Iterationsschritt für ein gegenüber dem Referenzspektrum gestörtes Spektrum durchgeführt wird.

Die Kovarianzmatrix des erwarteten Rauschfehlers S_n wird mit Gl. (3.30) unter Verwendung der oben beschriebenen Kovarianzmatrix S_y berechnet. Die Abschätzung des Parameterfehlers erfolgt unter Verwendung von Gl. (3.31). Für die Abschätzung der Variation im Ergebnis aufgrund einer Störung im Vertikalprofil der Größe \vec{b}_i wird zusätzlich zu dem Referenzspektrum, das mit dem ungestörten Profil \vec{b}_i berechnet wird, ein Spektrum mit einem um $+\Delta\vec{b}_i$ gestörten Profil berechnet. Die Größe der Störung hängt von dem jeweiligen Parameter ab. Man geht davon aus, dass für ein Retrieval die Ergebnisse der ESA-Level2-Off-Line Produkte verfügbar sind. Für Ozon, Methan, N_2O , NO_2 , HNO_3 und die Temperatur werden folglich die für diese Profile abgeschätzten 1σ -Unsicherheiten verwendet [Ridolfi et al., 2000]. Für die Unsicherheit der Sichtlinie geht man davon aus, dass diese vor dem Wasserdampfretreival in einem separaten Retrievalschritt angepasst wird und die verwendete Unsicherheit dem 1σ -Wert entspricht. Die Variation $\Delta\vec{b}_i$ der übrigen Parameter erfolgt unter Verwendung von Extremwerten für die einzelnen Größen, die jemals unter atmosphärischen Bedingungen gemessen wurden [Remedios, 1999]. Die Extremwerte gelten für mittlere Breiten und werden, wie die Parameterprofile aus mittleren Breiten, an die veränderte Profilform in der tropischen Atmosphäre angepasst. Für diese Parameter stellt die Fehlerabschätzung somit einen größtmöglichen Einfluss des jeweiligen Parameters auf das Ergebnis \vec{x} dar. Im Anhang sind in Tab. A.1 die verwendeten Unsicherheiten der berücksichtigten Parameter aufgelistet. Die Varianzen, die im Ergebnis als Folge der einzelnen Fehlerbeiträge auftreten, werden summiert und geben die Kovarianzmatrix des Parameterfehlers.

Die Kovarianz des Glättungsfehlers wird mit Gl. (3.33) abgeschätzt. Zur Berechnung der Kovarianz des Glättungsfehlers wird die Kovarianz des tatsächlichen Zustands der Atmosphäre benötigt. Die tatsächliche Kovarianz des aktuellen Zustands der Atmosphäre zum Zeitpunkt der Messung ist in der Regel nicht verfügbar. Es ist folglich eine statistische Beschreibung notwendig, die den Zustand der Atmosphäre wiedergibt. Die Kovarianz einer tatsächlichen Messung kann aus einem Ensemble von mehreren Messungen unter vergleichbaren Bedingungen gebildet werden, um den Vergleich mit dem mittleren Zustand der Atmosphäre zu ermöglichen. Für eine Fehlerabschätzung mit synthetischen Daten bietet es sich an, eine idealisierte Kovarianzmatrix zu verwenden, deren Aufbau und Struktur sehr wohl bekannt ist. So ist es möglich, neben dem Glättungsfehler auch dessen Abhängigkeit von der Wahl der geeigneten Kovarianzmatrix zu untersuchen.

Die Variationen des Wasserdampfs und deren typische vertikale Korrelationslängen in der Atmosphäre sind in den einzelnen Höhenstufen der Atmosphäre sehr unterschiedlich und höchst variabel. Eine konstante Verteilung der Varianz und der charakteristischen Skalenlänge der Korrelation ermöglicht jedoch, in einer theoretischen Studie die Auflösbarkeit verschieden starker und unterschiedlich feiner und grober Strukturen zu untersuchen und deren Einfluss auf den Glättungsfehler abzuschätzen.

Die idealisierte Kovarianzmatrix S_{x_e} , die in die Berechnung des Glättungsfehlers einfließt, wird mit Gl. (3.34) berechnet. In einem Teil der Untersuchungen werden zur Berechnung von S_{x_e} die Unsicherheit σ_{x_e} und die Korrelationslänge l konstant in allen Höhen gewählt, um den Einfluss der Form der Kovarianz auf den Glättungsfehler zu untersuchen. Betrachtet werden Korrelationslängen l von 3 km, 1,5 km, 1 km, 500 m und 100 m und relative Standardabweichungen von $\sigma_{x_e} = 0,5$ (50 %) bei H_2O bzw. $\sigma_{x_e} = 1,0$ (100 %) bei Kontinuum. Diese Werte für l stellen Skalenlängen dar, wie sie für Strukturen in der Atmosphäre auftreten. Je kleiner l gewählt wird, also je strukturierter das wahre Profil ist, umso größer wird der Fehler durch Glättung des Retrievals. Schwankungen mit großer vertikaler Erstreckung, wie sie durch $l = 3$ km simuliert werden sollen, sind in der stabil geschichteten Stratosphäre, in der nicht mit starken vertikalen Austauschprozessen zu rechnen ist, zu erwarten. Strukturen mit Ausdehnungen von 100 m bis 1 km sind in der Troposphäre, hervorgerufen durch konvektive und turbulente Austauschprozesse, eine realistische Annahme.

Um eine realistischere Annahme über den Einfluss von Strukturen im gesuchten Profil auf das Ergebnis zu erhalten, werden die Unsicherheit σ_{x_e} und die Korrelationslänge l höhenabhängig gewählt. In der Troposphäre geht man von feinen Strukturen (kleine Korrelationslängen) mit großer Amplitude aus. Dies soll den stärkeren vertikalen Austausch durch konvektive Prozesse repräsentieren. In der unteren Stratosphäre werden ausgedehnte Strukturen (größere Korrelationslängen) mit geringerer Amplitude verwendet. Dadurch wird der schwächere vertikale Austausch und die niedrigere Variabilität berücksichtigt. Für die Stratosphäre wird eine relative Standardabweichung von $\sigma_{x_e} = 0,1$ und eine charakteristische Länge von $l = 3,0$ km gewählt. In der Troposphäre geht man von $\sigma_{x_e} = 0,5$ und einer Korrelationslänge $l = 1,0$ km aus.

Die Fehlerabschätzung wird für ein Retrievalgitter mit 1 km Gitterabstand durchgeführt. Unabhängig vom gewählten Messgitter wird der Bereich von 3 bis 29 km durch das gewählte Höhengitter abgedeckt. Bei den untersuchten Messszenarien werden ein Messgitter mit 3 km-Abstand zwischen 5 und 26 km und ein Messgitter mit 1,5 km-Abstand

im Bereich zwischen 5 und 27,5 km untersucht. Der nach unten erweiterte Höhenbereich des Retrievalgitters ist so gewählt, dass die Einflüsse des FOV auf die Messung berücksichtigt werden können.

Für die Fehlerabschätzung wird eine Regularisierung mit dem Regularisierungsoperator erster Ordnung nach Tikhonov–Philips angewendet, wobei der Regularisierungsparameter höhenabhängig gewählt ist. Die Höhenabhängigkeit wird durch die Matrix \mathbf{W} eingeführt. Sie ist eine Diagonalmatrix, deren Elemente proportional zum Kehrwert des Wasserdampf-mischungsverhältnisses der entsprechenden Höhenstufe sind ($w_{i,i} \sim 1/(vmr_{H_2O}(z_i))$). Die Wichtung des Regularisierungsterms mit dem Faktor γ wird so gewählt, dass der gesamte Retrievalfehler bei weiterer Erhöhung von γ nicht mehr kleiner wird. Zu kleine Werte für γ führen in der Fehlerabschätzung zu erhöhten Gesamtfehlern.

Die hier dargestellten Annahmen bilden die Grundlage für die quantitative Abschätzung des zu erwartenden Gesamtfehlers und der Einzelbeiträge durch Rauschen, Glättung und Unsicherheit bei den einfließenden Parametern. Im Folgenden werden nun die Ergebnisse der Fehlerabschätzungen für ausgewählte Retrievalszzenarien gezeigt. Ausgehend von Messungen im Standardgitter mit 3 km Gitterabstand werden zwei Fälle untersucht. Es wird vom Standardfall eines reinen Wasserdampfretrievals ausgegangen. Dann wird der Fall betrachtet, dass zusätzlich zum Wasserdampf noch das Temperaturprofil als gesuchter Parameter abgeleitet wird, um die Temperaturabhängigkeit des Spektrums in der Tropopausenregion besser zu berücksichtigen. Mit dem Ziel einer höheren vertikalen Auflösung im Ergebnis wird die Fehlerbilanz für ein feineres Messgitter mit 1,5 km Abstand bei gleichem Retrievalgitter aufgestellt. Abschließend werden die Ergebnisse bewertet und diskutiert.

6.2 Fehlerabschätzung für ein reines Wasserdampfretrieval

Zunächst wird auf das naheliegende Szenario zur Ableitung von Wasserdampfprofilen unter tropischen Bedingungen eingegangen: Die vertikale Verteilung des Wasserdampfs ist, abgesehen von den als Hilfsgröße dienenden Kontinuumsprofilen, das einzige gesuchte Profil. Im weiteren Verlauf wird dieser Fall stets als „reines Wasserdampfretrieval“ bezeichnet. Für ein Messgitter mit 3 km-Schritten zwischen 5 und 26 km Tangentenhöhe werden die Auswertefenster mit Hilfe der in Kap. 4.2 beschriebenen Algorithmen von Clarmann und Echle ausgewählt [von Clarmann and Echle, 1998b], [von Clarmann and Echle, 1998a].

Für das hier betrachtete Szenario ergibt sich eine Okkupationsmatrix mit insgesamt 237 Haupt-Auswertefenstern. In Abb. 6.2 sind die gewählten Auswertefenster und ihre Positionen im Spektrum dargestellt. Im Bereich des atmosphärischen Fensters bei 850 cm^{-1} liegen einige Auswertefenster. Ein großer Teil dieser in Kanal A ansässigen Fenster dient der Auswertung in der mittleren und unteren Troposphäre. Hier ist als Folge der erhöhten Transmission im atmosphärischen Fenster die Messung bis in die mittlere Troposphäre möglich. Der weitaus größte Anteil der verfügbaren Auswertefenster liegt in den Kanälen B und C, im Bereich der ν_2 -Bande des Wasserdampfs, deren Zentrum bei 1595 cm^{-1} liegt. Ein Teil der hier gefundenen Auswertefenster deckt den Bereich der oberen Troposphäre ab. Die meisten Auswertefenster liegen hier jedoch in der unteren Stratosphäre ab 17 km aufwärts und konzentrieren sich auf den Bereich um das Bandenzentrum. In die-

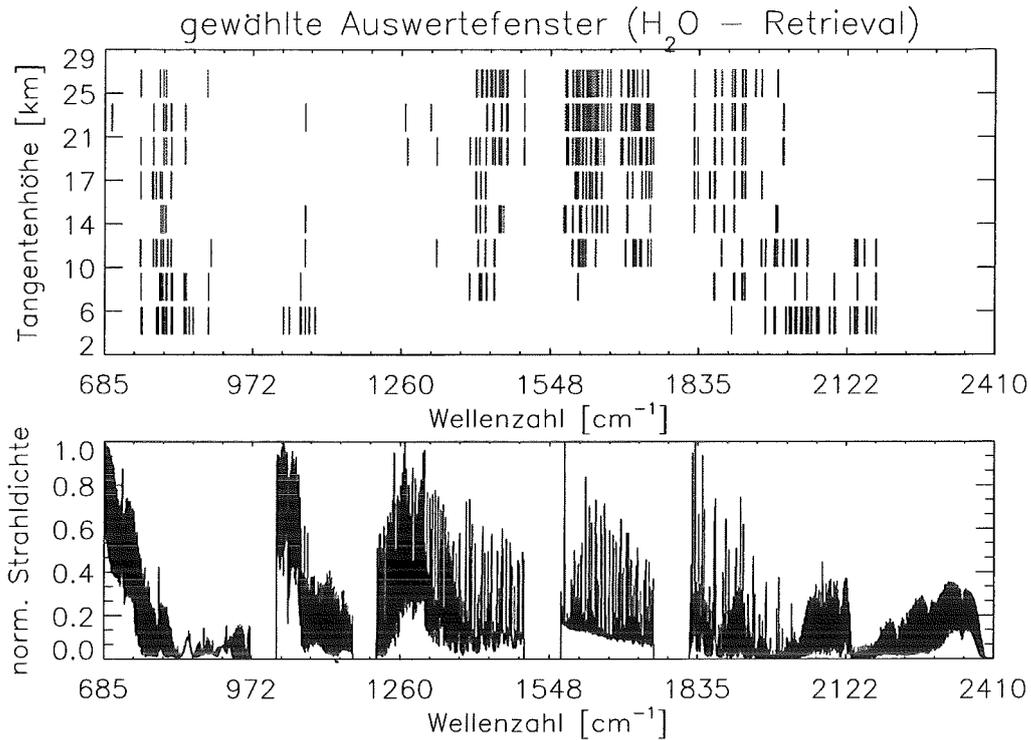


Abbildung 6.2: Die ausgewählten Auswertefenster für ein Wasserdampf-Retrieval. Dargestellt sind die Positionen im Spektrum und in den verschiedenen Tangentenhöhen. Das Spektrum im unteren Bildteil entspricht einer Messung in einer Tangentenhöhe von 14 km, wobei die Teilspektren der einzelnen MIPAS Kanäle auf den jeweils maximalen Strahllichtewert in diesem Kanal normiert sind.

sem Spektralbereich verhindert in der Troposphäre die mit abnehmender Tangentenhöhe schnell zunehmende Opazität der Atmosphäre brauchbare Messungen für niedrige Tangentenhöhen. Weitere Auswertefenster im Höhenbereich der Troposphäre finden sich im Kanal AB zwischen 1000 und 1100 cm^{-1} und im Kanal D zwischen 2000 und 2200 cm^{-1} .

Für die gewählte Okkupationsmatrix werden mit Gl. (3.30), Gl. (3.31), Gl. (3.33) und Gl. (3.35) der Gesamtfehler und die dazu beitragenden einzelnen Fehlerquellen abgeschätzt. In Abb. 6.3 sind auf der linken Seite die erwarteten Fehler im gemessenen Profil dargestellt. Für die Abschätzung des Glättungsfehlers wurde zur Berechnung der Matrix \mathbf{S}_{x_e} eine Korrelationslänge von $l = 3 \text{ km}$ und eine relative Unsicherheit von $\sigma_{x_e} = 50 \%$ angenommen. Schwankungen mit solch einer vertikale Ausdehnung können für das gewählte Mess- und Retrievalgitter durch die Messung aufgelöst werden. Der Regularisierungsparameter zur Wichtung des Regularisierungsterms wird mit $\gamma = 0.004$ gewählt.

Zunächst wird auf die Beiträge der Einzelfehler eingegangen, aus denen sich der Gesamtfehler zusammensetzt.

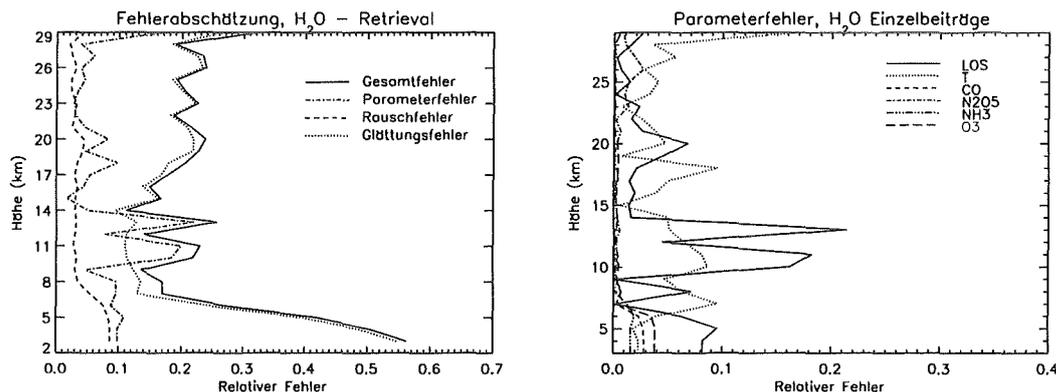


Abbildung 6.3: Abgeschätzter Gesamtfehler und Einzelbeiträge für die Ableitung von tropischen Wasserdampfprofilen mit einem Messgitter von 3 km (links) und Beiträge der stärksten Störgrößen zum gesamten Parameterfehler (rechts)

Rauschfehler

Die Reaktion des Ergebnisses auf das Rauschen des Messgeräts, der Rauschfehler, zeigt aufgrund der verwendeten höhenabhängigen Regularisierung eine nahezu höhenkonstante Verteilung mit einer Unsicherheit von unter 5 % zwischen 7 und 28 km Höhe. Unter 7 km und bei einer Retrievalhöhe von 29 km steigt der Fehler etwas an. Der Anstieg bei 29 km ist damit zu erklären, dass die Tangentenhöhen und damit die Messungen nur bis in 26 km Höhe angenommen werden. Für die oberste Retrievalhöhe liegt kein Beitrag aus dem Vektor der Spektren \vec{y} vor. Die Information über den Beitrag dieser Höhe zum Ergebnis kommt einzig durch die simulierte Sensitivität der Spektren auf Variationen in dieser Höhe, wie sie durch die Jacobimatrix repräsentiert wird. Diese Sensitivität ist deutlich geringer, als die Reaktion eines Spektrums auf Variationen in der entsprechenden Tangentenhöhe. Es steht also weniger Information über Wasserdampf zur Verfügung.

Der Anstieg unterhalb von 7 km ist eine Folge der Opazität der Atmosphäre in allen Kanälen. Nur ein geringer Teil der in diesen niedrigen Tangentenhöhen emittierten Strahlung des Wasserdampfs erreicht das Messgerät. Der größte Teil wird in darüberliegenden kälteren Luftschichten der Troposphäre wieder absorbiert. Ein großer Teil der empfangenen Strahldichte stammt aus Schichten, die über der Tangentenhöhe liegen. Die Linienform gleicht hier teilweise einer Absorptionslinie, wie man sie gegen den warmen Hintergrund der unteren, optisch dichten Troposphäre misst. Die Sensitivität auf Variationen in der Tangentenhöhe ist folglich sehr klein. In der Jacobimatrix treten in Spalten, die diesen niedrigen Höhen entsprechen, nur sehr kleine Werte auf. Der Einfluß des Rauschens des Messgeräts gewinnt an Bedeutung und der Rauschfehler nimmt zu.

Parameterfehler

Der Parameterfehler zeigt im Vergleich zum Rauschfehler eine ausgeprägte Höhenabhängigkeit. Zwischen 14 und 28 km liegt der Fehler bei 10 % und zum Teil deutlich darunter. Dieses Ergebnis zeigt, dass die in diesen Tangentenhöhen ausgewählten Auswertefenster gut geeignet sind, Wasserdampfprofile unter minimalem

Einfluss von Störgrößen abzuleiten. Die Doppelspitze im Bereich der Hygropause (20 km) und der Tropopause (17 km) werden von Fehlerbeiträgen als Folge von Unsicherheiten im Temperaturprofil und in der Sichtlinie (engl.: line of sight, LOS), deren 1σ -Unsicherheit mit 300 m angenommen wird, erzeugt. Zwischen 14 und 9 km steigt der Parameterfehler sehr stark an. Hauptursache hierfür sind der störende Einfluss von Unsicherheiten im einfließenden Temperaturprofil und der angenommenen Sichtlinie. Unterhalb von etwa 10 km liegt der Parameterfehler wieder bei 10 %. Die Struktur des Parameterfehlers in der Troposphäre und der Tropopausenregion mit den starken Schwankungen von Retrievalstufe zu Retrievalstufe, die vor allem durch die Fehlerbeiträge von Temperatur und LOS hervorgerufen werden, kommen daher, dass hier der Betrag der Elemente des Vektors $\Delta\vec{x}_{b,i}$ dargestellt sind. Der Vektor $\Delta\vec{x}_{b,i} = \vec{x}_{b,i} - \vec{x}$ gibt die Abweichung des Ergebnisses $\vec{x}_{b,i}$ vom Referenzwert \vec{x} als Folge eines um $\Delta\vec{b}_i$ gestörten Parametervektors im Strahlungsübertragungsmodell wieder. Die Reaktionen des Retrievals auf die veränderten Spektren erzeugen im Vektor $\vec{x}_{b,i}$ Oszillationen, die im Vektor $\Delta\vec{x}_{b,i}$ als positive und negative Abweichungen von der Referenz auftreten. Die Retrievalstützstellen im Bereich der Nulldurchgänge weisen kleine Werte in $\Delta\vec{x}_{b,i}$ auf. Diese sind verantwortlich für die Betragsschwankungen im Parameterfehler. In unterschiedlichen Höhen reagiert das Retrieval mit verschiedenen Korrekturen, um den Einfluss der Störgrößen auszugleichen.

In Abb. 6.3 sind die größten Fehlerquellen im Parameterfehler dargestellt. Die abgeschätzten Fehlerbeiträge von Temperatur und Sichtlinien-Unsicherheit dominieren den Parameterfehler. Der hohe Fehlerbeitrag durch die Temperaturunsicherheit zeigt, wie sensibel das troposphärische Spektrum im Infraroten auf Temperaturänderungen reagiert. Der Anstieg des Temperaturfehlers an der Hygropause und der Tropopause ist auf die niedrige Temperatur und die kleinen Wasserdampf-mischungsverhältnisse in dieser Region zurückzuführen. Schon geringe Variationen im Temperaturprofil führen zu einer deutlichen Reaktion bei den Spektrallinien des Wasserdampfs. Die durch die Temperaturvariation veränderte Linienstärke resultiert in fehlerhaften Werten im Wasserdampfprofil.

Einige der zur Auswertung verwendeten Spektrallinien sind nahezu gesättigt. Im Sättigungsfall wird die Auswertung der Linienform schwieriger. Bei Sättigung ist im Linienzentrum das maximale Emissionsvermögen erreicht. Das Emissionsvermögen der Linie nimmt im Zentrum bei weiterer Zunahme des Wasserdampfgehalts nicht mehr zu, da Emission nach dem Kirchhoff'schen Gesetz nur vom Emissionsvermögen und der Temperatur des Emittenten abhängt. Die Linienform verändert sich bei weiterem Anstieg des Wasserdampfgehalts durch die Verbreiterung der Linie. Geht also das Temperaturprofil als fester Parameter in die Modellierung der SÜG ein und weicht der verwendete Wert von dem tatsächlichen Temperaturprofil der Atmosphäre ab, so kann im Sättigungsfall die Form der Linie aufgrund des Fehlers im Temperaturprofil nicht richtig modelliert werden. Die Folge ist ein Fehler im Wasserdampfprofil.

In Abb. 6.4 sind exemplarisch die Zeilen der Jacobimatrix für zwei spektrale Stützstellen im Zentrum und am Rande einer Wasserdampflinie dargestellt. Man sieht, dass die Linien für niedrige Tangentenhöhen eine hohe Sensitivität auf Variationen in darüberliegenden Luftschichten zeigen. Die beiden untersten Tangentenhöhen zeigen kaum Reaktion auf eine Störung in der entsprechenden Tangentenhöhe und gleichzeitig eine starke negative Sensitivität bezüglich Variationen in darüberliegenden Schichten. Die Atmosphäre ist hier optisch dicht und die Linie gesättigt. Der Strahldichtewert in 11 km Tangentenhöhe

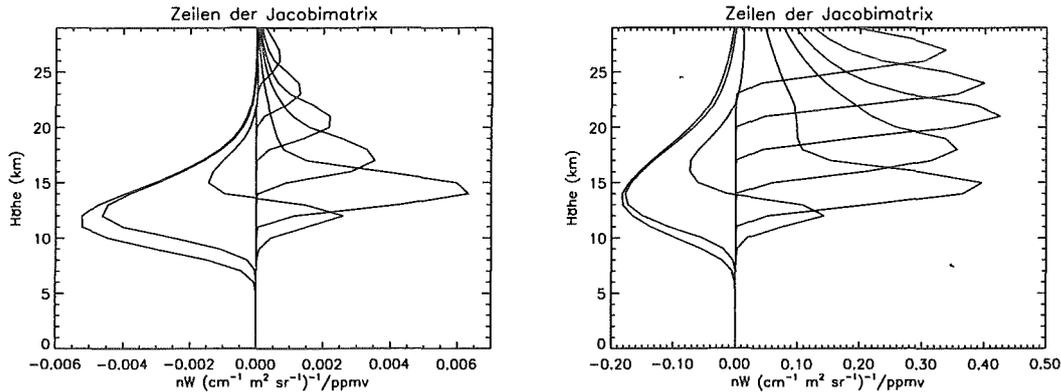


Abbildung 6.4: Zeilen der Jacobimatrizen mit den Ableitungen der gemessenen Strahldichte $I(\nu)$ nach dem H_2O -Mischungsverhältnisse für zwei spektrale Stützstellen in einem Wasserdampfauswertefenster. Dargestellt sind die Werte für eine Stützstelle beim Linienzentrum (rechts, $\nu = 792.025 \text{ cm}^{-1}$) und am Rand der Linie (links, $\nu = 791.9 \text{ cm}^{-1}$). Jede Linie entspricht den Ableitungen einer Tangentenhöhe für Störungen in allen Höhen.

zeigt eine positive Sensitivität auf Störungen in der Tangentenhöhe und negative Reaktion auf Störungen darüber. Erst für Messungen von 14 km aufwärts liegt das Maximum der Sensitivität der Strahldichte in der Tangentenhöhe. Man sieht an den Werten, die in der Jacobimatrix auftreten, dass die Sensitivität im Linienzentrum (rechts) am höchsten ist und vom Linienzentrum weg abfällt. Eine ähnliche Verteilung der Sensitivität wird für alle Linien erwartet, wobei die maximale Sensitivität in unterschiedlichen Tangentenhöhen erreicht wird. Auch die Höhe, unterhalb der mit Sättigung und Opazität gerechnet werden muss, ist für jede Spektrallinie verschieden. Die Lage der Auswertefenster in den einzelnen Tangentenhöhen orientiert sich an der Sensitivität der einzelnen Linien.

Der resultierende Fehler aus der LOS-Unsicherheit zeigt, dass in der Troposphäre ein erheblicher Fehler im Ergebnis hervorgerufen werden kann, wenn das tatsächliche Messgitter zu weit gegen die angenommenen Tangentenhöhen verschoben ist. Im Bereich der Stratosphäre spielt diese, auch als absolute LOS-Unsicherheit bezeichnete Abweichung keine große Rolle, da die vertikalen Gradienten von Wasserdampf und Temperatur deutlich schwächer sind als in der Troposphäre. In der Troposphäre wird der Einfluss der genauen Kenntnis der LOS auf das Ergebnis deutlich größer. Das gemessene Spektrum resultiert aus der Temperatur und den Beiträgen von Wasserdampf und anderen Spurengasen in der Tangentenhöhe. Im Retrieval werden im Strahlungsübertragungsmodell die Temperatur und andere Parameter der angenommenen Tangentenhöhe verwendet. Tatsächlich wird das gemessene Spektrum aber, abgesehen vom Wasserdampf, durch die Temperatur und die weiteren Parameter entlang der tatsächlichen Sichtlinie mitbestimmt, wodurch sich eine Differenz zwischen dem simulierten und dem gemessenen Spektren ergeben kann. Durch die Unsicherheit in der Sichtlinie ist die Gesamtteilchenzahl des Wasserdampfs entlang der tatsächlichen Sichtlinie eine andere, als sie entsprechend der nominellen Tangentenhöhe wäre. Das Retrieval passt die Spektren folglich an eine andere Wasserdampfsäule entlang des Sehstrahls an. Der daraus resultierende Wert im Profil weicht folglich von dem tatsächlichen Wert in der entsprechenden Tangentenhöhe ab. Dieser fehlerhafte Wert wird

der angenommenen Tangentenhöhe und damit auch der zugeordneten Retrievalhöhe zugewiesen, wodurch sich ein falsches Wasserdampfprofil im Ergebnis ergibt.

Die erwartete absolute Unsicherheit im Ergebnis eines LOS-Retrievals liegt bei etwa 150 m und ist somit deutlich niedriger als die hier verwendete Unsicherheit von 300 m. Der Fehler im Wasserdampfretrieval aufgrund der LOS-Unsicherheit wird also kleiner ausfallen, als in dieser Abschätzung.

Neben Temperatur und LOS werden noch zahlreiche weitere Parameter, vor allem Profile von interferierenden Spurengasen, im Modell berücksichtigt. Durch deren ungenaue Kenntnis werden im Ergebnis Fehler erzeugt. In Abb. 6.3 sind zusätzlich zur Temperatur und zur LOS noch die Fehlerbeiträge der Gase aufgetragen, die durch ihre Konzentrationsunsicherheiten am stärksten zum Parameterfehler beitragen. Dies sind vor allem die Gase CO, N₂O₅, NH₃, NO₂, und Ozon. Deren Beiträge bezogen auf das Wasserdampfprofil sind mit relativen Fehlern unter 5 % deutlich kleiner als die Beiträge der Temperatur- und der LOS-Unsicherheit.

Unterhalb von 10 km wird der Einfluss des Parameterfehlers auf das Ergebnis wieder kleiner. Die steigende Opazität der mittleren und unteren Troposphäre sorgt hier für eine geringere Sensitivität der Spektren auf Unsicherheiten in den Parameterprofilen \vec{b} . Folglich wirken sich hier Unsicherheiten in \vec{b} weniger stark auf das Ergebnis von \vec{x} aus.

Glättungsfehler

Der Glättungsfehler liegt oberhalb der Tropopause, zwischen 17 und 29 km bei etwa 20 %. Für Retrievalhöhen zwischen 8 und 17 km Höhe ist der Fehler mit 10 bis 15 % geringer. Unterhalb von 8 km nimmt der Glättungsfehler aufgrund der fehlenden Informationen im Spektrum stark zu.

Der niedrige Fehlerbeitrag in der mittleren Troposphäre lässt sich dadurch erklären, dass hier durch die hohe Temperatur und durch die großen Werte des Wasserdampf-mischungsverhältnisses im Profil sehr starke Wasserdampf-Signaturen im Spektrum erzeugt werden. Der Informationsgehalt der Messung ist hier hoch und die Regularisierung hat nur wenig Einfluss auf das Ergebnis. Der hohe Informationsgehalt erlaubt eine genaue Zuordnung des gemessenen Signals zu bestimmten Höhen und damit eine gute vertikale Auflösung im Ergebnis.

Der starke Anstieg des Glättungsfehlers unterhalb von 7 km Höhe ist wieder mit der fehlenden Sensitivität des Spektrums und der dadurch fehlenden spektralen Information über den Wasserdampfgehalt in der unteren Troposphäre zu erklären. Der Regularisierungsterm gewinnt hier an Einfluss auf das Ergebnis, welches dadurch stärker geglättet wird.

Oberhalb der Tropopause ist die Temperatur bis in 29 km Höhe niedriger als in der mittleren Troposphäre. Die Volumenmischungsverhältnisse des Wasserdampfs liegen mit 2 bis 4 ppmv deutlich unter den Werten der Troposphäre. Die hier ausgewerteten Linien sind folglich schwächer als in der Troposphäre. Der Einfluss der Nebenbedingung auf das Ergebnis wird etwas größer. Das schlägt sich auch in einer schlechteren vertikalen Auflösung und damit in einem erhöhten Glättungsfehler nieder.

Der Glättungsfehler hängt maßgeblich von der Kovarianzmatrix S_{x_e} ab. Je kleinräumiger die vertikalen Strukturen im Profil sind um so größer wird der Fehler, der im Ergeb-

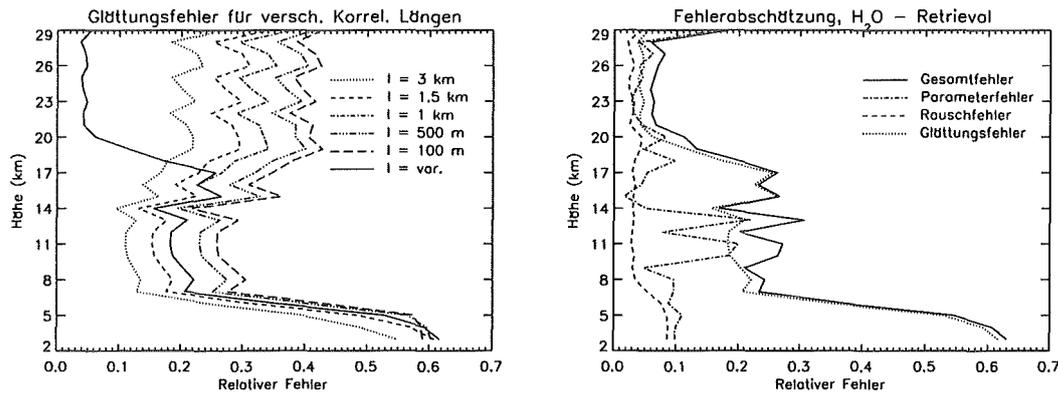


Abbildung 6.5: Links: Abgeschätzter Glättungsfehler für unterschiedliche Parameter in der Berechnung der Kovarianzmatrix S_{x_e} . Dargestellt sind die Verteilungen des Glättungsfehlers für unterschiedliche Korrelationslängen zwischen $l = 100$ m und $l = 3$ km bei gleicher Unsicherheit σ_{x_e} . Die durchgezogene Kurve zeigt den geschätzten Glättungsfehler für eine realistischere Kovarianz mit kleiner Unsicherheit und großen Weglängen in der Stratosphäre und großer Unsicherheit und kleiner Länge l in der Troposphäre. Rechts: Abgeschätzter Gesamtfehler und Einzelbeiträge für die Verwendung einer realitätsnahen Kovarianzmatrix S_{x_e} .

nisprofil gemacht wird, weil diese Strukturen durch die Messung nur teilweise aufgelöst werden können. Um die Abhängigkeit des Glättungsfehlers von der Struktur der Atmosphäre zu untersuchen, werden Kovarianzmatrizen nach Gl. (3.34) mit unterschiedlichen Parametern l und σ_{x_e} berechnet und die Veränderung im Glättungsfehler betrachtet.

Die Variation der Korrelationslänge l zeigt, wie sich der Glättungsfehler verhält, wenn Vertikalprofile des vmr von Wasserdampf mit einer vertikalen Struktur dieser charakteristischen Länge aus den Messungen abgeleitet werden sollen. Zur Berechnung der Kovarianzmatrix S_{x_e} wird zunächst σ_{x_e} konstant gehalten, während für die charakteristische Länge l Werte von 3 km, 1,5 km, 1 km, 500 m und 100 m gewählt werden. In Abb. 6.5 ist die Zunahme des Glättungsfehlers mit abnehmender Korrelationslänge zu sehen.

Für das betrachtete Gitter mit 3 km Tangentenabstand ist es nicht möglich, Strukturen mit einer geringeren Ausdehnung als dem Gitterabstand zu erfassen. Für feine Strukturen ist die Wahrscheinlichkeit sehr groß, dass sie zwischen den Gitterpunkten auftreten und von diesen nicht erfasst werden. Die Verwendung des feineren Retrievalgitters kann, bei Verwendung einer Nebenbedingung, die Ableitung des Profilverlaufs auf einem feineren Gitter ermöglichen und Strukturen, die feiner aufgelöst sind als das Tangentengitter, erfassen. Durch den Einfluss des Regularisierungsterms tritt hier ein glättender Effekt ein, der das Ergebnis über mehrere Stützstellen im Gitter verschmiert. Die Werte an den Retrievalpunkten sind durch die Glättung nicht unabhängig voneinander. Strukturen im Profil, die feiner sind als das Retrievalgitter können nicht mehr aufgelöst werden. Die großen Fehlerbeiträge des Glättungsfehlers für $l = 100$ m bzw. $l = 500$ m die man in Abb. 6.5 sieht, zeigen, dass mit den gegebenen Annahmen für das Messgitter und das Retrievalgitter das wahre Profil nicht aufgelöst werden kann. Versucht man also von dem Ergebnis auf tatsächliche vertikale Strukturen in der Atmosphäre mit einer vertikalen Ausdehnung zu

schließen, die kleiner ist als das Retrievalgitter, so ist der dabei gemachte Fehler deutlich größer als die Fehlerbeiträge vom Rauschen des Instruments und von den Modellparametern.

Ähnliches wie für den Einfluss der charakteristischen Länge l gilt auch für die Reaktion des Glättungsfehlers auf Veränderung der Unsicherheit σ_{x_e} . Bei einem Anstieg der Werte von σ_{x_e} erhöhen sich dementsprechend auch die berechneten Werte der Elemente der Matrix \mathbf{S}_{x_e} . Folglich ergibt sich für eine größere Unsicherheit im klimatologischen atmosphärischen Profil auch ein größerer Beitrag durch den Glättungsfehler.

Der bisher betrachtete Fall einer Kovarianzmatrix, deren Elemente für alle Höhen dieselbe Verteilung um die Hauptdiagonale besitzen, ist in der realen Atmosphäre unrealistisch. Sie ist jedoch gut geeignet, die Abhängigkeit des Glättungsfehlers vom Aufbau der Matrix \mathbf{S}_{x_e} zu zeigen. Um nun eine realistischere Abschätzung des Glättungsfehlers bei der Ableitung tropischer Wasserdampfprofile zu erhalten, wird mit Gl. (3.34) eine Matrix berechnet, deren Parameter so gewählt sind, dass sie die natürliche Variabilität in der Atmosphäre und die Eigenschaften von MIPAS besser repräsentiert. Natürliche Strukturen im Wasserdampfprofil der Stratosphäre zeigen vertikale Ausdehnungen von mehreren Kilometern und nur kleine Amplituden. In der verwendeten Matrix wird für die Retrievalstufen, die im verwendeten Atmosphärenmodell in der Stratosphäre liegen eine charakteristische Länge von 3 km und eine relative Unsicherheit von $\sigma_{x_e} = 0.1$ verwendet. Die Troposphäre besitzt deutlich ausgeprägtere Strukturen. Auch wenn durchaus feinere Strukturen vorkommen können, wird die Korrelationslänge mit 1 km gewählt, da diese durch das Retrievalgitter noch aufgelöst werden kann. Die Amplitude der relativen Variabilität wird mit $\sigma_{x_e} = 0.5$ gewählt. Für die Tropopausenregion werden in Gl. (3.34) die Parameter aus beiden Atmosphärenschichten berücksichtigt. In Abb. 6.5 zeigt die durchgezogene Kurve den für diese Annahmen abgeschätzten Glättungsfehler. Oberhalb von 20 km liegt der Fehler unter 5 %. Das zeigt, dass die angenommenen Strukturen im atmosphärischen Profil im gewählten Szenario aufgelöst werden können. Unterhalb der Hygropause steigt der Fehler allmählich an, da der Einfluss der Troposphäre, für die eine größere Varianz angenommen wird, zunimmt. Durch die gewählten Korrelationslängen in Stratosphäre und Troposphäre, sowie über den Einfluss des FOV steigt der Glättungsfehler an, je weiter man in die Troposphäre hineinblickt.

Die hohen Werte mit bis zu 25 % im Bereich der Tropopause zeigen, dass dort die aufgrund der niedrigen Tropopausentemperatur schwächere Sensitivität der Wasserdampflinien durch einen größeren Einfluss der Regularisierung kompensiert wird. Die Struktur der Matrix \mathbf{S}_{x_e} wird hier durch die größeren Werte für σ_{x_e} und die kleineren Werte für l , die den Zustand der Troposphäre darstellen sollen, geprägt. Diese resultieren, wie oben gezeigt, in höheren Werten im Glättungsfehler. Unterhalb der Tropopause geht der Glättungsfehler über in den Verlauf, wie er schon im obigen Fall mit einer höhenkonstanten Unsicherheit und Korrelationslänge gezeigt und beschrieben wird.

Anhand der oben dargestellten Fälle wurde gezeigt, wie der Glättungsfehler von der Wahl der Matrix \mathbf{S}_{x_e} abhängt. Im Folgenden wird für die Abschätzung des Glättungsfehlers für MIPAS die zuletzt beschriebene, „realitätsnahe“ Kovarianzmatrix mit unterschiedlichen Parametern σ_{x_e} und l in Troposphäre und Stratosphäre eingesetzt.

Gesamtfehler

In Abb. 6.5 ist rechts der abgeschätzte Gesamtfehler unter Verwendung der „realitätsnahen“ Abschätzung des Glättungsfehlers dargestellt. Oberhalb von 20 km liegt der Gesamtfehler bei etwa 7 %. Unterhalb von 20 km steigt der Gesamtfehler deutlich auf 25 % an. Der erhöhte Parameterfehler trägt geringfügig zum Fehlerbudget bei. Die dominante Fehlergröße ist hier der Glättungsfehler. In der mittleren Troposphäre, zwischen 9 und 14 km sind die Beiträge von Glättungsfehler und Parameterfehler mit jeweils ca. 20 % gleich groß. In der unteren Troposphäre verliert der Parameterfehler an Einfluss. Der Gesamtfehler wird dort durch die Glättung bestimmt. Mit Werten um 5 % spielt der Einfluss des Messgeräteraustauschs auf das Ergebnis im gesamten Fehlerbudget nur eine untergeordnete Rolle.

6.3 Fehlerabschätzung für ein simultanes Retrieval von Wasserdampf und Temperatur

In Abschnitt 6.2 wurde bei der Betrachtung des Parameterfehlers gezeigt, wie stark das Ergebnis des Wasserdampfretrievals von der genauen Kenntnis des Temperaturprofils abhängt. Es ist daher naheliegend, den Einfluss dieser Störgröße zu minimieren. Eine Möglichkeit ist, gleichzeitig mit dem Wasserdampfprofil auch das der Temperatur anzupassen. Im Folgenden soll dieser Fall mit „Simultanretrieval“ bezeichnet werden. Hier wird unter anderem die Temperaturabhängigkeit der Wasserdampflinien und des Hintergrundkontinuums genutzt, um aus ihnen Informationen über die vertikale Temperaturverteilung zu gewinnen. Diese Information wird wiederum genutzt, um die Signale des Wasserdampfs zu modellieren.

Für diesen Ansatz zur Ableitung von Wasserdampfprofilen ist ein anderer Satz von Auswertefenstern als der, der im Fall eines reinen Wasserdampfretrievals verwendet wird, nötig. Es können hier auch Bereiche des Spektrums zur Ableitung von Wasserdampfprofilen verwendet werden, die eine deutlich größere Sensitivität bezüglich der Temperatur besitzen. Linien mit einer großen Temperaturabhängigkeit und ganz oder nahezu gesättigte Wasserdampflinien haben weniger störenden Einfluss auf das Retrievalergebnis als im Fall des reinen Wasserdampfretrievals. Mit Hilfe der oben vorgestellten Algorithmen wird eine neue Okkupationsmatrix für dieses Szenario ausgewählt. In Abb. 6.6 sind die Positionen der Auswertefenster im Spektrum dargestellt. Die Verteilung der gewählten Auswertefenster unterscheidet sich von der vorhergehenden. Insgesamt stehen 192 Auswertefenster zur Verfügung. Im Bereich des atmosphärischen Fensters liegen die geeigneten Spektralintervalle im Höhenbereich der Troposphäre zwischen 5 und 17 km. Im Kanal AB, zwischen 1020 und 1170 cm^{-1} befinden sich keine geeigneten Auswertefenster. Wie auch im Fall des reinen Wasserdampfretrievals konzentrieren sich die Fenster auf die Region der ν_2 -Bande. Beim simultanen Retrieval beider Größen scheint deren Verteilung kompakter. Im Kanal C findet man nur sehr wenige Auswertefenster unterhalb der Tropopause. Oberhalb von 1820 cm^{-1} , im Kanal D, finden sich ebenfalls weniger Spektralintervalle zur Auswertung. Insgesamt ist eine Konzentration an Auswertefenstern in den Kanälen B und C zu sehen. Nur für Tangentenhöhen in der mittleren und unteren Troposphäre konzentrieren sich die ausgewählten Intervalle auf die bis in tiefere Höhen transparenten Kanäle A und D.

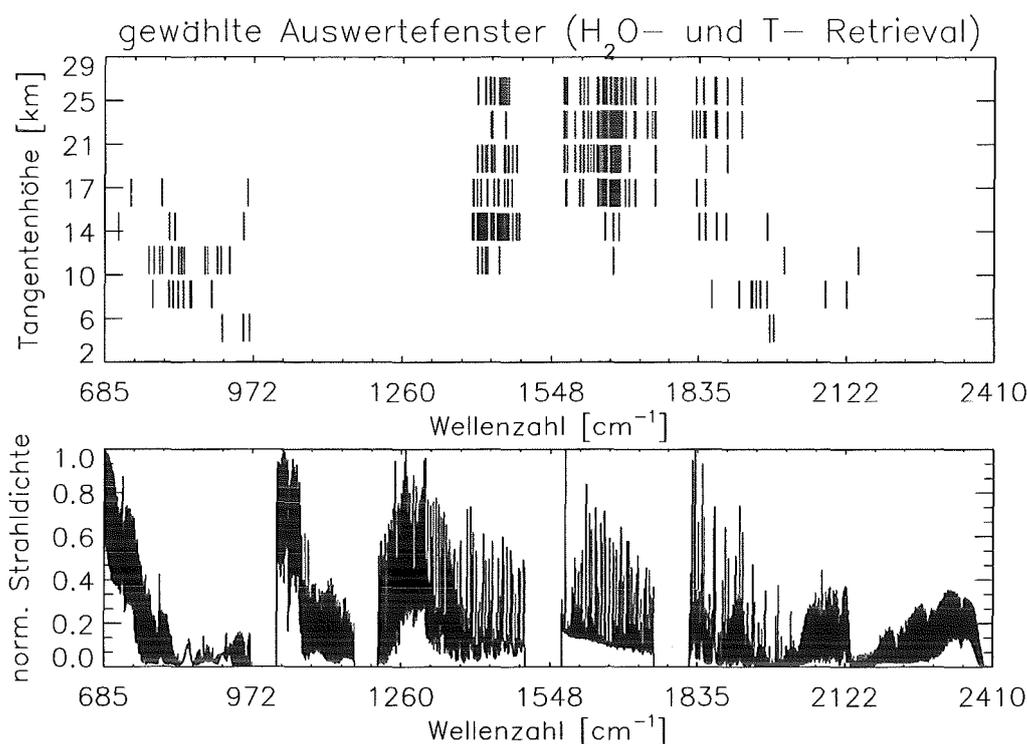


Abbildung 6.6: Die ausgewählten Auswertefenster für ein simultanes Wasserdampf- und Temperaturretrieval. Dargestellt sind, wie in Abb. 6.2, die Positionen im Spektrum und in den verschiedenen Tangentenhöhen

Auffällig ist, dass für die unteren Tangentenhöhen 5, 8 und 11 km weniger Auswertefenster zur Verfügung stehen als im einfachen Fall für das Wasserdampfretrieval. Gerade in der untersten Tangentenhöhe stehen nur fünf Auswertefenster zur Verfügung.

In Abb. 6.7 ist der abgeschätzte Gesamtfehler zusammen mit den Einzelbeiträgen der verschiedenen Fehlerquellen für ein Simultanretrieval dargestellt. Im Bereich der unteren Stratosphäre liegt der Gesamtfehler bis etwa 19 km Höhe unter 8 %. In der Tropopausenregion steigt der Fehler aufgrund des zunehmenden Glättungsfehlers bis 23 % an. Unterhalb von 14 km steigt der Fehler bis 50 % und zum Teil deutlich darüber an. Hier wird der Gesamtfehler zusätzlich noch durch den starken Beitrag des Parameterfehlers bestimmt. Unterhalb von 11 km wirkt sich die geringere Anzahl an geeigneten Auswertefenstern aus. Es steht weniger spektrale Information zur Verfügung, was sich in einem Anstieg der Fehlerbeiträge äußert.

Der Rauschfehler zeigt, wie in Kap. 6.2, eine nahezu höhenkonstante Verteilung mit ca. 5 % zwischen 11 und 29 km. Darunter findet ein Anstieg bis 13 % statt. Wie auch beim reinen Wasserdampfretrieval ist der Rauschfehler in keiner der betrachteten Höhen die dominierende Fehlergröße.

In der vertikalen Verteilung des Parameterfehlers und dessen Einzelbeiträge (siehe

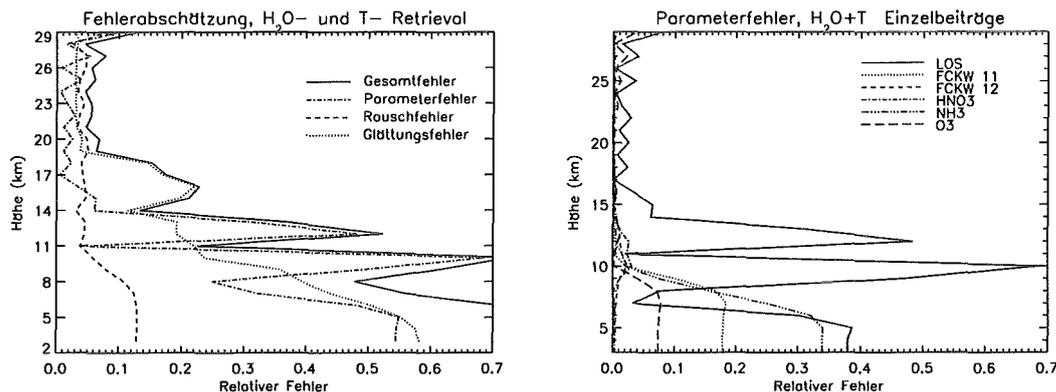


Abbildung 6.7: Abgeschätzter Gesamtfehler und Einzelbeiträge für simultane Ableitung von tropischen Wasserdampf- und Temperaturprofilen mit einem Messgitter von 3 km (links) und Beiträge der stärksten Störgrößen zum gesamten Parameterfehler (rechts)

Abb. 6.7, rechts) sieht man, wie der reduzierte Retrievalfehler der Temperatur auf den Gesamtfehler eingeht. Zwischen 16 und 28 km Höhe liegt er zum Teil unter 5 %. Erst unterhalb von 14 km erhöht der Beitrag der LOS-Unsicherheit den Fehler. Der Einfluss anderer Fehlergrößen wirkt sich in der unteren Troposphäre aus. Hier tragen vor allem die Fehlerbeiträge von FCKW 11, NO₂ und Ozon zum Parameterfehler bei. Durch die Verwendung anderer Auswertefenster ist auch die Liste der wichtigsten Stör gases etwas verändert. Zusätzlich zu den schon genannten Gasen tragen vor allem FCKW 12, HNO₃ und NH₃ zum Parameterfehler bei.

Der Glättungsfehler zeigt im Bereich der oberen Troposphäre und der Stratosphäre eine ähnliche Verteilung wie für das reine Wasserdampfretreival. Sein Beitrag liegt in der unteren Stratosphäre bei ca. 4 %. Zur Tropopause hin steigt sein Beitrag auf 22 %. Das lokale Minimum mit etwas über 10 % in 14 km Höhe kann, wie oben, durch starke, sehr gut auszuwertende Signale erklärt werden. Für Höhen unter 14 km nimmt der Glättungsfehler rasch zu. Er steigt bis auf Werte über 50 % in der unteren Troposphäre an. Die fehlende spektrale Information aufgrund der geringen Anzahl an Auswertefestern und der zunehmenden Opazität der Atmosphäre wirkt sich negativ auf die vertikale Auflösung aus.

Der große Fehlerbeitrag durch den Einfluss der LOS-Unsicherheit ist, wie schon angedeutet, auf Kompensationseffekte im Retrievalansatz zurückzuführen. In der unteren Troposphäre erschweren Sättigungseffekte im Spektrum das Retrieval. Diese Unsicherheit wird in darüberliegenden Schichten kompensiert und sorgt hier für große Abweichungen des Retrievalergebnisses vom tatsächlichen Profil. Vernachlässigt man die untersten Tangentenhöhen und betrachtet nur die Tangentenstufen in 11 km und darüber, so werden die Fehlerbeiträge des Parameterfehlers in der Troposphäre erheblich kleiner. Sie sind dann bis in eine Retrievalhöhe von 10 km kleiner als 10 %. In Abb. 6.8 ist die resultierende Fehlerbilanz und die Einzelbeiträge sowie der in seine wichtigsten Störgrößen aufgeteilte Parameterfehler dargestellt. Bei der iterativen Lösung der Retrievalgleichung werden diese Kompensationseffekte teilweise ausgeglichen.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Fehlerabschätzung bezieht sich auf die Ableitung von Wasserdampfprofilen unter Verwendung aller zur Verfügung stehenden Tan-

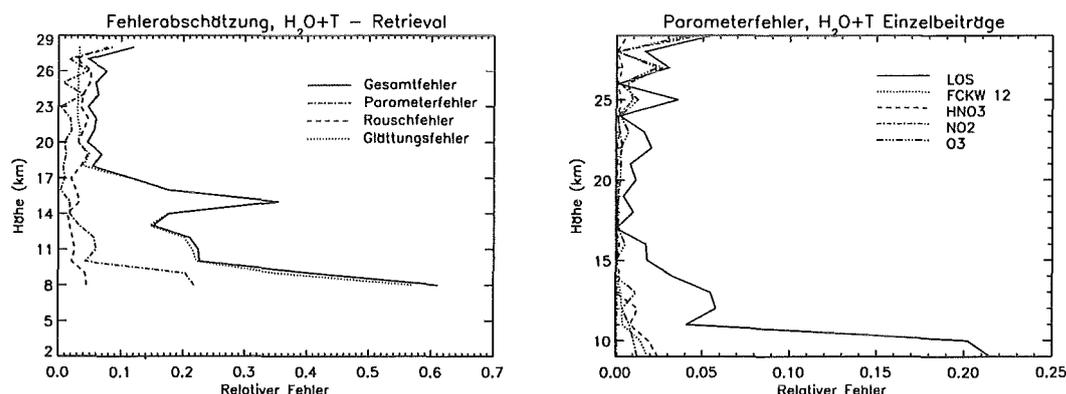


Abbildung 6.8: Wie Abb. 6.7, jedoch für einen verkleinerten Höhenbereich von 8 bis 29 km

gentenhöhen und Retrievalstufen. Daher wird im Folgenden stets der Fall betrachtet, dass das Retrievalgitter von 2 bis 29 km reicht.

Das Simultanretrieval hebt sich also vor allem durch einen geringeren Gesamtfehler in der oberen Troposphäre und der unteren Stratosphäre vom reinen Wasserdampfretrieval ab. Die gleichzeitige Anpassung der Temperatur reduziert den Fehlerbeitrag von Parameterfehler und Glättungsfehler. Die großen Beiträge des Parameterfehlers in der mittleren und unteren Troposphäre als Folge der LOS-Unsicherheit lassen sich durch Beschränkung des Messgitters auf Tangentenhöhen von 11 km aufwärts erheblich reduzieren.

6.4 Fehlerabschätzung für Retrieval im UT/LS-Modus

Für das MIPAS Experiment ist, neben einigen anderen ausgewählten Messszenarien, ein spezielles Tangentenhöhengitter für die UT/LS-Region vorgesehen. Dieses sieht vor, in der Tropopausenregion Messungen mit einem Abstand von 1,5 km zwischen den Tangentenhöhen durchzuführen. Durch die feinere Abstufung im Messgitter wird eine höhere vertikale Auflösung und folglich ein geringerer Glättungsfehler erreicht. Es soll nun eine Fehlerabschätzung für die Messungen im UT/LS-Modus gemacht werden, mit dem Ziel, die Besonderheiten aufzuzeigen und den Nutzen dieser speziellen Anwendung zu unterstreichen.

Für die Fehlerabschätzung werden dieselben Annahmen für die Modellatmosphäre verwendet wie oben. Das gewählte Tangentenhöhengitter erstreckt sich in 1,5 km-Schritten von 5 bis 27,5 km und das Retrievalgitter reicht, wie beim Standardfall, in 1 km-Schritten von 3 bis 29 km Höhe. Das Messgitter des UT/LS-Modus bietet, auf Kosten der Information über die mittlere und obere Stratosphäre und die Mesosphäre, die doppelte Anzahl an Tangentenhöhen wie sie für die Standard-Messszenarien gegeben sind. Die zur Auswertung benötigten Auswertefenster werden auf der Basis der Okkupationsmatrizen, die für das Messungen im Standardmodus verwendet werden, ausgewählt. In den zusätzlichen Tangentenhöhen, die die Abstände zwischen den Stufen des groben Standardgitters halbieren, werden die vorhandenen Auswertefenster aus einer Tangentenhöhe des Standardgitters auch auf das Spektrum der nächsthöheren Tangentstufe angewendet. Für die Tangentstufe in 6,5 km Höhe gelten dann dieselben Auswertefenster wie im Spek-

trum aus 5 km Tangentenhöhe. In 9,5 km Höhe sind die Auswertefenster identisch mit denen in 8 km Höhe, usw..

Für diese angepasste Okkupationsmatrix ist die Anzahl der Auswertefenster und der anzupassenden Parameter die gleiche wie für den Standardfall. Die Anzahl der zur Verfügung stehenden Messwerte des Spektrums im Vektor \vec{y} verdoppelt sich. Es wird erwartet, dass die zusätzliche spektrale Information, die eine erhöhte Anzahl an spektralen Stützstellen bietet, einen erkennbaren Einfluss auf das Ergebnis zeigt. Unter anderem ist zu erwarten, dass die Beiträge von Rausch- und Glättungsfehler abnehmen [Hase, 2000].

6.4.1 Wasserdampfretreival im UT/LS-Modus

In Abb. 6.9 sind der geschätzte Gesamtfehler für die Ableitung eines tropischen Wasserdampfprofils aus Messungen im UT/LS-Modus dargestellt. Der vertikale Verlauf des Gesamtfehlers ähnelt dem Verlauf, der für Messungen im Standardmodus abgeschätzt wurde. In der unteren Stratosphäre und der oberen Troposphäre liegt der ermittelte Gesamtfehler unter den Werten des Standardfalls.

Der Rauschfehler ist weitgehend konstant in allen Höhen. Wie schon erwartet liegen seine Werte mit etwa 3 % deutlich unter den Werten des Standardszenarios. Der Glättungsfehler zeigt ebenfalls einen ähnlichen Verlauf wie im Standardfall mit kleineren Fehlerbeiträgen. Die feinere Abstufung im Messgitter führt zu einer höheren vertikalen Auflösung und damit zu einer Reduktion des Glättungsfehlers. Der Parameterfehler wird auch hier durch die Unsicherheiten im Temperaturprofil und in der LOS dominiert. In 11 km Höhe trägt der Fehlerbeitrag der LOS mit fast 30 % sehr stark zum Gesamtfehler bei. Die Fehlerbeiträge in der Hygro- und Tropopausenregion sind mit maximal 6 % kleiner als der Parameterfehler von nahezu 10 % im Standardfall.

Die deutlich größere Anzahl an spektralen Messwerten und die feinere Abstufung im Messgitter führt für den Fall des Wasserdampfretreivals zu einem Fehlerbudget, das vor allem in Höhen oberhalb von 14 km von dem größeren Informationsgehalt verglichen mit dem Standardfall profitiert. Der Gesamtfehler und auch die Einzelbeiträge nehmen hier niedrigere Werte an.

6.4.2 Wasserdampf- und Temperaturretrieval im UT/LS-Modus

Wie schon für das Standardszenario wird zusätzlich zum reinen Wasserdampfretreival das Simultanretreival von Temperatur und Wasserdampf betrachtet. Auch für diesen Fall erhofft man sich einen positiven Einfluss des höher aufgelösten Messgitters auf das Ergebnis. Das Ergebnis dieser Fehlerbetrachtung ist in Abb. 6.10 in der bekannten Darstellungsweise gezeigt.

Im Höhenbereich zwischen 14 und 28 km gleicht der Verlauf des Gesamtfehlers der Verteilung für das Standardszenario. Unterhalb von 14 km zeigt sich eine Abnahme des Gesamtfehlers gegenüber dem Retrieval im 3 km-Gitter. Grund hierfür ist der deutlich kleinere Parameterfehler, der Werte von 20 % in 13 km Höhe und 30 bis 40 % in Höhen unter 10 km annimmt. Das Messgitter ermöglicht hier eine bessere Erfassung des Wasserdampf- und des Temperaturprofils. Der wichtigste Grund für den großen Fehler als Folge der LOS-Unsicherheit, der starke Gradient im Wasserdampfprofil, wird im feinen Messgitter durch

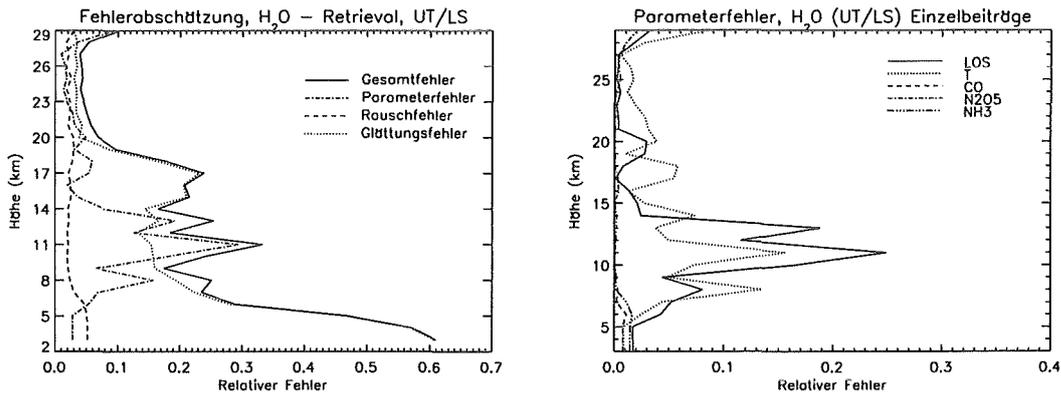


Abbildung 6.9: Abgeschätzter Gesamtfehler und Einzelbeiträge für die Ableitung von tropischen Wasserdampfprofilen mit einem Messgitter im UT/LS-Modus (links) und Beiträge der stärksten Störgrößen zum gesamten Parameterfehler (rechts)

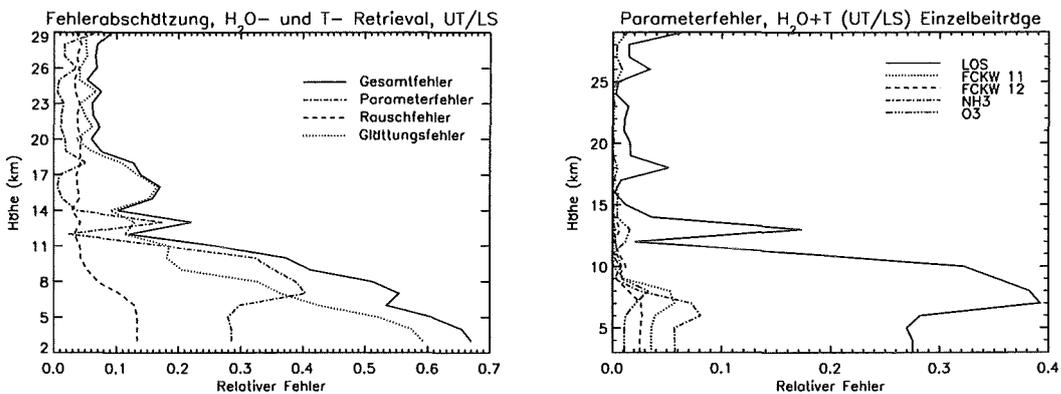


Abbildung 6.10: Abgeschätzter Gesamtfehler und Einzelbeiträge für die simultane Ableitung von tropischen Wasserdampf- und Temperaturprofilen mit einem Messgitter im UT/LS-Modus (links) und Beiträge der stärksten Störgrößen zum gesamten Parameterfehler (rechts)

das Simultanretrieval besser erfasst als im Standard-Messgitter und tritt somit schwächer im Fehlerbudget auf.

Der Gesamtfehler steigt unterhalb von 11 km stark an. Die größere Anzahl an Tangentenhöhen kann in der mittleren und unteren Troposphäre der Tropen den Fehlereinfluss der zunehmenden optische Dicke nicht ausgleichen. In diesen Höhen ist nur bedingt mit zufriedenstellenden Ergebnissen zu rechnen.

Bei Messungen im UT/LS-Gitter reduziert sich, wie erwartet, der Gesamtfehler für die beiden betrachteten Retrievalansätze. Alle Fehlergrößen werden bei Verwendung des feineren Tangentenhöhengitters verringert. Auch für Messungen im UT/LS-Modus zeigt sich, dass das Simultanretrieval bis in die obere Troposphäre in niedrigeren Gesamtfehlern gegenüber dem reinen Wasserdampfretrieval resultiert.

6.5 Bewertung der unterschiedlichen Retrievalansätze

Nachdem nun die einzelnen, untersuchten Retrievalszzenarien dargestellt wurden, werden diese verglichen und untereinander bewertet. Zunächst werden die Fehlerbudgets der Messungen im Standardmodus miteinander verglichen. Anschließend werden dann die Unterschiede und Gemeinsamkeiten zum Fehlerbudget der Messungen UT/LS-Modus aufgezeigt.

6.5.1 Vergleich des reinen Wasserdampfretrievals mit dem simultanen Wasserdampf- und Temperaturretrieval

Betrachtet man die abgeschätzten Gesamtfehler für das reine Wasserdampfretrieval und das Simultanretrieval mit der Temperatur als zweite gesuchte Größe (siehe Abb. 6.5 und 6.7), so fallen schnell Gemeinsamkeiten und Unterschiede auf. Die vertikale Verteilung des Gesamtfehlers ist in beiden Fällen sehr ähnlich. Die untere Stratosphäre zeigt geringe Gesamtfehler mit weniger als 10 % relativem Fehler. In der Tropopausenregion steigt in beiden Szenarien der Fehler aufgrund des erhöhten Glättungsfehlers und des zunehmenden Einflusses des Parameterfehlers an. In beiden Fällen ist der Einfluss der Kovarianzmatrix S_{x_c} auf den Glättungsfehler zu erkennen. Unterhalb von 14 km steigt der Gesamtfehler im Falle des Simultanretrievals stärker an.

Bei genauer Betrachtung sieht man, dass in der unteren Stratosphäre der gesamte Fehler für das reine Wasserdampfretrieval geringfügig höher liegt als der für das Simultanretrieval. Gerade in der Höhe der angenommenen Hygropause, bei etwa 20 km, liegt der Fehler für das Simultanretrieval deutlich unter dem des Einzelretrievals. Auch darunter, in der Tropopausenregion, bis ca. 14 km ergibt die Fehlerabschätzung für das Simultanretrieval kleinere Fehler. Unterhalb von 14 km ist es umgekehrt. Hier ergeben sich im Standard-Modus für das reine Wasserdampfretrieval geringere Fehlerbeträge.

In der Tropopausenregion und der darüberliegenden unteren Stratosphäre ist der Rauschfehler des Simultanretrievals etwas größer. Dies wird jedoch durch die geringeren Beiträge des Glättungs- und des Parameterfehlers kompensiert. Unterhalb von etwa 14 km steigen der Glättungsfehler und vor allem der Parameterfehler, als Folge der hohen Beiträge der LOS-Unsicherheit, deutlich an. Eine Ursache für diesen starken Beitrag ist die Tatsache, dass die verwendete LOS-Unsicherheit mit 300 m verhältnismäßig groß gewählt ist. Für die Ableitung der LOS aus den gemessenen Spektren wird eine Unsicherheit von ca. 150 m erwartet, wodurch sich ein erheblich geringerer Fehlerbeitrag im Ergebnis ergibt. Es wurde gezeigt, dass für das Simultanretrieval der Parameterfehler als Folge der LOS-Unsicherheit durch Vernachlässigung der untersten Tangentenhöhen erheblich reduziert wird.

Es ist anzumerken, dass für die natürliche Variabilität des Wasserdampfprofils in der oberen Troposphäre mit 50 % relativer Unsicherheit ein verhältnismäßig hoher Wert gewählt wurde. Wie in Kap. 2 beschrieben, stellt die hier verwendete thermische Tropopause keine scharfe Grenze zwischen den Atmosphärenschichten dar, sondern es existiert eine Übergangsschicht zwischen der Obergrenze der hochreichenden Konvektion in ca. 13 bis 14 km und der thermischen Tropopause [Atticks and Robinson, 1983]. In dieser Schicht wird eine deutliche Stabilisierung der Atmosphäre beobachtet [Highwood and Hoskins, 1998]. Man kann also davon ausgehen, dass die Variabilität in dieser Schicht schwächer ist

als für die Fehlerabschätzung angenommen. Der Glättungsfehler wird in diesem Höhenbereich folglich geringer ausfallen und den Gesamtfehler reduzieren. Das Szenario des simultanen Retrievals wird, aufgrund des niedrigeren Parameterfehlers in der TTL, Vorteile beim Retrieval in der UT/LS-Region bieten.

Die starke Zunahme des Gesamtfehlers unterhalb von 14 km im Simultanretrieval gegenüber dem Fehler im reinen Wasserdampfretreival scheint gegen diesen Ansatz zu sprechen. Beachtet man jedoch die beobachtete Obergrenze der oben angesprochenen hochreichenden Konvektion, so sieht man, dass unterhalb von 13 km mit hoher Wahrscheinlichkeit konvektive Bewölkung auftritt. Werden bei einer Messung durch das FOV Wolken erfasst, so ist aufgrund der veränderten Strahlungsübertragung ein Retrieval nicht mehr möglich. Unterhalb von 13 km ist in den Tropen im Bereich der innertropischen Konvergenzzone mit wenigen verwertbaren Messungen zu rechnen, weswegen die schlechtere Leistungsfähigkeit des Simultanretrievals in der mittleren und unteren Troposphäre nicht ins Gewicht fällt.

Aus dem Vergleich der abgeschätzten Fehler kann gefolgert werden, dass eine simultane Ableitung von Wasserdampf und Temperatur in der unteren Stratosphäre und vor allem in der Hygropausen- und der Tropopausenregion bessere Ergebnisse erwarten lässt als ein reines Wasserdampfretreival.

6.5.2 Vergleich der Retrievals im Standard- und im UT/LS-Messszenario

Der Einsatz des speziellen, feiner abgestuften UT/LS-Szenarios bei der Messung in der Tropopausenregion wirkt sich, wie erwartet, positiv auf die Fehlerbilanz aus. Vor allem in der Tropopausenregion fällt der Gesamtfehler niedriger aus als im Standardszenario.

Für das Retrievalschema mit einem reinen Wasserdampfretreival ergibt sich im UT/LS-Modus in der unteren Stratosphäre oberhalb von 20 km ein geringerer Gesamtfehler als für das Standardszenario. Alle Fehlerbeiträge werden hier durch das feinere Messgitter reduziert. Auch in der Tropopausenregion und der oberen Troposphäre bis in eine Höhe von 11 km erhält man für das spezielle Szenario niedrigere Werte im Fehlerbudget. Vor allem der reduzierte Glättungsfehler als stärkste Fehlergröße führt hier zu besseren Ergebnissen. Unterhalb von 14 km wächst der Fehler im UT/LS-Modus durch einen starken Anstieg des Parameterfehlers an. Hier sorgen vor allem der erhöhte Fehlerbeitrag durch die Unsicherheit von LOS und Temperatur für die Zunahme. Für die Region der oberen Troposphäre und der unteren Stratosphäre bietet das UT/LS-Szenario eine Verbesserung von bis zu 5 % im Fehlerbudget gegenüber Messungen im 3 km-Gitter.

Oben wurde gezeigt, dass die simultane Ableitung von Wasserdampf- und Temperaturprofilen bessere Ergebnisse, vor allem in der Tropopausenregion erhoffen lässt. Für das Simultanretrieval im UT/LS-Messszenario ergibt sich im Bereich der unteren Stratosphäre keine Verbesserung im Gesamtfehler. Der leicht erhöhte Beitrag des Glättungsfehlers verhindert hier eine Reduktion des Gesamtfehlers und er liegt in beiden Fällen bei 8 %. In der Tropopausenregion, unterhalb von etwa 18 km wirkt sich die höher aufgelöste Messung jedoch deutlich auf das Ergebnis des Simultanretrievals aus. An der Tropopause liegt der Gesamtfehler im UT/LS-Modus mit abgeschätzten 17 % Gesamtfehler deutlich unter dem Fehler im Standardmodus, der 23 % beträgt. Auch der starke Anstieg bei 14 km im Parameterfehler wird durch das veränderte Messgitter deutlich von 52 auf 22 % reduziert.

Unterhalb von etwa 12 km steigt für beide betrachtete Messgitter der Gesamtfehler im Simultanretrieval stark an.

Vergleicht man abschließend die beiden Fehlerabschätzungen für die Messungen im UT/LS-Modus, so ist das reine Wasserdampfretreival in Höhen über 21 km etwas besser. Von der Hygropause abwärts jedoch zeichnet sich der Ansatz des Simultanretrievals als geeigneter aus. Die abgeschätzten Fehler für den Bereich der Tropopause und der oberen Troposphäre bis in Höhen von etwa 11 km liegen zum Teil deutlich unter dem abgeschätzten Gesamtfehler des Einzelretrievals. Für Messungen im UT/LS-Modus zeigt sich, wie für das Standardszenario, dass das Simultanretrieval für die Untersuchung der Tropopausenregion und der oberen Tropopause aus Sicht des Fehlerbudgets einige Vorteile gegenüber dem Ansatz des reinen Wasserdampfretreivals bietet.

6.6 Betrachtung der vertikalen Auflösung für die verschiedenen Szenarien

Neben der Fehlerabschätzung für ein ausgewähltes RetrievalszENARIO kann auch mit Hilfe der erreichbaren vertikalen Auflösung des Instruments die Qualität eines abgeleiteten Profils bewertet werden. Die Auflösungsmatrix \mathbf{A} , die mit Gl. (3.32) berechnet wird, liefert eine Abschätzung der erreichbaren vertikalen Auflösung. Die Auswirkung der vertikalen Auflösung auf das Ergebnis spiegelt sich über den Glättungsfehler auch im Fehlerbudget wieder. Aus der Kovarianzmatrix des Glättungsfehlers kann jedoch keine Aussage über die vertikale Auflösung gemacht werden, während die direkte Analyse der Auflösungsmatrix \mathbf{A} eine Abschätzung ermöglicht.

Die Funktion, die den Verlauf der Werte in einer Zeile der Matrix \mathbf{A} beschreibt, besitzt im Matrixelement a_{ii} ein Maximum, wobei die Funktionswerte zu den Elementen der Nebendiagonalen hin abnehmen. Die Breite des Funktionsverlaufs um dieses Maximum kann als Maß für das Auflösungsvermögen des Retrievals verwendet werden. Hier soll die so genannte Halbwertsbreite des Maximums in einer Zeile der Matrix als Abschätzung für die vertikale Auflösung verwendet werden. Die Halbwertsbreite ist die Breite, bei der die Funktion, die den interpolierten Verlauf der Werte in der Zeile beschreibt, halb so groß ist wie das Maximum. Es wird für jede Zeile der Matrix \mathbf{A} die Halbwertsbreite des Maximums bestimmt und damit auch die erreichbare vertikale Auflösung der entsprechenden Retrievalstufe abgeschätzt.

Der Einfluss des Messgitters auf die erreichbare vertikale Auflösung wird anhand der berechneten Auflösungsmatrizen für das Simultanretrieval in beiden betrachteten Messgittern dargestellt. In Abb. 6.11 sind die berechneten Auflösungsmatrizen für das Retrieval mit Messungen im Standardmodus und im UT/LS-Modus dargestellt. Die horizontale Achse gibt die atmosphärische Höhe an, während die vertikale Achse die Retrievalhöhe angibt. Die Farben geben den Wert des entsprechenden Elements nach der Farbskala an. In beiden Abbildungen erkennt man die auffällige Bandstruktur im oberen Teil der Matrix. Die Spalte dieser Matrix gibt die Antwort des Retrievals auf eine δ -Störung in dieser Höhe und die Zeilen geben an, aus welchen Höhen Information in das Retrievalergebnis einfließt. Hier ist die Struktur der Matrix wie man sie erwartet: Maxima entlang der Hauptdiagonalen mit abnehmenden Werten zu den Nebendiagonalen hin.

Geht man entlang der vertikalen Achse von großen Höhen zu niedrigeren und betrach-

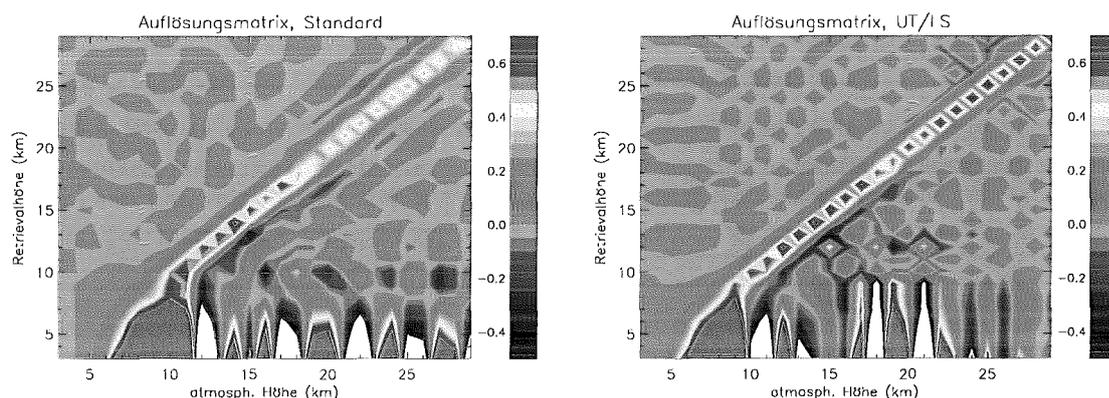


Abbildung 6.11: Auflösungsmatrizen für ein gleichzeitiges Retrieval von Wasserdampf und Temperatur für ein Standard-Messscenario (links) und eine Messung im UT/LS-Modus

tet man die jeweiligen Zeilen, so sieht man am Verlauf der Werte in den einzelnen Zeilen, dass unterhalb von 14 km die Bandstruktur mit abnehmender Höhe verloren geht. Hier treten abseits der Hauptdiagonalen Nebenmaxima auf, die andeuten, dass hier auch Informationen aus anderen, über der betrachteten Retrievalstufe liegenden Schichten zum Ergebnis beitragen und dieses beeinflussen. Negative Werte bei Elementen bedeuten, dass sich eine positive Variation in dieser Höhe durch eine Reaktion mit negativem Vorzeichen im Ergebnis äußert. Unterhalb von 10 km treten die Maxima der Funktionen, die die Zeilen der Matrix beschreiben, nicht mehr in der Hauptdiagonalen auf, sondern in Höhen, die über der Schicht liegen. Das ist die Reaktion auf Sättigungseffekte im Spektrum, d.h. die Opazität der Atmosphäre. Die Strahlung aus der entsprechenden Schicht wird zum großen Teil auf dem Weg zum Messgerät absorbiert. Das Messgerät misst bei niedrigen Tangentenhöhen nicht die Strahldichte aus dieser Schicht, sondern vorwiegend Strahlung, die aus Schichten stammt, die über der Tangentenhöhe liegen (siehe auch Abb. 6.4).

Betrachtet man die Spalten der Matrix, so sieht man, dass die Retrievalergebnisse in niedrigen Schichten, unterhalb von 10 km, sehr stark von den Beiträgen der höher gelegenen Schichten beeinflusst werden. Neben den Maxima in der Retrievalhöhe, die der Position der Spalte in der Matrix entspricht, finden sich auch für Elemente, die niedrigen Höhen zuzuordnen sind, Werte mit großen Beträgen und negativen und positiven Vorzeichen. Das zeigt, dass eine Variation in einer größeren Höhe eine sehr starke Reaktion in den Ergebnissen der untersten Retrievalhöhen hervorruft. Dies ist ein Hinweis, dass Messungen in den niedrigen Tangentenhöhen des untersuchten Szenarios von starken Sättigungseffekten und der Opazität der Atmosphäre in den verfügbaren Spektralbereichen begleitet werden.

Aus der Struktur der Matrizen in Abb. 6.11 ist zu folgern, dass in einer tropischen Atmosphäre, wie sie hier angenommen wird, unterhalb von 10 km aufgrund der Opazität der Atmosphäre ein Wasserdampfretrieval keine sinnvollen Ergebnisse liefert. Bei der verwendeten Modellatmosphäre zeigt die Auflösungsmatrix für Höhenstufen zwischen 10 und 13 km im Ergebnisvektor \vec{x} jeweils starke Sensitivität auf die Beiträge der darüberliegenden Schichten.

In den betrachteten Fällen ermöglicht die Auswertung der Auflösungsmatrix für Höhen oberhalb von 13 km eine gute Abschätzung der vertikalen Auflösung. Beide Matrizen in

Abb. 6.11 liefern mit der Bandstruktur für Stufen oberhalb von 14 km die Möglichkeit, die Auflösung durch Bestimmung der Halbwertsbreite abzuschätzen. Vergleicht man die Matrizen, so erkennt man, dass die Maxima im Fall der Messung im UT/LS-Modus größere Werte aufweisen als für den Fall der Messung im Standardmodus. Die Maxima des UT/LS-Szenarios sind zudem schmaler und deuten auf eine höhere vertikale Auflösung hin. In Abb. 6.12 ist für jede Retrievalhöhe die vertikale Auflösung dargestellt, wie sie über die Halbwertsbreite des Maximums einer Zeile der Matrix **A** bestimmt wird. Dargestellt sind die Ergebnisse für alle vier betrachteten Szenarien.

Die Ergebnisse für Höhen unter 14 km werden aus den oben genannten Gründen nicht beachtet. Zum Teil liegen hier die Maxima, deren Halbwertsbreiten bestimmt wurden, nicht auf der Hauptdiagonalen, sondern in Bereichen, die über der zugehörigen Retrievalhöhe liegen. Für Retrievalhöhen, die zwischen 14 und 17 km liegen, ist die vertikale Auflösung mit Werten um 2 km besser, als für die Bereiche der unteren Stratosphäre oberhalb von 17 km. Der Einfluss des troposphärischen Temperatur- und Wasserdampfprofils erzeugt hier deutlich stärkere Signale, aus denen mehr Information über den vertikalen Verlauf des Wasserdampfprofils gewonnen werden kann. Im Bereich der unteren Stratosphäre fällt auf, dass das Simultanretrieval für das Messszenario im Standardmodus (gestrichelte Linie) mit etwa 2,5 km bereits eine bessere Auflösung erreicht, als das reine Wasserdampfretrieval sowohl im Standardmodus (gepunktete Linie) als auch im UT/LS-Modus (Strich-Punkte). Die Verwendung des feineren Messgitters bietet, wie zu erwarten war, eine deutlich höhere vertikale Auflösung. Die berechnete Auflösung liegt hierbei für das Simultanretrieval zwischen etwa 1,5 und 1,9 km.

Nimmt man die erreichbare vertikale Auflösung als Auswahlkriterium für das geeignete RetrievalszENARIO, so kommt man zum selben Schluss, wie auch schon mit den Ergebnissen der Fehlerbetrachtung. Das Simultanretrieval liefert eine höhere vertikale Auflösung im Höhenbereich der UT/LS-Region. Die Verwendung eines feiner abgestuften Messgitters mit dem halben Gitterabstand des Standardszenarios hat einen erheblichen Einfluss auf die vertikale Auflösung.

6.7 Folgerungen aus der Fehlerabschätzung für MIPAS

Die Fehlerabschätzungen für ausgewählte Retrieval- und Messszenarien mit dem MIPAS-Instrument in einer tropischen Modellatmosphäre sollen die Entscheidung für das geeignete Verfahren erleichtern.

In mehr als 80 % aller Messungen wird MIPAS im Standardmodus messen. Hierbei werden bis in die obere Stratosphäre Messungen mit einem 3 km-Gitter durchgeführt. Die Fehlerabschätzung für die Ableitung tropischer Wasserdampfprofile aus Messungen im Standardmodus hat gezeigt, dass die Hinzunahme der Temperatur als zusätzliche anzupassende Größe in der UT/LS-Region zu einem reduzierten Gesamtfehler führt. Besonders im Höhenbereich der Hygropause, der Tropopause und der oberen Troposphäre bzw. TTL bis in Höhen von etwa 14 km ergibt sich eine verbesserte Fehlerbilanz durch reduzierte Fehlerbeiträge aus Glättungsfehler und Parameterfehler. Der höhere Gesamtfehler für Höhen unterhalb von etwa 14 km, der für das Simultanretrieval abgeschätzt wird, kann in der Auswertung akzeptiert werden, da in der tropischen Atmosphäre bis in etwa 13 – 14 km Höhe mit hochreichender Konvektion und Wolken zu rechnen ist. Bei Präsenz von

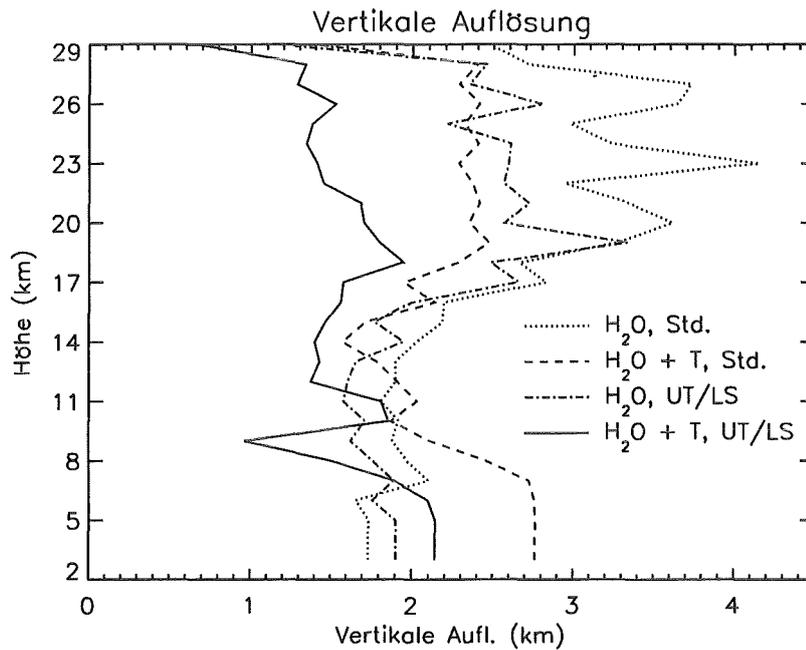


Abbildung 6.12: Mit Hilfe des Kriteriums der Halbwertsbreite berechnete vertikale Auflösung in allen Retrievalhöhen. Dargestellt sind die Ergebnisse für alle betrachteten Mess- und Retrievalszzenarien.

nicht vernachlässigbar optisch dicken Wolken im FOV ist ein Retrieval nicht mehr möglich. Auch die Analyse der Auflösungsmatrix zeigt, dass die Opazität der Atmosphäre unterhalb 14 km das Ergebnis beeinflusst. Am Beispiel des Simultanretrievals wurde gezeigt, dass der Parameterfehler in der mittleren Troposphäre deutlich reduziert wird, wenn bei der Auswertung die unteren Tangentenhöhen unterhalb von 11 km nicht verwendet werden.

Die Abschätzung der erreichbaren vertikalen Auflösung bestätigt das Ergebnis der Fehlerabschätzung. Das Simultanretrieval ermöglicht bei gleichem Mess- und Retrievalgitter mit etwa 2,5 km eine deutlich bessere vertikale Auflösung als das reine Wasserdampfretreival. Hier wird in der unteren Stratosphäre ein Auflösungsvermögen von 3 bis 4 km erreicht.

Neben den Messungen im Standardbetrieb ist unter anderem auch ein spezieller Messmodus für die UT/LS-Region vorgesehen, bei dem in der Tropopausenregion und der unteren Stratosphäre die Messungen auf einem Gitter mit 1,5 km Abstufung durchgeführt werden. Hier zeigt sich, wie auch schon für das Retrieval im Standardmodus, dass die simultane Anpassung des Wasserdampfprofils und der Temperatur einen Gewinn an Genauigkeit im Ergebnis liefert. Auch hier ist die erreichbare vertikale Auflösung durch das Simultanretrieval besser als für das reine Wasserdampfretreival.

Sowohl im Standardfall als auch für Messungen im UT/LS-Messszenario bietet das simultane Retrieval von Wasserdampf und Temperatur einen niedrigeren Gesamtfehler und eine bessere vertikale Auflösung.

Kapitel 7

Untersuchung der Leistungsfähigkeit des HIRDLS-Experiments hinsichtlich der Ableitung von Wasserdampfprofilen

Wie für MIPAS schon beschrieben, ist ein fehlerfreies Retrieval nahezu unmöglich. Um einen Eindruck zu gewinnen, wie genau ein Ergebnis aus einem Retrieval mit Messungen von HIRDLS ist, wird ebenfalls eine Fehlerbetrachtung unternommen. Die Methodik zur Fehlerbetrachtung folgt der Retrievalstrategie, die am National Center for Atmospheric Research (NCAR) für die Auswertung der Messungen vorgesehen ist. Für die Fehlerabschätzung werden Werkzeuge und Algorithmen verwendet, die am NCAR vorhanden sind bzw. die während eines Forschungsaufenthalts auf der Basis des „HIRDLS-Level2 Algorithm Theoretical Basis Document“ [Lambert et al., 1999] entwickelt wurden. Die Retrievalstrategie und die für die Fehlerbetrachtung gemachten Annahmen unterscheiden sich für MIPAS und HIRDLS. Ein direkter Vergleich der Ergebnisse ist daher nicht unmittelbar möglich. Anhand eines Wasserdampfretrievals mit den hierfür vorgesehenen Kanälen 18 ($1387 - 1435 \text{ cm}^{-1}$) und 20 ($1422 - 1542 \text{ cm}^{-1}$) soll die Wirkung einiger Störgrößen untersucht werden. Für vereinfachte Annahmen wird ein Fehlerbudget erstellt.

Für die Fehlerabschätzung ist die Berechnung der erwarteten Strahldichten der einzelnen Kanäle sowie deren Jacobimatrizen notwendig. Die Berechnung der erwarteten Strahldichten in den HIRDLS Kanälen wird mit einem Modell durchgeführt, das auf dem hochaufgelösten Strahlungsübertragungs-Code GENLN2 [Edwards, 1992] basiert. Die Berechnung der Absorptionskoeffizienten wird durch sogenannte „Look-Up“-Tabellen beschleunigt. Hierbei sind die Absorptionskoeffizienten der einzelnen Gase für viele spektrale Stützstellen und unterschiedliche Druck- und Temperaturwerte vorberechnet und abgelegt. Der tatsächliche Absorptionskoeffizient wird dann für die gegebenen Druck- und Temperaturbedingungen für jede Stützstelle interpoliert. Die mit einer hohen spektralen Auflösung berechneten Strahldichten $I(\nu)$ werden dann nach Gl. (3.9) mit der Filterfunktion des Kanals $f(\nu)$ multipliziert und über das Spektralintervall $\Delta\nu$ integriert bzw. – da

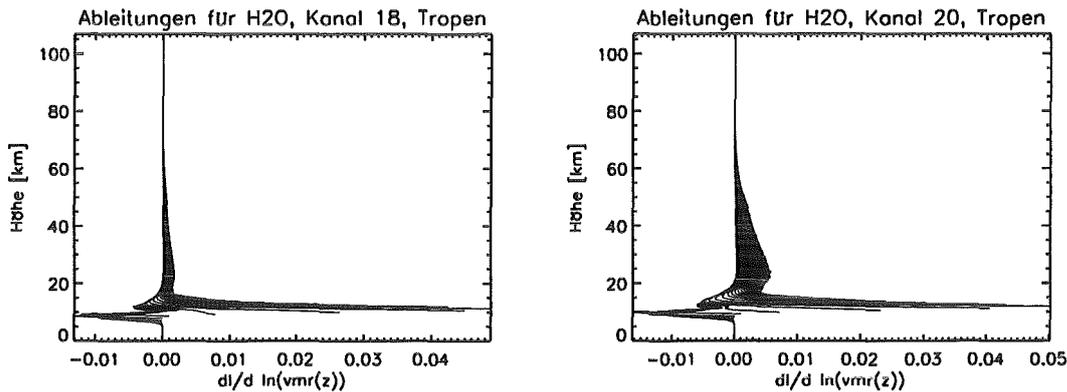


Abbildung 7.1: Zeilen der Jacobimatrizen mit den Ableitungen der gemessenen Strahldichte I nach dem Logarithmus des H_2O -Mischungsverhältnisses in Kanal 18 (links) und 20 (rechts)

es sich um diskrete Werte handelt – summiert. Man erhält dadurch einen Messwert pro Kanal und Tangentenhöhe.

Die Berechnung der Elemente der Jacobimatrix erfolgt analytisch. Die Sensitivität bezüglich der Mischungsverhältnisse der Gase bezieht sich auf deren natürlichen Logarithmus. Die einzelnen Elemente sind also mit $K_{i,j} = \frac{\partial y_i}{\partial \ln x_j}$ darstellbar.

In Abb. 7.1 sind die Zeilen der Jacobimatrizen für die Kanäle 18 und 20 bei den untersuchten tropischen Atmosphärenbedingungen dargestellt. In beiden Fällen ist die Sensitivität unterhalb der Tropopause am größten. Die geringeren Werte der Elemente für Tangentenhöhen im Tropopausenbereich sind eine Folge der niedrigen Temperaturen in dieser Höhe, die sich auf die resultierenden Strahldichten und deren Ableitungen auswirken. Oberhalb der Tropopause nehmen die Werte der Ableitungen wieder zu. Ab ca. 25 km Höhe nehmen die Werte allmählich ab. Kanal 20 zeigt in der unteren Stratosphäre deutlich größere Werte als Kanal 18. Hier wird die Rollenverteilung der beiden Kanäle deutlich: Kanal 18 dient der Erkundung der oberen Troposphäre während Kanal 20 Informationen über die stratosphärischen Bereiche liefert. Bei den troposphärischen Tangentenhöhen fallen die z.T. starken negativen Beiträge in Höhen über den Tangentenhöhen auf. Die Ursache hierfür sind Sättigungseffekte im Spektrum. Eine Erhöhung des Mischungsverhältnisses in diesen Stufen verringert die Strahldichte am Messgerät durch Selbstabsorption und Emission aus den kälteren Luftschichten der Tropopause.

Bei der Berechnung der Strahldichten wird das FOV nicht berücksichtigt, da die gemessenen Werte vor der Auswertung durch Entfaltung vom FOV-Einfluss befreit werden sollen. Dadurch wird der Rechenaufwand herabgesetzt und das Retrieval beschleunigt [Lambert et al., 1999].

7.1 Annahmen

Für das RetrievalszENARIO bei HIRDLS wird der Ansatz einer „maximum a posteriori“-Lösung [Rodgers, 2000] verwendet. Die Grundlage für die Fehlerabschätzung liefert dann die allgemeine Retrievalgleichung in Form von Gl. 3.29. Der Einfluss der Fehlergrößen auf das Retrieval wird wieder aufgeteilt in Rauschfehler, Glättungsfehler und Parameterfehler.

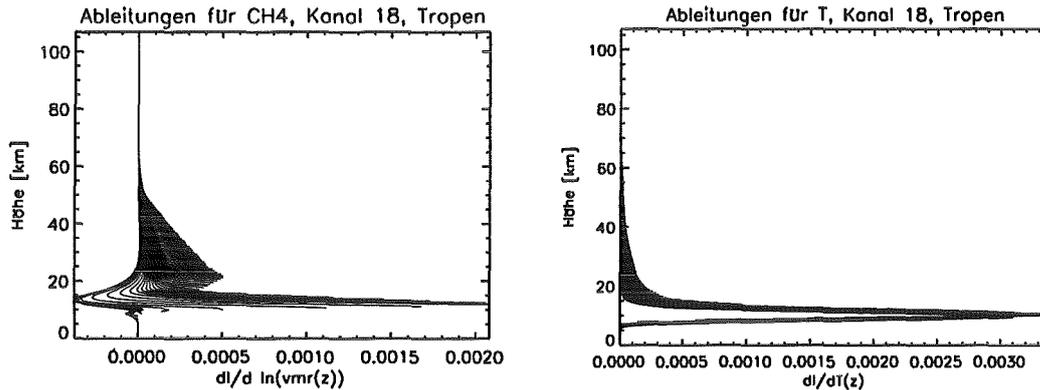


Abbildung 7.2: Zeilen der Jacobimatrizen mit den Ableitungen der gemessenen Strahldichte I nach dem Logarithmus des Mischungsverhältnisses des Störgases CH_4 und nach der Temperatur für Kanal 18

Für die „maximum a posteriori“-Lösung des Retrievals wird angenommen, dass der aktuelle Zustand der Atmosphäre mit einer gewissen Unsicherheit, repräsentiert durch die Matrix \mathbf{S}_a , bekannt ist. Bei der Berechnung der Kovarianz des Glättungsfehlers mit Gl. (3.33) ist daher die Matrix \mathbf{S}_{x_e} , die denselben Zustand beschreibt, identisch mit der *a priori* Kovarianzmatrix \mathbf{S}_a .

Die Berechnung der Kovarianzmatrix des Parameterfehlers erfolgt mit Gl. (3.31). Die höhenabhängigen Variationen im Vertikalprofil der Störgrößen werden durch die Kovarianzmatrix \mathbf{S}_b repräsentiert und durch die Jacobimatrix \mathbf{K}_b gewichtet. In Abb. 7.2 und Abb. 7.3 sind die Zeilen der Jacobimatrizen für die stärksten Störgrößen CH_4 und Temperatur dargestellt. Die gemessene Strahldichte zeigt die größte Sensitivität für Variationen in der Tangentenhöhe. Die Sensitivität der Strahldichte auf Störungen des Profils in Höhen, die deutlich oberhalb der Tangentenhöhe liegen, ist dagegen sehr klein. Die Verbindung zu Höhenstufen über der jeweiligen Tangentenhöhe durch \mathbf{K}_b erlauben eine detaillierte Behandlung der Reaktion auf Störungen im Profil \vec{b} . Für die untersten Tangentenhöhen, die hier in der tropischen Troposphäre liegen, sind die oben beschriebenen Sättigungseffekte zu erkennen. Dort treten in der Jacobimatrix niedrige Werte in der betrachteten Tangentenhöhe auf und größere und teilweise auch negative Werte in den Retrievalstufen, die über dieser Tangentenhöhe liegen. Das bedeutet, dass die gemessene Strahldichte für diese Tangentenhöhen maßgeblich auf Variationen in den darüberliegenden Luftschichten reagiert. Wie später noch gezeigt wird, wirken sich diese Sättigungseffekte auf die Fehlerbilanz aus.

Im Folgenden sollen die Ergebnisse der Fehlerabschätzung für die Ableitung von Wasserdampfprofilen unter tropischen Bedingungen betrachtet werden. Die atmosphärischen Bedingungen sind dieselben wie für die Untersuchung der Leistungsfähigkeit von MIPAS in Kap. 6. Anders als für die Fehlerabschätzung für MIPAS werden hier nur die bedeutendsten atmosphärischen Störgrößen für den Parameterfehler berücksichtigt: Temperatur, CH_4 , CO_2 und molekularer Sauerstoff (O_2).

Die *a priori* Kovarianzmatrix, die in das Retrieval mit der „maximum a posteriori“-Lösung einfließt, wird mit Hilfe von Gl. 3.34 erstellt. Hierbei werden die Unsicherheit σ_{x_a} des Wasserdampfs und die Korrelationslänge l in allen Höhen konstant gehalten. In Tab. 7.1 sind die verwendeten Unsicherheiten für Wasserdampf und die betrachteten Störgrößen

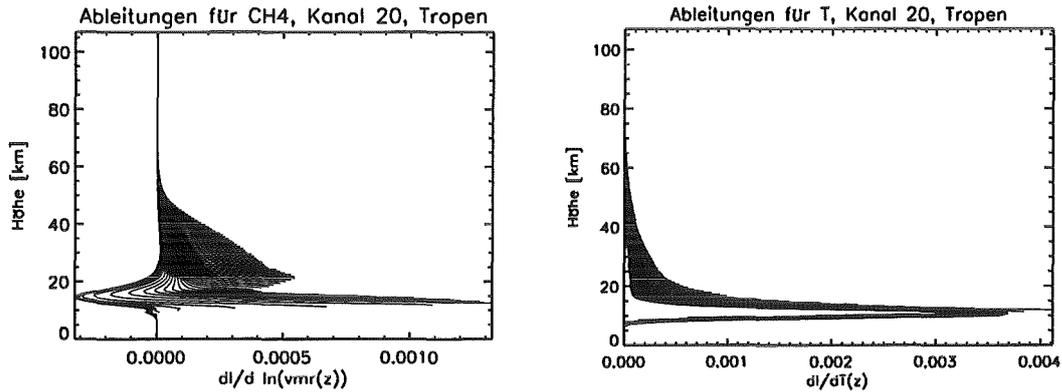


Abbildung 7.3: Zeilen der Jacobimatrizen mit den Ableitungen der gemessenen Strahldichte I nach dem Logarithmus des Mischungsverhältnisses des Störgases CH_4 und nach der Temperatur für Kanal 20. Jede Kurve stellt die Werte aus einer Zeile der jeweiligen Jacobimatrix dar.

dargestellt.

Die Kovarianz der Messung S_y wird durch eine Diagonalmatrix dargestellt, deren Diagonalelemente die Quadrate der nominellen Rauschwerte des jeweiligen Messkanals sind. In Tab. 7.2 sind die verwendeten Werte für das nominelle Rauschen für die verwendeten Wasserdampf-Kanäle aufgelistet. Die Annahme einer diagonalen Kovarianzmatrix ist gerechtfertigt, da die einzelnen Elemente des Messvektors \vec{y} unabhängig voneinander sind.

Die für die Berechnung der Kovarianzmatrix des Parameterfehlers benötigten Kovarianzmatrizen S_b werden auch mit Gl. (3.34) berechnet. Wie man in Tab. 7.1 sieht, sind die Varianzen der Störgrößen z.T. höhenabhängig. Die Korrelationslänge l wird jeweils konstant angenommen.

Das Fehlerbudget des Wasserdampfretrievals wird zunächst für jeden Kanal einzeln und anschließend für ein simultanes Retrieval mit beiden Kanälen aufgestellt.

$\sigma_{x,i}$ (H_2O)	0.75 ($z > 0\text{km}$)
$\sigma_{b,i}$ (CO_2)	0.005 ($z \leq 50\text{km}$) 0.03 ($z > 50\text{km}$)
$\sigma_{b,i}$ (CH_4)	0.03 ($z \leq 17\text{km}$) 0.03 ($z > 17\text{km}$)
$\sigma_{b,i}$ (O_2)	0.001 ($z > 0\text{km}$)
$\sigma_{b,i}$ (Temperatur)	1K ($z \leq 50\text{km}$) 2K ($z > 50\text{km}$)
Korrelationslänge l	$l = 1 \text{ km}$

Tabelle 7.1: Verwendete Unsicherheiten für die, in die Fehlerbetrachtung einfließenden, Modellparameter und deren Höhenabhängigkeit. Die Unsicherheiten der Gase sind relativ angegeben, die der Temperatur absolut in Kelvin.

	Kanal 18	Kanal 20
σ_i	$1.2 \times 10^{-4} \text{ W m}^2 \text{ sr}^{-1}$	$1.6 \times 10^{-4} \text{ W m}^2 \text{ sr}^{-1}$

Tabelle 7.2: Angenommenes radiometrisches Rauschen, wie es für die Kanäle 18 und 20 zur Bestimmung der Kovarianzmatrix \mathbf{S}_y verwendet wird.

7.2 Fehlerabschätzung für Kanal 18

Die Fehlerabschätzung wird zunächst für die Verwendung aller Retrievalstufen zwischen der 1000 hPa-Fläche und der 0.0001 hPa-Fläche verwendet. Die Umrechnung der Retrievalstufen aus den Druck-Flächen in die geometrischen Höhenstufen ergibt dabei einen Höhenbereich von 0,11 km bis 106,9 km. In Abb. 7.4 ist auf der linken Seite das geschätzte Fehlerbudget dargestellt. Betrachtet man die einzelnen Fehlerbeiträge, aus denen sich der Gesamtfehler zusammensetzt, so sieht man, dass der Parameterfehler den größten Beitrag zum Fehlerbudget liefert. Der Glättungsfehler hat mit Werten unter 5 % in der oberen Troposphäre und der unteren und mittleren Stratosphäre nur sehr geringen Anteil am Gesamtfehler. Nur oberhalb von 80 km dominiert die Glättung das Gesamtbudget. Hier besitzt die Auflösungsmatrix in den entsprechenden Elementen keine signifikanten Beiträge. Betrachtet man Gl. 3.33, so sieht man, dass die Kovarianzmatrix des Glättungsfehlers für kleine Werte in den Diagonalelementen der Matrix \mathbf{A} die Werte der *a priori* Kovarianzmatrix annimmt und somit die Unsicherheit des *a priori* Profils wiedergibt.

Der Rauschfehler liegt bei Werten zwischen 1 % in der oberen Troposphäre, 10 % in der unteren Stratosphäre und 30 % in der unteren Mesosphäre. Hier spiegelt sich das Signal-zu-Rauschverhältnis wider, das in der Troposphäre am größten ist und mit zunehmender Höhe abnimmt und damit den Einfluss des Rauschens verstärkt.

Der große Fehlerbeitrag des Parameterfehlers hat verschiedene Ursachen. Die hohe Empfindlichkeit des Retrievals auf Temperaturvariationen in der Tropopausenregion resultiert aus dem dortigen Temperaturminimum mit Werten unter 200 K. Die gemessene Strahldichte hängt direkt von der Temperatur der emittierenden Schichten ab. In kalten Regionen wie der tropischen Tropopause reagiert die Strahldichte stark auf Temperaturvariationen, da eine Variation um einen absoluten Wert bei niedrigen Temperaturen eine stärkere relative Änderung darstellt als bei hohen Temperaturen. Diese relative Temperaturänderung wirkt sich zusammen mit den niedrigen Wasserdampf-mischungsverhältnissen in einem großen relativen Fehlerbeitrag aus, da sich hier kleine Änderungen im Wasserdampfvolumenmischungsverhältnis als starke relative Änderung im Profil äußern.

Der sehr starke Anstieg des Parameterfehlers oberhalb von 40 km mit einem Maximalwert von über 500 % in 73 km Höhe ist eine Folge von Sättigungseffekten in der unteren Troposphäre. Eine Erklärung für diesen Effekt auf das Ergebnis ist die steigende Opazität der Atmosphäre, je niedriger die Retrievalstufen gewählt werden. Die zunehmende Sättigung macht das Spektrum mehr und mehr sensibel gegenüber Störungen in darüberliegenden Schichten. Gerade beim Wasserdampf, der unter tropischen Bedingungen starke Sättigung im Spektrum aufweist, treten z.T. sehr starke, teilweise auch negative Reaktionen auf Störungen in Schichten oberhalb der betroffenen Höhe auf. Dieses Verhalten wirkt sich über die Jacobimatrix auf die Elemente der verallgemeinerten Inversen \mathbf{G}_y aus. Hier erzeugen diese großen Werte abseits der Hauptdiagonalen starke Nebenmaxima in Zeilen

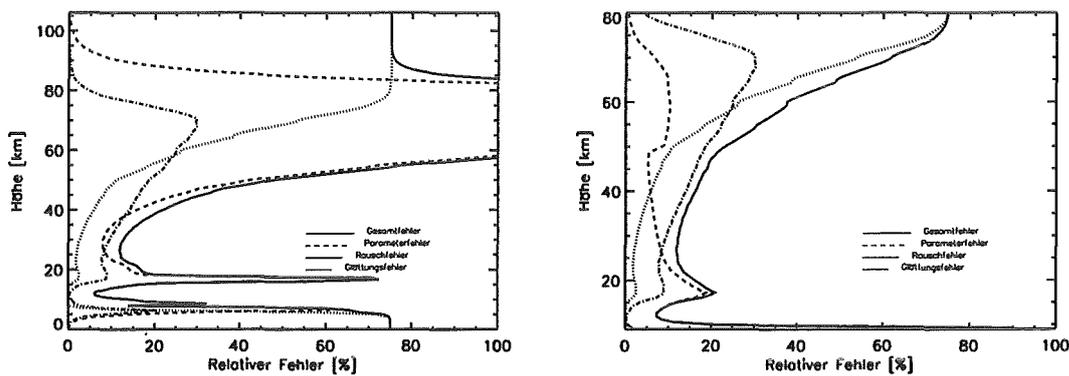


Abbildung 7.4: Abgeschätztes Fehlerbudget für Kanal 18. Dargestellt sind der Gesamtfehler und die Einzelbeiträge. Links das Fehlerbudget für das Retrieval mit allen Tangentenhöhen und rechts für den eingeschränkten Höhenbereich von 9,3 bis 80 km.

und Spalten der Matrix, die den Höhen der oberen Stratosphäre zuzuordnen sind. Die Jacobimatrizen K_b bezüglich der Störgrößen zeigen ebenfalls Sättigungseffekte. Über die Matrixoperationen der Fehlerabschätzung werden diese Beiträge der großen Nebenmaxima teilweise in die Hauptdiagonale der Kovarianzmatrix des Parameterfehlers hineintransformiert. Vor allem die hohe Sensitivität der Strahldichte auf Temperatur-Variationen tragen dabei zu den sehr großen Parameterfehlern oberhalb von 40 km bei.

Es ist naheliegend, den Einfluss der Opazität der untersten Atmosphäre durch eine geeignete Einschränkung der verwendeten Tangentenhöhen zu minimieren. Durch sukzessives Weglassen der untersten Retrievalhöhe ergibt sich eine neue untere Grenze, bei der eine deutliche Verbesserung des Fehlerbudgets erreicht wird. Die Verwendung der darunterliegenden Stufen erhöht das Fehlerbudget, das Weglassen weiterer Stufen darüber hat keine weitere Verbesserung im Gesamtfehler zur Folge.

Im nominellen Messmodus liegt die oberste Messhöhe bei 80 km. Daher wird die oberste verwendete Tangentenstufe von 106 auf 80 km herabgesetzt. Damit ergibt sich für den Kanal 18 ein neues Gitter, bei dem die oberste Retrievalhöhe der erste Gitterpunkt über $z = 80$ km ist und die unterste Retrievalstufe durch empirische Auswahl auf 9,3 km festgelegt wird.

Die rechte Grafik in Abb. 7.4 zeigt, wie sich die Fehlerverteilung durch Vernachlässigung der störenden Tangentenhöhen verändert. Beim direkten Vergleich der einzelnen Fehlerbeiträge sieht man, dass der Rausch- und der Glättungsfehler in den betrachteten Höhenstufen unverändert bleibt. Die Sättigungseffekte wirken sich durch die Fehlerfortpflanzung folglich nur auf den Parameterfehler aus. In Abb. 7.5 sind die Beiträge zum Parameterfehler für CH_4 und die Temperatur für den ursprünglichen Messvektor mit allen Tangentenpunkten und für den modifizierten Messvektor dargestellt. Für beide Störgrößen sieht man beim ursprünglichen Gitter ein Fehlermaximum in ca. 72 km Höhe. Der Fehlerbeitrag von CH_4 ist mit ca. 3 % gegenüber den 520 %, die durch die Temperaturunsicherheit hervorgerufen wird, vernachlässigbar.

Die Veränderung des Gitters verringert den Fehlerbeitrag durch Methan nur geringfügig. Lediglich das kleine Fehlermaximum in der Mesosphäre verschwindet. Das Feh-

lerprofil als Folge der Temperaturunsicherheit verändert sich dagegen völlig. Das Fehlermaximum in der Mesosphäre verringert sich auf 10 %. Das zweite Maximum in der Tropopausenregion verringert sich von ca. 70 % auf 20 %. Aufgrund der starken Emissionen, die zum größten Teil von den spektralen Strukturen des Wasserdampfs stammen, geht der Einfluss der Störgrößen in der oberen Troposphäre zurück und der Parameterfehler nimmt in der oberen Troposphäre ein Minimum an.

In 50 km Höhe fällt der Knick im Fehlerprofil des Temperaturfehlers auf. Hierbei handelt es sich um ein Artefakt der angenommenen Unsicherheit. Die angenommene Temperaturschwankung steigt hier abrupt von 1,0 auf 2,0 K in der oberen Atmosphäre an und führt zu einem erhöhten Fehlerbeitrag (siehe Tab. 7.1).

Der von Methan verursachte Fehler zeigt ein Maximum in der Hygropausenregion. Die Messungen in dieser Höhe zeigen eine erhöhte Sensitivität auf CH_4 -Variationen (siehe Abb. 7.2), die sich zusammen mit den niedrigen Wasserdampfmischungsverhältnissen in einem erhöhten Parameterfehler äußert. Die weiteren betrachteten Störgrößen CO_2 und O_2 liefern nur sehr geringe Beiträge zum Fehlerbudget. Da sie im Vergleich zum Einfluss von Temperatur und Methan vernachlässigbar sind, soll hier nicht näher darauf eingegangen werden.

Oberhalb von 72 km nimmt der Einfluss der atmosphärischen Störgrößen ab. Sowohl die gemessenen Strahldichten in Kanal 18 als auch die Elemente der Jacobimatrizen sind hier sehr klein. Aus den gemessenen Werten kann dort keine Information mehr über die Zielgröße Wasserdampf gewonnen werden. Das Ergebnis wird hier vor allem durch die Regularisierung bestimmt und strebt somit dem *a priori* Profil zu. Der Einfluss der Störgrößen verschwindet.

Der Fehlerbeitrag, der durch das Rauschen des Messgeräts hervorgerufen wird, zeigt wie alle Fehlerbeiträge ein Minimum in der oberen Troposphäre. Die Ableitungen der Strahldichte nach dem Wasserdampfgehalt steigen hier an, während der Wert des Rauschens im Kanal mit der Höhe konstant bleibt. Der Einfluss des Rauschens sinkt. In der Tropopausenregion steigt der Rauschfehler bis auf 10 % an und steigt dann bis zu einem relativen Fehler von 30 % in 70 km an. Die Zunahme ist das Resultat der abnehmenden Sensitivität für die Zielgröße, wodurch das Rauschen als Fehlergröße an Bedeutung gewinnt.

Oberhalb von 70 km fällt der Rauschfehler rasch ab. Die Werte in der Jacobimatrix gehen dort gegen Null. Als Folge dessen wird das Ergebnisprofil gegen den *a priori* Wert gezogen. Das Rauschen des Messgeräts hat kaum Einfluss auf das Ergebnis und der Rauschfehler verschwindet. Zwischen 25 und 60 km Höhe ist das Rauschen die dominierende Größe im Fehlerbudget. Unterhalb von 25 km übernimmt der Parameterfehler die Rolle der Hauptstörgröße.

Die dritte betrachtete Fehlergröße, der Glättungsfehler, zeigt einen typischen Verlauf mit niedrigen Werten in der unteren Atmosphäre und großen Werten oberhalb der Stratosphäre. Der geringe Fehlerbeitrag in der oberen Troposphäre und der Stratosphäre zeigt, dass hier die vertikale Auflösung sehr gut ist. Die Diagonalwerte der Auflösungsmatrix sind hier nahe eins und nach Gl. (3.33) resultiert das in einem kleinen abgeschätzten Glättungsfehler. Oberhalb von etwa 40 km nehmen die Werte in der Diagonalen der Auflösungsmatrix und damit die vertikale Auflösung ab. Folglich nimmt der Glättungsfehler zu. In etwa 70 km Höhe erreicht er sein Maximum mit 75 %. Dieser Wert entspricht der Unsi-

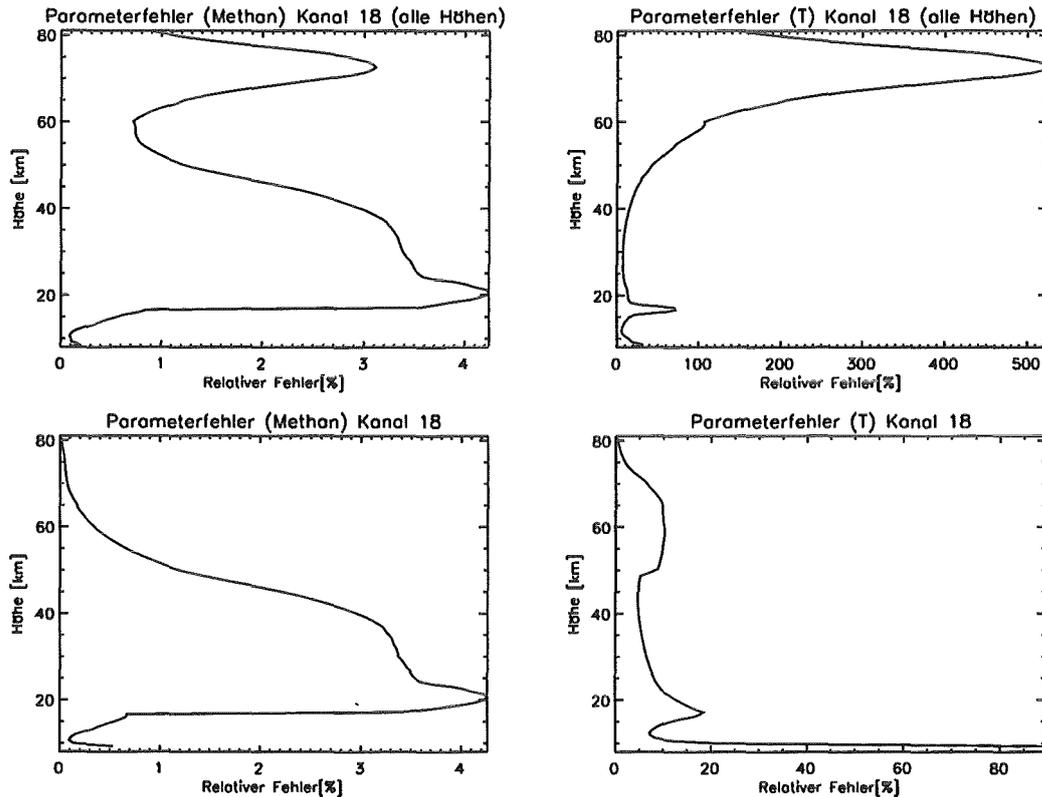


Abbildung 7.5: Beiträge von CH₄ (links) und Temperatur (rechts) zum Parameterfehler mit dem ursprünglichen (oben) und dem modifizierten Messgitter (unten)

cherheit, die in der *a priori* Kovarianz S_a für den Wasserdampf angenommen wird. Aus Gl. (3.33) sieht man, dass für sehr kleine Werte in der Auflösungsmatrix die Kovarianz des Glättungsfehlers gegen die *a priori* Kovarianz geht.

Wie oben beschrieben hängt das Fehlerbudget sehr stark vom abgedeckten Höhenbereich der im Retrieval verwendeten Messungen ab. Dieser Effekt tritt in verstärktem Maße bei Verwendung des Kanals 20 auf, da dieser Kanal eine höhere Sensitivität in der Stratosphäre besitzt. Auch beim gemeinsamen Retrieval mit den Kanälen 18 und 20 muss dieser Effekt berücksichtigt werden. Im Folgenden wird daher nicht mehr näher darauf eingegangen und es wird nur noch das modifizierte Retrievalgitter betrachtet.

7.3 Fehlerabschätzung für Kanal 20

Wie für Kanal 18 wird jetzt die Fehlerabschätzung für den zweiten Wasserdampf-Kanal bei HIRDLS, Kanal 20, durchgeführt. Der von Kanal 20 abgedeckte Spektralbereich zielt auf die Ableitung von Wasserdampfprofilen in der Stratosphäre ab [Edwards et al., 1995]. Es ist also zu erwarten, dass sich dieser veränderte Höhenbereich auch in den Vertikalverteilungen der Fehlerkomponenten widerspiegelt.

Nach den oben beschriebenen Auswahlkriterien wird der geeignete Höhenbereich für die Fehlerabschätzung von 9,9 km bis 80,5 km gewählt. In Abb. 7.6 sind der Gesamt-

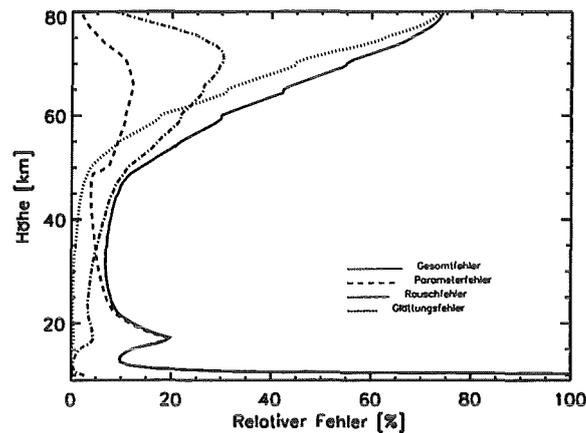


Abbildung 7.6: Abgeschätztes Fehlerbudget für Kanal 20. Dargestellt sind der Gesamtfehler und die Einzelbeiträge für den eingeschränkten Höhenbereich von 9,9 bis 80 km.

fehler und dessen Einzelbeiträge für das Retrieval eines tropischen Wasserdampfprofils dargestellt. Betrachtet man den Gesamtfehler, so sieht man, dass in der Stratosphäre der abgeschätzte Fehler mit weniger als 10 % in Höhen bis ca. 50 km deutlich kleiner ist, als der Gesamtfehler für Kanal 18. Wie erwartet dagegen der Fehler in der oberen Troposphäre etwas höher.

Der geschätzte Rauschfehler in der Stratosphäre ist mit etwa 5 % niedriger als in Kanal 18. In Abb. 7.1 sieht man, dass die Werte der Jacobimatrizen in Kanal 20 in der Stratosphäre größer sind als die für Kanal 18 berechneten Ableitungen. Der Kanal ist also sensitiver gegenüber Wasserdampfvariationen und reagiert weniger empfindlich auf den Einfluss des Rauschens. Das nominelle Rauschen ist im Kanal 20 etwas höher als im ersten betrachteten Wasserdampfkanal, aber die relative Änderung ist hierbei deutlich geringer als der Unterschied in den Ableitungen der beiden Kanäle. Zwischen 35 und 60 km liefert der Rauschfehler den stärksten Beitrag zum Gesamtfehler.

Die erhöhte Sensitivität spiegelt sich auch im niedrigeren Glättungsfehler wieder. Die für das betrachtete Szenario geschätzte vertikale Auflösung ist in der gesamten Stratosphäre hoch und hält den Beitrag des Glättungsfehlers bis 50 km unter 3 %. Oberhalb nimmt der Glättungsfehler stark zu und wird dort zur dominierenden Fehlergröße.

Einzig der Parameterfehler zeigt vergleichbare Werte und eine Vertikalverteilung wie sie für Kanal 18 abgeschätzt werden. Auch im Kanal 20 wird der Parameterfehler von der Temperatur dominiert. Die zweitstärkste berücksichtigte Störgröße, Methan, liefert mit maximal 1,4 % einen schwächeren Beitrag als im Kanal 18.

7.4 Fehlerabschätzung für ein simultanes Retrieval mit den Kanälen 18 und 20

Es stehen gleichzeitige Messungen aus zwei Wasserdampf-Kanälen zur Verfügung. Daher ist es naheliegend zu untersuchen, wie sich ein simultanes Retrieval unter Verwendung beider Kanäle in der Fehlerbilanz auswirkt. Hierzu werden die beiden separaten Messvek-

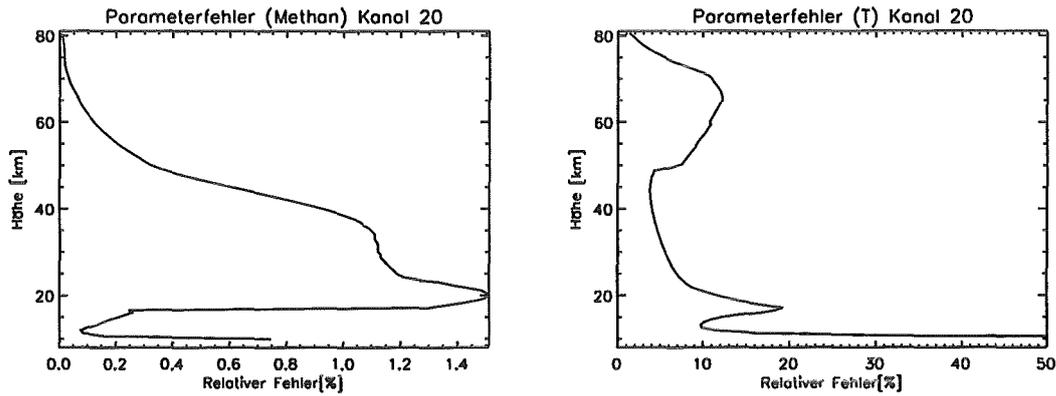


Abbildung 7.7: Beiträge von CH_4 (links) und Temperatur (rechts) zum Parameterfehler in Kanal 20

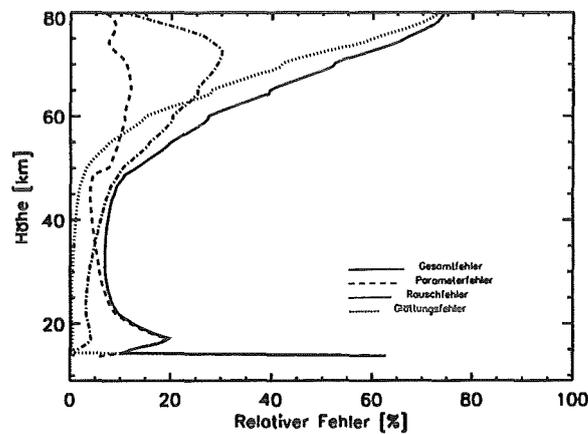


Abbildung 7.8: Abgeschätztes Fehlerbudget für ein gemeinsames Retrieval mit den Kanälen 18 und 20. Dargestellt sind der Gesamtfehler und die Einzelbeiträge für den eingeschränkten Höhenbereich von 13,8 bis 80 km.

toren \vec{y}_{18} und \vec{y}_{20} , die Jacobi- und die Kovarianzmatrizen entsprechend zusammengefasst. Es wird erwartet, dass durch diese simultane Inversion zweier Messungen die Vorteile der beiden Kanäle vereint werden. Wie schon für Kanal 18 und 20 wird das verwendete Messgitter optimiert. Das modifizierte Retrievalgitter deckt einen Höhenbereich von 13,8 bis 80,5 km ab.

Abb. 7.8 zeigt das resultierende Fehlerbudget mit den Einzelbeiträgen. Die vertikale Fehlerverteilung ähnelt zum großen Teil der Verteilung, die wir für Kanal 20 erhalten. Nur in der oberen Stratosphäre liegen die Fehler geringfügig unter denen des Einzelretrievals.

Die Beiträge von Glättungs- und Rauschfehler gleichen für den betrachteten Höhenbereich weitgehend denen für Kanal 20. Beim Parameterfehler fällt ein zusätzlicher Beitrag in 75 km Höhe auf. Dieser wird durch CH_4 -Beiträge erzeugt. In dieser Höhe ist jedoch der Fehlerbeitrag des Glättungsfehlers dominant und sowohl Parameter- als auch Rauschfehler fallen hier in der Gesamtbilanz kaum ins Gewicht.

7.5 Folgerungen aus der Fehlerabschätzung

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Fehlerabschätzungen für die Ableitung von tropischen Wasserdampfprofilen mit HIRDLS zusammengefasst und bewertet.

Beispielhaft wurde für den Kanal 18 gezeigt, dass die hohe Opazität der Atmosphäre in der unteren Troposphäre der Tropen das Retrieval maßgeblich beeinflusst. Der verwendete Retrievalansatz, bei dem alle Retrievalstufen gleichzeitig angepasst werden, hat zur Folge, dass sich Instabilitäten beim Retrieval in der untersten Atmosphäre auf den gesamten Höhenbereich auswirken. Die Reduktion des Mess- bzw. Retrievalgitters auf einen Höhenbereich, der die niedrigsten Tangentenhöhen, die von Sättigung und Opazität geprägt sind, und die obersten Messwerte, die keine spektrale Information mehr liefern, vernachlässigt, führt zu einem deutlich niedrigeren Fehlerbudget. Das bessere Ergebnis kommt vor allem durch den veränderten Beitrag des Parameterfehlers. Dieser Effekt konnte bei allen drei Retrievalszenarien beobachtet werden. Die Untergrenze der auszuwertenden Messung wird also durch Sättigungseffekte im Spektrum und durch die optische Dicke der Atmosphäre bestimmt. Bei den untersuchten Fällen liegt sie in einer tropischen Atmosphäre zwischen 9,3 und 13,8 km. Bei der Auswahl der HIRDLS-Spektralkanäle werden für verfügbare Retrievalergebnisse mit Kanal 18 als untere Grenze 8 km angegeben [Edwards et al., 1995].

Der Vergleich der Fehlerbudgets für die Verwendung der einzelnen Wasserdampfkanäle mit dem Fehlerbudget, das man für ein simultanes Retrieval mit beiden Kanälen erhält, zeigt keinen deutlichen Vorteil für das simultane Retrieval. Das Fehlerbudget für ein Retrieval mit Kanal 20 ist dem Budget für ein Retrieval mit beiden Kanälen sehr ähnlich. Zudem liegt die unterste nutzbare Tangentenhöhe im letzteren Fall um ca. 4 km höher. Die Wasserdampfkanäle werden beim Retrieval im Standardbetrieb und im speziellen Modus für die obere Troposphäre ausgewertet [Lambert et al., 1999]. Im Standardmodus werden beide Wasserdampfkanäle verwendet. Hierbei wird durch die Redundanz der Messungen eine gewisse Sicherheit bei den Ergebnissen und eine dauerhafte Messreihe gewährleistet.

Der spezielle Retrievalmodus für die obere Troposphäre sieht ein etwas verändertes Retrievalschema vor. Ausgewertet wird neben anderen Kanälen nur der Wasserdampf-Kanal 18. Es wird nicht mit einem „Global-Fit-Ansatz“ sondern mit einem „Onion-Peeling-Algorithmus“ ausgewertet [McKee et al., 1969], [Russell III and Drayson, 1972], [Lambert et al., 1999]. Hierbei wird das gesuchte Profil in der Atmosphäre von oben nach unten, Schicht für Schicht bestimmt. Für das Retrieval in der oberen Troposphäre verwendet man die unterste Retrievalstufe, die noch in der Stratosphäre liegt, als erste auszuwertende Schicht. Oberhalb dieser Höhe z_{op} werden die Ergebnisse aus dem zuerst durchgeführten Retrieval mit „maximum a posteriori“-Ansatz als bekannte Eingabegrößen für die Strahlungsübertragungsrechnung verwendet. Die Retrievalgleichung wird nun, ausgehend von der Schicht in der Höhe z_{op} nach unten hin Tangentenhöhe für Tangentenhöhe gelöst, wobei die nächstgelegene Tangentenhöhe unter der zuletzt ausgewerteten Schicht ausgewertet wird. Die iterative Retrievalgleichung muss für diesen einen gesuchten Wert gelöst werden. Dieser Wert wird nun zusammen mit den darüberliegenden Werten im Profil als bekannte Eingabegröße für die SÜG verwendet. Mit diesem Profil wird nun wieder die Retrievalgleichung für die nächste, tieferliegende Schicht gelöst. Dieser Vorgang wiederholt sich nun für jede Schicht, bis die unterste Stufe erreicht ist. Die Atmosphäre wird, wie beim Schälen einer Zwiebel von außen nach innen Schicht für Schicht ausgewertet,

daher auch der Begriff „Onion-Peeling“.

Anschließend wird das so erhaltene troposphärische Profil mit dem stratosphärischen verbunden und als Startprofil für ein erneutes „maximum a posteriori“-Retrieval für die gesamte Atmosphäre verwendet [Lambert et al., 1999]. Von diesem Verfahren verspricht man sich eine bessere Fehlerbilanz für niedrige Tangentenhöhen. Der zuletzt geschilderte Fall wurde nicht in dieser Fehlerabschätzung behandelt.

Kapitel 8

Vergleich und Bewertung der Leistungsfähigkeit von MIPAS und HIRDLS

In diesem Abschnitt sollen die Ergebnisse der Fehlerabschätzung, die für MIPAS (Kap. 6) und HIRDLS (Kap. 7) gemacht wurden, miteinander verglichen werden. Ein quantitativer Vergleich der Ergebnisse ist nicht unmittelbar möglich, da sich unter anderem die Messprinzipien der beiden Instrumente in einigen Punkten unterscheiden und unterschiedliche Retrievalstrategien verwendet werden. Auch die Fehlerabschätzung wurde teilweise mit verschiedenen Werkzeugen durchgeführt. Die hier betrachteten Zahlenwerte der einzelnen Fehlerbeiträge wurden aufgrund der jeweiligen Annahmen und Voraussetzungen gewonnen. Bei der Betrachtung der Fehlerbeiträge und deren quantitativer Bewertung wird auf die Unterschiede der Instrumente und der verwendeten Retrievalstrategien, sowie auf deren Einfluss auf das Fehlerbudget eingegangen.

Die Messprinzipien der beiden Instrumente zeigen Gemeinsamkeiten und Unterschiede. Beide Instrumente arbeiten mit der Horizontsondierungsgeometrie, bei der die emittierte Strahlung im infraroten Bereich des Spektrums gemessen wird. Während HIRDLS in 21 festgelegten Kanälen die emittierte Strahldichte breitbandig misst, werden von MIPAS hochaufgelöste Spektren aufgenommen, die mit über 50.000 Einzelwerten einen weiten Bereich im Infraroten abdecken.

Für die Bestimmung von Wasserdampfprofilen misst HIRDLS in 2 Kanälen. Für jede Tangentenstufe liefert HIRDLS folglich 2 Messwerte zur Auswertung, d.h. die Anzahl der Messwerte die zur Bestimmung eines Wasserdampfprofils verwendet werden können, ist doppelt so groß wie die Zahl der Tangentenstufen. Bei MIPAS erhält man für jede Tangentenhöhe 50.000 Werte zur Auswertung. Die Reduktion der spektralen Stützstellen durch die Verwendung der Auswertefenster verringert diese. Es werden jedoch immer noch einige Hundert Werte im Spektrum zur Auswertung verwendet. Die im Spektralraum mit der Dimension m definierten Matrizen in den Gleichungen zur Lösung der Inversion für HIRDLS sind kleiner als für das spektral auflösende MIPAS und es müssen bei der iterativen Lösung der Inversionsgleichung weniger Variablen angepasst werden. Aufgrund der breitbandigen Messung ist das Signal-zu-Rausch Verhältnis pro Messwert für HIRDLS besser als für MIPAS.

Die festen Kanäle von HIRDLS sind für alle Messungen und Beobachtungsszenarien gleich. Die Messungen für unterschiedliche atmosphärische Bedingungen und Messszenarien werden immer in demselben Spektralbereich gemacht. Sie sind daher sehr gut untereinander vergleichbar. Diese Tatsache führt wiederum zu Nachteilen. Im Fall einer Sättigung des Spektrums, wie sie bei Messungen in der Troposphäre bei hohen Temperaturen und Wasserdampfgehalten eintreten kann, ist eine Auswertung der Messdaten nur schwer oder gar nicht möglich. Die Wasserdampf-Kanäle von HIRDLS decken jeweils einen sehr breiten Spektralbereich ab, in dem Signaturen zahlreicher Störgase zum Signal beitragen. Ihre Position ist zwar so gewählt, dass der Beitrag der Störgrößen minimal ist, jedoch kann er nicht ignoriert werden.

Die Auswertung von Wasserdampfmessungen mit MIPAS ist komplexer. Im Vorfeld des Retrievals muss ein Satz Auswertefenster festgelegt werden, der aus besonders geeigneten Spektralbereiche zur Auswertung besteht. Dieser Satz wird für jedes Messszenario und eine Reihe typischer atmosphärischer Zustände neu festgelegt, um ein optimales Ergebnis zu erhalten. Der Vergleich der Ergebnisse, die mit verschiedenen Auswertefenstern gewonnen werden, findet dann unter der Annahme statt, dass die jeweilige Auswahl den Zustand der Atmosphäre wiedergibt. Messungen, die für dieselben Bedingungen gemacht wurden, z.B. Messungen in den Tropen, werden mit Hilfe derselben Auswertefenster gewonnen. Mit MIPAS können durch diese Auswahl in jeder Tangentenhöhe die Spektralbereiche verwendet werden, die eine optimale Sensitivität auf Wasserdampf aufweisen. Für den Fall der Opazität und Sättigung in einzelnen Spektralbereichen können in niedrigen Höhen Signaturen ausgewertet werden, die nicht gesättigt sind.

Die Abstufung des Messgitters ist für HIRDLS mit Schritten von etwa 200 m vorgesehen. Zusammen mit dem FOV, das im Tangentenpunkt eine vertikale Ausdehnung von etwa 1 km besitzt, bietet HIRDLS mit etwa 1 – 2 km eine deutlich bessere vertikale Auflösung als MIPAS [Gille and Barnett, 1992]. Das große FOV mit einer vertikalen Erstreckung von 3 – 4 km und die Abstufung von 3 km im Messgitter des Standardmodus, führen zu einer vertikalen Auflösung von ca. 2,5 bis 3 km im Standardmodus. Das große FOV für MIPAS ist notwendig, um genügend Strahldichte aufzunehmen und ein ausreichend großes Signal-zu-Rauschverhältnis zu erreichen. Das grobe Messgitter ermöglicht eine ausreichend schnelle vertikale Abtastung der Atmosphäre zwischen 6 und 68 km innerhalb von etwa 75 s. Im UT/LS-Modus wird eine vertikale Auflösung von 1,5 – 2 km erreicht. Diese Messungen werden seltener durchgeführt als Messungen im Standardmodus und bieten diese hohe vertikale Auflösung nur für Messungen in der Troposphäre und der unteren Stratosphäre.

Die Fehlerabschätzungen für HIRDLS und MIPAS unterscheiden sich in einigen Punkten. Der Retrievalansatz, der für HIRDLS gewählt wurde ist der des „maximum a posteriori“ nach Rodgers [Rodgers, 2000] mit dem Einsatz einer Kovarianzmatrix S_a als Nebenbedingung. Für die Abschätzung des Retrievalfehlers bei MIPAS wurde dagegen von einer Nebenbedingung nach Tikhonov-Phillips ausgegangen. Beide Verfahren hängen sehr stark von der jeweiligen Nebenbedingung ab. Während die Nebenbedingung beim „maximum a posteriori“-Ansatz fest gegeben ist, kann bei der Regularisierung die Stärke frei gewählt werden. Die Wahl des Regularisierungsparameters γ wurde hier so getroffen, dass sich eine optimierte Nebenbedingung ergibt. Dadurch wird die freie Wahl der Nebenbedingung stark eingeschränkt.

Für beide Instrumente liegt der abgeschätzte Rauschfehler, der das Rauschen des Messgeräts im Ergebnis widerspiegelt, in der unteren Stratosphäre zwischen 17 und 30 km bei etwa 5 % und darunter. Die verwendeten Regularisierungen führen bei beiden Geräten dazu, dass das jeweils erreichte Signal-zu-Rausch-Verhältnis in der Messung zu vergleichbaren Rauschfehlern im Ergebnis führt.

Der Vergleich des Glättungsfehlers ist nicht so direkt möglich wie der Vergleich der Rauschfehler. Die erreichbare vertikale Auflösung der beiden Geräte unterscheidet sich sehr stark. HIRDLS liefert die Messdaten auf einem feinen Gitter mit etwa 200 m Gitterabstand. Dasselbe Gitter wird auch als Retrievalgitter verwendet. Für den Fall, dass Retrievalgitter und Messgitter gleich sind, kann die Regularisierung schwach gewählt werden. Die Auflösungsmatrix besitzt entlang der Hauptdiagonalen Werte, die nahe bei eins liegen und stark zu den Nebendiagonalen hin abfallen. Die charakteristische Länge l der durch die Kovarianzmatrix S_a beschriebenen vertikalen Struktur der Variationen ist mit 1 km größer als das Messgitter. Strukturen mit dieser vertikalen Erstreckung können gut mit dem Messgitter erfasst werden. Als Folge dessen fällt der Glättungsfehler gering aus. Das Retrievalgitter mit einer Abstufung von 1 km ist für MIPAS deutlich feiner als das Messgitter. Die Glättung durch die Nebenbedingung ist hier für das stabile Retrieval notwendig und wirkt sich auch auf den Glättungsfehler aus. Die Maxima in der Auflösungsmatrix sind hier breiter und mit Werten von 0,6 bis 0,7 kleiner als für HIRDLS. Die für die Abschätzung des Glättungsfehlers berücksichtigten Strukturen in der Atmosphäre mit einer vertikalen Erstreckung von 1 bis 3 km können durch das Mess- und das Retrievalgitter nicht vollständig erfasst werden. Daraus ergibt sich, dass der Glättungsfehler für MIPAS in der UT/LS-Region mit 5 bis 20 % deutlich größer ist, als der für HIRDLS abgeschätzte.

Der Parameterfehler wird für HIRDLS nur für wenige Störgrößen abgeschätzt. Hier werden nur drei Gase (O_2 , CH_4 und CO_2) und die Temperatur als Störgrößen betrachtet. Der Beitrag von Ozon und anderen Gasen wurde nicht berücksichtigt. Die Unsicherheit in der Sichtlinie des Instruments, die für MIPAS einen großen Anteil am Parameterfehler ergibt, wurde für HIRDLS ebenfalls nicht betrachtet. Berücksichtigt man die hohe Temperaturabhängigkeit des Parameterfehlers, so ist zu erwarten, dass der Beitrag des LOS-Fehlers in der Troposphäre das Fehlerbudget für HIRDLS verändert. Für MIPAS wurden insgesamt 28 Störgrößen inklusive der Temperatur- und der LOS-Unsicherheit in der Fehlerabschätzung berücksichtigt. Vergleicht man die Beiträge der Parameterfehler im Bereich der unteren Stratosphäre und der Troposphäre, so sieht man, dass der Parameterfehler für HIRDLS in der unteren Stratosphäre mit etwa 5 bis 10 % Werte zeigt, die mit denen für MIPAS vergleichbar sind. An der Tropopause zeigt der geschätzte Parameterfehler für HIRDLS mit bis zu 20 %, die vor allem eine Folge der Temperaturunsicherheit sind, große Beiträge. Für MIPAS werden in der gleichen Höhenregion Werte von bis zu 10 % geschätzt. Hier wirkt sich neben der Temperaturunsicherheit auch die LOS-Unsicherheit auf das Fehlerbudget aus. Für HIRDLS und MIPAS ist der Einfluss interferierender Gase auf den Parameterfehler gering. In der oberen Troposphäre nimmt der Parameterfehler für HIRDLS bis in 13 km Höhe stark ab. Dagegen nimmt hier der Parameterfehler für MIPAS in 14 km Höhe als Folge der LOS-Unsicherheit stark zu. Vernachlässigt man den LOS-Beitrag bei MIPAS, so ist der Parameterfehler im Standardmodus in allen Retrievalhöhen kleiner als 10 %. Für das Simultanretrieval liegt der Fehler ohne LOS bis 10 km sogar unter 5 %. Vernachlässigt man also den Fehler aufgrund der LOS-Unsicherheit, so sind

die Parameterfehler für HIRDLS und MIPAS in der oberen Troposphäre bis 10 km etwa gleich groß, bei Anwendung des Simultanretrievals für MIPAS sogar noch kleiner als für HIRDLS. Am Beispiel des Simultanretrievals mit MIPAS wurde gezeigt, dass der Fehlerbeitrag im Wasserdampfretrieval aufgrund der LOS-Unsicherheit stark zurückgeht, wenn man die untersten Tangentenhöhen nicht im Retrieval verwendet. Die Fehlerfortpflanzung als Folge der gesättigten Spektren in niedrigen Tangentenhöhen wird dadurch verringert. Für beide Instrumente ist in der tropischen Atmosphäre das Retrieval von Wasserdampf für Höhen unter 10 km als Folge von Sättigungseffekten und Opazität mit einem „Global Fit“ Ansatz schwer möglich.

Geht man davon aus, dass die Ergebnisse der beiden betrachteten Instrumente mit den hier in der Fehlerabschätzung verwendeten Retrievalschemata und Annahmen gewonnen werden, so sind die Fehlerbudgets für die UT/LS-Region für beide Instrumente ähnlich. Bei beiden Experimenten trägt der Rauschfehler mit ähnlich großen Werten zum Gesamtfehler bei. Der Glättungsfehler ist für das vertikal hochauflösende HIRDLS Instrument nur sehr gering, während er bei MIPAS in der tropischen Tropopausenregion die größte Fehlerquelle darstellt. Andererseits zeigt HIRDLS beim Parameterfehler, vor allem in der tropischen Tropopause mit den dort auftretenden niedrigen Temperaturen große Beiträge, die mit MIPAS durch geeignete Auswertefenster und den Einsatz des Simultanretrievals mit der Temperatur deutlich geringer ausfallen.

Im Gesamtfehler zeigen beide Instrumente für die jeweilige Retrievalstrategie eine ähnliche Vertikalverteilung. Die Einzelbeiträge der verschiedenen Fehlerquellen unterscheiden sich zum Teil. Es muss in Erinnerung behalten werden, dass die Fehlerabschätzung sehr stark von den Annahmen abhängt, die in die Berechnung einfließen.

Kapitel 9

Unterschiedliche Fallstudien für MIPAS–Retrievals

Bis jetzt wurden theoretische Fehlerabschätzungen betrachtet. Deren einziges Ziel ist es, die Fehlerbeiträge aus verschiedenen Fehlerquellen im Retrieval getrennt zu betrachten und diese zu quantifizieren. Im folgenden Abschnitt soll anhand von Fallstudien, die ein Retrieval von Wasserdampf aus MIPAS–Spektren unter idealen Bedingungen simulieren, die Funktionalität der gewählten Retrievalstrategie getestet werden. Mit Hilfe dieser simulierten Testretrievals sollen die in das Retrieval einfließenden Steuerparameter, wie z.B. die gewählten Regularisierungsparameter, weiter optimiert werden, um die in den Spektren enthaltene Information so gut wie möglich auszunutzen. Die Retrievalrechnungen werden mit dem am IMK zur Auswertung der MIPAS/Envisat–Daten entwickelten Retrievalprozessor „RCP“ durchgeführt [Stiller et al., 2002]. Für die Fallstudien werden Retrievals mit simulierten Messungen durchgeführt, wobei alle Zustandsgrößen, die diese Messung bestimmen, bekannt sind. Da der Zustand der Atmosphäre, den das gemessene Spektrum wiedergibt, bekannt ist, kennt man folglich das Ergebnis, das vom Retrieval erwartet wird. Der Vergleich des Retrievalergebnisses mit dem Referenzprofil, das zur Simulation der Messung verwendet wird, ermöglicht die Analyse des Retrievals.

Für ein solches Test–Retrieval wird ein gemessenes Spektrum simuliert. Das berechnete Spektrum wird additiv mit einem normalverteilten apodisierten Rauschen überlagert, das mit einem numerischen Zufallszahlengenerator berechnet wird [Press et al., 1996]. Die Stärke des Rauschens ergibt sich aus den gerätespezifischen Angaben für das nicht apodisierte Rauschen im jeweiligen Spektralbereich (siehe Abb. 4.4). Abgesehen von seiner gewählten mittleren Stärke ist das Rauschen die einzige wirklich unbekannte Größe in einem simulierten Retrieval, da die Verteilung der Rauschwerte auf die spektralen Stützstellen nicht bekannt ist. In Kap. 6 wurde gezeigt, dass die Fehler durch Störgase klein sind im Vergleich zum Glättungsfehler und dem Parameterfehler als Folge der Temperatur und LOS–Unsicherheit. Daher werden außer der Reaktion auf die Temperatur– und die LOS–Unsicherheit keine weiteren Parameterfehler betrachtet.

Ausgehend von einem Startwert \vec{x}_0 für die gesuchten Profile (sog. „initial guess“–Profile) wird die Retrievalgleichung iterativ gelöst. Da das gesuchte Profil (Referenzprofil) \vec{x} bekannt ist, kann aus dem Vergleich zwischen dem Retrievalergebnis $\hat{\vec{x}}$ und dem Profil \vec{x} auf die Güte des Retrievals geschlossen werden. Die Wahl von Szenarien, bei denen die

gesuchten Profile im Vektor \vec{x} und auch die Profile der Eingabeparameter Temperatur und LOS gegenüber den Referenzprofilen gestört werden, soll zeigen, wie das Retrieval und damit das Ergebnis von den gewählten Parametern abhängt.

In den folgenden Abschnitten werden die gleichen Retrievalszzenarien verwendet, wie sie schon bei der Fehlerbetrachtung in Kap. 6 untersucht wurden. Als Startprofil \vec{x}_0 für die iterative Lösung werden für Wasserdampf und Temperatur jeweils die in Abb. 6.1 dargestellten Profile verwendet. Für die gleichzeitig anzupassenden Profile der Aerosolextinktion werden die jeweiligen Teilvektoren $\vec{x}_{0,kont}$ im Startprofil \vec{x} mit $\vec{x}_{0,kont} = \vec{0}$ initialisiert. Zur Berechnung der simulierten Messspektren werden diese Profile bewusst verändert und die damit berechneten Spektren zusätzlich noch mit einem normalverteilten Rauschen überlagert.

Eine höhenabhängigen Regularisierung 1. Ordnung nach Tikhonov–Phillips, wie sie in Kap. 6 zur Abschätzung des Fehlerbudgets verwendet wurde, wird auch hier benutzt. Um eine optimale Auswahl der Regularisierungsparameter im Retrieval zu verwenden, wird die Stärke und die Höhenabhängigkeit der Regularisierung mit Hilfe eines Algorithmus unter Vorgabe objektiver Kriterien festgelegt [Steck, 2002]. Als Kriterien zur Auswahl der geeigneten Regularisierungsparameter können z.B. die Zahl der erreichbaren Freiheitsgrade für das Profil der gesuchten Größe im Gleichungssystem oder der mittlere Rauschfehler im Ergebnis vorgegeben werden. Für die hier betrachteten Fälle wird die Regularisierungsmatrix für Wasserdampf so aufgestellt, dass der mittlere relative Rauschfehler im Wasserdampfprofil bei 10 % liegt. Die Höhenabhängigkeit der Diagonalelemente $W_{i,i}$ der Gewichtsmatrix \mathbf{W} im Regularisierungsterm von Gl. (3.26) wird auch hier proportional zu $1/vmr_{H_2O}(z)$ gewählt. Für Höhen, die keine oder nur wenig Information liefern, werden automatisch größere Werte in der Regularisierungsmatrix verwendet, um den Einfluss der Regularisierung auf das Ergebnis zu erhöhen. Das gilt vor allem für Retrievalhöhen, die unterhalb der niedrigsten Tangentenstufe oder oberhalb der obersten Tangentenstufe liegen. Die Retrievalstufen, die den Bereich der untersten Tangentenhöhe erfassen, werden zusätzlich etwas stärker regularisiert, da hier aufgrund der geringen Anzahl an Auswertefenstern und der zu erwartenden Sättigungseffekte eine stärkere Nebenbedingung zur Stabilisierung des Retrievals nötig ist.

Für den Fall des Simultanretrievals wird für die Temperatur eine weitgehend höhenkonstante Regularisierungsmatrix gewählt. Der Wert der Regularisierungsstärke wird so festgelegt, dass der mittlere Rauschfehler bei $\Delta T = 1$ K liegt. Die Retrievalstufen, die nicht durch vorhandene Tangentenstufen abgedeckt werden, für die also keine eigenen Messwerte vorhanden sind, werden wie beim Wasserdampfretrieval stärker regularisiert. Für Höhen unterhalb von 8 km und oberhalb von 30 km wird eine Regularisierungsstärke von $W_{i,i} = 1.0 \text{ T}^{-2}$ gewählt, während zwischen 8 und 29 km eine Regularisierungsstärke von $W_{i,i} = 0.4 \text{ T}^{-2}$ sinnvolle Ergebnisse liefert.

Wie bei der Temperatur wird für das Kontinuum als zusätzliche Größe im Parametervektor eine weitgehend höhenkonstante Regularisierung gewählt. Zwischen 12 und 32 km Höhe liegt die gewählte Regularisierungsstärke bei $W_{i,i} = 1.0 \times 10^4 \text{ km}^2$. Unterhalb von 12 km und oberhalb von 32 km wird mit einem Faktor $W_{i,i} = 1.0 \times 10^5 \text{ km}^2$ bzw. $W_{i,i} = 1.0 \times 10^7 \text{ km}^2$ in 100 km (siehe Gl. (3.26)) Höhe deutlich stärker regularisiert, um ein ausreichend glattes Ergebnis zu bekommen.

Die Elemente im Retrievalvektor \vec{x} beinhalten neben den gesuchten Werten des Wasser-

dampfprofils und, im Falle des Simultanretrievals, den Elementen des Temperaturprofils, auch die Elemente der als Hilfsgröße gleichzeitig angepassten Profile des Hintergrundkontinuums. Da für jedes verwendete Auswertefenster ein komplettes Profil für das Hintergrundkontinuum mit angepasst wird, erhöht sich die Anzahl der Elemente im Vektor \vec{x} mit jedem Auswertefenster um die Anzahl der verwendeten Retrievalstufen im Profil des Hintergrundkontinuums. Die Lösung der Retrievalgleichung erfordert einige mathematische Operationen, wie Matrizenmultiplikationen und Matrixinversionen, deren Rechenaufwand mit steigender Parameterzahl deutlich zunimmt. Man geht davon aus, dass das Kontinuum, das die Hintergrundstrahlung des Spektrums bestimmt, über einen größeren Bereich im Spektrum nur schwach variiert. Um den Rechenaufwand zu reduzieren wird für benachbarte Auswertefenster, die in einem Spektralintervall mit einer maximalen Ausdehnung von $\Delta\nu = 20 \text{ cm}^{-1}$ liegen, ein gemeinsames Kontinuumsprofil angepasst. Alle spektralen Stützstellen der ursprünglich ausgewählten Spektralintervalle bleiben hierbei durch die Übernahme der untergeordneten Teil-Auswertefenster erhalten. Die Anzahl der anzupassenden Aerosolprofile reduziert sich hierdurch deutlich. Infolgedessen wird auch die Zahl der anzupassenden Parameter reduziert und die Rechenzeit zur Lösung der Inversionsgleichung kürzer. Für die hier berechneten Retrievaläufe wurde die Zeit, die pro Iterationsschritt benötigt wird auf bis zu ein siebtel der ursprünglichen Zeit reduziert. Zusätzlich wird das Retrieval durch die reduzierte Anzahl an gesuchten Parametern stabiler und die Zahl der Iterationen bis zur Konvergenz wird reduziert.

Die Spektren der simulierten Messung werden für ein Wasserdampfprofil berechnet, das gegenüber dem verwendeten Standardprofil verändert wird. Unterhalb von 17 km wird das Standardprofil mit dem Faktor 1,5 multipliziert. Zwischen 18 und 25 km wird das Profil um 10 % erhöht und gleichzeitig mit der Funktion

$$vmr(z) = vmr_{ref}(z)[z(1 + DOS)] \quad (9.1)$$

verändert [Toon et al., 1992], wobei vmr_{ref} das Standardprofil darstellt und der sogenannte „Downwellingfaktor“ DOS die Stärke der Streckung des Profils bestimmt. Dadurch wird die Hygropause in 18 km Höhe verschoben. Oberhalb von 25 km wird das Profil mit 1,3 und oberhalb von 50 km mit 1,5 skaliert. Hierdurch wird ein Referenzprofil erzeugt, das sich durch eine verschobene Hygropause und unterschiedlich starke Skalierungen in verschiedenen Höhen vom Startprofil (= Standardprofil) unterscheidet. Dies soll ein realitätsnahes Profil darstellen, das gegenüber dem Startprofil eine veränderte vertikale Struktur besitzt, die durch das Retrieval erfasst werden soll.

Zur Berechnung der simulierten Messspektren wird davon ausgegangen, dass im Retrieval Zustandsgrößen, die zusätzlich zur gesuchten Größe im Strahlungsübertragungsmodell verwendet werden, genau bekannt sind. Es werden dieselben Profile zur Lösung der Retrievalgleichung und zur Berechnung des Messspektrums verwendet. Eine Ausnahme bildet hier das Profil der Temperatur. Hier nimmt man an, dass das Profil bereits vor dem Wasserdampfretrieval in einem separaten Retrievalprozess aus den gemessenen Spektren gewonnen wird. Dieses Profil wird dann in der Retrievalgleichung eingesetzt. Für Temperaturprofile aus der „Near-Realtime“-Prozessierung, die bereits wenige Stunden nach der Messung zur Verfügung stehen, wird eine Unsicherheit von 1,5 K erwartet. Das Temperaturprofil, das in die Simulation des Messspektrums einfließt, wird daher mit einer Störung mit einer Standardabweichung von $\Delta T = 1,5 \text{ K}$ überlagert. Hierbei ist das Profil auf ei-

nem 1 km-Gitter gegeben und die Störungen werden auf einem 3 km-Gitter überlagert und dazwischen linear interpoliert. So ist eine Korrelation mit benachbarten Profilstufen gewährleistet.

Die Ableitung der Kontinuums-Profile für jedes Auswertefenster sollen helfen, breitbandige Strukturen im Spektrum anzugleichen, die nicht durch die Wasserdampf-Signaturen abgebildet werden können. Für das Retrieval geht man davon aus, dass keine *a priori* Information über das Kontinuum im Spektrum gegeben ist. Um keine zusätzlichen Probleme bei gesättigten Spektralbereichen zu bekommen, werden die zu Beginn in das Retrieval einfließenden Startprofile für die Kontinuumsparameter gleich Null gesetzt. Für die simulierten Messspektren werden für alle Auswertefenster dieselben Profile mit Extinktionskoeffizienten verwendet. Es wird dabei in der Troposphäre von großen Kontinuumsbeiträgen mit Absorptionskoeffizienten von $5,0 \times 10^{-4} \text{ km}^{-1}$ ausgegangen, die oberhalb der Troposphäre bis in 30 km Höhe abnehmen. Man geht davon aus, dass in Höhen oberhalb von etwa 25 km, über der so genannten Junge-Schicht, einer stratosphärischen Aerosolschicht in etwa 20 km mittlerer Höhe, kein Aerosol und damit kein Kontinuum im Spektrum mehr vorhanden ist. In Höhen darüber ist daher im simulierten Messspektrum kein Kontinuumseinfluss enthalten.

9.1 Messung im Standard-Messgitter

Die Simulation des Retrievals wird für das Standard-Messgitter durchgeführt, wie es für die Messungen mit MIPAS vorgesehen ist. Das nominelle Messgitter deckt den Höhenbereich von 6 bis 68 km ab (siehe Kap. 4). Hier wird ein Messgitter verwendet, bei dem die Tangentenhöhen in den Höhen 6,3; 9,2; 11,7; 15,2; 18,6; 20,5; 24,1; 26,8; 29,4; 33,3; 35,9; 39,1; 42,3; 46,6; 52,2; 59,5 und 68,2 km liegen. Dieses Gitter soll den realistischen Fall annähern, bei dem die nominellen Tangentenhöhen nicht exakt getroffen werden, aber die tatsächlichen Tangentenhöhen bekannt sind. Das verwendete Retrievalgitter für Wasserdampf und Temperatur erstreckt sich von 3 bis 120 km. Unterhalb von 44 km ist es mit 1 km Gitterabstand gewählt, darüber bis 70 km mit 2 km Abstand. Oberhalb der obersten Tangentenstufe wird die Gitterweite größer gewählt. Das Retrievalgitter für das Kontinuum wird bis 33 km in 1 km-Schritten mit einer weiteren Retrievalstufe in 120 km Höhe, zur Stabilisierung des Retrievals, gewählt.

Die Auswertefenster aus Kap. 6, die für Höhen zwischen 5 und 26 km gewählt wurden, werden für die Höhenstufen bis 27 km verwendet. Für die Fallstudien wird das nominelle Messgitter verwendet, das gegenüber dem Gitter, für das die Fenster ausgewählt wurden, um 1 km verschoben ist. Man geht davon aus, dass sich die Eigenschaften des Spektrums dadurch nur geringfügig ändern, wodurch die Anwendung der gegebenen Belegungsmatrix auf diese Höhenstufen gerechtfertigt ist. Um die Form des gesuchten Profils gut zu bestimmen, ist es notwendig, im Retrieval auch Messungen aus darüberliegenden Schichten zu verwenden. Die Auswertefenster für die Tangentenhöhen von 30 km aufwärts werden aus einer Auswahl von Spektralintervallen übernommen, die, unabhängig von der hier durchgeführten Auswahl, ebenfalls für ein Retrieval von Wasserdampfprofilen in den Tropen ausgewählt werden [Glatthor, 2001].

Das Ergebnis für das Retrieval von Wasserdampf unter den beschriebenen Testbedingungen wird in Abb. 9.1 gezeigt. Dargestellt sind im linken Bild das Startprofil, das Re-

ferenzprofil und das Ergebnis des Retrievals. Die Fehlerbalken repräsentieren nur den abgeschätzten Rauschfehler im Ergebnis. Der Glättungsfehler und andere Fehlergrößen sind nicht dargestellt. Im rechten Bild ist die relative Abweichung des Ergebnisses vom Referenzprofil dargestellt. Zusätzlich ist noch die Vertikalverteilung des abgeschätzten Rauschfehlers dargestellt. Der Rauschfehler liegt im betrachteten Höhenbereich zwischen 5 und 10 %. Die untere Troposphäre und die Tropopausenregion zeigen gegenüber den anderen Höhen einen etwas größeren Einfluss des Rauschfehlers auf das Ergebnis.

In der Stratosphäre, oberhalb von 25 km weicht das Ergebnis um etwa 10 % vom Referenzprofil ab. In der UT/LS-Region zwischen 14 und 25 km treten größere Differenzen zwischen dem Ergebnis und dem Referenzprofil auf. Im Ergebnis liegt die Hygropause, wie im Startprofil, in 20 km Höhe. Die Hygropause im Referenzprofil befindet sich jedoch in 18 km Höhe. Der Verlauf des Profils wird in diesem Höhenbereich offenbar durch das *a priori* Profil dominiert, so dass das Retrieval den Verlauf des Referenzprofils nicht nachbilden kann. Das abgeleitete Profil zwischen 14 und 25 km deutet auf Kompensationseffekte im Retrieval hin. Die Wasserdampfmischungsverhältnisse in der unteren Stratosphäre zwischen 20 und 25 km Höhe, die in Folge der Anbindung an das *a priori* Profil auftreten, liegen zwischen 10 und 20 % unter denen des Referenzprofils. In der oberen Troposphäre wird diese Abweichung durch Volumenmischungsverhältnisse im Wasserdampfprofil ausgeglichen, die bis zu 30 % über der Referenz liegen. Unterhalb der UT/LS-Region, zwischen 9 und 14 km Höhe bildet das Ergebnis die Referenz sehr gut ab. Hier ist genügend Information im Spektrum, um das Profil abzuleiten. Erst unterhalb von 9 km zeigt das Ergebnis sehr starke Oszillationen und Abweichungen von der Referenz. Hier führt die Opazität der Atmosphäre zu Problemen im Retrieval, die auch durch eine stärkere Regularisierung nicht zufriedenstellend gelöst werden können.

Ein Maß für die geeignete Wahl der Regularisierung stellt die Anzahl der verfügbaren Freiheitsgrade (engl.: degrees of freedom, *dfs*) in einem Retrieval dar. Die Anzahl der Freiheitsgrade ist die Anzahl der unabhängigen Werte im Ergebnis, die durch die Messung gegeben sind. Die Anzahl der Freiheitsgrade der Messung wird aus der Auflösungsmatrix bestimmt. Sie ist die Spur der Matrix **A** [Rodgers, 2000]:

$$dfs = \text{Spur}(\mathbf{A}) \quad (9.2)$$

Ist die Messung nicht verrauscht oder von Nebenbedingungen abhängig, dann liefert das gemessene Signal nur Information über die gesuchte Größe. Die Anzahl der Freiheitsgrade ist dann gleich der Anzahl der Elemente im Ergebnisvektor $\hat{\mathbf{x}}$.

Für das Retrieval von Wasserdampf unter den oben beschriebenen Bedingungen erhält man mit der gewählten Regularisierung einen Wert von $dfs = 20,8$. Von den 60 Werten, die der Ergebnisvektor für Wasserdampf zur Verfügung stellt, ist also ein Drittel der Information unabhängig. Es stehen Messungen aus 17 Tangentenhöhen zur Verfügung. Bei etwa 20 Freiheitsgraden erhält man also unabhängige Informationen über das Vertikalprofil aus mehr Höhen als sie durch die Tangentenhöhen vorgegeben sind. Gerade bei niedrigen Retrievalhöhen in der Troposphäre, in denen Spektren mit starken Signaturen vorliegen, kann aus der Form der Linien auch Information über den Profilverlauf zwischen den Tangentestufen gewonnen werden.

Die Lösung der Retrievalgleichung variiert ein simuliertes Spektrum iterativ so lange, bis der Unterschied zum gemessenen und die Variation im abgeleiteten Profil minimal

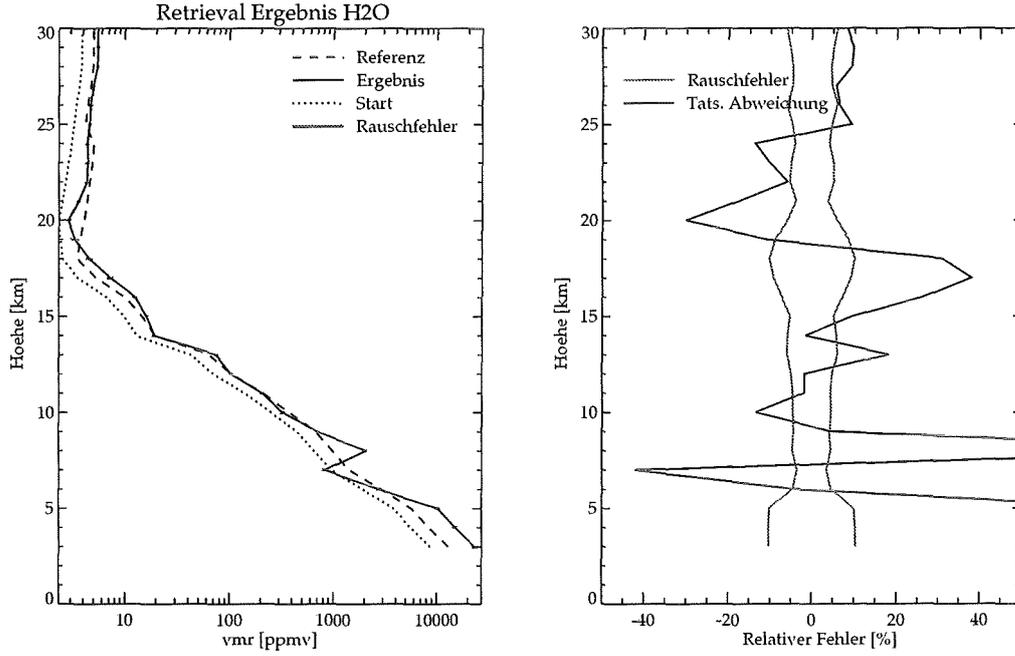


Abbildung 9.1: Retrievalergebnis für Wasserdampf mit einem Standard-Messgitter und einem Retrievalgitter mit 1 km Abstufung. Im linken Bild sind das Startprofil, das Referenzprofil und das Ergebnis mit den Fehlerbalken des Rauschfehlers dargestellt. Rechts: Relative Abweichung des Ergebnisses vom Referenzprofil und Rauschfehler.

werden. Eine objektive Möglichkeit, die Güte der Anpassung zu bewerten ist der χ^2 -Test (siehe z.B. [Brandt, 1992]):

$$\chi_y^2 = (\vec{y}_{calc} - \vec{y}_{mess})^T \mathbf{S}_y^{-1} (\vec{y}_{calc} - \vec{y}_{mess}). \quad (9.3)$$

\vec{y}_{calc} ist der Vektor mit dem gerechneten Spektrum und \vec{y}_{mess} enthält das gemessene Spektrum. χ_y^2 ist der χ^2 -Wert für die Anpassung der Spektren. Analog wird der χ^2 -Wert für die Erfüllung der Nebenbedingung berechnet: $\chi_R^2 = (\vec{x}_a - \vec{x})^T \mathbf{R} (\vec{x}_a - \vec{x})$. Das χ^2 für die Lösung der Retrievalgleichung mit der Nebenbedingung \mathbf{R} ergibt sich der χ^2 -Wert zu $\chi^2 = \chi_y^2 + \chi_R^2$. Der Erwartungswert von χ^2 ist die Zahl der unabhängigen Variablen des Systems. Werden die Abhängigkeiten zwischen den einzelnen Stützstellen im Spektrum durch die Matrixelemente außerhalb der Diagonalen von \mathbf{S}_y bzw. \mathbf{R} richtig berücksichtigt, so ist der Erwartungswert die Anzahl m der Elemente im Vektor \vec{y}_{mess} bzw. die Anzahl n der Elemente im Vektor \vec{x} . Dividiert man χ^2 durch den Erwartungswert, so ist der Erwartungswert des normierten χ_{norm}^2 eins. Für die additive Kombination $\chi^2 = \chi_y^2 + \chi_R^2$ ergibt sich das normierte χ^2 zu [Grabowski, 2001]:

$$\chi_{norm}^2 = \frac{\chi_y^2(n_y - n_x) + \chi_R^2}{n_y} \quad (9.4)$$

Liegt der berechnete Wert des normierten χ_{norm}^2 nahe bei eins, so ist das ein Indiz, dass das Retrieval das Spektrum gut an das gemessene angepasst hat und somit das Ergebnis

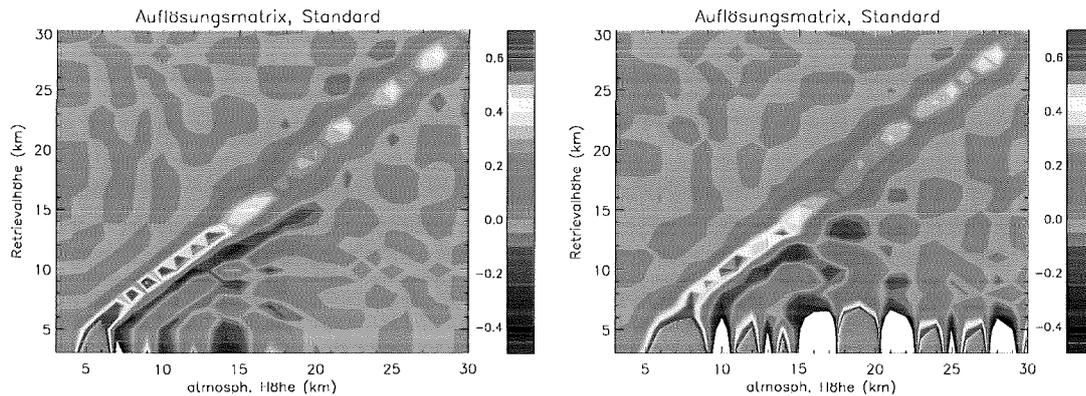


Abbildung 9.2: Auflösungsmatrizen für das Wasserdampfretrieval mit Messungen im Standardmodus. Dargestellt sind die Matrix für das reine Wasserdampfretrieval (links) und das Simultanretrieval (rechts).

den Zustand der Atmosphäre wiedergibt. Das hier beschriebene simulierte Wasserdampfretrieval ergibt einen Wert von $\chi_{norm}^2 = 1,14$. Folglich ist das Referenzspektrum durch das Retrieval gut wiedergegeben.

Die vertikale Auflösung, die für dieses Ergebnis erreicht werden kann, wird mit dem Kriterium der Halbwertsbreite abgeschätzt. In Abb. 9.2 ist links die Auflösungsmatrix für das reine Wasserdampfretrieval dargestellt. In der Stratosphäre, zwischen 18 und 30 km, liegt die abgeschätzte Auflösung zwischen 3 und 4 km. Hier ist die Auflösung durch den Abstand des Messgitters bestimmt. Zwischen 18 und 21 km liegt die Auflösung bei etwa 4 km. Die geringere Auflösung deutet auf einen stärkeren Einfluss der Regularisierung auf das Ergebnis in dieser Höhe hin. Dies deckt sich mit der Beobachtung, dass das Retrieval die Hygropause in der Höhe detektiert, in der die Hygropause des Startprofils liegt. In der Tropopausenregion und der oberen Troposphäre liegt die abgeschätzte Auflösung zwischen 2 und 3 km. Die Auflösung ist feiner als das Messgitter. Das unterstützt die Annahme, dass die Wasserdampf-Signaturen in den verwendeten Spektralbereichen der oberen Troposphäre auch Informationen über die Vertikalverteilung innerhalb des Gesichtsfelds nutzen. Unterhalb von 9 km kann keine Aussage über die vertikale Auflösung gemacht werden, da die Ergebnisse zu stark von den Beiträgen aus anderen Höhen abhängen.

In Abb. 9.3 ist das Ergebnis für ein Simultanretrieval unter den oben beschriebenen Bedingungen dargestellt. Das Referenzspektrum wird hier mit den gleichen Eingabeparametern berechnet, wie für das Wasserdampfretrieval, wobei sich das Retrieval auf die veränderten Auswertefenster des Simultanretrievals stützt (siehe Abb. 6.6). Das Wasserdampfprofil der unteren Stratosphäre bis zu 18 km hinab wird sehr gut reproduziert. Die relativen Abweichungen des Ergebnisses vom Referenzprofil liegen weitgehend innerhalb der Unsicherheit des geschätzten Rauschfehlers. Das Retrieval reproduziert die Hygropause in 18 km. Unterhalb von 17 km liegt das abgeleitete Profil um bis zu 20 % unter dem gesuchten Profil. Durch das Temperaturminimum in dieser Höhe sind die auswertbaren Emissionslinien in dieser Höhe schwächer und damit schwieriger anzupassen. Dieses Defizit wird durch einen verstärkten Einfluss der Regularisierung ausgeglichen. Die positive Abweichung von der Referenz in etwa 13 km Höhe kompensiert die negative Abweichung an der Tropopause. In der mittleren Troposphäre stimmt das Ergebnis wieder gut mit

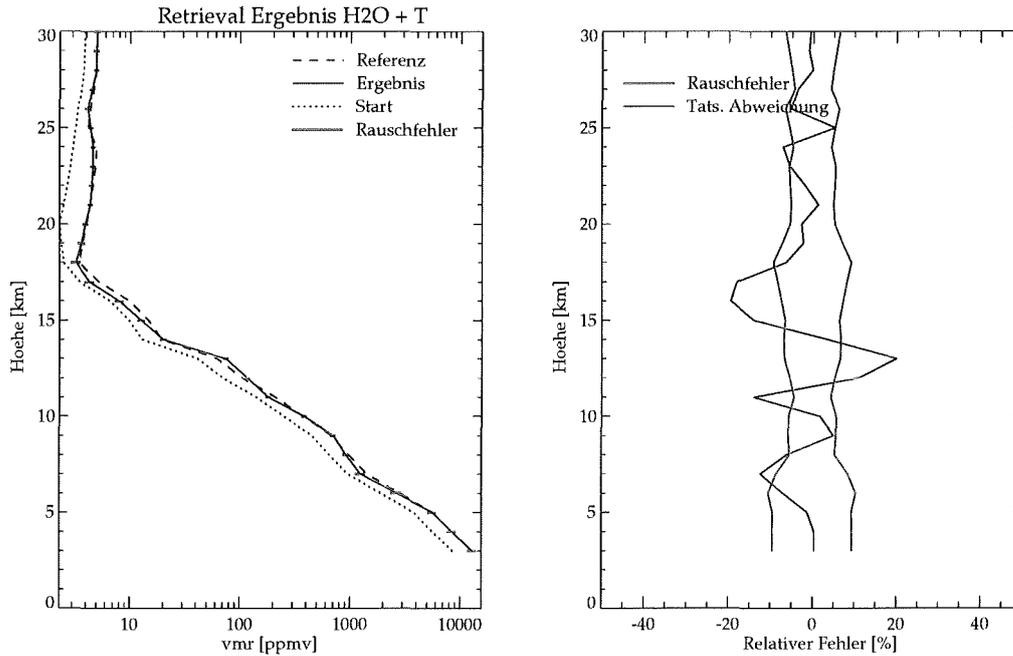


Abbildung 9.3: Wie Abb. 9.1, jedoch für simultanes Retrieval von Wasserdampf und Temperatur

dem Referenzprofil überein. Die Anzahl der Freiheitsgrade des Signals liegt bei 18,5 für 17 Tangentenhöhen und ist damit etwas niedriger als für das Wasserdampfretrieval ohne Temperatur. Der Wert mit $\chi_{norm}^2 = 1.04$ deutet auf eine gute Reproduktion des Referenzspektrums hin.

In Abb. 9.2 ist rechts die Auflösungsmatrix für das Simultanretrieval dargestellt. Die vertikale Auflösung für die simultane Ableitung von Wasserdampf und Temperatur liegt zwischen 14 und 28 km bei 2,8 bis 3,5 km. Die bessere vertikale Auflösung im Vergleich zum reinen Wasserdampfretrieval spiegelt sich im Ergebnis wieder, da hier die Hygropause gut getroffen wird und das Profil der unteren Stratosphäre gut mit dem Referenzprofil übereinstimmt. In der mittleren Troposphäre erhöht sich die vertikale Auflösung. Bei 10 km liegt sie bei Werten um 2 km. Darunter ist aufgrund starker Nebenmaxima in den Zeilen der Auflösungsmatrix keine Aussage über die vertikale Auflösung möglich.

In Tangentenhöhen der mittleren Troposphäre, unterhalb von etwa 11 km in den Tropen kann es in den Spektren zur Sättigung der Spektrallinien kommen. Zudem ist in den Tropen unterhalb von etwa 14 km mit Bewölkung zu rechnen, die ein Retrieval nahezu unmöglich macht. Es ist naheliegend, die untersten Tangentenhöhen, die das Retrieval schwieriger machen, und für die mit Schwierigkeiten im Retrieval gerechnet werden kann, von der Auswertung auszuschließen. Um die Reaktion des Retrievals auf einen veränderten Höhenbereich zu untersuchen, werden Messgitter gewählt, deren unterste Tangentenhöhe bei 9, 12 und 15 km liegen. Der Höhenbereich des jeweiligen Retrievalgitters wird an den, durch die Tangentenhöhen abgedeckten Höhenbereich angepasst.

Es zeigt sich, dass dieser Schritt keine Vorteile für das Ergebnis in der UT/LS-Region bringt. Für das Wasserdampfretrieval ohne Temperaturanpassung erhält man zwischen 16 und 21 km auch für die veränderten Messgitter die starken Abweichungen vom Referenz-

profil. Die Hygropause bleibt im Ergebnis in 20 km Höhe und verfehlt die tatsächliche Hygropause in 18 km Höhe.

Für das Simultanretrieval zusammen mit der Temperatur zeigt sich auch kein Vorteil durch den Ausschluss der unteren Tangentenhöhen. In der UT/LS-Region wird Höhe und der Feuchtegehalt der Hygropause mit den veränderten Retrievalgittern genauso gut wiedergegeben wie mit dem ursprünglichen Retrievalgitter. Das Ergebnis der simulierten Retrievals legt die Vermutung nahe, dass sinnvolle Ergebnisse bis in die mittlere Troposphäre möglich sind. Ein Weglassen der unteren Tangentenhöhen könnte dazu führen, dass Informationen über das Vertikalprofil der mittleren Troposphäre, die das Retrieval liefert, nicht genutzt werden.

Bisher wurde ein festes Retrievalgitter verwendet, dessen Gitterabstand mit 1 km kleiner ist als der Abstand der Tangentenhöhen mit 3 km. Nun soll das Verhalten eines Retrievals auf den Tangentenhöhen betrachtet werden. Dadurch wird die Anzahl der gesuchten Parameter verringert und die Information, die eine Messung auf einer bestimmten Tangentenhöhe liefert, wird dieser direkt zugeordnet. Für dieses Retrievalschema werden simulierte Retrievals durchgeführt. Hierbei werden die gleichen Start- und Referenzprofile verwendet, wie schon in den oben beschriebenen Fällen.

In Abb. 9.4 ist das Ergebnis des simulierten Wasserdampfretrievals auf dem Tangentenhöhengitter dargestellt. Der geschätzte Rauschfehler liegt in der unteren Stratosphäre bei etwa 5 bis 10 %. In der Troposphäre nimmt der Rauschfehler kontinuierlich ab. Hier wird im Retrieval stärker regularisiert, um das Retrieval zu stabilisieren, wodurch der Rauschfehler reduziert wird. Die starke Differenz zum Referenzprofil in 21 und 24 km Höhe kommt daher, dass die Struktur des Referenzprofils aufgrund der gröberen Diskretisierung und dem Einfluss der Regularisierung nicht erfasst werden kann. Die Strukturen, die durch die feinere Diskretisierung des 1 km-Gitters vom Retrieval erfasst werden können, werden hier durch das Retrievalschema nicht aufgelöst und führen zu einer Abweichung von bis zu 20 %. Unterhalb der Tropopause liegt die Differenz zum Referenzprofil bei -20 bis -30 %. Diese Differenz tritt auch im Fall des Simultanretrievals auf. Im Folgenden soll der Grund für dieses Verhalten kurz erläutert werden.

Die Ursache für diese starke negative Abweichung ist der exponentielle Verlauf des Profils des Wasserdampfvolumenmischungsverhältnisses in der Troposphäre mit seinem starken Gradienten. Dieser Profilverlauf kann durch die lineare Interpolation in KOPRA im grob diskretisierten Retrievalgitter nicht genau nachgebildet werden. Das Profil der gesuchten Größe wird im Retrievalprozessor auf das Retrievalgitter interpoliert und an das Strahlungsübertragungsmodell übergeben. Der verwendete Algorithmus KOPRA interpoliert die Werte der übergebenen Spurengase linear zwischen den Stützstellen [Höpfner, 2000]. Für die Berechnung des Curtis-Godson-Mittelwerts der Teilsäule zwischen zwei Retrievalstufen im interpolierten Profilverlauf ergibt sich für ein nichtlineares Profil eine falsche Teilsäulendichte, mit der die Strahlungsübertragungsrechnung durchgeführt wird. Im Fall von Wasserdampf führt diese Interpolation zu erhöhten Mittelwerten des Wasserdampfs in den Teilschichten des Profils, mit denen die Spektren und Ableitungen berechnet werden. Um diese erhöhten Mittelwerte auszugleichen, korrigiert der Retrievalalgorithmus das Profil mit niedrigeren Wasserdampfmischungsverhältnissen, um das simulierte Spektrum an das Referenzspektrum anzupassen. Das Ergebnisprofil liegt also um den Wert unter dem Referenzwert, um den das Profil reduziert werden muss, damit die Spektren

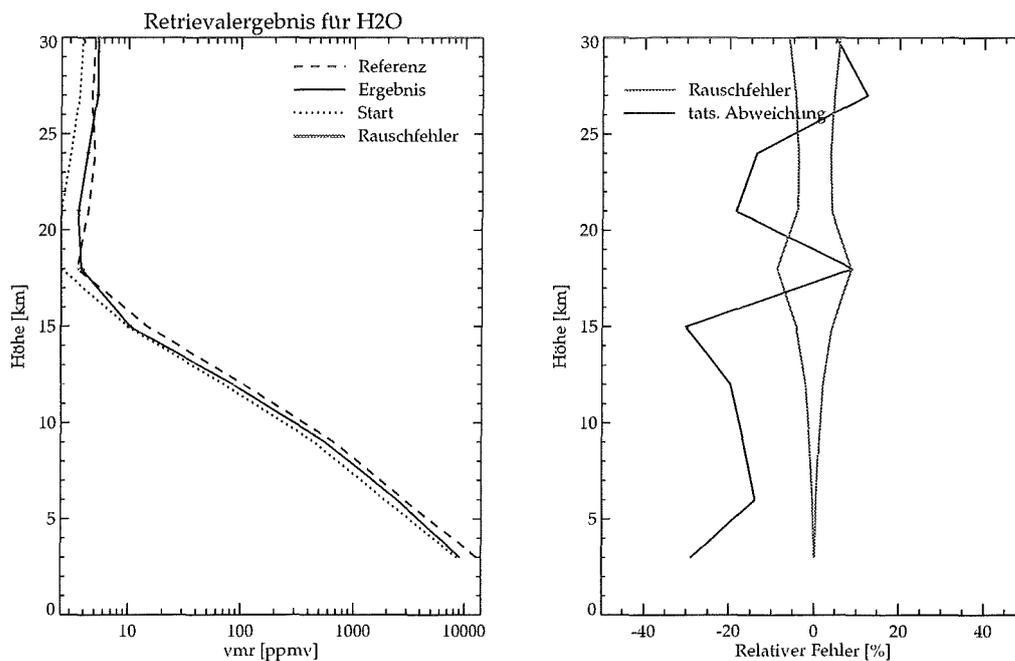


Abbildung 9.4: Wie Abb. 9.1, jedoch für ein Retrieval auf den Tangentenhöhen

trotz fehlerhafter Teilsäulenberechnung an die Referenzspektren angepasst werden können.

Es zeigt sich also, dass die Verwendung eines groben Retrievalgitters für atmosphärische Größen mit einem nichtlinearen vertikalen Profilverlauf nur dann möglich ist, wenn das Profil zwischen zwei Gitterpunkten richtig interpoliert wird. Für Wasserdampf unter den hier betrachteten tropischen Bedingungen ist die lineare Approximation des Profils bei einem Gitterabstand von 3 km mit KOPRA nicht geeignet. Der Ansatz eines festen Retrievalgitters mit einer feinen Diskretisierung in 1 km-Schritten in der Tropo- und der Stratosphäre ist auch bei linearer Interpolation im Strahlungsübertragungsmodell ausreichend fein gewählt, um den nichtlinearen Verlauf des Wasserdampfprofils in der Troposphäre hinreichend genau zu erfassen.

In Kap. 6 wurde gezeigt, dass neben der Temperatur die Unsicherheit der LOS den stärksten Beitrag zum Parameterfehler liefert. Um den Einfluss einer Unsicherheit der LOS auf das Ergebnis zu untersuchen, werden Referenzspektren berechnet, deren Tangentenhöhen zusätzlich mit einer variierenden Unsicherheit belegt werden. Dadurch wird ein Retrieval simuliert, bei dem die Tangentenhöhen nicht genau bekannt sind. Die Variation der LOS gegenüber der angegebenen Tangentenhöhe wurde mit einer absoluten Unsicherheit von 100 m vorgegeben. Das bedeutet dass das gesamte Tangentenhöhen-gitter um 100 m gegen das angegebene verschoben wird. Zusätzlich wird noch eine relative Unsicherheit eingeführt, die den Abstand zwischen den Tangentenhöhen variiert. Für die mittlere relative Unsicherheit werden 136 m verwendet. Diese ist geringer als in die Kap. 6 angenommene, da man davon ausgeht, dass die LOS in einem vorhergehenden Retrievalschritt bestimmt wird. Für das LOS-Retrieval wird eine erreichbare Genauigkeit von 150 m angenommen. Die Abweichungen der tatsächlichen Tangentenhöhen von den im Retrieval verwendeten sind in Tab. 9.1 aufgelistet.

angegebene Tangentenhöhe [km]	Δz [km]	tatsächliche Tangentenhöhe [km]
6,3	-0,25	6,15
9,2	-0,21	9,09
11,7	-0,15	11,65
15,2	-0,08	15,22
18,6	-0,02	18,68
20,5	0,05	20,65
24,1	0,12	24,32
26,8	0,18	27,08
29,4	0,22	29,72
33,3	0,26	33,66
35,9	0,17	36,17
39,1	0,03	39,23
42,3	0,00	42,40
46,6	-0,03	46,67
52,2	-0,09	52,21
59,5	-0,05	59,55
68,2	-0,02	68,28

Tabelle 9.1: Tangentenhöhen, verwendete Unsicherheiten der LOS und resultierende Tangentenhöhen im Referenzspektrum für das RetrievalszENARIO mit LOS–Unsicherheit. Zusätzlich wird noch eine absolute Unsicherheit von 100 m zu den Tangentenhöhen addiert [Funke, 2001].

In Abb. 9.5 ist das Retrievalergebnis eines Simultanretrievals für eine simulierte Messung mit LOS–Unsicherheit dargestellt. Der Gitterabstand im Retrievalgitter ist hier wieder mit 1 km in Tropo– und Stratosphäre gewählt. Man sieht, dass in nahezu allen Höhenbereichen das Ergebnis sehr gut ist. Einzig der leichte Anstieg der Profilverte in 25 km Höhe wird nicht exakt nachgebildet. Dort liegt die Differenz bei ca. 20 %. Unterhalb von 20 km liegt die Differenz zwischen Ergebnis und Referenz bei maximal 10 % und damit im Rahmen des abgeschätzten Rauschfehlers. Für dieses Ergebnis erhält man 18,6 Freiheitsgrade und einen Wert von $\chi_{norm}^2 = 1,06$ für die Residuenspektren. Geringe Unsicherheiten in der Kenntnis der tatsächlichen Tangentenhöhe haben für das hier gestellte Retrievalproblem offenbar kaum Auswirkung auf das Ergebnis. Einzig die Zahl der Iterationen, die bis zur Konvergenz nötig sind, erhöht sich. In der Troposphäre führt eine Unsicherheit im gegebenen Tangentenhöhen-gitter von mehreren hundert Metern und mehr jedoch zu Schwierigkeiten im Retrieval. Die Auswertefenster sind für die jeweilige Tangentenhöhe optimiert. Durch eine starke Verschiebung der Tangentenhöhe können die Positionen der Auswertefenster den optimalen Wirkungsbereich verlassen. Die Informationen über die Zielgröße sind dann nicht mehr ausreichend für ein zufriedenstellendes Ergebnis.

Für die Untersuchungen der Testretrievals auf Basis der simulierten Messungen im vorgesehenen Standard–Messmodus bestätigen sich bei den simulierten Retrievals die Aussagen, die aufgrund der Fehleranalyse mittels der diagnostischen Werkzeuge gemacht wurden. Gerade im UT/LS–Bereich bringt die Hinzunahme der Temperatur als zusätzliche

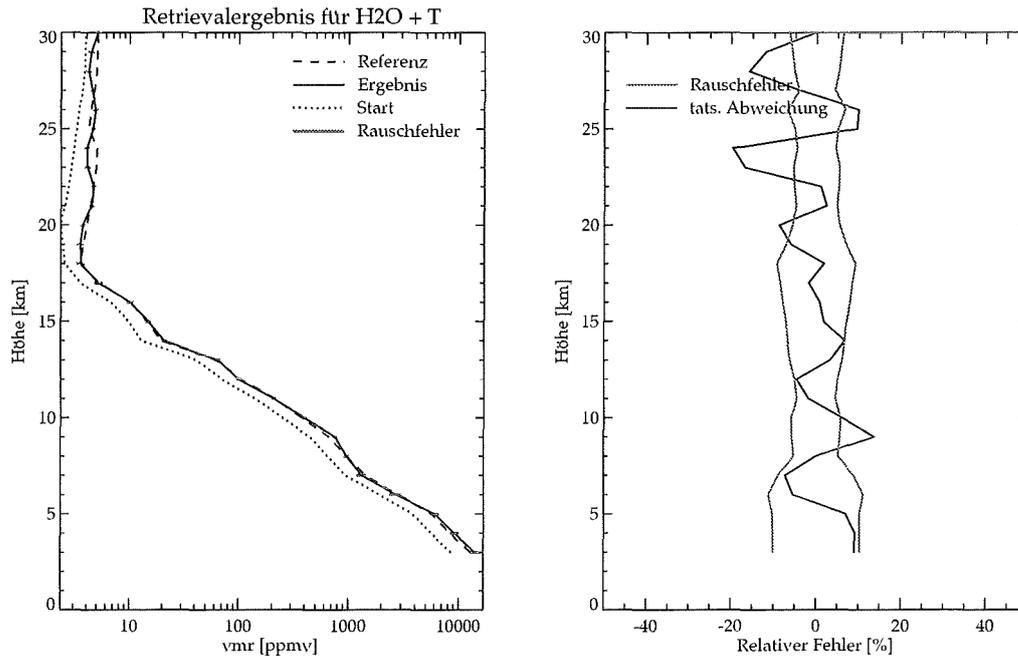


Abbildung 9.5: Wie Abb. 9.3, jedoch für ein Retrieval auf der Basis fehlerhafter LOS im Referenzspektrum

anzupassende Größe einen Vorteil für das Ergebnis. Feinere Strukturen im Wasserdampfprofil, wie z.B. die Hygropause und deren Lage, werden besser erfasst und reproduziert. In der mittleren Troposphäre sind die mit dem Simultanretrieval erhaltenen Ergebnisse zuverlässiger. Die Anpassung der zur Lösung der Retrievalgleichung berechneten Spektren an die gemessenen Spektren durch den Retrievalalgorithmus resultiert in den hier betrachteten Szenarien bei gleichzeitiger Anpassung der Temperatur wie erwartet in kleineren Differenzen der beide Spektren. Auch kleine Unsicherheiten der LOS in der Größenordnung von 100 bis 200 m gegenüber den nominellen Tangentenstufen können durch den Retrievalansatz erfasst und ausgeglichen werden. Die Verwendung eines Retrievalgitters, das eine Inversion der Profile auf dem Messgitter durchführt, hat sich als ungünstig erwiesen. Wie oben beschrieben wurde, können der nichtlineare Verlauf und die großen Gradienten im Wasserdampfprofil mit dem hier verwendeten Strahlungsübertragungsmodell auf dem groben Gitter nicht gut genug durch die lineare Interpolation erfasst werden. Es ergeben sich dadurch große systematische Fehler im Ergebnis.

9.2 Messung im UT/LS-Messgitter

Von Messungen mit dem feiner abgestuften UT/LS-Messmodus verspricht man sich vertikal höher aufgelöste und genauere Profile aus der UT/LS-Region. Wie für das Standard-Messszenario werden auch simulierte Retrievals für diesen Modus durchgeführt. Der von den Messungen abgedeckte Höhenbereich erstreckt sich von 5 bis 40 km. Das verwendete Retrievalgitter erstreckt sich von 2 bis 100 km. Zwischen 2 und 28 km Höhe liegt der gewählte Gitterabstand bei 1 km, von 30 bis 40 km liegt er bei 2 km und darüber nimmt er bis 20 km zu. Durch dieses Gitter ist eine feine Erfassung des Profils in der UT/LS-

Region gewährleistet und gleichzeitig kann die Profilform in den größeren Höhen im Retrieval berücksichtigt werden. Die Referenzspektren werden mit denselben Eingabeprofilen berechnet, wie für das Standard-Messszenario. Die hier verwendeten Tangentenhöhen, die sich etwas vom nominellen Messgitter unterscheiden, sind: 5,2; 6,1; 8,3; 9,3; 10,7; 12,6; 14,3; 15,2; 17,1; 18,4; 20,1; 24,5; 30,3 und 40,1 km. Dieses Messgitter unterscheidet sich von dem Gitter, das für die Fehleranalyse in Kap. 6 verwendet wurde. Dort wurde die Atmosphäre bis in 27 km Höhe in 1,5 km-Schritten abgetastet. Die Regularisierung wird, wie auch für das Standardszenario, nach objektiven Kriterien festgelegt, wobei die Kriterien zur Festlegung der Regularisierungsstärke die gleichen sind.

In Abb. 9.6 ist das Ergebnis für ein simuliertes Wasserdampfretreival dargestellt. Wie für das Retrieval im Standardszenario (Abb. 9.1) wird die Form des Profils in der unteren Stratosphäre zwischen 18 und 25 km nicht gut getroffen. Die geschätzte Unsicherheit infolge des Rauschfehlers liegt bei etwa 5 %. Zwischen 20 und 25 km liegt das Ergebnis um bis zu 20 % unter dem Referenzprofil. Darüber und darunter wird diese Abweichung durch erhöhte Werte gegenüber der Referenz kompensiert. Die Hygropause liegt auch hier im abgeleiteten Profil in 20 km Höhe und damit um 2 km über der tatsächlichen Höhe im Referenzprofil. Zwischen 10 und 15 km Höhe liegt die Abweichung innerhalb der geschätzten Fehlergrenzen. Der Profilverlauf ist sehr gut getroffen. Unterhalb von 10 km wird das Referenzprofil etwas schlechter reproduziert als in der oberen Troposphäre. Die Differenzen zur Referenz liegen hier bei etwa 15 %. Die Werte unterhalb von 4 km stellen eine Extrapolation des Profils bis zum Boden dar, da hier keine spektrale Information gegeben ist. Die Abweichungen sind geringer als diejenigen, die für das Standard-Messszenario beobachtet werden. Die Probleme, die im Standardszenario in der unteren Troposphäre auftreten, werden hier teilweise durch das feiner abgestufte Messgitter abgefangen und die Oszillation des Ergebnisses um die Referenz fällt geringer aus. Die Anzahl der Freiheitsgrade des Signals liegt für dieses Ergebnis bei 16. Für 14 zur Verfügung stehende Messstufen bedeutet das, dass die gemessenen Spektren zusätzlich zu den Wasserdampfwerten in der Tangentenhöhe über die Druckverbreiterung der Linien auch Information über die Verteilung zwischen den Messstufen liefern. χ_{norm}^2 liegt bei etwa 1,11. Das simulierte Spektrum stimmt folglich gut mit dem Referenzspektrum überein.

In Abb. 9.7 ist im linken Bild die Auflösungsmatrix für das reine Wasserdampfretreival dargestellt. Das Retrievalergebnis unterhalb von 6 km Höhe ist durch starke Beiträge aus anderen, darüberliegenden Schichten geprägt. Hier ist das Ergebnis nicht repräsentativ für die Höhenstufen, denen es zugeordnet wird. Für Schichten über 7 km ist eine Zuordnung der Werte zur entsprechenden Höhe möglich. Unterhalb von 15 km liegt die geschätzte vertikale Auflösung zwischen 1,7 und 2,7 km. Oberhalb von 15 km, in der Tropopausenregion, nimmt die vertikale Auflösung ab. Sie beträgt hier 3 bis 3,5 km. Oberhalb von 23 km nimmt das Auflösungsvermögen deutlich ab. Ab 17 km Höhe bestimmt das Tangentenhöhengitter die Auflösung. Oberhalb von 20 km beträgt der Abstand der Tangentenhöhen 5 bis 10 km. Schon unterhalb von 20 km wirkt sich das oberhalb von 20 km weiter abgestufte Messgitter auf die vertikale Auflösung aus. Die Spektren liefern kaum Höheninformation über das Profil zwischen den Tangentenhöhen. In der tropischen Tropopausenregion endet die feine Abstufung des Messgitters im Bereich der Hygropause. Gerade in dieser Region ist eine feinere Abstufung bis über die Hygropause hinaus von Vorteil. Von der ESA sind weitere fein abgestufte Messmodi vorgesehen, bei denen die

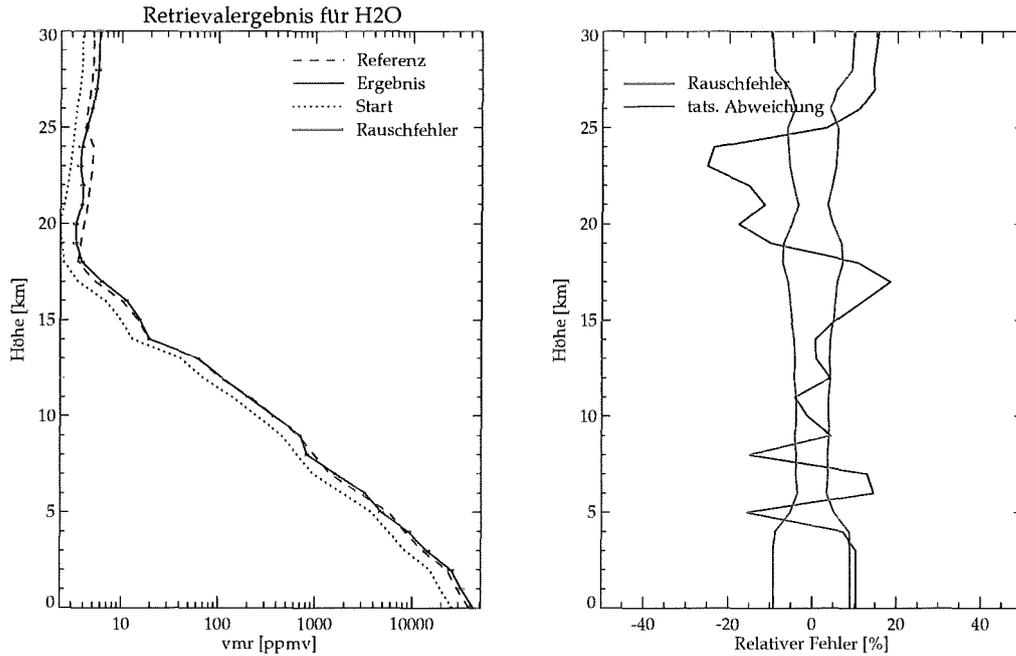


Abbildung 9.6: Ergebnis eines Wasserdampfretrievals für Messungen im UT/LS-Modus. Dargestellt ist das Ergebnisprofil mit Startprofil und Referenzprofil (links), sowie die prozentuale Differenz zwischen Ergebnis und Referenzprofil.

Starthöhe der untersten Tangentenstufe mit der Tropopausenhöhe variiert wird, wodurch auch in den Tropen eine feine Abtastung über die gesamte Tropopausenregion mit der Hygropause vertikal aufgelöste Messungen ermöglicht.

Das Ergebnis des Simultanretrievals mit der Temperatur, das in Abb. 9.8 dargestellt ist, gibt das Referenzprofil in der unteren Stratosphäre bis unter die Tropopause sehr gut wieder. Die Lage und der Feuchtegehalt der Hygropause werden sehr gut getroffen. Die Differenz zum Referenzprofil liegt hier unter 10 %. In der oberen und mittleren Troposphäre,

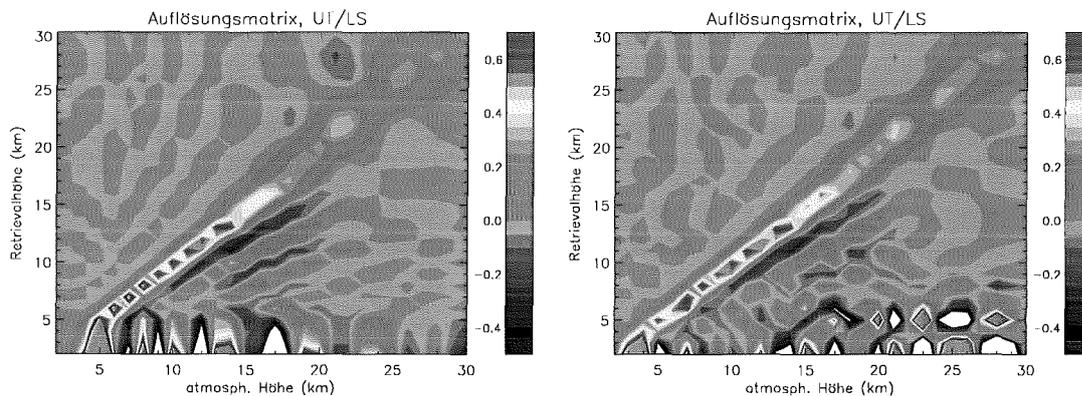


Abbildung 9.7: Auflösungsmatrizen für das Wasserdampfretrieval mit Messungen im UT/LS-Modus. Dargestellt sind die Matrix für das Wasserdampfretrieval (links) und das Simultanretrieval mit der Temperatur (rechts).

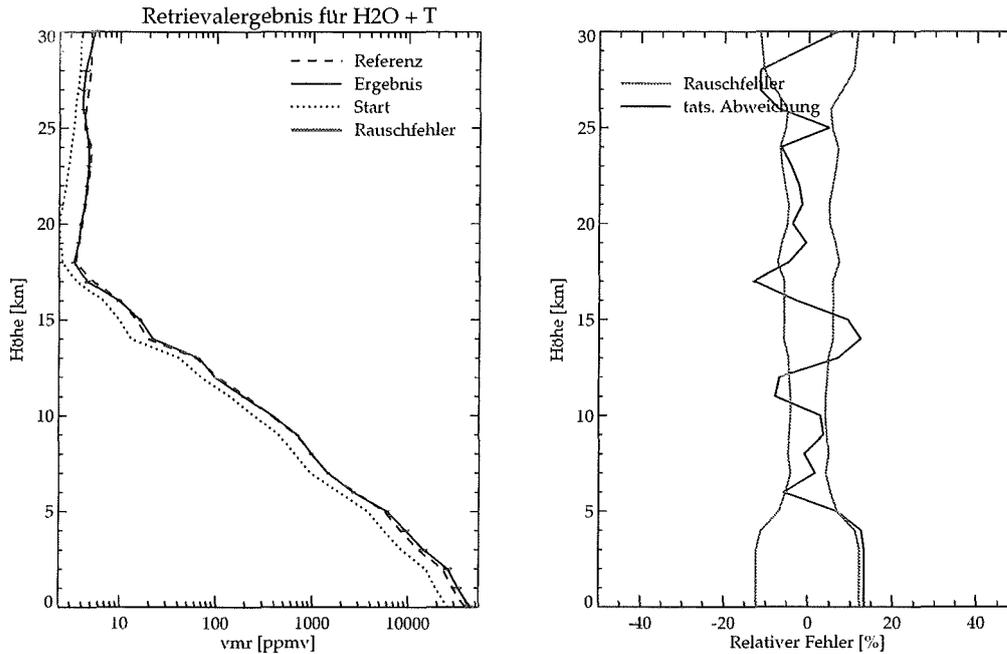


Abbildung 9.8: Wie Abb. 9.6, aber für simultanes Retrieval von Wasserdampf zusammen mit der Temperatur

hinunter bis etwa 6 km Höhe, ist die Differenz zwischen Ergebnis und Referenz mit bis zu 15 % etwas größer als in der Tropopausenregion. Dennoch gibt das abgeleitete Profil das Referenzprofil gut wieder. Die Zahl der Freiheitsgrade liegt hier bei 15,6. Der Wert von $\chi_{norm}^2 = 1,19$ zeigt, dass das Referenzspektrum durch das Retrieval gut nachgebildet wird.

In Abb. 9.7 ist im rechten Bild die Auflösungsmatrix des Ergebnisses dargestellt. Hier ist ebenfalls zu erkennen, dass für Retrievalhöhen unter 7 km keine eindeutige Zuordnung des Ergebnisses zur Retrievalhöhe gemacht werden kann. Ein großer Teil des Signals stammt aus anderen Höhen. Dies deckt sich mit den beobachteten großen Differenzen zwischen Ergebnis und Referenzprofil. Zwischen 8 und 16 km Höhe wird eine gute vertikale Auflösung mit 1,5 bis 2,5 km erreicht. Von der Tropopause bis ca. 23 km nimmt die vertikale Auflösung etwas ab. Sie ist jedoch besser als für den Fall des reinen Wasserdampfretrievals. Die Halbwertsbreiten der Maxima liegen um etwa 400 bis 600 m unter den Werten des reinen Wasserdampfretrievals, was die Überlegenheit der simultanen Auswertung bezüglich der vertikalen Auflösung belegt.

Die starken Nebenmaxima in der Auflösungsmatrix, die in beiden betrachteten Retrievalansätzen für niedrige Tangenten- und Retrievalhöhen auf starke Beiträge aus Schichten über den Retrievalhöhen hinweisen, deuten auf mögliche Vorteile im Retrieval hin, die sich durch Ausschließen der untersten Tangentenhöhen ergeben würden. Daher wird zusätzlich ein RetrievalszENARIO betrachtet, in dem nur Tangentenhöhen von 9,5 km und darüber verwendet werden. Durch den veränderten Messvektor, der die Störeinflüsse der untersten Tangentenhöhen eliminiert, konvergiert die iterative Lösung der Retrievalgleichung schneller. Die Ergebnisse in den nicht veränderten Höhen des Retrievalgitters bleiben gleich und werden durch diese Einschnitte nicht verändert.

Simulierte Retrievalszenarien, bei denen die Tangentenhöhen als nicht genau bekannt angenommen werden, zeigen ein ähnliches Verhalten, wie die betrachteten Fälle für Messungen im Standardmodus. Kleine Unsicherheiten in der Größenordnung weniger hundert Meter führen zu kleinen Änderungen im abgeleiteten Profil.

9.3 Bewertung der Retrievalstrategien

Die Betrachtung der Ergebnisse aus den Fallstudien zeigt, dass die gewählte Retrievalstrategie mit einem fein aufgelösten Retrievalgitter, das unabhängig vom Messgitter ist, geeignet ist, um Wasserdampfprofile in der tropischen Tropopausenregion abzuleiten.

Die Untersuchungen eines Retrievals mit Messungen im Standardmodus verdeutlichen, dass das feine Retrievalgitter Strukturen im Profil zwischen den Tangentenhöhen erfassen kann. Wie bei der Fehlerbetrachtung in Kap. 6 schon ausgeführt wurde, zeigt sich auch hier eine Verbesserung im Ergebnis durch Hinzunahme der Temperatur als zusätzlichen anzupassenden Parameter. Dieses Simultanretrieval zeichnet sich durch kleinere Abweichungen vom Referenzprofil aus. Der Verlauf des Wasserdampfprofils an der Hygropause wird vom Simultanretrieval besser wiedergegeben. Für den untersuchten Fall konnte die Position der Hygropause und das dort herrschende Mischungsverhältnis gut wiedergegeben werden. Für den hier dargestellten Testfall zeigt das reine Wasserdampfretreival in der Tropopausenregion Probleme den Verlauf des Profils und damit die Hygropausenhöhe zu treffen. Hier ist offenbar das Ergebnis von den *a priori* Annahmen der Regularisierung beeinflusst.

In Kap. 6 wurde bei der Betrachtung des Parameterfehlers die Bedeutung der LOS-Unsicherheit für das Retrieval dargestellt. In den betrachteten Testfällen erzeugte eine kleine LOS-Unsicherheit mit etwa 100 bis 200 m Abweichung keine signifikante Differenz zwischen Ergebnis und Referenz. Für das verwendete Retrievalschema wirken sich kleine LOS-Unsicherheiten, wie sie nach einem LOS-Retrieval gegeben sind, nicht signifikant auf das Ergebnis aus. Größere Abweichungen zwischen den angenommenen und den tatsächlichen Tangentenhöhen von 500 m bis 1 km führen vor allem in der Troposphäre zu Problemen bei der numerischen Lösung der Retrievalgleichung und zu schlechteren Retrievalergebnissen.

Der Einfluss von Sättigungseffekten legt die Vermutung nahe, dass durch Abschneiden von niedrigen Tangentenhöhen das Ergebnis verbessert wird. Die betrachteten Testfälle haben aber gezeigt, dass ein Abschneiden keine erkennbare Auswirkung auf das Ergebnis in der Tropopausenregion zeigt.

Am Beispiel einer Messung im Standardmodus wurde dargestellt, dass ein Retrieval, bei dem die Höhenstützstellen der Profile durch das Tangentenhöhengitter gegeben sind, mit dem hier verwendeten Strahlungsübertragungsmodell in der Troposphäre nur bedingt möglich ist. Die lineare Interpolation zwischen den Retrievalhöhen gibt den tatsächlichen exponentiellen Verlauf des Wasserdampfprofils für den großen Gitterabstand nicht richtig wieder. Im Ergebnis ergibt sich dadurch eine systematische Abweichung vom Referenzprofil. Der Verlauf des Profils zwischen den Tangentenhöhen wird durch das grobe Gitter nicht erfasst.

Für Messungen im Standardmodus liefert die gleichzeitige Ableitung von Wasserdampfprofilen zusammen mit der Temperatur für die Tropopausenregion und die obere

Troposphäre in den Tropen bessere Ergebnisse als ein reines Wasserdampfretreival. Auf Grund der Ergebnisse der Fallbeispiele zeigt sich, dass es sinnvoll ist, für die Ableitung von Wasserdampfprofilen in der Tropopausenregion und der oberen Troposphäre ein feineres Retrievalgitter zu benutzen, das unabhängig von den Messhöhen gewählt wird. Zusammen mit dem Ansatz des Simultanretrievals sind gute Ergebnisse für Wasserdampf zu erwarten.

Auch für Messungen im UT/LS-Modus werden die Ergebnisse der Fehlerabschätzung aus Kap. 6 durch die betrachteten Fallstudien bestätigt. Wie erwartet liefert das feinere Messgitter eine bessere vertikale Auflösung. Der Vorteil des Simultanretrievals für das Ergebnis sorgt auch beim UT/LS-Szenario für ein besseres Ergebnis.

Um die UT/LS-Region zu untersuchen, bieten Messungen im UT/LS-Modus eindeutig die Vorteile, die man sich aus der Definition dieses höherauflösenden Messgitters verspricht. Die Untersuchung der Tropopausenregion erfordert hoch auflösende Messungen bis in Höhen, die über der Hygropause liegen. In den Tropen kann die Hygropause durchaus in 20 km auftreten. Die feine Abstufung des UT/LS-Gitters endet hier in etwa 20 km. Für die Tropen wäre daher ein Messgitter, das mit der steigenden Tropopausenhöhe mitgeführt wird, von Vorteil. Hier ist es unwahrscheinlich, dass Messungen bis in 5 km Höhe möglich sind. Auf derart tiefe Messungen könnte aber verzichtet werden zu Gunsten eines feinen Gitters bis 24 km Höhe, das eine gute Erfassung der Hygropause ermöglicht.

Für die Untersuchung der UT/LS-Region sollten, wann immer möglich, Messungen im UT/LS-Modus verwendet werden. Etwa 85 % der Messungen finden im Standard-Messmodus statt. Hier erhält man mit der oben dargestellten Retrievalstrategie zufriedenstellende Ergebnisse.

Kapitel 10

Schlussbetrachtung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Ableitbarkeit von Wasserdampfprofilen in der tropischen Tropopausenregion aus MIPAS-Spektren eingehend betrachtet. Es wurde eine detaillierte Fehlerbilanz für die Ableitung von Wasserdampf erstellt. Die Ergebnisse der Fehlerbilanz wurden anschließend mit Testretrievals bestätigt.

Die Fehlerabschätzung für Messungen auf dem Standard-Messgitter mit einem Tangentenabstand von 3 km in Troposphäre und Stratosphäre unter Verwendung eines Retrievalgitters mit einer Gitterweite von 1 km hat gezeigt, dass die größten Fehlerbeiträge durch die glättenden Eigenschaften der Regularisierung und den Einfluss von im Retrieval nicht mit angepassten Störgrößen, wie z.B. Temperatur, LOS und verschiedene Spurengase, kommen. Vor allem in der tropischen Tropopausenregion und der Troposphäre wird der Gesamtfehler durch die Beiträge von Glättungs- und Parameterfehlern dominiert. Die größten Beiträge zum Parameterfehler resultieren aus der Unsicherheit der Temperatur und der ungenauen Kenntnis der Sichtlinie des Instruments. Es hat sich dabei gezeigt, dass die Hinzunahme der Temperatur als zusätzliche anzupassende Größe im Retrieval, den Fehlerbeitrag des Parameterfehlers in der UT/LS-Region deutlich verringert und gleichzeitig zu einer besseren vertikalen Auflösung führt.

Für die Untersuchung der Tropopausenregion und der dort ablaufenden Prozesse ist für MIPAS ein spezieller UT/LS-Modus vorgesehen, der in der Tropopausenregion und der unteren Stratosphäre mit einem feineren Messgitter messen soll. Die Fehlerabschätzung zeigt, dass die einzelnen Fehlerbeiträge und damit auch der Gesamtfehler für Messungen auf einem 1,5 km-Gitter für Höhen zwischen 5 und 27,5 km gegenüber dem Standard-Messszenario zurückgehen. Das simultane Retrieval von Wasserdampf und Temperatur führt auch im UT/LS-Modus zu Ergebnissen mit deutlich reduzierten Gesamtfehlern im Tropopausenbereich. Durch das feine Messgitter wird, wie erwartet, die vertikale Auflösung erheblich verbessert.

In einem Vergleich mit einer vereinfachten Fehlerabschätzung für das HIRDLS-Instrument wurde gezeigt, dass unter den gegebenen Annahmen die Gesamtfehler für beide Experimente in der Tropopausenregion und der unteren Stratosphäre das Ergebnis ähnlich stark belasten. Die Beiträge der einzelnen Fehlerkomponenten zum Gesamtfehler unterscheiden sich jedoch für die beiden Instrumente. Während für MIPAS der Glättungsfehler den größten Beitrag liefert, spielt dieser für HIRDLS nur eine kleine Rolle. Andererseits ist der Parameterfehler in der Stratosphäre und der Tropopausenregion bei HIRDLS domi-

nierend, während die Auswahl geeigneter Auswertefenster den Parameterfehler für MIPAS klein hält.

In ausgewählten Fallbeispielen für MIPAS wurde mit simulierten Retrievalläufen die Funktionalität der gewählten Retrievalansätze getestet und die Wahl der geeigneten Regularisierungsparameter optimiert. Sowohl für Messungen im Standardmodus wie auch im UT/LS-Modus hat sich dabei die Erkenntnis der Fehlerabschätzung bestätigt, dass die simultane Ableitung von Wasserdampf- und Temperaturprofilen eine bessere Reproduktion des Wasserdampfprofils ermöglicht. Die Ableitung von Wasserdampfprofilen auf einem groben Retrievalgitter, das sich mit den Tangentenhöhen des Standard-Messgitters deckt, hat sich mit dem zur Strahlungsübertragung verwendeten Modell KOPRA als ungünstig erwiesen. Durch die lineare Interpolation der Profilstufen fließt das Profil in der Troposphäre mit fehlerhaften Mittelwerten der Schichten zwischen den Tangententufen in die Strahlungsübertragsrechnung ein und resultiert in einem relativ großen systematischen Fehler im Ergebnis. Das verwendete Retrievalgitter mit 1 km-Abstufung kann den exponentiellen Profilverlauf in der Troposphäre auch mit linear interpolierenden Strahlungsübertragsprogrammen gut erfassen. Für den Fall einer Messung in polaren Breiten ergeben die Testbeispiele aus der AMIL2DA-Studie ebenfalls gute Ergebnisse bei der Ableitung von Wasserdampfprofilen in der UT/LS-Region [v.Clarmann, 2002]. Diese belegen, dass nicht nur in den Tropen gute Wasserdampfmessungen möglich sind.

Der UT/LS-Modus für MIPAS sieht Messungen mit einem 1,5 km-Gitter für den Höhenbereich zwischen 5 und 20 km vor. Für die Auswertung von Messungen im UT/LS-Modus in der tropischen Atmosphäre liegt die oberste Tangentenhöhe des fein abgestuften Messgitters in der Höhe, in der die tropische Hygropause erwartet wird. Hier ergibt sich durch die großen Abstände der Tangentenhöhen oberhalb von 20 km ein deutlicher Verlust in der vertikalen Auflösung.

Die Ergebnisse aus der Fehlerabschätzung und den simulierten Retrievalläufen zeigen, dass in der tropischen UT/LS-Region gute Ergebnisse aus den Messungen mit MIPAS zu erwarten sind. Die Auflösung der Hygropause bis auf ca. 1,5 km und die genauen Messungen in der tropischen Übergangsschicht (TTL) können wertvolle Erkenntnisse über die Bedeutung dieser Region für den Transport von Luftmassen und Wasserdampf in die untere Stratosphäre der Tropen liefern. Aus den Profilmessungen der TTL werden Rückschlüsse auf die Dehydration der Luft auf ihrem Weg in die Stratosphäre erhofft.

Die globale Abdeckung mit Wasserdampfprofilen in der Stratosphäre und der UT/LS-Region ermöglicht die Beobachtung einer globalen Wasserdampfverteilung. Entlang der Flugbahn des Satelliten wird etwa alle 500 km eine vertikale Abtastung der Atmosphäre durchgeführt. Diese Auflösung ist zu grob, um klein- und mesoskalige Strukturen horizontal aufzulösen. Die zeitliche Abfolge aufeinanderfolgender Messungen entlang der Flugbahn ist geeignet, großskalige Phänomene und Verteilungen mit Ausdehnungen von 500 km und mehr zu erfassen. Da die Erstellung einer globalen Wasserdampfkarte mit Messungen von mehreren Tagen geschieht, können hier nur Strukturen erfasst werden, die sich im Lauf weniger Tage nur geringfügig ändern. Mit Hilfe von Methoden der Datenassimilation können auch Vorgänge betrachtet werden, die in kürzeren Zeiträumen stattfinden. Die Zeitskalen für Veränderungen in der Stratosphäre sind größer als die Prozesse, die in der Troposphäre ablaufen.

Das Bild der Wasserdampfverteilung in der unteren Stratosphäre, das man durch

MIPAS-Messungen erhält, lässt eine Analyse der Verteilung und deren Veränderung in verschiedenen Zeitskalen von einigen Tagen bis hin zu einigen Jahren (maximal der Lebensdauer des Instruments) zu. In den Tropen sollte es möglich sein, aus Profilen innerhalb der „tropical pipe“, die in regelmäßigen Abständen aufgenommen werden, vertikale Transportprozesse und den damit verbundenen „tape recorder effect“ zu beobachten. Die Transportprozesse zwischen den Tropen und Außertropen können anhand von unterschiedlichen Wasserdampfmischungsverhältnissen verfolgt werden, sofern keine Mischungsprozesse zwischen den Luftmassen stattfinden. MIPAS kann die meridionale Verteilung von Wasserdampf in der innertropischen Konvergenzzone und deren zeitliche Variation erfassen.

Der Austausch zwischen der untersten Stratosphäre und der Troposphäre außerhalb der Tropen kann, wenn er nicht zu schnell abläuft, beobachtet werden. Wasserdampfmessungen in der untersten Stratosphäre können durch ihre genauen Messungen dazu beitragen, die Bedeutung als Übergangsschicht zwischen Troposphäre und ungestörter Stratosphäre aufzuzeigen. In der UT/LS-Region kann anhand des Wasserdampfmischungsverhältnisses auf den Ursprung der Luft geschlossen werden. Trockene Luftpakete in der Troposphäre deuten auf einen stratosphärischen Ursprung hin und feuchte Luft in der Stratosphäre auf troposphärischen Ursprung.

Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Fälle zeigen, dass die Messungen mit MIPAS dazu beitragen können, einige der offenen Fragen im Zusammenhang mit dem stratosphärischen Wasserdampf und Transportprozessen in der UT/LS-Region zu klären. Am IMK werden im Rahmen der wissenschaftlichen Auswertung der MIPAS-Spektren verschiedene Ziele verfolgt. Einen Schwerpunkt wird die Untersuchung der Vorgänge in der UT/LS-Region sein, die dazu beitragen sollen, die Vorgänge zu verstehen und deren Umsetzung in atmosphärischen Modellen zu ermöglichen.

Literaturverzeichnis

- [SPA, 2000] (2000). SPARC assessment of upper tropospheric and stratospheric water vapour. WCRP - 113, WMO/TD - No. 1043, SPARC Report No. 2.
- [Atticks and Robinson, 1983] Atticks, M. G. and Robinson, G. D. (1983). Some features of the structure of the tropical tropopause. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 109:295–308.
- [A.Tuck et al., 1997] A.Tuck, Baumgardner, D., Chan, K., Dye, J., Elkins, J., Gary, B., Hovde, S., Kelly, K., Loewenstein, M., Margitan, J., May, R., Podiolske, J., Proffitt, M., Rosenlof, K., Smith, W., Webster, C., and Wilson, J. (1997). The brewer-dobson circulation in the light of high altitude in-situ aircraft observations. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 124:1–70.
- [Blom et al., 1999] Blom, C. E., Gulde, T., Keim, C., Kimmig, W., Piesch, C., Sartorius, C., and Fischer, H. (1999). MIPAS-STR: A new instrument for stratospheric aircraft. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 693–694. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Brandt, 1992] Brandt, S. (1992). *Datenanalyse*. Bibliographisches Institut, Mannheim.
- [Brasseur and Solomon, 1986] Brasseur, G. and Solomon, S. (1986). *Aeronomy of the Middle Atmosphere*. Atmospheric Science Library, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, second edition.
- [Brewer and Dobson, 1949] Brewer, A. W. and Dobson, G. M. B. (1949). Evidence for a world circulation provided by measurements of helium and water vapour distribution in the atmosphere. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 75(13):351–363.
- [Brindley and Harries, 1998] Brindley, H. and Harries, J. E. (1998). The impact of far IR absorption on clear sky greenhouse forcing: Sensitivity studies at high spectral resolution. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 60(2):151–180.
- [Carli et al., 1998] Carli, B., Ridolfi, M., Raspollini, P., Dinelli, B. M., Dudhia, A., and Echle, G. (1998). Study of the retrieval of atmospheric trace gas profiles from infrared spectra. Technical report, European Space Agency. Final Report of ESA Contract 12055/96/NL/CN.
- [Chandrasekhar, 1960] Chandrasekhar, S. (1960). *Radiative Transfer*. Dover Publ., New York.

- [Clough et al., 1989] Clough, S. A., Kneizys, F. X., Anderson, G. P., Shettle, E. P., Chetwynd, J. H., Abreu, L. W., Hall, L. A., and Worsham, R. D. (1989). FASCOD3: Spectral simulation. In Lenoble, J. and Geleyn, J.-F., editors, *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 1988: Current Problems in Atmospheric Radiation, Lille, France, 18–24 August 1988*, pages 372–375. A. Deepak Publishing, Hampton, Va, USA.
- [Crutzen, 1971] Crutzen, P. J. (1971). Ozone production rates in an oxygen–hydrogen–nitrogen oxide atmosphere. *J. Geophys. Res.*, 76(30):7311–7327.
- [de F. Forster and Shine, 1999] de F. Forster, P. M. and Shine, K. P. (1999). Stratospheric water vapour changes as possible contributor to observed stratospheric cooling. *Geophys. Res. Lett.*, 26:3309–3312.
- [Dobson et al., 1946] Dobson, G. M. B., Brewer, A. W., and Cwilong, B. (1946). The meteorology of the stratosphere. *Proc. R. Soc. London*, 185:144–175.
- [Echle, 1998] Echle, G. (1998). Persönl. Mitteilung.
- [Edwards, 1992] Edwards, D. P. (1992). GENLN2: A general line-by-line atmospheric transmittance and radiance model. Technical report, NCAR, Boulder, Colorado. Version 3.0, Description and users guide, NCAR/TN-367+STR.
- [Edwards et al., 1995] Edwards, D. P., Gille, J. C., Bailey, P. L., and Barnett, J. J. (1995). Selection of sounding channels for the High Resolution Dynamics Limb Sounder. *Appl. Opt.*, 34(30):7006–7018.
- [Endemann, 1999] Endemann, M. (1999). MIPAS instrument concept and performance. In *Proceedings of European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, Noordwijk, Netherlands, 18–22 January*, pages 29–43. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Endemann et al., 1993] Endemann, M., G.Lange, and Fladt, B. (1993). Michelson interferometer for passive atmospheric sounding (MIPAS): a high-resolution limb sounder for the european polar platform. In Lynch, D., editor, *Passive Infrared Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere*, volume 1934, pages 296–307. Orlando, USA, 13–15 April, 1993.
- [Fischer, 1992] Fischer, H. (1992). Remote sensing of atmospheric trace constituents using Fourier Transform Spectrometry. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 96(3):306–314.
- [Fischer and Oelhaf, 1996] Fischer, H. and Oelhaf, H. (1996). Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb-emission spectrometers. *Appl. Opt.*, 35(16):2787–2796.
- [Fischer et al., 1988] Fischer, H., Rabus, D., Girard, A., Gauffre, G., Müller, C., Flaud, J., Camy-Peyret, C., Ehhalt, D., Crutzen, P. J., Labitzke, K., and Cariolle, D. (1988). MIPAS, Michelson interferometer for passive atmospheric sounding on the european polar platform. Proposal to ESA.

- [Fujiwara et al., 1998] Fujiwara, M., Kita, K., and Ogawa, T. (1998). Stratosphere-troposphere exchange of ozone associated with the equatorial Kelvin wave as observed with ozonesondes and rainsondes. *J. Geophys. Res.*, 103(D15):19,173–19,182.
- [Fujiwara et al., 2000] Fujiwara, M., Kita, K., Ogawa, T., Kawakami, S., and Sano, T. (2000). Seasonal variation of tropospheric ozone in Indonesia revealed by 5-year ground-based observations. *J. Geophys. Res.*, 105:1879–1888.
- [Funke, 2000] Funke, B. (2000). Ein Modell für die Zustandsverteilung von NO bei nichtvorhandenem lokalem thermodynamischem Gleichgewicht und dessen Nutzung zur Ableitung atmosphärischer Parameter aus 5.3 μm Emissionsspektren. Wissenschaftliche Berichte FZKA 6413, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Funke, 2001] Funke, B. (2001). Persönl. Mitteilung.
- [Gettelman and Baughcum, 1999] Gettelman, A. and Baughcum, S. L. (1999). Direct deposition of subsonic aircraft emissions into the stratosphere. *J. Geophys. Res.*, 104(D7):8317–8327.
- [Gille and Barnett, 1992] Gille, J. C. and Barnett, J. J. (1992). The High Resolution Dynamics Limb Sounder (HIRDLS). An instrument for the study of global change. In Gille, J. C. and Visconti, G., editors, *The Use of EOS for Studies of Atmospheric Physics*, pages 433–450, North-Holland, New York.
- [Gille and Barnett, 1996] Gille, J. C. and Barnett, J. J. (1996). Conceptual design of the high resolution dynamics limb sounder (HIRDLS) for the EOS chemistry mission. In *Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research II, 5–6 August 1996, Denver, CO*, volume 2830, pages 190–201.
- [Glatthor, 2001] Glatthor, N. (2001). Persönl. Mitteilung.
- [Grabowski, 2001] Grabowski, U. (2001). Persönl. Mitteilung.
- [Gutzler, 1992] Gutzler, D. (1992). Climatic variability of temperature and humidity over the tropical western pacific. *Geophys. Res. Lett.*, 19:1595–1598.
- [Hansen, 1992] Hansen, P. C. (1992). Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve. *SIAM Rev.*, 34(4):561–580.
- [Harries, 1996] Harries, J. E. (1996). The greenhouse earth: A view from space. *Q. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 122:799–818.
- [Hartmann et al., 2001] Hartmann, D. L., Holton, J. R., and Fu, Q. (2001). The heat balance of the tropical tropopause, cirrus and stratospheric dehydration. *Geophys. Res. Lett.*, 28(10):1969–1972.
- [Hase, 2000] Hase, F. (2000). Inversion von Spurengasprofilen aus hochaufgelösten bodengebundenen FTIR-Messungen in Absorption. Wissenschaftliche Berichte FZKA 6512, Forschungszentrum Karlsruhe.

- [Hase et al., 1999] Hase, F., Blumenstock, T., and Paton-Walsh, C. (1999). Analysis of the instrumental line shape of high-resolution Fourier transform IR spectrometers with gas cell measurements and new retrieval software. *Appl. Opt.*, 38(15):3417–3422.
- [Highwood and Hoskins, 1998] Highwood, E. J. and Hoskins, B. J. (1998). The tropical tropopause. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 124(549):1579–1604.
- [Holton et al., 1995] Holton, J. R., Haynes, P. H., M. E, M., Douglas, A. R., Rood, R. B., and Pfister, L. (1995). Stratosphere - troposphere exchange. *Reviews of Geophysics*, 33(4):403–439.
- [Höpfner, 2000] Höpfner, M. (2000). Geophysical model and atmospheric layering. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 29–34. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Höpfner et al., 1998] Höpfner, M., Stiller, G. P., Kuntz, M., von Clarmann, T., Echle, G., Funke, B., Glatthor, N., Hase, F., Kemnitzer, H., and Zorn, S. (1998). The Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm. Part II: Interface to retrieval applications. In Wang, J., Wu, B., Ogawa, T., and Guan, Z., editors, *Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds, Beijing, China, 15–17 September 1998*, volume 3501, pages 186–195.
- [Jucks and Salawitch, 2000] Jucks, K. W. and Salawitch, R. J. (2000). Future changes in upper stratospheric ozone. *Geophys. Monograph*, 123:241–255.
- [Kley et al., 1979] Kley, D., Stone, E. J., Henderson, W. R., Drummond, J. W., Harrop, W. J., a. L. Schmeltekopf, Thompson, T. L., and Winkler, R. H. (1979). In situ measurements of the mixing ratio of water vapor in the stratosphere. *J. Atmos. Sci.*, 36:2513–2524.
- [Lachance, 1999] Lachance, R. (1999). MIPAS level 1b algorithm technical baseline document: an overview. In *Proceedings of European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, Noordwijk, Netherlands, 18–22 January*, pages 51–63.
- [Lambert et al., 1999] Lambert, A., Bailey, P., Edwards, D., Gille, J., Johnson, B., Halvorson, C., Massie, S., and Stone, K. (1999). High Resolution Dynamics Limb Sounder (hirdls) level-2 Algorithm Theoretical Basis Document. Hirdls internal document sw-hir-339, National Center for Atmospheric Research, Boulder, CO, USA.
- [Maidment, 1993] Maidment, D. R., editor (1993). *Handbook of Hydrology*. McGraw-Hill.
- [McKee et al., 1969] McKee, T. B., Whitman, R. I., and Lambiotte, Jr., J. J. (1969). A technique to infer atmospheric water-vapor mixing ratio from measured horizon radiance profiles. Technical Report TN D-5252, NASA, Washington, D.C.
- [Molina and Rowland, 1974] Molina, M. J. and Rowland, F. S. (1974). Stratospheric sink for chlorofluoromethanes: Chlorine atom-catalysed destruction of ozone. *Nature*, 249:810–812.

- [Mote et al., 1996] Mote, P. W., Rosenlof, K. H., McIntyre, M. E., Carr, E. S., Gille, J. C., Holton, J. R., Kinnersley, J. S., Pumphrey, H. C., III, J. M. R., and Waters, J. W. (1996). An atmospheric tape recorder: The imprint of tropical tropopause temperatures on stratospheric water vapor. *J. Geophys. Res.*, 101:3989–4006.
- [Nedoluha et al., 1998] Nedoluha, G. E., Bevilacqua, R. M., Gomez, R. M., Siskind, D. E., Hicks, B. C., and III, J. M. R. (1998). Increases in middle atmospheric water vapor as observed by the halogen occultation experiment (haloe) and the ground-based water vapor millimeter-wave spectrometer from 1991 - 1997. *J. Geophys. Res.*, 103:3531–3542.
- [Norton and Beer, 1976] Norton, H. and Beer, R. (1976). New apodizing functions for Fourier spectrometry. *J. Opt. Soc. Am*, 66(3):259–264. (Errata *J. Opt. Soc. Am.*, 67, 419, 1977).
- [Oelhaf et al., 1996] Oelhaf, H., von Clarmann, T., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Keim, C., Maucher, G., Sartorius, C., Seefeldner, M., Trieschmann, O., Wetzels, G., and Wölfel, M. (1996). Remote sensing of the Arctic stratosphere with the new balloon-borne MIPAS-B2 instrument. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3rd Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 270–275, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Oltmans and Hofmann, 1995] Oltmans, S. J. and Hofmann, D. J. (1995). Increase in lower-stratospheric water vapor at a mid-latitude northern hemisphere site from 1981 to 1994. *Nature*, 374:146–149.
- [Peixoto and Oort, 1992] Peixoto, J. and Oort, A. (1992). *Physics of Climate*. American Institute of Physics, New York.
- [Peter, 2000] Peter, T. (2000). Ultrathin subvisible cirrus clouds at the tropical tropopause. In *AIP CONFERENCE PROCEEDINGS*, number 534, pages 619–622.
- [Phillips, 1962] Phillips, D. (1962). A technique for the numerical solution of certain integral equations of first kind. *J. Ass. Comput. Mat.*, 9:84–97.
- [Plumb, 1996] Plumb, R. A. (1996). A "tropical pipe" model of stratospheric transport. *J. Geophys. Res.*, 101(D2):3957–3972.
- [Press et al., 1996] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., and Flannery, B. P. (1996). *Numerical Recipes in FORTRAN 90*. Cambridge University Press, Cambridge, zweite edition.
- [Randel et al., 1996] Randel, D. L., Haar, T. H. V., Ringerud, M. A., Stephens, G., Greenwald, T. J., and Combs, C. L. (1996). A new global water vapor dataset. *Bulletin of the AMS*, 77(6).
- [Randel et al., 1999] Randel, W. J., Wu, F., Russell III, J. M., and Waters, J. (1999). Space-time patterns of trends in stratospheric constituents derived from UARS measurements. *J. Geophys. Res.*, 104(D3):3711–3727.

- [Remedios, 1999] Remedios, J. J. (1999). Extreme atmospheric constituent profiles for MIPAS. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 779–782. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Ridolfi et al., 2000] Ridolfi, M., Carli, B., Carlotti, M., von Clarmann, T., Dinelli, B., Dudhia, A., Flaud, J.-M., Höpfner, M., Morris, P. E., Raspollini, P., Stiller, G., and Wells, R. J. (2000). Optimized forward and retrieval scheme for MIPAS near-real-time data processing. *Appl. Opt.*, 39(8):1323–1340.
- [Rinsland et al., 1985] Rinsland, C. P., Levine, J. S., and Miles, T. (1985). Concentration of methane in the troposphere deduced from 1952 infrared solar spectra. *Nature*, 318:245–249.
- [Rodgers, 1976] Rodgers, C. D. (1976). Retrieval of atmospheric temperature and composition from remote measurements of thermal radiation. *Rev. Geophys. Space Phys.*, 14(4):609–624.
- [Rodgers, 2000] Rodgers, C. D. (2000). *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*, volume 2 of *Series on Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics*, F. W. Taylor, ed. World Scientific.
- [Ross and Elliot, 1996] Ross, R. J. and Elliot, W. P. (1996). Tropospheric water vapour climatology and trends over north america. *J. Climate*, 9:3561–3574.
- [Rothman et al., 1998] Rothman, L. S., Rinsland, C. P., Goldman, A., Massie, T., Edwards, D. P., Flaud, J.-M., Perrin, A., Camy-Peyret, C., Dana, V., Mandin, J.-Y., Schroeder, J., McCann, A., Gamache, R. R., Wattson, R. B., Yoshino, K., Chance, K. V., Jucks, K. W., Brown, L. R., Nemtchinov, V., and Varanasi, P. (1998). The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN atmospheric workstation): 1996 edition. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 60(5):665–710.
- [Russell III and Drayson, 1972] Russell III, J. M. and Drayson, S. R. (1972). The inference of atmospheric ozone using satellite horizon measurements in the 1042 cm^{-1} band. *J. Atmos. Sci.*, 29:376–390.
- [Shindell, 2001] Shindell, D. T. (2001). Climate and ozone response to increased stratospheric water vapor. *Geophys. Res. Lett.*, 28(8):1551–1554.
- [Simmons et al., 1999] Simmons, A. J., Untch, A., and Jakob, C. (1999). Stratospheric water vapor and tropical tropopause temperatures in ecmwf analyses and multi-year simulations. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 125:353–386.
- [Slingo and Webb, 1997] Slingo, A. and Webb, M. J. (1997). The spectral signature of global warming. *Q. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 123:293–307.
- [Smith et al., 2000] Smith, C. A., Toumi, R., and Haigh, J. D. (2000). Seasonal trends in stratospheric water vapour. *Geophys. Res. Lett.*, 27(12):1687–1690.

- [Steck, 2002] Steck, T. (2002). Methods for determining regularization for atmospheric retrieval problems. *Applied Optics*, 41(9):1788–1797.
- [Steck and von Clarmann, 2001] Steck, T. and von Clarmann, T. (2001). Constrained profile retrieval applied to the observation mode of the Michelson interferometer for passive atmospheric sounding. *Appl. Opt.*, 40(21):3559–3571.
- [Stiller, 2000] Stiller, G. P., editor (2000). *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm (KOPRA)*, volume FZKA 6487 of *Wissenschaftliche Berichte*. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Stiller et al., 2002] Stiller, G. P., von Clarmann, T., Fischer, H., Funke, B., Glatthor, N., Grabowski, U., Höpfner, M., Kiefer, M., and Milz, M. (2002). *Entwicklung eines Auswerte-Algorithmus und eines Datenverarbeitungssystems für das MIPAS Satellitenexperiment*, volume FZKA 6703 of *Wissenschaftliche Berichte*. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Tikhonov, 1963] Tikhonov, A. (1963). On the solution of incorrectly stated problems and method of regularization. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 151:501.
- [Toon et al., 1992] Toon, G. C., Farmer, C. B., Shaper, P. W., Lowes, L. L., Norton, R. H., Schoeberl, M. R., Lait, L. R., and Newman, P. A. (1992). Evidence for subsidence in the 1989 Arctic winter stratosphere from airborne infrared composition measurements. *J. Geophys. Res.*, 97:7963–7970.
- [v.Clarmann, 2002] v.Clarmann, T. (2002). Persönl. Mitteilung.
- [Volk et al., 1996] Volk, C. M., Elkins, J. W., Fahey, D. W., Salawitch, R. J., Dutton, G. S., Gillian, J. M., Proffitt, M. H., Loewenstein, M., Podolske, J. R., Minschwaner, K., and Chan, J. J. M. (1996). Quantifying transport between the tropical and mid-latitude lower stratosphere. *Science*, 272:1763–1768.
- [von Clarmann and Echle, 1997] von Clarmann, T. and Echle, G. (1997). Selection of optimized microwindows for atmospheric spectroscopy. In *Fourier Transform Spectroscopy*, volume 3 of *OSA Technical Digest Series*, pages 44–46. Optical Society of America, Washington, D.C.
- [von Clarmann and Echle, 1998a] von Clarmann, T. and Echle, G. (1998a). The Karlsruhe Occupation Matrix Algorithm (KOMA). Technical report, European Space Agency, ESTEC. Technical Note, ESA Contract Number 11717/95/NL/CN, CCN2.
- [von Clarmann and Echle, 1998b] von Clarmann, T. and Echle, G. (1998b). Selection of optimized microwindows for atmospheric spectroscopy. *Appl. Opt.*, 37(33):7661–7669.
- [von Clarmann et al., 2001] von Clarmann, T., Fischer, H., Funke, B., Glatthor, N., Grabowski, U., Höpfner, M., Kiefer, M., Martín-Torres, F. J., Milz, M., and Stiller, G. P. (2001). MIPAS interactive semi-operational level-2 data processing. In Smith, W. L. and Timofeyev, Y. M., editors, *IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation*, pages 785–788. A. Deepak Publishing, Hampton, Va, USA.

- [Wentz and Schabel, 2000] Wentz, F. J. and Schabel, M. (2000). Precise climate monitoring using complementary satellite data sets. *Nature*, 403:414–416.
- [Zander et al., 1989] Zander, R., Demoulin, P., Ehhalt, D. H., and Schmidt, U. (1989). Secular increase of the vertical column abundance of methane derived from IR solar spectra recorded at the Jungfraujoch station. *J. Geophys. Res.*, 94(D8):11,029–11,039.
- [Zhou et al., 2001] Zhou, X., Geller, M. A., and Zhang, M. (2001). The cooling trend of the tropical cold point tropopause temperatures and its implications. *J. Geophys. Res.*, 106:1511–1522.

Anhang A

In der Fehlerrechnung angenommene Unsicherheiten der verwendeten Parameter

Störgröße	0 - 17 km	17 - 25 km	25 - 50 km	50 - 120 km
Temperatur	1,5 K	1,5 K	1,5 K	1,5 K
CO ₂	0,5 %	0,5 %	0,2 %	13 %
O ₃	20 %	10 %	10 %	20 %
CH ₄	3 %	15 %	15 %	30 %
N ₂ O	3 %	15 %	15 %	30 %
HNO ₃	50 %	10 %	20 %	200 %
CO	100 %	130 %	250 %	130 %
NO ₂	100 %	10 %	10 %	10 %
N ₂ O ₅	40 %	28 %	1000 %	1000 %
ClO	17 %	1000 %	1000 %	1000 %
HOCl	1000 %	570 %	1000 %	1000 %
ClONO ₂	1000 %	1000 %	1000 %	1000 %
NO	1000 %	1000 %	1000 %	610 %
HCN	94 %	97 %	50 %	24 %
NH ₃	100 %	33 %	100 %	100 %
CFC - 11	10 %	30 %	1000 %	1000 %
CFC - 12	11 %	31 %	1000 %	1000 %
CFC - 14	10 %	10 %	8,1 %	10 %
CFC - 22	17 %	14 %	10 %	360 %
CCl ₄	5 %	9 %	9 %	10 %
COF ₂	35 %	75 %	57 %	200 %
H ₂ O ₂	1000 %	1000 %	1000 %	1000 %
C ₂ H ₂	170 %	1000 %	1000 %	1000 %
C ₂ H ₆	17 %	57 %	75 %	0 %
OCS	26 %	30 %	31 %	1 %
SO ₂	1000 %	930 %	1000 %	1000 %
SF ₆	23 %	28 %	65 %	66 %

Tabelle A.1: Verwendete Unsicherheiten für die Störung des gesamten Profils der interferierenden Gase und Parameter [Remedios, 1999], [Ridolfi et al., 2000]

Anhang B

Verwendete Symbole und Abkürzungen

B.1 Verwendete Symbole

$\alpha(\nu, s)$	Absorptionsvermögen
$\epsilon(\nu, s)$	Emissivität
$\vec{\epsilon}_b$	Standardabweichung des Parameters b
$\vec{\epsilon}_y$	Rauschen der Messung y in Vektorschreibweise
$\vec{\epsilon}_n$	Rauschfehler im Ergebnis
$\vec{\epsilon}_p$	Parameterfehler im Ergebnis
$\vec{\epsilon}_s$	Glättungsfehler im Ergebnis
$\vec{\epsilon}_m$	Modellfehler im Ergebnis
$\Delta\nu$	Spektralintervall
$\Delta\nu_{ideal}$	erreichbare Auflösung eines Fourierinterferometers
$\Delta\vec{F}$	Abweichung des Vorwärtsmodells von der Realität
$\Delta\vec{x}_{b,i}$	Abweichung des Retrievalergebnisses als Folge einer Störung im Modellparameter \vec{b}_i
$\delta(\nu, s)$	optische Dicke
δ_g	optische Dicke eines einzelnen Gases g
γ	Regularisierungsparameter für Tikhonov-Phillips-Regularisierung
λ	Wellenlänge
ν	Wellenzahl, inverse Wellenlänge
$\rho_a(s)$	Absorberdichte bei s
$\rho_a(s, g)$	Absorberdichte des Gases g bei s
ρ_w	Dichte des Wasserdampfs
ρ	Dichte der feuchten Luft
ρ_l	Dichte der trockenen Luft
τ_i	Transmission der Schicht i
$\tau(\nu, s, s_1)$	Transmission der Schicht zwischen s und s_1
Θ	potentielle Temperatur

a	absolute Feuchte
\mathbf{A}	Auflösungsmatrix
$B(\nu, T)$	Planck-Funktion
c	Vakuum-Lichtgeschwindigkeit
$dI_{em}(\nu)$	infinitesimale Änderung der Strahldichte durch Emission
$dI_{abs}(\nu)$	infinitesimale Änderung der Strahldichte durch Absorption
$dI(\nu)$	infinitesimale Änderung der Strahldichte
$d\nu$	infinitesimaler Spektralbereich
ds	infinitesimale Wegstrecke
e	Partialdruck des Wasserdampfs
$E(t)$	Sättigungsdampfdruck des Wasserdampfs
$f(\nu)$	Filterfunktion eines Kanals
$\vec{F}(\vec{x})$	Funktion des Strahlungsübertragungsmodells
$f(\nu)$	spektrale Filterfunktion
\mathbf{G}_y	verallgemeinerte Inverse
h	Planck'sche Konstante
h_t	Tangentenhöhe
\mathbf{I}	Einheitsmatrix
$I_i(\nu)$	Strahldichtebeitrag der Teilschicht i
$I(\nu, s), I(\nu)$	Strahldichte
$I_0(\nu)$	Strahldichte vor dem Eintritt in ein Luftvolumen
k	Boltzmann-Konstante
$k(\nu, s)$	Absorptionskoeffizient bei ν und s
$k(\nu, s, g)$	Absorptionskoeffizient des Gases g bei ν und s
\mathbf{K}	Jacobimatrix
\mathbf{K}_b	Jacobimatrix bzgl. der Störgröße \vec{b}
l_{wv}	Verdunstungswärme von Wasser
l_{ew}	Schmelzwärme von Wasser
\mathbf{L}	Regularisierungsoperator
\mathbf{L}_0	Tikhonov-Phillips Regularisierungsoperator nullter Ordnung
\mathbf{L}_1	Tikhonov-Phillips Regularisierungsoperator erster Ordnung
m	Mischungsverhältnis von Wasser
m_l	Molekulargewicht von trockener Luft
m_w	Molekulargewicht von Wasser
n	Dimension des Parametervektors \vec{x}
N	Anzahl der Wegstücke entlang des Sehstrahls
N_g	Anzahl der berücksichtigten Gase
p	Druck
p_i	Partialdruck der Größe i
$P(\vec{x})$	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Größe \vec{x}
q	spezifische Feuchte
\vec{r}	Parameter der Nebenbedingung
r	relative Luftfeuchte
R^*	universelle Gaskonstante
s	Wegstrecke

S_a	Kovarianzmatrix des <i>a priori</i> -Parametervektors
S_b	Kovarianzmatrix der Störparameter \vec{b}
S_{cb}	Fehler-Kovarianzmatrix im Ergebnis durch Störung \vec{b}
$S_{b,i}$	Kovarianzmatrix des Parameterfehlers erzeugt durch Störung von \vec{b}_i
S_m	Kovarianzmatrix des Modellfehlers \vec{e}_m
S_F	Kovarianzmatrix des Modellfehlers im Spektralraum
S_n	Kovarianzmatrix des Rauschfehlers \vec{e}_n
S_s	Kovarianzmatrix des Glättungsfehlers \vec{e}_s
S_{x_e}	Kovarianzmatrix von Profilen der gesuchten Größe im Parameterraum
S_p	Kovarianzmatrix des Parameterfehlers \vec{e}_p
S_{tot}	Kovarianzmatrix des Gesamtfehlers
S_y	Kovarianzmatrix der Messung
t	Temperatur in ° C
t_d	Taupunkt in in ° C
T	Temperatur in K
T_{backgr}	Strahlungstemperatur des Hintergrunds in K
T_i	mittlere Temperatur der Schicht i in K
\vec{y}	Vektor mit Spektren
$\vec{y}_{b,i}$	Spektrum eines um $\Delta\vec{b}_i$ gestörten Parameterprofils \vec{b}_i
\vec{y}_{mess}	Vektor mit gemessenen Spektren
\vec{y}_{calc}	Vektor mit berechneten Spektren
\vec{x}	Parametervektor
\vec{x}_0	Erwartungswert des Ereignisses \vec{x}
\vec{x}_a	<i>a priori</i> des Parametervektors
$\hat{\vec{x}}$	geschätzte Lösung des Parametervektors
v	spezifisches Volumen
v_i	spezifisches Volumen der Größe i
W	Wichtungsfunktion für höhenabhängige Regularisierung

B.2 Verwendete Abkürzungen

CPT	cold point tropopause
CSRT	clear-sky radiative tropopause
Envsat	Environmental Satellite
EOS	earth observing system
ESA	European space agency
EZMW	Europäisches Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage
FTIR	Fourier Transformation im Infrarot
FCKW	Fluor-Chlor-Kohlenwasserstoffverbindung
FOV	field of view
GOMOS	global ozone monitoring by occultation of stars
HALOE	halogen occultation experiment
HIRDLS	high resolution dynamics limb sounder
HIRS	high resolution infrared radiation sounder
IMK	Institut für Meteorologie und Klimaforschung
ITKZ	Innertropische Konvergenz Zone
KOMA	Karlsruhe occupation matrix algorithm
KOPRA	Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm
LTE	local thermodynamic equilibrium
LOS	line of sight
LRT	lapse rate tropopause
MIPAS	Michelson Interferometer für passive atmosphärische Sondierung
MLS	microwave limb sounder
MPD	maximum path difference
NASA	national aeronautics and space administration
ppmv	parts per million by volume
ppbv	parts per billion by volume
pptv	parts per trillion by volume
PSC	polar stratospheric cloud
PVU	potential vorticity unit
SCIAMACHY	scanning imaging absorption spectrometer for atmospheric cartography
SSM/I	special sensor microwave imager
STE	stratosphere – troposphere exchange
SÜG	Strahlungsübertragungsgleichung
TTL	tropical transition layer / tropical tropopause layer
UT/LS	upper troposphere/lower stratosphere
UTH	upper tropospheric humidity
UTTC	ultrathin tropical cirrus
vmr	volume mixing ratio
WMO	world meteorological organisation
ZPD	zero path difference

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung des hydrologischen Kreislaufs	5
2.2	Der Strahlungshaushalt der Erde	7
2.3	Globale Verteilung der mittleren Wasserdampfgesamtsäulen	10
2.4	Schematische Darstellung der Austauschprozesse zwischen Stratosphäre und Troposphäre	13
2.5	Mittlere jährliche zonale Wasserdampfverteilung in der Stratosphäre	14
4.1	Zusammensetzung der Strahldichte bei Horizontsondierung	36
4.2	Schematische Darstellung des MIPAS-Instruments im Orbit	37
4.3	Schema eines Michelson Interferometers	39
4.4	Verlauf des nicht apodisierten Rauschens in den MIPAS Spektralkanälen . .	40
4.5	Konzept des Retrievalprozessors	43
5.1	Verteilung der HIRDLS Kanäle 1 – 5 und 6 – 9	46
5.2	Verteilung der HIRDLS Kanäle 10 – 12 und 13 – 17	47
5.3	Verteilung der HIRDLS Kanäle 18 – 21	47
6.1	Vertikalprofile von Temperatur und Wasserdampf unter tropischen Bedin- gungen	50
6.2	Die ausgewählten Auswertefenster für das Wasserdampf-Retrieval	54
6.3	Abgeschätzter Gesamtfehler und Einzelbeiträge für ein 3 km-Messgitter . .	55
6.4	Zeilen der Jacobimatrizen für zwei spektrale Stützstellen in einem Wasser- dampfauswertefenster	57
6.5	Glättungsfehler für unterschiedliche Kovarianzmatrizen S_{x_e} und Fehlerbud- get für eine realitätsnahe Kovarianzmatrix	59
6.6	Die ausgewählten Auswertefenster für das Simultanretrieval	62
6.7	Fehlerbudget und Einzelbeiträge zum Fehler für das Simultanretrieval . . .	63
6.8	Fehlerbudget Fehler für das Simultanretrieval mit reduziertem Retrievalgitter	64
6.9	Fehlerbudget und Einzelbeiträge zum Fehler für ein reines Wasserdampfre- trieval im UT/LS-Modus	66
6.10	Fehlerbudget und Einzelbeiträge zum Fehler für das Simultanretrieval im UT/LS-Modus	66
6.11	Auflösungsmatrizen für ein Simultanretrieval im Standard- und im UT/LS- Modus	70
6.12	Vertikale Auflösung in allen Höhen für die betrachteten Szenarien	72
7.1	Zeilen der Jacobimatrizen für Wasserdampf in den Kanälen 18 und 20 . . .	74

7.2	Zeilen der Jacobimatrizen für CH ₄ und Temperatur in Kanal 18	75
7.3	Zeilen der Jacobimatrizen für CH ₄ und Temperatur in Kanal 20	76
7.4	Abgeschätztes Fehlerbudget für Kanal 18	78
7.5	Beiträge von CH ₄ und Temperatur zum Parameterfehler in Kanal 18	80
7.6	Abgeschätztes Fehlerbudget für Kanal 20	81
7.7	Beiträge von CH ₄ und Temperatur zum Parameterfehler in Kanal 20	82
7.8	Fehlerbudget für ein gemeinsames Retrieval mit den Kanälen 18 und 20	82
9.1	Retrievalergebnis für Wasserdampf mit einem Standard-Messgitter und einem 1 km-Retrievalgitter	94
9.2	Auflösungsmatrizen für das Wasserdampfretrieval mit Messungen im Standard-Modus	95
9.3	Retrievalergebnis für ein Simultanretrieval mit einem Standard-Messgitter und einem 1 km-Retrievalgitter	96
9.4	Retrievalergebnis für Wasserdampf mit einem Standard-Messgitter und einem Retrieval auf den Tangentenhöhen	98
9.5	Retrievalergebnis für ein Simultanretrieval mit LOS-Unsicherheit	100
9.6	Ergebnis für ein Wasserdampfretrieval mit einem UT/LS-Messgitter und einem 1 km-Retrievalgitter	102
9.7	Auflösungsmatrizen für das Wasserdampfretrieval mit Messungen im UT/LS-Modus	102
9.8	Retrievalergebnis für ein Simultanretrieval mit einem UT/LS-Messgitter und einem 1 km-Retrievalgitter	103

Tabellenverzeichnis

4.1	MIPAS-Kanäle	39
7.1	Verwendete Unsicherheiten für die Modellparameter, sowie deren Höhenabhängigkeit	76
7.2	Radiometrisches Rauschen für die Kanäle 18 und 20	77
9.1	Tangentenhöhen, verwendete Unsicherheiten der LOS und resultierende Tangentenhöhen	99
A.1	Verwendete Unsicherheiten fuer die Störung interferierender Gase und Parameter	118