

# **Forschungszentrum Karlsruhe**

Technik und Umwelt

**Wissenschaftliche Berichte**

FZKA 6703

## **Entwicklung eines Auswertalgorithmus und eines Datenverarbeitungssystems für das MIPAS Satellitenexperiment**

Gabriele P. Stiller, Thomas von Clarmann,  
Herbert Fischer, Bernd Funke, Norbert Glatthor,  
Udo Grabowski, Michael Höpfner, Michael Kiefer  
und Mathias Milz

Institut für Meteorologie und Klimaforschung

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit  
Mitteln des Bundesministeriums für *Bildung und Forschung*  
unter dem Förderkennzeichen 07UFE10/6 gefördert. Die  
Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt  
bei den Autoren.

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe  
2002

**Impressum der Print-Ausgabe:**

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

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

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

**ISSN 0947-8620**

## Zusammenfassung

### **Entwicklung eines Auswertalgorithmus und eines Datenverarbeitungssystems für das MIPAS Satellitenexperiment**

Für die Auswertung der MIPAS-Daten auf dem Forschungssatelliten ENVISAT wurde ein Auswertesystem entwickelt. Beginnend mit Erfahrungen, die bei den MIPAS-Vorläufer-Experimenten MIPAS-LM, MIPAS-B, MIPAS-B2, MIPAS-Transall und MIPAS-STR gesammelt wurden, und die zu einem ad hoc Auswerteschema führten, wurde für MIPAS/ENVISAT ein Datenanalyse-System entwickelt, das der erwarteten Datenmenge und -qualität gerecht wird.

Dazu wurde ein Strahlungstransportalgorithmus zur Simulation atomosphärischer Infrarot-Spektren entwickelt, der alle bekannten Effekte in der Atmosphäre enthält und in internationalen Vergleichstests seine hohe Qualität bewiesen hat. Das Retrieval-Konzept wurde auf den neuesten Erkenntnissen der Retrieval-Theorie aufgebaut und berücksichtigt alle Korrelationen zwischen Daten und die Behandlung von a priori Information in aller Konsequenz. Darüber hinaus wurde die Retrieval-Strategie für alle erwarteten Situationen in der Atmosphäre entsprechend dem state-of-the-art und darüber hinaus entwickelt.

Für die Untersuchung spezieller Fragestellungen wie Non-LTE-Effekte oder PSCs wurden Modelle entwickelt und in das Retrievalsystem eingekoppelt, die das Retrieval stabilisieren und ausserdem eine direkte Ableitung der internen Modellparameter aus den Spektren zulassen. Das gesamte Auswertesystem einschliesslich Vor- und Nachprozessierungsschritten und der Visualisierung der Ergebnisse wurde so weit automatisiert, dass eine Bearbeitung der erwarteten erheblichen Datenmengen möglich wird. Damit wurde ein System geschaffen, mit dem wir für die wissenschaftliche Auswertung der MIPAS/ENVISAT-Daten bestens gerüstet sind.

## Abstract

### **Development of an analysis and data processing system for the MIPAS satellite experiment**

A data processing system for the analysis of MIPAS data from the research satellite ENVISAT has been developed. Starting from experience with the MIPAS precursor experiments MIPAS-LM, MIPAS-B, MIPAS-B2, MIPAS-Transall, and MIPAS-STR, which led to an ad hoc data analysis scheme, a data analysis system for MIPAS-ENVISAT has been developed which takes into account the data quantity and quality expected.

A radiative transfer algorithm for the simulation of atmospheric infra-red spectra taking into account all known effects in the atmosphere has been developed which demonstrated in international intercomparisons its high level quality. The retrieval concept applied is based on the most recent finding of retrieval theory and considers all correlations between data and the handling of a priori information in all consequence. The retrieval strategy for all situations in the atmosphere to be encountered has been developed according to the state of the art or beyond this.

For the investigation of special topics like non-LTE or PSCs models have been developed and coupled into the retrieval system; by this the retrieval will be stabilized and a direct retrieval of the model parameters from the spectra is made possible. The complete data analysis system including the pre- and postprocessing steps and the visualization of the data products has been automated in order to allow processing of the expected huge data amounts. Over all, a system has been generated which provides us confidence that we are well prepared for the scientific analysis of the MIPAS/ENVISAT data.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Akronymverzeichnis</b>	<b>3</b>
1 Allgemeine Einführung . . . . .	1
2 Stand des Wissens zu Beginn des Projekts . . . . .	3
3 Weiterentwicklung wissenschaftlicher Auswerteprogramme und Ableitung atmosphärischer Parameter mit Hilfe des wissenschaftlichen level-2 Datenprozessors . . . . .	4
3.1 Strahlungsübertragungs-Algorithmen . . . . .	5
3.2 Inversionsverfahren . . . . .	14
3.3 Vor- und Nachbearbeitung . . . . .	55
4 Validierungs- und Charakterisierungsaktivitäten . . . . .	62
4.1 Validierung des Vorwärtsmodells . . . . .	62
4.2 Validierung des Auswerteprocessors . . . . .	63
4.3 Charakterisierung der MIPAS Level-1-b Daten . . . . .	69
4.4 Validierung der eigenen Datenprodukte . . . . .	70
4.5 Validierung der ESA-Level-2 Datenprodukte . . . . .	71
5 Stand der Arbeiten am Ende des Projektes . . . . .	72
5.1 Status des Auswerteprocessors . . . . .	72
5.2 Offene Punkte . . . . .	74
6 Wissenschaftliche Vertretung des MIPAS-Experiments im internationalen Rahmen . . . . .	76
6.1 Zusammenarbeit mit der ESA . . . . .	76
6.2 Internationale Tagungen . . . . .	76
6.3 Kooperation mit anderen Gruppen . . . . .	76
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>78</b>

# Abbildungsverzeichnis

1	Ausschnitt eines Spektrums für 11 km Tangentenhöhe, in dem $\text{CCl}_4$ abgeleitet werden könnte . . . . .	14
2	Schemazeichnung des MIPAS-level-2-Datenprozessors am IMK . . . . .	22
3	Microwindow-Datenbank für den Nachweis von ClO für eine Höhenverteilung, wie sie bei Chloraktivierung in der polaren Vortex vorkommt	25
4	Ergebnis eines Testretrievals zur simultanen Ableitung der Temperatur und der Sichtlinie . . . . .	33
5	Spektren für $\text{O}_2$ für Tangentenhöhen zwischen 10 und 50 km . . . . .	36
6	Gesamt-Retrieval-Fehler und die Komponenten des Gesamt-Fehlers für die Ableitung der Temperatur (links) und des Mischungsverhältnisses von NO (rechts) oberhalb von 100 km. . . . .	38
7	Anpassung des simulierten Spektrums an das gemessene, PSC-Signaturen enthaltende Boden-Spektrum (Messung der solaren Strahlung) . . . . .	41
8	Glättungsfehler beim Wasserdampf-Retrieval für die tropische Atmosphäre und ein feines (gepunktet) bzw. grobes (durchgezogen) Messgitter . . . . .	46
9	Absolute Fehlerprofile aller untersuchten Spurengase in ppmv . . . . .	48
10	Gemittelte relative Zufallsfehler (rot) und Gesamtfehler (grün) für einen Mittelungszeitraum von 3 Monaten und eine Mittelungsfläche von $10^\circ \times 10^\circ$ , verglichen mit den klimatologischen Variabilitäten für eine Reihe von troposphärisch relevanten Spurengasen und eine Tangentenhöhe von 8km . . . . .	49
11	Vergleich der berechneten Rotationstemperaturen $T_{rot}$ und der Spintemperaturen $T_{spin}$ mit abgeleiteten Daten aus CIRRIS-1A-Spektren	51
12	Schematische Darstellung des entwickelten NLTE-Retrieval-Ansatzes	52
13	$\text{O}_3$ -Profil-Retrieval . . . . .	66
14	$\text{CH}_4$ -Profil-Retrieval . . . . .	67
15	Abweichungen der Ergebnisse von 10 Ozon-Testretrievals mit unterschiedlich durch Rauschen gestörten Spektren vom Referenz-Profil . . . . .	68

# Akronymverzeichnis

AFGL	Air Force Geophysics Laboratory (jetzt: Philipps Laboratory)
AMIL2DA	Advanced MIPAS Level 2 Data Analysis
ATMOS	Atmospheric Trace Molecule Spectroscopy Experiment
BUV	backscatter ultraviolet (ultraviolettes rückgestreutes Licht)
CLAES	Cryogenic Limb Array Etalon Spectrometer
CRISTA	Cryogenic Infrared Spectrometers and Telescope for the Atmosphere
DPAD	Data Processing and Algorithm Development
DFD	Deutsches Fernerkundungsdatenzentrum
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
DPI	Doppelpendelinterferometer
EASOE	European Arctic Stratospheric Ozone Experiment
ENVISAT	Environmental Satellite
ESA	European Space Agency
EU	European Union
FASCODE	Fast Atmospheric Signature Code
FASCOD2	Fast Atmospheric Signature Code, Version 2
FASCOD3	Fast Atmospheric Signature Code, Version 3
FCKW	Fluorchlorkohlenwasserstoff
FOV	field of view (Gesichtsfeld)
FT-IR	Fourier Transform Infrared (Fouriertransformationsspektroskopie im infraroten Spektralbereich)
GOME	Global Ozone Monitoring Experiment
ILS	instrument line shape (Apparatefunktion)
IMK	Institut für Meteorologie und Klimaforschung
IRC	International Radiation Commission
IRIS	Infrared Interferometer Spectrometer
ISAMS	Improved Stratospheric and Mesospheric Sounder
IRC	International Radiation Commission
KOPRA	Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm
LBL	line-by-line (Linie für Linie)
LIMS	Limb Infrared Monitor of the Stratosphere
LOS	line of sight (Sichtlinie)
LTE	local thermodynamic equilibrium (lokales thermodynamisches Gleichgewicht)
MIPAS	Michelson Interferometer für Passive Atmosphärensondierung
MIPAS-B	ballongetragenes MIPAS-Gerät
MIPAS-B2	neues ballongetragenes MIPAS-Gerät
MIPAS-ENVISAT	satellitengetragenes MIPAS-Gerät
MIPAS-FT	flugzeuggetragenes MIPAS-Gerät
MIPAS-STR	MIPAS-Version für ein Stratosphärenflugzeug
NAT	nitric acid trihydrate (Salpetersäuretrihydrat)
NCAR	National Center of Atmospheric Research

NDSC	Network for Detection of Stratospheric Change
NESR	noise equivalent spectral radiance
NESR <sub>0</sub>	noise equivalent spectral radiance, unapodized
NLTE oder Non-LTE	non-local thermodynamic equilibrium (Zustand, in dem kein lokales thermodynamisches Gleichgewicht herrscht)
OFM	Optimized Forward Model
OFP	Ozonforschungsprogramm
OPD	optical path difference (Weglängendifferenz)
OPD <sub>0</sub>	zero optical path difference (Null Weglängendifferenz)
OPD <sub>max</sub>	maximum optical path difference (maximale Weglängendifferenz)
ORM	Optimized Retrieval Model
PAN	Peroxyazetylnitrat
PSC	polar stratospheric cloud (Polare Stratosphärenwolke)
RAT	Retrieval of Atmospheric Trace Gas Profiles
REPROBUS	Reactive Processes Ruling the Ozone Budget in the Stratosphere
SAMS	Stratospheric and Mesospheric Sounder
SCAIS	Simulation Code For Atmospheric Infrared Spectra
SESAME	Second European Stratospheric Arctic and Mid-Latitude Experiment
SIRIS	Stratospheric Infrared Interferometer Spectrometer
SVD	singular value decomposition (Singulärwertzerlegung)
TES	Tropospheric Emission Sounder
THESEO	Third European Stratospheric Experiment on Ozone
TSVD	Truncated Singular Value Decomposition (abgeschnittene Singulärwertzerlegung)
UARS	Upper Atmosphere Research Satellite
UV-A	ultraviolette Strahlung von 315 bis 400 nm
UV-B	ultraviolette Strahlung von 280 bis 315 nm

## 1 Allgemeine Einführung

In diesem Kapitel wird eine kurze allgemeine Einführung zur Problemstellung des vorliegenden Forschungsprojektes gegeben. Zum einen sollen die grundlegenden Zusammenhänge skizziert werden, die zum Verständnis der folgenden Kapitel notwendig sind; zum anderen soll die Bedeutung einiger in diesem Kontext häufig verwendeter Fachbegriffe geklärt werden.

Die Atmosphäre besteht neben ihren Hauptbestandteilen Stickstoff und Sauerstoff und Argon aus vielen weiteren Gaskomponenten, die, mit Ausnahme von Wasserdampf, in um Größenordnungen geringerer Konzentration vorliegen, den sogenannten Spurengasen. Diese sind aufgrund ihrer chemischen Eigenschaften und wegen ihrer Wirkung auf den Strahlungshaushalt der Erde von großer Bedeutung für Umweltprobleme wie stratosphärischer Ozonabbau oder Treibhauseffekt. Viele dieser Spurengase emittieren und absorbieren Infrarotstrahlung und sind damit Fernerkundungsmessungen in diesem Spektralbereich gut zugänglich. Da jedes dieser Gase aufgrund seiner Spektrallinien seinen typischen "Fingerabdruck" im Infrarotspektrum hinterläßt, kann man die Gase im atmosphärischen Spektrum im allgemeinen gut unterscheiden, sofern die spektrale Auflösung des Messinstruments hinreichend gut ist.

Eine vorteilhafte Methode, um große Spektralbereiche des infraroten Spektrums simultan mit hoher spektraler Auflösung zu messen, ist die Fouriertransformationsspektroskopie mit einem Michelson-Interferometer. Als Messgeometrie bietet sich die Horizontsondierung an, bei der das Gerät von einer hochfliegenden Plattform - einem Satelliten oder einem Stratosphärenballon - schräg nach unten, jedoch ohne den Erdboden zu sehen, durch die Atmosphäre hindurch in den Weltraum blickt. Je nach Beobachtungswinkel wird ein anderer Teil der Atmosphäre gesehen, wodurch sich eine recht gute Höhengauflösung der Messungen ergibt. Wenn der Sehstrahl dabei auf eine Strahlungsquelle im Hintergrund gerichtet ist, zum Beispiel die auf- oder untergehende Sonne, spricht man von Okkultationsexperimenten. Das gemessene Signal besteht in der Absorption des Sonnenlichtes durch die im Lichtweg enthaltenen Spurengase - die Hauptbestandteile der Atmosphäre sind für Infrarotstrahlung weitgehend transparent. Okkultationsmessungen haben den Nachteil, daß die Messungen von der Tages- und Jahreszeit abhängig sind. Messungen in der Polarnacht, zu Mitternacht oder Mittag sind mit dieser Messmethode ausgeschlossen. Wesentlich günstiger - wenn auch bezüglich technischer Realisierung und Auswertemethodik anspruchsvoller - sind Emissionsexperimente. Bei diesen blickt das Gerät durch die Atmosphäre hindurch in den "kalten" Weltraum und misst die Wärmestrahlung der Spurengase. Auch hier gilt, dass die Hauptbestandteile der Atmosphäre zum Gesamtsignal meist nicht beitragen. Emissionsmessungen sind von der Tageszeit unabhängig. Von der genauen Kenntnis des Blickwinkels hängt die Genauigkeit der Auswertung in starkem Maße ab.

MIPAS (Michelson Interferometer für Passive atmosphärische Sondierung) [Fischer, 1992, Fischer, 1993a, Fischer, 1993b, Fischer and Oelhaf, 1996, Fischer and Oelhaf, 1998, Fischer, 2001, Endemann and Fischer, 1993, Oelhaf and Fischer, 1995] ist, wie der Name schon sagt, ein Michelsoninterferometer, das die Emission der atmosphärischen Spurenstoffe in Horizontsondierungsgeometrie messen soll. Das Attribut "passiv" charakterisiert die Methode, bei der nur natürliche Strahlung gemessen wird, im Vergleich zu "aktiven" Methoden wie Echolot, Radar, Lidar u.s.w., bei denen das Messgerät selbst ein Signal aussendet, dessen Veränderung durch die zu vermessende Größe die gesuchte Information enthält. Durch seinen Einsatz auf einem Satelliten soll globale Überdeckung der MIPAS-Messungen erreicht werden.

Ursprünglich - das heißt in der Anfangszeit des diesem Bericht zugrundeliegenden Forschungsprojekts - war geplant, MIPAS auch im Rahmen des deutschen ATMOS-

Atmosphärenforschungssatelliten einzusetzen. Später wurde das ATMOS-Projekt eingestellt, MIPAS wurde als "Core-payload" für den Envisat-Satelliten der ESA ausgewählt, womit die Verantwortung für das Experiment formal an die European Space Agency (ESA) überging. Dennoch blieben dem IMK – sowohl hinsichtlich Aufgabenbereichen unter ESA-Verantwortung wie auch als wissenschaftlicher Datennutzer mit eigener Prozessierungsinfrastruktur – zahlreiche Aufgaben erhalten. Durch die politische Umlagerung des MIPAS-Projektes während der Projektlaufzeit ergibt sich die Änderung des Projekttitels.

Die Auswertung der MIPAS-Daten läuft etwa folgendermaßen ab: Die unmittelbaren Messergebnisse, die ein Fourierspektrometer liefert, sind Interferogramme. Diese werden durch Phasenkorrektur, Apodisierung, Fouriertransformation und Kalibrierung in Strahldichtespektren umgerechnet, die das Wärmestrahlungssignal der Atmosphäre repräsentieren. Dieser Auswerteschritt wird als "Level-1" bezeichnet. Im darauffolgenden "Level-2" Auswerteschritt werden aus den spektralen Strahldichten die interessierenden Größen, im Wesentlichen die Mischungsverhältnisse der einzelnen Spurengase, berechnet. Für diesen Arbeitsschritt benötigt man ein sogenanntes "Strahlungsübertragungsmodell" oder "Vorwärtsmodell", mit dem das Strahldichtespektrum als Funktion der atmosphärischen Parameter (Gaskonzentrationen, Temperatur, u.s.w.) und der Messgeometrie berechnet wird. Außerdem liefert das Vorwärtsmodell – entweder direkt oder, weniger effizient, über Differenzenquotientenbildung – die Sensitivitäten der spektralen Strahldichten auf die verschiedenen Parameter. Durch eine Inversionsmethode nach dem Kriterium der kleinsten quadratischen Abweichung zwischen gemessenen und berechneten Strahldichtewerten werden diejenigen Parameter (z.B. Gaskonzentrationen) gesucht, für die das berechnete Spektrum optimal zum gemessenen passt. Bei realen Anwendungen ergibt sich noch eine gewisse Kompliziertheit, da nicht einzelne Parameter ausgewertet werden, sondern Vertikalprofile, die aus vielen Einzelparametern bestehen. Um die in den Messungen enthaltene Information über die Höhenverteilung der Spurengase zugänglich zu machen, wird nicht ein Spektrum allein ausgewertet, sondern mehrere, die die Atmosphäre unter verschiedenen Blickwinkeln repräsentieren, und deren Information daher primär aus verschiedenen Höhenschichten stammt.

Das IMK hat auf drei verschiedenen Arbeitsbereichen zur Entwicklung der MIPAS Auswerteprozessoren beigetragen. Dies sind:

1. Der sogenannte "Online" oder "Near Real Time" Prozessor der ESA; Aufgabe dieses Prozessors ist es, die sechs sogenannten "Hauptgase"  $O_3$ ,  $H_2O$ ,  $N_2O$ ,  $NO_2$ ,  $CH_4$  und  $HNO_3$ , sowie Druck und Temperatur bei kompletter räumlicher und zeitlicher Abdeckung, jedoch mit ein wenig reduzierter Genauigkeit, zu analysieren. Für die eigentliche Prozessorentwicklung hat letztendlich ESA die Verantwortung (und Finanzierung) übernommen. Da diese Entscheidung jedoch vergleichsweise spät (1995) konkretisiert wurde, sind auch zahlreiche allgemeine Vorstudien im Rahmen des vorliegenden Projektes in den ESA-Prozessor eingeflossen.
2. Der sogenannte "offline" Prozessor des "nationalen Bodensegments" wurde bei dem DLR in Oberpfaffenhofen installiert. Der Leistungsumfang ist der gleiche wie beim Online-Prozessor der ESA. Ursprünglich war geplant, hierfür einen eigenen speziell entwickelten Prozessor zu benutzen, um in der Lage zu sein, die Standarddatenprodukte mit erhöhter Genauigkeit zu generieren. Nach allgemeinen Vorarbeiten im Rahmen des vorliegenden Projektes am IMK wurde mit dem Bau des Prozessors beim DLR 1996 begonnen. Die allgemeineren und grundsätzliche Vorstudien des IMK sind als Teil des hier beschriebenen Projektes zu sehen, während darüber hinausgehende Beiträge des IMK, insbesondere Software- und Know-How-Transfer, durch separate Verträge finanziert wurden. Nachdem die ESA jedoch vorgeschrieben hatte, eine Kopie des

Online-Prozessoren für die Offline-Prozessierung am DLR zu verwenden, wurde die Bedeutung des nationalen Bodensegments naturgemäß reduziert.

3. Da keiner der oben beschriebenen Prozessoren die wissenschaftlichen Anforderungen des IMK abdeckt, wurde am IMK ein eigener Prozessor entwickelt, der komplementär zu den vorhandenen Prozessoren ist und primär die wissenschaftliche Arbeit mit MIPAS-Daten am IMK ermöglichen soll. Die Entwicklung dieses Prozessors ist Hauptteil des hier beschriebenen Projektes, zumindest seit sich abgezeichnet hat, daß keiner der anderen Prozessoren den IMK-Anforderungen genügen würde.

Da die Zuständigkeiten, Verantwortlichkeiten und forschungspolitischen Ziele auf nationaler und internationaler Ebene nicht zu jeder Zeit klar waren und sich im Laufe der Zeit geändert haben, mußte das IMK flexibel auf die jeweilige Situation reagieren, wodurch sich eine nicht immer geradlinige Entwicklungslinie ergab. Mittlerweile sind derartige Probleme jedoch gelöst, und es wurden auf verschiedenen Ebenen Auswerteprozessoren geschaffen, die sich wissenschaftlich sinnvoll ergänzen. Da das IMK in vielerlei Projekte involviert war, die zumeist durch Teilfinanzierung charakterisiert waren, ist eine klare Trennung, welche Arbeit für welches Projekt durchgeführt wurde, nicht in letzter Konsequenz möglich. Durch die kontinuierliche und großzügige Förderung des hier beschriebenen Projektes wurde es jedoch möglich, unseren Arbeiten die notwendige Kontinuität zu geben und - jenseits von Detailverpflichtungen durch kurzfristige Projekte - an einer langfristigen Entwicklungslinie festzuhalten.

**Nebenbemerkung:** Die in diesem Bericht beschriebenen Arbeiten wurden alle zumindest in Form von technischen Berichten, meist jedoch als rezensierte Beiträge in anerkannten wissenschaftlichen Zeitschriften veröffentlicht (siehe Publikationsverzeichnis). Wir verstehen diesen Bericht daher als eine Möglichkeit, die durchgeführten Arbeiten im Überblick darzustellen, und verzichten auf die detaillierte Darstellung aller Einzelergebnisse; stattdessen verweisen wir auf die an entsprechender Stelle zitierten Veröffentlichungen.

## 2 Stand des Wissens zu Beginn des Projekts

Der Beginn des Projektes "Wissenschaftliche Begleitung der Entwicklung des Sensors MIPAS für den Umweltsatelliten Atmos" datiert auf 1991. Zu diesem Zeitpunkt war hochauflösende Horizontemissionsspektroskopie im Infraroten noch keineswegs etabliert. Erfahrungen bezüglich Emissionsexperimenten gab es lediglich mit Mehrkanalradiometern, Gaskorrelationsradiometern und niedrig auflösenden Spektrometern.

Bezüglich Absorptions/Okkultationsexperimenten existierten bereits Erfahrungen von Ballonexperimenten sowie dem Atmospheric Trace Molecule Spectroscopy (ATMOS) Experiment der NASA, das auf Spacelab-3 eingesetzt wurde [Farmer et al., 1987]. Durch dieses Experiment war bewiesen, dass Fourierspektrometrie ein geeignetes Werkzeug zur quantitativen Erfassung einer Vielzahl von Molekülen ist.

Ein erster Ansatz, Fourierspektroskopie im mittleren Infrarot auch in Emission durchzuführen, geht auf Kunde und Kollegen [Brasunas et al., 1988] zurück, die ein entsprechendes Horizontsondierungsexperiment mittels eines Stratosphärenballons durchgeführt haben. Da diesem amerikanischen Experiment jedoch nach unserem Wissen die Mittel gestrichen wurden, blieben die meisten dieser Daten unausgewertet.

1989 führte das IMK seinen ersten Ballonflug mit einem gekühlten Fourierspektrometer durch (MIPAS-B) [Oelhaf et al., 1991]. Wenngleich einige der Kompo-

nenen des Gerätes noch fehlerhaft arbeiteten, wurde mit diesem Experiment die Tragfähigkeit des Konzeptes der Horizontsondierung in Emission bewiesen, und es konnten bereits Vertikalprofile von vier wichtigen Spurengasen, nämlich  $O_3$ ,  $HNO_3$ , CFC-11 und CFC-12 aus den gemessenen Daten hergeleitet werden [von Clarmann et al., 1993c]. Die Auswertung erfolgt damals noch interaktiv, das heißt, der involvierte Wissenschaftler mußte durch gezielte Variation der interessierenden Parameter die gemessenen und die berechneten Spektren zur Übereinstimmung bringen. An automatisierte Auswertung war damals noch nicht zu denken. Zwar gab es schon entsprechende Software, die die Parameteranpassung auf Basis simulierter Messungen durchführen konnte. Die Anwendung auf reale Messungen gelang jedoch nicht, da durch die realen Daten immer Probleme aufkamen, die in der damaligen Software nicht vorgesehen waren.

Zur gleichen Zeit etwa wurden am IMK erste Erfahrungen mit bodengebundener Emissionsspektroskopie gemacht, z.B. [Adrian et al., 1991]. Auch hier erfolgte die Auswertung vorerst interaktiv. Gerade durch dieses mühevoll interaktive Arbeiten wurden damals wertvolle Erfahrungen gesammelt, die später in den Bau von Auswerteprozessoren eingeflossen sind.

Als Werkzeuge standen damals vorrangig zwei Vorwärtsprogramme zur Verfügung, mit denen atmosphärische Spektren simuliert werden konnten:

- FASCODE (Fast Atmospheric Signature Code) war ein Linie-für-Linie Strahlungsübertragungsprogramm des Air Force Geophysics Laboratory. Es enthielt schon Refraktion und Wasserdampfkontinua, jedoch keine geeignete Implementierung für Zustandsbesetzungen außerhalb des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts, kein Line-mixing, keine Integration über das Gesichtsfeld des Meßgerätes, keine Faltung der monochromatischen Spektren mit der instrumentellen Linienform; die Originalversion konnte die Wirkungsquerschnitte schwerer Moleküle, die nicht Linie für Linie berechnet werden, nicht handhaben; die Sensitivitäten des Signals nach den Parametern wurden nicht ausgegeben. Außerdem war die Datenstruktur des auf ein FORTRAN66 zurückgehenden Programmes derart, dass Upgrades meist nicht möglich waren. Dennoch erwies sich dieses Programm als nützlich, um mit den MIPAS Ballondaten wertvolle Erfahrungen zu sammeln.
- Bei SCAIS (Simulation Code for Atmospheric Infrared Spectra) handelt es sich um eine Eigenentwicklung des IMK, die auf ein Vorläuferprogramm der Universität München zurückgeht [Redemann, 1984]. Dieses Programm war zwar sehr genau, jedoch wenig effizient bezüglich der Rechenzeit. SCAIS kam sowohl zur Auswertung der bodengebundenen Absorptionsmessungen zum Einsatz, als auch später als Test- und Entwicklungsumgebung von Modulen zur Erweiterung des Leistungsumfanges.

### **3 Weiterentwicklung wissenschaftlicher Auswerteprogramme und Ableitung atmosphärischer Parameter mit Hilfe des wissenschaftlichen level-2 Datenprozessors**

Im Rahmen dieses Vorhabens ist es gelungen, einen leistungsfähigen MIPAS level-2 Prozessor zur wissenschaftlichen Auswertung von Strahldichtespektren zu entwickeln, durch den die operationelle Datenauswertung bei der ESA und bei der DLR optimal ergänzt wird. Während die operationellen Datenprozessoren bei vollständiger räumlicher und zeitlicher Überdeckung nur Druck, Temperatur, sowie die Gase

O<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, HNO<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O, NO<sub>2</sub> und CH<sub>4</sub> auswerten, sollen am IMK möglichst alle in MIPAS-Spektren sichtbaren Gase ausgewertet werden, wobei eine komplette räumliche und zeitliche Überdeckung nicht angestrebt ist und auch nicht möglich sein wird. Die Auswertung der zusätzlichen Gase ist mit spezifischen Problemen verbunden, deren Lösung in den folgenden Abschnitten diskutiert wird.

### 3.1 Strahlungsübertragungs-Algorithmen

Bei der Auswertung gemessener Spektren spielt das Strahlungsübertragungsprogramm eine Schlüsselrolle: Mit ihm werden Spektren als Funktion der atmosphärischen Parameter und Instrumentenparameter simuliert. Es löst die Strahlungsübertragungsgleichung, hier in der Formulierung von Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1960]:

$$S_{\Theta}(\nu, l_{obs}) = S_{\Theta}(\nu, l_o) \tau(\nu, l_{obs}, l_o) + \int_{l_{obs}}^{l_o} J(\nu, l) \sigma_{a,total}^{Vol}(\nu, l) \tau(\nu, l_{obs}, l) dl \quad (1)$$

mit	
$S_{\Theta}$	spektrale Strahldichte für den Blickwinkel $\Theta$
$J$	Quellfunktion
$\tau(\nu, l_1, l_2)$	Transmission zwischen $l_1$ and $l_2$ für die Wellenzahl $\nu$
$dl$	Wegelement
$\sigma_{a,total}^{Vol}$	Absorptions-Koeffizient bezogen auf Gase und Aerosole (pro Volumen)
$l_{obs}$	Position des Beobachters
$l_o$	Position der Hintergrund-Strahlungsquelle
$\nu$	Wellenzahl
$l$	Wegkoordinate

Diskrepanzen zwischen diesen simulierten und den gemessenen Spektren erlauben Rückschlüsse, wie die Parameter geändert werden müssen, um eine möglichst gute Anpassung zwischen Messung und Rechnung zu erreichen. Eine effiziente Kodierung ist hier besonders relevant, da bei den Strahlungsübertragungsrechnungen der weitaus größte Teil der Rechenzeit der gesamten Auswertung anfällt. Zu Anfang des Projektes standen zwei Strahlungsübertragungsalgorithmen zur Verfügung: FASCODE und SCAIS. Aufgrund der Erfahrungen mit diesen Programmen leisteten wir im Rahmen der "Data Processing and Algorithm Development" Arbeitsgruppe der ESA wichtige Beiträge zur Definition des "Optimized Forward Models" (OFM), das Teil des offiziellen MIPAS Online Prozessors wurde. Da all diese Strahlungsübertragungsprogramme den Anforderungen der wissenschaftlichen Auswertung am IMK nicht genügten, wurde schließlich am IMK ein neues Strahlungsübertragungsprogramm entwickelt, in das alle im Vorfeld gemachten Erfahrungen eingeflossen sind. (siehe Kapitel 3.1.1.3)

#### 3.1.1 Vorstudien

Bevor mit der Konzeption eines speziell für die MIPAS-Satellitendatenauswertung optimierten Strahlungsübertragungsprogramms [Stiller, 2000a] begonnen wurde, wurde durch die Modifikation und Anwendung vorhandener Programme wertvolle Erfahrung gesammelt.

**3.1.1.1 FASCODE** Bei FASCODE (Fast Atmospheric Signature Program) [Clough et al., 1986, Clough et al., 1989] handelt es sich um ein Strahlungsübertragungsprogramm des Air Force Geophysics Laboratory (heute: Philipps Laboratory). Aufgrund seiner vergleichsweise geringen Rechenzeit- und Speicherplatzanforderungen schien dieses Programm für die Auswertung großer Datenmengen sehr

geeignet und wurde am IMK für die Auswertung der MIPAS-B (Ballon) und MIPAS-FT (Flugzeug Transall) Messungen verwendet. Ausserdem wurden damit spektroskopische Messungen des Alfred Wegener Institutes für Polar und Meeresforschung am IMK ausgewertet. Daneben diente es für zahlreiche theoretischen Studien zur Vorbereitung des MIPAS Satellitenexperimentes.

Bei der Auswertung gemessener Daten muss ein Vorwärtsprogramm als Unterprogramm aufgerufen werden; hierzu musste eine Datenschnittstelle geschaffen werden. Bei der Verwendung von FASCODE als Unterprogramm zeigte sich, daß aufgrund der Verwendung von data-statements für Variable (nicht Konstanten!) der sukzessive Aufruf mit den gleichen Eingabedaten zu unterschiedlichen Ergebnissen führte. Auch dieser Fehler konnte behoben werden. Aufgrund zustandsparameterabhängiger interner Diskretisierung kam es weiterhin zu unstetigen Abhängigkeiten der berechneten Strahldichten von den Eingabeparametern, was zu unsinnigen partiellen Ableitungen der Strahldichten nach den Parametern führte. Außerdem führte dies zu artifiziellen Nebenminima der kleinsten Quadrate der Abweichungen zwischen Messung und Simulation, was die Konvergenz der Iteration massiv behinderte. All diese Effekte erscheinen ziemlich trivial, waren jedoch mühsam zu beheben und schärften unser Bewusstsein für die Anforderungen an ein optimiertes Vorwärtsmodell.

Neben diesen technischen Defiziten genügte der Leistungsumfang von FASCODE auch auf der physikalischen Seite nicht: Emissionen von Gasen, die nicht Linie für Linie, sondern über tabellierte Wirkungsquerschnitte berechnet werden (insbesondere FCKW's und andere schwere Moleküle, deren Rotationsstruktur im Spektrum nicht auflösbar ist) konnten nicht berechnet werden. Um dies zu ermöglichen, waren umfangreiche Änderungen an FASCODE nötig.

In der Anfangszeit diente FASCOD als Baustein des institutseigenen Inversionsprogramms RAT (Retrieval of Atmospheric Trace Gases) [von Clarmann, 1994], mit dem auch zahlreiche theoretische Studien zur Auswertemethodik durchgeführt wurden [von Clarmann, 1993, von Clarmann, 1995, von Clarmann et al., 1995a, von Clarmann et al., 1996a, von Clarmann et al., 1997a, von Clarmann et al., 1994, Echle and von Clarmann, 1998, Echle and von Clarmann, 1999, Echle et al., 1995, Echle et al., 1992, Echle et al., 1994, Manuilova et al., 1996, Manuilova et al., 1998, López-Puertas et al., 1996, López-Puertas et al., 1998]. Bald wurde das Gespann FASCODE/RAT zur Auswertung der vom IMK durchgeführten MIPAS-B Messungen verwendet [von Clarmann et al., 1993b, von Clarmann and Adrian, 1993, von Clarmann et al., 1993a, von Clarmann et al., 1993c, von Clarmann et al., 1995b, von Clarmann et al., 1996b, von Clarmann et al., 1997b, Echle et al., 1996b, Echle et al., 1996a, Echle et al., 1997, Echle et al., 1998a, Echle et al., 1998b, Stowasser et al., 1997, Stowasser et al., 1999, Wetzel et al., 1995, Wetzel et al., 1996, Wetzel et al., 1997b, Wetzel et al., 1997a, Wetzel et al., 1998] und schließlich auch zur Auswertung der MIPAS-FT Daten [Blom et al., 1994, Blom et al., 1995, Blom et al., 1996, von Clarmann and Adrian, 1993, Glatthor et al., 1996, Glatthor et al., 1997, Glatthor et al., 1998a, Glatthor et al., 1998b, Höpfner, 1994, Höpfner et al., 1996a, Höpfner et al., 1996b, Höpfner et al., 1998a, Höpfner et al., 1998b]. Die Robustheit und Flexibilität dieses Auswerteprozessors führt dazu, daß auch externe Gruppen ihre Daten bei uns auswerten liessen [Notholt et al., 1993, Notholt et al., 1994].

**3.1.1.2 SCAIS** Neben FASCODE wurde am IMK ein weiteres Strahlungsübertragungsmodell unterhalten: SCAIS (Simulation Code for Atmospheric Infrared Spectra) ist eine Eigenentwicklung des IMK [Adrian et al., 1993], die auf

Bausteinen basiert, die am Meteorologischen Institut der Universität München entwickelt worden sind [Bolle, 1967, Redemann, 1984, von Clarmann, 1986]. Entwicklungsschwerpunkte bezüglich SCAIS waren die Parametrisierung des atmosphärischen Aerosolbeitrags [Adrian, 1990b], die angemessenen Berücksichtigung des Wasserdampfkontinuums [Adrian, 1990a], die Modellierung des breitbandigen Signals schwerer Moleküle [Penner, 1989], die Näherung der Instrumentenfunktion [Stiller et al., 1995b], die Kopplung von Übergängen, bekannt als "line mixing" oder "line coupling" oder auch "collisional narrowing" [Funke, 1995, Funke et al., 1998b], sowie die rechentechnische Optimierung durch Verwendung von tabellierten Absorptionskoeffizienten (Adrian et al., unveröffentlicht).

SCAIS hat, auch in Verbindung mit dem Inversionsprogramm RAT, bei internationalen Vergleichstests im Rahmen des NDSC (Network for the Detection of Stratospheric Change) hervorragend abgeschnitten [Zander, 1995, Zander et al., 1993]. Einsatzbereich von SCAIS war die Auswertung der vom IMK durchgeführten bodengebundenen spektroskopischen Messungen [Adrian et al., 1991, Adrian et al., 1992a, Adrian et al., 1992b, Adrian et al., 1993, Adrian et al., 1994, Blumenstock et al., 1994, Blumenstock et al., 1996, Blumenstock et al., 1997b, Blumenstock et al., 1997a, Blumenstock et al., 1998, Thomas et al., 1994, Wegner et al., 1996, Wegner et al., 1997, Wegner et al., 1998]. Da bei bodengebundenen Messungen das troposphärische Signal eine große Rolle spielt, in dem Druckverbreiterung der Linien eine dominierende Rolle spielt, stellte sich SCAIS mit seiner sorgfältigen und genauen Modellierung der Linienflügel als sehr geeignet heraus.

**3.1.1.3 Die Data Processing and Algorithm Development Gruppe** Die "Data Processing and Algorithm Development" Gruppe (DPAD) wurde von der ESA eingerichtet, um in der Entwicklung des MIPAS-Auswerteprozessors weiterzukommen. Zwar konnte in dieser Gruppe kein Konsens über das endgültige Auswertekonzept erzielt werden, doch wurden wichtige Fragen identifiziert, wo noch Klärungs- und Entwicklungsbedarf bestand. Die Liste der offenen Fragen wurden in einem Abschlußbericht zusammengefaßt [Fischer et al., 1994], der der ESA als Handlungsgrundlage zur Definition weiterer Studien übergeben wurde.

Die Diskussionen in der DPAD Gruppe verliefen teilweise divergent, weil damals der Leistungsumfang des Online-Prozessors noch nicht definiert war. Die Anforderungen an einen vereinfachten operationellen Prozessor wurden lange Zeit mit den Anforderungen an einen wissenschaftlichen nicht-operationellen Prozessor vermischt. Schließlich setzte sich jedoch die Meinung durch, daß beide Charakteristika in einem Prozessor nicht zu haben sind, und die Weichenstellung in Richtung zweigleisigen Vorgehens – ein schneller vereinfachter Prozessor für die operationelle Auswertung einerseits und ein genauer flexibler Prozessor für die wissenschaftliche Auswertung andererseits – wurde vorbereitet.

Folgende Anfordeungen an den Prozessor wurden hinsichtlich des Vorwärtsmodells definiert:

- Berechnung des optischen Weges durch die Atmosphäre;
- Definition eines geeigneten Frequenzgitters für die Berechnung der Absorptionskoeffizienten.
- Berechnung der Absorptionskoeffizienten für alle Höhenstufen und alle Gase;
- Integration der Strahlungsübertragungsgleichung längs des optischen Weges;
- Integration des Strahldichtefeldes über das Gesichtsfeld;
- Anwendung der spektralen Gerätefunktion.

Hinsichtlich des optimalen Herangehens an das Inversionsproblem wurde keine Einigung erreicht. Folgende offene Probleme wurden identifiziert, zu deren Klärung weiterführende wissenschaftliche Studien als nötig erachtet wurden:

- Eine Studie zur Auswahl der optimalen Auswertefenster;
- Eine Studie zur Bewertung der Relevanz von non-LTE Effekten;
- Eine Studie zum angemessenen Umgang mit der Kontinuumsemission;
- Eine Studie über den Zusammenhang zwischen den Tangentenhöhenabständen und der vertikalen Auflösung;
- Eine Studie über den Einfluß horizontaler Inhomogenitäten.

Die Aktivitäten der DPAD Gruppe endeten mit Abgabe des Reports und der Vergabe des Auftrags der Entwicklung des Prototyp des Auswerteprozessors an IROE (Florenz) durch die ESA.

**3.1.1.4 Das Optimized Forward Model** Das Optimized Forward Model (OFM) [Carli et al., 1998, Carli et al., 1999, Höpfner et al., 1997, Raspollini et al., 1999a, Raspollini et al., 1999b, Ridolfi et al., 2000a, Ridolfi et al., 1998, Ridolfi et al., 2000b] wurde nicht im Rahmen des hier beschriebenen Forschungsprojektes entwickelt, sondern im Rahmen eines von der ESA an das IROE (Florenz) vergebenen Auftrages, bei dem das IMK als Subkontraktor fungierte. Dennoch soll dieses Programm hier diskutiert werden, weil viele der im Rahmen des hier beschriebenen Projektes geleisteten Voruntersuchungen, die vor der Auftragsvergabe durch die ESA an IROE stattfanden, die Entwicklung des OFM beeinflußt haben, und das OFM unter massiver Mitarbeit des IMK (durch Delegation eines Mitarbeiters für mehr als 9 Monate nach Florenz) entstanden ist. Das OFM ist ein Linie-für Linie Strahlungsübertragungsprogramm nach dem Curtis-Godson-Prinzip. Seine wesentlichen Charakteristika sind:

- direkte Datenschnittstellen zum Inversionsprogramm;
- quasi-analytische Berechnung der partiellen Ableitungen
- Mehrfachverwendung von Zwischenergebnissen bei der Berechnung der Spektren einer Horizontsondierungssequenz anstelle eines neuen Programmaufrufs pro Geometrie;
- Berücksichtigung des MIPAS-Gesichtsfeldes
- Berechnung der Linienform an ausgewählten Spektralstützstellen und lineare Interpolation dazwischen;
- optionale Verwendung extern berechneter Absorptionskoeffizienten;
- Vernachlässigung der Streuung;
- keine Berücksichtigung von Line-Mixing;
- keine Berücksichtigung von non-LTE.

### 3.1.2 Das Strahlungsübertragungsprogramm KOPRA

Das Strahlungsübertragungsmodell KOPRA (Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Model) [Stiller et al., 1997, Stiller et al., 1998, Stiller et al., 1999a, Stiller, 2000a] wurde eigens für den MIPAS Datenprozessor entwickelt, da zur Zeit des Beginns des Vorhabens alle verfügbaren Strahlungsübertragungsprogramme erhebliche Schwachstellen aufwiesen, die sie für den Einsatz der MIPAS-Satellitendatenauswertung unbrauchbar machten. KOPRA zeichnet sich aus durch die folgenden Eigenschaften:

1. hohe Rechengeschwindigkeit im Vergleich zu ähnlich leistungsfähigen Programmen; insbesondere wird die Voigt-Funktion hochgenau, aber effizient berechnet [Kuntz, 1997b, Kuntz and Höpfner, 2000]
2. benutzergesteuerte Rechengenauigkeit. Diese wirkt sich aus auf die Auswahl der zu berücksichtigenden Spektrallinien und die numerische Berechnung der Absorptionskoeffizienten [Kuntz, 1997a, Kuntz et al., 1998, Kuntz and Höpfner, 1999, Kuntz, 2000, Höpfner et al., 1999, Höpfner and Kellmann, 2000];
3. analytische Berechnung der partiellen Ableitungen  $\partial y/\partial x_j$ ; [Höpfner et al., 1998c, Höpfner, 2000a]. Dies erspart die Berechnung der Jacobimatrix über Differenzquotienten, die ungenauer ist und mehr Rechenzeit braucht;
4. Die Integration der Strahlungsübertragungsgleichung über den Weg durch die inhomogene Atmosphäre erfolgt über den Ansatz von *Curtis* [Curtis, 1952] und *Godson* [Godson, 1953], der durch Verwendung massengewogener atmosphärischer Zustandsgrößen ein relativ grobes Integrationsgitter längs des Weges ohne großen Genauigkeitsverlust erlaubt [Hase and Höpfner, 1999, Hase and Höpfner, 2000, Höpfner, 2000b].
5. Pseudokontinua schwerer Moleküle werden druck- und temperaturabhängig berechnet [Zorn et al., 2000]. Basis hierfür sind im Labor unter wohldefinierten Bedingungen gemessene Spektren der Absorptionswirkungsquerschnitte [Varanasi, 1992a, Varanasi, 1992b, Varanasi et al., 1992, Varanasi et al., 1994, Varanasi and Nemtchinov, 1994];
6. Die atmosphärische Refraktion wird nach dem Verfahren der infinitesimalen Verrückung [Hase and Höpfner, 1999] effektiv und genau modelliert. Dieses Verfahren erlaubt eine unkomplizierte Berücksichtigung der Ellipsoidform der Erde und ihrer Atmosphäre [Hase and Höpfner, 2000];
7. Abweichungen vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (NLTE) können berücksichtigt werden [Funke and Höpfner, 2000];
8. Kopplung zwischen Übergängen (sog. line-mixing Effekt) kann berücksichtigt werden [Funke, 1995, Funke et al., 1996, Funke et al., 1997, Funke et al., 1998b, Funke, 2000b];
9. beim Extinktionsbeitrag des Aerosols wird zwischen Streuung und Absorption unterschieden [Höpfner and Echle, 2000];
10. die Berechnung der O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, und H<sub>2</sub>O-Kontinua wird unterstützt [Echle and Höpfner, 2000];
11. Horizontale Inhomogenitäten atmosphärischer Zustandsgrößen werden berücksichtigt, entweder durch Gradienten oder 3-dimensionale Felder [Höpfner, 2000b];

12. instrumentelle Effekte (die charakteristische Linienform des Instruments, das Gesichtsfeld des Instruments) werden simuliert, und numerische Apodisierung wird unterstützt [Hase, 2000].

### 3.1.2.1 Anbindung an Retrieval-Szenarien

#### 1. Non-Local Thermodynamic Equilibrium (Non-LTE)

Insbesondere in der höheren Atmosphäre, wo die Luftdichte gering ist, ist die Zeitspanne zwischen zwei spontanen Emissionen eines Moleküls oft kleiner als die Zeitspanne zwischen zwei Stößen zwischen Molekülen. Stoßvorgänge sorgen typischerweise dafür, daß die Anregungsenergie eines Moleküls auf alle Freiheitsgrade Boltzmannverteilt wird und das lokale thermodynamische Gleichgewicht erhalten bleibt. Ist – wegen zu seltener Stöße – das lokale thermodynamische Gleichgewicht gestört, kann die Emission eines Moleküls nicht mehr durch seine kinetische Temperatur beschrieben werden, sondern die individuellen Energien der einzelnen Anregungsfreiheitsgrade müssen individuell berücksichtigt werden. Die Energien der Vibrationsfreiheitsgrade werden als Vibrationstemperaturen bezeichnet. Im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht stimmen diese mit der kinetischen Temperatur überein. Bricht das lokale thermodynamische Gleichgewicht zusammen (non-LTE, non-local thermodynamic equilibrium), müssen diese für die aktuelle atmosphärische Situation berechnet werden. Das IMK war aktiv bei der Untersuchung der Relevanz des Zusammenbruchs des thermodynamischen Gleichgewichtes, bei der Entwicklung von Modellen zur Berechnung von Vibrationstemperaturen, sowie bei der Entwicklung einer Auswertestrategie für Situationen, für die die Vibrationstemperaturen nicht bekannt sind.

- **Untersuchungen zur Relevanz von non-LTE Effekten:** Zu diesem Thema wurde vom IMK eine internationale Studie koordiniert [von Clarmann et al., 1998], an einer ESA-Studie mitgearbeitet [López-Puertas et al., 1996], sowie eigene Arbeiten durchgeführt [Stiller, 2000b]. Den Studien lag im Wesentlichen die Strategie zu Grunde, non-LTE relevante Probleme soweit möglich zu vermeiden, indem Auswertefenster herangezogen werden, in denen non-LTE keine erhebliche Rolle spielt. Zu diesem Zweck wurden Vibrationstemperaturen für alle relevanten Gase generiert, Strahldichtespektren für LTE und non-LTE berechnet, und aus der Differenz dieser Spektren der durch die Vernachlässigung von non-LTE implizierte Auswertefehler abgeschätzt. Es zeigte sich, dass der Ansatz, non-LTE zu vermeiden, für die meisten operationellen Datenprodukte gerechtfertigt ist.
- **Entwicklung der Vibrationstemperaturmodelle:** Erste Erfahrungen in der Modellierung von Vibrationstemperaturen wurden durch einen IMK-Mitarbeiter während eines Arbeitsaufenthaltes am IAA (Granada) gesammelt. Dabei entstand ein Modell zur Berechnung der Vibrations-, Rotations- und Spintemperaturen des Gases NO [Funke, 2000a, Funke and López-Puertas, 1999, Funke et al., 2000a, Funke and López-Puertas, 2000]. Weiterhin konnte das IMK einen Mitarbeiter des IAA gewinnen, der bereits ein Modell zur Generierung der Vibrationstemperaturen von Ozon entwickelt hatte [Martín-Torres et al., 1999]. Die Zusammenarbeit dieser beiden Wissenschaftler führte schließlich zur erfolgreichen Entwicklung eines verallgemeinerten (gasunabhängigen) Modells (siehe Kap. 3.2.9.1).
- **Einbindung der Vibrationstemperaturmodelle:** Die non-LTE Strategie des IMK ist die direkte Herleitung von non-LTE Modellparametern

tern aus den gemessenen Spektren. Hierzu musste das oben beschriebene verallgemeinerte non-LTE in das Vorwärtsmodell eingebunden werden, d.h. es musste die folgende Datenschnittstelle geschaffen werden: Das Vorwärtsmodell übergibt dem non-LTE Modell die aktuellen atmosphärischen Daten. Das non-LTE-Modell berechnet die Besetzungszahlen der einzelnen Anregungszustände und gibt sie an KOPRA zurück, das sie zur Lösung der Strahlungsübertragungsgleichung verwendet. Wenn die Besetzungszahlen ihrerseits vom Strahlungsfeld gesteuert werden, ergeben sich weitere Abhängigkeiten. Weitere Details zur Auswertestrategie bezüglich non-LTE sind unter Kap. 3.2.9.2 beschrieben.

## 2. Horizontale Inhomogenitäten

Üblicherweise wird bei der Auswertung von Horizontsondierungsmessungen die Atmosphäre als horizontal homogen angenähert. Wir zeigten bereits 1993 [von Clarmann, 1993], daß diese Näherung nicht durchweg angemessen ist. Um horizontalen Inhomogenitäten Rechnung zu tragen, erlaubt KOPRA die Berücksichtigung von Horizontalgradienten atmosphärischer Zustandsgrößen. Da KOPRA auch die partiellen Ableitungen der Spektren nach den Horizontalgradienten optional bereitstellt, wird auch die Herleitung der Horizontalgradienten aus den Spektren unterstützt. Neuerdings sind am IMK Untersuchungen im Gange, inwieweit anstelle der linearen Näherung durch Horizontalgradienten auch dreidimensionale Felder der atmosphärischen Zustandsgrößen unmittelbar verarbeitet werden können. Erste Versuche sind vielversprechend, jedoch werden die partiellen Ableitungen hierfür noch nicht unterstützt.

## 3. Aerosolbeiträge und Kontinua

Nicht das komplette atmosphärische Signal lässt sich durch Linienspektren beschreiben. Vielmehr ist ein zusätzliches im Frequenzraum eher kontinuierliches Signal zu berücksichtigen. Dieses kontinuierliche Signal beschreibt u.a. die Emission von Wolken und Aerosol, das Signal der Wasserdampflineinflügel, das von den gängigen Linienformmodellen nicht richtig beschrieben wird, die Beiträge schwerer Moleküle, deren Rotationsübergänge nicht als einzelne Linien auflösbar sind, sowie Dimer-Übergänge (z.B.  $O_2-O_2$ ). Besonders interessant sind für die MIPAS-Auswertung die Auswirkungen des Aerosols auf das Kontinuumssignal: Aus der Frequenzabhängigkeit des Kontinuums können Rückschlüsse auf Zusammensetzung und Größenverteilung des atmosphärischen Aerosols und der Wolkenpartikel gezogen werden [Echle, 1996, Echle et al., 1996b, Echle et al., 1996a, Echle et al., 1997, Echle et al., 1998b, Echle et al., 1998a, Echle and von Clarmann, 1998, Echle and von Clarmann, 1999, Höpfner et al., 2001, Höpfner et al., 2001c]. Zu diesem Zweck muss ein Mie-Streu-Programm zwischen Vorwärtsprogramm und Inversionsprogramm eingekoppelt werden; das Mie-Programm berechnet aus den komplexen Brechungsindizes die Absorptions- und Streu-Koeffizienten für die aktuelle Annahme über die Aerosol-Größenverteilung und gibt sie an das Strahlungsübertragungsmodell. Dieses berücksichtigt sie als Absorptions- und Extinktionskoeffizienten bei der Berechnung des atmosphärischen Aerosolsignals. Das Inversionsprogramm vergleicht gemessene und simulierte Spektren und ermittelt aus deren Differenz verbesserte Schätzwerte über die Aerosol-Größenverteilung. Diese werden an das Mie-Modell gegeben und ein neuer Iterationsschritt beginnt. Die Anforderungen an KOPRA bestehen darin, die komplexen Brechungsindizes verwerten zu können. Außerdem muss KOPRA die partiellen Ableitungen der Spektren nach den Aerosolparametern liefern.

#### 4. Line-Mixing

Während der Stoßprozesse von Molekülen kommt es zu Energieübertragungen zwischen energetisch benachbarten Übergängen. Dies impliziert veränderte Intensitätsverhältnisse der Linien untereinander, sowie veränderte Linienformen. Diese Effekte wurden beschrieben von *Armstrong* [Armstrong, 1982], *Bulanin* und Mitarbeiter [Bulanin et al., 1984], *Strow* und Mitarbeiter [Strow and Reuter, 1988, Strow et al., 1994], oder *Hartmann* [Hartmann and L'Haridon, 1995, Hartmann et al., 1996] als *line mixing* oder *line coupling*. Da die Energieniveaus bei Q-Zweigen besonders eng beieinander liegen, sind die Kopplungseffekte hier besonders ausgeprägt. Unsere Modellierung dieser Effekte für CO<sub>2</sub> entsprechend dem Modell von *Strow et al.* ist beschrieben durch *Funke et al.* [Funke, 1995, Funke et al., 1996, Funke et al., 1997, Funke et al., 1998b, Funke, 2000b]. In unserem Programm wird sowohl die Näherung nach Rosenkranz [Rosenkranz, 1975] als auch die Methode der direkten Diagonalisierung der Relaxationsmatrix unterstützt. Wahlweise kann ausserdem das Modell von *Hartmann et al.*, sowohl in der direkten Diagonalisierung als auch in der Rosenkranz-Näherung, in KOPRA verwendet werden. Außerdem ist die Modellierung des P- und R-Zweig-line-mixings für CO<sub>2</sub> entsprechend der Arbeiten von *Tobin et al.* [Tobin, 1993] implementiert; bei diesen Zweigen mischen sich line-mixing- und sog. "far-wing-" Effekte, d.h. Abweichungen von der Lorentz-Form in den Linienflügeln bedingt durch die endliche Dauer der Stöße, so dass neben der Modellierung der Line-mixing-Effekte im P- und R-Zweig selbst eine mit beiden Effekten kompatible Beschreibung der Form der fernen Flügel gefunden werden musste.

Die Kopplung von Übergängen ist offensichtlich druckabhängig, da hoher Druck die Wechselwirkungen zwischen Molekülen verstärkt. Da es hier zu druckabhängigen Energieübertragungen zwischen Übergängen kommt, eröffnet die Kopplung zwischen Übergängen die Möglichkeit der Rekonstruktion des atmosphärischen Drucks selbst dann, wenn aufgrund unzureichender spektraler Auflösung des Meßgeräts die Druckverbreiterung der Spektrallinien nicht mehr aufgelöst werden kann. Ein solches Verfahren wurde von *Hartmann* vorgeschlagen (Privatmitteilung, 1997), und harrt seitdem der Bearbeitung durch einen noch zu findenden Diplomanden oder Doktoranden.

Die oben beschriebene Störung der Energielevels durch andere Moleküle führt auch zur Druckverschiebung, bei der sich das Zentrum einer Spektrallinie längs der Frequenzachse verschiebt. Auch dieses Phänomen ist nur bei großen Drücken - also in der Tropopausenregion und darunter - relevant. Über erfolgreiche Ansätze, dieses Phänomen zur Rekonstruktion von Druckprofilen zu verwenden, ist uns nichts bekannt.

#### 5. Isotopomer-Verbindungen mit individuellen Mischungsverhältnissen

Bei Molekülverbindungen der häufigsten in der Atmosphäre vorkommenden Atome wie H, C, O oder N sind Moleküle unterschiedlicher Isotop-Verbindungen, sog. Isotopomere, nachweisbar. Prominente Vertreter sind <sup>16</sup>O<sup>18</sup>O<sup>16</sup>O, CH<sub>3</sub>D oder HDO. Entsprechend ihrer Entstehungsprozesse haben Isotopomere eines Moleküls durchaus individuelle Mischungsverhältnisprofile. Nimmt man für die Isotopomere eines Moleküls ein Vertikalprofil und ein festes Mengenverhältnis an, kann dies zu nennenswerten Retrievalfehlern führen, besonders wenn die Neben-Isotopomere abgeleitet werden sollen, und in den ausgewählten Spektralfenstern auch Spektrallinien des Haupt-Isotopomers liegen [Stiller et al., 2001b]. Um dies zu umgehen, lässt KOPRA für jedes Isotopomer ein individuelles Mischungsverhältnis-Profil zu und korrigiert die Einträge zu den Linienintensitäten in der HITRAN-Datenbank, die sich auf ein

Standard-Verhältnis des Auftretens der Isotopomere beziehen, entsprechend [Höpfner, 2000b].

## 6. Spurengase für die keine Liniendaten vorliegen

Normalerweise werden die spektroskopischen Eigenschaften der Spurengase durch sog. Linien-Datenbanken erfasst, in denen die Positionen, Intensitäten, Breiten und Temperaturabhängigkeiten der Vibrations-Rotations-Übergänge eines Spurengases zusammengetragen sind. KOPRA liest diese Datenbank ein und berechnet daraus die Intensität und Breite der jeweiligen Linie zu den gegebenen atmosphärischen Bedingungen. Diese Datenbanken decken ca. 40 Spurengase ab, deren Vorkommen in der Atmosphäre bisher mittels Infrarot-Spektroskopie nachgewiesen werden konnte. Daneben gibt es eine Reihe anderer Spurengase, die in den Datenbanken nicht enthalten sind.

- **Cross-Section Gase:** Unter den sogenannten "Cross-Section Gasen" werden Gase verstanden, deren Vibrations-Rotationsübergänge unter bestimmten Bedingungen nicht mehr auflösbar sind, und deren Spektren deshalb sinnvollerweise nicht Linie für Linie berechnet werden, z.B. FCKW's, ClONO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> oder SF<sub>6</sub>. Stattdessen werden im Labor gemessene Spektren der Absorptions-Wirkungsquerschnitte (engl. cross-sections) verwendet. In der Anfangszeit der MIPAS Aktivitäten gab es derartige Wirkungsquerschnittspektren nur für wenige Gase und ausschließlich für Laborbedingungen. Mittlerweile stehen solche Referenzspektren für die meisten relevanten Gase für verschiedene Drücke und Temperaturen zur Verfügung, wie sie typischerweise in der Atmosphäre herrschen. Das Strahlungsübertragungsprogramm KOPRA ist in der Lage, derartige Referenzspektren einzulesen, auf die aktuellen Drücke und Temperaturen zu interpolieren, und die so berechneten Absorptionskoeffizienten für die Strahlungsübertragungsrechnungen zu verwenden.
- **"Exotische" Spurengase:** Neben den Gasen, die klassischerweise in der Atmosphärenspektroskopie behandelt werden, und deren spektroskopische Daten in einschlägigen Datenbanken [Rothman et al., 1998, Jacquinet-Husson et al., 1999, Brown et al., 1987] gesammelt sind, wurde in der letzten Zeit die Relevanz einer ganzen Reihe weiterer Gase erkannt [Kerridge et al., 2001]. Hierunter fallen z.B. Azeton, PAN, Methanol, Isopren, Propylen, und Dimethylsulfid. Um die Detektierbarkeit dieser Spezies quantitativ zu untersuchen, mussten für diese Gase spektroskopische Daten (Liniendaten oder Wirkungsquerschnittspektren) beschafft werden, und die entsprechenden Datenschnittstellen für KOPRA geschaffen werden.

### 3.1.3 Relevanz der in KOPRA implementierten Modelliermöglichkeiten

Die in KOPRA implementierten Modelliermöglichkeiten sind zum Teil einzigartig unter vergleichbaren Strahlungstransfer-Codes. Ob sie jedoch auch relevant für die korrekte Beschreibung des Strahlungstransportes durch die reale Atmosphäre sind, wurde in einer ausführlichen Studie untersucht [Stiller et al., 1998, Stiller et al., 1999b, Stiller et al., 1999a, Stiller et al., 2001b]. Dazu wurden die Retrievalfehler abgeschätzt, die durch übliche Vereinfachungen bei der Strahlungstransportmodellierung gemacht werden, wie z.B. keine horizontalen Inhomogenitäten, keine non-LTE Effekte bei Retrieval von Quellgasen nahe der Tropopause, nicht-variable und höhenkonstante relative Verhältnisse der verschiedenen Isotop-Zusammensetzungen eines Spurengases, etc.. Abb. 1 zeigt als Beispiel den Ausschnitt eines Spektrums für eine Tangentenhöhe von 11 km unter verschiedenen

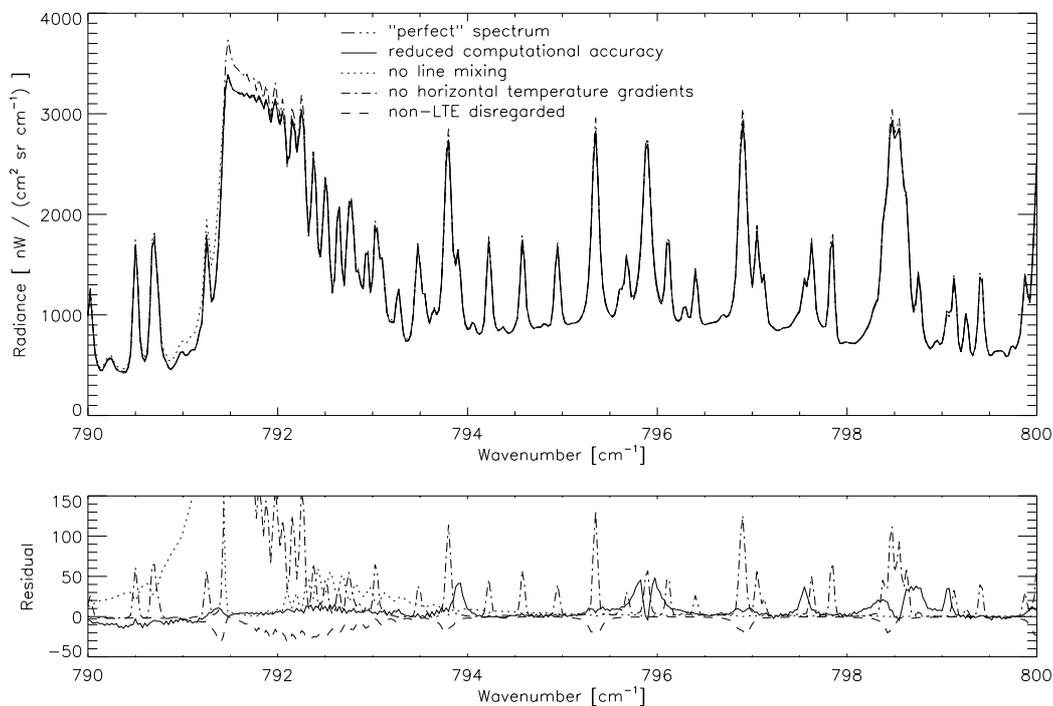


Abbildung 1: Ausschnitt eines Spektrums für 11 km Tangentenhöhe, in dem  $\text{CCl}_4$  abgeleitet werden könnte; er werden folgende Modellierungen miteinander verglichen; Referenzsimulation ( -... ); reduzierte numerische Genauigkeit ( — ); Vernachlässigung des line mixings ( ... ); Vernachlässigung horizontaler Gradienten ( -.-.- ); Vernachlässigung von Non-LTE-Effekten ( - - - ).

Vereinfachungen bei der Strahlungstransport-Modellierung. Es ergaben sich erhebliche Retrievalfehler, die z.T. die Fehler durch das Detektor-Rauschen um bis zu einer Größenordnung übersteigen. Es konnte außerdem nachgewiesen werden, daß auch eine hohe numerische Genauigkeit, besonders bei der Faltung des Instrumentengesichtsfeldes mit dem Strahldichte-Profil, wichtig für ein korrektes Retrievalergebnis ist. Das Ergebnis dieser Studie ist eine *a-posteriori* Rechtfertigung für die hohe Genauigkeit, die bei der Entwicklung des Strahlungstransportmodells KOPRA angestrebt worden ist.

### 3.2 Inversionsverfahren

Zwar lagen zu Beginn des Projektes schon umfassende theoretische Arbeiten zur Inversionstheorie von [Rodgers, 1976] vor, doch wurden in der Praxis – zumindest in Verbindung mit spektral hoch auflösenden Instrumenten – weitgehend ad hoc Verfahren verwendet. Mit dem Auswerteprogramm RAT (Retrieval of Atmospheric Trace Gases), das die Kombination verschiedener Auswerteverfahren mit verschiedenen Vorwärtsmodellen unterstützte und die simultane Auswertung verschiedener atmosphärischer Zustandsparameter erlaubte, hatte das IMK Analysewerkzeuge, die aus heutiger Sicht als State of the Art zu bezeichnen waren. Diese Werkzeuge wurden mit Erfolg über viele Jahre hinweg zur Auswertung der MIPAS Ballon-, Flugzeug-

und Bodenexperimente verwendet. Die rasante Steigerung der Leistungsfähigkeit der Rechner innerhalb des letzten Jahrzehnts führte jedoch dazu, daß die damaligen *ad hoc* Ansätze nicht mehr zu rechtfertigen waren, und erlaubte die Implementierung eines völlig neuen Auswertewerkzeugs, das optimal an die Anforderungen des MIPAS Satellitenexperiments angepasst ist.

### 3.2.1 Theoretische Grundlagen

**3.2.1.1 Inversion** Es sei  $\mathbf{y}_{Messung}$  ein  $m_{max}$ -dimensionaler Vektor, der die gemessenen Größen  $y_{m,Messung}$  enthält. In der atmosphärischen Infrarotemissionspektrometrie ist der Meßvektor eine Horizontsondierungssequenz aus Strahldichtespektren, von denen jedes aus einzelnen spektralen Strahldichten besteht. Weiterhin sei  $\mathbf{f}$  unser Strahlungsübertragungsmodell, das beschreibt, wie sich atmosphärische und andere bestimmende Größen  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{u}$  auf einen Satz Meßwerte  $\mathbf{y}$  abbilden.

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2)$$

Unter  $\mathbf{x}$  wollen wir den  $n_{max}$ -dimensionalen Vektor der unabhängigen Variablen verstehen, die im Rahmen der Inversion von  $\mathbf{f}$  unbekannt sind und die rekonstruiert werden sollen, während  $\mathbf{u}$  bekannte Parameter sind, die bei der Inversion konstant gehalten werden, selbst wenn sie mit einer gewissen Unsicherheit behaftet sind. Die Funktion  $\mathbf{f}$  ist im allgemeinen nichtlinear, wird aber zweckmäßigerweise linearisiert:

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (3)$$

Die Dimension  $m_{max}$  des Vektors der Meßwerte  $\mathbf{y}$  ist in der Spektrometrie im allgemeinen größer als die des Parametervektors  $\mathbf{x}$ . Wir fassen die partiellen Ableitungen  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{x}$  zur  $m_{max} \times n_{max}$ -dimensionalen *Jacobi*-Matrix  $\mathbf{K}$  zusammen und erhalten:

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{K}_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad (4)$$

wobei das Subskript  $i$  für den besten vorhandenen Schätzwert der Parameter steht, für die Spektren berechnet und Ableitungen entwickelt werden. Aufgrund  $m_{max} > n_{max}$  ist das Inversionsproblem formal überdeterminiert und wird derart minimiert, daß die quadratische Norm der Differenz zwischen  $\mathbf{y}$  und  $\mathbf{y}_{Messung}$ , gewichtet mit der Inversen der  $m_{max} \times m_{max}$  dimensionalen Kovarianzmatrix der Messung  $\mathbf{S}_y$  minimal wird:

$$\|\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x})\|_{\mathbf{S}_y^{-1}}^2 = \|\mathbf{y}_{Messung} - (\mathbf{y}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{K}_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i))\|_{\mathbf{S}_y^{-1}}^2 = \text{minimal}. \quad (5)$$

Die Schätzung für den Zustandsgrößenvektor im Rahmen einer *Newton*'schen Iteration für den  $i$  plus ersten Iterationsschritt lautet

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i)^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)). \quad (6)$$

Die Diagonale von  $\mathbf{S}_y$  enthält die Unsicherheit jedes einzelnen Meßwertes, ausgedrückt in Varianzen, während die übrigen Elemente die jeweiligen Korrelationen zwischen den Meßwerten beschreiben. Superskript  $T$  bezeichnet transponierte Matrizen.

Um zu vermeiden, daß bei stark nichtlinearen Problemen während eines Iterationsschrittes der Gültigkeitsbereich der linearen Approximation verlassen wird, führten *Levenberg* [Levenberg, 1944] und *Marquardt* [Marquardt, 1963] einen Dämpfungsterm ein,

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)). \quad (7)$$

Hier ist  $\lambda$  ein vom Benutzer gewählter Dämpfungsparameter, und  $\mathbf{I}$  ist die Einheitsmatrix. Die durch den Term  $\lambda\mathbf{I}$  hervorgerufene Dämpfung hat keinen Einfluß auf die Lösung, denn im Fall von Konvergenz wird dieser Beitrag Null, und die Lösung ist identisch zu der Lösung nach Gleichung 6.

Falls die Lösung instabil wird, weil das Rauschen zu groß wird, oder die einzelnen bestimmenden Gleichungen aus dem Gleichungssystem (4) voneinander nahezu linear abhängig werden, bietet es sich an, eine Nebenbedingung

$$\mathbf{B}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{r} \quad (8)$$

zu stellen, um Gleichung (6) oder (7) eindeutig lösbar zu machen.  $\mathbf{x}_0$  ist hierbei ein vom Benutzer festgelegter *a priori* Satz von Zustandsgrößen. Diese Nebenbedingung kombiniert mit Gleichung (5) ergibt

$$\|\mathbf{y}_{Messung} - (\mathbf{y}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{K}_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i))\|_{\mathbf{S}_y^{-1}}^2 + \gamma\|\mathbf{B}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - \mathbf{r}\|^2 = \text{minimal}. \quad (9)$$

Instruktive Arbeiten hierzu sind zum Beispiel [Kuntz, 1994] oder [Schimpf, 1996]. Bei praktischen Anwendungen ist oft  $\mathbf{r} = 0$  angemessen. Anwendung auf Gleichung (6) ergibt dafür

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_0 + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} ((\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{K}_i(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i)). \quad (10)$$

Die Formulierung der Parameteränderung bezogen auf  $\mathbf{x}_i$  anstelle  $\mathbf{x}_0$  lautet,

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)) + \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i)). \quad (11)$$

Alternativ kann auch in Gleichung (8)  $\mathbf{x}_0 = 0$  gesetzt werden, also die Nebenbedingung anstatt auf die Differenz zwischen Ergebnis und Startprofil auch auf das Ergebnis angewendet werden:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)) - \gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B} \mathbf{x}_i). \quad (12)$$

Häufig verwendet werden in der Fernerkundung die Nebenbedingung nach *Tikhonov* und *Phillips* [Tikhonov, 1963, Phillips, 1962] oder eine stochastische Nebenbedingung [Rodgers, 1976]. Auch wenn Gleichung 10 strukturell Gleichung 7 sehr ähnlich sieht, so ist doch zu beachten, daß der Einfluß der Nebenbedingung auch bei Konvergenz nicht verschwindet, sondern die Nebenbedingung einen beabsichtigten Einfluß auf die Lösung hat.

Der einfachste Operator, der zur Regularisierung taugt, ist eine Einheitsmatrix. Mit  $\mathbf{x}_0 = 0$  zwingt die Nebenbedingung

$$\mathbf{B}_0 \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_{max}} \end{pmatrix} = 0. \quad (13)$$

die Lösung bei Anwendung von Gleichung (12) in Richtung Null, während mit  $\mathbf{x}_0 \neq 0$  die Lösung bei Anwendung von Gleichung (11) an das Startprofil gebunden wird.

Die Nebenbedingung nach *Tikhonov* und *Phillips* wird in der Fernerkundung meist verwendet in einer Variante, die die Glattheit von Profilen atmosphärischer Zustandsparameter erzwingt, indem Differenzen benachbarter Profilstützpunkte klein

gehalten werden:

$$\mathbf{B}_1 \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_{max}-1} \end{pmatrix} = 0. \quad (14)$$

Auch ein Dämpfen der zweiten Ableitungen ist möglich:

$$\mathbf{B}_2 \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_{max}-2} \end{pmatrix} = 0. \quad (15)$$

Der Regularisierungsparameter  $\gamma$  regelt die Stärke der Wirksamkeit der Nebenbedingung.

Für die Anwendung der sogenannten stochastischen Zwangsbedingung, daß die Lösung von der *a priori* Information  $x_0$ , die in der Regel durch ein klimatologisches Mittel der gesuchten Zustandsgrößen  $x_n$  gegeben ist, möglichst wenig abweichen soll, ergibt sich durch Anwendung *Bayes'scher* Statistik (siehe z.B. [Rodgers, 1976]):

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_0 + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_{a\,priori}^{-1})^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} ((\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{K}_i(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i)), \quad (16)$$

beziehungsweise, ausgehend vom aktuellen Schätzwert  $\mathbf{x}_i$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_{a\,priori}^{-1})^{-1} (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)) + \mathbf{S}_{a\,priori}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i)), \quad (17)$$

Hierbei ist  $\mathbf{S}_{a\,priori}$  die  $n_{max} \times n_{max}$  Kovarianzmatrix der Unsicherheit der *a priori* Information,  $\mathbf{x}_0$ , über den Parametervektor. Die Lösung stellt das optimal gewichtete Mittel aus dem direkten Meßergebnis und der *a-priori*-Information dar, wobei die Wichtung quadratisch invers zur jeweiligen Unsicherheit erfolgt. Bei diagonal angenommenem  $\mathbf{S}_{a\,priori}^{-1}$  wird die Äquivalenz in der Wirkungsweise zu Gleichungen (10) und (11) bei Anwendung des  $\mathbf{B}_0$ -Operators deutlich.

Die in älteren Arbeiten von *Rodgers* (siehe z.B. [Rodgers, 1976]) favorisierte Äquivalentumformung von Gleichung (16)

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{S}_{a\,priori} \mathbf{K}_i^T (\mathbf{K}_i \mathbf{S}_{a\,priori} \mathbf{K}_i^T + \mathbf{S}_y)^{-1} ((\mathbf{y}_{Messung} - \mathbf{y}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{K}_i(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i)) \quad (18)$$

ist nur für Radiometermessungen mit  $m_{max} < n_{max}$  effizient, aber für die Auswertung von Spektren mit  $m_{max} > n_{max}$  unangebracht, da Matrizen wesentlich größerer Reihen- und Spaltenzahl invertiert werden müssen.

**3.2.1.2 Fehlerrechnung** Der Rekonstruktionsfehler  $S_x$  des Parametervektors  $\mathbf{x}$  setzt sich zusammen aus dem durch das Rauschen der Meßwerte verursachten Rekonstruktionsfehler  $\mathbf{S}_{x,Rauschen}$ , durch den Fehler des zur Inversion verwendeten Modells und seiner Parameter  $\mathbf{S}_{x,u}$ , sowie durch den oben erwähnten Glättungsfehler  $\mathbf{S}_{x,Glättung}$  [Rodgers, 1990]:

$$\mathbf{S}_x = \mathbf{S}_{x,Rauschen} + \mathbf{S}_{x,u} + \mathbf{S}_{x,Glättung} \quad (19)$$

Alle Fehler werden hier durch ihre Kovarianzmatrizen charakterisiert, in deren Diagonale die Varianzen ( $\sigma_{x,n}^2$ ) stehen, während die Elemente außerhalb der Diagonalen die Korrelationen zwischen den  $\sigma_{x,n}$  beschreiben.

Jede Messung ist mit einem Meßfehler  $\sigma_y$  behaftet, der im Rahmen der Fehlerrechnung meist durch die dazugehörige Varianz  $\sigma_y^2$  dargestellt wird. Im Rahmen der linearen Näherung wird der durch den Meßfehler bewirkte Rekonstruktionsfehler  $\sigma_x$  abgeschätzt als

$$\sigma_{x,Rauschen} = \frac{\partial x}{\partial y} \sigma_y. \quad (20)$$

Im Fall der Spektrometrie hat man es mit mehreren Meßwerten  $x_n$  zu tun. Die Gesamtheit der Meßfehler dieser Meßpunkte heißt Rauschen. Die Varianzen der Einzelmessungen (spektralen Stützstellen) werden in der Diagonalen der Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_{y,Rauschen}$  dargestellt. Einträge außerhalb der Diagonalen charakterisieren Korrelationen zwischen den Einzelmessungen. Aus  $\mathbf{S}_{y,Rauschen}$  kann in Konsistenz mit der nach quadratischer Norm best-approximierten Schätzung des Ergebnisses gemäß Gleichung (6) der durch das Rauschen implizierte Fehler des Rekonstruktionsergebnisses  $\mathbf{S}_{x,Rauschen}$  berechnet werden als

$$\mathbf{S}_{x,Rauschen} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})^{-1}. \quad (21)$$

Wird regularisiert, gilt entsprechend:

$$\mathbf{S}_{x,Rauschen} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}^T (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1}, \quad (22)$$

$\mathbf{R}$  ist hier der jeweilige Regularisierungsterm, zum Beispiel  $\gamma \mathbf{B}^T \mathbf{B}$  im Falle einer *Tikhonov*-Regularisierung wie in Gleichung (14). Wenn die Einzelmessungen als statistisch unabhängig voneinander betrachtet werden, sind die Elemente von  $\mathbf{S}_{y,Rauschen}$  außerhalb der Diagonalen Null. Numerische Filterung von einem Satz von Meßwerten mit ursprünglich unabhängiger Information (d. h. Apodisierung von Interferogrammen) führt zu korrelierten Meßwerten. Die entsprechende Kovarianzmatrix berechnet sich aus dem Wert des Rauschen des unapodisierten Signals (*noise equivalent spectral radiance, NESR*), dem Stützstellenabstand  $\Delta\nu$  und der Apodisierungsfunktion *APO* als

$$s_{i,j} = NESR^2 \times \sum_k \Delta\nu^2 \times (APO_k \times APO_{k-abs(i-j)}). \quad (23)$$

Wenn im Falle von *Fourier*-Transformationspektrometrie sogenanntes "zero-padding" (Auffüllen des Interferogramms mit Nullen bis die Stützstellenanzahl  $2^n$  beträgt) angewendet wird, wird die Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_{y,Rauschen}$  singulär, und Gleichung 21 kann nicht mehr angewendet werden. Wenn das Rauschen im betrachteten Spektralbereich überall gleich groß ist und eine Wichtung der Elemente von  $\mathbf{K}$  untereinander entfallen kann, schätzen wir  $\mathbf{S}_x$  unter Vermeidung der Inversion von  $\mathbf{S}_y$  ab als

$$\mathbf{S}_x = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y \mathbf{K} (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1}, \quad (24)$$

beziehungsweise, wenn regularisiert wird, als

$$\mathbf{S}_x = (\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y \mathbf{K} (\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1}, \quad (25)$$

Im Falle einer singulären Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_y$  und frequenzabhängigem Rauschen hilft Gleichung (24) nicht unmittelbar weiter, denn die Wichtung der Elemente von  $\mathbf{K}$  müßte wiederum nach  $\mathbf{S}_y^{-1}$  erfolgen. In der Praxis hat es sich bewährt, das Rauschen als lokal konstant anzunehmen, und für Teilbereiche des Spektrums Gleichung 24 zu verwenden. Sollen verschiedene Teilbereiche, die durch unterschiedlich starkes Rauschen charakterisiert sind, zur Auswertung herangezogen werden, können die Teilbereiche untereinander mit guter Näherung als untereinander unkorreliert

betrachtet werden. Eine andere Lösungsmöglichkeit des Problems der singulären Kovarianzmatrizen besteht in der Eigenwertzerlegung.

Sowohl Modellfehler wie auch Parameterfehler sind im Spektrum korreliert. Die Rekonstruktionsfehler  $\Delta x_{i,j}$  des Parameters  $x_i$  aufgrund der Fehlerquelle  $j$  des Modells oder der Parameter werden linear approximiert als

$$\Delta \mathbf{x}_j = \begin{pmatrix} \Delta x_{1,j} \\ \Delta x_{2,j} \\ \vdots \\ \Delta x_{i_{max},j} \end{pmatrix} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{fehlerhaft,j} - \mathbf{y}_{wahr}), \quad (26)$$

beziehungsweise, wenn regularisiert wird,

$$\Delta \mathbf{x}_j = \begin{pmatrix} \Delta x_{1,j} \\ \Delta x_{2,j} \\ \vdots \\ \Delta x_{i_{max},j} \end{pmatrix} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{fehlerhaft,j} - \mathbf{y}_{wahr}), \quad (27)$$

Dabei sind  $i_{max}$  die Anzahl der anzupassenden Parameter,  $\mathbf{y}_{wahr}$  ist ein mit einem als fehlerfrei angenommenen, möglichst vollständigen Strahlungsübertragungsmodell berechnetes Referenzspektrum, und  $\mathbf{y}_{fehlerhaft,j}$  ein Spektrum, das mit dem gleichen Modell und den gleichen Parametern gerechnet wurde, außer daß Parameter  $j$  um eine Standardabweichung gestört wurde, bzw. der physikalische Effekt mit Index  $j$  bei der Rechnung vernachlässigt wurde. Typische Fehlerquellen, deren Auswirkung auf die Rekonstruktion von Spurengasvertikalprofilen durch diesen Formalismus beschrieben werden, sind Temperaturunsicherheiten, Unsicherheiten in der Konzentration von Gasen, deren Linien in den auszuwertenden Spektralbereich hineinragen, fehlerhaft angenommene Elevationswinkel, die Vernachlässigung von Übergangskopplungen, oder die manchmal unangemessene Annahme von lokalem thermodynamischen Gleichgewicht.

Die spektral korrelierte Natur dieser Fehler  $j$  führt zur folgenden Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_j$ :

$$\mathbf{S}_{x,u_j} = \Delta \mathbf{x}_j \Delta \mathbf{x}_j^T. \quad (28)$$

Es ist zu beachten, daß sich Rekonstruktionsfehler, die auf zueinander unkorrelierten Parameterfehlern beruhen, als Varianzen (bzw. Kovarianzmatrizen) addieren, während bei Modellfehlern aufgrund ihrer vorhersagbaren Natur linear die Standardabweichungen linear addiert werden. Der Gesamtrekonstruktionsfehler aufgrund von  $i_{max}$  Modell- und  $j_{max}$  Parameterfehlern wird also beschrieben als

$$\mathbf{S}_{x,u_{i_{max},j_{max}}} = \sum_1^{i_{max}} \Delta \mathbf{x}_i^T \sum_1^{i_{max}} \Delta \mathbf{x}_i + \sum_1^{j_{max}} \mathbf{S}_{x,u_j}. \quad (29)$$

Sind verschiedene unsichere Parameter teilweise korreliert - wie zum Beispiel bei Höhenprofilen atmosphärischer Parameter üblich - dann berechnet sich  $\mathbf{S}_{x,u_j}$  als

$$\mathbf{S}_{x,u_j} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{K}_u \mathbf{S}_u \mathbf{K}_u^T \mathbf{K} (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1}, \quad (30)$$

oder mit Regularisierung

$$\mathbf{S}_{x,u_j} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{K}_u \mathbf{S}_u \mathbf{K}_u^T \mathbf{K} (\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1}. \quad (31)$$

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

Um die räumliche Auflösung einer Messung zu beschreiben, bedient man sich der Auflösungsmatrix (engl.: *averaging kernel matrix*)  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \quad (32)$$

Die Spalte  $n$  der  $n_{max} \times n_{max}$ -dimensionalen Auflösungsmatrix gibt das Höhenprofil an, auf das das gewählte Rekonstruktionsschema eine Deltafunktion mit dem Maximum an der Höhenstufe  $n$  abbildet. Wenn keine Regularisierung erfolgt, ist die Auflösungsmatrix die Einheitsmatrix.

Es gibt viele Möglichkeiten, die Höhenauflösung einer Fernerkundungsmessung durch einen skalaren Wert zu charakterisieren, zum Beispiel über die Halbwertsbreite einer Zeile oder Spalte der Auflösungsmatrix. Eine Darstellung, die die Unabhängigkeit von zwei Punkten im Parameterraum zum Maß nimmt, ist die Modulationstransferfunktion  $\mathbf{M}$ ; jede Spalte  $\mathbf{m}_n$  dieser Matrix ist definiert als die *Fourier-Transformierte* der entsprechenden Zeile  $\mathbf{a}_n$  der Auflösungsmatrix  $\mathbf{A}$ . Die Höhenauflösung an der Höhenstufe  $n$  ist dann definiert als die reziproke Halbwertsbreite von  $\mathbf{a}_n$  bezogen auf den Initialwert [Carlotti and Carli, 1994].

Aus der Auflösungsmatrix kann bei Kenntnis der typischen Höhenauflösung, dargestellt durch die klimatologische Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_{x,klimatol.}$ , der mittlere durch Regularisierung bewirkte Rekonstruktionsfehler abgeschätzt werden:

$$\mathbf{S}_{Glättung} = (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \mathbf{S}_{x,klimatol.} (\mathbf{A} - \mathbf{I})^T \quad (33)$$

$\mathbf{I}$  ist die  $n_{max} \times n_{max}$  Einheitsmatrix.  $\mathbf{S}_{Glättung}$  beschreibt den Rekonstruktionsfehler durch Glättung im Falle einer Regularisierung wie in Gleichungen 10 und 14, beziehungsweise den Fehler durch die Anbindung der Lösung an *a priori* Wissen wie in Gleichung 16. Wird nicht regularisiert, ist  $\mathbf{S}_{Glättung}$  offensichtlich Null, denn dieser Formalismus beschreibt nur Glättungsfehler durch den Rekonstruktionsformalismus, nicht jedoch solche, die durch eine möglicherweise zu grobe Diskretisierung des Parametervektors  $\mathbf{x}$ , oder durch die limitierte Höhenauflösung des Meßgerätes bewirkt werden.

### 3.2.2 Allgemeine Strategie

Dem Gestalter eines Rekonstruktionsschemas für ein spezielles Rekonstruktionsproblem bleibt der folgende Entscheidungsspielraum:

1. Die Wahl eines zuverlässigen Vorwärtsmodells zur Lösung des nichtlinearen Problems  $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$  und zur Berechnung der Jacobimatrix  $\mathbf{K}_i$ . Dieses Modell muß bei geeigneter Wahl der Parameter  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{u}$  das gemessene Spektrum möglichst perfekt beschreiben und die partiellen Ableitungen  $\partial y_m / \partial x_n$  bereitstellen. Da in der gesamten *level-2*-Auswertung der Hauptanteil der Rechenzeit bei der Vorwärtsberechnung der Spektren und der partiellen Ableitungen anfällt, ist hier rechnerische Effizienz besonders wichtig. Für den MIPAS Auswerteprozessor wurde zu diesem Zweck KOPRA entwickelt (siehe Kapitel 3.1.2)
2. Eine vorteilhafte Definition des Parametervektors  $\mathbf{x}$ . Dies umfaßt einerseits die Entscheidung, welche Parameter aus der Messung rekonstruiert werden sollen, und welche als bekannt vorausgesetzt werden sollen, also welche Größen dem Vektor  $\mathbf{x}$  und welche dem Vektor  $\mathbf{u}$  zugeordnet werden sollen; andererseits ist in diesem Zusammenhang eine Entscheidung zu treffen, wie die in Wirklichkeit kontinuierlichen Verteilungsfunktionen der Zustandsgrößen auf den diskreten Parametervektor  $\mathbf{x}$  abgebildet werden. Die Definition des Parametervektors basiert auf dem Wissen, welche physikalischen Prozesse, die das Spektrum

beeinflussen, von den Targetparametern derart gesteuert werden, daß die Rekonstruktion der Targetparameter möglich wird. Außerdem soll die Dimension von  $\mathbf{x}$  nicht den Rahmen des rechnerisch Praktikablen sprengen, und Rekonstruktionsfehler aufgrund von Unsicherheiten von  $\mathbf{u}$  sollen vermieden werden. Weiterhin muß entschieden werden, ob die Parameter  $\mathbf{x}$  direkt rekonstruiert werden sollen, oder Funktionen derselben, zum Beispiel  $\ln(\mathbf{x})$ . Für die Standardanwendung des MIPAS Auswerteprozessors wählten wir den folgenden Parametervektor: Volumenmischungsverhältnisse des gesuchten Spurengases auf einem Höhengitter, das enger als die Tangentenhöhenabstände ist (ca. 1 km); Horizontalgradienten der Volumenmischungsverhältnisse; einen Wert zur Nulllinienkalibrationskorrektur pro Auswertefenster; einen Wert für die atmosphärische Kontinuumsemission pro Auswertefenster und Höhenstufe.

3. Eine optimierte Auswahl, welche Meßwerte  $y_m$  (i.e. spektralen Stützstellen) bei der Auswertung berücksichtigt werden sollen, und welche nicht. Geeignete Stützstellen sind solche, an denen die Meßwerte  $y_m$  maximal von den Targetparametern  $x_n$  abhängen, und gleichzeitig minimal von schlecht bekannten Konstanten  $u$  abhängen. Durch Verwendung einer optimalen Auswahl der Meßwerte  $y_m$  wird der Rekonstruktionsfehler von  $\mathbf{x}$  minimal. Zur optimalen Bestimmung der sogenannten Auswertefenster wurde am IMK ein spezieller Algorithmus entwickelt [von Clarmann and Echle, 1998b] und damit eine Auswertefensterdatenbank generiert [Echle et al., 2000] (siehe auch Kap. 3.2.5.1).
4. Eine geeignete Auswahl der Regularisierungsmethode, falls eine solche angewendet werden soll. Die jeweiligen Regularisierungsparameter sind so zu wählen, daß sie Instabilitäten bei der Lösung eventuell schlecht gestellter Inversionsprobleme verhindern, aber die Zwangsbedingung nicht überbewerten. Für den MIPAS Datenprozessor verwenden wir die Tikhonov-Regularisierung für Größen, zu denen keine unabhängigen Messungen vorliegen (z.B. die meisten Mischungsverhältnisse von Spurengasen). Für Größen, zu denen unabhängige Messungen vorhanden sind (z.B. die Elevationswinkel der Messung) wird stochastische Regularisierung verwendet [Steck and von Clarmann, 1997, Steck and von Clarmann, 1999a, Steck and von Clarmann, 1999b, Steck, 2000, Steck and von Clarmann, 2000a, Steck and von Clarmann, 2000b, Steck and von Clarmann, 2001].
5. Die Wahl eines geeigneten mathematischen Werkzeuges für die Inversion. Hierfür hat sich die Choleski-Zerlegung (siehe z.B. [Press et al., 1996]) als besonders effektiv herausgestellt.

### 3.2.3 Architektur

Der MIPAS-Datenprozessor ist als grafisches Mehr-Benutzer-System konzipiert und besteht aus [von Clarmann et al., 2000a, von Clarmann et al., 2000c]:

- dem Prozessor-Kern, aufgebaut aus dem Vorwärtsmodell "KOPRA" und dem Inversionsalgorithmus "INVERS", beide unter dem Kontrollprogramm "RCP", das die Iteration der Profile an einem Messpunkt des Orbits zur Konvergenz führt. Das Vorwärtsmodell bezieht seine Liniendaten aus den angegliederten Datenbanken "HITRAN" und anderen Quellen und enthält physikalische Modelle zur Berechnung der Vibrationstemperaturen, genereller Non-LTE Effekte sowie Brechungs- und Streukoeffizienten. Der Prozessor-Kern liest seine Eingabedaten aus einem temporären Arbeitsverzeichnis und legt die Ergebnisse dort wieder ab;

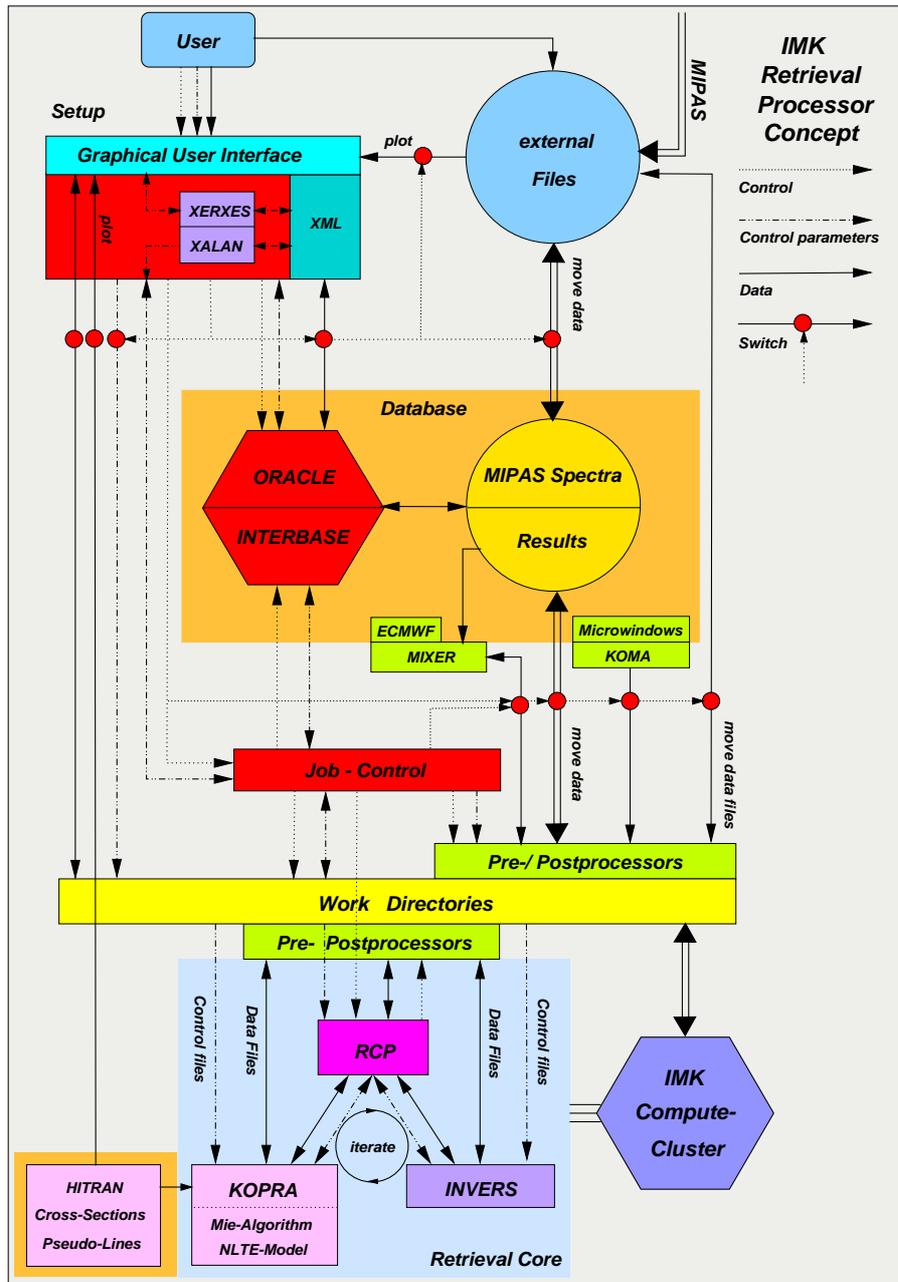


Abbildung 2: Schemazeichnung des MIPAS-level-2-Datenprozessors am IMK

- dem temporären Arbeitsverzeichnis, das alle veränderlichen Eingabedaten sowohl für den Prozessorkern als auch für einige Prä- und Postprozessoren enthält und die Resultate zwischenspeichert;
- einer Reihe von Prä- und Postprozessoren, die notwendige Formatkonvertierungen, Auswahlen, Qualitätskontrollen und die Belegung des Arbeitsverzeichnisses mit den notwendigen Eingabedateien für den Retrievalkern sowie das Abspeichern der Ergebnisse übernehmen;
- der Ablaufsteuerung "JOB-CONTROL", die die automatische Steuerung der

Verarbeitung über die ausgewählten Messpunkte zur Aufgabe hat sowie alle Prä- und Postprozessoren mit Eingabedateien im Arbeitsverzeichnis versorgt und in der richtigen Reihenfolge aufruft;

- der Profildatenbank "ECMWF" und angeschlossenen Profil-Mischer "MIXER", der einen klimatologischen Profildatensatz für Anfangswerte und a priori - Profile nach einer vom Benutzer vorgegebenen hierarchischen Tabelle automatisch erzeugt (siehe Kap. 3.3.2);
- der Auswertefenster-Datenbank und angeschlossenen Auswahlprogramm "KOMA", das für jedes Auswerte-Szenario und jeden Messpunkt eine angepasste Auswertefenster-Auswahl generiert;
- den zentralen Datenbanken "ORACLE" und "INTERBASE", die die Messspektren und die Ergebnisse sowie alle Benutzerdateien verwalten und komfortable Suchfunktionen bereitstellen;
- der graphischen Benutzeroberfläche, einer Java-Applikation zum Aufsetzen der Prozessierung für einen kompletten Raum-Zeit Bereich der Messpunkte, die eine komplette Benutzerverwaltung beinhaltet und ihren Status in XML-Konfigurationsdateien ablegt;
- dem Oberflächen-Kontrollprogramm, das die Verbindung der Benutzeroberfläche zu den Datenbanken, der automatischen Ablaufsteuerung und den der Oberfläche zugrundeliegenden XML-Konfigurationsdateien übernimmt und die benötigten Steuerdateien für den Prozessorkern, der Ablaufsteuerung und den Prä- und Postprozessoren aus jenen Dateien mit Hilfe der Open-Source XML/XSLT-Parser "XERCES" und "XALAN" erzeugt;
- dem IMK Computer-Cluster, bestehend aus 8 4-Prozessor Compaq Alpha Servern, die zu einer virtuellen Maschine zusammengeschaltet sind, 2 Sun 4-Prozessor Servern und einem Sun 6-Prozessor Server, alles angeschlossen an ein 4 TByte SAN Festplattensystem zur Speicherung der Messspektren und der Ergebnisse, sowie eine MOD-Jukebox zur Langzeitarchivierung.

Abb. 2 zeigt eine Schemazeichnung des MIPAS-level-2-Datenprozessors am IMK mit den genannten Bausteinen.

### 3.2.4 Numerik

Die numerischen Aspekte eines Prozessors betreffen die Methode der Matrixinversion, die Iterationsschrittweitendämpfung, die Konvergenzabfrage sowie eine Umskalierung der Jacobi-Matrix.

- Da die zu invertierenden Matrizen quadratisch und positiv definit sind, wurde zur **Matrixinversion** die Choleski-Zerlegung (z.B. [Press et al., 1996]) gewählt. Die Retrievalgleichung wurde derart umgeformt, daß die Inversion der inneren Klammer vermieden wird, solange keine Fehlerrechnung nötig ist – also bei allen Iterationsschritten außer dem letzten.
- Um zu verhindern, daß das Inversionsverfahren innerhalb eines Iterationsschrittes den Gültigkeitsbereich der linearen Näherung verlässt, wurde das Levenberg-Marquardt-Verfahren zur **Iterationsschrittweitendämpfung** (Gleichung 7) implementiert.
- Das Schlüsselkriterium der **Konvergenzabfrage** in unserem Programm ist die Differenz des Parametervektors in zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten. Der Definition des Schwellwertes liegt die Idee zugrunde, daß der

Fehler, der durch den Abbruch der Iteration nach einer endlichen Zahl von Iterationsschritten bewirkt wird, mindestens eine Größenordnung kleiner sein muß, als der durch das Rauschen der Messung bewirkte Fehler. Die jeweiligen Schwellwerte werden demnach dynamisch gesetzt in Abhängigkeit von den abgeschätzten Fehlern. Es wird sichergestellt, daß die Iteration nur abgebrochen wird, wenn Linearität erreicht ist, also der aktuelle Schätzwert im Gültigkeitsbereich der linearen Näherung um den vorhergehenden Schätzwert liegt.

- Die absoluten Werte der Einträge in die Jacobi-Matrix variieren um viele Größenordnungen. Allein dadurch ergibt sich für die innere Klammer in der Inversionsgleichung eine intolerabel hohe Konditionszahl. Um diesbezügliche Probleme zu vermeiden, erfolgt eine Umskalierung der Jacobi-Matrix, die nach erfolgter Inversion invers auf die Ergebnisse angewendet wird. Dies entspricht einer Transformation der Jacobimatrix ins Dimensionslose, und einer Rücktransformation der Ergebnisse in den realen Zustandsparameterraum.

### 3.2.5 Definition von Retrieval-Szenarien

Verschiedene wissenschaftliche Fragestellungen verlangen verschiedene Meßgeometrien, verschiedene Targetparameter, verschiedene Parametereinstellungen des Vorwärtsmodells, und betreffen verschiedene Jahreszeiten und Klimazonen. Die Gesamtheit dieser Kenngrößen bezeichnen wir als Retrieval-Szenario. Für jedes Retrieval-Szenario sind typische strategische Entscheidungen für das Auswerteprozedere zu treffen, die im folgenden diskutiert werden:

**3.2.5.1 Auswertefenster** Es ist nicht praktikabel, jedes gemessene Spektrum in seiner Gesamtheit auszuwerten. Stattdessen konzentriert sich die Auswertung auf ausgewählte Auswertefenster (microwindows), die möglichst viel Information über das gesuchte Gas enthalten und zugleich möglichst unempfindlich auf Fehler unbekannter Parameter sind. Offensichtlich hängen optimale Auswertefenster von den Annahmen über relevante Fehlerquellen (und damit von der Messgeometrie und dem aktuellem atmosphärischem Zustand) ab. In der Anfangszeit wurden solche Auswertefenster eher intuitiv ausgewählt, indem man simulierte Spektren betrachtete, und Spektralbereiche definierte, die von einer gut separierten Linie des gesuchten Gases dominiert waren. [von Clarmann and Adrian, 1993, von Clarmann et al., 1993c, von Clarmann et al., 1993a, von Clarmann et al., 1995b, von Clarmann et al., 1996a, von Clarmann et al., 1997a, von Clarmann et al., 1997b, Echle et al., 1992, Echle et al., 1994, Echle et al., 1995, Echle, 1996, Echle et al., 1996a, Echle et al., 1997, Echle and von Clarmann, 1998, Echle et al., 1998b, Echle et al., 1998a, Oelhaf and Fischer, 1983, Oelhaf et al., 1994]. Listen solcher Auswertefenster wurden für die Auswertung von Spurengasen [Echle et al., 1995] sowie Druck und Temperatur [von Clarmann et al., 1995a] bereitgestellt und um quantitative Einträge ergänzt, die ihre Eignung charakterisierten, insbesondere in Hinblick auf Probleme seitens non-LTE [von Clarmann et al., 1998]. Später entwickelten wir ein quantitatives Verfahren, das automatisch Auswertefenster generiert, die die quadratische Summe aus dem durch Rauschen und dem durch unsichere Parameter bewirktem Fehler minimierte [von Clarmann and Echle, 1997a, von Clarmann and Echle, 1997b, von Clarmann and Echle, 1998a, von Clarmann and Echle, 1998b, von Clarmann et al., 2000b]. Der durch Rauschen bewirkte Fehler nimmt immer ab, wenn das Auswertefenster um eine weitere Spektralstützstelle vergrößert wird, da zusätzliche Information bereitgestellt wird. Der Parameterfehler nimmt dagegen oft zu, da diese Stützstellen zum Beispiel vermehrt

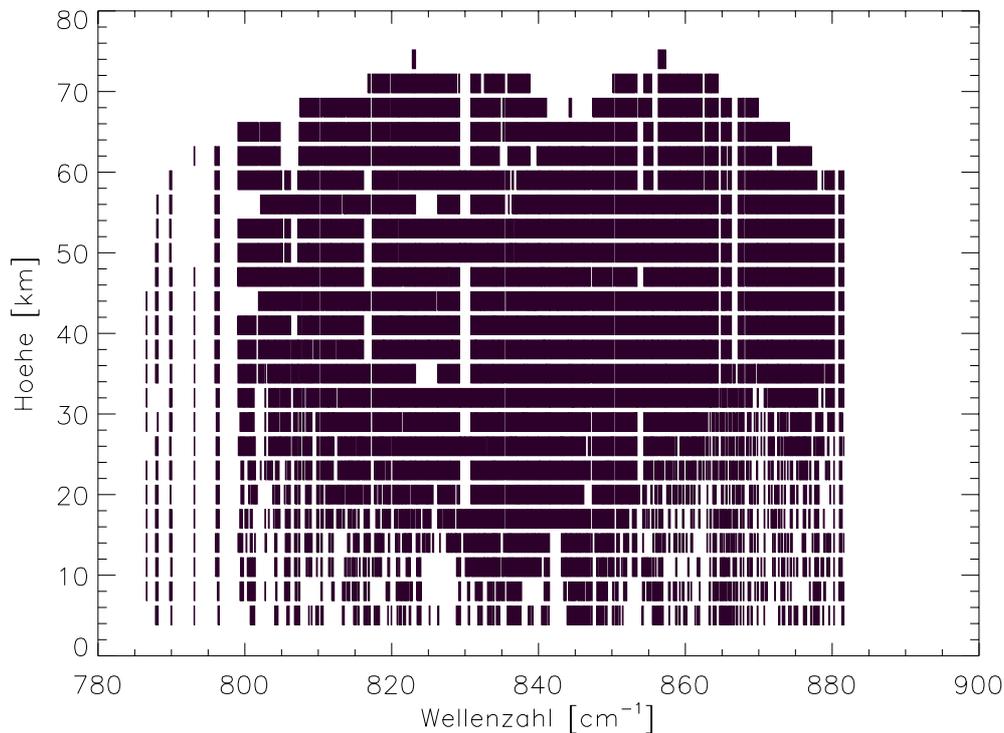


Abbildung 3: Microwindow-Datenbank für den Nachweis von ClO für eine Höhenverteilung, wie sie bei Chloraktivierung in der polaren Vortex vorkommt. Die schwarzen Felder markieren die für die Auswertung benutzbaren spektralen Gitterpunkte abhängig von der Höhe.

Signal enthalten, das von einem Gas verursacht wird, dessen Konzentration nicht bekannt ist. Dieses neue Verfahren wurde auf typische MIPAS-Szenarien angewandt, und es zeigte sich, daß es sehr vorteilhaft ist, für jede Tangentenhöhe einen anderen Satz Auswertefenster zu verwenden, und bezüglich der Größe jedes einzelnen Auswertefensters Höhenabhängigkeit zuzulassen [Echle et al., 1999, Echle et al., 2000]. Außerdem wurden sog. Masken höhenabhängig eingeführt, die so bestimmt werden, dass störende Interferenzlinien anderer Gase, die zu hohen systematischen Fehlern führen würden, ausgeblendet werden. Als letzter Schritt wurde ein Zusammenfassen von z.T. sehr kleinen Microwindows zu solchen mit einer vorgegebenen Höchstbreite, wiederum unter Verwendung der Masken, eingeführt, um die Anzahl der Microwindows zu begrenzen (Milz, unveröffentlicht, 2000). Inzwischen stehen am IMK Datenbanken für Auswertefenster aller relevanten Spurengase sowie zur simultanen Anpassung der Temperatur und der Tangentenhöhen zur Verfügung [Glatthor et al., 2001, Stiller et al., 2000, Stiller et al., 2001a]. Abb. 3 zeigt als Beispiel eine solche Microwindow-Datenbank für ClO für erhöhte Konzentrationen, wie sie in der polaren Vortex in Ozonabbau-Situationen anzutreffen sind.

**3.2.5.2 Sequentielle versus simultane Auswertung** Die Entscheidung zwischen sequentieller und simultaner Auswertung betrifft zwei Aspekte: 1. Die Frage, ob die Spektren einer Limb-Sequenz sequentiell oder simultan ausgewertet werden sollen; 2. die Frage, ob verschiedene Spurengase sequentiell oder simultan ausge-

wertet werden sollen, und welche Reihenfolge bei der sequentiellen bzw. welche Kombination bei der simultanen Auswertung am sinnvollsten ist.

1. Eine Sequenz aus Horizontsondierungsmessungen ist dadurch charakterisiert, daß das gemessene Signal nicht von atmosphärischen Zustandsgrößen unterhalb der Tangentenhöhe abhängt, sondern nur vom Zustand der Atmosphäre in Höhen, die vom Sehstrahl durchschritten werden. Dies ermöglicht eine sequentielle Auswertung von oben nach unten: Im ersten Schritt wird der atmosphärische Zustand  $x_n$  oberhalb der größten Tangentenhöhe  $z_{tan,n}$  aus der Messung zur größten Tangentenhöhe,  $\mathbf{y}(z_{tan,n})$  rekonstruiert. Wenn der atmosphärische Zustand  $x_{n-1}$  zwischen der größten und zweitgrößten Tangentenhöhe rekonstruiert wird, kann der Zustand oberhalb der größten Tangentenhöhe,  $x_n$ , der das Signal ebenfalls beeinflusst, als bekannt vorausgesetzt und konstant gehalten werden. Auf diese Art kann man sich bis zur tiefsten Tangentenhöhe vorarbeiten und ein komplettes Profil rekonstruieren. Diese Methode hat den einleuchtenden Namen *onion peeling* [Goldman and Saunders, 1979, Russell III and Drayson, 1972, McKee et al., 1969]. Der Parametervektor  $\mathbf{x}$  wird in jedem der Einzelschritte optimal klein gehalten; in vielen Fällen besteht er nur aus einem Element  $x(n)$ , das genau eine Zustandsgröße innerhalb einer Schicht beschreibt. Weiterhin zeigt diese Methode ein günstiges Konvergenzverhalten, da die partiellen Ableitungen  $\partial \mathbf{y}_{z_{tan,n}} / \partial x_n$  nicht durch grobe Fehler in den angenommenen Zuständen  $x_{n+1}$  bis  $x_{n_{max}}$  in höheren Schichten verfälscht werden, da diese Zustände aus vorhergehenden Iterationsschritten bereits bekannt sind. Rekonstruktionsfehler von  $x_n$  bewirken durch Kompensationseffekte Folgefehler entgegengesetzten Vorzeichens bezüglich  $x_{n-1}$ . Eine Methode, die diese Fehlerfortpflanzung zu vermeiden trachtet, wurde von *Carlotti* unter dem Namen *global fit* publiziert [Carlotti and Carli, 1994]. Bei dieser Methode wird die gesamte Horizontsondierungssequenz simultan ausgewertet. Der Parametervektor  $\mathbf{x}$  enthält das komplette diskrete Profil der atmosphärischen Zustandsgröße; der Meßvektor enthält die auszuwertenden Meßdaten aus allen Tangentenhöhen. Die *Jacobi*-Matrix  $\mathbf{K}$  enthält alle partiellen Ableitungen  $\partial y_{m,n} / \partial x_{i=1 \dots n_{max}}$ , während die Ableitungen  $\partial y_{m,n} / \partial x_{i=1 \dots n_{max}-1}$  aus geometrischen Gründen Null sind. Mit  $n_{max}$  wird hier die Gesamtzahl der von unten nach oben nummerierten Tangentenhöhen bezeichnet. Die *onion peeling* Methode verwendet im Gegensatz dazu nur die Ableitungen  $\partial y_{m,n} / \partial x_n$ ; die zusätzliche Evaluierung der Ableitungen  $\partial y_{m,n} / \partial x_i$  mit  $i > n$  begründet die Überlegenheit der *global fit* Methode, denn diese zusätzlichen Ableitungen enthalten unter Umständen Information, die geeignet ist, die *onion peeling* Fehlerfortpflanzung zu unterbinden. Die mögliche Zahl der Freiheitsgrade wird nicht ausgenützt, und die dadurch gewonnene Redundanz an Information mindert den durch Rauschen verursachten Rekonstruktionsfehler  $\mathbf{S}_{x,Rauschen}$ .

Wenn jedoch nur eine Spektrallinie ausgewertet wird, deren Druckverbreiterung nicht spektral aufgelöst werden kann, dann zeigt sich diese Linie in Spektren verschiedener Tangentenhöhen nahezu in derselben Form, nämlich der charakteristischen Linienform des Meßinstruments. Infolgedessen sind auch die Spalten der *Jacobi*-Matrix, d.h. die Ableitungsspektren zu den verschiedenen Höhen in oder oberhalb der Tangentenhöhe, linear abhängig voneinander. Durch das Hinzufügen linear abhängiger Gleichungen wird jedoch keine zusätzliche Information in Gleichung 6 gebracht, und *global fit* bietet gegenüber *onion peeling* keinen Vorteil. Der zusätzliche Aufwand für das Evaluieren der zusätzlichen Ableitungen  $\partial y_{m,n} / \partial x_i$  mit  $i > n$  ist dann nicht unbedingt gerechtfertigt. Dieser Zusammenhang erklärt, warum in [von Clarmann, 1990] bei Testrechnungen mit *onion peeling* und *global fit* stets

die gleichen Lösungsprofile gefunden wurden.

Außerdem sind bei frühen Iterationsschritten die partiellen Ableitungen  $\partial \mathbf{y}_{z_{tan,n}} / \partial x_n$  für tiefe Schichten durch falsche Annahmen der Zustandsparameter in größeren Höhen verfälscht, was schlechtere Konvergenz begründet. Zusätzlich hat das *global-fit*-Verfahren die Eigenschaft, daß es für mögliche systematische Fehler der Parameter in tieferen Höhen eine Fehlerfortpflanzung nach oben bewirkt, was bei *onion peeling* ausgeschlossen ist.

Obwohl bei der Anwendung auf MIPAS-Envisat nicht mit einer Verbesserung der Genauigkeit durch die Verwendung der Global-Fit-Methode gerechnet werden kann, haben wir uns für diese Methode entschieden, und zwar aus rechentechnischen Gründen:

- Das Vorwärtsprogramm KOPRA berechnet die Jacobi-Matrix quasi-analytisch; der ungeheure Aufwand, den die Global Fit Methode implizierte, als die partiellen Ableitungen noch über Differenzenquotienten aus einzelnen Vorwärtsrechnungen evaluiert werden mussten, ist damit erheblich reduziert.
  - Viele Optimierungen im Vorwärtsprogramm KOPRA kommen nur zum Tragen, wenn Spektren und Ableitungen für eine komplette Horizontsondierungssequenz simultan berechnet werden.
  - Für die Fehlerrechnung wird ohnehin die komplette Jacobi-Matrix benötigt.
  - Da am IMK nicht die Originalmethode nach Carlotti verwendet wird, sondern regularisiert wird, werden die Konvergenzprobleme durch Fehler in höheren Schichten massiv reduziert.
2. Die Entscheidung, ob Spurengase sequentiell oder simultan ausgewertet werden, muss im Einzelfall für jedes Spurengas, und unter Umständen auch abhängig von den atmosphärischen Bedingungen, getroffen werden. So zeigte es sich z.B., dass die simultane Ableitung von Temperatur und Wasserdampf in der tropischen Atmosphäre von Vorteil ist. Bei der Definition der Retrieval-Szenarien wurde für jedes Spurengas überprüft, ob ein simultanes Mit-Anpassen der Spurengase, die die höchsten systematischen Fehler erzeugen, von Vorteil ist. Wo dies der Fall war, wurden entsprechende simultane Retrieval-Szenarien aufgesetzt. Die Reihenfolge der verbleibenden sequentiell anzupassenden Gase wurde noch nicht endgültig festgelegt; dies soll während der commissioning phase auf Grundlage der wirklichen Datenqualität von MIPAS geschehen.

### 3.2.6 Verbessertes Druck-/Temperatur-/Sichtlinien-Retrieval

Ein typisches Problem bei der Horizontsondierung ist die Unkenntnis des Elevationswinkels  $\alpha$  beziehungsweise der zugehörigen Tangentenhöhe. Da alle weiteren *level-2*-Ergebnisse von richtigen Annahmen über die Elevationswinkel der Beobachtung abhängen, kommt dieser Rekonstruktionsaufgabe zentrale Bedeutung zu. Erschwerend kommt hinzu, daß in der Regel das Temperaturprofil simultan rekonstruiert werden muß, um Folgefehler der Temperatur auf die Elevationswinkel zu vermeiden. Für Absorptionsexperimente wird diese Problematik in der Literatur zur Rekonstruktion der Elevationswinkel temperaturinsensitive Spektrallinien verwendet, (siehe z.B. *Rinsland et al.* [Rinsland et al., 1992] und darin enthaltene Referenzen), oder die Rekonstruktion der Elevationswinkel und der Temperatur erfolgt simultan mit Hilfe der sogenannten Rotationsanalyse, die Spektrallinien unterschiedlicher Temperaturabhängigkeit verwendet, um eine eindeutige Lösung des

Rekonstruktionsproblems zu erreichen [Stiller et al., 1995a]. Dabei wird meist auf Linien des Gases  $\text{CO}_2$  zurückgegriffen, da dessen Mischungsverhältnis gut bekannt und in weiten Bereichen der Atmosphäre nahezu höhenkonstant ist. Das Vertikalprofil von  $\text{N}_2$  ist zwar noch weniger variabel, aber da dieses Gas kein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzt, sind seine Übergänge sehr schwach.

Für das entsprechende Rekonstruktionsproblem im Falle von Emissionssmessungen liegt deutlich weniger verwertbare Literatur vor. Es muß zwischen zwei Fällen unterschieden werden: Bei den meisten Emissionsexperimenten ist der relative Unterschied zweier benachbarter Elevationswinkel eine konstante Größe und nur die absolute Elevation der Horizontsondierungssequenz ist eine Unbekannte (z.B. beim *Tropospheric Emission Sounder* (TES)) [Beer and Glavich, 1989]. Für diese Klasse von Rekonstruktionsproblemen ist die sogenannte Zweifarbenmethode [Gille and House, 1971] tauglich, die Messungen in Spektralkanälen unterschiedlicher Opazität. Bei anderen Experimenten sind auch die Differenzen zwischen je zwei benachbarten Elevationswinkeln mit starken Unsicherheiten behaftet. Da das gemessene spektrale Signal  $\mathbf{y}$  sehr stark vom Elevationswinkel  $\alpha$  abhängt, ist es prinzipiell möglich,  $\alpha$  direkt aus den Spektren zu bestimmen. Bei Geräten, die die Druckverbreiterung auflösen und so eine Rekonstruktion der Drücke aus den Linienbreiten erlauben, ist dieses Rekonstruktionsproblem relativ einfach, da die Tangentenhöhenzuordnung über die hydrostatische Approximation

$$\frac{R_{Luft}T}{g(z)} \ln\left(\frac{p}{p_0}\right) = z_0 - z \quad (34)$$

erreicht werden kann, wobei  $g$  die Schwerebeschleunigung ist,  $R_{Luft}$  die Gaskonstante für Luft, und  $(z_0, p_0)$  Druck und Höhe eines bekannten Referenzpunktes. Von Horizontsondierungs-Infrarotspektrometern mit derzeit realistischem spektralem Auflösungsvermögen kann die Druckverbreiterung nicht hinreichend gut gesehen werden, so daß die ganze Information über  $\alpha$  aus der Intensität der Spektrallinien gewonnen werden muß. Die Intensitäten hängen ab von der Temperatur und vom Partialsäulengehalt des Gases. Der Partialsäulengehalt  $m_g$  eines Gases  $g$  längs des Lichtwegs zwischen zwei durch Tangentenhöhen definierte Schichtgrenzen hängt ab vom Druck  $p$ , vom Volumemischungsverhältnis  $c_v$  und von der Länge  $(l_2 - l_1)$  des Lichtwegs in der betrachteten Schicht:

$$m_g = \int_{l_1}^{l_2} c_v(l) \frac{N_{Avogadro}}{R} \frac{p(l)}{T(l)} dl, \quad (35)$$

wobei  $N_{Avogadro}$  die Avogadrozahl und  $R$  die universelle Gaskonstante ist. Für als homogen angenommenen Atmosphärenschichten ergibt sich unter Verwendung gemittelter Zustandsgrößen  $\bar{p}$ ,  $\bar{T}$  und  $\bar{c}_v$

$$m_g = \bar{c}_v \frac{N_{Avogadro}}{R} \frac{\bar{p}}{\bar{T}} (l_2 - l_1), \quad (36)$$

Die Weglänge  $(l_2 - l_1)$  kann durch geometrische, und der Druck  $p$  durch hydrostatische Operationen auf den Rekonstruktionsparameter  $\alpha$  zurückgeführt werden. Es bleiben pro Tangentenhöhe  $n$  drei unabhängige Parameter:  $T_n$ ,  $c_{v_n}$  und  $\alpha_n$ . Wenn nur Linien des Gases  $\text{CO}_2$  verwendet werden, reduziert sich die Zahl der unbekannt Parameter auf zwei, denn das Mischungsverhältnis von  $\text{CO}_2$  ist gut bekannt und weitgehend höhenkonstant. Die verbleibenden anzupassenden Parameter  $T$  und  $\alpha$  sind untereinander stark korreliert, denn sowohl die Temperatur wie auch die Teilchenzahl beeinflussen die Intensität einer Spektrallinie. Die Arbeit von Abbas et al. [Abbas et al., 1994] liefert einen allgemeinen Anhaltspunkt über ein angemessenes Verfahren zur Aufstellung eines lösbaren Inversionsproblems: Es wird dort vorgeschlagen, verschiedene  $\text{CO}_2$ -Linien unterschiedlicher Temperaturabhängigkeit

zu verwenden, um gleichzeitig Information über die Elevationswinkel und die Temperatur aus den Spektren zu gewinnen.

Im Folgenden wird über unsere Aktivitäten berichtet, die zur Entwicklung eines Retrievalschemas für Temperatur, Druck und Beobachtungswinkel beigetragen haben.

**3.2.6.1 Vorstudien** Bevor die Entwicklung eines Auswerteverfahrens für Temperatur, Druck und Sichtlinie für MIPAS-Envisat begonnen wurde, wurden folgende Vorarbeiten geleistet:

- Es wurden ausführliche Sensitivitätsstudien zur Fehlerfortpflanzung der Temperatur und Pointing Information auf die abgeleiteten Mischungsverhältnisse durchgeführt [Linden, 1991, von Clarmann et al., 1994]
- Es wurden CO<sub>2</sub>-Linien gesucht, die in ihrer Kombination einen besonders hohen Informationsgehalt über sowohl Temperatur als auch Pointing versprechen [von Clarmann et al., 1995a].
- Es wurde versucht, aus MIPAS-B Spektren Pointing-Information abzuleiten. Dabei haben wir viel über die Sensitivität der Auswertung auf die Pointing-Information gelernt, sowie über die Problematik, die Pointing-Information simultan mit der Temperatur aus realen Messungen eindeutig abzuleiten [von Clarmann et al., 1993b, von Clarmann et al., 1993c, Schmidt, 1993, Zorn, 1994].
- Im Rahmen eines Forschungsaufenthaltes am JPL wurde ein Algorithmus zur Rotationsanalyse entwickelt und auf Okkultations-Spektren des ATMOS (Atmospheric Trace Molecule Experiment) Experimentes angewendet [Stiller, 1995, Stiller et al., 1995a]. Viele Auswertearbeiten von ATMOS basierten auf der Pointing- und Temperaturinformation, die mit dieser Methode hergeleitet wurde [Gunson et al., 1996, Abrams et al., 1996].

**3.2.6.2 Untere und mittlere Atmosphäre** Die untere und mittlere Atmosphäre sind dadurch gekennzeichnet, daß:

- die hydrostatische Approximation mit guter Genauigkeit gilt;
- die meisten Emissionsbanden im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht sind;
- das Mischungsverhältnis von CO<sub>2</sub> relativ gut bekannt und weitgehend höhenunabhängig ist.

Für MIPAS-Envisat wurden folgende Überlegungen angestellt und entsprechende Verfahren entwickelt:

- **Allgemeines Verfahren**

Entsprechend unserer allgemeinen Strategie werden die Profile von Druck und Temperatur auf einem tangentialhöhenunabhängigen Höhengitter mit 1 km Gitterpunktstand dargestellt. Für die Rekonstruktion des Temperaturprofils wird zur Regularisierung nur ein Glättungsoperator, jedoch keine Anbindung der Ergebnisse an die *a priori* Temperaturen im Sinne von *optimal estimation* verwendet. Im Gegensatz dazu werden die Elevationswinkel gemäß *optimal estimation* bestimmt, da hierüber unabhängige Messungen verfügbar sind: Als *a priori* Information wird die *ESA engineering information* verwendet, die aus Sternkammermessungen stammt. Der Druck wird - mit optionalen nicht-hydrostatischen Korrekturen - ausgehend von einem Druck-Höhe-Temperatur-Wertetripel aus externer Quelle hydrostatisch für das aktuelle

Temperaturprofil nachgeführt, ist also keine unabhängig zu rekonstruierende Größe. Weitere anzupassende Größen sind Horizontalgradienten der Temperatur, Kontinuumsstrahlung, und eine Nulllinienkalibrierungskorrektur der Strahldichtespektren.

Um ein ausreichend determiniertes Inversionsproblem zu definieren, müssen auch mindestens zwei Signaturen unterschiedlicher Temperaturabhängigkeit oder unterschiedlicher Opazität simultan ausgewertet werden [Abbas et al., 1994, Kumer and Mergenthaler, 1991, Stiller et al., 1995a, von Clarmann, 1995]. Alle unsere Arbeiten zu dieser Problematik [von Clarmann et al., 1994, von Clarmann et al., 1995a, von Clarmann, 1995, von Clarmann et al., 1996a, von Clarmann et al., 1997a, von Clarmann et al., 1998, von Clarmann et al., 1999a, von Clarmann and Friedle, 1999, von Clarmann et al., 1999b, von Clarmann et al., 2000a, von Clarmann et al., 2000c, López-Puertas et al., 1999a, López-Puertas et al., 1999b, López-Puertas et al., 1996, López-Puertas et al., 1998] basieren auf dieser Idee und tragen der Tatsache Rechnung, daß die Auswahl der zur Auswertung herangezogenen Auswertefenster von entscheidender Bedeutung ist. Wir selektieren die optimalen Auswertefenster, indem wir den kombinierten Fehler

$$\Delta_{T,\alpha} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_T}{w_T}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_\alpha}{w_\alpha}\right)^2} \quad (37)$$

minimieren, wobei  $\sigma_T$  und  $\sigma_\alpha$  die Unsicherheiten der Temperatur beziehungsweise des Elevationswinkels in Abhängigkeit der Auswahl der Auswertefenster sind, und  $w_T$  und  $w_\alpha$  die Genauigkeitsanforderungen, mit denen die aktuellen Unsicherheiten invers gewichtet werden. Dieser Verfahren berücksichtigt implizit die Notwendigkeit spektraler Signaturen unterschiedlicher Temperaturabhängigkeit oder unterschiedlicher Opazität.

Die Elevation des Sehstrahls wird durch eine auf der ENVISAT-Plattform befindliche Sternkamera gemessen. Diese *a priori* Information über die Sichtlinie ist jedoch stark fehlerbehaftet: Um diese *a priori*-Information dem Rekonstruktionsschema zugänglich zu machen, wird die Kovarianzmatrix des Elevationsfehlers benötigt. In einer ersten Version des Prozessorkonzeptes wurden die Anpassungsparameter entsprechend den Elevations-Spezifikationen gewählt: Eine Größe beschreibt die absolute Elevation der gesamten Horizontsondierungssequenz, und weitere Größen beschreiben die relativen Vertikalabstände benachbarter Tangentenhöhen zueinander. In diesem Fall ist die Elevations-Kovarianzmatrix diagonal, entsprechend den angegebenen Unsicherheiten; allerdings ist eine entsprechende Koordiantentransformation zwischen den Rekonstruktionsparametern und den Vorwärtsmodellparametern nötig, denn letztere müssen die absoluten Elevationen jedes einzelnen Sehstrahls sein. In späteren Versionen des Prozessorkonzeptes wird diese Koordiantentransformation während der Prozessierung vermieden, indem sie direkt auf die Kovarianzmatrix angewendet wird: Die von der ESA angegebenen Unsicherheiten werden in Unsicherheiten jedes einzelnen Sehstrahls umgerechnet. Die Rekonstruktionsparameter sind dann direkt die in der Vorwärtsrechnung benötigten absoluten Elevationen.

Aus ESA-Engineering Information sind die folgenden Unsicherheiten für das Pointing gegeben (die auf Tangentenhöhen bezogenen Größen sind noch in Elevationswinkel umzurechnen):

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha_{abs}}^2 &\hat{=} (900 \text{ m})^2 \\ \sigma_{\alpha_{rel}}^2 &\hat{=} (150 \text{ m})^2\end{aligned}$$

Hierbei sind  $\sigma_{\alpha_{abs}}$  die absolute Unsicherheit der Elevation, und  $\sigma_{\alpha_{rel}}$  die Unsicherheit der relativen Elevation zwischen zwei benachbarten Tangentenhöhen.<sup>1</sup> Die folgende, von *Ressel* (Privatmitteilung, März 1999) formulierte Koordinatentransformation überträgt die von der ESA gegebenen Spezifikationen in den von uns gewählten Parameterraum:

Mit

$$\alpha(n_{max}) = \alpha_{a \text{ priori}}(n_{max}) + \Delta\alpha_{abs}, \quad (38)$$

wobei  $\alpha_{abs}$  der absolute Tangentenhöhenfehler der Horizontsondierungssequenz als Ganzes ist, und

$$\alpha_{rel}(n) = \alpha(n+1) - \alpha(n) \quad (39)$$

für  $1 \leq n \leq n_{max}-1$  ergibt sich folgende Transformation:

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix} \alpha_{rel}(1) \\ \alpha_{rel}(2) \\ \vdots \\ \alpha_{rel}(n_{max}-1) \\ \Delta\alpha_{abs} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ & & \ddots & \\ & & & -1 & 1 \\ 0 & & & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(1) \\ \alpha(2) \\ \vdots \\ \alpha(n_{max}-1) \\ \alpha(n_{max}) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_{a \text{ priori}}(n_{max}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (40)$$

oder in anderer Nomenklatur

$$\mathbf{z}_{rel} = \mathbf{U}\mathbf{z}_{\alpha} - \mathbf{z}_{a \text{ priori}} \quad (41)$$

Daraus folgt:

$$\mathbf{z}_{\alpha} = \mathbf{U}^{-1}(\mathbf{z}_{rel} + \mathbf{z}_{a \text{ priori}}) \quad (42)$$

Daraus ergibt sich für die Kovarianzmatrix der Tangentenhöhen:

$$\mathbf{S}_{\alpha} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{S}_{\alpha_{ESA}}(\mathbf{U}^{-1})^T \quad (43)$$

mit

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_{\alpha_{ESA}}(i \neq j) &= 0; \\ \mathbf{S}_{\alpha_{ESA}}(j, j) &= \sigma_{\alpha_{rel}}^2 \hat{=} (150 \text{ m})^2; \text{ für } j < j_{max} \\ \mathbf{S}_{\alpha_{ESA}}(j_{max}, j_{max}) &= \sigma_{\alpha_{abs}}^2 \hat{=} (900 \text{ m})^2.\end{aligned}$$

Abbildung 4 zeigt das Ergebnis eines Testretrievals zur simultanen Ableitung der Temperatur und der Sichtlinie nach den hier beschriebenen Verfahren. Es

<sup>1</sup>Da die ESA-Spezifikation (absolut 1.8 km, *top-to-bottom* 0.9 km, benachbarte Spektren 0.3 km, 95%-*confidence limit*) nicht statistisch sind, lassen sich Inkonsistenzen nicht ganz vermeiden

wurden Messungen nach dem Standardmessszenario zwischen 6 und 68 km simuliert und mit den entsprechenden NESR Werten verrauscht. Das Temperaturretrieval wurde nach *Tikhonov* regularisiert, das Sichtlinienretrieval jedoch nicht-regularisiert (entgegen den eben beschriebenen Ausführungen) durchgeführt. Der Temperaturfehler beträgt im Mittel 0.68 K, der Sichtlinienfehler ist maximal 150 m. Es wird erwartet, dass die *a priori* Regularisierung des Sichtlinienretrievals zu noch besseren Ergebnissen führen wird.

- **Rekonstruktion des Drucks**

Der Druck soll nicht als unabhängige zu rekonstruierende Größe gehandhabt werden, sondern hydrostatisch, ausgehend von einem (Höhe, Druck, Temperatur)-Wertetripel aus externer Quelle für die aktuell rekonstruierten Temperaturen berechnet werden. Lediglich eine nichthydrostatische Korrektur soll optional, mit starker hydrostatischer Nebenbedingung mittels der *optimal estimation* Methode rekonstruiert werden.

Durch das hydrostatische Nachführen des Druckprofils zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationen wirkt sich die Temperatur auch mittelbar auf das Spektrum aus. Dieser Beitrag ist in der partiellen Ableitung  $\partial Y/\partial T$  nicht enthalten, sondern muß, sollte er berücksichtigt werden, gesondert berechnet werden (Privatmitteilung *Schreier* und *Schimpf*, 1999):

$$\frac{dy}{dT} = \frac{\partial y}{\partial T} + \sum_j \frac{\partial y}{\partial p_j} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial T}. \quad (44)$$

Diese Nachdifferentiation ist jedoch rechenaufwendig, so daß es ökonomischer erscheint, darauf zu verzichten, und stattdessen wenige zusätzliche Iterationsschritte in Kauf zu nehmen, die sich durch schlechtere Konvergenz aufgrund ungenauerer Temperaturableitungen ergeben.

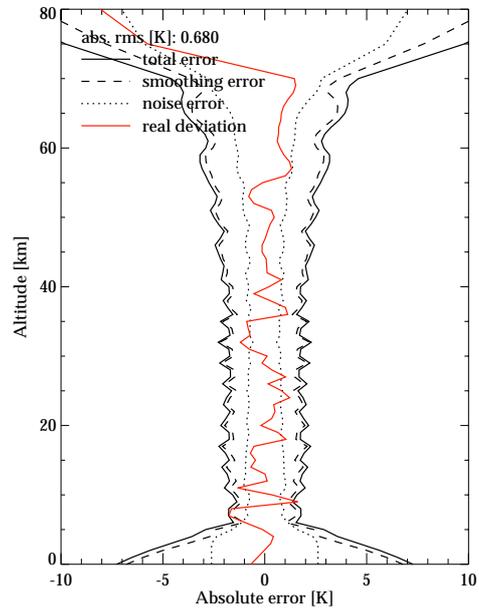
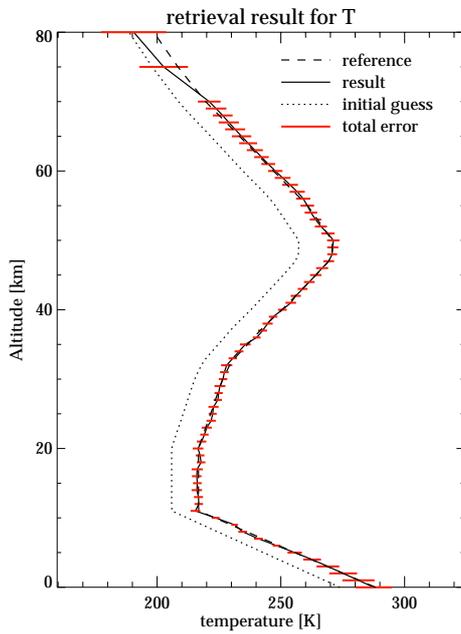
Dieses Auswerteschema, bei dem der Druck nur mittelbar angepaßt wird, trägt der Tatsache Rechnung, daß die Druckinformation im Spektrum sehr eingeschränkt ist. Neben der Erhöhung der Dichte und damit der Teilchenzahl längs des optischen Weges – der deutlichsten Auswirkung des Drucks, auf deren Analyse unser Auswerteschema maßgeschneidert ist – zeigen MIPAS-Spektren noch Druckverbreiterungs- und Line-mixing-Effekte. In der Theorie lassen beide Effekte eine Bestimmung des Drucks zu, die unabhängig von der Teilchenzahl ist. Leider ist jedoch auf Grund der begrenzten spektralen Auflösung von MIPAS die Druckverbreiterung nur bei Spektren der tiefsten Tangentenhöhen zu sehen. Beim Line-mixing erfolgt ein Intensitätstransfer zwischen eng benachbarten Linien einer Bande; daher ist hier die spektrale Auflösung des Messgeräts weniger kritisch. Beide Effekte werden in unserer Auswertestrategie implizit genutzt, da sie von KOPRA beschrieben werden und in der **K**-Matrix als  $\frac{\partial y}{\partial \alpha}$  enthalten sind. Eine explizite Studie über die Ausnutzung des line-mixings in CO<sub>2</sub>-Q-Zweige zur Ableitung des Drucks konnte bisher noch nicht in Angriff genommen werden (siehe auch Kap. 3.1.2.1, Punkt 4).

- **Simultan anzupassende Größen**

Simultan zur Rekonstruktion des Temperaturprofils und der Korrektur der Elevationswinkel werden auch die Extinktionskoeffizienten einer empirisch zu bestimmenden Kontinuumsstrahlung dargestellt. Aufgabe dieses empirischen Kontinuums ist, alle Kontinuumsbeiträge verschiedener Ursachen, die in der Regel nur ungenau kausal zu modellieren sind, zu kompensieren, um zu verhindern, daß falsch angenommene oder modellierte Kontinua Folgefehler auf die rekonstruierten Spurengasprofile bewirken. Da alle bekannten Kontinua nur

Degrees of freedom: 20.4

considered altitude range for mean values: 10.0 - 61.0 km

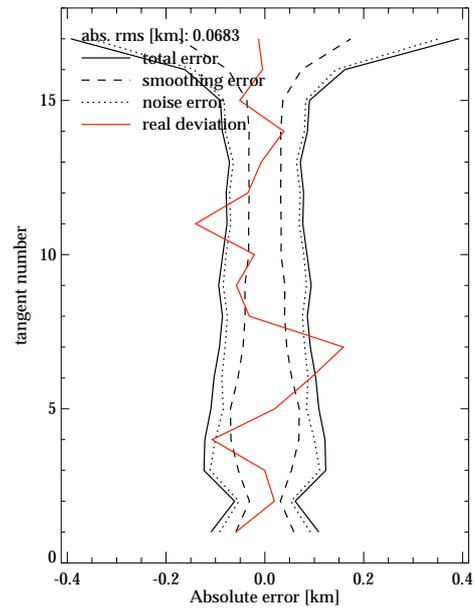
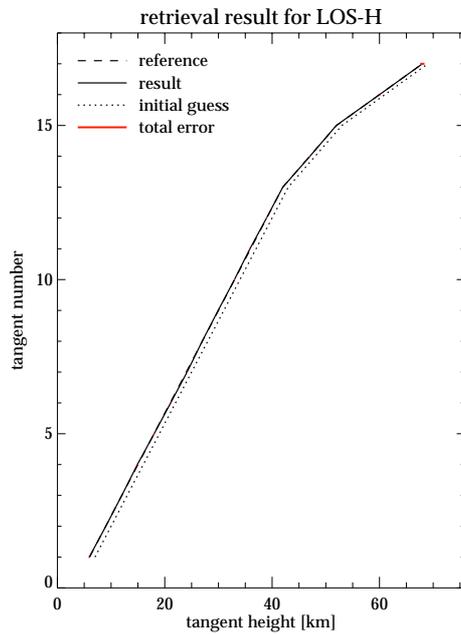


/home/glatthor/Processor/rcp/RCP\_Test/output/TLOS\_30mw\_18

Thu Jul 26 11:06:01 MET DST 2001

Degrees of freedom: 17.0

mean total error [km]: 0.136, mean noise error [km]: 0.120, mean smoothing error [km]: 0.0630



/home/glatthor/Processor/rcp/RCP\_Test/output/TLOS\_30mw\_18/diagnostics.ps

Thu Jul 26 11:06:03 MET DST 2001

Abbildung 4: Ergebnis eines Testretrievals zur simultanen Ableitung der Temperatur und der Sichtlinie

unterhalb von 30 km Höhe relevant sind, wird der Wert des empirischen Kon-

tinuums oberhalb auf Null gesetzt. Darüber wird stattdessen eine höhenunabhängige Nulllinienkalibrationskorrektur rekonstruiert. Sowohl die Nulllinienkalibrationskorrektur als auch das empirische Kontinuum sind, im Gegensatz zu den atmosphärischen Zustandsgrößen, auswertefensterabhängige Größen. Dies bedeutet, daß um so mehr Größen zu rekonstruieren sind, je mehr Auswertefenster verwendet werden.

Weitere simultan zu rekonstruierende Parameter sind Horizontalgradienten der Spurengase. Für deren Darstellung ist ein gröberes Höhengitter vorgesehen, dessen Gitterweite noch optimiert werden muß. Über die Horizontalgradienten wird aus dem *online*-Datenprodukt unabhängige Information vorliegen. Über zentrierte Differenzenquotienten können diese Gradienten einfach ermittelt werden. Da dabei keine Information aus dem gerade auszuwertenden Spektrum einfließt, kann diese Information als unabhängige Information aus einer externen Messung behandelt werden, und die Anwendung der *optimal estimation* Methode ist zulässig. Wenn die Messung selbst kaum Information über die Gradienten enthält, kann so stark regularisiert werden, daß die jeweiligen Werte beim Startwert festgehalten werden. Dann wird gegenüber dem *online*-Produkt immerhin eine Verbesserung des Ergebnisses durch Berücksichtigung der Horizontalgradienten in der Vorwärtsrechnung erreicht, selbst wenn diese nicht aus der aktuellen Messung rekonstruiert werden.

- **Microwindow-Auswahl und Retrievalstrategie**

Da in der Sequenz der Auswerteschritte das Druck-/Temperatur-/Line-of-Sight Retrieval als erster Schritt erfolgt, ist es besonders wichtig, besonders reine CO<sub>2</sub>-Signaturen zur Auswertung zu verwenden, da die Mischungsverhältnisse der interferierenden Gase noch nicht bekannt sind. Für die Routineauswertung wurden entsprechende spektrale Auswertefenster bestimmt, die den störenden Einfluß interferierender Gase so gering wie möglich halten [Echle et al., 2000]. Auch Unsicherheiten im CO<sub>2</sub>-Profil wurden dabei berücksichtigt. Im Bereich der tropischen Tropopause stellte es sich als vorteilhaft heraus, die Temperatur und den Wasserdampfgehalt simultan zu ermitteln, da beide Parameter hohe Kovarianzen zeigen [Milz et al., 1999a, Milz et al., 1999b, Milz et al., 1999c]. Außerdem wurde eine Methode entwickelt, die dyadisch quadrierte spektrale Sensitivität des Signals der Kovarianzmatrix der Messung zuzuschlagen, um die Wirkung unsicherer Parameter  $u$  besser zu berücksichtigen:

$$\mathbf{S}_y^* = \mathbf{S}_y + (\mathbf{f}(u + \Delta u) - \mathbf{f}(u))(\mathbf{f}(u + \Delta u) - \mathbf{f}(u))^T \quad (45)$$

Es wurde gezeigt, daß die Lösung der Retrievalgleichung 6 mit  $\mathbf{S}_y^*$  anstelle von  $\mathbf{S}_y$  äquivalent zur simultanen Anpassung der störenden Parameter ist, ohne jedoch die Zahl der zu invertierenden Parameter zu erhöhen [von Clarmann et al., 2001b].

- **Vorgehen bei gestörtem CO<sub>2</sub>-Profil**

Eine besondere Problematik entsteht, wenn das CO<sub>2</sub>-Mischungsverhältnisprofil aufgrund vertikaler Transportprozesse relativ stark gestört ist; diese Situation kann auftreten, wenn in der Stratosphäre "Blasen älterer Luft" anzutreffen sind (siehe z.B. [Hall and Plumb, 1994]), bei denen das CO<sub>2</sub>-Mischungsverhältnis **sowie das von anderen Tracern** die troposphärischen Verhältnisse einiger Jahre zuvor repräsentiert. Dies hat Auswirkungen, wenn in einem späteren Auswerteschritt das Mischungsverhältnis solcher Tracer (z.B. SF<sub>6</sub>) und damit das Alter der stratosphärischen Luft bestimmt werden soll. Zwar ist die klimatologische Variabilität von CO<sub>2</sub> im Fehlerbudget für die Druck- bzw. Sichtlinienbestimmung enthalten, jedoch handelt man

sich in diesem speziellen Fall einen Zirkelschluss ein: über den Fehler in der Sichtlinien- bzw. Druckbestimmung, der durch das fehlerhaft angenommene CO<sub>2</sub>-Profil eingebracht wird, wird das reduzierte Tracer-Mischungsverhältnis, aus dem man auf das Alter der Luft schliessen könnte, implizit wegkorrigiert. Einen Ausweg aus dieser Situation bietet das Druck- und Sichtlinien-Retrieval auf Basis von anthropogen unbeeinflussten, gut durchmischten Spurengasen wie N<sub>2</sub> oder O<sub>2</sub>. Diese haben jedoch den Nachteil, dass ihre Spektrallinien nur sehr schwach sind, da sie kein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzen und damit für Infrarotstrahlung weitgehend transparent sind.

Durch kollisionsbedingte Störungen der Symmetrie kann N<sub>2</sub> kurzzeitig ein elektrisches Dipolmoment erhalten. Die so erzeugten sehr breiten Spektrallinien überlagern sich zu einem mindestens 10 cm<sup>-1</sup> breiten Kontinuum im Bereich der 4.3 μm CO<sub>2</sub>-Bande. Auch O<sub>2</sub> verursacht ein kollisionsbedingtes Kontinuum, auf dessen Bedeutung für die atmosphärische Fernerkundung erstmals *Timofeev* und *Tonkov* [Timofeyev and Tonkov, 1978] hingewiesen haben. Da dieses bei etwa 1600 cm<sup>-1</sup> im Bereich der 6.3 μm-Wasserdampfbande liegt, ist es nicht einfach, dieses Kontinuum in Messungen vom Wasserdampfkontinuum zu unterscheiden [Fischer et al., 1988]. Daneben zeigen beide Moleküle relativ schwache sog. verbotene Quadrupol-Übergänge, die sich im Spektrum als Linien-Signaturen äussern. Es wurde eine Sensitivitätsstudie durchgeführt, inwieweit Signaturen von O<sub>2</sub> zum Druck- und Sichtlinien-Retrieval herangezogen werden können. Die linienförmigen Signaturen sitzen auf dem breiten O<sub>2</sub>-Kontinuum, das unter der 6.3 μm-Wasserdampfbande liegt und zu schwach ist, um vom Wasserdampf-Kontinuum separiert werden zu können. Die O<sub>2</sub>-Linien ragen, insbesondere für die Tangentenhöhen 14 bis 23 km, deutlich über das Mess-Rauschen hinaus und sollten detektierbar sein (siehe Abb. 5)

Allerdings ist zu beachten, dass die deutlichsten Signaturen bei 1570 cm<sup>-1</sup> in der Lücke zwischen den MIPAS-Kanälen B und C liegen, und eine solche Auswertung nur möglich ist, wenn das mittlere Infrarot, wie bereits in Aussicht gestellt (*M. Endemann*, MIPAS-SAG, 25./26. Juni 1998), lückenlos abgedeckt wird. Erfahrungen mit N<sub>2</sub>-Linien zur Bestimmung des Druckes und der Sichtlinie liegen mit Arbeiten zu ATMOS [Rinsland et al., 1992] bereits in der Literatur vor. Diese Ansätze können ohne weiteres für die MIPAS-Datenauswertung übernommen werden.

**3.2.6.3 Obere Atmosphäre** Die obere Atmosphäre ist dadurch gekennzeichnet, daß:

- die hydrostatische Approximation nur noch eingeschränkt gilt;
- viele Emissionsbanden im non-LTE sind;
- das Mischungsverhältnis von CO<sub>2</sub> von der Höhe abhängt und dadurch wesentlich weniger genau bekannt ist.

Um die dadurch implizierten Probleme zu lösen, wurden folgende Auswerte-Ansätze entwickelt:

- **Beschreibung des z-p-T Zusammenhangs in der oberen Atmosphäre**  
Die hydrostatische Approximation, wie sie in der unteren Atmosphäre gilt, kann nicht mehr weiterverwendet werden. Als Folge davon ist die Zuordnung des Druckes (und damit der Teilchenzahl längs des Weges) aus den abgeleiteten Größen Sichtlinie und Temperatur nicht mehr einfach möglich. Fehler hierbei verfälschen jedoch nachfolgende Ableitungen von Volumenmischungsverhältnissen von Spurengasen. Folgende Prozesse sind ab ca. 80 km zu berücksichtigen:

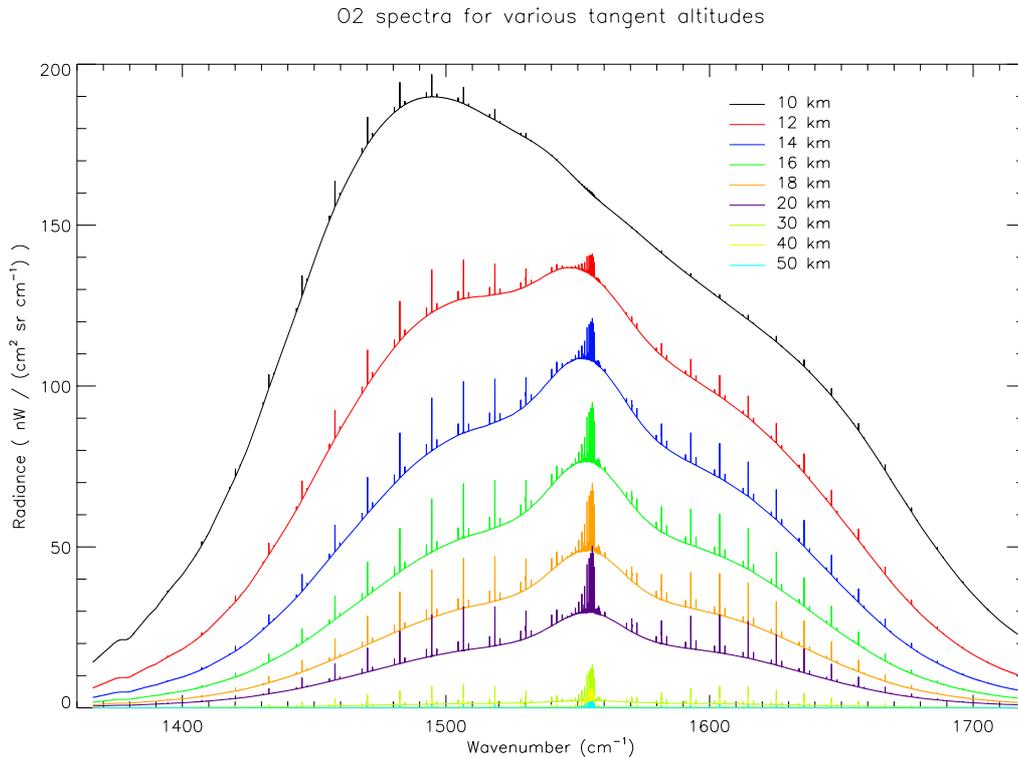


Abbildung 5: Spektren für O<sub>2</sub> für Tangentenhöhen zwischen 10 und 50 km

- Durch Entmischungsprozesse ist das Molekulargewicht der Atmosphäre nicht mehr höhenunabhängig. Die wirkliche Zusammensetzung der Atmosphäre (atomarer Sauerstoff, molekularer Sauerstoff, molekularer Stickstoff und weitere Stoffe) muß höhenabhängig zur Berechnung des Molekulargewichts der Luft herangezogen werden, um aus dem hydrostatischen Grundgesetz den z-p-T Zusammenhang zu berechnen. Dieser Schritt zur verbesserten Modellierung ist im Vorwärtsmodell KOPRA bereits verwirklicht.
- Allerdings zeigen Vergleiche mit der US76-Standard-Modellatmosphäre trotzdem noch signifikante Abweichungen in größeren Höhen. Diese sind zurückzuführen auf die Dissoziation von molekularem Sauerstoff in Höhen ab 85 km, und konkurrierenden Prozessen der Eddy- und molekularen Diffusion zwischen 85 und 110 km, die mit vertikalem Transport verbunden sind. Oberhalb von 120 km ist die Modellierung des z-p-T-Zusammenhangs wieder relativ einfach, wenn berücksichtigt wird, daß jede Komponente der Atmosphäre im hydrostatischen Gleichgewicht ist, und der Gesamtdruck und die Gesamtdichte aus den Einzelkomponenten berechnet wird. Eine Modellierung des z-p-T-Zusammenhangs für den Höhenbereich zwischen 85 und 120 km, der in Übereinstimmung mit der US76-Standard-Modellatmosphäre ist, ist im Rahmen dieses Forschungsvorhabens noch nicht gelungen.

- **Untersuchung der Sichtlinien-Information**

In der unteren Atmosphäre kann die Sichtlinien-Information zusammen mit

der Temperatur aus den Spektren selbst abgeleitet werden, weil davon ausgegangen werden kann, daß das Mischungsverhältnis von  $\text{CO}_2$  hinreichend genau genug bekannt ist, so daß die Strahldichten, die aus der Teilchendichte und -verteilung längs des Sehstrahls berechnet werden, nur von Druck und Temperatur abhängen. Von dieser Voraussetzung kann ab ca. 70 km Höhe nicht mehr ausgegangen werden; die Strahldichten in  $\text{CO}_2$ -Linien werden zunehmend durch Vibrations-NLTE-Prozesse bestimmt, und ab ca. 100 km ist das  $\text{CO}_2$ -Mischungsverhältnisprofil wegen Photodissoziation in  $\text{CO}$  nicht mehr genau genug bekannt. Daher wurden  $\text{N}_2$  und  $\text{O}_2$  auf ihre Eignung zum Retrieval der Sichtlinie untersucht.  $\text{O}_2$  dissoziiert allerdings auch ab ca. 85 km in atomaren Sauerstoff, so daß das  $\text{O}_2$ -Profil nicht genau bekannt ist, und bei  $\text{N}_2$  ist ebenfalls mit NLTE-Prozessen zu rechnen, so daß simultan zur Sichtlinie und der kinetischen Temperatur auch die Zustandsbesetzung der  $\text{N}_2$ -Zustände abgeleitet werden müsste. Außerdem sind die Signaturen beider Gase schon ab ca. 68 km Tangentenhöhe so schwach (siehe Abb. 5, daß nicht davon ausgegangen werden kann, eine genauere Information über die relative Lage der Sichtlinien zueinander, als durch die *a priori* Information gegeben, abgeleitet werden kann. Damit stehen als Information über die absolute Lage des Gesamt-Scans und seiner Unsicherheit nur die Information zur Verfügung, die in vorhergehenden Schritten aus Spektren tieferer Tangentenhöhen abgeleitet wurde. Die einzelnen Sichtlinien können um diese Information korrigiert werden. Die relative Lage der Sichtlinien zueinander kann nicht korrigiert werden; ihre Unsicherheit ist durch die *a priori* Information gegeben und muß in der Fehlerrechnung später abgeleiteter Größen (Temperatur, Spurengas-Profile, NLTE-Parameter) berücksichtigt werden.

- **Entwicklung eines Rotationsanalyse-Algorithmus zur Ableitung der kinetischen Temperatur, basierend auf  $\text{CO}_2$ -Banden, für Tangentenhöhen zwischen ca. 68 und 100 km**

Die Anwendung der Rotationsanalyse zur Ableitung der kinetischen Temperatur beruht auf der Annahme, dass sich die Übergänge einer Bande im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht bzgl. ihrer Rotationszustandsbesetzung befinden. Arbeiten von Gusev (Privatmitteilung, 1999) für die  $\nu_3$ -Bande weisen darauf hin, daß Effekte des Rotations-Non-LTEs im Horizontsondierungsspektrum bis in Tangentenhöhen unterhalb von 100 km (Tag- und Nacht-Spektren) bzw. unterhalb von 120 km (Tagspektren) keine Rolle spielen. Ob dies auch für andere Banden zutrifft, muss noch geprüft werden. Dennoch wurde unter Annahme des Rotations-LTEs folgendes Auswerte-Konzept entwickelt: Es wird angenommen, daß die Sichtlinie im Rahmen ihrer *a priori*-Fehler bekannt ist, bzw. die vertikale Lage des Gesamt-Scans aus Messungen tiefer in der Atmosphäre korrigiert werden kann. Damit reduziert sich das Problem auf die Ableitung der kinetischen Temperatur bei bekannter Tangentenhöhe und die nachgeschaltete Berechnung des zum  $z$ -T-Paar gehörenden Druckes. Die Temperatur kann aus dem Verhältnis der Strahldichten der Linien einer geeigneten Bande (z.B. im  $4.3 \mu\text{m}$ - oder  $15 \mu\text{m}$ -Bereich) abgeleitet werden (sog. Rotationsanalyse). Simultan zur Temperatur muß das Mischungsverhältnis von  $\text{CO}_2$  abgeleitet werden, um die Gesamtintensität der Bande an die Messung anzupassen. Dieses Ergebnis muß allerdings verworfen werden, da davon auszugehen ist, dass sich die entsprechenden Banden im Vibrations-Non-LTE befinden, und dies bei der Auswertung nicht berücksichtigt wird. Beide Effekte, das Mischungsverhältnis-Profil und Abweichungen im Vibrations-LTE, bewirken, solange Linearität in der Strahlungsübertragungsgleichung vorausgesetzt werden kann, eine skalierende Erhöhung der Strahldichten in allen Linien einer Bande, und sind daher im Retrieval stark kor-

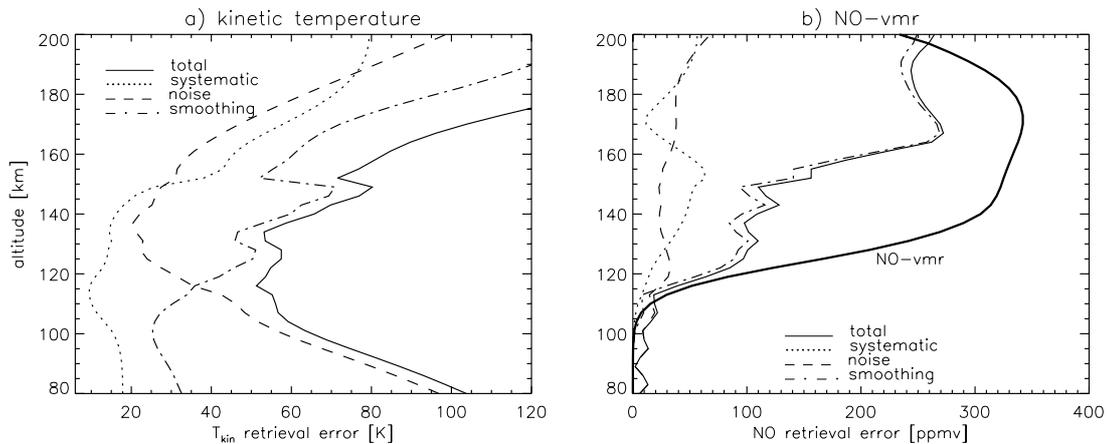


Abbildung 6: Gesamt-Retrieval-Fehler und die Komponenten des Gesamt-Fehlers für die Ableitung der Temperatur (links) und des Mischungsverhältnisses von NO (rechts) oberhalb von 100 km.

reliert. Als nächste Schritte in der Umsetzung des Auswerte-Konzepts stehen die Auswahl geeigneter spektraler Fenster, sowie die Abschätzung des Fehlers, bei dem die *a priori*-Information über die Sichtlinie einen relevanten Beitrag spielen wird, an; dies konnte jedoch im Rahmen des Vorhabens nicht mehr begonnen werden.

- **Entwicklung eines Algorithmus zur Ableitung der kinetischen Temperatur, basierend auf NO-Linien, für Tangentenhöhen zwischen ca. 100 und 160 km**

Im Rahmen von umfangreichen Studien zur Ableitung von NO aus MIPAS-Spektren (siehe Kap. 3.2.9), das bis in die untere Stratosphäre NLTE-Effekte zeigt, wurde auch eine Methode zur Ableitung der kinetischen Temperatur in der Thermosphäre entwickelt. Bei dieser Methode wird vorausgesetzt, daß die Zustandsbesetzungsverteilung von NO, die auch durch Rotations-NLTE beeinflusst ist, mit dem entwickelten NO-NLTE-Modell [Funke and López-Puertas, 2000] beschrieben werden kann, d.h. daß die Modell-Parameter, die Rotations-NLTE beschreiben, genau genug bekannt sind (Näheres siehe Kap. 3.2.9.3). Außerdem wird vorausgesetzt, daß die Sichtlinie bekannt ist, und der Druck aus Höhe und kinetischer Temperatur mit einem geeigneten Modell berechnet werden kann. Unter dieser Bedingung wurde für ein Retrieval-Szenario, bei dem in dem genannten Höhenbereich das Mischungsverhältnis-Profil von NO, das kinetische Temperaturprofil, und die höhenunabhängige chemische Produktionsrate  $P_{N+O_2}$  (aus der Reaktion  $N + O_2 \rightarrow NO + O$ ) simultan abgeleitet wird, die Ableitungsgenauigkeit bestimmt [Funke et al., 2001, Funke, 2000a]. Bei diesem Retrieval-Ansatz machen wir uns zu Nutzen, daß ein NLTE-Modell, das die Zustandsbesetzung von NO beschreibt und die Ableitung des Spektrums nach den Parametern dieses NLTE-Modells füttert, in das Strahlungstransportmodell KOPRA eingebunden worden ist. Der beschriebene Retrieval-Ansatz erlaubt die Ableitung der kinetischen Temperatur in der Thermosphäre mit einer Genauigkeit von ca. 60 K, auf einem Meß- und Retrievalgitter von 3 km Gitterweite (siehe Abb. 6). Dies stellt bei einer mittleren Schwankungsbreite der Temperatur von 100 - 160 K in diesem Höhenbereich immer noch einen Informationsgewinn dar.

### 3.2.7 Studie zur Ableitbarkeit von Aerosolparametern

**3.2.7.1 Pilotstudie anhand MIPAS-B** Erstmals wurden aus den MIPAS-B Spektren im März des Jahres 1992 optische und mikrophysikalische Aerosolparameter hergeleitet. Zu dieser Zeit war die untere Stratosphäre auf Grund der Pinatubo-Eruption reich an vulkanischem Aerosol. Das Aerosol zeigt sich in den Spektren – insbesondere bei tiefen Tangentenhöhen – als schwach frequenzabhängiges, also kontinuumsähnliches Signal. Aerosolextinktionskoeffizienten wurden für 60 spektrale Positionen zwischen 750 und 980  $\text{cm}^{-1}$  sowie 1180 und 1380  $\text{cm}^{-1}$  aus den Spektren abgeleitet. Die spektrale Abhängigkeit der Extinktionskoeffizienten ließ den Schluß zu, dass es sich um in Wasser gelöste Schwefelsäure handelte. Durch iterative Anpassung von Extinktionskoeffizienten, die mit einem Mie-Modell berechnet wurden, an die aus der Messung hergeleiteten Extinktionskoeffizienten wurden die Zusammensetzung und Größenverteilung der Aerosolpartikel hergeleitet [Echle, 1996, Echle et al., 1996b, Echle et al., 1996a, Echle et al., 1997, Echle et al., 1998a, Echle et al., 1998b]. Es zeigte sich, dass bei tiefen Tangentenhöhen Mehrfachstreuung zumindest als Extinktionsterm relevant ist. Die resultierende Schwefelsäurekonzentration war konsistent mit den jeweiligen Temperaturen und Wasserdampfpartialdrücken. Die angenommene unimodale Aerosolgrößenverteilung führte jedoch zu einer Unterschätzung kleiner Partikel, wodurch die Oberflächendichte im Vergleich zu in situ Messungen unterschätzt wurde [Echle et al., 1998b].

Die damaligen Aktivitäten waren durch zwei gravierende Einschränkungen geprägt: Das damals verfügbare Strahlungsübertragungsmodell FASCOD3 unterstützte Streuung für Horizontsondierungsgeometrie nicht. Die Abschätzung des Streuannteils an der Extinktion wurde infolgedessen mit einem spektral niedrig auflösenden Modell durchgeführt. Mit den korrigierten Extinktionskoeffizienten wurde dann die spektral hochaufgelöste Analyse weitergeführt. Aus diesen Erfahrungen folgte für das Strahlungsübertragungsmodell des Satellitendatenprozessors die Mindestspezifikation, dass Absorption und Extinktion nicht gleichgesetzt werden dürfen (was zu einer vereinfachten Formulierung der Strahlungsübertragungsgleichung führt), sondern daß Streuung und Absorption getrennt zu behandeln sind.

Eine weitere Hürde bei den damaligen Arbeiten war, daß immer abwechselnd Extinktionsparameter-Retrievals und Aerosolparameter-Retrievals durchgeführt werden mussten, was erheblichen interaktiven Aufwand bedeutete. Für ein operationelles Auswertesystem ergab sich demnach die Forderung, daß das Mie-Modell in das Strahlungsübertragungsmodell KOPRA einkoppelbar sein muss, damit sich Aerosolparameter direkt, d.h. ohne Umweg über Extinktionskoeffizienten, aus den gemessenen Spektren herleiten lassen.

**3.2.7.2 Untersuchung zur Ableitbarkeit von spektralen Extinktionskoeffizienten und mikrophysikalischen Eigenschaften aus MIPAS/ENVISAT Spektren** Die gewonnenen Erfahrungen mit der Ableitung von Pinatubo-Aerosol-Parametern aus MIPAS-B Daten wurden in einer Studie zur Ableitung von Parametern verschiedener stratosphärischer Schwefelsäure-Aerosolarten aus MIPAS/ENVISAT-Daten weiterverwendet [Echle and von Clarmann, 1998, Echle and von Clarmann, 1999]. Es zeigte sich dabei, daß die Teilchendichteverteilung mit guter Genauigkeit abgeleitet werden kann. Die simultane Ableitung weiterer Größen, wie der Gewichtsanteil der Schwefelsäure im Aerosol, die Größe und die Mode-Weite, wird umso schwieriger, je kleiner die Teilchen sind.

**3.2.7.3 Einbindung der gewonnenen Erkenntnisse in KOPRA und in den Satellitenprozessor** Aus den Arbeiten von Echle et al. zeigte sich zum einen

für die Modellierung der Strahlungsübertragung, dass es nötig ist, Streuung und Absorption von Aerosol explizit zu behandeln. Dies wurde in KOPRA konsequent implementiert. Bezüglich der Ableitung der mikrophysikalischen Eigenschaften von Aerosolen erscheint es zweckmässiger, direkt diese Grössen aus den Spektren zu gewinnen, als den Umweg über die Ableitung der Extinktionskoeffizienten-Profile zu gehen. Daher wurde ein Mie-Modell in KOPRA eingebaut [Höpfner and Echle, 2000]. Erforderliche Eingaben hierzu sind die Größenverteilung der Teilchen und komplexe Brechungsindex-Spektren. Die Einbindung des Mie-Modells macht es möglich, direkt die analytischen Ableitungen des Spektrums nach den mikrophysikalischen Parametern zu bestimmen, was die Grundlage für den Einbau in eine Retrievalumgebung darstellt. Auf der Seite des Inversionsprogramms sind die Schnittstellen für das Retrieval der mikrophysikalischen Parameter ebenfalls vorbereitet.

#### **3.2.7.4 Ableitung von Eigenschaften polarer stratosphärischer Wolken aus MIPAS-ENVISAT Messungen**

In dieser Studie wurde untersucht, ob und mit welcher Genauigkeit sich mikrophysikalische Parameter polarer stratosphärischer Wolken (PSCs) aus MIPAS-ENVISAT Messungen ableiten lassen [Zimmermann, 2000]. Zuerst wurden alle verfügbaren Daten von Brechungsindizes für mögliche Zusammensetzungen von PSCs verglichen, um ihre Genauigkeit festzustellen. Es zeigte sich, dass speziell bei NAT die Ergebnisse der Laborexperimente stark differieren [Zimmermann and Höpfner, 2000]. Für ternäre  $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{O}$  Lösungen gibt es lediglich eine Quelle. Aus veröffentlichten in-situ Ballonmessungen von PSCs wurden typische Höhenprofile der Teilchenzahldichte und der Größenverteilung zusammengestellt. Für verschiedene Szenarien wurden dann mit KOPRA Breitband-Simulationen für die Beobachtungsgeometrie von MIPAS-ENVISAT durchgeführt. Das spektrale PSC-Signal konnte so mit dem spezifizierten Rauschlevel des Geräts verglichen werden. Für das Szenario grosser NAT-PSC-Teilchen übertraf das PSC-Signal das Rauschen um bis zu einen Faktor 40, während für kleine Teilchen das Signal mit dem Rauschen vergleichbar war. Für die verschiedenen Szenarien wurden spektrale Fenster ausgewählt und mittels linearer Fehlerfortpflanzung der Fehler des Retrievals von Größenparametern bestimmt. Unter der Annahme von bekanntem Radius und Breite der Teilchenverteilung konnte die Anzahldichte auf 3% beim Szenario mit grossen und auf 50% beim Szenario mit kleinen Teilchen bestimmt werden. Für die grossen Teilchen war es möglich, einen simultanen Fit von Anzahldichte und Radius mit Fehlern kleiner 10% durchzuführen. Infolge des Rayleigh-Limits ist keine Unterscheidung zwischen Radius und Anzahldichte für kleine Teilchen möglich. Die Volumendichte konnte mit 12% bei grossen und auf 20% bei kleinen Teilchen bestimmt werden. Diese Abschätzungen treffen allerdings nur solange zu, bis die Wolke optisch dicht wird, wie es bei PSCs von Typ II (Wassereisteilchen) der Fall ist [Höpfner et al., 2001c].

Ansatz und Durchführbarkeit konnten prinzipiell anhand einer spektral hochauflösenden FTIR-Messung vom Boden aus verifiziert werden. Allerdings ist durch die völlig unterschiedliche Beobachtungsgeometrie und instrumentelle Bedingungen eine unmittelbare Übertragung der Ergebnisse nicht möglich. Aus dem in Kiruna gemessenen Spektrum konnte abgeleitet werden, daß sich eine PSC-Wolke im Sehstrahl befand, die aus Eisteilchen mit einer Teilchendichte von  $1,85 \text{ cm}^{-3}$  und einem mittleren Teilchenradius von  $2,0 \mu\text{m}$  bestand. Diese Ergebnisse konnten anhand von gleichzeitig erfolgten Lidar-Beobachtungen bestätigt werden [Höpfner et al., 2001, Höpfner et al., 2001b]. Abb. 7 zeigt die beste Anpassung des simulierten Spektrums an das gemessene zusammen mit den abgeleiteten Parametern.

#### **3.2.7.5 Bedeutung der Streuung**

Im Gegensatz zu Gasen, bei denen die Bedeutung der Streuung im infraroten Spektralbereich zu vernachlässigen ist, wech-

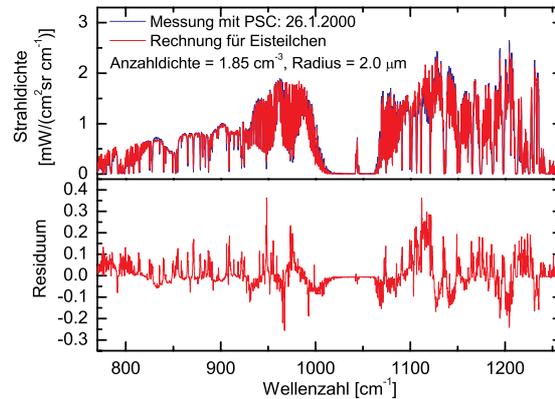


Abbildung 7: Anpassung des simulierten Spektrums an das gemessene, PSC-Signaturen enthaltende Boden-Spektrum (Messung der solaren Strahlung). Die Signaturen der Spurengase wurden in einem vorhergehenden Schritt angepasst.

selwirken Aerosole auch im infraroten merklich durch Streuung mit dem Strahlungsfeld. Untersuchungen mit MIPAS-B Daten haben ergeben, dass das völlige Ignorieren der Streuung zu falschen Ergebnissen führt [Echle et al., 1998b]. Da die volle spektral hochaufgelöste Berücksichtigung der Mehrfachstreuung für einen einigermaßen operationellen Betrieb nicht praktikabel ist, wurde als Kompromiss die folgende Strategie vorgeschlagen: Der Unterschied zwischen Absorption und Extinktion wird bei der Formulierung des Strahlungstransfers berücksichtigt. Weil im thermodynamischen Gleichgewicht Absorptivität gleich Emissivität ist, bewirkt der Aerosolabsorptionskoeffizient auch eine – in MIPAS-B-Spektren deutlich sichtbare – thermische Emission der Aerosolschicht. Die Differenz zwischen Extinktion und Absorption ist der Signalverlust durch Streuung. Dieser Effekt wird berücksichtigt, während Streuung als Signalquelle, also in den Lichtweg eingestreutes Licht, unberücksichtigt bleibt<sup>2</sup>. Die Gültigkeit dieser Näherung hängt stark von der Teilchendichte – also der Relevanz der Mehrfachstreuung – und den aktuellen geometrischen Verhältnissen ab.

**3.2.7.6 Untersuchung zur gleichzeitigen Ableitbarkeit von spektralen Extinktionskoeffizienten und Spurengasprofilen** Während die gleichzeitige Ableitbarkeit von spektralen Extinktionskoeffizienten und Spurengasprofilen in der Anfangszeit noch den Rang eines eigenständigen Forschungsthemas hatte, hat sich dieser Ansatz immer mehr zum Standard für die Gasauswertung etabliert. Der Grund ist der folgende: Die Kontinuumsmission der Spektren wird durch die Strahlungsmodelle nur unzureichend beschrieben, da einerseits nicht für alle Kontinuumsarten zuverlässige Modelle zur Verfügung stehen, und andererseits die Eingabegrößen für diese Modelle im aktuellen Fall nicht immer bekannt sind. Es hat sich deshalb – schon bei den Pilotstudien mit MIPAS-B Daten – bewährt, zusätzlich zu den Targetparametern immer einen empirischen Kontinuumsparameter zusätzlich

<sup>2</sup>Seit dem Abschluss des Vorhabens wurde KOPRA so erweitert, dass auch die Einstreuung von Strahlung, die von der Sonne, der Erdoberfläche oder aus dem  $4\pi$ -Raumwinkel der Atmosphäre herrührt, auf Basis der Streufunktion, die das Mie-Modell ebenfalls liefert, berücksichtigt werden kann. Erste Testrechnungen und Vergleiche mit gemessenen MIPAS-B Spektren von PSCs demonstrieren, dass besonders für Teilchen  $> 1 \mu\text{m}$  die Einstreuung eine keinesfalls zu vernachlässigende Rolle spielt (Höpfner et al, unveröffentlicht).

an die Messung anzupassen. Dieser mag im Einzelfall ohne physikalische Bedeutung sein, aber er verhindert die Fortpflanzung eines Fehlers im Kontinuumsmodell auf die Targetparameter gemäß Gleichungen 26 bzw. 27. Unserer gesamten Strategie, so auch in der Auswahl der spektralen Auswertefenster, wird dieser Ansatz jetzt zu Grunde gelegt. Die Unterscheidung zwischen Absorptionskoeffizient und Extinktionskoeffizient steht in diesem Zusammenhang nicht im Vordergrund. Je besser die physikalischen Kontinua ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ , etc) bekannt sind und mit dem Strahlungsübertragungsmodell beschrieben werden, um so eher erlauben die empirisch ermittelten Extinktionskoeffizienten Rückschlüsse auf Aerosolkenngrößen im Sinne von *Echle et al.* [Echle et al., 1998b].

**3.2.7.7 Studie über die Möglichkeit der Gasauswertung bei optisch dicken troposphärischen Wolken** Troposphärische Wolken werden bei den untersten Tangentenhöhen der MIPAS/ENVISAT Beobachtungen eine Rolle spielen. Insbesondere ist mit großflächiger Cirrus-Bewölkung und, in den Tropen, mit hochreichender Cumulus-Bewölkung zu rechnen. Systematische Studien hierzu, insbesondere was die Optimierung der Spurengas-Auswertung in Gegenwart von optisch dünner Bewölkung angeht, konnten bisher noch nicht durchgeführt werden. Als Hauptproblem hierbei wird gesehen, daß das Signal von Wolken im IR-Spektrum aus einem breitbandigen und wenig, aber nicht völlig, unstrukturierten Kontinuum besteht. Gleichzeitig haben viele in der oberen Troposphäre relevanten Spurengase ebenfalls breitbandige Signaturen (Freone, PAN, Azeton, usw.). Die Aufgabe besteht darin, diese Signaturen voneinander zu trennen. Anhand von Ballon- und Flugzeugspektren konnten erste Erfahrungen mit dem Einfluß von Wolken auf die Ableitbarkeit von Spurengasen in der oberen Troposphäre gemacht werden. Das vorgehen war zweistufig: zunächst wurde unter der Annahme, der spektrale Verlauf der Wolken-Extinktions-Koeffizienten sei bekannt, die Wolken-Untergrenze und die Wolkendicke bestimmt. Die Unsicherheiten dieser Großen wurden in die Fehlerrechnung für die Spurengas-Ableitungen einbezogen. Es zeigte sich, daß schon sehr kleine Unsicherheiten in der Lage und Dicke der Wolken zu nennenswerten Fehlern in den abgeleiteten Spurengasen führen [von Clarmann and Adrian, 1993]. Da diese Ergebnisse jedoch mit Verfahren erzielt wurden, die nicht mehr dem heutigen Vorgehen entsprechen (siehe Kap. 3.2.7.6), ist eine unmittelbare Übertragbarkeit der Ergebnisse nicht gegeben. Eine umfassende Studie unter Verwendung der neuen Strategie konnte noch nicht begonnen werden, ist aber für die Zukunft geplant, und eine Teil-Finanzierung ist bei der ESA beantragt.

### 3.2.8 Studien zur Ableitbarkeit von Spurengasprofilen im Bereich der oberen Troposphäre/unteren Stratosphäre (OT/US)

**3.2.8.1 Pilotprojekt MIPAS-B** Sämtliche Messungen mit dem MIPAS-Ballon-Instrument sind wegen der Flughöhe des Ballons bei ca. 30 km dem OT/LS-Bereich zuzuordnen, wiewohl die wissenschaftliche Fragestellung eher unter dem Schlagwort "Polare Ozonchemie" anzusiedeln ist. Auch muss bemerkt werden, dass eine Auswertung der Spektren bis in die Troposphäre hinein eben wegen der eher stratosphärischen wissenschaftlichen Fragestellung meist nicht versucht worden ist. Dennoch konnten aus der Auswertung der Ballon-Spektren wichtige Erfahrungen gesammelt werden über die typischen Auswerteprobleme, die bei Spektren aus diesem Höhenbereich auftreten.

Aus den folgenden Gründen impliziert die Auswertung von Spektren tiefer Tangentenhöhen besondere Probleme: Durch die große Zahl der Gase, die im Tropopausenbereich zum atmosphärischen Spektrum beitragen, sowie durch die ausgeprägte Druckverbreiterung der Linien ist es schwer, gut separierte Spektrallinien der Targetgase zu finden. Aufgrund der großen Teilchendichten längs des Sehstrahls, und

der insbesondere im Troposphärenbereich hohen Wasserdampfdichte ist die optische Dicke der Absorber groß, was zu reduzierten Sensitivitäten der Spektren auf die Targetparameter führt. Dies ist insbesondere bei Gasen mit ausgeprägtem Konzentrationsmaximum in der Stratosphäre problematisch. Alle Arten atmosphärischer Kontinua sind besonders im Bereich hoher Drücke, wie sie im Tropopausenbereich herrschen, relevant. Aufgrund der starken Vertikalgradienten der Zustandsparameter ist die Kenntnis der Sichtlinie von besonderer Bedeutung. Weil die Spektren in vielen Bereichen bereits gesättigt sind, ist auch eine gute Kenntnis der Temperatur wichtig für die Auswertung der Gase. Gerade diese beiden Größen sind jedoch aufgrund der schlechten Sensitivitäten und schlecht separierten Linien nicht immer ausreichend gut ableitbar. Dies gilt um so mehr, wenn, wie bei den MIPAS Ballonmessungen der Jahre 1989 und 1990, nur unzureichende oder unzutreffende *a priori* Information über die Sichtlinie vorliegt.

Auf Grund dieser Erschwernisse wurden die Spektren der ersten beiden MIPAS-B Flüge als ganzes anstelle auf Basis kleiner Auswertefenster analysiert. Dem Vorteil der verbesserten Sensitivität steht der Nachteil des explodierenden Parametervektors und damit einhergehend unzureichende rechnerische Effizienz entgegen. Diese Auswertearbeiten sind dokumentiert in den Publikationen [von Clarmann and Adrian, 1993, von Clarmann et al., 1993b, von Clarmann et al., 1993c, Schmidt, 1993, Zorn, 1994].

Da damals kein optimiertes Strahlungsübertragungsmodell vorhanden war, war es nicht praktikabel, das inverse Strahlungsübertragungsproblem gemäß Gleichungen 6 und folgende exakt zu lösen. Vielmehr bediente man sich gezwungenermaßen *ad hoc* Methoden, die die komplette Evaluierung der Jacobi-Matrix  $\mathbf{K}$  vermieden. Eine damals entwickelte Methode zur Stabilisierung der Inversion war z.B. die geschichtete Onion Peeling Methode [Schmidt, 1993]. Mit der Verfügbarkeit des Vorwärtsprogramms KOPRA, das komplette Jacobimatrizien optimiert berechnet, erübrigte es sich, derartige *ad hoc* Ansätze weiterzuführen.

**3.2.8.2 Vorstudien** Aus rechenzeitökonomischen Gründen erfolgten unsere frühen Arbeiten mit realen Meßdaten stets auf Basis eines infinitesimal approximierten Sehstrahls. Für den Fall einer stark strukturierten Atmosphäre mit abrupten Änderungen der Zustandsparameter, wie sie im Übergangsbereich zwischen Troposphäre und Stratosphäre vorkommen, ist es jedoch wichtig, das Strahldichtefeld mit der Gesichtsfeldfunktion des Messinstruments zu falten. Ein Ansatz dazu wurde bereits 1991 entwickelt [Wegner, 1991]. Erst das rechenzeitoptimierte Strahlungsübertragungsmodell KOPRA erlaubte die routinemäßige Anwendung solcher Verfahren.

**3.2.8.3 Optimierung der Ableitungsgenauigkeit und Höhenauflösbarkeit am Beispiel von tropischem Wasserdampf** In der Höhenregion von oberer Troposphäre und unterer Stratosphäre treffen an der Tropopause zwei Atmosphärenschichten aufeinander, die sich stark in ihren Eigenschaften unterscheiden. Die chemische Zusammensetzung der Troposphäre wird durch die große dynamische Aktivität und die konvektive Durchmischung in dieser Region bestimmt. Eine große Bedeutung für die Zusammensetzung und chemische Reaktionen haben hier Spurengase, die ihren Ursprung am Erdboden haben, und die bis zur Tropopause meist gut durchmischt sind. Oberhalb der Tropopause ist die vertikale Durchmischung deutlich schwächer. Die Mischungsverhältnisse vieler Spurengase troposphärischen Ursprungs nehmen hier aufgrund der Photolyse und der geringen vertikalen Durchmischung sehr schnell mit der Höhe ab. Die Zusammensetzung der Atmosphäre wird hier durch die stratosphärischen Abläufe geprägt. Spurenstoffe, die in der Stratosphäre erzeugt werden, nehmen hier z.T. stark mit der Höhe zu (z.B. Ozon). Zusam-

men mit der genauen Kenntnis des Temperaturprofils geben die starken Gradienten in den Vertikalverteilungen von troposphärischen und stratosphärischen Spurengasen einen Hinweis auf die ungefähre Lage der Tropopause. Aus der vertikalen Verteilung bestimmter Gase kann man auf dynamische Austauschprozesse schließen, die über die Tropopause hinweg stattfinden.

Um die starken Gradienten und Veränderungen in Spurengasprofilen in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre beobachten zu können, ist es nötig, mit einer vertikalen Auflösung zu messen, die auch kleinere vertikale Strukturen erkennen lässt.

Untersuchungen zur Ableitbarkeit und vertikalen Auflösung wurden am Beispiel von Wasserdampf in tropischen Regionen gemacht. Gerade in den Tropen besitzt das troposphärische Vertikalprofil von Wasserdampf mit Mischungsverhältnissen von über 10000 ppmv am Erdboden und unter 3 ppmv im Minimum (sog. *Hygropause*) einen sehr starken vertikalen Gradienten. Das ausgeprägte Minimum wird unter anderem durch die sehr niedrigen Temperaturen von deutlich unter 200 K in der tropischen Tropopause hervorgerufen.

Zur Ermittlung des Vertikalprofils wurde ein optimierter Satz von Auswertefenstern ausgewählt [Milz et al., 1999a, Milz et al., 1999b, Milz et al., 1999c]. Diese sollen möglichst viel Information über den Wasserdampfgehalt des interessanten Bereichs der Tropopause liefern. Für ein Standard-Messszenario mit einem Tangentenabstand von 3 km wurden Auswertefenster von 5 km bis 26 km Höhe ausgewählt. Die Abschätzung der vertikalen Auflösung wurde für ein Auswerte-Gitter mit einem Gitterpunkt-Abstand von 1 km gemacht. Dieses Gitter deckt den Höhenbereich von 3 bis 29 km ab.

Um ein Maß für die vertikale Auflösung einer Messung zu bekommen, verwendet man die Auflösungsmatrix (*Averaging-Kernel-Matrix*). Sie wird wie folgt berechnet:

$$\mathbf{A} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \quad (46)$$

Die Matrix gibt die abgeschätzte vertikale Auflösung wieder, die beim Retrieval z.B. durch Regularisierung, unterschiedliche Mess- und Retrievalgitter, Sättigungseffekte im Spektrum etc. im Ergebnisprofil erreicht wird. Im Falle eines idealen Ergebnisses ohne Verluste ist die Auflösungsmatrix eine Einheitsmatrix. Im Normalfall jedoch wird die Information über einen breiteren Bereich verschmiert, d.h. einem Punkt im Ergebnisprofil werden auch Informationen zugewiesen, die aus einer anderen Höhe des tatsächlich betrachteten Profils stammen. Die einzelnen Zeilen dieser Matrix geben für jeden Punkt im ermittelten Profil an, wieviel jeder einzelne Punkt im gesamten diskretisierten Profil zum Ergebnis in diesem Punkt beiträgt. Die Halbwertsbreite des Maximums jeder Zeile der Matrix stellt ein Maß für die vertikale Auflösung dar.

Die Glättung des Ergebnisses durch die eingeschränkte Auflösung der Messung führt zu einem Glättungsfehler, der in der Abschätzung des Fehlerbudgets berücksichtigt werden muss. Die Kovarianz  $\mathbf{S}_{gl}$  des Glättungsfehlers berechnet sich aus:

$$\mathbf{S}_{gl} = (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \mathbf{S}_e (\mathbf{A} - \mathbf{I})^T \quad (47)$$

Hier ist  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix und  $\mathbf{S}_e$  die Kovarianz des Ergebnis-Profils.

Die Auflösung und der Glättungsfehler wurden für das Standard-Messszenario mit 3 km ermittelt. Aus den Zeilen der Auflösungsmatrix ergibt sich für Höhen über 11 km eine Halbwertsbreite zwischen 2,0 und 2,5 km. Im verwendeten Beispiel des tropischen Wasserdampfprofils erschweren unterhalb von 11 km Sättigungseffekte und Absorption im Spektrum das Retrieval und eine Abschätzung der Auflösung ist über die Halbwertsbreite nicht möglich.

Zusätzlich zum Standard-Modus des MIPAS-S sieht ein spezieller UT/LS-Modus Messungen auf einem teilweise feineren Messgitter mit 1,5 km Tangentenabstand

in den unteren Tangentenhöhen vor. Der hierbei abgedeckte Höhenbereich erstreckt sich von 5 km bis 44 km. Die feinere Abtastung ermöglicht eine höhere Auflösung der vertikalen Profile. Die vertikale Auflösung wurde für diesen Fall abgeschätzt. Im Höhenbereich von 11 km bis 29 km ergibt sich für die verwendete tropische Atmosphäre eine Auflösung von ca. 1,4 km bis 1,9 km. Auch hier ist unterhalb von ca 11 km keine Auflösungsabschätzung möglich.

Für die Abschätzung des Glättungsfehlers für beide Fälle wurde eine vereinfachte Kovarianz der Messung  $\mathbf{S}_e$  verwendet. Deren Elemente  $s_{e,i,j}$  wurden mit Hilfe einer Exponentialfunktion berechnet:

$$s_{e,i,j} = \sigma_i \sigma_j \exp \left( -\frac{|z_i - z_j|}{l_i} \right) \quad (48)$$

$\sigma_i, \sigma_j$  sind die erwarteten Unsicherheiten der Höhenstufe  $i$  bzw.  $j$ .  $z_i$  und  $z_j$  sind die Höhe der Stufen und  $l_i$  ist die charakteristische Längenskala einer Störung in der Stufe  $i$ .

Für die Troposphäre bis 17 km wurde eine Unsicherheit von  $\sigma = 50\%$  und eine charakteristische Länge von  $l_i = 500m$  angenommen. In der Stratosphäre wurden unter Berücksichtigung der stabileren Schichtung etwas kleinere Unsicherheiten mit  $\sigma = 10\%$  bei einer etwas größerer Längenskala ( $l = 1.5km$ ) verwendet.

Vergleicht man die vertikalen Verteilungen der beiden Fehler (siehe Abb. 8), so sieht man, dass unterhalb der Tropopause, wo starke Gradienten und feinere Strukturen im Wasserdampfprofil erwartet werden, die Messungen mit feinerem Messgitter (gepunktet) zu besseren Ergebnissen führen. Insgesamt ist für den optimierten Microwindow-Datensatz und für das feinere Messgitter ein Gesamtehrer von ca. 5 % in der Stratosphäre und 15 bis 25% in der Troposphäre oberhalb von 11 km zu erwarten (siehe Abb. 8).

**3.2.8.4 Vergleiche mit HIRDLS** Im Rahmen eines sechsmonatigen Forschungsaufenthalts am NCAR in Boulder, CO wurde eine Vergleichsstudie mit dem "High Resolution Dynamics Limb Sounder" (HIRDLS) gemacht. HIRDLS ist ein satellitengestütztes Radiometer, das ebenfalls im Horizontsondierungsmodus arbeitet. Es besitzt 21 Kanäle im Infraroten zwischen 575 und 1608  $\text{cm}^{-1}$ , die so gewählt sind, dass die mit ihnen gemessene Strahlung von der Information über eine Zustandsgröße dominiert wird. Interferenzen durch andere Gase wurden minimiert. Das Gesichtsfeld des Instruments ist mit ca. 1 km vertikal und 10 km horizontal deutlich kleiner als bei MIPAS. HIRDLS wird vertikal nahezu kontinuierlich von 8 - 80 km messen. Hierbei wird eine vertikale Auflösung von ca 1 - 2 km erwartet. Eine unter stark vereinfachten Annahmen gemachte Fehlerabschätzung für die beiden Wasserdampfkanäle zeigt vergleichbare Fehler, wie sie auch für MIPAS erwartet werden. Die vertikale Auflösung von HIRDLS ist deutlich größer als die von MIPAS. Das Radiometer-Prinzip, das die gemessene Strahlung über breite festgelegte spektrale Bereiche integriert, bereitet bei Sättigung der Spektren und bei großen Beiträgen interferierender Parameter Probleme bei der Auswertung. Diese Probleme können bei MIPAS durch die geeignete Wahl von Auswertefenstern z.T. umgangen werden.

**3.2.8.5 Erhöhung der Sensitivität** Aus unter Kap. 3.2.8.1 genannten Gründen, und weil viele der im Bereich der oberen Troposphäre/unteren Stratosphäre interessanten Gase nur schwach ausgeprägte Signaturen haben, ist die Sensitivität der Spektren auf manche Targetgasmischungsverhältnisse nur gering. Diesbezüglichen Problemen kann auf dreierlei Arten begegnet werden:

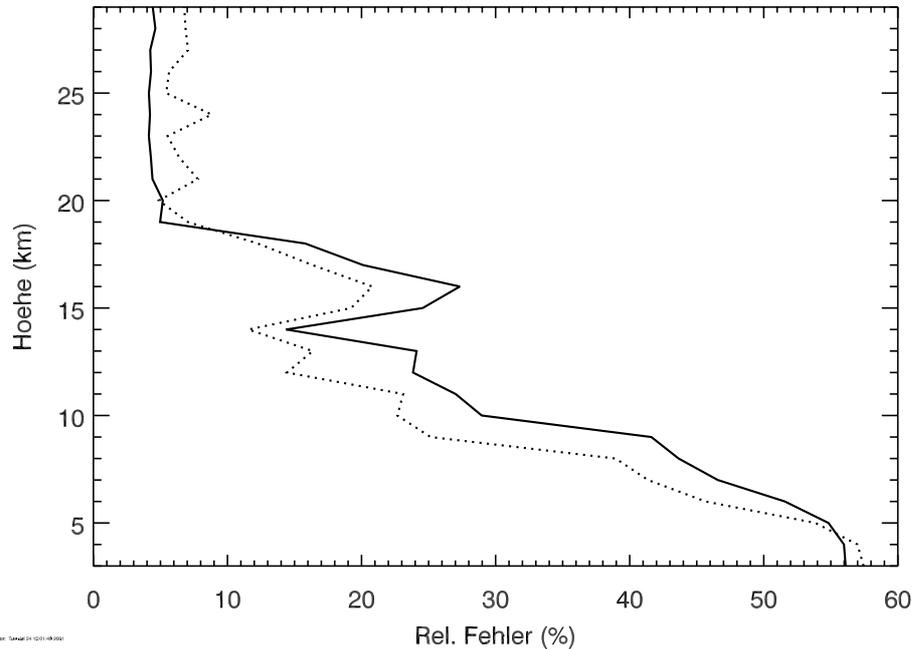


Abbildung 8: Glättungsfehler beim Wasserdampf-Retrieval für die tropische Atmosphäre und ein feines (gepunktet) bzw. grobes (durchgezogen) Messgitter. Nähere Erläuterungen siehe Text.

1. **Auswertefenster:** Der naheliegendste Ansatz besteht in der Auswahl möglichst sensitiver Auswertefenster. Mit der unter Kap. 3.2.5.1 beschriebenen Methodik werden diejenigen Linien und Spektralbereiche ermittelt, die die (relativ) beste Sensitivität aufweisen, also den kleinsten Retrievalfehler bewirken. Um die Sensitivität weiter zu steigern, werden viele solche Auswertefenster kombiniert.
2. **Auswertung des gesamten Spektrums:** Wenn die in separierten Linien enthaltene Information nicht ausreicht, um den gesuchten Zustandsparameter zufriedenstellend abzuleiten, kann das komplette gemessene Spektrum ausgewertet werden. Dabei wird ein Maximum an redundanter Information benutzt; allerdings hängt das komplette Spektrum von einer Vielzahl unbekannter Parameter ab. Diese Verfahren wird im Kap. 3.2.8.1 diskutiert. Außerdem kann auf das entwickelte Verfahren zur Wichtung der Messung mit zusätzlichen systematischen Fehlern (siehe Gleichung 45) zurückgegriffen werden [von Clarmann et al., 2001b].
3. **Mittelung von Ergebnissen:** Von *Stiller et al.* [Stiller et al., 2001a] wurde gezeigt, dass es viele interessante Gase gibt, deren erwartete Konzentrationen unterhalb der Nachweisbaregrenze von MIPAS liegen. Da die Ergebnisse einiger dieser Gase jedoch vom Zufallsfehler dominiert werden, können durch Mittelung sinifikante Ergebnisse erzielt werden. Schon früh wurde von uns erkannt, daß die Anwendung einer Retrievalgleichung mit Nebenbedingung (Gl. 10 oder 16) die statistische Unabhängigkeit der Ergebnisse zerstört und so einfaches arithmetisches Mitteln der Ergebnisse verbietet. Wir konfrontierten seit 1999 die Community mit diesem Problem (hauptsächlich im Rahmen unserer Gutachtertätigkeit für das TES-Experiment). TES science team member

C.D. Rodgers reagierte mit einem Vorschlag, das gemittelte Ergebnis um den übergewichtigen Beitrag der a priori Information zu korrigieren. Dieser Ansatz kann und soll nun auch für MIPAS angewendet werden:

$$\mathbf{x}_{neu} = (\mathbf{S}_x^{-1} - \mathbf{S}_{a\ priori,alt}^{-1} + \mathbf{S}_{a\ priori,neu}^{-1})^{-1} (\mathbf{S}_x^{-1})\mathbf{x}_{alt} - \mathbf{S}_{a\ priori,alt}^{-1}\mathbf{x}_{a\ priori,alt} + \mathbf{S}_{a\ priori,neu}^{-1}\mathbf{x}_{a\ priori,neu} \quad (49)$$

**3.2.8.6 Auswertefenster für relevante Gase** Der Schwerpunkt unserer ersten wissenschaftlichen Nutzung von MIPAS/ENVISAT wird beim Studium von Prozessen in der unteren Stratosphäre und oberen Troposphäre liegen (stratosphärische Ozonzerstörung, Austauschprozesse zwischen Stratosphäre und Troposphäre, Ozonchemie der oberen Troposphäre, etc.), mit einigen Exkursen in die obere Stratosphäre/Mesosphäre (z.B. Einfluß der solaren Variabilität auf die Stratosphäre, Energie-Budget der Mesosphäre) und Thermosphäre (z.B. Produktion von thermosphärischem NO und Eintrag in die Stratosphäre). Daher war es eine dringende Notwendigkeit, die Datenauswertung im OT/US-Bereich umfassend vorzubereiten. Grundlage hierfür ist die Auswahl und Optimierung geeigneter spektraler Auswertefenster. Hierfür wurde die im Rahmen des Vorhabens entwickelte Methode [von Clarmann and Echle, 1998b] angewendet (siehe auch Kap. 3.2.5.1).

- **Szenarien für mittlere Breiten:** Für typische Bedingungen mittlerer Breiten (Spurengas-Profile, Temperatur-Profil) wurden die spektralen Auswertefenster für ca. 45 Gase für den Höhenbereich 5 bis 68 km optimiert. Bei der Berechnung der zugrundegelegten Referenzspektren wurde der Beitrag von 53 Spurengasen berücksichtigt; eine weitere, ähnlich komplette Simulation des atmosphärischen Spektrums ist uns nicht bekannt. Zur Optimierung der spektralen Auswertefenster wurden folgende Fehlerquellen berücksichtigt: Detektorrauschen, Unsicherheiten verschiedener Instrumentenparameter, Unsicherheit in der Sichtlinienbestimmung und im Temperaturprofil, klimatologische Variabilitäten der interferierenden Gase, Unsicherheiten in den spektroskopischen Daten und Approximationen und Unsicherheiten in der Vorwärtsmodellierung (insbesondere NLTE-Effekte und Kontinua gasförmiger Konstituenten). Die Optimierung der spektralen Auswertefenster wurde selbst-konsistent für alle Spezies des Mittleren-Breiten-Szenarios sowie für die beiden anderen Szenarien (s.u.) durchgeführt, so daß die erhaltenen Fehlerabschätzungen miteinander verglichen werden können. Grundsätzlich sind wir von einem Beobachtungsgitter mit 3 km vertikaler Schrittweite und einem nicht-regularisierenden Retrieval ausgegangen. Ergebnis dieser Arbeiten sind sog. Microwindow-Datenbanken, die für jede der simulierten Tangentenhöhen eine komplette Zusammenstellung geeigneter spektraler Auswertefenster mit ihren nach den einzelnen Fehlerquellen aufgeschlüsselten Fehlerbeiträgen enthalten. Ein ebenfalls entwickelter Algorithmus [Echle et al., 2000] erlaubt dann die Auswahl eines reduzierten und optimalen Satzes von spektralen Fenstern für eine konkrete Anwendungssituation unter den dann vorgegebenen Randbedingungen (z.B. Rechenzeit- und Speicherplatz-Angebot, Ausfall bestimmter spektraler Kanäle oder Tangentenhöhen durch Störungen in der Messung etc.). Die mit der Microwindow-Auswahl bereitgestellte Fehlerabschätzung erlaubt eine erste Beurteilung der Datenprodukte und -qualität die im Bereich der OT/US zu erwarten ist, wobei darauf hingewiesen werden muss, dass die angewandte Methode der linearen Fehlerabschätzung keine Test-Retrievals ersetzen kann. In Abb. 9 sind die erwarteten Fehlerprofile für ca. 45 Spurengase im Bereich der OT/UT zusammengestellt [Stiller et al., 2001a, Stiller et al., 2000]. Viele dieser Spurengase wurden noch nie aus Fernerkundungsmessungen abgeleitet. Damit wird das hohe Potential für atmosphärenwissenschaftliche Arbeiten, das in MIPAS steckt, erneut demonstriert.

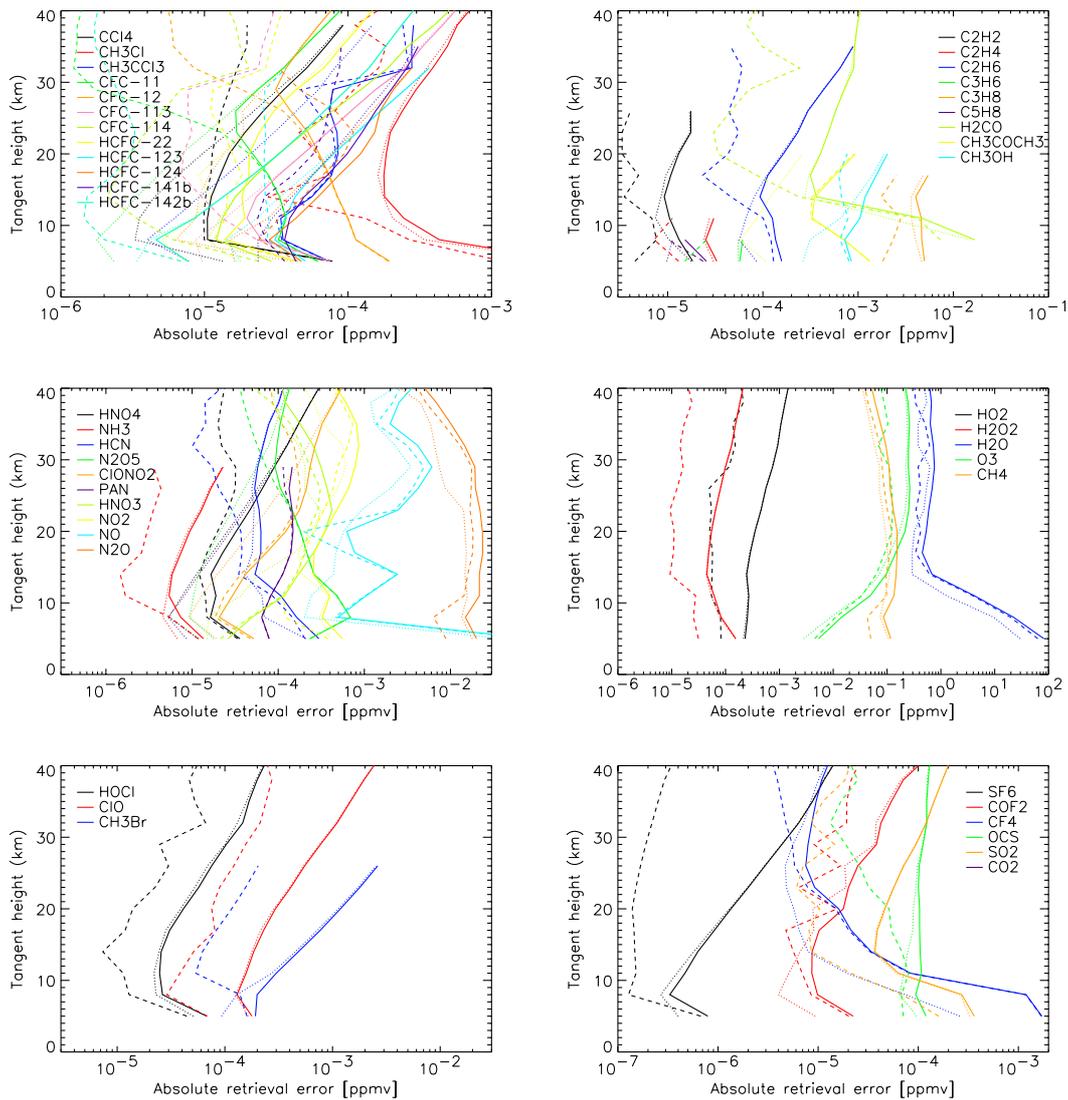


Abbildung 9: Absolute Fehlerprofile aller untersuchten Spurengase in ppmv; die gepunktete Linie zeigt jeweils den Fehler bedingt durch das Mess-Rauschen, die gestrichelte Linie ist die quadratische Summe aller Parameterfehler, die durchgezogene Linie zeigt den quadratisch addierten Gesamtfehler.

Daß insbesondere für viele der anthropogen erzeugten Quellgase der Höhenbereich der Nachweisbarkeit eingeschränkt ist, liegt in erster Linie an den rasch abfallenden Mischungsverhältnisprofilen dieser Gase in der Stratosphäre. Doch selbst wenn aus individuellen Einzelmessungen nur obere Grenzen für die Konzentrationen abgeleitet werden können, wird durch sensitive Mittelung weitere Information gewonnen. Abb. 10 zeigt die erwarteten Unsicherheiten von über ein Gitter von  $10^{\circ} \times 10^{\circ}$  saisonal gemittelten Messungen in der Höhe 8 km für eine Reihe von Spurengasen, die für das Verständnis der in der OT ablaufenden Ozon-Chemie relevant sind. Verglichen damit ist die globale Variabilität dieser Spurengase. In fast allen Fällen ist die Unsicherheit der gemittelten Werte kleiner als ihre globale Variabilität, so dass mit globalen Karten dieser Gase mit einer relativ guten räumlichen Auflösung aus MIPAS-Messungen

### Seasonal $10^\circ \times 10^\circ$ MIPAS uncertainties and climatological variability at 8 km tangent altitude

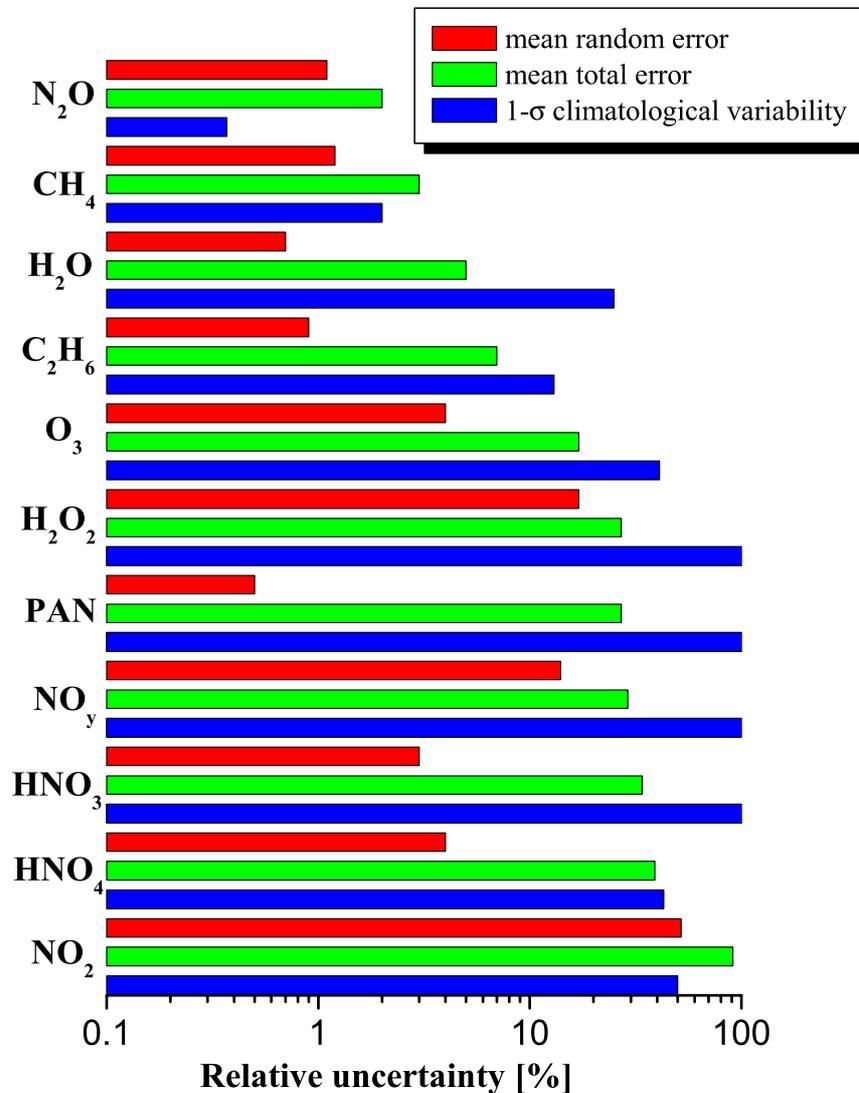


Abbildung 10: Gemittelte relative Zufallsfehler (rot) und Gesamtfehler (grün) für einen Mittelungszeitraum von 3 Monaten und eine Mittelungsfläche von  $10^\circ \times 10^\circ$ , verglichen mit den klimatologischen Variabilitäten für eine Reihe von troposphärisch relevanten Spurengasen und eine Tangentenhöhe von 8km. Für die Berechnung des gemittelten Gesamtfehlers wurde angenommen, dass sich die systematischen Fehler nicht reduzieren lassen, was in der Realität günstiger sein wird. Gezeigt sind jeweils die 1- $\sigma$ -Unsicherheiten bzw. -Variabilitäten.

gerechnet werden kann.

- **Szenarien für den Polarwinter:** Analog zu den Arbeiten für mittlere

Breiten wurden auch für die Bedingungen des Polarwinters Microwindow-Datenbanken erstellt und eine Fehlerabschätzung gemacht. Die Bedingungen unterscheiden sich in erster Linie durch unterschiedliche, zum Teil stark erhöhte (z.B. ClO) oder erniedrigte (Quellgase nach Absinken) Spurengasprofile in der unteren Stratosphäre, und eine wesentlich kältere Tropopause und untere Stratosphäre. Bei der Auswahl der Gase haben wir uns auf die Fragestellungen konzentriert, die besonders im Polarwinter relevant sind, wie die  $\text{NO}_y$ -Partitionierung oder das Chlorbudget. Es wurden daher nicht für alle Spurengase eine Polarwinter-spezifische Auswahl gemacht. Das interessanteste Ergebnis war der Nachweis-Fehler für ClO unter erhöhten Bedingungen: für ein realistisches ClO-Profil, das im Polarfrühling 1997 durch das MIRA-Mikrowellen-Experiment gemessen wurde [Kopp et al., 1999], wurde der Gesamt-Retrievalfehler auf ca. 40 % in 14 bis 17 km Höhe abgeschätzt [Kimmich, 2000], eine Genauigkeit die z.B. mit dem MLS-Instrument, das bisher die wesentliche Quelle für flächendeckende ClO-Messungen in der Atmosphäre war, vergleichbar ist!

- **Szenarien für die Tropen:** Für tropische Szenarien lagen bis zum Projektende keine vollständigen Datensätze über realistische Spurengas-Profile vor, mit denen Strahldichte-Simulationen gemacht werden konnten. Daher konnte eine Microwindow-Auswahl für tropische Bedingungen nur für die Temperatur und die MIPAS-Standardgase  $\text{O}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{NO}_2$  durchgeführt werden. Dabei ist zu beachten, daß die Abschätzung der Fehler durch interferierende Gase auf Profilen typisch für mittlere Breiten beruht und damit nicht ganz realistisch ist. Weitere Arbeiten sind hier notwendig.
- **Übergreifende Szenarien:** Im Rahmen unserer MIPAS-Datenauswertung wird es oft zu der Situation kommen, dass der zu prozessierende Datensatz nicht eindeutig einer der genannten drei Breitenzonen zugeordnet werden kann, so z.B. wenn die Nordkalotte von 30 bis 90 ° N ausgewertet werden soll. In diesen Fällen könnte der Wechsel zu einem anderen Microwindow-Datensatz systematische Versätze in den sonst einheitlich ausgewerteten Profilen erzeugen. Um dies zu vermeiden und eine geeignete Strategie zu entwickeln, wurde untersucht, wie weit sich die Microwindow-Datensätze für mittlere Breiten für die Auswertung polarer Spektren eignen und umgekehrt [Kimmich, 2000, Glatthor et al., 2001]. Es zeigte sich, daß es in den meisten Fällen die Anwendung "polarer" Microwindows auf Spektren mittlerer Breiten zu vergleichbar guten oder etwas besseren Ergebnissen führt, als die Anwendung von für mittlere Breiten erzeugten Microwindows auf die Polar-Atmosphäre. Dies ist zu verstehen wenn man bedenkt, daß polare Bedingungen z.B. bzgl. der Temperatur ein "worst case" darstellen, und die Microwindow-Auswahl in diesem Fall besonders optimiert sein muss. Für das oben angeführte Beispiel bedeutet dies, dass eine solche Nordkalotte komplett unter Verwendung der "polaren" Microwindows ausgewertet werden würde.

### 3.2.9 Ableitung von Non-LTE-Parametern und Gasen im Non-LTE

**3.2.9.1 Entwicklung eines verallgemeinerten NLTE-Modells** NO wurde als das atmosphärische Spurengas identifiziert, bei dem auf die Berücksichtigung von NLTE-Effekten am wenigsten verzichtet werden kann, weil sein Signal im atmosphärischen Spektrum bis in Tangentenhöhen in der untersten Stratosphäre durch NLTE-Effekte beeinflusst ist. Daher wurde begonnen, für dieses Spurengas ein geeignetes Modell für die Besetzungsverteilung der Zustände zu entwickeln. In Kooperation mit dem Instituto de Astrofísica de Andalucía (IAA) in Granada ist es gelungen, ein NLTE-Modell

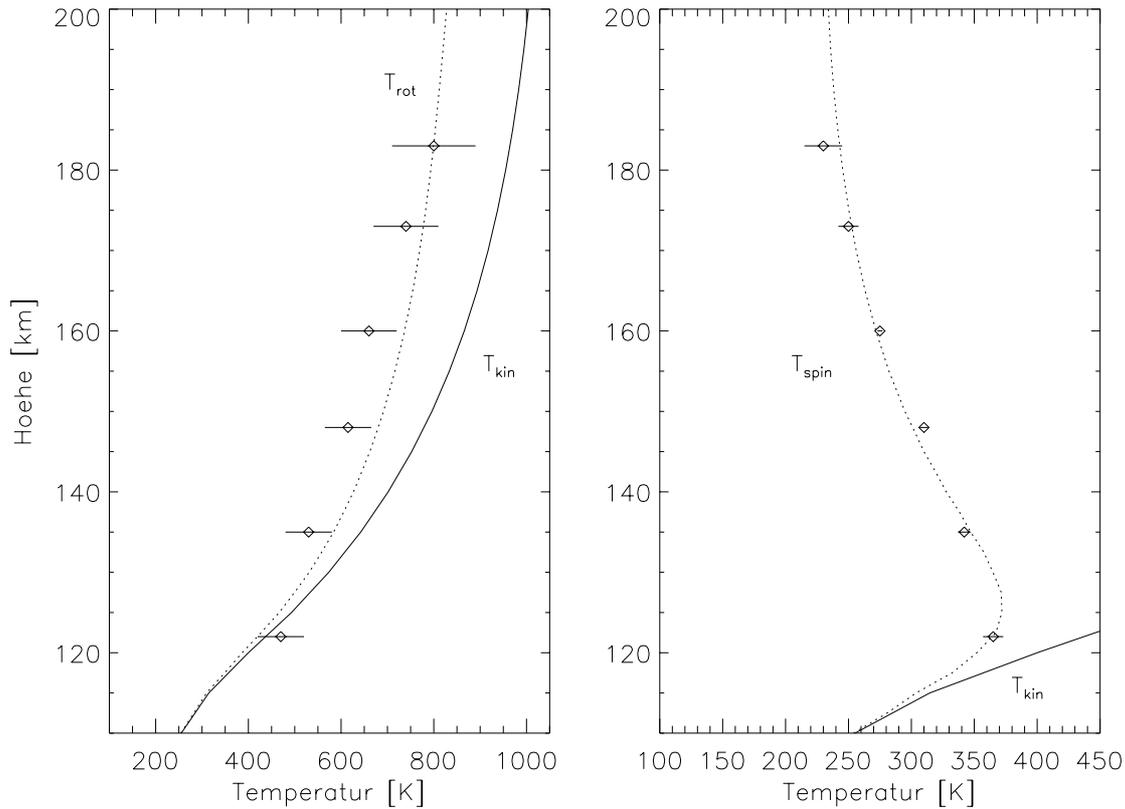


Abbildung 11: Vergleich der berechneten Rotationstemperaturen  $T_{rot}$  und der Spintemperaturen  $T_{spin}$  mit abgeleiteten Daten aus CIRRIS-1A-Spektren [Sharma et al., 1996].

für NO zu entwickeln, mit dem nicht nur die Besetzungsverteilung der Zustände unter Vibrations-NLTE, sondern auch unter Rotations- und Spin-NLTE beschrieben werden kann [Funke et al., 1998a, Funke and López-Puertas, 1999, Funke et al., 2000a, Funke and López-Puertas, 2000, Funke, 2000a]. Ein Vergleich mit Rotations- und Spintemperaturen, die aus CIRRIS-1A-Daten abgeleitet worden sind, zeigte, dass das entwickelte NLTE-Modell in der Lage ist, die experimentell bestimmte NO-Zustandsverteilung mit hoher Genauigkeit zu reproduzieren [Funke and López-Puertas, 2000] (siehe Abb. 11).

Das entwickelte Modell wurde für die Anwendung auf CO modifiziert und zeigte auch in diesem Fall eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit bisher veröffentlichten Modellen [Funke, 2000a]. Da in den behandelten Fällen die Strahlendichteverteilung in der Atmosphäre die Zustandsbesetzung der Gase unmittelbar beeinflusst, lag es nahe, das NLTE-Modell mit dem Strahlungstransport-Programm KOPRA unmittelbar zu koppeln. Dabei wurde eine Schnittstelle zum Retrieval-Ansatz (s.u.) geschaffen, indem durch das gekoppelte Strahlungstransport-NLTE-Modell die Ableitungen des berechneten Spektrums nach den NLTE-Prozessparametern bereitgestellt werden. Dieser Ansatz ist unseres Wissens einzigartig in der atmosphärischen Fernerkundung (Funke, unveröffentlicht, 2000). Schließlich wurde ein verallgemeinertes NLTE-Modell entwickelt, in dem alle denkbaren Prozesse, die als Quellen oder Senken für die Besetzung eines Vibrations-, Rotations- oder Spin-Zustandes wirken, berücksichtigt sind (Funke und Martín-Torres, unveröffentlicht, 2001). Dieses Modell kann für die Spurengase NO, CO, O<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub>, HNO<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O,

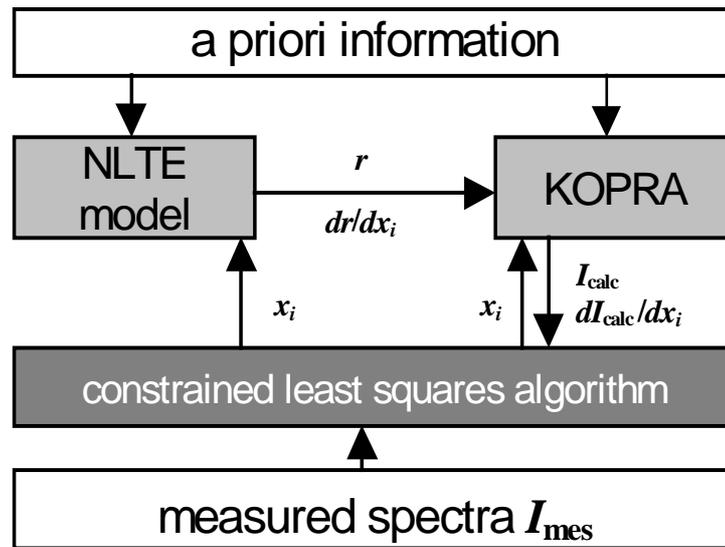


Abbildung 12: Schematische Darstellung des entwickelten NLTE-Retrieval-Ansatzes

$\text{N}_2\text{O}$  und  $\text{OH}$  angewendet werden, indem die für das jeweilige Gas zutreffenden Prozessparameter bereitgestellt werden. Auch das verallgemeinerte NLTE-Modell ist mit KOPRA gekoppelt und stellt als Einheit mit KOPRA die Ableitungen des Spektrums nach NLTE-Prozessparametern bereit.

**3.2.9.2 Entwicklung des NLTE-Retrieval-Ansatzes** Üblicherweise werden im Falle von NLTE Spurengasprofile ausgewertet, indem *a priori* berechnete Vibrations-temperaturprofile verwendet werden (z.B. [Kostsov et al., 1997]). Das gleichzeitige Retrieval von Vibrations-temperaturen und Mischungsverhältnissen führt jedoch oft zu einem schlecht gestellten Retrievalproblem. Am Beispiel von  $\text{NO}$  sind wir daher einen Schritt weitergegangen und haben das Modell zur Vorwärtsberechnung von Vibrations-temperaturen in das Retrieval eingekoppelt (siehe Abb. 12).

Retrievalparameter sind dann neben den Mischungsverhältnissen nicht mehr die Vibrations-temperaturen selbst, sondern die (unsicheren) Eingabeparameter des Vibrations-temperaturmodells, bei  $\text{NO}$  im wesentlichen die Photolyserate von  $\text{NO}_2$  ( $\text{NO}$  wird durch photolytische Spaltung von  $\text{NO}_2$  in einem angeregten Zustand erzeugt). Die Anzahl der Variablen wird dadurch erheblich reduziert, und die Unabhängigkeit der Variablen voneinander wird verbessert. Wir haben nachgewiesen, daß dadurch ein besser gestelltes Inversionsgleichungssystem entsteht, ohne daß exzessiv reguliert werden muß [Funke et al., 1999b, Funke et al., 1999a, Funke et al., 1999c, Funke et al., 2000a, Funke, 2000a, Funke et al., 2001, Funke et al., 2000b]. Die Ableitbarkeit von NLTE-Parametern für  $\text{NO}$ , nämlich der  $\text{NO}_2$ -Photolyserate in der Stratosphäre und der  $\text{N}+\text{O}_2$ -Reaktionsrate in der Thermosphäre, aus MIPAS/ENVISAT-Spektren wurde quantitativ nachgewiesen, und die Retrievalfehler abhängig von der gewählten Höhenauflösung quantifiziert [Funke et al., 2001]. Neben den genannten Parametern ist es ausserdem möglich, die kinetische Temperatur in der Thermosphäre abzuleiten (siehe Kap. 3.2.6.3). Es wurde gezeigt, daß ein regularisierendes Verfahren (wie es in unserem Inversionsansatz realisiert ist) bei der Ableitung von  $\text{NO}$ -Profilen gegenüber einem nicht-regularisierenden Global-Fit-Verfahren große Vorteile bringt, und außerdem die Beobachtungshöhe für die Ableitung von stratosphärischen  $\text{NO}$ -Profilen auf ca. 70 km ausgedehnt werden sollte. Diesem Vorschlag ist die ESA nachgekommen, indem das Standard-Beobachtungs-

Szenario auf 6 - 68 km ausgedehnt worden ist. Weiterhin sollte das Retrieval von NO-vmr im UT/LS-Bereich vom Retrieval des stratosphärischen Profils abgekoppelt und in einem separaten zweiten Schritt durchgeführt werden, um die Retrievalfehler im stratosphärischen Profil so klein wie möglich zu halten [Funke, 2000a].

### 3.2.9.3 Validierung des für NO entwickelten Verfahrens mit Messdaten

Das entwickelte Verfahren für NO sollte mit verfügbaren Meßdaten, z.B. MIPAS-Balloondaten oder CRISTA-Daten, validiert werden. Eine Untersuchung der verfügbaren CRISTA-Daten ergab jedoch sehr schnell, daß die geringere spektrale Auflösung und das relativ hohe Rauschen (bei oberen Tangentenhöhen) eine quantitative Auswertung nicht lohnend machten. Zur Durchführbarkeit der Analyse bei MIPAS-Balloondaten wurde eine theoretische Studie gemacht [Funke et al., 2000a]. Diese Studie ergab, daß aus typischen MIPAS-Balloondaten NO in der unteren Stratosphäre mit einer Genauigkeit von  $10^{-3}$  ppmv bei einer Höhenauflösung von 2.5 km nachgewiesen werden kann. Die abgeschätzte Nachweisgenauigkeit für die Photolyse von NO<sub>2</sub> reicht aus, um den Effekt der NO<sub>2</sub>-Photolyse auf die Zustandsbesetzungsverteilung von NO nachzuweisen. Ein Retrieval von NO und der NO<sub>2</sub>-Photolyse an gemessenen Daten konnte innerhalb der Laufzeit des Vorhabens jedoch nicht mehr durchgeführt werden, weil bis Ende 2000 keine kalibrierten Tag-spektren aus dem MIPAS-Balloonexperiment zur Verfügung standen, und das nächtliche Mischungsverhältnis von NO so gering ist, daß es in den Spektren nicht nachgewiesen werden kann.

### 3.2.9.4 Ausweitung des Verfahrens auf andere Gase

Im Rahmen der Entwicklung des verallgemeinerten NLTE-Modells (siehe Kap. 3.2.9.1) wurde die Ausweitung des oben beschriebenen Retrieval-Verfahrens auf andere Gase, insbesondere CO, O<sub>3</sub>, OH, NO<sub>2</sub> und CO<sub>2</sub>, vorbereitet. Das verallgemeinerte NLTE-Modell liefert nicht nur die Zustandsbesetzungsverteilung im Vibrations-, Rotations- und Spin-NLTE (wo nötig), sondern auch die Ableitung der Zustandsbesetzungsverteilung nach NLTE-Prozess-Parametern. Zusammen mit den von KOPRA bereitgestellten Ableitungen der Spektren nach den Zustandsbesetzungen ergeben sich daraus die im Retrieval benötigten Ableitungen der Spektren nach den NLTE-Prozess-Parametern. Bis zum Ende des Vorhabens konnte die vollständige Implementierung der Ableitungen nach NLTE-Prozess-Parametern für alle in Frage kommenden Gase nicht mehr abgeschlossen werden, so daß Test-Retrievals nicht mehr durchgeführt werden konnten. Allerdings wurden unabhängig davon für die Fälle CO und O<sub>3</sub> Studien mit den selbständigen, gasspezifischen NLTE-Modellen durchgeführt, um den Nachweisfehler des Mischungsverhältnisses von CO bzw. des Mischungsverhältnisses und der Kollisionsraten bei O<sub>3</sub> zu quantifizieren. Beide Studien ergaben, daß die Nachweiswahrscheinlichkeit für die Mischungsverhältnisse, im Falle von CO beschränkt auf die mittlere Stratosphäre und darüber, sehr gut ist. Für Ozon sind in der Mesosphäre Fehler  $\leq 18\%$  zu erwarten [Glatthor et al., 2001]. Die Kollisionsrate für Ozon kann mit ca. 50 % Genauigkeit abgeleitet werden, was angesichts einer Streuung dieser Größe in der Literatur um einen Faktor 5 einen erheblichen Informationsgewinn darstellt [Martín-Torres et al., 2001].

### 3.2.9.5 Einkopplung eines Photolysemodells

Folgende Problematik liegt diesem Thema zugrunde:

In der Dämmerung (d.h. für Beobachtungen nahe des Terminators) kann nicht mehr von einer horizontal homogenen Verteilung des NO/NO<sub>2</sub>-Verhältnisses ausgegangen werden, weil die NO/NO<sub>2</sub>-Konvertierung innerhalb von Minuten nach Sonnenauf- bzw. -untergang geschieht. Ein Sehstrahl, der teilweise beleuchtet wird und sich teilweise in der Dunkelheit befindet, durchmisst damit völlig ver-

schiedene atmosphärische Bedingungen. Ohne Berücksichtigung dieser Umstände würden die NO- und NO<sub>2</sub>-Retrievalergebnisse verfälscht werden, weil 1. starke horizontale Gradienten auftreten, und 2. die NO<sub>2</sub>-Photolyse stark auf die NLTE-Zustandsbesetzungsverteilung von NO einwirkt. Gleichzeitig wird durch diesen Umstand aber auch die Gelegenheit geboten, die NO<sub>2</sub>-Photolyserate abhängig vom Sonnenzenitwinkel aus MIPAS-Messungen zu bestimmen; dies bedeutet eine Verbesserung der Modellierung der NO-Non-LTE- Zustandsverteilung und damit des NO-Retrievals insgesamt; außerdem ist die NO<sub>2</sub>-Photolyserate auch für die atmosphärische Modellierung der Photochemie und damit für das Verständnis des Ozonabbaus in der polaren Dämmerung von grossem Interesse.

Bisher wurde folgendes Konzept zur Behandlung des Problems entwickelt: Die 2-dimensionale Verteilung des NO/NO<sub>2</sub>-Verhältnisses in der Sehstrahlenebene soll aus den MIPAS-Beobachtungen abgeleitet werden, indem ein einfaches Photolysemodell in den Strahlungsübertragungs-, NLTE- und Retrieval-Algorithmus eingekoppelt wird, analog zur Einkopplung des NLTE- oder Mie-Modells. Das Gesamtsystem muss außerdem die Ableitung der Spektren nach der Photolyserate bereitstellen, wobei zu beachten ist, daß diese im NLTE-Modell für NO **und** im Photolysemodell selbst eine Rolle spielt. Dieses Photolysemodell, dessen Hauptparameter die Photolyserate abhängig vom Sonnenzenitwinkel ist, wird benutzt, um on-line in jedem Retrievalschritt die Partitionierung zwischen NO und NO<sub>2</sub> längs des Sehstrahls zu berechnen; Retrievalparameter bei diesem Problem sind das Mischungsverhältnis des für eine Limb-Sequenz horizontal homogen angenommenen NO<sub>x</sub> (die Partitionierung in NO und NO<sub>2</sub> wird vom Modell selbst gelöst) sowie die Photolyserate als Funktion des Sonnenzenitwinkels (d.h. die Parameter einer geeigneten Parametrisierung). Für dieses Retrievalproblem ist der Mess- und Retrievalvektor zu optimieren, eine Durchführbarkeitsstudie zu machen und die erwarteten Ergebnisse hinsichtlich ihrer Fehler, räumlichen Auflösung und Korrelationen zu charakterisieren. Schließlich ist das analysierte und optimierte System auf MIPAS-Daten anzuwenden.

Wegen Verzögerungen bei den anderen Arbeitspunkten und insbesondere durch die umfangreichen und zunächst nicht vorgesehenen Arbeiten zur Entwicklung des verallgemeinerten NLTE-Modells, mit denen der für diesen Arbeitspunkt eingeplante Mitarbeiter ebenfalls betraut war, konnten diese Arbeiten nicht im vorgesehenen Umfang ausgeführt werden. Es soll jedoch angemerkt werden, dass unser Auswertesystem durch die neuesten erfolgten Entwicklungen grundsätzlich mit dem hier beschriebenen Ansatz kompatibel ist; so ist KOPRA z.B. in der Lage, die vom Photolysemodell zu erzeugenden 2-dimensionalen NO- und NO<sub>2</sub>-Verteilungen weiterzuverarbeiten, und das Gesamtsystem ist in der Lage, die Ableitungen der Spektren nach den Parametern eines angekoppelten Modells zu erzeugen und zu verarbeiten. Außerdem wird die NO<sub>2</sub>-Photolyserate im bereits existierenden NLTE-Modell für NO verwendet, und die Ableitungen werden dort bereits korrekt berechnet und vom NLTE-Modell über KOPRA an den Retrievalalgorithmus weitergegeben.

### 3.2.10 Ableitung von Horizontalgradienten

**3.2.10.1 Ansatz auf Basis der Onion-Peeling Methode** Schon 1993 haben wir darauf hingewiesen, daß die gängige Näherung, daß die Atmosphäre nur vertikale, aber keine horizontale Struktur aufweise, in der räumlichen Skala eines Horizontsondierungsexperiments nicht immer gerechtfertigt ist [von Clarmann, 1993]. Entsprechend der damals notwendigen und üblichen *ad hoc* Auswerteschemata schlugen wir eine Strategie vor, dieses Problem zu lösen: Anstelle des Vorgehens von oben nach unten (Onion Peeling), bei dem jede Horizontsondierungssequenz separat ausgewertet wird, favorisierten wir, erst die höchsten Beobachtungen vieler Horizontsondierungssequenzen auszuwerten. Aus diesen könnten dann – vorausgesetzt, die Beobachtungsrichtung ist parallel oder antiparallel zur Flugrichtung des

Satelliten – für jeden Punkt der betrachteten Höhe längs des Orbits der aktuelle Zustandsparameter durch Interpolation ermittelt werden. In einem nächsten Schritt sollten die zweithöchsten Tangentenhöhen ausgewertet werden. Die Zustandsparameter für Luftvolumina in der höchsten Atmosphärenschicht, die der Sehstrahl der zweithöchsten Tangentenhöhe durchläuft, wären dann bereits bekannt. Mit dieser tomographischen, an die Onion Peeling Methode angelehnten Arbeitsweise könnte man sich bis in die tiefsten Atmosphärenschichten vorarbeiten. Leider unterstützten die uns damals zur Verfügung stehenden Strahlungsübertragungsalgorithmen keine horizontalen Inhomogenitäten, so daß unsere Arbeiten über theoretische Betrachtungen und Sensitivitätsstudien nicht hinausgehen konnten.

**3.2.10.2 Jetziger Ansatz** Zugunsten operationeller Auswertbarkeit favorisieren wir jetzt wieder ein Vorgehen, daß Horizontsondierungssequenz um Horizontsondierungssequenz nacheinander abarbeitet. Horizontale Inhomogenitäten werden linear approximiert mit Hilfe der Horizontalgradienten. Auf Basis der Zustandsgrößen der nominalen Geolokation einer Beobachtung und Horizontalgradienten berechnet das Strahlungsübertragungsprogramm KOPRA für jeden Punkt des Sehstrahls die aktuellen Zustandsgrößen. Die Gradienten können bei der Inversion entweder als konstante Parameter oder als Fitparameter gehandhabt werden. Da der Informationsgehalt der Messung über die Horizontalgradienten gering ist, ist Regularisierung im Sinne von Optimal Estimation geplant. Dies stellt sicher, dass das Retrieval stabil bleibt, wenn zu wenig Information in der Messung vorhanden ist, aber dennoch die Fehlerfortpflanzung der Gradienten auf die Targetparameter minimal bleibt. Es ist daran gedacht, soweit verfügbar, die Gradienten aus den MIPAS Online Daten zu ermitteln.

### 3.3 Vor- und Nachbearbeitung

#### 3.3.1 Datenverwaltung

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde eine Anforderungsanalyse bzgl. der Datenhaltung und -verwaltung erstellt und ein Konzept entwickelt, wie diese Anforderungen erfüllt werden könnten. Die Umsetzung des Konzepts erfolgte in Zusammenarbeit mit dem Institut für Angewandte Informatik (IAI), Forschungszentrum Karlsruhe, im Rahmen des Vorhabens 07 UFE 17/2 "Aufbau eines Bodensegments für die wissenschaftliche Auswertung von MIPAS/ENVISAT". Einige Kernpunkte der Anforderungsanalyse und des Konzepts der Datenhaltung sind die folgenden:

1. Ein schneller Zugriff auf eine große Datenmenge ist jederzeit notwendig; dies führte zur Anschaffung eines RAID-Arrays mit gegenwärtig 4.3 TB Speicherkapazität.
2. Es muss Zugriff auf die level-1b-Daten der ESA, sowie auf Level-2 Daten der ESA, des DLR und auf eigene level-2 Daten ermöglicht werden.
3. Daten müssen zusammen mit allen notwendigen Prozessierungsparametern abgespeichert werden, so dass bei eigenen level-2-Daten eine Re-Prozessierung, die zu demselben Ergebnis führt, jederzeit möglich ist. Dies führte zu der Definition einer Dateien-Struktur mit Meta-Daten und Haupt-Daten. Das Datenverwaltungssystem sucht in der Hauptsache nach Datencharakteristika in den Meta-Daten.
4. Die abgeleiteten Daten sollen Projekten (die sich an wissenschaftliche Fragestellungen orientieren) zugeordnet sein, aber der Zugriff auf diese Daten

soll projektübergreifend möglich sein. Es muss eine Visualisierungsmöglichkeit für die bereits vorhandenen Datensätze und ihre Zuordnung zu Projekten geschaffen werden.

### 3.3.2 Initial Guess Datensätze

Die Konvergenz der Datenableitung hängt entscheidend von der Güte der ersten Schätzung ("initial guess") ab; je näher die erste Schätzung am tatsächlichen Profil ist, desto weniger Iterationsschritte braucht das iterative Inversionsverfahren, und desto kürzer ist die aufgewendete Rechenzeit. Daher ist es für den Durchsatz großer Datenmengen und die effiziente Ausnutzung des Rechnersystems von großer Wichtigkeit, sehr gute erste Schätzungen für die abzuleitenden Spurengasprofile zu haben. Andererseits ist es bei den zu erwartenden Datenmengen nicht mehr möglich, die am besten passenden "initial guess" Profile von Hand auszuwählen. Daher wurde ein automatisches System entwickelt, das auf der Basis aller verfügbaren Daten und ihrer Unsicherheiten nach einem vorgegebenen Prioritätsschema eine optimierte erste Schätzung zusammenstellt [Kiefer et al., 2001]. Als Datenbasen werden dabei berücksichtigt:

- Near real time Datenprodukte der ESA
- Produkte des Off-line Prozessors des DFD
- Klimatologische Mittelwerte (CIRA-Referenzprofile, UARS-Mittelprofile etc.)
- ECMWF-Datenprodukte
- Einzelmessungen (MIPAS-B, ATMOS etc.)
- Daten des MSISE90 Modells [Hedin, 1991]
- Räumlich/zeitlich benachbarte Ergebnisse der IMK Datenauswertung

Jeder dieser Datensätze wird außerdem charakterisiert durch seine Unsicherheit, ausgedrückt durch die Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}$ . Wird auf klimatologische Mittelwerte zurückgegriffen, muß unter Umständen gemäß einer mit der Klimatologie mitgelieferten Vorschrift das für den Breitengrad, die Jahres- und Tageszeit passende Profil erzeugt werden. Im Falle der CIRA-Datensätze wurde durch eine Kugelfunktionsanalyse/-synthese eine Inter- und Extrapolationsmöglichkeit in Bereiche ohne klimatologische Daten geschaffen. Die Mischung der einzelnen Beiträge  $\hat{x}_i$  erfolgt im Prinzip durch Wichtung durch die reziproke Unsicherheit  $\hat{\mathbf{S}}_{x_i}^{-1}$  gemäß:

$$\hat{x} = \left( \sum_i^N \mathbf{S}_{\hat{x}_i}^{-1} \right)^{-1} \left( \sum_i^N \hat{\mathbf{S}}_{x_i}^{-1} \hat{x}_i \right). \quad (50)$$

Mit der Interpolationstransformation  $\mathbf{V}$  wird die Interpolation der Daten und der Kovarianzmatrizen auf ein gemeinsames Gitter beschrieben als

$$x_i = \mathbf{V}_i \hat{x}_i, \quad \mathbf{S}_{x_i} = \mathbf{V}_i \hat{\mathbf{S}}_{x_i} \mathbf{V}_i^T. \quad (51)$$

Dabei tritt das Problem auf, daß die  $\mathbf{S}_{x_i}$  singulär werden. Als Ausweg wird die Wichtung

$$\mathbf{W}_i = \mathbf{V} (\mathbf{V}^T \mathbf{V})^{-1} \hat{\mathbf{S}}_{x_i}^{-1} (\mathbf{V}^T \mathbf{V})^{-1} \mathbf{V}^T \quad (52)$$

gebildet, mit deren Hilfe die Mischung der Daten schließlich als

$$x = \left( \sum_i^N \mathbf{W}_i \right)^{-1} \left( \sum_i^N \mathbf{W}_i x_i \right) \quad (53)$$

geschrieben werden kann.

Dabei wird folgende Prioritätsreihenfolge eingehalten:

Ergebnisse der IMK Datenanalyse → DFD Produkte → ESA Produkte → CIRA  
Klimatologie → MSISE90 Modell → Mittelprofile.

Einzelmessungen werden bei guter räumlicher/zeitlicher Nähe vor den klimatologischen Daten gewählt. Durch dieses Schema wird sichergestellt, daß für jede Geolokation auf jeden Fall ein initial-guess-Profil für den Start des Retrievals vorliegt.

### 3.3.3 Qualitätskontrolle der Spektren

In der bisherigen Auswertung der Feldmesskampagnen nahm die visuelle Inspektion der Spektren und der angepassten simulierten Spektren durch den bearbeitenden Wissenschaftler immer einen sehr großen Raum ein, der bei der erwarteten Datenmenge von MIPAS/ENVISAT nicht mehr geleistet werden kann. Es wurden dabei jedoch wichtige Erfahrungen gesammelt, in welche Richtung systematische Fehler in den Spektren oder der *a priori* Information die Anpassung verfälschen. Diese Erfahrung wurde genutzt, um Werkzeuge zu entwickeln, um die Qualität der gemessenen und der best-fit Spektren automatisch beurteilen zu können [Milz, 1998, Milz and von Clarmann, 1997, Milz and von Clarmann, 1999]. Die entwickelten Werkzeuge wurden anhand von MIPAS-Ballon-Spektren getestet. Bei den gemessenen Spektren werden mit geeigneten numerischen Werkzeugen folgende Punkte überprüft:

- Liegen die gemessenen Strahldichtewerte in einem plausiblen Rahmen? Dazu wird überprüft, ob die gemessenen Strahldichtewerte kleiner sind als die Werte der Planck-Funktion für die höchste Temperatur des vertikalen Profils, und einer angenommenen Emissivität von 1, und ob weniger als 15.8 % aller gemessenen Werte kleiner sind als  $-\sigma_R$  bzw. weniger als 2.3% kleiner als  $-2\sigma_R$  (mit  $-\sigma_R$  = Rauschen der Messung).
- Im Falle der Co-Addition von Spektren wird die Varianz des co-addierten Spektrums mit dem Fischer-F-Test überprüft. Damit kann z.B. entschieden werden, ob die Sichtlinien der co-addierten Spektren zusammenfallen oder streuen.
- Im Falle, dass eine axialsymmetrische Linienform erwartet wird (was für MIPAS/ENVISAT nicht ganz stimmt) kann überprüft werden, in welchem Masse die Linienform im gemessenen Spektrum von der Symmetrie abweicht; hierfür wird ein sog. Asymmetrie-Index definiert. Starke Abweichungen von der Symmetrie deuten auf fehlerhafte Phasenkorrektur in der level-1b-Auswertung hin.
- Es gibt Bereiche im Spektrum für die zumindest für grosse Tangentenhöhen nahezu kein Strahlungssignal erwartet wird (sog. spektrale Fenster). In diesen Fenstern wird überprüft, ob der Mittelwert des gemessenen Signals dem Erwartungswert entspricht, ob die Standardabweichung dem spezifizierten Messrauschen entspricht, und ob die Anzahl der Stützstellen, für die der gemessene Wert vom Erwartungswert abweicht, verglichen mit dem Messrauschen der Statistik gehorcht. Werden Abweichungen festgestellt, kann dies auf eine fehlerhaft zugeordnete Tangentenhöhe, auf Fehler bei der Kalibrierung der Spektren oder eine fehlerhafte Temperaturzuordnung hindeuten.

### 3.3.4 Qualitätskontrolle der Datenprodukte

Die Qualitätskontrolle der abgeleiteten Datenprodukte kann unterteilt werden in folgende Aspekte:

- Qualitätskontrolle der Residuenspektren, d.h. der Differenzspektren zwischen Messung und bester Anpassung
- Qualitätskontrolle der abgeleiteten geophysikalischen Größen, insbesondere Plausibilitäts- und Konsistenzchecks

**3.3.4.1 Qualitätskontrolle der Residuenspektren** Erfolgt die Qualitätsüberprüfung der gemessenen Spektren im Rahmen der Vor-Prozessierung vor der eigentlichen level-2-Auswertung, so wird die Qualitätsüberprüfung des best-fits nach dem Retrieval als Nachprozessierungsschritt ausgeführt. Hierbei wird nach charakteristischen Signaturen in den sog. Residuen-Spektren, das sind die Differenzspektren zwischen dem gemessenen Spektrum und der besten Anpassung, gesucht.

- Als erster grundsätzlicher Schritt wird ein  $\chi^2$ -Test durchgeführt, mit dem systematische Abweichungen zwischen Messung und Rechnung aufgedeckt werden. Im idealen Fall, bei dem das Residuum-Spektrum nur durch das Rauschen beschrieben ist, ist der erwartete Wert für  $\chi^2$  gleich der Anzahl der Freiheitsgrade, d.h. die Differenz zwischen Anzahl der unabhängigen Beobachtungen (in unserem Fall Anzahl der unabhängigen spektralen Stützstellen) und Anzahl der unabhängigen Anpassungsparameter. Dabei ist zu beachten, dass aufgrund der numerischen Apodisierung der Spektren die spektralen Stützstellen und aufgrund der angewendeten Regularisierung im Retrieval auch die Anpassungsparameter **nicht** unabhängig voneinander sind. Das Hauptproblem bei der Bestimmung des  $\chi^2$  war damit die Bestimmung der Freiheitsgrade des Systems.

Folgender geeigneter Ausdruck ist in unserem Datenprozessor implementiert:

$$\chi_{normiert}^2 = \frac{\begin{pmatrix} \mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{x}_0 - \mathbf{x} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \mathbf{S}_y & 0 \\ 0 & \mathbf{S}_{a\ priori} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{x}_0 - \mathbf{x} \end{pmatrix}}{m} \quad (54)$$

Hierbei sind  $m$  = die Anzahl der Messpunkte (ohne Berücksichtigung der Korrelationen untereinander),  $\mathbf{y}$  und  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  der Vektor der Messwerte bzw. der angepassten Werte,  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{x}_0$  der Vektor der angepassten bzw. *a priori* Parameter,  $\mathbf{S}_y$  bzw.  $\mathbf{S}_{a\ priori}$  die Kovarianzmatrix der Messung bzw. der *a priori*-Information.

Damit ergeben sich aussagekräftige Werte, die tatsächlich auf systematische Signaturen in den Residuenspektren hindeuten.

- Es werden Korrelationskoeffizienten zwischen dem Spektrum und dem Residuen-Spektrum berechnet; hohe Korrelationen deuten auf systematische Abweichungen an den Positionen der Linien hin, was wiederum auf fehlerhafte Annahmen über das Temperatur- und Druckprofil, die abgeleiteten oder als *a priori* Information verwendeten vmr-Profilen oder die Vibrationstemperaturen zurückgeführt werden kann.
- Es wird nach Funktionen nullter bis zweiter Ordnung bzw. periodischen Funktionen gesucht, die dem Spektrum überlagert sind. Dabei wird die entsprechende Funktion an das Residuen-Spektrum angefitet, anschliessend vom Residuen-Spektrum abgezogen, und die Summe der Fehlerquadrat (rms) vor und nach der Korrektur mit der entsprechenden Funktion gebildet. Eine signifikante Reduktion des rms deutet auf die Überlagerung einer solchen Funktion

hin. Ursachen dafür können Fehler in der Strahldichte-Kalibrierung, Fehler in der Modellierung des Strahldichte-Kontinuums (bedingt durch weit entfernte Linienflügel oder Aerosol-Beiträge), und bei periodischen Funktionen "Spikes" im Spektrum oder sog. *channeling*-Effekte sein.

- Symmetrische Strukturen im Residuen-Spektrum um die Position von Spektrallinien herum weisen auf fehlerhafte Beschreibung der Linienform hin. Radialsymmetrische Strukturen werden dabei von einer nicht korrekten Linienposition, d.h. einer fehlerhaften Frequenzkalibrierung, oder von einer fehlerhaften Phasenkorrektur erzeugt, während axialsymmetrische Strukturen von nicht korrekten Intensitäten und/oder Breiten, d.h. von fehlerhaften Annahmen über das Temperatur- oder vmr-Profil, erzeugt werden. In beiden Fällen wird ein Asymmetriekoeffizient berechnet, dessen Größe ein Maß für die beobachtete Symmetrie ist und damit Hinweise auf mögliche Fehlerquellen in der Auswertung gibt.

### 3.3.4.2 Qualitätskontrolle der abgeleiteten geophysikalischen Größen

Für die Qualitätskontrolle der abgeleiteten geophysikalischen Größen sind eine Reihe von statistischen Untersuchungsmethoden vorgesehen.

- Breitenzonen-Mittelwerte werden mit klimatologischen Mittelwerten aus der Initial-guess-Datenbank verglichen, um eine systematische Abweichung festzustellen.
- Die globale Verteilung des Mischungsverhältnisses einiger Spurengase wie Ozon kann in guter Näherung als gauss-förmig angesehen werden (D. Lary, Vortrag beim TROPOSAT-Workshop, Frascati, April 2001). Global ermittelte Spurengas-Mischungsverhältnisse werden daher auf ihre statistische Verteilung hin überprüft.
- Korrelationen von Spurengasen bzgl. ihres vertikalen Profils werden auf Basis eines großen Datensatzes auf ihre Plausibilität hin überprüft; so werden z.B. für anthropogene Quellgase positive Korrelationen erwartet.

### 3.3.5 Visualisierung der Ergebnisse

Als geeignetes Werkzeug für die Visualisierung der Ergebnisse, d. h. die Verteilung geophysikalischer Parameter, konnte das frei verfügbare Java- bzw. C++-Werkzeug VisAd/Vis5D (Quelle: UCAR, Boulder, bzw. University of Wisconsin) gefunden werden, mit dem es möglich ist, Daten auf vierdimensionalen regelmäßigen oder unregelmässigen Raum-Zeit-Gittern als 2-D oder 3-D Verteilungen farbige darzustellen; d.h. dass mit diesem Software-Werkzeug dreidimensionale räumliche Verteilungen ohne Berücksichtigung des Zeitpunkts der Messung dargestellt werden können, oder beliebige zweidimensionale Schnitte (z.B. längs der Orbitalebene), oder viele andere Darstellungen mehr. Das System zeichnet sich durch hohe Flexibilität aus.

Für die Darstellungen, die dem Ableitungsprozess näher sind und in erster Linie als Diagnosewerkzeuge gebraucht werden, wurden im Haus Entwicklungen vorangetrieben. Zu diesen Darstellungen gehören Spektren und Residuenspektren, Profile längs des Orbits (sog. Curtain-Plots), Averaging kernels, Mittelwerte von Profilen oder Residuenspektren, u.v.a.m..

### 3.3.6 Datenassimilation

Um aus den MIPAS-Spurengasprofilen globale Karten erzeugen zu können, sollten diese in Raum und Zeit interpoliert werden können. Die 4-dimensionale Interpolation kann geschehen durch die Verwendung eines globalen chemischen Transportmo-

dells (CTM), das sowohl den Transport der Spurenstoffe als auch deren chemische Weiterentwicklung beschreiben kann. Am IMK steht ein solches Modell (KASIMA) zur Verfügung. Mit Hilfe dieses Modells können die von MIPAS gelieferten Daten raumfüllend und in Vorwärtsrechenritten global auf eine gegebene Uhrzeit interpoliert werden. Das Modell wird durch das Einfüttern immer neuer Messpunkte "angetrieben". Diskrepanzen in den Daten, wie sie bei der unmittelbaren Darstellung in globalen Karten durch den zeitlichen Versatz der Messungen auftreten würden, werden dadurch eliminiert. Dieses Verfahren erlaubt den Vergleich mit anderen Messungen, wie es z.B. bei der Validierung der Daten benötigt wird, und auch den Vergleich mit anderen Modellrechnungen, deren Ergebnisse üblicherweise global zu einer einheitlichen Uhrzeit dargestellt werden. Die hier beschriebene einfache Vorstufe der Datenassimilation ist ohne weitere Entwicklungsarbeiten möglich und wird eingesetzt, sobald MIPAS-Daten zur Verfügung stehen.

Darüberhinaus ist das Konzept der 4-D-Var-Datenassimilation ein innovatives Verfahren zur Steuerung von atmosphärischen Modellen mit Hilfe gemessener Daten. Dabei werden geeignete Modellparameter des CTMs an die Felder gemessener Daten nach dem Verfahren der kleinsten Abweichungsquadrate angepaßt. Dabei fließen sowohl Fehler der Messung als auch Fehler des Modells in die Anpassung ein. Das Ergebnis dieses Verfahrens ist nicht nur die globale Verteilung gemessener und nicht gemessener Spurengase für einen bestimmten Zeitraum, sondern auch eine Beurteilung der Qualität der Mess- und Modelldaten, sowie ein an die Messung optimal angepasster Satz von Modell-Parametern. Sprünge in der zeitlichen Entwicklung von Spurengasverteilungen, wie sie in dem vereinfachten, oben beschriebenen Verfahren beim Einfüttern eines neuen Messpunktes zwangsläufig auftreten, werden bei dieser Klasse von Verfahren vermieden. Diese Form der Datenassimilation wird mit Hochdruck von einigen renommierten Gruppen in Europa, gerade für die zukünftige Ausnutzung der ENVISAT-Daten, vorangetrieben. Entwicklungsarbeiten auf diesem Gebiet überschreiten die Kapazitäten unserer Gruppe bei weitem. Es ist uns jedoch im Laufe des vorliegenden Vorhabens gelungen, Kontakte zu den relevanten Gruppen zu knüpfen und gemeinsame Projekte zu beginnen oder vorzubereiten. Folgende Kontakte und gemeinsame Projekte zur Verwendung von MIPAS-Produkten in der Datenassimilation existieren bereits oder werden in Kürze anlaufen:

- Im Rahmen des AFO-2000 Vorhabens SACADA werden wir MIPAS-Daten bereitstellen, um die in diesem Vorhaben entwickelten Datenassimilations-Verfahren zu validieren. Damit leisten wir in diesem Vorhaben einen wesentlichen Beitrag zur Weiterentwicklung des Stands des Wissens auf dem Gebiet der Datenassimilation. Über die Validierung hinaus werden wir auch, orientiert an wissenschaftlich interessanten Episoden, assimilierte Karten gemessener und nicht gemessener Datenprodukte erhalten. Wegen der beschränkten Auswertekapazität sind die aus MIPAS-Standardprodukten erzeugten assimilierten Karten eine wichtige Ergänzung der MIPAS-Datenprodukte um nicht direkt abgeleitete Spurengase *und* nicht ausgewertete Geolokationen.
- Daneben sind wir in eine ESA-Studie zur Datenassimilation von MIPAS- und GOMOS-Daten als Berater zu technischen Fragen bzgl. der MIPAS-Datenprodukte involviert ("Assimilation of Atmospheric Composition Measurements for Future Atmospheric Chemistry Mission, ESA ITT AO/1-3608/99/NL/DC, Leitung: Dr. David Lary, Cambridge University; Beginn der Studie: 8. Mai 2000, Dauer: 18 Monate).
- Innerhalb des NERC (Natural Environment Research Council) von Großbritannien hat sich das Data Assimilation Research Centre (DARC) mit ausschließlich britischen Partnern (Leitung: Dr. William Lahoz, Dr. Alan O'Neill)

gebildet. Ziel dieser Gruppe ist die Weiterentwicklung von Datenassimilationswerkzeugen für die Anwendung auf ENVISAT-Daten. Obwohl wir nicht zu diesem Zentrum gehören (können), werden wir regelmäßig informiert und zu Arbeitstreffen eingeladen, um das technische Know-how bzgl. der MIPAS-Daten einfließen zu lassen.

- In Beantwortung des ESA Announcements of Opportunity wurde das folgende Proposal für die Cal/Val-Phase eingereicht, bei dem wir Partner sind: Evaluation of Envisat data using a Numerical Weather Prediction assimilation system (Leitung: Dr. William Lahoz). Ziel dieses Proposals ist es, die Konsistenz zwischen den ENVISAT Daten und dem GCM (General circulation model), das für die Assimilation benutzt wird, abzuschätzen, die Fehlercharakteristika der ENVISAT Level-2 Daten und der level-3 und level-4 assimilierten Daten abzuschätzen, und eine unabhängige Bewertung der Genauigkeit der ENVISAT-Daten beizusteuern.
- In dem zur Zeit in Verhandlung befindlichen Vorhaben zum Fünften Rahmenprogramm der EU "Towards the Prediction of Stratospheric Ozone III: The Partitioning of the NO<sub>y</sub> Components" ist geplant, dass in Zusammenarbeit mit Partnern aus Norwegen (NILU) und England (Cambridge) die von uns beigesteuerten MIPAS-Daten mit verschiedenen Verfahren (synoptische Abbildung, Kalman-Filterung, 4-D-Var-Datenassimilation) assimiliert werden. Geplanter Vorhabensbeginn ist Januar 2002.
- In Beantwortung des ESA-ITT AO/1-3791/01/NL/MM ("Consideration of Mission Studying Chemistry of the UTLS") wurde von uns zusammen mit Partnern des Rutherford Appleton Laboratories und der Universität Cambridge eine Studie vorgeschlagen; hierin soll unter anderem abgeschätzt werden, welchen Nutzen horizontal und vertikal hochaufgelösten geophysikalischen Daten, wie sie aus einem potentiellen MIPAS-Nachfolge-Experiment zur Verfügung gestellt werden könnten, für die numerische Wettervorhersage im Rahmen ihrer Verwendung in der Datenassimilation mit einem GCM haben könnten. Eine Nachricht über die Annahme dieses Vorhabens-Vorschlags steht noch aus.

### 3.3.7 Ableitung höherwertiger Datenprodukte

Im operationellen Rahmen und für die ENVISAT-Standardprodukte der ESA und des DLR hat die Ableitung der sog. level-3-Karten (synoptisierte Karten der ENVISAT-Datenprodukte) inzwischen DFD/DLR übernommen. Eine Bedarfsanalyse für die dort eingesetzten Verfahren hat ergeben, daß diese auf unsere Datenprodukte vermutlich nicht angewendet werden können, weil eine so große kontinuierliche räumlich/zeitliche Abdeckung, wie diese Verfahren zur Initialisierung benötigen, von uns aufgrund der beschränkten Prozessierungs-Kapazität nicht bereitgestellt werden können. Für level-3-Karten unserer eigenen Datenprodukte werden wir daher auf die im Kapitel 3.3.6 beschriebenen vereinfachten Verfahren zur Synoptisierung bzw. in Einzelfällen auf volle 4-D-var-Datenassimilation zurückgreifen.

Weitere höherwertige Datenprodukte wie Korrelationen zwischen Spurengasen, saisonale, monatliche oder Breitenzonen-Mittelwerte können durch die bereitgestellten Visualisierungswerkzeuge (siehe Kap. 3.3.5) erzeugt werden. Weitere Werkzeuge werden während der Interpretation der MIPAS-Daten bedarfsorientiert entwickelt.

## 4 Validierungs- und Charakterisierungsaktivitäten

### 4.1 Validierung des Vorwärtsmodells

#### 4.1.1 Kreuzvalidierung mit anderen Modellen

Mittlerweile ist das IMK-eigene Vorwärtsmodell KOPRA gründlich validiert. Die folgenden Arbeitsschritte haben dazu beigetragen:

- **Kreuzvalidierung mit dem RFM:** In einem ersten Schritt wurde KOPRA gegen das sogenannte "Reference Forward Model" kreuzvalidiert, das an der Universität Oxford im Auftrag der ESA als Referenzprogramm entwickelt wurde. Hierbei zeigte sich, daß beide Modelle grundsätzlich zuverlässig arbeiten. Alle Diskrepanzen konnten mit Implementierungsdetails schlüssig erklärt werden [Glatthor et al., 1999a, Glatthor et al., 1999b].
- **Kreuzvalidierung im Rahmen von RSMA:** Die Internationale Strahlungskommission (IRC) hat eine Arbeitsgruppe zur Fernerkundung der mittleren Atmosphäre eingerichtet (RSMA, Remote Sensing of the Middle Atmosphere). Eine Untergruppe, die derzeit vom IMK koordiniert wird, kümmert sich um den Vergleich von Strahlungsübertragungsmodellen bei non-LTE Anwendungen. Auch bei diesem Test zeigte sich, daß KOPRA zuverlässig arbeitet [von Clarmann et al., 2000d]
- **Kreuzvalidierung im Rahmen von AMIL2DA:** AMIL2DA (Advanced MIPAS Level-2 Data Analysis) ist ein "shared-cost project co-funded by the Research DG of the European Commission within the RTD activities of a generic nature of the Environment and Sustainable Development sub-programme (5th Framework Programme)." Ein bedeutendes Arbeitspaket in diesem Projekt ist die Kreuzvalidierung der Strahlungsübertragungsmodelle von fünf europäischen Arbeitsgruppen. Auch bei diesem Vergleich zeigte sich, daß KOPRA zu den leistungsfähigsten und genauesten Programmen dieser Art gehört [von Clarmann et al., 2001a].

#### 4.1.2 Test mit Realdaten

- **Validierung im Rahmen der Vorbereitung der IASI-Datenauswertung:** Im Rahmen der Entwicklung eines ultraschnellen Strahlungsübertragungsprogramms für die Auswertung von Daten des zukünftigen Nadirsounders IASI (Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) wurde ein Vergleich verschiedener Modelle mit Nadirmessungen von Flugzeugen durchgeführt [Tjemkes et al., 2000]. Der Vergleich wurde von EUMETSAT koordiniert und es beteiligten sich elf Gruppen daran. Die zugrunde liegenden Flugzeugmessungen des HIS und des ARIES Interferometers waren unter vollständig verschiedenen Bedingungen aufgenommen worden (mittlere Breiten und Tropen). Es zeigte sich, dass KOPRA auch im Vergleich mit realen Messdaten zu den besten Modellen gehört.
- **Auswertung der im Hause durchgeführten FTIR-Messungen vom Boden, vom Ballon und vom Flugzeug aus:** KOPRA stellt mittlerweile am IMK die Grundlage der Auswertung verschiedenster Fernerkundungsexperimente mit Interferometern dar.

Bei bodengebundenen solaren Absorptionsmessungen mit extrem hochauflösenden FTIR-Geräten wird aus der Form der Spektrallinien Profilinformation von Spurengasen gewonnen. Hierzu ist neben der exakten Simulation

der atmosphärischen Prozesse, die die Linienform beeinflussen, eine genaue Kenntnis und Berechnung der instrumentellen Linienfunktion notwendig. Die hervorragenden Ergebnisse der Auswertung sprechen für sehr gute Modellierung beider Effekte mittels KOPRA [Hase et al., 2000].

Die Auswertung der MIPAS-B2-Messungen wird seit Flug 9 (Januar 2001) mit KOPRA und einem auf der Tikhonov-Regularisierung aufbauenden, einfachen Retrieval-Werkzeug [Höpfner et al., 2000a] durchgeführt. Bei älteren Flügen (1995 – 1999) wird seit etwa einem Jahr die Ableitung der Freone (FCKW-11 und FCKW-12) mit KOPRA durchgeführt. Die gemessenen Spektren werden sehr gut beschrieben, und die ersten vorläufigen Ergebnisse sind konsistent mit unabhängigen Messungen (Wetzel, persönliche Mitteilung, 2001). Ausserdem wurde aus den Messungen von März 1997 bis April 1999 ClONO<sub>2</sub> mit KOPRA unter Verwendung neuer Absorptions-Wirkungsquerschnitte von Birk und Wagner [Birk and Wagner, 2000] abgeleitet. Die aus verschiedenen Banden abgeleiteten Mischungsverhältnisse sind untereinander konsistenter als alte Ergebnisse, die Anpassungs-Qualität ist besser, d.h. systematische Abweichungen zwischen Messung und Simulation sind kleiner, und die abgeleiteten Mischungsverhältnisse sind niedriger und damit wahrscheinlicher als alte Werte [Oelhaf et al., 2000].

Die Auswertung von Messungen des flugzeuggetragenen Spektrometers MIPAS-STR basiert ebenfalls auf KOPRA [Höpfner et al., 2000a, Höpfner et al., 2000b, Höpfner et al., 2001a]. Umfangreiche Vergleiche der Ergebnisse mit extern verfügbaren Daten beweist dabei die korrekte Funktionsweise des Modells [Lessenich, 2000]. Am Beispiel der Datenverarbeitung von MIPAS-STR zeigt sich auch die Flexibilität von KOPRA. Bei diesem Experiment wird nicht nur in Horizontsondierung, sondern auch unter verschiedenen Winkeln in Aufwärtssondierung gemessen. Diese unterschiedlichen Blickrichtungen werden während eines Programmlaufs in optimierter Weise verarbeitet. Zur Auswertung der bis zu 80 limb-scan-Messungen von MIPAS-STR während eines Flugs wurde eine quasi-operationelle Auswertung mit KOPRA realisiert. Diese Anwendung auf relativ grosse Datenmengen zeigt, dass KOPRA auch für einen quasi-operationellen Einsatz bestens geeignet ist.

## 4.2 Validierung des Auswerteprozessors

Parallel zur Prozessorentwicklung wurde die jeweils aktuelle Prozessorversion stets umfangreichen Tests unterzogen. In einem ersten Schritt wurde die mathematische Richtigkeit und Grundfunktionalität mit akademischen Testfunktionen verifiziert. Danach wurden sukzessive die Schnittstellen zum Strahlungsübertragungsprogramm KOPRA getestet. Beginnend mit bewusst einfach gehaltenen Testfällen, deren Ergebnisse unmittelbar nachvollziehbar sind (eine unbekannte Variable, ein Auswertefenster) wurden die Testfälle durch Vergrößerung der Höhenbereichs, dichtere Darstellung der Höhenprofile, Hinzunahme weiterer Auswertefenster sowie Berücksichtigung weiterer Variablen schrittweise verallgemeinert und immer besser der Realität angepaßt. Das schrittweise Vorgehen erlaubte stets das effektive Auffinden von Fehlern, da immer ein verstandener, geringfügig einfacherer Testfall als Referenz vorlag. Im Zuge der Tests wurden auch die Feineinstellung diverser Regularisierungsparameter (Konvergenzschranken, Iterationsdämpfer nach Levenberg-Marquardt, Regularisierungsstärke, weitere Schwellwerte für Kontrollabfragen) vorgenommen.

Zur Validierung des MIPAS-Datenprozessors erfolgten erste Testretrievals der sogenannten "Haupt-Target-Parameter" Temperatur, Sichtlinie (LOS), H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O, O<sub>3</sub>, HNO<sub>3</sub> und NO<sub>2</sub> an mit KOPRA berechneten synthetischen Meßspektren. Die

”Meßspektren” wurden mit den von der ESA gemessenen Rauschwerten gestört, weitere systematische Fehlerquellen wurden nicht berücksichtigt. Als Auswertefenster wurden in der Regel aus 10 bzw. 30 sogenannten ”Microwindows” bestehende Okkupationsmatrizen für mittlere Breiten verwendet, die mit dem Karlsruher Okkupations-Matrix-Algorithmus (KOMA) berechnet worden waren.

Ein typisches RetrievalszENARIO sah beispielsweise so aus:

- Retrievalparameter: Höhenprofil des Haupt-Target-Parameters und 1 Kontinuumsprofil je Microwindow, teilweise zusätzlich 1 Offsetprofil je Microwindow.
- Messung: 16 Tangentenhöhen zwischen 8 und 53 km mit 3 km Abstand (ESA-Standardmessmodus bis 1999) bzw. 17 Tangentenhöhen zwischen 6 und 68 km mit 3 km Abstand bis 42 km, darüber gröbere Höhenauflösung (ESA-Standardmessmodus ab 1999).
- Retrievalgrid für das jeweilige Haupt-Target: 67 bzw. 79 Retrievalhöhen von 0 bis 120 km mit 1 km Abstand bis 55 bzw. 70 km, darüber gröbere Höhenauflösung.
- Retrievalgrid für die Kontinuumsprofile: 39 Retrievalhöhen von 0 bis 120 km; mit 1 km Abstand bis 32 km, darüber gröbere Höhenauflösung.
- Initial-guess- und *a-priori*-Profile: Meist gegenüber dem Referenzprofil mit dem Faktor 0.8 skalierte, aber auch vertikal verschobene Profile.

Dieses RetrievalszENARIO entspricht ungefähr dem einfachsten Fall der geplanten operationellen Auswertung. Darüberhinaus wurden auch simultane Anpassungen von zwei Zielgasen gemeinsam durchgeführt. Da das verwendete Retrievalgrid um den Faktor 3 feiner als das Meßgrid ist, muß die Lösung der Retrievalgleichung durch eine Nebenbedingung regularisiert werden. In den Tests wurde hauptsächlich für den gesamten Höhenbereich die Regularisierung nach Tikhonov und Phillips mit dem Operator der ersten Ableitung  $\frac{d}{dz}$  verwendet.

Ziel der Tests war, empirisch für die verschiedenen Haupt-Target-Parameter geeignete Werte des Regularisierungsparameters  $\gamma$  sowie weiterer Steuerparameter, wie z.B. Konvergenzschranken, zu finden. Zur Bestimmung von geeigneten  $\gamma$ -Profilen wurden, ausgehend von schwacher Regularisierung, diejenigen  $\gamma$ -Werte ermittelt, bei denen die Abweichung zwischen berechnetem und ”wahrem” Profil gerade innerhalb der statistischen Erwartung lagen.

Abb. 13 zeigt das Ergebnis eines  $O_3$ -Profil-Retrievals anhand einer aus 10 Microwindows bestehenden Okkupationsmatrix. Die zusätzlich in jedem Microwindow angepaßten Kontinuumsprofile sind hier nicht dargestellt. Das  $O_3$ -initial-guess-Profil wurde auf 80% des Referenzprofils skaliert, das initial-guess-Profil des Kontinuums war identisch mit dem Referenzprofil. In der obersten Reihe von Abb. 13 sind links das initial-guess- (durchgezogen) und Referenzprofil (gestrichelt), in der Mitte das angepaßte (durchgezogen) und das Referenzprofil (gestrichelt) und rechts das initial-guess- (gestrichelt) und das angepaßte (durchgezogen) Profil dargestellt. Die weiteren Reihen zeigen Ergebnisse der einzelnen Iterationsschritte: links die Differenz zwischen angepaßtem und initial-guess-Profil, in der Mitte die Abweichung zwischen angepaßtem und Referenzprofil und rechts zur Veranschaulichung des Konvergenzverhaltens die Differenz zwischen dem  $i$ -ten und  $(i-1)$ -ten angepaßten Profil. Bei einer vorgegebenen Konvergenzschranke von 10% des in den Parameterraum übertragenen Rauschfehlers konvergierte das Retrieval nach vier Iterationsschritten. Die Übereinstimmung zwischen dem angepaßten und dem ”wahren”  $O_3$ -Profil ist bis in ca. 40 km Höhe sehr gut. Die Abweichung im Bereich des  $O_3$ -Maximums beträgt etwa 1%. Zwischen 50 und 60 km treten Differenzen von ungefähr 10% auf.

Abb. 14 zeigt das Ergebnis eines komplizierteren Tests für die Retrievalparameter  $\text{CH}_4$  und Kontinuum, wobei nur die  $\text{CH}_4$ -Profile dargestellt sind (Bedeutung der einzelnen Kurven siehe Abb. 13). Hier wurde das  $\text{CH}_4$ -Referenzprofil gegenüber dem first-guess-Profil abgesenkt und das first-guess-Profil des Kontinuums auf 80% des Referenzprofils skaliert. Die verwendete Occupationsmatrix bestand aus 30 Microwindows, somit waren neben dem  $\text{CH}_4$ -Profil 30 Kontinuumsprofile anzupassen. Bei der gleichen Konvergenzschranke wie im vorigen Beispiel waren 7 Iterationen bis zur Erfüllung des Konvergenzkriteriums nötig. In der Troposphäre, der unteren und mittleren Stratosphäre treten Abweichungen von ca. 10% zwischen angepaßtem und "wahrem"  $\text{CH}_4$ -Profil auf, in der oberen Stratosphäre von bis zu 20%. Diese Differenzen sind größer als beim  $\text{O}_3$ -Retrieval, aber innerhalb des dreifachen Meßwerterauschens.

Abb. 15 zeigt das Ergebnis von 10 Test-Retrievals eines  $\text{O}_3$ -Profils, bei denen jeweils unterschiedliche Rauschmuster auf die simulierten Spektren gegeben worden sind. Die Abweichungen vom Referenzprofil liegen innerhalb der durch die Kovarianzmatrix des Spektrums vorhergesagten Fehlerschranken (dicke Linie); damit ist die korrekte Berechnung der Kovarianzmatrix der Messung sowie die Konvergenz des Prozessors und die Regularisierung validiert.

Die bisher durchgeführten Retrievaltests zeigen, daß der Datenprozessor im Zusammenspiel mit den vorberechneten Okkupationsmatrizen etc. prinzipiell funktioniert. Als weitere Tests sind kompliziertere Retrievalszenarios und Anwendung auf wirkliche Meßdaten (MIPAS-Ballon-Spektren) vorgesehen. Weiterhin befindet sich ein Computerprogramm zur objektiven Bestimmung optimaler Profile von Regularisierungsparameter kurz vor dem Abschluß. Mit diesem Hilfsmittel, das eine bessere Feineinstellung der Regularisierungsparameter ermöglichen wird, werden sich u.U. die vorgestellten Ergebnisse, insbesondere das  $\text{CH}_4$ -Retrieval, weiter verbessern lassen.

Über diese Tests hinaus ist eine *end-to-end* Validierung geplant, durch die auch die Fehlerfortpflanzung durch die einzelnen Rekonstruktionsschritte vom Sichtlinien- und Temperaturretrieval über die Analyse der Hauptgase bis zu den exotischen Spezies enthält. Dieser Arbeitsschritt steht unmittelbar bevor. Es konnten dafür weitere Drittmittel eingeworben werden.

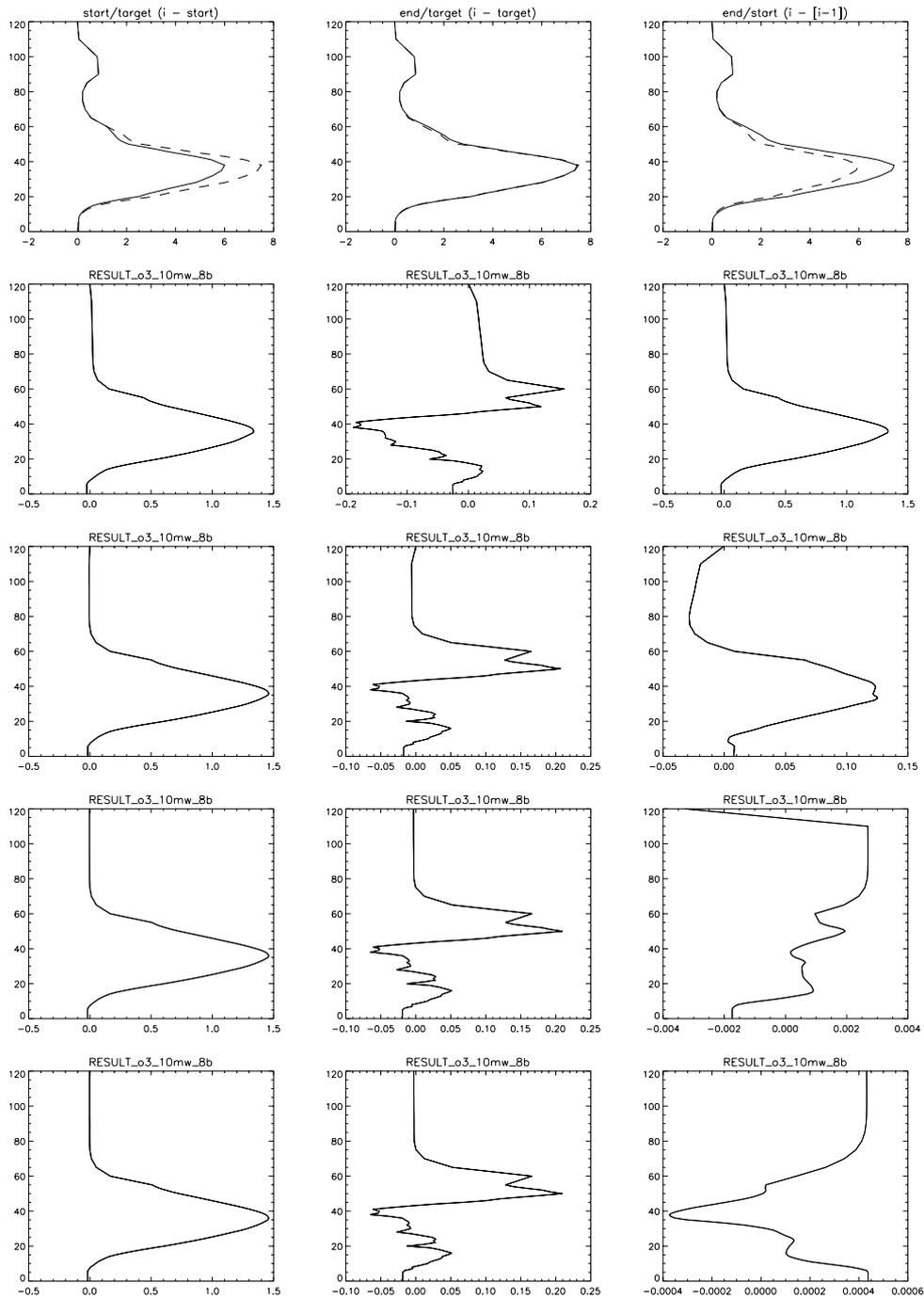


Abbildung 13:  $O_3$ -Profil-Retrieval, 10-Microwindow (MW) Okkupationsmatrix, zusätzlicher Retrievalparameter: 1 Kontinuumsprofil je MW (nicht dargestellt). Oberste Reihe links: initial-guess- (durchgezogen) und Referenzprofil (gestrichelt), in der Mitte: angepaßtes (durchgezogen) und Referenzprofil (gestrichelt), rechts: initial-guess- (gestrichelt) und angepaßtes (durchgezogen) Profil. Weiteren Reihen: Ergebnisse der einzelnen Iterationsschritte; links: Differenz zwischen angepaßtem und initial-guess-Profil, Mitte: Abweichung zwischen angepaßtem und Referenzprofil, rechts: Differenz zwischen  $i$ -tem und  $(i-1)$ -tem angepaßten Profil.

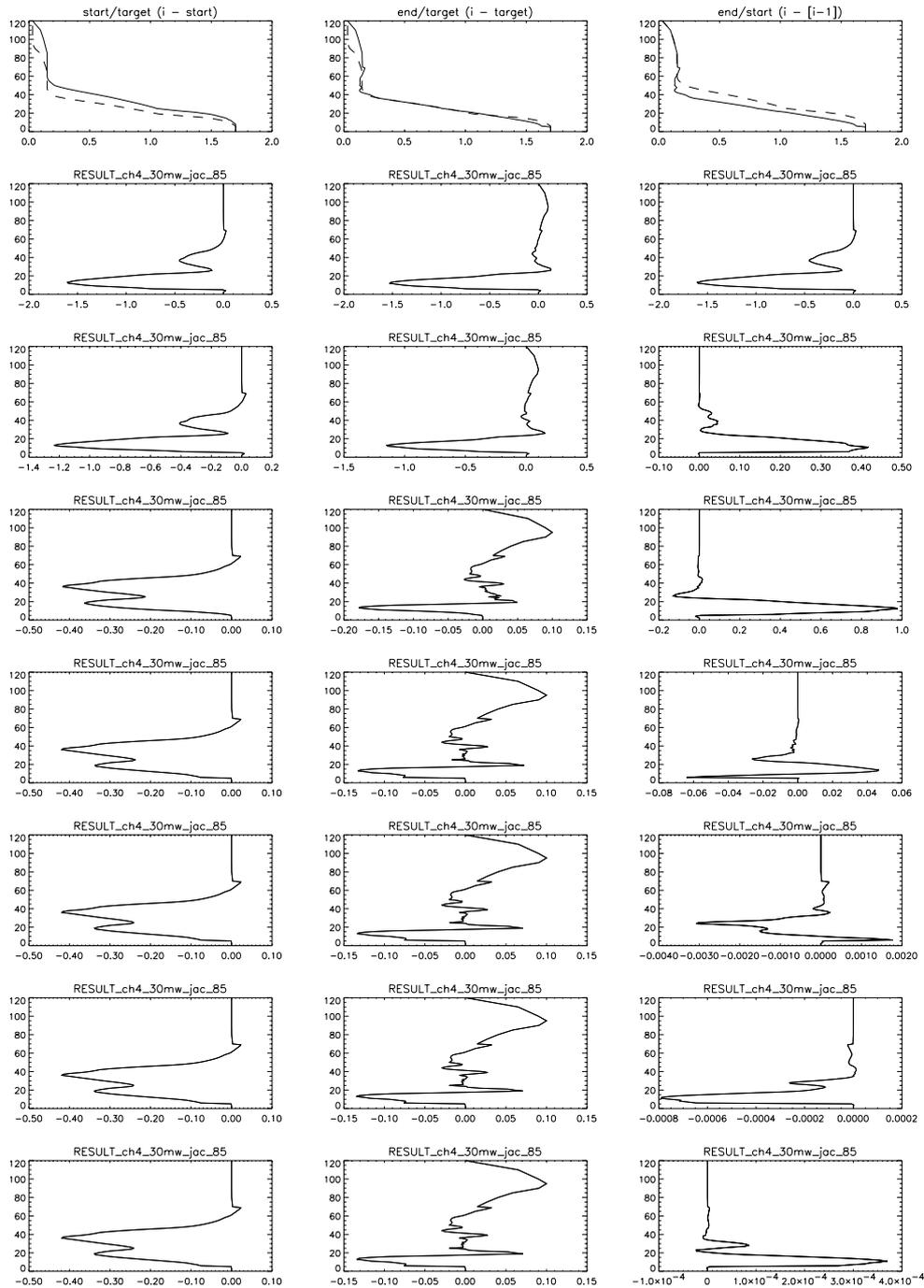


Abbildung 14: CH<sub>4</sub>-Profil-Retrieval, 30-Microwindow (MW) Okkupationsmatrix, zusätzlicher Retrievalparameter: 1 Kontinuumsprofil je MW (nicht dargestellt). Gleiche Bedeutung der Kurven wie in Abb. 13.

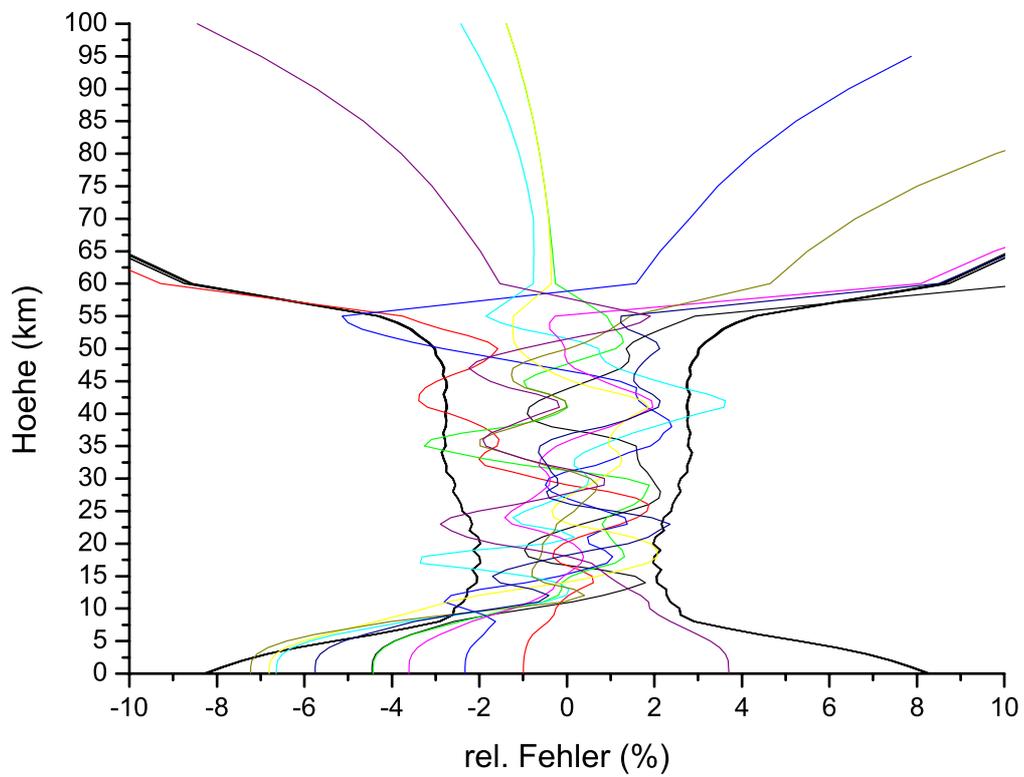


Abbildung 15: Abweichungen der Ergebnisse von 10 Ozon-Testretrievals mit unterschiedlich durch Rauschen gestörten Spektren vom Referenz-Profil. Die individuellen Abweichungen liegen alle im Rahmen des durch die Kovarianzmatrix der Messung vorhergesagten Fehlerbereichs (dicke Linie).

### 4.3 Charakterisierung der MIPAS Level-1-b Daten

In den Anträgen zum vorliegenden Bericht war davon ausgegangen worden, daß im Rahmen dieser Arbeiten auch die eigentlichen Validierungsarbeiten erfolgen sollten. Da sich der Start des Envisat jedoch massiv verzögert hat, und im Antragszeitraum keine Daten vorlagen, beschränkten sich unsere Arbeiten auf das Ausarbeiten methodischer Ansätze und vorbereitende Arbeiten.

Das IMK wird bei der Charakterisierung der MIPAS Level-1-b Daten eine wichtige Rolle spielen. Datenzugriff in der Commissioning Phase ist durch das ESA-AO Proposal "INFLIC" gesichert. Die Validierung bzw. Charakterisierung erfolgt sowohl als Auftragnehmer der ESA als auch im eigenen Interesse zur Qualitätssicherung der am IMK zu generierenden Daten. Eine Finanzierung der eigentlichen Charakterisierungsarbeiten wurde durch die ESA in Aussicht gestellt. Da die Entwicklung der Methodik jedoch nicht durch die ESA unterstützt wurde, musste dazu auf Mittel des vorliegenden Forschungsprojektes zurückgegriffen werden. Allein die Mittelbeschaffung für das INFLIC Proposal (die bis heute nicht erfolgreich abgeschlossen sind) impliziert bislang nicht endende Anstrengungen, da in der Anfangsphase die Zuständigkeit hierfür von ESA und DLR wie ein Tischtennisball hin- und hergespielt wurde, was zum Schreiben immer neuer Anträge zu dem gleichen Forschungsprojekt führte. Nachdem sich nun DLR und ESA offenbar geeinigt haben, dass die ESA für die Finanzierung der eigentlichen INFLIC-Arbeiten zuständig ist, hat es die ESA bis heute nicht fertiggebracht, einen entsprechenden Vertragsentwurf zu unterbreiten. Aufgrund dieser Finanzierungslücke mussten die Vorarbeiten anderweitig finanziert werden.

#### 4.3.1 Analyse des Betrags des Rauschens

Als Teil des Level-1 Datenproduktes wird die ESA NESR-Werte liefern, die aus der Analyse der Imaginärteile der Spektren herzuleiten sind. Diese NESR-Werte werden wir analysieren, indem die Standardabweichung spektraler Daten im Realteil der Spektren in Wellenzahlbereichen bzw. Höhenbereichen, wo der Signalerwartungswert Null ist, berechnet wird. Die genaue Kenntnis der NESR ist wichtig für die Auswertungen, da die Wirkung der Regularisierungsoperatoren davon abhängt. Die hierfür nötigen Werkzeuge wurden spezifiziert.

#### 4.3.2 Analyse der Kovarianz des Rauschens

Es wird erwartet, dass das Rauschen unkorreliert ist, sofern keine numerische Apodisierung vorgenommen wird. Dies ist zu verifizieren, indem, analog zu Abschnitt 4.3.1, die Kovarianzdaten aus Daten ermittelt werden, wo der Erwartungswert des Signals Null ist. Von Null abweichende Kovarianzen müssen in der Kovarianzmatrix  $S_y$  berücksichtigt werden. Die hierfür nötigen Werkzeuge wurden spezifiziert.

#### 4.3.3 Untersuchung der instrumentellen Linienform

Die MIPAS-Apparatefunktion wird in tabellierter Form Teil des Level-1-B Datenproduktes sein. Sie soll durch Anwendung auf separierte Spektrallinien bei großen Tangentenhöhen verifiziert werden. Als Hilfsmittel stehen uns mittlerweile eigene Apparatfunktionsmodelle zur Verfügung, die ins Strahlungsübertragungsmodell KOPRA eingebunden werden können. Sollte es zu Problemen mit der bereitgestellten tabellierten Apparatfunktion kommen, können die Parameter des IMK-eigenen Apparatfunktionsmodells derart an die gemessenen MIPAS-Spektren angepasst werden, dass durch die Apparatfunktion implizierte Fehler möglichst klein werden.

#### 4.3.4 Analyse des instrumentellen Offsets

Die aktuellen Auswertestrategien sowohl der ESA als auch des IMK setzen voraus, daß die Nulllinienkalibration von der Tangentenhöhe unabhängig ist. Sollte diese Annahme für MIPAS-Spektren nicht zutreffen, würde das Fehler im Retrieval der Targetgrößen implizieren. Zur Sicherheit ist der IMK-Prozessor so flexibel kodiert, dass er auch die Berücksichtigung höhenabhängiger Nulllinienkalibrationskorrekturen erlaubt. Da auch das empirische Kontinuum eine anzupassende Variable in jedem Auswertenster ist, wird es zu Kompensationen zwischen diesen beiden Größen kommen, die das Retrieval destabilisieren. Eine eindeutige Zuordnung des kontinuierlichen Signals dürfte am besten im Bereich starker Spektrallinien möglich sein, wo die Strahlungübertragung stark nichtlinear ist. Außerdem ist eine Analyse des Nulllinienkalibrierung in Tangentenhöhen hilfreich, wo bekannt ist, daß das atmosphärische Kontinuum Null ist (etwa oberhalb 30 km).

#### 4.3.5 Untersuchung des Einflusses von Linienemissionen in den sogenannten Deep Space Spektren

Zur Nulllinienkalibration der MIPAS-Spektren werden sogenannte "Deep Space Spektren" herangezogen. Anders als deren Name suggeriert, handelt es sich dabei jedoch um atmosphärische Horizontsondierungsspektren, die lediglich bei einer Tangentenhöhe von etwa 150 bis 210 km unter reduzierter spektraler Auflösung aufgenommen werden. Wenn diese Spektren noch atmosphärisches Signal – z.B. durch NO Linien in non-LTE – enthalten, verdirbt dies die Kalibrierung.

Um diesen Effekt zu untersuchen, sind zwei Schritte geplant: Zum einen sollen zu den aktuellen Tangentenhöhen der Deep Space Spektren für die aktuellen Bedingungen KOPRA-Rechnungen angefertigt werden. Diese werden zeigen, wie groß das atmosphärische Signal in diesen Spektren wirklich ist. Zum anderen sollen die Best-Fit Residuen im Bereich der NO-Bande auf Anzeichen von Kalibrationsfehlern untersucht werden.

### 4.4 Validierung der eigenen Datenprodukte

Auch die Validierung der IMK Level-2 Datenprodukte konnte wegen der Verzögerung des Starts von Envisat nicht im Antragszeitraum durchgeführt werden. Es wurden jedoch vorbereitende Arbeiten durchgeführt, und Mittel zur Finanzierung der eigentlichen Validierungsarbeiten allokiert, so dass die Validierung sichergestellt ist. Zur Validierung unserer Level-2 Datenprodukte werden vielerlei Datenquellen zur Verfügung stehen. In Frage kommende Daten sind hierbei in erster Linie Datenprodukte von Ballon- und Flugzeug-Validierungskampagnen, die für das MIPAS-Satellitenexperiment vorgesehen sind. Für die Validierung ist es u. a. wichtig, dass viele dieser Datenprodukte mit Experimenten erzeugt werden, die auf anderen Mess-Prinzipien als MIPAS und anderen Auswerteverfahren beruhen, so dass von unabhängigen Daten ausgegangen werden kann. Neben den geplanten Flug-Messkampagnen wird es im Rahmen der internationalen NDSC-Aktivitäten (Network for the Detection of Atmospheric Change) weitere bodengebundene Langzeit-Mess-Kampagnen mit FTIR- und Millimeterwellen-Instrumenten geben, die ebenfalls für die ENVISAT-Validierung vorgeschlagen sind. Diese Experimente werden Vertikalsäulengehalte, aber auch (wenn auch vertikal schlechter aufgelöste) Profile einer ganzen Reihe von Spurengasen, darunter  $O_3$ ,  $N_2O$ ,  $HNO_3$ ,  $CH_4$ ,  $NO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2CO$ ,  $ClONO_2$ ,  $NO$ , und CFC-12, zur Validierung zur Verfügung stellen.

Daneben sind eine Reihe von Ergebnissen anderer Experimente öffentlich zugänglich, die auch für die Kreuz-Validierung herangezogen werden können. Zu denken ist hierbei an HALOE, SAGE III, GOME, oder Daten des im Februar 2001 gestarteten

ODIN-Satelliten. Alle Datenprodukte außer ODIN werden beispielsweise vom ATMOS Datencenter am DFD/DLR oder vom DAAD (Goddard Distributed Active Archive Center) über WWW angeboten. Bzgl. der Nutzung der ODIN-Daten haben wir bereits erste Kontakte aufgenommen.

Mit diesen Daten sollen die MIPAS Spurengasprofile, Temperaturdaten, Wolken- und Aerosolparameter etc. verglichen werden, um systematische Unterschiede, Versätze etc. aufzudecken und zu beheben. Nur die wenigsten Daten sind jedoch unmittelbar vergleichbar. Um aussagekräftige Vergleiche zu ermöglichen, wurden zahlreiche Hilfsmittel und Werkzeuge bereitgestellt, die in den folgenden Abschnitten beschrieben werden.

#### 4.4.1 Aufbau einer Satelliten-Datensammlung

Der Aufbau einer eigenen Satellitendatensammlung erwies sich als nicht notwendig, weil es im Internet inzwischen eine Reihe von Seiten bzw. Werkzeuge gibt, mit denen auf Satellitendatensammlungen zugegriffen werden kann, bzw. die aus vorhandenen Sammlungen für ein vorgegebenes Raum-Zeit-Fenster eine Auswahl treffen. Eine der hilfreichsten Seiten hierzu ist die folgende, die von Dr. David Lary, Universität Cambridge, betrieben wird:

<http://waw.atm.ch.cam.ac.uk/Data/Access.Database.htm>

(Diese Seite ist gegenwärtig wegen Cracker-Angriffen gesperrt, wird nach Auskunft von Dr. David Lary aber wieder zur Verfügung gestellt.)

#### 4.4.2 Bereitstellung von Mittelungs-Strategien für den Vergleich von räumlichen und zeitlichen Mitteln

Um Satellitendaten untereinander zu vergleichen, bietet es sich an, anstelle der Originaldaten Mittelwerte zu vergleichen. Dies hat den Vorteil, dass Daten verglichen werden können, die nicht die gleiche Luftmasse oder den gleichen Messzeitpunkt betreffen, sofern sie nur dem gleichen statistischen Ensemble zuzuordnen sind. Insbesondere zur Feststellung eventueller Offsets und anderer systematischer Fehleranteile in den Daten ist dieser Ansatz geeignet. Allerdings ist zu beachten, dass die Nebenbedingung aus Gleichungen 3.10 oder 3.17 die statistische Unabhängigkeit der Daten zerstört. Der in Kapitel 3.2.8.5 diskutierte Ansatz (siehe Gl. 45) schafft auch hier Abhilfe.

#### 4.4.3 Bereitstellung theoretisch abgesicherter Validierungswerkzeuge

Ein Vergleich von Profilen zweier Experimente ohne eine quantitativ abgesicherte Aussage, ob die Profile im Sinne eines  $\chi^2$ -Tests signifikant voneinander abweichen oder nicht ist nicht mehr zeitgemäß. Aufbauend auf der Validierungstheorie nach *Rodgers* [Rodgers and Connor, 1999] wurde am IMK ein Computerprogramm implementiert, daß die Kovarianzmatrix der Differenz zweier Profile unter Berücksichtigung der verschiedenen Averaging Kernel Matrizen berechnet und anschließend für einen  $\chi^2$ -Test verwendet.

### 4.5 Validierung der ESA-Level-2 Datenprodukte

Strategien und Werkzeuge für die folgenden Validierungsschritte wurden bereitgestellt, während die eigentliche Analyse mangels MIPAS-Envisat-Daten zurückgestellt werden musste:

- Konsistenzanalyse der spektroskopischen Daten,
- Untersuchung der Relevanz von Non-LTE in den Microwindows der operativen Auswertung,

- Untersuchung der Relevanz von Emissionen aus großer Höhe,
- Analyse der langzeit-gemittelten Diskrepanzen zwischen gemessenen Spektren und ihren Anpassungen.

Unsere Analysewerkzeuge umfassen:

- Ein Auswerteprogramm, mit dem für beliebig zusammengestellte Auswertefenster Spektren analysiert werden können. Mit dem unter Kap. 4.4.3 beschriebenen Validierungswerkzeug können die aus den verschiedenen Microwindows resultierenden Profile verglichen werden. Signifikante Abweichungen deuten auf inkonsistente spektroskopische Daten hin.
- Das Vorwärtsprogramm KOPRA, das non-LTE beschreibt, und eine frei wählbare obere Grenze der Atmosphäre unterstützt. Hiermit kann für den aktuellen Fall die Relevanz von non-LTE in den Microwindows nachgewiesen werden und die Bedeutung der Emissionen hoher Atmosphärenschichten abgeschätzt werden.
- Visualisierungswerkzeuge für Residuenspektren sowie statistische Werkzeuge zur Berechnung des normierten  $\chi^2$  wurden bereitgestellt. Eine Methode wurde gefunden, wie  $\chi^2$  für die Anwendung einer Nebenbedingung berechnet werden kann.

Mit diesen Werkzeugen sehen wir uns für die Commissioning Phase gut gerüstet.

## 5 Stand der Arbeiten am Ende des Projektes

### 5.1 Status des Auswerteprozessors

Der IMK-Auswerteprozessor ist für interaktiven Betrieb einsatzbereit und wird rege für Testrechnungen, Optimierung von Prozessierungsparametern und Auswertbarkeitsstudien genutzt. Als wesentliche Bausteine wurden bereits in das System integriert:

- das Retrieval Control Program (RCP),
- das Strahlungsübertragungsprogramm KOPRA,
- Programme zur Generierung bzw Selektion optimaler Auswertefenster,
- ein Grundsortiment an Diagnostikwerkzeugen (Kovarianzmatrizen, Averaging Kernels, Residuen)

Damit ist die grundsätzliche Funktionalität des Prozessors gewährleistet. Bis zum Start von Envisat im Oktober 2001 sollen noch die Systemintegration der folgenden Bausteine erfolgen:

- Automatischer Generierungssystem für a priori Profile,
- Modelle zur Generierung von Vibrationstemperaturen,
- Validierungswerkzeug,
- Erweiterte diagnostische Werkzeuge ( $\chi^2$ , automatisierte Analyse systematischer Residuen),
- Graphische Benutzeroberfläche einschließlich Datenbankanbindungen.

Diese Werkzeuge stehen entweder schon bereit, so dass nur noch die Systemintegration aussteht, oder befinden sich kurz vor der Fertigstellung. Sie werden das Arbeiten mit dem MIPAS-Datenprozessor noch wesentlich komfortabler machen und damit einen größeren Datendurchsatz ermöglichen.

Mit den erarbeiteten Werkzeugen sehen wir uns gerüstet, die Datenauswertung der MIPAS-Messungen weit über den Standard-Fall hinaus (6 Haupt-Spurengase und Temperatur für den Höhenbereich 12 km bis 68 km) angehen zu können:

- **Untersuchungen zum stratosphärischen Ozonverlust in hohen und mittleren Breiten:**

Die für atmosphärenwissenschaftliche Fragen interessanten Spurengase im Polarwinter, nämlich Stickstoff- und Chlorverbindungen, können mit den erarbeiteten Werkzeugen abgeleitet werden. Für die speziellen Bedingungen des Polarwinters wurde die Ableitung optimiert. Der Ableitung von NO wurde, aufgrund der Non-LTE-Problematik, sehr viel Aufmerksamkeit gewidmet und ein innovatives und sehr vielversprechendes Ableitungs-Schema entwickelt.

- **Ozonchemie in der oberen Troposphäre:**

Für die chemischen Prozesse, die das Ozon-Budget in der oberen Troposphäre bestimmen, sind eine Reihe von Spurengasen relevant, die bisher noch nicht aus IR-Fernerkundungsmessungen abgeleitet worden sind, wie C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, HO<sub>2</sub>, PAN oder Azeton. Eine Strategie zur Ableitung derartiger Gase wurde entwickelt und optimiert, und Strategien zur Verbesserung der Sensitivität wurden entwickelt.

- **Vertikale Transportprozesse in der Tropopausenregion (STE):**

Zur Beobachtung von STE-Prozessen ist eine hohe vertikale Auflösung nötig; die Bedingungen, die die MIPAS-Mission bietet, wurden untersucht und die Auswertung in jeder Hinsicht optimiert, um die bestmögliche vertikale Auflösung bei gleichzeitig minimiertem Auswertefehler zu erhalten.

- **Ableitung von Spurengasen, die für das Strahlungsbudget relevant sind:**

Neben den Hauptgasen CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O etc. können eine Reihe von FCKW's aus MIPAS-Spektren abgeleitet werden. Auch hierfür wurde die Auswertestrategie optimiert und insbesondere auf FCKW's ausgedehnt, die bisher unseres Wissens noch nicht aus IR-Spektren abgeleitet worden sind, wie FCKW-113 oder H-FCKW-141b. Diese und andere Spurengase wie SF<sub>6</sub> oder CF<sub>4</sub> können außerdem als Tracer zur Untersuchung von vertikalen Transportprozessen verwendet werden.

- **Mesosphäre/Thermosphäre und Studium von Non-LTE-Effekten:**

Für die Untersuchung der Spurengasverteilung in der Mesosphäre und Thermosphäre, insbesondere O<sub>3</sub>, OH, CO, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> und NO wurden große Anstrengungen unternommen, die korrekte Berücksichtigung von Non-LTE-Effekten und das Retrieval von Non-LTE-Prozessparametern zu ermöglichen. Die Anstrengungen mündeten in ein verallgemeinertes Non-LTE-Modell für alle Gase, das in das Strahlungstransportmodell KOPRA integriert ist und über die Bereitstellung von Ableitungen nach den Non-LTE-Prozessparametern eine direkte Anbindung an das Retrieval besitzt. Es wurde ein innovatives Retrieval-Schema entwickelt, das die Ableitung der Mischungsverhältnisprofile zusammen mit Non-LTE-Prozess-Parametern erlaubt; es konnte gezeigt werden, dass dieses Verfahren bisherigen Ansätzen deutlich überlegen ist. Mit unseren Arbeiten zum Non-LTE-Retrieval sind wir international führend.

Eine Ableitung von NO, CO und der kinetischen Temperatur in der Thermosphäre, und Ozon, CO, OH, und H<sub>2</sub>O sowie von relevanten Non-LTE-Prozessparametern in der Mesosphäre wird in Kürze möglich sein. Die Ableitung von CO<sub>2</sub> und insbesondere von CO<sub>2</sub>-Non-LTE-Prozessparametern wird noch einige Arbeit benötigen.

- **Wolken und Aerosole, PSC's:**  
Auch für die Ableitung von chemischen und mikrophysikalischen Eigenschaften von Wolken und Aerosolen, und insbesondere PSCs, sehen wir uns gerüstet. Analog zu dem beim Non-LTE-Retrieval verfolgten Ansatz wurde ein Mie-Modell zur Berechnung der Absorption und Streuung durch Partikel in KOPRA eingekoppelt und die Ableitung der Spektren nach den Parametern des Mie-Modells, also der Dichte- und Größenverteilung, bereitgestellt. Damit ist es uns, ebenfalls nach unserem Wissen weltweit als einzige Gruppe, möglich, direkt mikrophysikalische Eigenschaften der Wolken oder Aerosole aus den Spektren abzuleiten. Die prinzipielle Funktionalität des Verfahrens konnte bereits an einer PSC-Messung vom Boden aus demonstriert werden.
- **Werkzeuge für die Datencharakterisierung, z.B. für Anwendung in der Datenassimilation, und für die sensitive Mittelung:**  
Neben der Ableitung der Datenprodukte selbst ist es von grosser Bedeutung, die Daten auch korrekt zu charakterisieren; dies spielt bei der Weiterverwendung der Daten eine erhebliche Rolle. Prominentes Beispiel ist die Datenassimilation, bei der neben den Fehlern der Daten und des Modells auch die Korrelationen der Datenpunkte untereinander, ausgedrückt als Kovarianzmatrizen, eingehen. Die Werkzeuge, die wir uns erarbeitet haben, sind im Rahmen der Retrieval-Theorie als state-of-the-art zu bezeichnen; in einigen Aspekten, wie die Berücksichtigung systematischer Fehler bereits beim Retrieval, oder bei der Berücksichtigung der Korrelationen bei der Bildung von Mittelwerten, gelangen uns neue, wegweisende Arbeiten. In der Zukunft erhoffen wir uns durch die Zusammenarbeit mit Gruppen, die state-of-the-art 4-D-var-Datenassimilation betreiben, weitere gegenseitig befruchtende Entwicklungen.
- **Werkzeuge für die Validierung:**  
Für die Charakterisierung des Instruments, die Validierung der level-2-Auswertung und die Validierung der geophysikalischen Datenprodukte haben wir eine Reihe von Werkzeugen entwickelt, die ebenfalls die neuesten und weitestgehenden Entwicklungen auf dem Gebiet der Validierungstheorie und Strahlungstransportberechnung beinhalten. Wir sehen uns damit auch für die Validierungsphase gut gerüstet.
- **Spezifische Behandlung aller Breitenzonen:**  
Die Optimierung der Auswertung ist außerdem spezifisch für verschiedene Breitenzonen erfolgt; es wurden entsprechend der klimatologischen Verteilung der Spurengase die Auswertefenster optimiert und eine Prognose über die erzielbare Auswertegenauigkeit erstellt.

Mit den erarbeiteten Algorithmen und Werkzeugen sind wir in der Lage, die anstehenden atmosphärenwissenschaftlichen Fragestellungen, wie sie schon in einigen AFO2000- und EU-Projekten festgehalten sind, mit Hilfe der dafür abgeleiteten MIPAS-Daten in Angriff zu nehmen.

## 5.2 Offene Punkte

Von den in den verschiedenen Anträgen beschriebenen Arbeitspunkten konnten die folgenden noch nicht zufriedenstellend abgeschlossen bzw. konnten wegen der Ver-

schiebung des Starts des ENVISAT nicht bearbeitet werden:

- Modellierung des Höhe/Druck/Temperatur-Zusammenhangs und Entwicklung des Temperatur-Retrievals in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre
- Vollständiges NLTE-Retrieval für weitere Gase ausser NO
- Ableitung von  $\text{NO}_x$  und  $\text{J}(\text{NO}_2)$  am Terminator
- Untersuchung des Einflusses von troposphärischen Wolken und 2-dimensionale Ableitung von Wolkenparametern
- Validierung

Bei Aktivitäten, die die obere Atmosphäre bzw. die Bedingungen am Terminator betreffen, war die Ursache für die Verzögerung die Priorisierung des verallgemeinerten Non-LTE-Modells, das in den Anträgen ursprünglich in dieser Form nicht vorgesehen war. Dieses Werkzeug ist jedoch von sehr großem Nutzen, weil es uns ermöglicht, für eine Vielzahl von Gasen Non-LTE-Effekte im Retrieval zu modellieren bzw. für atmosphärenwissenschaftliche Untersuchungen zu nutzen. Es konnte wenigstens zum Teil eine Nachfolgefinanzierung zur weiteren Bearbeitung der noch offenen Fragen bzgl. der oberen Atmosphäre gefunden werden. Bei der Datenanalyse von Beobachtungen am Terminator ist zu beachten, daß je Orbit eine Überschreitung des Terminators nur zwei mal (von 67 Beobachtungs-Sequenzen) erfolgt, und die besonderen Bedingungen der Dämmerungschemie nur für NO,  $\text{NO}_2$  und ClO relevant sind; ClO ist voraussichtlich nur unter stark erhöhten Konzentrationen, wie sie im Polarwinter auftreten können, mit MIPAS nachweisbar. Damit reduziert sich das in der Anfangsphase ableitbare Gesamt-Datenprodukt nicht wesentlich; ausserdem wird im ESA-Standard-Produkt für  $\text{NO}_2$  unseres Wissens auf die speziellen Bedingungen bei Dämmerungsbeobachtungen überhaupt nicht eingegangen, was nach unseren Abschätzungen eine erheblichen Fehler in den Daten erzeugen wird.

Die Behandlung von Wolken, insbesondere dünne Cirren und andere troposphärische Wolken, im Sehstrahl und die 2-dimensionale Ableitung von Wolkenparametern ist ein weiterer Punkt, der in Zukunft noch intensiver bearbeitet werden muss. Die Finanzierung dieser Aktivitäten hinsichtlich MIPAS sowie eines MIPAS-Nachfolgeinstruments mit verbesserter räumlicher Auflösung ist schon bei der ESA beantragt. Von der Wolkenproblematik sind nur die troposphärischen Anwendungen der MIPAS-Datenprodukte betroffen. In der Anfangsphase werden wir uns dort, wo eine Behandlung der Wolken über die mit-anzupassende unspezifische Kontinuums-Emission nicht möglich ist, auf wolkenfreie Beobachtungen konzentrieren.

Die geplanten Validierungsaktivitäten konnten nicht wie in den Anträgen vorgesehen durchgeführt werden, weil sich der ENVISAT-Start immer weiter verschoben hat. Wir sind selbst im letzten, Ende 1999 gestellten, Antrag noch davon ausgegangen, dass der Start der ENVISAT-Mission noch in der Laufzeit des Vorhabens erfolgen wird. Die weitere Verzögerung führte dazu, dass die Validierungsarbeiten im Rahmen anderer Vorhaben durchgeführt werden müssen, wie z.B. Vorhaben im Rahmen von AFO2000, des HGF-Vernetzungsfonds-Projekts "Generierung und Validierung von Datenprodukten aus ENVISAT-Messungen sowie deren Nutzung zur Erforschung der oberen Troposphäre und der Stratosphäre" oder EU-finanzierten Vorhaben. In diesen Projekten wird auch die erste wissenschaftliche Nutzung der Daten erfolgen, die mit Hilfe des hier aufgebauten Systems abgeleitet werden.

## 6 Wissenschaftliche Vertretung des MIPAS-Experiments im internationalen Rahmen

### 6.1 Zusammenarbeit mit der ESA

Während der gesamten Laufzeit des Vorhabens bestand eine intensive Zusammenarbeit mit der ESA über Fragen der Datenauswertung und der wissenschaftlichen Nutzung der MIPAS-Daten. Genannt sei hier besonders die Mitarbeit in der MIPAS SAG (Scientific Advisory Group), in der DPAD (Data Processing and Algorithm Development Subgroup), im ACVT (Atmospheric Chemistry Validation Team), die Beteiligung an einer Vielzahl von wissenschaftlichen Studien zur MIPAS-Datenauswertung (siehe Literaturliste), die Beteiligung an einer Studie zur Definition einer Nachfolge-Mission im Rahmen des Earth Explorer Programms der ESA, sowie die Einreichung einer großen Zahl wissenschaftlicher Proposals zur Validierung der MIPAS-Daten und zu ihrer wissenschaftlichen Nutzung.

### 6.2 Internationale Tagungen

Im Laufe des Vorhabens wurden Reisen zu wissenschaftlichen Tagungen, zu Arbeitsbesprechungen mit Kooperationspartnern und zu Treffen mit ESA-Wissenschaftlern durchgeführt, um die Ergebnisse des Vorhabens im internationalen Rahmen zu vertreten. Eine Liste der durchgeführten Reisen liegt dem Auftraggeber vor.

### 6.3 Kooperation mit anderen Gruppen

Folgende Kooperationen bestanden im Laufe des Vorhabens mit anderen Gruppen in Zusammenhang mit dem MIPAS-Satellitenexperiment:

- IROE, Florenz: Zusammenarbeit im Rahmen der Studie "Development of an optimized algorithm for routine p,T and VMR retrieval from MIPAS limb emission spectra"; neun-monatiger Forschungsaufenthalt eines IMK-Wissenschaftlers am IROE zur Entwicklung des OFM (Optimized Forward Model), das Bestandteil des ESA-Datenprozessors ist.
- Universität Bologna: Zusammenarbeit im Rahmen der Studie "Development of an optimized algorithm for routine p,T and VMR retrieval from MIPAS limb emission spectra"
- Universität Oxford: Zusammenarbeit im Rahmen der Studien "Development of an optimized algorithm for routine p,T and VMR retrieval from MIPAS limb emission spectra" bei der Entwicklung der Microwindow-Auswahl und "Definition of Observational Requirements for Support to Future Earth Explorer Atmospheric Chemistry Mission (ACE)" bei der vergleichenden Bewertung verschiedener geplanter FTIR-Instrumente
- LPPM, Paris: Zusammenarbeit im Rahmen der Studien "Development of an optimized algorithm for routine p,T and VMR retrieval from MIPAS limb emission spectra" und "Definition of Observational Requirements for Support to Future Earth Explorer Atmospheric Chemistry Mission (ACE)"
- IAA, Granada: Zusammenarbeit im Rahmen der Entwicklung von NLTE-Modellen und NLTE-Retrieval-Ansätzen; es fanden mehrere längere Forschungsaufenthalte eines Wissenschaftlers am IAA statt
- RAL, Didcot: Zusammenarbeit im Rahmen der Studie "Definition of Observational Requirements for Support to Future Earth Explorer Atmospheric Chemistry Mission (ACE)"

- DLR, Oberpfaffenhofen: Zusammenarbeit im Rahmen der MIPAS Level-2 offline Prozessor-Entwicklung und im Rahmen der Studie "Definition of Observational Requirements for Support to Future Earth Explorer Atmospheric Chemistry Mission (ACE)"
- Universität St. Petersburg: Zusammenarbeit im Rahmen der Non-LTE-Modellierung und anfängliche Zusammenarbeit bei der Entwicklung von Retrieval-Ansätzen mit mehreren Forschungsaufhalten russischer Wissenschaftler am IMK
- JPL, Pasadena: sechs-monatiger Forschungsaufenthalt einer Wissenschaftlerin im Rahmen der ATMOS-Datenauswertung; außerdem Gutachtertätigkeit für die NASA bzgl. des Level-2 Algorithmus für das TES-Experiment
- University of Waterloo, Canada: Beratungstätigkeit für das ACE-Experiment (ATMOS-Nachfolge-Experiment)
- NCAR, Boulder: Zusammenarbeit im Rahmen einer HIRDLS/MIPAS-Vergleichsstudie; es fand ein sechs-monatiger Forschungsaufenthalt am NCAR statt.
- EUMETSAT, Darmstadt: Zusammenarbeit im Rahmen eines Algorithmenvergleichs von Strahlungstransportmodellen in der Vorbereitungsphase des IASI-Experiments
- Daneben besteht eine Zusammenarbeit mit den Gruppen IROE, Universität Bologna, RAL, Universität Oxford, LPPM, IAA, DLR, Universität Bremen, und FMI Helsinki im Rahmen des EU-Vorhabens AMIL2DA. Es hat die Entwicklung verschiedener Level-2 Auswerte-Ansätze, wie sie in einigen der beteiligten Gruppen erfolgt, sowie die Kreuzvalidierung der Auswerte-Ansätze und der erzeugten Datenprodukte zum Inhalt. Mit der Koordination dieses europäischen Projekts hat das IMK auch eine koordinative und richtunggebende Rolle bzgl. der europäischen MIPAS-Auswerteaktivitäten übernommen.

# Verzeichnis der im Zusammenhang mit diesem Vorhaben entstandenen Publikationen

- [Abrams et al., 1996] Abrams, M. C., Chang, A. Y., Gunson, M. R., Abbas, M. M., Goldman, A., Irion, F. W., Michelsen, H. A., Newchurch, M. J., Rinsland, C. P., Stiller, G. P., and Zander, R. (1996). On the assessment and uncertainty of atmospheric trace gas burden measurements with high resolution infrared solar occultation spectra from space by the ATMOS experiment. *Geophys. Res. Lett.*, 23(17):2337–2340.
- [Adrian et al., 1994] Adrian, G. P., Baumann, M., Blumenstock, T., Fischer, H., Friedle, A., Gerhardt, L., Maucher, G., Oelhaf, H., Scheuerpflug, W., Thomas, P., Trieschmann, O., and Wegner, A. (1994). First results of ground-based FTIR measurements of atmospheric trace gases in north Sweden and Greenland during EASOE. *Geophys. Res. Lett.*, 21(13):1343–1346.
- [Adrian et al., 1992a] Adrian, G. P., Blumenstock, T., Fischer, H., Frank, E., Gulde, T., Oelhaf, H., Thomas, P., and Trieschmann, O. (1992a). Column amounts and some information on the vertical distribution of trace gases in the late north polar winter 1990. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 96(3):272–276.
- [Adrian et al., 1991] Adrian, G. P., Blumenstock, T., Fischer, H., Gerhardt, L., Gulde, T., Oelhaf, H., Thomas, P., and Trieschmann, O. (1991). Column amounts of trace gases derived from ground-based measurements with MIPAS during CHEOPS III. *Geophys. Res. Lett.*, 18(4):783–786.
- [Adrian et al., 1992b] Adrian, G. P., Fischer, H., Frank, E., and Oelhaf, H. (1992b). Säulengehalte und Vertikalverteilung atmosphärischer Spurengase im arktischen Spätwinter 1990. *Annalen der Meteorologie*, 27.
- [Adrian et al., 1993] Adrian, G. P., von Clarmann, T., Fischer, H., and Oelhaf, H. (1993). Trace gas measurements with the ground-based MIPAS experiment during the Arctic winters 1990 to 1992. In Keevallik, S. and Kärner, O., editors, *IRS '92: Current Problems in Atmospheric Radiation*, pages 359–362. A. Deepak Publishing, Hampton, Va, USA.
- [Blom et al., 1994] Blom, C., Fischer, H., Glatthor, N., Gulde, T., and Höpfner, M. (1994). Airborne measurements during the European Arctic stratospheric experiment: column amounts of  $\text{HNO}_3$  and  $\text{O}_3$  derived from FTIR emission sounding. *Geophys. Res. Lett.*, 21(13):1351–1354.

- [Blom et al., 1995] Blom, C., Fischer, H., Glatthor, N., Gulde, T., Höpfner, M., and Piesch, C. (1995). Spatial and temporal variability of ClONO<sub>2</sub>, HNO<sub>3</sub> and O<sub>3</sub> in the Arctic winter of 1992/93 as obtained by airborne infrared emission spectroscopy. *J. Geophys. Res.*, 100(D5):9101–9114.
- [Blom et al., 1996] Blom, C. E., Fischer, H., Glatthor, N., Gulde, T., Höpfner, M., Kimmig, W., Piesch, C., and Lee, A. M. (1996). MIPAS-TRANSALL observations on the variability of ClONO<sub>2</sub> during the Arctic winter of 1994/95. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3<sup>d</sup> Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 314–318, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Blumenstock et al., 1997a] Blumenstock, T., Fietze, S., Fischer, H., Richter, M., Stiller, G. P., Thomas, P., Meier, A., and Nakajima, H. (1997a). Time series of HNO<sub>3</sub> column amounts as measured by ground-based FTIR spectroscopy at Kiruna (Sweden) in winter 1995/96 and 1996/97. In Harris, N. R. P., Kilbane-Dawe, I., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 4<sup>th</sup> Eur. Symp. on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 22–26 Sep 1997*, pages 411–414, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 66.
- [Blumenstock et al., 1996] Blumenstock, T., Fischer, H., Friedle, A., Hase, F., Schreiber, J., and Thomas, P. (1996). Column amounts of trace gases measured by ground-based FTIR spectroscopy near Kiruna, Sweden, during winter 1994/95. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3<sup>d</sup> Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 340–343, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Blumenstock et al., 1997b] Blumenstock, T., Fischer, H., Friedle, A., Hase, F., and Thomas, P. (1997b). Column amounts of ClONO<sub>2</sub>, HCl, HNO<sub>3</sub>, and HF from ground-based FTIR measurements made near Kiruna, Sweden in late winter 1994. *J. Atmos. Chem.*, 26(3):311–321.
- [Blumenstock et al., 1998] Blumenstock, T., Fischer, H., Friedle, A., Stiller, G. P., and Thomas, P. (1998). Column amounts of HCl, ClONO<sub>2</sub> and HF measured by ground-based FTIR spectroscopy near Kiruna (S) during winter since 1990. In Bojkov, R. D. and Visconti, G., editors, *Atmospheric Ozone, Proceedings of the XVIII Quadrennial Ozone Symposium, L'Aquila, Italy, 12–21 September 1996*, volume 1, pages 469–472. International Ozone Commission.
- [Blumenstock et al., 1994] Blumenstock, T., Fischer, H., Gerhardt, L., Thomas, P., Trieschmann, O., and Wegner, A. (1994). Column amounts of trace gases measured by ground-based FTIR spectroscopy during the EASOE campaign. In *SPIE – The International Society for Optical Engineering*, volume 2089, pages 532–533. 9<sup>th</sup> International conference on Fourier Transform Spectroscopy, held in Calgary, Alberta, Canada, 23–27 August 1993.
- [Carli et al., 1999] Carli, B., Battistini, E., Carlotti, M., von Clarmann, T., Dinelli, B. M., Dudhia, A., Echle, G., Flaud, J.-M., Gignoli, A., Höpfner, M., Lunedei, E., Mencaraglia, F., Morris, P. E., Raspollini, P., Ridolfi, M., Stiller, G. P., Vigiani, A., and Wells, R. J. (1999). MIPAS level 2 algorithm. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 65–76. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.

- [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.
- [Echle, 1996] Echle, G. (1996). Ableitung von optischen und mikrophysikalischen Parametern stratosphärischer Aerosole aus Emissionsspektren im infraroten Spektralbereich. Wissenschaftliche Berichte FZKA 5811, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Echle and Höpfner, 2000] Echle, G. and Höpfner, M. (2000). Parameterization of continua caused by gaseous constituents. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 89–94. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Echle et al., 1995] Echle, G., Oelhaf, H., von Clarmann, T., and Schmidt, M. (1995). Definition of spectral intervals for the retrieval of trace gas concentrations from MIPAS limb emission spectra. Technical report, European Space Agency. Final Report of ESA Contract 10993/94/NL/PR.
- [Echle et al., 1992] Echle, G., Oelhaf, H., and Wegner, A. (1992). Measurement of atmospheric parameters with MIPAS. Technical report, European Space Agency. Final Report of ESA Contract 9597/91/NL/SF.
- [Echle et al., 1994] Echle, G., Oelhaf, H., and Wegner, A. (1994). On the potential of I.R. limb emission spectroscopy for the measurement of the stratospheric composition. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 52(3/4):253–265.
- [Echle and von Clarmann, 1998] Echle, G. and von Clarmann, T. (1998). Retrieval of stratospheric aerosol properties by the MIPAS–Envisat limb sounder. In *IGARSS '98 Sensing and Managing the Environment*. IGARSS '98, 6–10 July 1998, Seattle, WA, USA.
- [Echle and von Clarmann, 1999] Echle, G. and von Clarmann, T. (1999). Retrieval of stratospheric aerosol properties by the MIPAS–ENVISAT limb sounder. In *Proc. 8<sup>th</sup> Internat. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, Toulouse, France, Nov 16–18, 1998*, pages 269–272.
- [Echle et al., 2000] Echle, G., von Clarmann, T., Dudhia, A., Flaud, J.-M., Funke, B., Glatthor, N., Kerridge, B., López-Puertas, M., Martín-Torres, F. J., and Stiller, G. P. (2000). Optimized spectral microwindows for data analysis of the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding on the Environmental Satellite. *Appl. Opt.*, 39(30):5531–5540.
- [Echle et al., 1999] Echle, G., von Clarmann, T., Dudhia, A., López-Puertas, M., Martín-Torres, F. J., Kerridge, B., and Flaud, J.-M. (1999). Spectral microwindows for MIPAS–ENVISAT data analysis. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS '99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 481–486. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Echle et al., 1996a] Echle, G., von Clarmann, T., and Oelhaf, H. (1996a). Determination of optical and microphysical properties of volcanic stratospheric aerosols from MIPAS–B limb emission spectra. In Fischer, J., editor, *Satellite Remote Sensing and Modeling of Clouds and the Atmosphere*, volume 2961, pages 91–97. Satellite Remote Sensing, Taormina, 24 September 1996.

- [Echle et al., 1996b] Echle, G., von Clarmann, T., and Oelhaf, H. (1996b). A technique for retrieving mid-IR extinction coefficients of stratospheric aerosols from limb emission spectra. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3<sup>rd</sup> Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 823–826, Brussels, Luxemburg, European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Echle et al., 1997] Echle, G., von Clarmann, T., and Oelhaf, H. (1997). On the potential to derive optical and microphysical parameters of stratospheric aerosols from high resolution mid-IR limb emission spectra. In Smith and Stamnes, editors, *IRS '96: Current Problems in Atmospheric Radiation*, pages 659–662. Deepak Publishing.
- [Echle et al., 1998a] Echle, G., von Clarmann, T., and Oelhaf, H. (1998a). Ableitung von optischen und mikrophysikalischen Parametern des Pinatubo Aerosols aus MIPAS-B Emissionsspektren. *Annalen der Meteorologie*, 37.
- [Echle et al., 1998b] Echle, G., von Clarmann, T., and Oelhaf, H. (1998b). Optical and microphysical parameters of the Mt. Pinatubo aerosol as determined from MIPAS-B mid-IR limb emission spectra. *J. Geophys. Res.*, 103(D15):19,193–19,211.
- [Endemann and Fischer, 1993] Endemann, M. and Fischer, H. (1993). Envisat's high-resolution limb sounder: MIPAS. *ESA bulletin*, 76:47–52.
- [Fischer, 1992] Fischer, H. (1992). Remote sensing of atmospheric trace constituents using Fourier Transform Spectrometry. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 96(3):306–314.
- [Fischer, 1993a] Fischer, H. (1993a). Remote sensing of atmospheric trace constituents using mid-IR Fourier Transform Spectrometry. In Chedin, A., Chahine, M. T., and Scott, N. A., editors, *NATO ASI Series: High spectral resolution infrared remote sensing for earth's weather and climate studies*, pages 341–350. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest.
- [Fischer, 1993b] Fischer, H. (1993b). Remote sensing of atmospheric trace gases. *Interdisc. Sci. Rev.*, 18(3):185–191.
- [Fischer, 2001] Fischer, H. (2001). Spectroscopic measurements with MIPAS. In J. Demaison et al., editor, *Spectroscopy from Space*, pages 161–169. Kluwer Academic Publishers.
- [Fischer et al., 1994] Fischer, H., Carlotti, M., v. Clarmann, T., Endemann, M., Flaud, J., Muller, C., Oelhaf, H., Rast, M., Stiller, G. P., and Zander, R. (1994). MIPAS Data Processing and Algorithm Development (DPAD) Subgroup Report. Technical report, ESTEC, Noordwijk.
- [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 and Oelhaf, 1998] Fischer, H. and Oelhaf, H. (1998). Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb emission spectrometers. 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 42–46.

- [Funke, 1995] Funke, B. (1995). Modellierung des line-mixing Effekts in Q-Zweigen von CO<sub>2</sub>-Banden für die Berechnung von atmosphärischen Infrarotspektren. Master's thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Funke, 2000a] Funke, B. (2000a). Ein Modell für die Zustandsverteilung von NO bei nichtvorhandenem lokalem thermodynamischem Gleichgewicht und dessen Nutzung zur Ableitung atmosphärischer Parameter aus 5.3  $\mu\text{m}$  Emissionsspektren. Wissenschaftliche Berichte FZKA 6413, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Funke, 2000b] Funke, B. (2000b). Line mixing. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 69–75. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Funke and Höpfner, 2000] Funke, B. and Höpfner, M. (2000). Non-LTE and radiative transfer. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 101–106. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Funke and López-Puertas, 1999] Funke, B. and López-Puertas, M. (1999). Non-LTE vibrational, rotational and spin state distribution for the NO( $\nu=0,1,2$ ) states. In *Proc. 25<sup>th</sup> Annual European Meeting on Atmospheric Studies by Optical Methods, Granada (ASOM), Spain, 21–25 September 1998*, pages 206–209.
- [Funke and López-Puertas, 2000] Funke, B. and López-Puertas, M. (2000). Nonlocal thermodynamic equilibrium vibrational, rotational, and spin state distribution of NO( $\nu=0,1,2$ ) under quiescent atmospheric conditions. *J. Geophys. Res.*, 105(D4):4409–4426.
- [Funke et al., 1998a] Funke, B., López-Puertas, M., Stiller, G., von Clarmann, T., Fischer, H., Höpfner, M., and Kuntz, M. (1998a). Der Einfluß des nichtvorhandenen lokalen thermodynamischen Gleichgewichts (NLTE) auf die Ableitung von NO-Profilen aus MIPAS-ENVISAT Horizontsondierungsspektren. *Annalen der Meteorologie*, 37:33–34.
- [Funke et al., 1999a] Funke, B., López-Puertas, M., Stiller, G., von Clarmann, T., and Höpfner, M. (1999a). Retrieval of NO volume mixing ratio and non-LTE parameter from stratospheric midlatitude daytime MIPAS/ENVISAT limb spectra at 5.3  $\mu\text{m}$ . In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 425–432. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Funke et al., 2000a] Funke, B., López-Puertas, M., Stiller, G., von Clarmann, T., Höpfner, M., and Kuntz, M. (2000a). Non-LTE state distribution of nitric oxide and its impact on the retrieval of the stratospheric daytime NO profile from MIPAS limb sounding experiments. *Adv. Space. Res.*, 26(6):947–950.
- [Funke et al., 1999b] Funke, B., López-Puertas, M., Stiller, G. P., von Clarmann, T., and Höpfner, M. (1999b). A new inversion approach for stratospheric NO accounting for non-LTE from MIPAS-ENVISAT limb radiance measurements. In Barbe, A., Flaud, J.-M., and Rothman, L., editors, *Proceedings of the Atmospheric Spectroscopy Application*, pages 255–258. ASA'99, Reims, France, 1–3 Sept. 1999.
- [Funke et al., 1999c] Funke, B., López-Puertas, M., Stiller, G. P., von Clarmann, T., and Höpfner, M. (1999c). Retrieval of NO volume mixing ratio and NLTE parameter from stratospheric midlatitude daytime MIPAS-ENVISAT limb

- spectra at  $5.3 \mu\text{m}$ . In *Proc. 8<sup>th</sup> Internat. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, Toulouse, France, Nov 16–18, 1998*, pages 275–278.
- [Funke et al., 1996] Funke, B., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Echle, G., and Fischer, H. (1996). CO<sub>2</sub> Q-branch line mixing effects in MIPAS/ENVISAT limb emission spectra. In Barbe, A., Flaud, J.-M., Jacon, M., Mérienne, M. F., and Rothman, L., editors, *Proc. 4<sup>th</sup> Atmospheric Spectroscopy Applications, Reims, 4–6 September, 1996*. Université de Reims Champagne Ardenne.
- [Funke et al., 1997] Funke, B., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Echle, G., and Fischer, H. (1997). CO<sub>2</sub> line mixing in MIPAS limb emission spectra and its influence on retrieval of atmospheric parameters. In *Proc. 7<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, 12–14 May 1997*.
- [Funke et al., 1998b] Funke, B., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Echle, G., and Fischer, H. (1998b). CO<sub>2</sub> line mixing in MIPAS limb emission spectra and its influence on retrieval of atmospheric parameters. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 59(3–5):215–230.
- [Funke et al., 2000b] Funke, B., Stiller, G. P., von Clarmann, T., and Höpfner, M. (2000b). A new retrieval method accounting for NLTE for atmospheric parameters from MIPAS–ENVISAT limb radiance measurements. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000*.
- [Funke et al., 2001] Funke, B., Stiller, G. P., von Clarmann, T., and Höpfner, M. (2001). A new NLTE retrieval method for atmospheric parameters from MIPAS–ENVISAT emission spectra. *Adv. Space Res.*, accepted for publication.
- [Glatthor et al., 1997] Glatthor, N., Blom, C., and Fischer, H. (1997). Comparison of MIPAS-FT observations of HNO<sub>3</sub>, ClONO<sub>2</sub> and NO<sub>2</sub> in winter 1994/95 with SLIMCAT model calculations. In Harris, N. R. P., Kilbane-Dawe, I., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 4<sup>th</sup> Eur. Symp. on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 22–26 Sep 1997*, pages 269–272, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 66.
- [Glatthor et al., 1996] Glatthor, N., Blom, C., Fischer, H., Gulde, T., and Piesch, C. (1996). Interpretation of HNO<sub>3</sub> and O<sub>3</sub> burdens, observed in winter 1993/1994 on flights across the Arctic vortex edge. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 219–223, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Glatthor et al., 1998a] Glatthor, N., Blom, C. E., Blumenstock, T., Fischer, H., Gulde, T., Höpfner, Kimmig, W., Piesch, C., Bell, W., Galle, B., and Wirth, M. (1998a). MIPAS–TRANSALL observations of the variability of ClONO<sub>2</sub> during the Arctic winter of 1994/95. *J. Atmos. Chem.*, 30(1):81–101.
- [Glatthor et al., 1998b] Glatthor, N., Blom, C. E., von Clarmann, T., Fischer, H., Gulde, T., Piesch, C., Erle, F., Pfeilsticker, K., Chipperfield, M. P., Lee, A. M., and Pyle, J. A. (1998b). Airborne remote sensing of NO<sub>2</sub> in the Arctic winter of 1994–1995 and comparison with a three-dimensional chemical transport model. *J. Geophys. Res.*, 103(D11):13,315–13,326.

- [Glatthor et al., 1999a] Glatthor, N., Höpfner, M., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Dudhia, A., Echle, G., Funke, B., and Hase, F. (1999a). Intercomparison of the KOPRA and the RFM radiative transfer codes. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 757–764. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Glatthor et al., 1999b] Glatthor, N., Höpfner, M., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Dudhia, A., Echle, G., Funke, B., and Hase, F. (1999b). Intercomparison of the KOPRA and the RFM radiative transfer codes. In Russell, J. E., editor, *Satellite Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere IV*, volume 3867 of *EUROPTO*, pages 348–363. 20–22 September 1999, Florence, Italy.
- [Glatthor et al., 2001] Glatthor, N., von Clarmann, T., Echle, G., Grabowski, U., and Kimmich, E. (2001). Optimized spectral microwindows for midlatitude and polar trace gas retrieval from MIPAS–ENVISAT measurements. In Russell, J. E., Schäfer, K., and Lado-Bordowsky, O., editors, *Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere V*, volume 4168, pages 343–353.
- [Gunson et al., 1996] Gunson, M. R., Abbas, M. M., Abrams, M. C., Allen, M., Brown, L. R., Brown, T. L., Chang, A. Y., Goldman, A., Irion, F. W., Lowes, L. L., Mahieu, E., Manney, G. L., Michelsen, H. A., Newchurch, M. J., Rinsland, C. P., Salawitch, R. J., Stiller, G. P., Toon, G. C., Yung, Y. L., and Zander, R. (1996). The atmospheric trace molecule spectroscopy (ATMOS) experiment: Deployment on the ATLAS space shuttle missions. *Geophys. Res. Lett.*, 23(17):2333–2336.
- [Hase, 2000] Hase, F. (2000). Transformation of irradiated to measured spectral distribution due to finite spectral resolution and field of view extent of a Fourier transform spectrometer. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 119–132. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Hase et al., 2000] Hase, F., Blumenstock, T., Fischer, H., Höpfner, M., Thomas, P., Meier, A., Steen, A., and Kondo, Y. (2000). Profiles of O<sub>3</sub>, HCl and HF as retrieved from ground-based FTIR spectra recorded at Kiruna (Sweden) during winter 1997/98. In Harris, N. R. P., Guirlet, M., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 5<sup>th</sup> European Workshop on Stratospheric Ozone, St. Jean de Luz, France, 27 Sep-1 Oct 1999*, pages 244–247, Brussels, Belgium. European Commission. Air Pollution Research Report 73.
- [Hase and Höpfner, 1999] Hase, F. and Höpfner, M. (1999). Atmospheric ray path modeling for radiative transfer algorithms. *Appl. Opt.*, 38(15):3129–3133.
- [Hase and Höpfner, 2000] Hase, F. and Höpfner, M. (2000). Atmospheric raypath modeling for radiative transfer algorithms. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 35–42. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Höpfner, 1994] Höpfner, M. (1994). Das flugzeuggetragene Fernerkundungsexperiment MIPAS–FT: Auswertung und Interpretation der arktischen Meßkampagnen 1991/92 und 1992/93. Wissenschaftliche Berichte KfK 5438, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Höpfner, 2000a] Höpfner, M. (2000a). Derivatives and interface to the retrieval. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 133–144. Forschungszentrum Karlsruhe.

- [Höpfner, 2000b] Höpfner, M. (2000b). 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., 1996a] Höpfner, M., Blom, C. E., Blumenstock, T., Fischer, H., and Gulde, T. (1996a). Evidence for the removal of gaseous  $\text{HNO}_3$  inside the Arctic polar vortex in January 1992. *Geophys. Res. Lett.*, 23:149–152.
- [Höpfner et al., 2000a] Höpfner, M., Blom, C. E., Echle, G., Glatthor, N., Hase, F., and Stiller, G. (2000a). Retrieval simulations for MIPAS–STR measurements. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000*.
- [Höpfner et al., 1996b] Höpfner, M., Blom, C. E., Fischer, H., Glatthor, N., Gulde, T., Kimmig, W., Piesch, C., and Lee, A. M. (1996b). MIPAS–TRANSALL observations on the condensation of  $\text{HNO}_3$  during the Arctic winter of 1994/95. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3<sup>rd</sup> Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 213–218, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Höpfner et al., 1998a] Höpfner, M., Blom, C. E., Fischer, H., Glatthor, N., Gulde, T., Kimmig, W., Piesch, C., and Lee, A. M. (1998a). MIPAS–TRANSALL observations on the condensation of  $\text{HNO}_3$  during the Arctic winter of 1994/95. In Bojkov, R. D. and Visconti, G., editors, *Atmospheric Ozone, Proceedings of the XVIII Quadrennial Ozone Symposium, L’Aquila, Italy, 12–21 September 1996*. International Ozone Commission.
- [Höpfner et al., 1998b] Höpfner, M., Blom, C. E., Fischer, H., Glatthor, N., Gulde, T., Piesch, C., Renger, W., and Wirth, M. (1998b).  $\text{HNO}_3$  and PSC measurements from the TRANSALL: Sequestering of  $\text{HNO}_3$  in the winter of 1994/95. *J. Atmos. Chem.*, 30(1):61–79.
- [Höpfner et al., 2001a] Höpfner, M., Blom, C. E., Fischer, H., Gulde, T., Keim, C., Kimmig, W., Lessenich, K., Piesch, C., Ruhnke, R., and Sartorius, C. (2001a). MIPAS-STR observations of  $\text{HNO}_3$  and  $\text{ClONO}_2$  in the Antarctic polar stratosphere during September/October 1999. Vortrag bei EGS2001, 25.-30.3.01, Nizza.
- [Höpfner et al., 2000b] Höpfner, M., Blom, C. E., Fischer, H., Gulde, T., Keim, C., Kimmig, W., Lessenich, K., Piesch, C., Sartorius, C., v. Clarmann, T., Glatthor, N., Hase, F., and Stiller, G. (2000b). MIPAS–STR data analysis of APE–GAIA measurements. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000*.
- [Höpfner et al., 2001b] Höpfner, M., Blumenstock, T., Hase, F., and Zimmermann, A. (2001b). Comparison of mountain wave PSC measurements over northern Scandinavia by ground based FTIR and airborne lidar. Vortrag bei EGS2001, 25.-30.3.01, Nizza.
- [Höpfner and Echle, 2000] Höpfner, M. and Echle, G. (2000). The broadband continuum implementation. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 95–100. Forschungszentrum Karlsruhe.

- [Höpfner and Kellmann, 2000] Höpfner, M. and Kellmann, S. (2000). Optimization of model accuracy parameters. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 145–482. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Höpfner et al., 1999] Höpfner, M., Kellmann, S., and Stiller, G. P. (1999). Parameter optimisation for the line-by-line radiative transfer model KOPRA to be used in MIPAS–ENVISAT retrievals. In Barbe, A., Flaud, J.-M., and Rothman, L., editors, *Proceedings of the Atmospheric Spectroscopy Application*, pages 71–74. ASA’99, Reims, France, 1–3 Sept. 1999.
- [Höpfner et al., 1997] Höpfner, M., Stiller, G. P., Kemnitzer, H., Carli, B., Raspollini, P., Ridolfi, M., Carlotti, M., Vigiani, A., and Flaud, J.-M. (1997). An optimized forward and retrieval model for MIPAS near real time data evaluation. In *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, 12–14 May 1997*, Postfach 3640, D–76021 Karlsruhe, Germany. Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Meteorologie und Klimaforschung.
- [Höpfner et al., 1998c] Höpfner, M., Stiller, G. P., Kuntz, M., von Clarmann, T., Echle, G., Funke, B., Glatthor, N., Hase, F., Kemnitzer, H., and Zorn, S. (1998c). 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.
- [Höpfner et al., 2001c] Höpfner, M., von Clarmann, T., Echle, G., and Zimmermann, A. (2001c). Retrieval of PSC properties from MIPAS–ENVISAT measurements. In Sasano, Y., Wang, J., and Hayasaka, T., editors, *Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds II*, volume 4150, pages 52–61.
- [Höpfner et al., 2001] Höpfner, M., Blumenstock, T., Hase, F., Zimmermann, A., Flentje, H., and Fueglistaler, S. (2001). Mountain polar stratospheric cloud measurements by ground based FTIR solar absorption spectroscopy. *Geophys. Res. Lett.*, 28(11):2189–2192.
- [Kerridge et al., 2001] Kerridge, B. J., Reburn, W. J., Siddans, R., Smith, D. L., Watts, P. D., von Clarmann, T., Stiller, G. P., Linden, A., Kellmann, S., Remedios, J. J., Lama, F., Barnett, J. J., Murtagh, D., Stegman, J., Merino, F., Baron, P., Roscoe, H., Hausamann, D., Birk, M., Schreier, F., Schimpf, B., van Weele, M., Kelder, H., van Velthoven, P., Gauss, M., Isaksen, I., Hauglustaine, D., Clerbaux, C., Boucher, O., López-Puertas, M., and Flaud, J.-M. (2001). Definition of mission objectives and observational requirements for an atmospheric chemistry explorer mission. Technical report, Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, GB. Final Report of ESA Contract No.: 13048/98/NL/GD.
- [Kiefer et al., 2001] Kiefer, M., von Clarmann, T., and Grabowski, U. (2001). Atmospheric state parameter database for MIPAS. *Adv. Space Res.*, accepted for publication.
- [Kimmich, 2000] Kimmich, E. (2000). Eignung von MIPAS–ENVISAT–Daten zur Untersuchung der Chloraktivierung und Denoxifizierung im winterlichen Polarwirbel. Master’s thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Kostsov et al., 1997] Kostsov, V. S., Fischer, H., Timofeyev, Y. M., and Stiller, G. P. (1997). MIPAS used as a nonlocal thermodynamic equilibrium sounder for NO 5.3  $\mu\text{m}$  band. *J. Geophys. Res.*, 102(D25):30,003–30,015.

- [Kuntz, 1997a] Kuntz, M. (1997a). Accelerated line-by-line calculation of spectral absorption coefficients while retaining high numerical accuracy. In *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, 12–14 May 1997*, Postfach 3640, D–76021 Karlsruhe, Germany. Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Meteorologie und Klimaforschung.
- [Kuntz, 1997b] Kuntz, M. (1997b). A new implementation of the Humlicek algorithm for the calculation of the Voigt profile function. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 57(6):819–824.
- [Kuntz, 2000] Kuntz, M. (2000). Absorption coefficients, line collection and frequency grid. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 43–68. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Kuntz and Höpfner, 1999] Kuntz, M. and Höpfner, M. (1999). Efficient line-by-line calculation of absorption coefficients. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 63(1):97–114.
- [Kuntz and Höpfner, 2000] Kuntz, M. and Höpfner, M. (2000). The Voigt profile and the Planck function. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 107–118. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Kuntz et al., 1998] Kuntz, M., Höpfner, M., Stiller, G. P., 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 III: ADDLIN and TRANSF algorithms for modeling spectral transmittance and radiance. 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 247–256.
- [Lessenich, 2000] Lessenich, K. (2000). Ableitung von zweidimensionalen Verteilungen atmosphärischer Parameter aus MIPAS-STR-Spektren der APE-GAIA Messkampagne. Master’s thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Linden, 1991] Linden, A. (1991). Die Bestimmung von Tangentenhöhen aus Horizontsondierungsspektren im infraroten Spektralbereich. Master’s thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [López-Puertas et al., 1999a] López-Puertas, M., López-Valverde, M. Á., Martín-Torres, F. J., Zaragoza, G., Dudhia, A., von Clarmann, T., Kerridge, B. J., and Flaud, J.-M. (1999a). Non-LTE studies for the Envisat/MIPAS instrument. In *Proc. 25<sup>th</sup> Annual European Meeting on Atmospheric Studies by Optical Methods, Granada (ASOM), Spain, 21–25 September 1998*, pages 195–205.
- [López-Puertas et al., 1999b] López-Puertas, M., López-Valverde, M. Á., Martín-Torres, F. J., Zaragoza, G., Dudhia, A., von Clarmann, T., Kerridge, B. J., Koutoulaki, K., and Flaud, J.-M. (1999b). Non-LTE studies for the MIPAS instrument. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS’99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 257–264. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.

- [López-Puertas et al., 1996] López-Puertas, M., Zaragoza, G., López-Valverde, M. Á., Martín-Torres, F. J., Shved, G., Manuilova, R. O., Kutepov, A. A., Gusev, O., von Clarmann, T., Linden, A., Stiller, G., Wegner, A., Oelhaf, H., and Flaud, J.-M. (1996). Evaluation of non-LTE effects in MIPAS pressure, temperature and volume mixing ratio retrievals (non-LTE study). Technical report, European Space Agency. Final Report of ESA Purchase Order 151625/1995.
- [López-Puertas et al., 1998] López-Puertas, M., Zaragoza, G., López-Valverde, M. Á., Martín-Torres, F. J., Shved, G. M., Manuilowa, R. O., Kutepov, A. A., Gusev, O., von Clarmann, T., Linden, A., Stiller, G., Wegner, A., Oelhaf, H., Edwards, D. P., and Flaud, J.-M. (1998). Non-local thermodynamic equilibrium limb radiances for the MIPAS instrument on ENVISAT-1. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 59(3-5):377-403.
- [Manuilova et al., 1996] Manuilova, R. O., Gusev, O. A., Kutepov, A. A., von Clarmann, T., Oelhaf, H., Stiller, G. P., Wegner, A., López-Puertas, M., Martín-Torres, F. J., Zaragoza, G., and Flaud, J.-M. (1996). Modelling on non-LTE limb spectra of IR ozone bands for the MIPAS space experiment. In Barbe, A., Flaud, J.-M., Jacon, M., Mérienne, M. F., and Rothman, L., editors, *Proc. 4<sup>th</sup> Atmospheric Spectroscopy Applications, Reims, 4-6 September, 1996*. Université de Reims Champagne Ardenne.
- [Manuilova et al., 1998] Manuilova, R. O., Gusev, O. A., Kutepov, A. A., von Clarmann, T., Oelhaf, H., Stiller, G. P., Wegner, A., López-Puertas, M., Martín-Torres, F. J., Zaragoza, G., and Flaud, J.-M. (1998). Modelling of non-LTE limb spectra of IR ozone bands for the MIPAS space experiment. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 59(3-5):405-422.
- [Martín-Torres et al., 1999] Martín-Torres, F. J., López-Puertas, M., von Clarmann, T., Echle, G., Funke, B., and Höpfner, M. (1999). Retrieval of O<sub>3</sub> concentration profiles and critical parameters in non-LTE models from MIPAS/ENVISAT-1 limb spectra. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18-22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 577-580. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Martín-Torres et al., 2001] Martín-Torres, F. J., von Clarmann, T., Funke, B., Stiller, G. P., and López-Puertas, M. (2001). Prospects for retrieval of O<sub>3</sub> and non-LTE parameters from MIPAS/ENVISAT spectra. Poster bei EGS2001, 25.-30.3.01, Nizza.
- [Milz, 1998] Milz, M. (1998). Objektive und automatisierte Bewertung von gemessenen Infrarotspektren und Residuenspektren. Master's thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Milz and von Clarmann, 1997] Milz, M. and von Clarmann, T. (1997). Automatic, objective, and quantitative assessment of best fit residual spectra. In *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, 12-14 May '97*, Postfach 3640, D-76021 Karlsruhe, Germany. Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Meteorologie und Klimaforschung.
- [Milz and von Clarmann, 1999] Milz, M. and von Clarmann, T. (1999). Automated quality control of scene and residual FTIR spectra. In Carleer, M., Hilton, M., Lamp, T., Reuter, R., Russwurm, G. M., Schäfer, K., Weber, K., Weitkamp, K., Wolf, J.-P., and Woppowa, L., editors, *Environmental Sensing and Applications*, volume 3821 of *EUROPTO*, pages 404-415. 14-17 June 1999, Munich, Germany.

- [Milz et al., 1999a] Milz, M., von Clarmann, T., Stiller, G., Echle, G., and Fischer, H. (1999a). Retrieval of water vapour in the upper troposphere and lower stratosphere with MIPAS/ENVISAT. In *Proc. 8<sup>th</sup> Internat. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, Toulouse, France, Nov 16–18, 1998*, pages 321–324.
- [Milz et al., 1999b] Milz, M., von Clarmann, T., Stiller, G., and Fischer, H. (1999b). Measurement of water vapour in the upper troposphere and lower stratosphere with MIPAS/ENVISAT. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 395–400. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Milz et al., 1999c] Milz, M., von Clarmann, T., Stiller, G., and Fischer, H. (1999c). Retrieval of water vapour in the upper troposphere/lower stratosphere from MIPAS/Envisat limb emission spectra. In Larar, A. M., editor, *Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research III*, volume 3756, pages 536–543. 44th Annual Meeting, International Symposium on 19–21 July 1999, Denver, Colorado, USA.
- [Notholt et al., 1993] Notholt, J., Neuber, R., Schrems, O., and von Clarmann, T. (1993). Stratospheric trace gas concentrations in the Arctic polar night derived by FTIR–spectroscopy with the moon as IR light source. *Geophys. Res. Lett.*, 20(19).
- [Notholt et al., 1994] Notholt, J., von Clarmann, T., Adrian, G. P., and Schrems, O. (1994). Ground–based FTIR measurements of ClONO<sub>2</sub> vertical column amounts in the Arctic. *Geophys. Res. Lett.*, 21(13):1359–1362.
- [Oelhaf and Fischer, 1995] Oelhaf, H. and Fischer, H. (1995). Observations of the stratospheric composition with the balloon-borne and space-based MIPAS limb emission sounders. Sonderdruck IEEE.
- [Oelhaf et al., 1991] Oelhaf, H., von Clarmann, T., Fergg, F., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Fritzsche, C., Piesch, C., Rabus, D., Seefeldner, M., and Völker, W. (1991). Remote sensing of trace gases with a balloon borne version of the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). In *Proceedings 10<sup>th</sup> ESA Symposium on European Rocket and Balloon Programmes and Related Research, Mandelieu-Cannes, France, 27–31 May, 1991*. ESA SP–317.
- [Oelhaf et al., 1994] Oelhaf, H., von Clarmann, T., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Fritzsche, C., Linden, A., Piesch, C., Seefeldner, M., and Völker, W. (1994). Stratospheric ClONO<sub>2</sub> and HNO<sub>3</sub> profiles inside the Arctic vortex from MIPAS–B limb emission spectra obtained during EASOE. *Geophys. Res. Lett.*, 21(13):1263–1266.
- [Oelhaf et al., 2000] Oelhaf, H., Wetzell, G., Höpfner, M., Friedl-Vallon, F., Glatthor, N., Maucher, G., Stiller, G., Trieschmann, O., von Clarmann, T., Birk, M., and Wagner, G. (2000). Interconsistency checks of ClONO<sub>2</sub> retrievals from MIPAS–B spectra by using different bands and spectroscopic parameter sources. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000*.
- [Raspollini et al., 1999a] Raspollini, P., Carli, B., Carlotti, M., Dinelli, B. M., Dudhia, A., Flaud, J.-M., Höpfner, M., Morris, P. E., Ridolfi, M., Stiller, G. P., and Wells, R. J. (1999a). Optimisations and performance of the retrieval algorithm for MIPAS near real time data processing. In *Proc. Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, ASSFTS '98, 16–18 November 1998, Toulouse, France*, pages 81–88.

- [Raspollini et al., 1999b] Raspollini, P., Höpfner, M., and Ridolfi, M. (1999b). A retrieval model for near real time analysis of limb sounding observations. In *Proc. 6<sup>th</sup> Scientific Conference of the International Global Atmospheric Chemistry Project (IGAC), Bologna, Italy, 13–17 Sep 1999*.
- [Ridolfi et al., 1998] Ridolfi, M., Carli, B., Carlotti, M., Dudhia, A., Flaud, J.-M., Höpfner, M., Morris, P. E., Raspollini, P., Stiller, G. P., and Wells, R. J. (1998). An optimized forward and retrieval model for MIPAS near real time data processing. 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 170–185.
- [Ridolfi et al., 2000a] 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. (2000a). Optimized forward and retrieval scheme for MIPAS near-real-time data processing. *Appl. Opt.*, 39(8):1323–1340.
- [Ridolfi et al., 2000b] Ridolfi, M., Höpfner, M., and Raspollini, P. (2000b). Expected performances of near real time MIPAS data analysis. In Harris, N. R. P., Guirlet, M., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 5<sup>th</sup> European Workshop on Stratospheric Ozone, St. Jean de Luz, France, 27 Sep-1 Oct 1999*, pages 723–726, Brussels, Belgium. European Commission. Air Pollution Research Report 73.
- [Schmidt, 1993] Schmidt, M. (1993). Ableitung von Vertikalprofilen ozonrelevanter Spurengase aus MIPAS-B-90 Messungen: Methode, Ergebnisse, Fehleranalyse. Master's thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Steck, 2000] Steck, T. (2000). *Bestimmung von Vertikalprofilen von Spurengasen aus MIPAS-Messungen unter Hinzunahme von a priori Wissen*. PhD thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Kernforschungszentrum Karlsruhe. Dissertation, DLR-FB 2000-01, ISSN 1434-8454.
- [Steck and von Clarmann, 1997] Steck, T. and von Clarmann, T. (1997). Use of a priori knowledge within an ENVISAT MIPAS processor. In *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, 12–14 May '97*, Postfach 3640, D-76021 Karlsruhe, Germany. Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Meteorologie und Klimaforschung.
- [Steck and von Clarmann, 1999a] Steck, T. and von Clarmann, T. (1999a). The MIPAS ENVISAT level 2 offline processor: III use of a priori knowledge within the retrieval. In *Proc. 8<sup>th</sup> Internat. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, Toulouse, France, Nov 16–18, 1998*, pages 325–332.
- [Steck and von Clarmann, 1999b] Steck, T. and von Clarmann, T. (1999b). Use of a priori knowledge in the analysis of MIPAS ENVISAT data. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 523–528. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Steck and von Clarmann, 2000a] Steck, T. and von Clarmann, T. (2000a). Constrained constituent retrieval in the MIPAS-ENVISAT level 2 off-line processor. In *Proc. 9<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, ASSFTS 2000, 22–24 May 2000, Kyoto, Japan*, pages 74–78.

- [Steck and von Clarmann, 2000b] Steck, T. and von Clarmann, T. (2000b). Regularisation in MIPAS ENVISAT off-line constituent retrieval: Strategy and diagnostics. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000*.
- [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, 1995] Stiller, G. P. (1995). p–T profiles from rotational analysis of CO<sub>2</sub> lines in ATMOS/ATLAS-1 data. In *Proceedings of the 6<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, San Juan Capistrano, CA, USA, 3–5 Oct 1995*.
- [Stiller, 2000a] Stiller, G. P., editor (2000a). *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm (KOPRA)*, volume FZKA 6487 of *Wissenschaftliche Berichte*. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Stiller, 2000b] Stiller, G. P. (2000b). Overall retrieval error budget and a posteriori justification of modeling choices. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 521–540. Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Stiller et al., 1997] Stiller, G. P., Funke, B., Hase, F., Höpfner, M., Kemnitzer, H., Kuntz, M., Zorn, S., von Clarmann, T., and Echle, G. (1997). An accurate and optimized infrared radiative transfer model for pressure/temperature and trace gas retrieval from microwindows. In *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, 12–14 May 1997*, Postfach 3640, D-76021 Karlsruhe, Germany. Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Meteorologie und Klimaforschung.
- [Stiller et al., 2001a] Stiller, G. P., Glatthor, N., Kellmann, S., Kimmich, E., Linden, A., Milz, M., and Rohrer, F. (2001a). Retrieval of upper tropospheric species from MIPAS/ENVISAT and their use in atmospheric modeling. Vortrag bei EGS2001, 25.-30.3.01, Nizza.
- [Stiller et al., 2000] Stiller, G. P., Glatthor, N., Kellmann, S., Linden, A., Milz, M., and Fischer, H. (2000). MIPAS on ENVISAT as an UT/LS sounder. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000*. accepted for publication.
- [Stiller et al., 1995a] Stiller, G. P., Gunson, M. R., Lowes, L. L., Abrams, M. C., Raper, O. F., Farmer, C. B., Zander, R., and Rinsland, C. P. (1995a). Stratospheric and mesospheric pressure–temperature profiles from rotational analysis of CO<sub>2</sub> lines in atmospheric trace molecule spectroscopy/ATLAS1 infrared solar occultation spectra. *J. Geophys. Res.*, 100(D2):3107–3117.
- [Stiller et al., 1998] Stiller, G. P., Höpfner, M., Kuntz, M., von Clarmann, T., Echle, G., Fischer, H., Funke, B., Glatthor, N., Hase, F., Kemnitzer, H., and Zorn, S. (1998). The Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm. Part I: Requirements, justification, and model error estimation. 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 257–268.

- [Stiller et al., 1999a] Stiller, G. P., Höpfner, M., Kuntz, M., von Clarmann, T., Echle, G., Fischer, H., Funke, B., Glatthor, N., Hase, F., and Zorn, S. (1999a). The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA): Realization, model error assessment and a posteriori justification. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 749–756. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [Stiller et al., 1999b] Stiller, G. P., Höpfner, M., Kuntz, M., von Clarmann, T., Echle, G., Funke, B., Glatthor, N., Hase, F., Kemnitzer, H., and Zorn, S. (1999b). Model error assessment and a posteriori justification for the Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm (KOPRA). In *Proc. 8<sup>th</sup> Internat. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, Toulouse, France, Nov 16–18, 1998*, pages 265–268.
- [Stiller et al., 2001b] Stiller, G. P., von Clarmann, T., Funke, B., Glatthor, N., Hase, F., Höpfner, M., and Linden, A. (2001b). Sensitivity of trace gas abundances retrievals from infrared limb emission spectra to simplifying approximations in radiative transfer modeling. accepted by *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*.
- [Stiller et al., 1995b] Stiller, G. P., von Clarmann, T., Wegner, A., Baumann, M., Frank, E., and Oelhaf, H. (1995b). Retrieval of tropospheric versus stratospheric partitioning of HCl from ground-based MIPAS FTIR spectra. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 54(5):899–912.
- [Stowasser et al., 1997] Stowasser, M., Oelhaf, H., Wetzel, G., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Maucher, G., Seefeldner, M., Trieschmann, O., and von Clarmann, T. (1997). Stratospheric arctic winter profiles of CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O and HDO, measured by MIPAS-B. In Harris, N. R. P., Kilbane-Dawe, I., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 4<sup>th</sup> Eur. Symp. on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 22–26 Sep 1997*, pages 506–509, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 66.
- [Stowasser et al., 1999] Stowasser, M., Oelhaf, H., Wetzel, G., Friedl-Vallon, F., Maucher, G., Seefeldner, M., Trieschmann, O., von Clarmann, T., and Fischer, H. (1999). Simultaneous measurements of HDO, H<sub>2</sub>O and CH<sub>4</sub> with MIPAS-B; hydrogen budget and indication of dehydration inside the polar vortex. *J. Geophys. Res.*, 104(D16):19,213–19,226.
- [Thomas et al., 1994] Thomas, P., von Clarmann, T., Blumenstock, T., Fischer, H., Gerhardt, L., Gulde, T., Oelhaf, H., Scheuerpflug, W., Stiller, G. P., Trieschmann, O., and Wegner, A. (1994). Bodengebundene Messungen relevanter Spurengase zur Erforschung der Ozonchemie in der arktischen Stratosphäre mit Fourier-Spektrometern. Wissenschaftliche Berichte KfK 5242, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Tjemkes et al., 2000] Tjemkes, S., Patterson, T., Schluessel, P., and Tobin, D. (2000). The ISSWG line by line intercomparison. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000*.
- [von Clarmann, 1986] von Clarmann, T. (1986). Untersuchungen zur Strahldichteberechnung mit Linie-für-Linie Computerprogrammen. Master's thesis, Meteorologisches Institut, Ludwig-Maximilians-Universität München.
- [von Clarmann, 1990] von Clarmann, T. (1990). Die Bestimmung von Mischungsverhältnissen stratosphärischer Spurengase aus Emissionsspektren im infraroten

- Spektralbereich. Wissenschaftliche Berichte KfK 4698, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [von Clarmann, 1993] von Clarmann, T. (1993). From 'onion peeling' to 'cutting onion cubes'. In *Optical Remote Sensing of the Atmosphere Technical Digest 1993*, volume 5, pages 384–387. Optical Society of America, Washington, D.C.
- [von Clarmann, 1994] von Clarmann, T. (1994). RAT: A computational tool for retrieval of atmospheric trace gas profiles from infrared spectra. Wissenschaftliche Berichte KfK 5423, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [von Clarmann, 1995] von Clarmann, T. (1995). Simultaneous T, p & z retrieval from MIPAS limb emission data. In *Proceedings of the 6<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, San Juan Capistrano, CA, USA, 3–5 Oct 1995*.
- [von Clarmann and Adrian, 1993] von Clarmann, T. and Adrian, G. P. (1993). Impact of clouds on slant path emission spectra. In Keevallik, S. and Kaerner, O., editors, *IRS '92: Current Problems in Atmospheric Radiation*, pages 315–318. A. Deepak Publishing, Hampton, Va, USA.
- [von Clarmann et al., 2001a] von Clarmann, T., Bovensmann, H., Ceccherini, S., Dudhia, A., Funke, J.-M. F. B., García-Comas, M., Hilgers, S., Höpfner, M., Jay, V., Kerridge, B. J., Kyrölä, E., López-Puertas, M., Martín-Torres, F. J., Reburn, J., Ridolfi, M., Schreier, F., Schwarz, G., Siddans, R., and Stiller, G. P. (2001a). Advanced MIPAS level 2 data processing (AMIL2DA). In *Proceedings of the Pre-launch Workshop on the Atmospheric Chemistry Validation of Envisat (ACVE)*. ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, May 16-18, 2001. submitted.
- [von Clarmann et al., 1998] von Clarmann, T., Dudhia, A., Echle, G., Flaud, J.-M., Harrold, C., Kerridge, B., Koutoulaki, A., Linden, A., López-Puertas, M., López-Valverde, M. Á., Martín-Torres, F. J., Reburn, J., Remedios, J., Rodgers, C. D., Siddans, R., Wells, R. J., and Zaragoza, G. (1998). Study on the simulation of atmospheric infrared spectra. Technical report, European Space Agency. Final Report of ESA Contract 12054/96/NL/CN.
- [von Clarmann and Echle, 1997a] von Clarmann, T. and Echle, G. (1997a). 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, 1997b] von Clarmann, T. and Echle, G. (1997b). Selection of optimized microwindows for atmospheric spectroscopy. In *Proceedings of the 7<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, 12–14 May 1997*, Postfach 3640, D-76021 Karlsruhe, Germany. Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Meteorologie und Klimaforschung.
- [von Clarmann and Echle, 1998a] von Clarmann, T. and Echle, G. (1998a). Microwindow optimization for atmospheric spectroscopy. In Wang, J., Wu, B., Ogawa, T., and Guan, Z., editors, *Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds*, volume 3501, pages 238–246. Optical Remote Sensing, 15–17 September 1998, Beijing, China.
- [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., 2000a] von Clarmann, T., Echle, G., Fischer, H., Funke, B., Glatthor, N., Grabowski, U., Höpfner, M., Kiefer, M., Milz, M., and Stiller, G. P. (2000a). MIPAS interactive semi-operational level-2 data processing. In *Proc. 9<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, ASSFTS 2000, 22-24 May 2000, Kyoto, Japan*, pages 79-82.
- [von Clarmann et al., 2000b] von Clarmann, T., Echle, G., Fischer, H., Glatthor, N., and Kimmich, E. (2000b). Optimized microwindows in atmospheric spectroscopy. *Proc. SPIE, Remote Sensing of the Atmosphere, Environment, and Space*, Sendai, Japan, 9-12 Oct 2000, accepted for publication.
- [von Clarmann et al., 2000c] von Clarmann, T., Echle, G., Funke, B., Glatthor, N., Grabowski, U., Höpfner, M., Kiefer, M., and Stiller, G. (2000c). MIPAS interactive semi-operational level-2 data processing. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24-29 July 2000*.
- [von Clarmann et al., 1993a] von Clarmann, T., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Linden, A., Oelhaf, H., Piesch, C., Seefeldner, M., and Völker, W. (1993a). Retrieval of stratospheric O<sub>3</sub>, HNO<sub>3</sub> and ClONO<sub>2</sub> profiles from 1992 MIPAS-B limb emission spectra: Method, results and error analysis. *J. Geophys. Res.*, 98(D11):20,495-20,506.
- [von Clarmann and Friedle, 1999] von Clarmann, T. and Friedle, A. (1999). The MIPAS ENVISAT level 2 scientific offline processor: 2. retrieval concepts. In *Proc. 8<sup>th</sup> International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, ASSFTS '98, 16-18 November 1998, Toulouse, France*, pages 73-80.
- [von Clarmann et al., 2001b] von Clarmann, T., Grabowski, U., and Kiefer, M. (2001b). On the role of non-random errors in inverse problems in radiative transfer and other applications. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. in press 2001.
- [von Clarmann et al., 1995a] von Clarmann, T., Linden, A., and Echle, G. (1995a). The retrieval of pressure and temperature from MIPAS limb emission spectra. Technical report, European Space Agency. Final Report of ESA Purchase Order 142957.
- [von Clarmann et al., 1996a] von Clarmann, T., Linden, A., Echle, G., Wegner, A., and Fischer, H. (1996a). Retrieval of pressure and temperature from MIPAS-ENVISAT limb emission spectra. In Fischer, J., editor, *Satellite Remote Sensing and Modeling of Clouds and the Atmosphere*, volume 2961, pages 128-135. Satellite Remote Sensing, Taormina, 24 September 1996.
- [von Clarmann et al., 1997a] von Clarmann, T., Linden, A., Echle, G., Wegner, A., Fischer, H., and López-Puertas, M. (1997a). The retrieval of pressure and temperature from MIPAS-ENVISAT limb emission spectra. In Smith and Starnes, editors, *IRS '96: Current Problems in Atmospheric Radiation*, pages 557-560. Deepak Publishing.
- [von Clarmann et al., 2000d] von Clarmann, T., Linden, A., Funke, B., Dudhia, A., Edwards, D. P., López-Puertas, M., Kerridge, B., Kostsov, V., and Timofeyev, Y. (2000d). Intercomparison of non-LTE radiative transfer codes. In *Proceedings of the International Radiation Symposium IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, St. Petersburg, Russia, 24-29 July 2000*. accepted for publication.

- [von Clarmann et al., 1994] von Clarmann, T., Linden, A., and Oelhaf, H. (1994). The simultaneous retrieval of pressure and temperature from MIPAS limb emission spectra. Technical report, European Space Agency. Final Report of ESA Purchase Order 131253.
- [von Clarmann et al., 1995b] von Clarmann, T., Linden, A., Oelhaf, H., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Piesch, C., Seefeldner, M., Völker, W., Bauer, R., Engel, A., and Schmidt, U. (1995b). Determination of the stratospheric organic chlorine budget in the spring arctic vortex from MIPAS B limb emission spectra and air sampling experiments. *J. Geophys. Res.*, 100(D7):13,979–13,997.
- [von Clarmann et al., 1993b] von Clarmann, T., Oelhaf, H., and Fischer, H. (1993b). Analysis of MIPAS-B-89 limb emission spectra. In Keevallik, S. and Kaerner, O., editors, *IRS '92: Current Problems in Atmospheric Radiation*, pages 375–378. A. Deepak Publishing, Hampton, Va, USA.
- [von Clarmann et al., 1993c] von Clarmann, T., Oelhaf, H., and Fischer, H. (1993c). Retrieval of atmospheric O<sub>3</sub>, HNO<sub>3</sub>, CFC-11, and CFC-12 profiles from MIPAS-B-89 limb emission spectra. *Appl. Opt.*, 32(33):6808–6817.
- [von Clarmann et al., 1999a] von Clarmann, T., Stiller, G., Friedle, A., Ressel, K., and Steck, T. (1999a). The MIPAS level 2 off-line processor: Requirements and concepts. In *Proc. European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESAMS'99, 18–22 Jan 1999, Noordwijk*, pages 529–532. European Space Agency, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- [von Clarmann et al., 1999b] von Clarmann, T., Stiller, G. P., Friedle, A., Ressel, K., and Steck, T. (1999b). Scientific concept of the MIPAS level 2 offline processor. In *Fourier Transform Spectroscopy: New Methods and Applications*, OSA Technical Digest, pages 79–81. Optical Society of America, Washington, D.C.
- [von Clarmann et al., 1997b] von Clarmann, T., Wetzel, G., Oelhaf, H., Friedl-Vallon, F., Linden, A., Maucher, G., Seefeldner, M., Trieschmann, O., and Lefèvre, F. (1997b). ClONO<sub>2</sub> vertical profile and estimated mixing ratios of ClO and HOCl in winter Arctic stratosphere from Michelson interferometer for passive atmospheric sounding limb emission spectra. *J. Geophys. Res.*, 102(D13):16,157–16,168.
- [von Clarmann et al., 1996b] von Clarmann, T., Wetzel, G., Oelhaf, H., Linden, A., Trieschmann, O., and Lefèvre, F. (1996b). Vertical profiles of ClONO<sub>2</sub> from the balloon-borne MIPAS limb emission experiment. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3<sup>d</sup> Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 276–279, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Wegner, 1991] Wegner, A. (1991). Der Einfluß des nichtinfinitesimalen Gesichtsfeldes auf die Auswertung von spektral hochaufgelösten Horizontsondierungsspektren. Master's thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Wegner et al., 1998] Wegner, A., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Maucher, G., Blumenstock, T., and Thomas, P. (1998). Sequestration of HNO<sub>3</sub> in polar stratospheric clouds and chlorine activation as monitored by ground-based Fourier transform infrared solar absorption measurements. *J. Geophys. Res.*, 103(D17):22,181–22,200.

- [Wegner et al., 1996] Wegner, A., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Trieschmann, O., and Fischer, H. (1996). Variation of tropospheric HCl amounts over Kiruna/North Sweden with different tropospheric air masses. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3<sup>rd</sup> Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 286–291, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Wegner et al., 1997] Wegner, A., Stiller, G. P., von Clarmann, T., Trieschmann, O., Fischer, H., and Reimer, E. (1997). Variation of tropospheric HCl amounts over northern Sweden. *Geophys. Res. Lett.*, 24(8):849–852.
- [Wetzel et al., 1997a] Wetzel, G., Oelhaf, H., Ruhnke, R., Friedl-Vallon, F., Kouker, W., Maucher, G., Reddmann, T., Seefeldner, M., Seifert, A., Trieschmann, O., von Clarmann, T., and Fischer, H. (1997a). Nitrogen partitioning inside the 1997 late winter Arctic vortex derived from MIPAS–B limb emission spectra. In Harris, N. R. P., Kilbane-Dawe, I., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 4<sup>th</sup> Eur. Symp. on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 22–26 Sep 1997*, pages 518–521, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 66.
- [Wetzel et al., 1997b] Wetzel, G., Oelhaf, H., von Clarmann, T., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Maucher, G., Seefeldner, M., Trieschmann, O., and Lefèvre, F. (1997b). Vertical profiles of  $N_2O_5$ ,  $HO_2NO_2$ , and  $NO_2$  inside the Arctic vortex, retrieved from nocturnal MIPAS–B2 infrared limb emission measurements in February 1995. *J. Geophys. Res.*, 102(D15):19,177–19,186.
- [Wetzel et al., 1998] Wetzel, G., Oelhaf, H., von Clarmann, T., Fischer, H., Friedl-Vallon, F., Maucher, G., Seefeldner, M., Trieschmann, O., Lefèvre, F., Phillips, C., Pommereau, J.-P., Pirre, M., and Renard, J.-B. (1998). Vertical profiles of  $N_2O_5$ ,  $HO_2NO_2$ , and  $NO_2$  in the Stratospheric Arctic winter, retrieved from MIPAS–B2 infrared limb emission spectra: Comparison with model calculations and other measurements. In Bojkov, R. D. and Visconti, G., editors, *Atmospheric Ozone, Proceedings of the XVIII Quadrennial Ozone Symposium, L’Aquila, Italy, 12–21 September 1996*, volume 1, pages 619–622. International Ozone Commission.
- [Wetzel et al., 1996] Wetzel, G., von Clarmann, T., Fischer, H., Oelhaf, H., Trieschmann, O., and Lefèvre, F. (1996). Vertical profiles of  $N_2O_5$  from the balloon-borne MIPAS limb emission experiment. In Pyle, J. A., Harris, N. R. P., and Amanatidis, G. T., editors, *Proc. 3<sup>rd</sup> Eur. Workshop on Polar Stratospheric Ozone, Schliersee, Bavaria, 18–22 Sep 1995*, pages 183–186, Brussels, Luxemburg. European Commission. Air Pollution Research Report 56.
- [Wetzel et al., 1995] Wetzel, G., von Clarmann, T., Oelhaf, H., and Fischer, H. (1995). Vertical profiles of  $N_2O_5$  along with  $CH_4$ ,  $N_2O$  and  $H_2O$  in the late Arctic winter retrieved from MIPAS–B infrared limb emission measurements. *J. Geophys. Res.*, 100(D11):23,173–23,181.
- [Zander, 1995] Zander, R. (1995). IR retrieval algorithms intercomparison for the NDSC. In *Fourier Transform Spectroscopy: New Methods and Applications*, OSA Technical Digest Series, pages 104–106. Optical Society of America, Washington, D.C.
- [Zander et al., 1993] Zander, R., Demoulin, P., Mahieu, E., Adrian, G. P., Rinsland, C. P., and Goldman, A. (1993). ESMOSII/NDSC - IR spectral fitting algorithms intercomparison exercise. In Barbe, A. and Rothman, L., editors, *Proc. of Atmospheric Spectroscopy Applications-ASA Reims 93*.

- [Zimmermann, 2000] Zimmermann, A. (2000). Untersuchungen zur Ableitung mikrophysikalischer Parameter polarer stratosphärischer Wolken aus MIPAS-ENVISAT-Messungen. Master's thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Forschungszentrum Karlsruhe.
- [Zimmermann and Höpfner, 2000] Zimmermann, A. and Höpfner, M. (2000). Requirement for refractive indices for MIPAS-ENVISAT PSC analysis. In *Proceedings of the 6<sup>th</sup> Biennial HITRAN Database Conference, 19.-21.06.2000, Cambridge, MA*.
- [Zorn, 1994] Zorn, S. (1994). Ableitung von Vertikalprofilen von  $O_3$ ,  $CH_4$ ,  $N_2O$  und  $N_2O_5$  aus MIPAS-Ballonmessungen. Master's thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Zorn et al., 2000] Zorn, S., von Clarmann, T., Höpfner, M., Stiller, G. P., Glatthor, N., and Linden, A. (2000). Cross-sections of heavy molecules and pseudo-lines. In Stiller, G. P., editor, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6487, pages 77–87. Forschungszentrum Karlsruhe.

## Verzeichnis verwendeter Literatur

- [Abbas et al., 1994] Abbas, M. M., Shapiro, G. L., Conrath, B. J., Kunde, V. G., and Maguire, W. C. (1994). Method for correction of errors in observation angles for limb thermal emission measurements. *Appl. Opt.*, 23:1862–1866.
- [Adrian, 1990a] Adrian, G. (1990a). Infrarot-Absorption von atmosphärischem Wasserdampf – Probleme und Modellansätze. Wissenschaftliche Berichte KfK 4717, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Adrian, 1990b] Adrian, G. P. (1990b). private communication.
- [Armstrong, 1982] Armstrong, R. L. (1982). Line mixing in the  $\nu_2$  band of  $\text{CO}_2$ . *Appl. Opt.*, 21(12):2141–2145.
- [Beer and Glavich, 1989] Beer, R. and Glavich, T. A. (1989). Remote sensing of the troposphere by infrared emission spectroscopy. In *Proc. SPIE*, volume 1129, pages 42–51. Int. Soc. Opt. Eng.
- [Birk and Wagner, 2000] Birk, M. and Wagner, G. (2000). A new spectroscopic database for chlorine nitrate. In *Proceedings of the 6<sup>th</sup> Biennial HITRAN Database Conference, 19.-21.06.2000, Cambridge, MA*.
- [Bolle, 1967] Bolle, H.-J. (1967). Infrarotspektroskopie als Hilfsmittel und Gegenstand meteorologischer und planetarischer Forschung. Forschungsbericht W67–17, BMFT.
- [Brasunas et al., 1988] Brasunas, J. C., Kunde, V. G., and Herath, L. W. (1988). Cryogenic Fourier spectrometer for measuring trace species in the lower stratosphere. *Appl. Opt.*, 27(23):4964–4976.
- [Brown et al., 1987] Brown, L. R., Farmer, C. B., Rinsland, C. P., and Toth, R. A. (1987). Molecular line parameters for the atmospheric trace molecule spectroscopy experiment. *Appl. Opt.*, 26(23):5154–5182.
- [Bulanin et al., 1984] Bulanin, M. O., Dokuchaev, A. B., Tonkov, M. V., and Filippov, N. N. (1984). Influence of line interference on the vibration–rotation band shapes. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 31(6):521–543.
- [Carlotti and Carli, 1994] Carlotti, M. and Carli, B. (1994). Approach to the design and data analysis of a limb–scanning experiment. *Appl. Opt.*, 33:3238–3249.
- [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.

- [Clough et al., 1986] Clough, S. A., Kneizys, F. X., Shettle, E. P., and Anderson, G. P. (1986). Atmospheric radiance and transmittance: FASCOD2. In *Proceedings of the Sixth Conference on Atmospheric Radiation*, pages 141–146. Am. Meteorol. Soc., Williamsburg, Va.
- [Curtis, 1952] Curtis, A. R. (1952). A statistical model for water–vapour absorption. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 78:638–640.
- [Farmer et al., 1987] Farmer, C. B., Raper, O. F., and O’Callaghan, F. G. (1987). Final report on the first flight of the ATMOS instrument during the Spacelab 3 mission, April 29 through May 6, 1985. JPL publication, Jet Propulsion Laboratory.
- [Fischer et al., 1988] Fischer, H., Anderson, G. P., von Clarmann, T., Clough, S. A., Coffey, M. T., Goldman, A., and Kneizys, F. X. (1988). Intercomparison of transmittance and radiance algorithms (ITRA), report of the limb-group of the ITRA-workshop at the University of Maryland 12–14 March 1986. Wissenschaftliche Berichte KfK 4349, Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- [Gille and House, 1971] Gille, J. C. and House, F. B. (1971). On the inversion of limb radiance measurements I: Temperature and thickness. *J. Atmos. Sci.*, 28:1427–1442.
- [Godson, 1953] Godson, W. L. (1953). The evaluation of infra–red radiative fluxes due to atmospheric water vapour. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 79:367–379.
- [Goldman and Saunders, 1979] Goldman, A. and Saunders, R. S. (1979). Analysis of atmospheric infrared spectra for altitude distribution of atmospheric trace constituents – I. Method of analysis. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 21:155–161.
- [Hall and Plumb, 1994] Hall, T. M. and Plumb, R. A. (1994). Age as a diagnostic of stratospheric transport. *J. Geophys. Res.*, 99:1059–1070.
- [Hartmann and L’Haridon, 1995] Hartmann, J. M. and L’Haridon, F. (1995). Simple modeling of line–mixing effects in IR bands. I. Linear molecules: Application to CO<sub>2</sub>. *J. Chem. Phys.*, 103(15):6467–6478.
- [Hartmann et al., 1996] Hartmann, J. M., Nguyen-Van-Thanh, Brodbeck, C., Benidar, A., Le Doucen, R., Regalia, L., and Barbe, A. (1996). Simple modeling of line–mixing effects in IR bands. II. Nonlinear molecules applications to O<sub>3</sub> and CHClF<sub>2</sub>. *J. Chem. Phys.*, 104(6):2185–2191.
- [Hedin, 1991] Hedin, A. E. (1991). Extension of the MSIS thermosphere model into the middle and lower atmosphere. *J. Geophys. Res.*, 96(A2):1159–1172.
- [Jacquinet-Husson et al., 1999] Jacquinet-Husson, N., Arié, E., Ballard, J., Barbe, A., Bjoeraker, G., Bonnet, B., Brown, L. R., Camy-Peyret, C., Champion, J. P., Chédin, A., Chursin, A., Clerbaux, C., Duxbury, G., Flaud, J.-M., Fourrié, N., Fayt, A., Graner, G., Gamache, R., Goldman, A., Golovko, V., Guelachvili, G., Hartmann, J. M., Hilico, J. C., Hillman, J., Lefèvre, G., Lellouch, E., Mikhaïlenko, S. N., Naumenko, O. V., Nemtchinov, V., Newnham, D. A., Nikitin, A., Orphal, J., Perrin, A., Reuter, D. C., Rinsland, C. P., Rosenmann, L., Rothman, L. S., Scott, N. A., Selby, J., Sinitsa, L. N., Sirota, J. M., Smith, A. M., Smith, K. M., Tyuterev, V. G., Tipping, R. H., Urban, S., Varanasi, P., and Weber, M. (1999). The 1997 spectroscopic GEISA databank. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 62(2):205–254.

- [Kopp et al., 1999] Kopp, G., Berg, H., Hochschild, G., and Ruhnke, R. (1999). Profiles of stratospheric trace gases retrieved from ground-based millimeter wave radiometry at Ny-Ålesund 1997 and Kiruna 1998. In *1999 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium Proceedings, Hamburg, July 1999*, volume IV, pages 2293–2295.
- [Kumer and Mergenthaler, 1991] Kumer, J. B. and Mergenthaler, J. L. (1991). Pressure, temperature and ozone profile retrieval from simulated atmospheric earth-limb infrared emission. *Appl. Opt.*, 30(9):1124–1131.
- [Kuntz, 1994] Kuntz, M. (1994). Inversion schlecht gestellter Probleme am Beispiel der bodengebundenen, passiven Millimeterwellenradiometrie. Technical report, Kernforschungszentrum Karlsruhe. Report KfK 5421.
- [Levenberg, 1944] Levenberg, A. (1944). A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares. *Quart. Appl. Math.*, 2:164–168.
- [Marquardt, 1963] Marquardt, D. W. (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 11(2):431–441.
- [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.
- [Oelhaf and Fischer, 1983] Oelhaf, H. and Fischer, H. (1983). Measurements of minor constituents in the middle atmosphere from IR limb emission spectra - a feasibility study. Technical report, Universität München, Meteorologisches Institut. Wissenschaftliche Mitteilung Nr. 47.
- [Penner, 1989] Penner, K. (1989). Berechnung von Horizontsondierungsspektren aus Liniendaten und Wirkungsquerschnitten der Erdatmosphäre. Master's thesis, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe.
- [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.
- [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.
- [Redemann, 1984] Redemann, E. (1984). Ein FORTRAN-Rechenprogramm zur Berechnung der atmosphärischen Transmission und Strahldichte. Technical report, Report des Meteorologischen Instituts der Ludwig-Maximilians-Universität München.
- [Rinsland et al., 1992] Rinsland, C. P., Gunson, M. R., Zander, R., and López-Puertas, M. (1992). Middle and upper atmosphere pressure-temperature profiles and the abundances of CO<sub>2</sub> and CO in the upper atmosphere from ATMOS/Spacelab 3 observations. *J. Geophys. Res.*, 97(D18):20,479–20,495.
- [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, 1990] Rodgers, C. D. (1990). Characterization and error analysis of profiles retrieved from remote sounding measurements. *J. Geophys. Res.*, 95(D5):5587–5595.

- [Rodgers and Connor, 1999] Rodgers, C. D. and Connor, B. J. (1999). Intercomparison of remote sounding instruments. In *Optical Remote Sensing of the Atmosphere*, OSA Technical Digest, pages 46–48. Optical Society of America, Washington DC, 1999.
- [Rosenkranz, 1975] Rosenkranz, P. W. (1975). Shape of the 5 mm oxygen band in the atmosphere. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, AP-23(4):498–506.
- [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  $\text{cm}^{-1}$  band. *J. Atmos. Sci.*, 29:376–390.
- [Schimpf, 1996] Schimpf, B. (1996). Inversion durch Regularisierung zur Bestimmung von atmosphärischen Molekül-Konzentrationen aus Fern-Infrarot-Spektren. Master's thesis, Technische Universität München.
- [Sharma et al., 1996] Sharma, R. D., Doethe, H., and von Esse, F. (1996). On the rotational distribution of the 5.3  $\mu\text{m}$  'thermal' emission from nitric oxide in the night time terrestrial atmosphere. *J. Geophys. Res.*, 101(A8):17,129–17,135.
- [Strow and Reuter, 1988] Strow, L. L. and Reuter, D. (1988). Effect of line mixing on atmospheric brightness temperatures near 15  $\mu\text{m}$ . *Appl. Opt.*, 27(5):872–878.
- [Strow et al., 1994] Strow, L. L., Tobin, D. C., and Hannon, S. E. (1994). A compilation of first-order line-mixing coefficients for  $\text{CO}_2$  Q-branches. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 52(3/4):281–294.
- [Tikhonov, 1963] Tikhonov, A. (1963). On the solution of incorrectly stated problems and method of regularization. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 151:501.
- [Timofeyev and Tonkov, 1978] Timofeyev, Y. M. and Tonkov, M. V. (1978). Effect of the induced oxygen absorption band on the transformation of radiation in the 6  $\mu\text{m}$  region of the Earth's atmosphere. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.*, 14(6):437–441. Engl. Transl.
- [Tobin, 1993] Tobin, D. C. (1993). Carbon dioxide lineshapes in  $\Pi \leftarrow \Sigma$  and  $\Pi \leftarrow \Delta$  vibrational transitions. Master's thesis, University of Maryland Baltimore County.
- [Varanasi, 1992a] Varanasi, P. (1992a). Absorption coefficients of CFC-11 and CFC-12 needed for atmospheric remote sensing and global warming studies. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 48(2):205–219.
- [Varanasi, 1992b] Varanasi, P. (1992b). Absorption spectra of HCFC-22 around 829  $\text{cm}^{-1}$  at atmospheric conditions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 47(4):251–255.
- [Varanasi et al., 1992] Varanasi, P., Gopalan, A., and Brannon, Jr., J. F. (1992). Infrared absorption-coefficient data on  $\text{SF}_6$  applicable to atmospheric remote sensing. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 48(2):141–145.

- [Varanasi et al., 1994] Varanasi, P., Li, Z., Nemtchinov, V., and Cherukuri, A. (1994). Spectral absorption-coefficient data on HCFC-22 and SF<sub>6</sub> for remote-sensing applications. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 52(3/4):323–332.
- [Varanasi and Nemtchinov, 1994] Varanasi, P. and Nemtchinov, V. (1994). Thermal infrared absorption coefficients of CFC-12 at atmospheric conditions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 51(5):679–687.