



Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 6909

**Quantifizierung und Optimierung
der radiometrischen Genauigkeit
des Fourierspektrometers
MIPAS-B2**

A. Kleinert

Institut für Meteorologie und Klimaforschung

Oktober 2003

Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6909

**Quantifizierung und Optimierung der
radiometrischen Genauigkeit des
Fourierspektrometers MIPAS-B2***

Anne Kleinert

Institut für Meteorologie und Klimaforschung

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2003

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

Quantifizierung und Optimierung der radiometrischen Genauigkeit des Fourierspektrometers MIPAS-B2

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

genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl.-Phys. Anne Kleinert
aus Ludwigsburg

Tag der mündlichen Prüfung: 22. November 2002
Referent: Prof. Dr. H. Fischer
Korreferent: Priv. Doz. Dr. habil. C. E. Blom

Zusammenfassung

Das ballongetragene, kryogene Fourierspektrometer MIPAS-B2 (Michelson-Interferometer für passive atmosphärische Sondierung – Ballonversion 2) mißt mit dem Verfahren der Horizontsondierung Emissionsspektren der Atmosphäre im mittleren infraroten Spektralbereich. Aus den Spektren werden vertikale Konzentrationsprofile vieler, ozon- und klimarelevanter Spurengase abgeleitet. Die Messung der atmosphärischen Emissionsstrahlung stellt hohe Ansprüche an das Instrument und die Datenprozessierung. Da trotz der Kühlung des Optikmoduls seine thermische Eigenemission in derselben Größenordnung liegt wie der Strahlungsbeitrag der Atmosphäre, ist für eine hohe Genauigkeit der kalibrierten Spektren eine eingehende Charakterisierung des radiometrischen Verhaltens des Instruments erforderlich.

Ziel dieser Arbeit ist die Quantifizierung und Optimierung der radiometrischen Genauigkeit von MIPAS-B2. Dafür werden die verschiedenen Fehlerquellen untersucht, die zu einem systematischen Fehler in den kalibrierten Spektren führen. Hierzu zählen das Rauschen in den Kalibrierungsmessungen, die Änderung der Instrument-Eigenemission durch thermische Drift, Fehler in der Bestimmung der Basislinie des Instruments aufgrund atmosphärischer Restsignaturen, Unsicherheiten in der Temperatur und dem Emissionsvermögen des zur Kalibrierung verwendeten Schwarzkörpers, Fehler in der Phasenkorrektur und Restfehler nach der Korrektur der Detektor-Nichtlinearität.

Die Analyse von sieben Meßflügen, die im Zeitraum von 1997 bis 2002 im arktischen Winter und im Frühjahr/Sommer in mittleren Breiten erfolgten, zeigt, daß aufgrund der thermischen Drift des Instruments häufige Kalibrierungsmessungen notwendig sind. Für eine saubere Trennung atmosphärischer Restsignaturen von der Basislinie und eine gute Phasenkorrektur waren jedoch bei früheren Flügen lange Meßzeiten erforderlich. Im Rahmen dieser Arbeit konnten die bestehenden Verfahren so verbessert werden, daß die Kalibrierungsmessungen deutlich weniger Zeit in Anspruch nehmen und damit in kürzeren Zeitabständen durchgeführt werden können. Trotz der häufigeren Kalibrierungsmessungen bleibt insgesamt mehr Meßzeit für atmosphärische Messungen. Die verbleibenden Restfehler in der Kalibrierung wurden mit Hilfe von Simulationsrechnungen quantifiziert. Zur Korrektur der Detektor-Nichtlinearität wurde ein neues Verfahren entwickelt, das es erlaubt, die Nichtlinearitätsparameter für jeden Flug mit hoher Genauigkeit direkt aus Spektren abzuleiten, die während des Fluges gemessen werden.

Für den Flug vom 12. Februar 2002, der den aktuellen Zustand des Instruments wiedergibt, wird eine Abschätzung des Gesamtfehlers der kalibrierten Spektren angegeben. Die Programme, die im Rahmen dieser Arbeit für diese Fehlerberechnung entwickelt wurden, bieten die Möglichkeit, für künftige Flüge die systematischen Fehler in den kalibrierten Spektren operationell anzugeben.

Abschließend wird exemplarisch der Einfluß der systematischen Fehler in den Spektren auf die abgeleiteten Spurengasprofile untersucht. Es zeigt sich, daß zwischen multiplikativen und additiven Fehlerbeiträgen unterschieden werden sollte, da sich Skalierungsfehler und additive Fehler unterschiedlich auf die Ableitung der Spurengasprofile auswirken. Ein Skalierungsfehler in den Spektren führt zu einem etwa ebenso großen Skalierungsfehler in den Spurengasprofilen. Additive Fehler haben hingegen kaum einen Einfluß auf die abgeleiteten Profile, solange ein additiver Beitrag bei der Ableitung der Spurengasprofile als Anpassungsparameter freigegeben wird. Für die Interpretation von Korrelationen der Spurengase ist die Anforderung an die radiometrische Genauigkeit höher als für die Profile einzelner Gase, weil sich in diesem Fall die Fehler der einzelnen Profile verstärken können, so daß die radiometrische Genauigkeit an Bedeutung gewinnt.

Der Skalierungsfehler liegt zwischen 0,5 und 1,2% (2σ), abhängig von der Wellenzahl und vom zeitlichen Abstand zu den Kalibrierungsmessungen. Die Auswirkungen des Skalierungsfehlers sind mit ca. 1% deutlich kleiner als die Fehler in den spektroskopischen Liniendaten, die typischerweise im Bereich von 5 bis 20% (2σ) liegen. Der additive Fehler liegt zwischen 9 und 0,3 nW/(cm² sr cm⁻¹) (2σ) bei 770 bzw. bei 1950 cm⁻¹. Damit liegen die systematischen Fehler in den meisten Meßsituationen unterhalb des Rauschniveaus für Einzelspektren.

Mit den in dieser Arbeit vorgeschlagenen Methoden zur Optimierung der radiometrischen Genauigkeit konnte somit der systematische Fehler in den kalibrierten Spektren so weit reduziert werden, daß er verglichen mit anderen Fehlerquellen von untergeordneter Bedeutung ist.

Abstract

Quantification and optimisation of the radiometric accuracy of the Fourier transform spectrometer MIPAS-B2

The cryogenic balloon-borne Fourier transform spectrometer MIPAS-B2 (Michelson-interferometer for passive atmospheric sounding - balloon version 2) is a limb sounder measuring emission spectra of the atmosphere in the mid-infrared. From these spectra, trace gas profiles of numerous species are deduced which are relevant to the ozone chemistry and the greenhouse effect. Measurements of atmospheric emission spectra demand a very good instrument performance and a precise data processing. Although the instrument is cooled, its thermal self-emission is of the same order of magnitude as the atmospheric signal. Therefore, a profound characterisation of the instrument's radiometric properties is necessary to obtain a high accuracy in the calibrated spectra.

The objective of this thesis is the quantification and optimisation of the radiometric accuracy of MIPAS-B2. For this purpose the various error sources leading to a radiometric error in the calibrated spectra are examined. These errors are: noise in the calibration measurements, changes in the instrument's self-emission and responsivity due to thermal drifts, errors in the baseline determination due to residual atmospheric signatures, uncertainties of the temperature and emissivity of the blackbody which is used for calibration, errors in the phase correction, and residual errors after correction of the detector non-linearity.

Between 1997 and 2002, seven balloon flights have been performed under arctic winter conditions and in mid-latitudes in spring- or summertime. The analysis of these flights reveals that due to the thermal drift of the instrument, frequent calibration measurements are mandatory for a high accuracy. However, a long measurement time was necessary in the earlier flights to properly distinguish residual atmospheric signatures from the instrument's self-emission and to provide a good phase correction. Within this thesis the instrument characterisation and data processing could be improved so that the time needed for calibration measurements is reduced significantly. This allows to calibrate more often. In spite of the more frequent calibration measurements, the overall time for calibration could be reduced compared to earlier flights. The remaining errors in the calibrated spectra have been quantified using simulated spectra. For the correction of the detector non-linearity, a new method has been developed, allowing a precise determination of the non-linearity parameters from spectra that are measured during flight.

An estimate of the total systematic error in the calibrated spectra is given for the flight on 12th February 2002, which represents the current state of the instrument. The software, that

has been developed within the framework of this thesis, will allow an operational determination of the systematic error in the calibrated spectra for future flights.

Finally, the influence of systematic errors in the spectra on the retrieved trace gas profiles is investigated. It is shown that one has to distinguish between multiplicative and additive error contributions, because their influence on the trace gas profiles is different. A scaling error leads to an error in the profiles in the same order of magnitude, whereas additive errors barely alter the retrieved profiles, as long as an offset is treated as retrieval parameter and the spectra are not affected by clouds or aerosols. For the interpretation of correlations between different trace gases, the requirements for the radiometric accuracy are higher than for isolated profiles.

The scaling error is in the order of 0.5 to 1.2% (2σ), depending on the wavenumber and the time distance to the calibration measurements. Thus the errors in the trace gas profiles due to systematic errors in the calibrated spectra are of about 1% and therewith significantly smaller than spectroscopic errors, which are typically between 5 and 20% (2σ). The offset error is between 9 and 0.3 $\text{nW}/(\text{cm}^2 \text{sr cm}^{-1})$ (2σ) at 770 and 1950 cm^{-1} , respectively. In most situations, the systematic error is smaller than the noise level for single spectra.

With the optimisation of the radiometric accuracy achieved in this thesis, the systematic error in the calibrated spectra could be reduced so much that it is now only of minor importance compared to other error sources.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen der Fourierspektroskopie	3
2.1	Vom Spektrum zum Interferogramm: Funktionsweise des Interferometers	3
2.2	Vom Interferogramm zum Spektrum: die Fouriertransformation	4
2.2.1	Vom mathematischen zum gemessenen Interferogramm	5
2.2.2	Rauschen	7
2.2.3	Weitere Aspekte eines gemessenen Interferogramms	8
3	Das MIPAS-Ballonexperiment	10
3.1	Aufbau von MIPAS-B2	10
3.1.1	Das Interferometer	10
3.1.2	Das Optikmodul	10
3.1.3	Das Detektorsystem	13
3.1.4	Das Sichtlinienstabilisierungssystem	15
3.1.5	Elektronik und Gondel	16
3.2	Messung und Auswertung	18
3.2.1	Meßablauf	19
3.2.2	Kalibrieren der Spektren	20
3.2.3	Das Spurengasretrieval	21
3.3	Übersicht über die MIPAS-Ballonflüge	22
4	Grundlagen der Fehlerrechnung	24
4.1	Quantifizierung von Meßfehlern	24
4.1.1	Statistische Fehler	24
4.1.2	Systematische Fehler	25
4.2	Fehlerfortpflanzung	26
5	Kalibrierungsfehler	28
5.1	Spektrale Rauschäquivalentleistung (<i>NESR</i>)	28
5.2	Rauschen in den Schwarzkörper- und Weltraumspektren	31
5.2.1	Fehler in der Instrumentresponsivität	31
5.2.2	Fehler im Offset	32
5.3	Drift von Instrumentresponsivität und Offset	34
5.4	Bestimmen der Basislinie aus Weltraumspektren	40

5.5	Strahldichte des Schwarzkörpers	44
6	Phasenkorrektur	46
6.1	Strahlungsbeiträge und ihre Phasen	46
6.2	Die Phasenkorrektur von MIPAS-B2-Spektren	48
6.3	Phasenfehler	51
6.3.1	Auswirkung des Phasenfehlers	51
6.3.2	Phase des Schwarzkörperspektrums und instrumentelle Phase	53
6.3.3	Phase des atmosphärischen Spektrums	55
6.3.4	Zusammenfassung des Phasenfehlers	62
7	Detektor-Nichtlinearität	66
7.1	Grundlagen zur Nichtlinearität	66
7.1.1	Auswirkung auf die Kalibrierung	66
7.1.2	Auswirkung der Nichtlinearität innerhalb eines Interferogramms	68
7.2	Quantifizierung der Nichtlinearität	70
7.2.1	DC-gekoppelte Messungen	70
7.2.2	Analyse unreduzierter Interferogramme	71
7.3	Fehler der Nichtlinearitätskorrektur	76
7.3.1	Rauschen	76
7.3.2	Abbruch der Reihenentwicklung	76
7.3.3	Einfluß der Detektortemperatur	79
7.3.4	Fehler der Spannungsmessung	80
7.3.5	Gesamtfehler der Nichtlinearitätsbestimmung	82
8	Gesamtfehler	83
8.1	Beiträge zum Gesamtfehler	83
8.2	Summe der einzelnen Fehlerbeiträge	87
8.3	Beurteilung der Fehlerquellen	91
9	Auswirkungen systematischer Fehler in den Spektren auf die Spurengasprofile	92
9.1	Skalierungsfehler	92
9.2	Offsetfehler durch atmosphärische Restsignaturen	94
9.3	Offsetfehler durch Phasenfehler	96
9.4	Nichtlinearität	98
10	Schlußbemerkungen	102
	Literaturverzeichnis	106

INHALTSVERZEICHNIS

vii

Anhang	111
A Einige Funktionen und Eigenschaften der Fouriertransformation	111
B Rauschen im Spektrum im Fall einer monochromatischen Quelle	113
C Zur Berechnung der Strahldichte des Schwarzkörpers	115
D Berechnung des Fehlers in der instrumentellen Phase durch Rauschen	117
E Lösung einer kubischen Gleichung	119
Symbolverzeichnis	120
Liste der Abkürzungen	121
Abbildungsverzeichnis	122
Tabellenverzeichnis	124
Danksagung	125
Lebenslauf	127

Kapitel 1

Einleitung

Die Geburtsstunde der modernen Spektralanalyse legt die Geschichte der Physik in das Jahr 1859 [Brüche, 1960]. Der Physiker Gustav Robert Kirchhoff stellte in einem Versuch, bei dem er Sonnenlicht durch eine Kochsalzflamme treten ließ, einen eindeutigen Zusammenhang zwischen Emissions- und Absorptionslinien fest [Kirchhoff, 1859]. Bei geringer Intensität des Sonnenlichts erschienen an der Position der von Fraunhofer mit „D“ bezeichneten Doppellinie zwei helle Linien. Mit zunehmender Intensität der Sonnenstrahlung wurden diese Linien jedoch dunkel und erschienen schließlich viel deutlicher als in einem Versuchsaufbau ohne Kochsalzflamme. Aus diesen Beobachtungen schloß Kirchhoff, daß die dunklen Linien des Sonnenspektrums durch die Anwesenheit derjenigen Stoffe in der Sonnenatmosphäre entstehen, welche im Spektrum einer Flamme helle Linien an demselben Ort erzeugen. Damit war eine Methode zur Fernerkundung der Sonnenatmosphäre gefunden.

Um die Spektrallinien im Sonnenspektrum deuten zu können, waren Labormessungen erforderlich, mit deren Hilfe den Elementen, die in eine Flamme eingebracht wurden, charakteristische Emissionslinien zugeordnet werden konnten. Umgekehrt bot die Spektralanalyse die Möglichkeit, über neu auftretende Spektrallinien neue Elemente nachzuweisen. So entdeckte der Chemiker Robert Bunsen, der in dieser Zeit eng mit Kirchhoff zusammenarbeitete, mit dieser Methode im Jahr 1860 das Caesium und 1861 das Element Rubidium. Bunsen zeigte auch, daß bereits kleinste Mengen eines Elements, wenn sie in eine Flamme gebracht wurden, deutliche charakteristische Linien zeigen und die Spektralanalyse daher eine sehr empfindliche Nachweismethode darstellt.

Heute ist die Spektralanalyse eine weit verbreitete Methode, um die chemische Zusammensetzung von Gasgemischen über große Distanzen mit hoher Genauigkeit zu messen. Dabei können nicht nur die Spektrallinien einzelner Atome vermessen werden, sondern auch die Emissions- bzw. Absorptionslinien von Molekülen. Besonders auf dem Gebiet der Astronomie konnten mit dieser Methode der Fernerkundung große Fortschritte erzielt werden, jedoch ist diese Methode auch für die Analyse chemischer Komponenten der irdischen Atmosphäre sehr gut geeignet und wird seit geraumer Zeit eingesetzt.

Viele umweltrelevante Spurengase zeigen aufgrund quantenmechanischer Rotations-Schwingungs-Übergänge charakteristische spektrale Signaturen im infraroten Spektralbereich und sind so der Fernerkundung mit Hilfe der Spektralanalyse zugänglich. Anstelle der von Bunsen und Kirchhoff verwendeten Prismen werden heute vielfach Fourierspektrometer eingesetzt. Diese sind in der Lage, weite Spektralbereiche mit guter spektraler Auflösung simultan zu erfassen. Damit können viele Spurengase gleichzeitig gemessen werden.

Seit der Entdeckung des Ozonlochs über der Antarktis [Farman et al., 1985] ist die Stratosphäre verstärkt in das Interesse von Wissenschaft und Gesellschaft gerückt. Die starke Reduktion der stratosphärischen Ozonschicht im polaren Frühling resultiert aus einem komplexen Zusammenspiel chemischer und dynamischer Prozesse, die in Modellen bislang nur teilweise wiedergegeben werden können. Um diese Prozesse besser zu verstehen und modellieren zu können, ist die Messung vieler Spurengase unter verschiedenen meteorologischen Bedingungen in der Stratosphäre erforderlich.

Vor diesem Hintergrund werden am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) im Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) seit Ende der 1980er Jahre Fourierspektrometer zur atmosphärischen Fernerkundung entwickelt und eingesetzt [Fischer, 1992, Fischer und Oelhaf, 1996]. Das MIPAS-B2 (Michelson-Interferometer für passive atmosphärische Sondierung – Ballon Version 2) ist ein gekühltes ballongetragenes Fourierspektrometer, das aus einer Flughöhe von 28 bis 40 km in der Geometrie der Horizontsondierung Atmosphärenmessungen durchführt. Das Instrument mißt die Strahlung, die von den Molekülen in der Atmosphäre im infraroten Spektralbereich aufgrund thermisch angeregter Rotations- und Vibrationsübergänge zwischen ca. 5 und 13 μm emittiert wird. Aus den gemessenen Spektren können Vertikalprofile von über 20 ozon- und klimarelevanten Spurengasen abgeleitet werden, die in diesem Spektralbereich Signaturen aufweisen (siehe z.B. [Stowasser et al., 2002, Wetzell et al., 2002b]).

Alle Meßwerte sind naturgemäß mit Meßfehlern behaftet. Um diese Fehler möglichst gering zu halten, ist eine genaue Kenntnis der Instrumenteigenschaften erforderlich. Obwohl MIPAS-B2 zur Unterdrückung der thermischen Strahlung auf ca. 210 K gekühlt wird, liegt die Eigenemission des Instruments immer noch in derselben Größenordnung wie die atmosphärische Emission. Daher muß insbesondere das radiometrische Verhalten des Instruments sehr genau charakterisiert werden. Durch eine geschickte Gestaltung des Meßprogramms sowie eine angepaßte Prozessierung der Daten können die Fehler in den kalibrierten Spektren minimiert werden.

Hierzu werden in dieser Arbeit die Ergebnisse aus vergangenen Meßflügen analysiert und Verbesserungsmöglichkeiten untersucht. Die sorgfältige Abschätzung der verbleibenden Fehler in den Spektren ist eine wichtige Voraussetzung, um die Unsicherheit in den Vertikalprofilen der Spurengase angeben zu können. Daher werden im Rahmen dieser Arbeit die unterschiedlichen Fehlerquellen eingehend untersucht und die einzelnen Fehlerbeiträge quantifiziert. Abschließend wird an einigen repräsentativen Beispielen gezeigt, wie sich die unterschiedlichen Fehler auf die Genauigkeit der Spurengasprofile auswirken.

Kapitel 2

Grundlagen der Fourierspektroskopie

Die Grundlagen der Fourierspektroskopie sind in vielen Lehrbüchern beschrieben, z.B. in [Davis et al., 2001]. Hier sollen nur die für diese Arbeit wichtigen Aspekte dargestellt werden, auf Herleitungen wird weitgehend verzichtet. Zunächst wird die Funktionsweise des Interferometers beschrieben, anschließend wird auf die Rekonstruktion des Spektrums aus dem gemessenen Interferogramm eingegangen. Dabei werden die Unterschiede zwischen einem theoretischen, idealen Interferometer und einem realen Interferometer beleuchtet.

2.1 Vom Spektrum zum Interferogramm: Funktionsweise des Interferometers

Das Prinzip eines Michelson-Interferometers ist in Abb. 2.1 dargestellt. Die in das Interferometer einfallende Strahlung wird in zwei Teilstrahlen zerlegt, die unterschiedliche Wege durchlaufen und anschließend rekombiniert werden. Während die Teilstrecke x_1 fest bleibt, wird x_2 mit konstanter Geschwindigkeit variiert. Bei einer monochromatischen Quelle überlagern sich die beiden Teilstrahlen konstruktiv, wenn der optische Gangunterschied $x = x_1 - x_2$ (OPD, engl. optical path difference) ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist. Ein optischer Gangunterschied von einem ungeradzahligem Vielfachen der halben Wellenlänge führt zu einer destruktiven Interferenz, und die beiden Teilstrahlen löschen sich aus. Das Detektorsignal in Abhängigkeit von der optischen Weglängendifferenz x wird als Interferogramm $IFG(x)$ bezeichnet. Das Interferogramm ist für eine monochromatische Quelle der Wellenzahl κ (Wellenzahl = 1/Wellenlänge, $\kappa = 1/\lambda$) und der Intensität I_0 proportional zu einem unmodulierten und einem modulierten Term:

$$IFG(x) \propto I_0 \cdot (1 + \cos(2\pi\kappa x)) = \underbrace{I_0}_{\text{unmoduliert}} + \underbrace{I_0 \cdot \cos(2\pi\kappa x)}_{\text{moduliert}} \quad (2.1)$$

Der unmodulierte Gleichlichtanteil I_0 liefert keinen Beitrag zur Spektralanalyse und wird bei der Messung des Interferogramms durch ein Hochpaßfilter eliminiert. Damit vereinfacht sich Gl. (2.1) zu

$$IFG(x) \propto I_0 \cdot \cos(2\pi\kappa x) \quad (2.2)$$

Für eine polychromatische Quelle $S(\kappa)$ muß über alle spektralen Anteile integriert werden:

$$IFG(x) \propto \int_0^{\infty} S(\kappa) \cos(2\pi\kappa x) d\kappa \quad (2.3)$$

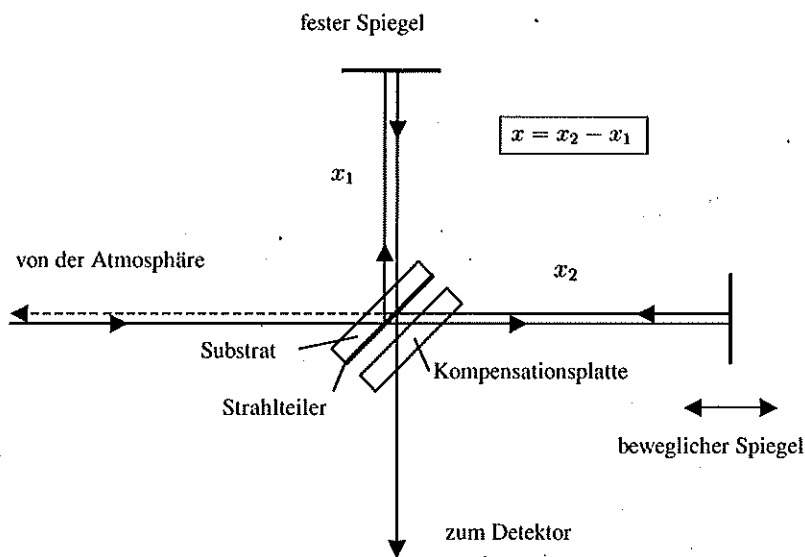


Abbildung 2.1: Prinzipskizze eines Michelson-Interferometers. Die von den beiden Spiegeln reflektierten Strahlen sind zur besseren Verfolgung des Weges leicht versetzt gezeichnet. Auf die Bedeutung des Substrats und der Kompensationsplatte wird in Abschnitt 2.2.3 eingegangen.

Aus Gl. (2.3) wird deutlich, daß das Michelson-Interferometer eine physikalische Fouriertransformation der einfallenden Strahlung durchführt. Das Spektrum $S(\kappa)$ kann somit aus dem Interferogramm durch eine mathematische Fourier-Rücktransformation berechnet werden.

2.2 Vom Interferogramm zum Spektrum: die Fouriertransformation

Durch eine (mathematische) Erweiterung des Spektrums auf negative Wellenzahlen mit

$$S(-\kappa) = S^*(\kappa), \quad (2.4)$$

wobei $S^*(\kappa)$ die konjugiert Komplexe von $S(\kappa)$ ist, erhält man aus (2.3) die komplexe Fouriertransformation (FT):

$$IFG(x) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\kappa) e^{i2\pi\kappa x} d\kappa = FT^+(S(\kappa)) \quad (2.5)$$

$$S(\kappa) = \int_{-\infty}^{\infty} IFG(x) e^{-i2\pi\kappa x} dx = FT^-(IFG(x)) \quad (2.6)$$

Die komplexe Fouriertransformation erlaubt es, das Spektrum als Produkt aus Betrag und Phase darzustellen. Mit der Definition (2.4) bleibt das Interferogramm jedoch reell. Der Betrag des Spektrums wird auch als Magnitude bezeichnet. Die Phaseninformation ist von Bedeutung, wenn

sich die Strahlung aus Beiträgen mit unterschiedlichen Phasen zusammensetzt. Auf die Phase wird ausführlich in Kap. 6 eingegangen.

Einige wichtige Eigenschaften der Fouriertransformation sowie einige nützliche Formeln sind in Anhang A zusammengestellt.

2.2.1 Vom mathematischen zum gemessenen Interferogramm

Das reale, gemessene Interferogramm ist nicht, wie in Gl. (2.5) dargestellt, kontinuierlich und unendlich ausgedehnt. In der Realität wird x nur in einem Bereich $[-L, L]$ gemessen, wobei L die (einseitige) Interferogrammlänge ist und $x = 0$ die Spiegelstellung definiert, bei der die optischen Wege in den beiden Interferometerarmen gleich lang sind. Das Interferogramm wird außerdem nicht kontinuierlich gemessen, sondern diskret abgetastet und digitalisiert.

Vom kontinuierlichen zum diskreten Interferogramm

Die Abtastpunkte werden mit Hilfe eines Längenmeßinterferogramms (*LMI*) erzeugt. Hierzu wird ein He-Ne-Laserstrahl mit $\lambda_{LMI} = 633$ nm parallel zum IR-Strahl durch das Interferometer geleitet.¹ Das *LMI* ist sinusförmig mit einer Periode von λ_{LMI} . Das IR-Signal wird nun bei jedem aufsteigenden Nulldurchgang des *LMI* aufgenommen, so daß ein diskretes Interferogramm mit $\Delta x = \lambda_{LMI}$ entsteht. Wie das Abtastverfahren im Detail realisiert wird, ist ausführlich in [Kimmig, 2001] beschrieben.

Mathematisch läßt sich der Übergang vom kontinuierlichen zum diskreten Interferogramm durch eine Multiplikation des Interferogramms mit einem Dirac-Kamm \square der Weite Δx beschreiben:

$$IFG_{digit}(x) = IFG(x) \cdot \square_{\Delta x}(x) \quad (2.7)$$

Was bedeutet dies nun für das Spektrum? Das kontinuierliche, symmetrische Spektrum wird mit der Fouriertransformierten des Dirac-Kamms gefaltet. Die Fouriertransformierte eines Dirac-Kamms mit einer Periodizität von Δx ist wieder ein Dirac-Kamm, allerdings mit einer Periodizität von $1/\Delta x$. Die Fouriertransformierte des digitalisierten Interferogramms ergibt also wieder das kontinuierliche Spektrum, allerdings wird dieses mit einer Periodizität von $1/\Delta x$ wiederholt. Dadurch kommt es zum sogenannten „Aliasing“, das heißt, die sich periodisch wiederholenden Spektren überlagern sich, und man erhält nur noch die Summe der Überlagerungen, die nicht mehr dem ursprünglichen Spektrum entspricht (Abb. 2.2).

Um eine Verfälschung des Spektrums durch Aliasing zu vermeiden, muß sichergestellt sein, daß im Spektrum keine größeren Frequenzen als $\kappa_{max} = 1/(2\Delta x)$ auftreten, bzw. das Abtastintervall muß hinreichend klein gewählt werden. Dann wird innerhalb des Bereichs $[-\kappa_{max}, \kappa_{max}]$ das Spektrum kontinuierlich und ohne Informationsverlust wiedergegeben. Das ist die Aussage des Nyquist-Theorems [Nyquist, 1928]. Die Wellenzahl $\kappa_{max} = 1/(2\Delta x) = \kappa_{Nyquist}$ wird auch Nyquist-Wellenzahl genannt.

Das Nyquist-Theorem läßt sich noch verallgemeinern. Das Spektrum wird eindeutig wiedergegeben, wenn alle im Spektrum auftretenden Wellenzahlen in einem Bereich von $n/(2\Delta x) \leq \kappa \leq (n+1)/(2\Delta x)$, $n \in \mathbb{N}_0$ liegen. Im Spektrum des diskretisierten Interferogramms wiederholt sich dieser Bereich im Intervall $[-\kappa_{max}, 0]$ oder im Intervall $[0, \kappa_{max}]$, abhängig davon, ob n gerade oder ungerade ist. Mit Kenntnis von n läßt sich also auch ein solches Spektrum wieder vollständig rekonstruieren.

¹633 nm ist annähernd die Laserwellenlänge im Vakuum, die für Messungen in einer Höhe von 30-40 km praktisch gültig ist. In allen Rechnungen wird für die Laserwellenzahl $7899,00188 \text{ cm}^{-1}$ verwendet.

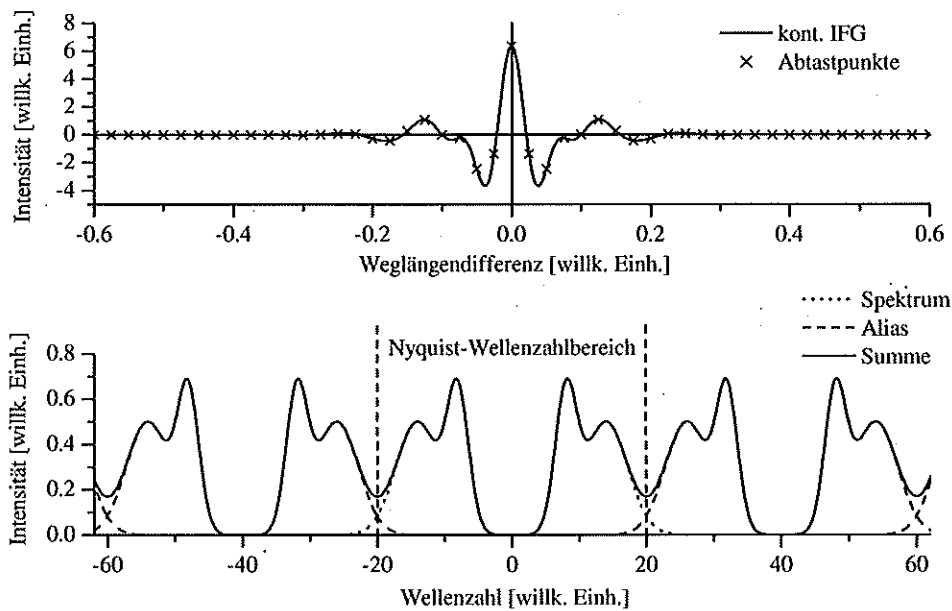


Abbildung 2.2: Kontinuierliches Interferogramm mit diskreten Abtastpunkten (oben) und zugehöriges Spektrum (unten). Das Spektrum der kontinuierlichen FT ist gepunktet gezeichnet, seine periodische Fortsetzung infolge der Digitalisierung gestrichelt. Durch das Überlappen der Spektren erhält man im Bereich $[0, 1/(2 \Delta x)]$ nicht das ursprüngliche Spektrum, sondern die Summe aus eigentlichem Spektrum und Alias (durchgezogene Linie).

Vom unendlichen zum endlich ausgedehnten Interferogramm

Ein weiterer Unterschied zum Interferogramm aus Gl. (2.5) besteht beim gemessenen Interferogramm darin, daß es nicht unendlich ausgedehnt ist, sondern sich nur auf eine Länge von $-L$ bis L erstreckt.² Mathematisch ausgedrückt, wird also das Interferogramm aus (2.5) mit einer Rechteckfunktion $\text{RECT}(\frac{x}{2L})$ multipliziert. Zur Definition der Rechteckfunktion und ihrer Fouriertransformierten siehe Anhang A.

Im Spektralraum entspricht die endliche Ausdehnung des Interferogramms einer Faltung mit einer SINC-Funktion der Breite $1/(2L)$ (von null bis zur ersten Nullstelle), das heißt, eine Delta-Funktion wird durch die Faltung auf eine SINC-Funktion abgebildet. Je länger das Interferogramm ist, desto schmaler wird die SINC-Funktion, und desto besser ist die spektrale Auflösung des Interferometers. Über die Interferogrammlänge ist somit die (maximal mögliche) spektrale Auflösung $\delta\kappa$ festgelegt (siehe z.B. [Connes, 1961]):

$$\delta\kappa = 1/(2L) \quad (2.8)$$

²Es ist im Prinzip nicht Voraussetzung, daß das Intervall symmetrisch zu $x = 0$ ist, jedoch werden in dieser Arbeit nur die sogenannten zweiseitigen Interferogramme behandelt, daher werden hier auch nur zweiseitige Interferogramme beschrieben.

Vom kontinuierlichen zum diskreten Spektrum

Bei der numerischen Fouriertransformation ist nicht nur das Interferogramm diskret, auch das Spektrum wird lediglich an diskreten Stützstellen berechnet, also mit einem Dirac-Kamm multipliziert. Wenn das Interferogramm der Länge $2L$ aus n Punkten im Abstand Δx besteht, ist der Stützstellenabstand im Spektrum gegeben durch $\Delta\kappa = 1/(n\Delta x)$. Die Multiplikation im Spektralraum entspricht einer Faltung im Interferogrammraum, das heißt, das Interferogramm wiederholt sich mit einer Periode von $2L$. Aliasing-Effekte treten hier nicht auf, da das gemessene Interferogramm nur im Intervall $[-L, L]$ existiert.

Die diskrete Fouriertransformation (DFT)

Der Übergang vom theoretischen, unendlich ausgedehnten, kontinuierlichen Interferogramm und dem zugehörigen Spektrum zum gemessenen, endlichen und diskreten Interferogramm und Spektrum erfolgt also im Interferogrammraum durch eine Multiplikation mit der Rechteckfunktion von $-L$ bis L , eine Multiplikation mit einem Dirac-Kamm der Weite Δx und durch eine Faltung mit einem Dirac-Kamm der Weite $2L$:

$$IFG_m(x) = \left[IFG(x) \cdot \text{RECT}\left(\frac{x}{2L}\right) \cdot \text{LI}_{\Delta x}(x) \right] \otimes \text{LI}_{2L}(x) \quad (2.9)$$

Für das gemessene, diskrete Spektrum gilt entsprechend:

$$S_m(\kappa) = \left[S(\kappa) \otimes [2L \cdot \text{SINC}(2\pi\kappa L)] \otimes \text{LI}_{1/(\Delta x)}(\kappa) \right] \cdot \text{LI}_{\Delta\kappa}(\kappa) \quad (2.10)$$

Hierbei ist:

$$n \cdot \Delta x = 2L \quad \Delta\kappa = \frac{1}{n \cdot \Delta x} \quad (2.11)$$

Datenreduktion

Wenn nicht der gesamte Spektralbereich von 0 bis $\kappa_{Nyquist}$ ausgewertet werden soll, sondern nur ein kleiner Bereich von κ_1 bis κ_2 , so könnte man das Interferogramm im Prinzip entsprechend unterabtasten, so daß durch die periodische Wiederholung des Spektrums der auszuwertende Spektralbereich (oder sein Spiegelbild) auf das Intervall $[0, (\kappa_2 - \kappa_1)]$ abgebildet wird. Mit Kenntnis der Intervallgrenzen κ_1 und κ_2 kann man daraus das eigentliche Spektrum rekonstruieren. Allerdings ist häufig nicht sichergestellt, daß außerhalb des Spektralbereichs, der übertragen werden soll, kein Signal vorhanden ist, das im Falle einer Unterabtastung Aliasing-Effekte verursachen würde. Daher wird das Interferogramm, bevor es unterabgetastet wird, mit der FFT eines digitalen Bandpaßfilters gefaltet, der das Signal außerhalb des gewünschten Spektralbereichs unterdrückt.

2.2.2 Rauschen

Das Rauschen im Interferogramm wird bei MIPAS-B2 durch das Rauschen der Photonen bestimmt, die auf den Detektor fallen. Das Photonenrauschen folgt einer Poissonverteilung, das heißt, das Rauschen ist proportional zur Wurzel der Photonenzahl N_{ph} [Kingston, 1978]. Für große Zahlen kann die Poissonverteilung in sehr guter Näherung durch eine Gaußverteilung beschrieben werden [Taylor, 1988]. Bei den mit MIPAS-B2 gemessenen Spektren ist ein großer Teil der Strahlung, die auf den Detektor trifft, unmoduliert. Damit ist der Gesamt-Photonenstrom auf den Detektor weitgehend unabhängig vom optischen Gangunterschied x . Lediglich in einem engen Bereich um $x = 0$ variiert das Signal zwischen ca. 80 und 120 % vom mittleren Signal. Das

Rauschen läßt sich somit in erster Näherung mit einer Funktion $\zeta(x)$ beschreiben, die folgendermaßen definiert wird: Für jeden Punkt x ist der Funktionswert $\zeta(x)$ ein Zufallswert aus einer Gaußverteilung mit dem Maximum bei null und einer Standardabweichung von 1. Dann ist das Rauschen gegeben als

$$IFG_{rau} = \sqrt{N_{ph}} \cdot \zeta(x) \quad (2.12)$$

Das gemessene Interferogramm IFG_m ist die Summe aus unverrauschem Interferogramm IFG_0 und Rauschen:

$$IFG_m = IFG_0 + IFG_{rau} \quad (2.13)$$

Das mit Rauschen behaftete Spektrum ist aufgrund der Linearität der Fouriertransformation (Anhang A) gegeben durch:

$$S_m = S_0 + S_{rau} = S_0 + \sqrt{N_{ph}} \cdot \zeta(\kappa) \quad (2.14)$$

Die Funktion $\zeta(x)$ beschreibt weißes Rauschen, das heißt Rauschen, das zeitinvariant und spektral gleichverteilt ist. Die Fouriertransformation von Rauschen ist wieder weißes Rauschen (siehe z.B. [Davis et al., 2001]), die Rauschamplitude im Spektrum ist also unabhängig von der Wellenzahl. Für starke spektrale Signaturen ist damit das Signal-zu-Rausch-Verhältnis (S/N, signal-to-noise-ratio) erheblich besser als für schwache Signaturen.

Die Rauschamplitude im Spektrum ist auch konstant, wenn das Interferogramm nicht von der unmodulierten Strahlung dominiert wird. Dies wird in Anhang B am Beispiel einer monochromatischen Quelle gezeigt. Diese Eigenschaft von Fourierpektrometern, das Rauschen im Spektralraum gleichmäßig zu verteilen, ist ein wesentlicher Unterschied zu dispersiven Spektrometern, bei denen das S/N lediglich vom Signal im jeweiligen Spektralbereich abhängt (wenn das Rauschen vom Photonenrauschen dominiert wird).

2.2.3 Weitere Aspekte eines gemessenen Interferogramms

In diesem Abschnitt sollen einige weitere Punkte diskutiert werden, in denen sich ein gemessenes Interferogramm vom idealisierten unterscheidet.

Phasenfehler

Das kontinuierliche Interferogramm wird in den meisten Fällen nicht exakt an der Position $x = 0$ abgetastet, so daß das diskrete Symmetriezentrum um ϵ gegenüber dem wahren Symmetriezentrum bei $x = 0$ verschoben ist. Wird nun die Fouriertransformation bezüglich des diskreten Symmetriezentrums durchgeführt, so entspricht dies einer Verschiebung der x-Achse um ϵ . Dies führt im (komplexen) Spektrum zu einem mit der Wellenzahl linearen Phasenfehler:

$$S(\kappa)_\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} IFG(x + \epsilon) e^{-i2\pi\kappa x} \Delta x = e^{i2\pi\kappa\epsilon} S(\kappa) = e^{i\varphi} S(\kappa) \quad \text{mit} \quad \varphi = 2\pi\kappa\epsilon \quad (2.15)$$

Weitere Ursachen für Phasenfehler sind frequenzabhängige elektrische Laufzeitdifferenzen in der Analogelektronik und dispersive Eigenschaften optischer Komponenten. Auf die Korrektur dieser Phasenfehler wird ausführlich in Kap. 6 eingegangen. Einen stark frequenzabhängigen Phasenfehler würde das Strahlteilersubstrat verursachen, da es sich nur in einem Interferometerarm befindet und sich in diesem aufgrund der Dispersion der optische Weg stark mit der Wellenzahl

ändert. Um diesen Effekt zu kompensieren, befindet sich auf der anderen Seite der strahlteilenden Schicht eine mit dem Strahlteilersubstrat nahezu identische Kompensationsplatte, die im anderen Interferometerarm liegt, so daß der durch das Substrat verursachte optische Gangunterschied für alle Frequenzen wieder annähernd gleich ist (vgl. Abb. 2.1).

Apparatefunktion und Apodisation

Die Apparatefunktion (*ILS*, engl. instrumental line shape) ist die Antwortfunktion des Instruments auf eine monochromatische Quelle, die mathematisch als Delta-Funktion beschrieben wird. Das gemessene Signal S_m ergibt sich aus der eingestrahlenen Linie $\delta(\kappa - \kappa_0)$ durch die Faltung mit der Apparatefunktion:

$$S_m(\kappa) = \delta(\kappa - \kappa_0) \otimes ILS(\kappa - \kappa_0) \quad (2.16)$$

Im idealisierten Fall eines unendlich kleinen Gesichtsfeldes und eines perfekt kollimierten Strahls ist die Apparatefunktion aufgrund der endlichen Länge des Interferogramms durch eine SINC-Funktion gegeben (vgl. Gl. (2.10)). Die *ILS* führt also zu einer Verbreiterung der Linie und zu Nebenmaxima. Ein ausgedehntes Gesichtsfeld und eine ungleichmäßige Ausleuchtung führen zu einer weiteren Verbreiterung und einer Asymmetrie der Apparatefunktion. Eine Charakterisierung der Apparatefunktion von MIPAS-B2 findet sich in [Lengel, 2000].

Bei der Ableitung von Spurengasprofilen aus den gemessenen Spektren erweisen sich die Nebenmaxima der SINC-Funktion als störend, insbesondere wenn die Nebenmaxima starker Linien benachbarte kleine Linien überlagern und die Analyse in schmalen Spektralbereichen durchgeführt wird. Daher wird das Interferogramm mit einer Apodisationsfunktion multipliziert, die statt des Rechtecks an den Enden des gemessenen Interferogramms einen weniger abrupten Übergang auf null bewirkt. Damit werden die Nebenmaxima stark gedämpft, allerdings verbreitert sich auch die Linienform, so daß sich die spektrale Auflösung verschlechtert. Eine Apodisation ist also immer ein Kompromiß zwischen schlechterer spektraler Auflösung und kleineren Nebenmaxima. Für die Interferogramme von MIPAS-B2 wird in der Regel die Norton-strong-Apodisation [Norton und Beer, 1976] verwendet, die die spektrale Auflösung um einen Faktor 1,6 verschlechtert. Durch die Apodisation sind benachbarte spektrale Stützstellen im Spektrum nicht mehr linear unabhängig.

Interpolation und Zerofilling

Wenn das Interferogramm auf das Intervall $[-L, L]$ begrenzt ist, dann beträgt der Diskretisierungsabstand im Spektrum $\Delta\kappa = \frac{1}{2L}$. Soll der Abstand $\Delta\kappa$ verringert werden, so kann man das Interferogramm symmetrisch zu $x = 0$ bis zur Länge L' mit Nullen auffüllen (Zerofilling). Damit beträgt der Diskretisierungsabstand im Spektrum nun $\Delta\kappa' = \frac{1}{2L'}$, das heißt, das Spektrum wurde auf einen anderen Stützstellenabstand interpoliert. Diese Methode wird zum einen zur Interpolation der spektralen Stützstellen verwendet, zum anderen kann man damit die Zahl der Punkte im Interferogramm auf eine Zweierpotenz erhöhen und damit die FFT (schnelle Fouriertransformation, engl. fast Fourier transform) anwenden, bei der gegenüber der DFT die Rechenzeit erheblich verkürzt wird. Auch das Zerofilling führt zu einer Abhängigkeit benachbarter spektraler Stützstellen.

Kapitel 3

Das MIPAS-Ballonexperiment

Das erste MIPAS-Ballonexperiment wurde von 1989 bis 1992 in vier Meßflügen eingesetzt, das nachfolgende und hier beschriebene Experiment MIPAS-B2 hat seit 1995 zehn Meßflüge absolviert. Neben der Instrumentbeschreibung wird in diesem Kapitel auch auf das Meßverfahren und die Datenauswertung eingegangen. Abschließend wird ein Überblick über die Meßflüge von 1997 bis 2002 gegeben. Eine ausführliche Beschreibung des Instruments ist in [Friedl-Vallon et al., 1999] zu finden.

3.1 Aufbau von MIPAS-B2

3.1.1 Das Interferometer

Das Kernstück von MIPAS-B2 ist ein gekühltes Fourierspektrometer, das nach dem Michelson-Prinzip funktioniert. Der optische Gangunterschied wird hier jedoch nicht durch die Linearverschiebung eines Spiegels erzeugt, sondern mit Hilfe eines sogenannten Doppelpendels (Abb. 3.1, [Burkert et al., 1983]). Die beiden Teilstrahlen werden über bewegliche Spiegelecken SE zu den beiden Retroreflektoren R_1 und R_2 gelenkt und laufen wieder über die Spiegelecken zurück zum Strahlteiler. Durch die Pendelbewegung der Spiegelecken nimmt der Weg des einen Teilstrahls in gleichem Maße zu, in dem der Weg des anderen Teilstrahls abnimmt. Durch diese Anordnung wird ein Verhältnis von optischer zu mechanischer Weglängendifferenz von 8:1 erzielt. Diese Pendelstruktur hat beim Einsatz an einem Ballon den Vorteil, daß sie gegenüber translatorischen Bewegungen unempfindlich ist. Durch Auslenkung des Pendels um ca. $\pm 5^\circ$ wird ein optischer Gangunterschied von $\pm 14,5$ cm erreicht und entsprechend eine maximale spektrale Auflösung von $0,0345 \text{ cm}^{-1}$.

3.1.2 Das Optikmodul

Das Optikmodul mit Einkoppelspiegel, Teleskop, Interferometer und Detektorsystem ist in Abb. 3.2 gezeigt. Die Teleskop- und die Interferometerebene befinden sich in einem Kaltraum, der mit Trockeneis auf ca. 210 K gekühlt wird. Der Aufsatz mit dem Einkoppelspiegel ist ungekühlt und befindet sich auf Umgebungstemperatur. Der Strahlengang, in Abb. 3.2 grün gezeichnet, ist noch einmal schematisch in Abb. 3.3 in linearer Darstellung gezeigt. Die Strahlung gelangt über den Einkoppelspiegel und einen Faltungsspiegel in das 3-Spiegel-Teleskop, dann über zwei weitere Faltungsspiegel in das Interferometer und schließlich über zwei Faltungsspiegel und einen sphärischen Spiegel in den Detektorkryostaten, der mit flüssigem Helium auf ca. 5 bis 7 K gekühlt wird.

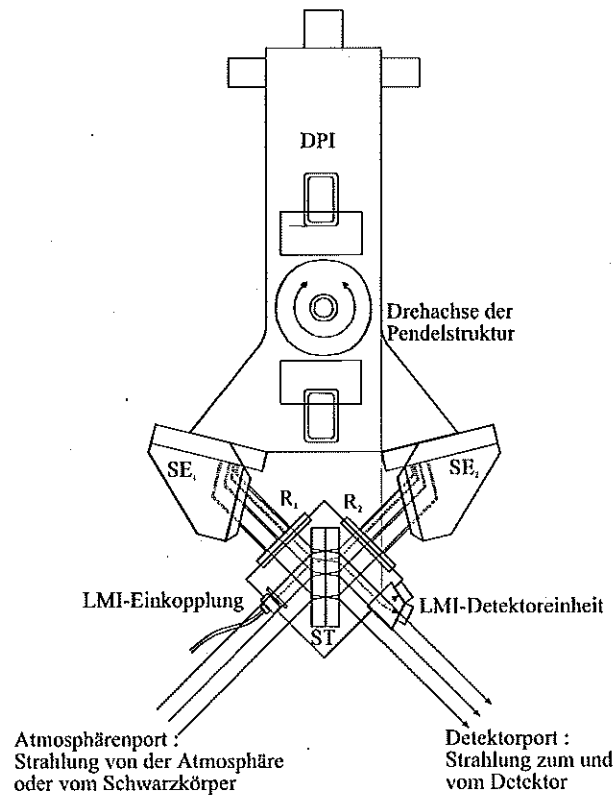


Abbildung 3.1: Das Doppelpendelinterferometer. Die Spiegelecken bewirken einen vertikalen Versatz des Strahls, die Retroreflektoren R1 und R2 befinden sich eine Ebene tiefer als der Strahlteiler.

Im Kryostaten wird die Strahlung über drei dichroitische Strahlteiler und vier Bandpaßfilter in vier spektrale Kanäle aufgeteilt und auf die Detektoren fokussiert.

Mit Hilfe des Teleskops wird der Öffnungswinkel des Gesichtsfeldes an den interferometrischen Raumwinkel angepaßt. Das vertikale Gesichtsfeld ist auf 5,0 mrad begrenzt, entsprechend einer Atmosphärenschichtdicke am Horizont von 3 km bei der untersten Tangentenhöhe.¹ Der Öffnungswinkel im Interferometer beträgt 12 mrad. Bei einem größeren Winkel könnte mehr Signal das Interferometer durchlaufen, andererseits wird mit zunehmendem Öffnungswinkel die Modulation des Signals bei großen optischen Weglängendifferenzen schlechter. Ein Raumwinkel, der noch eine gute Modulation bei gleichzeitig hohem Durchsatz gewährleistet, ist durch die sogenannte Raumwinkelbedingung gegeben, die den Zusammenhang zwischen dem Raumwinkel Ω_{max} und der Interferogrammlänge L für eine maximale Wellenzahl κ_{max} angibt.²

$$\Omega_{max} = \frac{\pi}{\kappa_{max} L} \quad (3.1)$$

Mit $\kappa_{max} = 1925 \text{ cm}^{-1}$ und $L = 14,5 \text{ cm}$ ergibt sich mit $\Omega = 4\pi \sin^2(\frac{\theta}{2})$ der halbe Öffnungs-

¹Zur Meßgeometrie siehe Abschnitt 3.1.4.

²Eine Herleitung der Raumwinkelbedingung findet sich z.B. in [Davis et al., 2001].

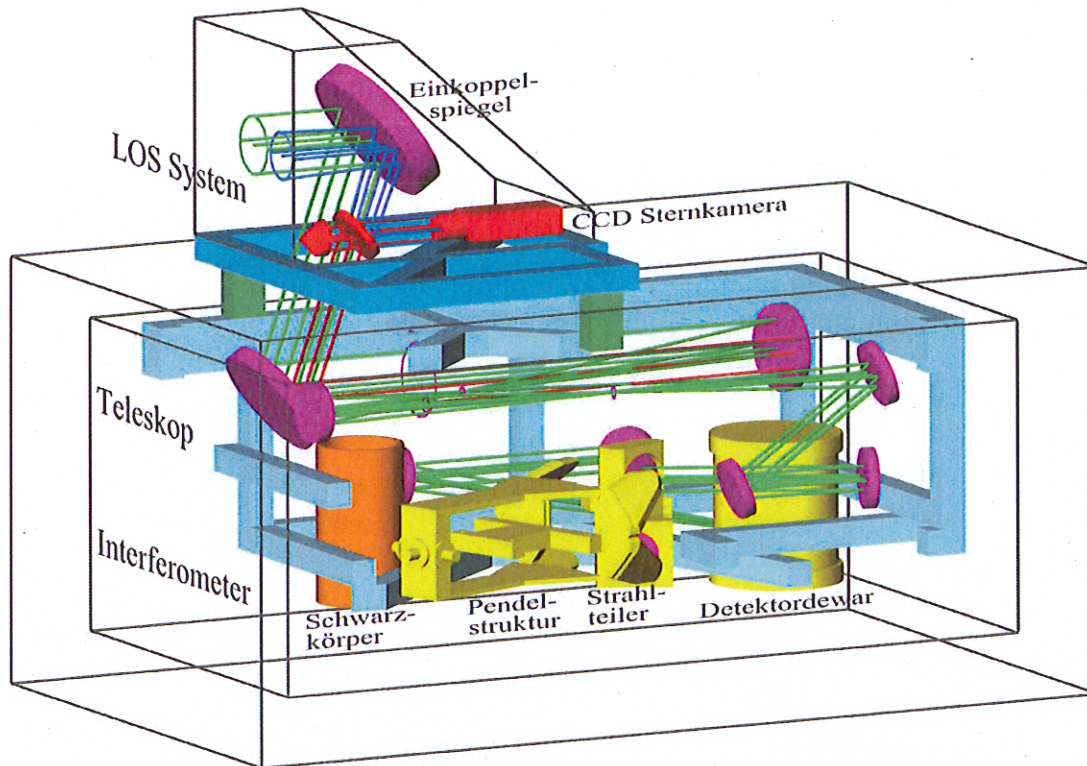


Abbildung 3.2: Das Optikmodul von MIPAS-B2.

winkel $\vartheta = 6,0$ mrad. Das Teleskop muß daher ein Übersetzungsverhältnis von 2,4 liefern. Wieviel Strahlung durch das Interferometer gelangt, ist durch die Etendue definiert. Die Etendue ist das Produkt aus Raumwinkel und Fläche und stellt in optischen Systemen eine Erhaltungsgröße dar. Die Fläche des Lichtbündels im Interferometer beträgt $17,7 \text{ cm}^2$, damit hat das Interferometer eine Etendue von $2,0 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ sr}$.

Eine weitere Funktion des Teleskops ist die Streulichtunterdrückung. Dazu sind an den Apertur- und den Feldorten jeweils Blenden montiert (in Abb. 3.3 als AS und FS gekennzeichnet). Die hinteren Blenden im Strahlengang sind jeweils um 10 % kleiner als die entsprechenden vorhergehenden, um auch die Beugungseffekte, die an den Blendenrändern entstehen, zu unterdrücken. Das Gesichtsfeld und die Apertur werden schließlich von kreisförmigen Blenden begrenzt, die sich im Detektorkryostaten befinden. Diese haben eine Temperatur von weniger als 10 K und liefern damit praktisch keine Eigenemission.

Da die Symmetrieachsen der sphärischen Spiegel nicht auf der optischen Achse liegen, wird das Gesichtsfeld durch Bildfehler horizontal verbreitert. Wichtig ist bei der Messung von Vertikalprofilen der Spurengase aber lediglich eine scharfe vertikale Begrenzung. Die Abbildungsqualität ist weniger bedeutend, da die Detektoren ohnehin keine räumliche Auflösung liefern.

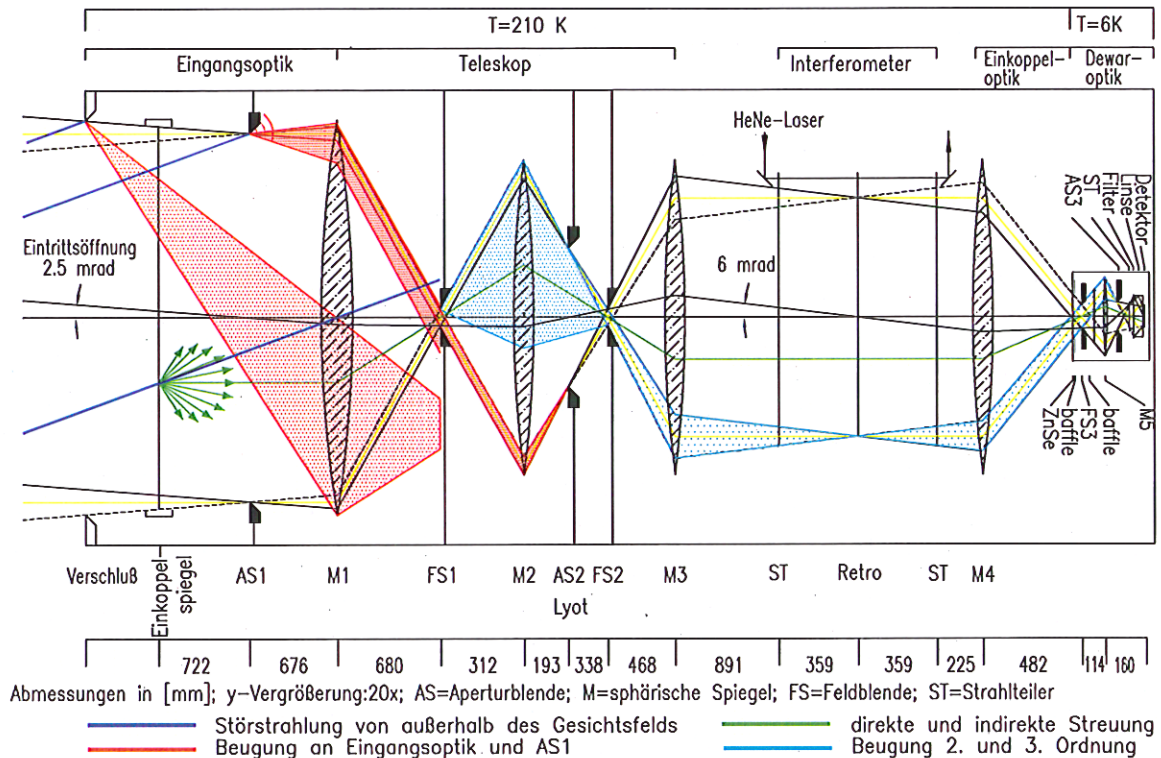


Abbildung 3.3: Strahlengang im Instrument. Um eine lineare Anordnung zu ermöglichen, sind die Spiegel als Linsen gezeichnet, Faltungsspiegel wurden ausgelassen. Für die Eintrittsöffnung und den Öffnungswinkel im Interferometer ist jeweils der halbe Öffnungswinkel angegeben.

3.1.3 Das Detektorsystem

Bei MIPAS-B2 werden in den vier spektralen Kanälen sogenannte Si:As-BIB-Detektoren eingesetzt. Das sind photoleitende Halbleiterbausteine aus stark mit Arsen dotiertem Silizium (Si:As), die eine *blocked-impurity-band*-(BIB)-Struktur aufweisen [Petroff und Stapelbroek, 1986]. Diese Struktur ermöglicht eine hohe Dotierung und damit ein geringes Volumen, so daß man diese Detektoren auch als Flächendetektoren bezeichnet. Ein Vorteil gegenüber herkömmlichen photoleitenden Volumendetektoren ist ihre Unempfindlichkeit gegenüber hochenergetischer Strahlung. Die Detektoren sind Einzelpixel mit einer Fläche von $1,6 \text{ mm} \times 1,6 \text{ mm}$. Eine detaillierte Beschreibung dieses Detektortyps findet sich z.B. in [Szmulowicz und Madarsz, 1987] und [Kleinert, 1998].

Die auf den Detektor treffenden Photonen werden nachgewiesen, indem sie von Elektronen absorbiert werden, die damit ins Leitungsband gelangen. Wenn am Detektor ein elektrisches Feld anliegt, bewegen sich die Elektronen zur Kathode und bewirken somit einen elektrischen Strom. Dieser wird mit Hilfe einer Feldeffekttransistorschaltung in eine Spannung umgesetzt, die verstärkt wird und das Ausgangssignal darstellt. Im Idealfall ist diese Spannung direkt proportional zur Zahl der einfallenden Photonen.

Das elektrische Feld am Detektor wird durch eine sogenannte Biasspannung erzeugt. Untersuchungen haben gezeigt, daß die Spannung zwischen ca. 0,8 und 2,4 V liegen sollte [Kleinert, 1998].

Wichtiger als der absolute Spannungswert ist jedoch die Stabilität der Spannung, da die Detektorresponsivität (das Verhältnis von Ausgangsspannung zu einfallendem Photonenstrom) von der Biasspannung abhängt. Als Spannungsversorgung werden Lithium-Eisensulfid-Batterien mit einer Nennspannung von 1,5 V eingesetzt.

Damit die Elektronen nur durch Photonenabsorption und nicht durch thermische Anregung ins Leitungsband gelangen, müssen die Detektoren auf Temperaturen unterhalb ca. 12 K gekühlt werden. Dies erfolgt in einem Kryostaten mit flüssigem Helium. Die Gleichgewichtstemperatur, die sich zwischen Heliumkühlung und Wärmeeintrag durch Kabel und Strahlung einstellt, liegt bei ca. 5 bis 7 K. Wie bei der Biasspannung ist die absolute Temperatur im Bereich mehrerer Kelvin unkritisch, jedoch ändert sich die Responsivität bereits merklich im Bereich von einigen zehn mK, so daß es sehr wichtig ist, die Temperatur stabil zu halten.

Bei den verwendeten Biasspannungen und Temperaturen und den bei Atmosphärenmessungen typischerweise auftretenden Photonenströmen ist das Rauschen am Ausgang des Detektors vom Rauschen der Hintergrundphotonen bestimmt [Kleinert, 1998] und damit hintergrundlimitiert. Für hintergrundlimitierte Detektoren ist die Rauschäquivalentleistung (*NEP*, engl. noise equivalent power) proportional zur Wurzel des einfallenden Photonenstroms [Kingston, 1978]:

$$NEP = \sqrt{\frac{2 (h\nu)^2 \Phi_{ph}}{\eta}} \quad (3.2)$$

mit $h\nu$ Energie eines Lichtquants
 Φ_{ph} Photonenstrom
 η Quantenwirkungsgrad (Zahl der absorbierten Photonen pro einfallende Photonen)

Channeling

An dieser Stelle sei noch ein unerwünschter Effekt der Detektoren, das sogenannte Channeling, erwähnt. Das Channeling entsteht durch Mehrfachreflexionen der Strahlung an planparallelen Grenzschichten. Wie bei einem Fabry-Perot-Interferometer wird die Intensität für Wellenlängen verstärkt, für die gilt:

$$n \cdot \lambda = 2 n d \cos \vartheta, \quad n \in \mathbb{N} \quad (3.3)$$

mit λ Wellenlänge
 n Brechungsindex
 d Dicke der Schicht, in der Mehrfachreflexion stattfindet
 ϑ Einfallswinkel

Für diese Wellenlängen beträgt der optische Gangunterschied zwischen einem Strahl, der direkt transmittiert wird und einem, der an jeder Grenzschicht einmal reflektiert wird, gerade ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge. Für den Wellenzahlabstand zweier aufeinanderfolgender Maxima gilt:

$$\delta\kappa = \frac{1}{2 n d \cos \vartheta} \quad (3.4)$$

Die lichtempfindliche Schicht der Detektoren befindet sich auf einem Siliziumsubstrat, das ein solches Channeling hervorruft. Die Dicke des Substrats beträgt 350 μm . Mit dem Brechungsindex von ca. 3,6 für Silizium ergibt sich daraus bei senkrechtem Einfall ein Channeling mit einer Periode von ca. 4 cm^{-1} , das dem eigentlichen Spektrum überlagert ist. Dieser Effekt läßt sich nicht

vermeiden, allerdings wird er abgeschwächt, wenn die Strahlung aus einem weiten Winkelbereich und schräg auf den Detektor fällt, vergleichbar mit der Abschwächung der Modulation bei einem großen interferometrischen Raumwinkel (vgl. Abschnitt 3.1.2). Daher sind in den Kanälen zwei, drei und vier die Detektoren um 30° gegen die einfallende Strahlung geneigt. Im Kanal 1, der den langwelligen Spektralbereich abdeckt, konnte der Effekt damit immer noch nicht hinreichend unterdrückt werden, deshalb wird hier statt einer Linse ein parabolischer Konzentrator eingesetzt. Durch den Konzentrator fällt das Licht aus einem weiten Winkel auf den Detektor, allerdings führt die Verwendung des Konzentrators dazu, daß das Gesichtsfeld ungleichmäßig auf den Detektor übertragen wird.

Alle übrigen optischen Komponenten wie Strahlteiler, Filter und Fenster, die ein Channeling hervorrufen könnten, sind leicht keilt, so daß ihre Grenzflächen nicht mehr planparallel sind und interferierende Mehrfachreflexionen verhindert werden.

3.1.4 Das Sichtlinienstabilisierungssystem

Um Vertikalprofile der Spurengaskonzentrationen zu messen, wird das Prinzip der Horizontsondierung angewandt, das in Abb. 3.4 schematisch dargestellt ist. Die Sichtlinie verläuft unter

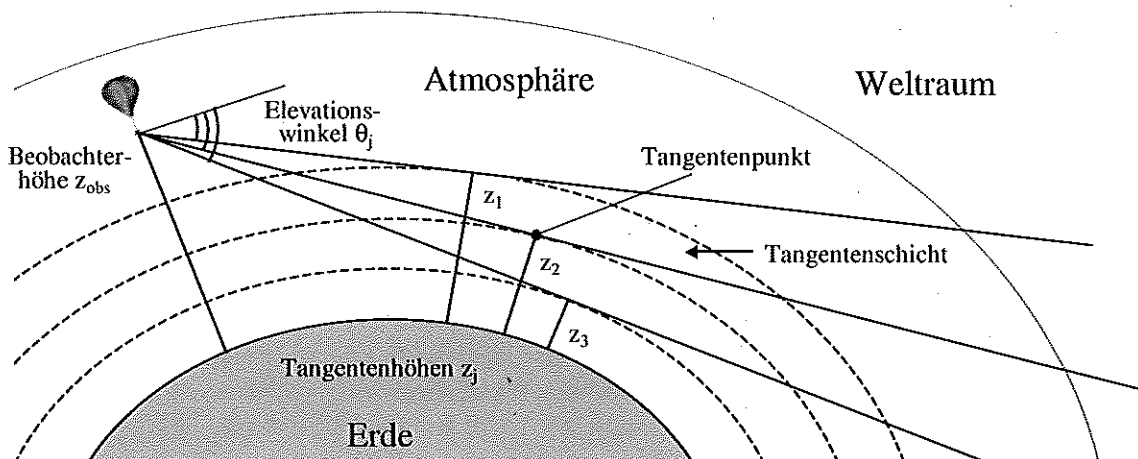


Abbildung 3.4: Meßgeometrie bei der Horizontsondierung (schematisch, nicht maßstäblich). Erläuterungen siehe Text.

verschiedenen Elevationswinkeln θ_j an der Erde vorbei durch die Atmosphäre in den Weltraum. Der Punkt des Sehstrahls, der der Erdoberfläche am nächsten kommt, ist der sogenannte Tangentenpunkt, und der kürzeste Abstand zwischen Tangentenpunkt und Erdoberfläche ist die Tangentenhöhe z_j . Jedem Elevationswinkel läßt sich somit eine Tangentenhöhe zuordnen. Die Tangentenschicht ist eine (gedanklich konstruierte) dünne Atmosphärenschicht, die den Tangentenpunkt enthält und aus der jeweils der Hauptanteil des Signals stammt. Mit Messungen unter verschiedenen Elevationswinkeln lassen sich daher Vertikalprofile von Spurengasen ableiten (s. Abschnitt 3.2.3). Eine Stärke dieser Meßgeometrie ist die gute vertikale Auflösung der

Spurengasprofile. Infolge der langen optischen Wege durch die Atmosphäre (mehrere hundert Kilometer) bietet die Horizontsondierung außerdem eine hohe Empfindlichkeit zum Nachweis geringer Spurengaskonzentrationen.

Aufgrund der Meßgeometrie führt ein kleiner Fehler bei der Einstellung des Elevationswinkels bereits zu großen Fehlern in der Tangentenhöhe. Um eine gute Höhenauflösung der Spurengasprofile zu erhalten, muß zum einen die Sichtlinie während der Messung unter einem Elevationswinkel gut stabilisiert sein, zum anderen ist für die Auswertung der Spurengasprofile eine genaue Kenntnis der Sichtlinie erforderlich. Die Lage des Instruments im Raum wird durch ein GPS-gestütztes (GPS: global positioning system) inertiales Navigationssystem (AHRS, attitude and heading reference system) bestimmt. Mit diesen Lage- und Orientierungsdaten werden Elevation und Azimut der Sichtlinie eingestellt. Die Einstellung der Elevation erfolgt über den Einkoppelspiegel (Abb. 3.2). Der Azimut wird über ein Pivot geregelt, das zwischen Gondel und Ballon montiert ist und über ein Drehgelenk eine Drehung der Gondel um die Hochachse ermöglicht (Abb. 3.5). Das Sichtlinienstabilisierungssystem ist ausführlich in [Seefeldner und Keim, 1995] und [Keim, 1995] beschrieben.

Für eine genaue Kenntnis der Sichtlinie wurde ein Sternreferenzsystem entwickelt. Dessen Kernstück ist eine CCD-Kamera, die entlang der Sichtlinie zu jedem Interferogramm ein Bild des Sternhimmels aufnimmt und mit Daten aus einem Sternkatalog vergleicht [Maucher, 1999]. Die Kamera sieht über einen Strahlteiler einerseits über den Einkoppelspiegel in den Sternhimmel (blaue Strahlen in Abb. 3.2), andererseits entlang der optischen Achse ins Instrument (rote Strahlen). Auf der zweiten Gesichtsfeldblende (FS₂ in Abb. 3.3) sind Leuchtdioden montiert, die die optische Achse des Instruments markieren. Auf diese Weise kann das Sternbild in Bezug zur optischen Achse gesetzt werden, um einen thermischen Verzug der Optik zu erfassen. Da die Sternreferenzmessungen nur nachts erfolgen können, sollten die Meßflüge zur Überprüfung der Sichtlinie wenigstens teilweise bei Dunkelheit erfolgen.

Die Einstellgenauigkeit der Sichtlinie beträgt 5', die Stabilität innerhalb von 15 Minuten (etwa die Zeit, die maximal für die Messung einer Tangentenhöhe zur Verfügung steht) beträgt 0,75', die Kenntnis anhand der Sternbilder weist eine Genauigkeit von 1' auf (alles 3 σ -Werte) [Maucher, 1999].

Als Schlußbemerkung zur Sichtlinie sei noch erwähnt, daß seit dem neunten Flug von MIPAS-B2 (Januar 2001) nicht mehr der Elevationswinkel stabilisiert wird, sondern die Tangentenhöhe. Damit werden die (wenn auch relativ langsamen) Höhenschwankungen des Ballons ebenfalls kompensiert.

3.1.5 Elektronik und Gondel

Die Flugelektronik hat im wesentlichen zwei Aufgaben: die Steuerung des Instruments und die Erfassung der Meßdaten. Die Befehle zur Instrumentsteuerung werden während des Fluges per Telekommando vom Boden zur Gondel übertragen. Ebenso werden die Meßdaten von der Flugelektronik per Telemetrie zur Bodenstation gesendet. Zu den Meßdaten zählen nicht nur die Interferogramme, sondern auch die Sternbilder und sogenannte Housekeeping-Daten, z.B. elektrische Ströme, Spannungen und Temperaturen, die Informationen über den Zustand des Instruments liefern. An der Bodenstation können die Daten zum einen direkt visualisiert werden, zum anderen werden sie in eine Datenbank geschrieben, in der sie sofort zur Analyse zur Verfügung stehen.

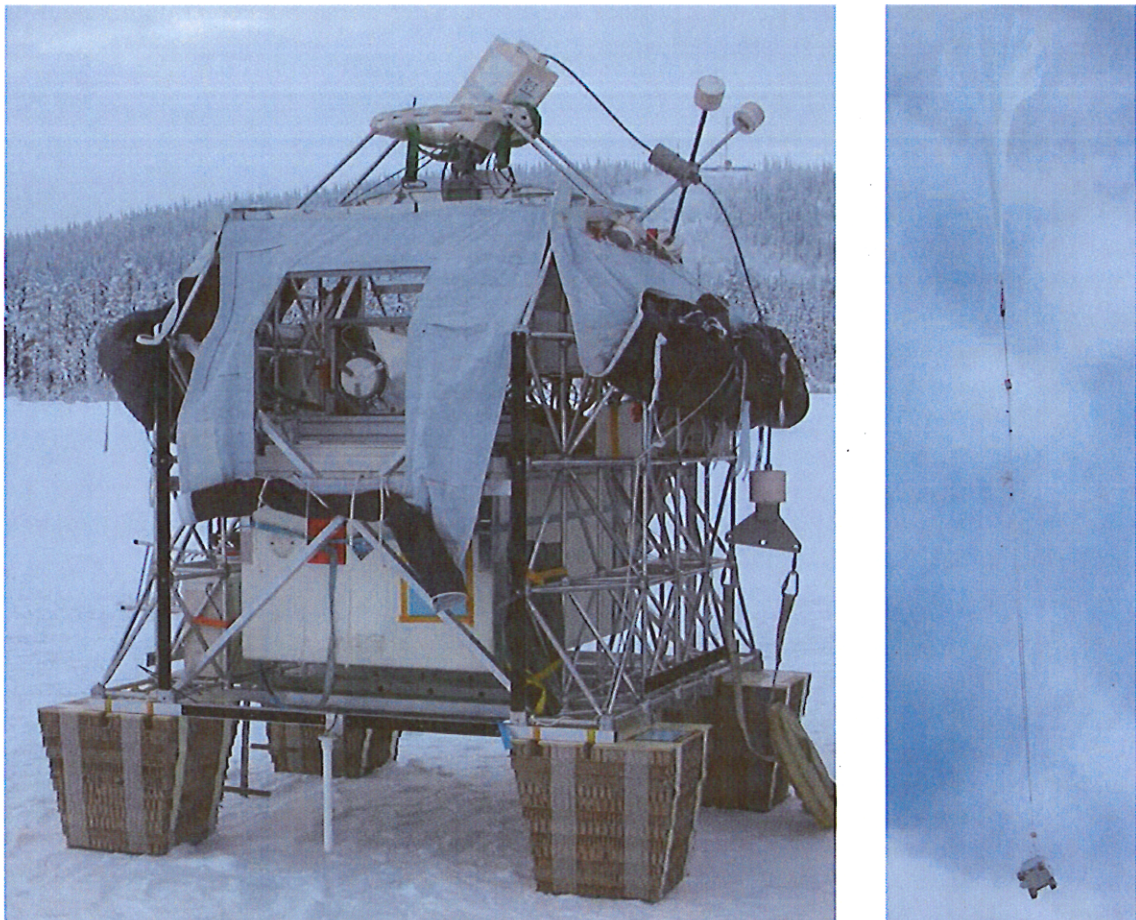


Abbildung 3.5: Die Gondel vor dem Start (links) und der Ballon mit Gondel kurz nach dem Start (rechts). In der Gondelstruktur ist die weiße Isolierungswanne, die das Optikmodul enthält, zu erkennen. Darüber befindet sich der Einkoppelspiegel hinter einer Klappe, die oberhalb der Tropopause geöffnet wird. Das Pivot zur Azimutstabilisierung hängt rechts herunter.

Abb. 3.5 zeigt die Gondel in flugfertiger Konfiguration kurz vor dem Start von Flug 10 am 12.2.2002 (links). Rechts ist das gesamte System, bestehend aus Gondel, Bifilare („flight-train“) und Ballon, kurz nach dem Start zu sehen. Direkt unter dem Ballon hängen drei Fallschirme; hier wird am Ende des Fluges der Ballon vom flight-train getrennt. Bei der Landung sind Beschleunigungen bis zum Zehnfachen der Erdbeschleunigung möglich. Die dabei auftretenden Kräfte werden teilweise von den Stoßdämpfern aus einer wabenförmigen Pappkartonstruktur, auf denen die Gondel steht, aufgenommen. Das Optikmodul ist zusätzlich mit Seildämpfern in der Gondelstruktur aufgehängt. Die stabile, fachwerkartige Konstruktion bietet einen guten Schutz, wenn die Gondel umkippt oder sich zwischen Bäumen verkeilt. In der Gondelstruktur sind die Lithium-Batterien, die die Stromversorgung während des Fluges gewährleisten, die Telemetrie-Elektronik und der Laser für das LMI untergebracht. Die Gondel Elektronik mit ihren Subkomponenten hängt über dem Optikmodul. Die Gondel selbst ist an einem Querbalken montiert, der die Aufhängung für das Pivot darstellt. Die Ausmaße der Gondel betragen ca. 1,80 m × 2,00 m × 1,80 m, das

Gesamtgewicht liegt bei 560 kg. Zum Schutz vor Erwärmung durch Sonnenstrahlung sind die Seitenwände mit einem Spezialstoff bespannt.

3.2 Messung und Auswertung

Ziel der Messungen ist es, vertikale Konzentrationsprofile (kurz: Vertikalprofile) ozon- und klimarelevanter Spurengase in der Stratosphäre und der oberen Troposphäre zu bestimmen. Durch Variation des Azimuts können z.B. Gebiete unterschiedlicher Temperatur oder im Randbereich des Polarwirbels Gebiete innerhalb und außerhalb des Wirbels vermessen werden. Ein Ballonflug dauert typischerweise mehrere Stunden. Da sich der Ballon mit den Luftmassen mitbewegt, können – wenn der Startzeitpunkt geschickt gewählt wird – Tag/Nacht-Variationen ebenfalls untersucht werden.

Der Weg von den gemessenen Interferogrammen zu den Vertikalprofilen der Spurengase ist in Abb. 3.6 skizziert. Auf die Kalibrierung und das sogenannte Spurengasretrieval wird in den Abschnitten 3.2.2 bzw. 3.2.3 eingegangen, Phasenkorrektur und Nichtlinearitätskorrektur werden ausführlich in den Kapiteln 6 und 7 behandelt.

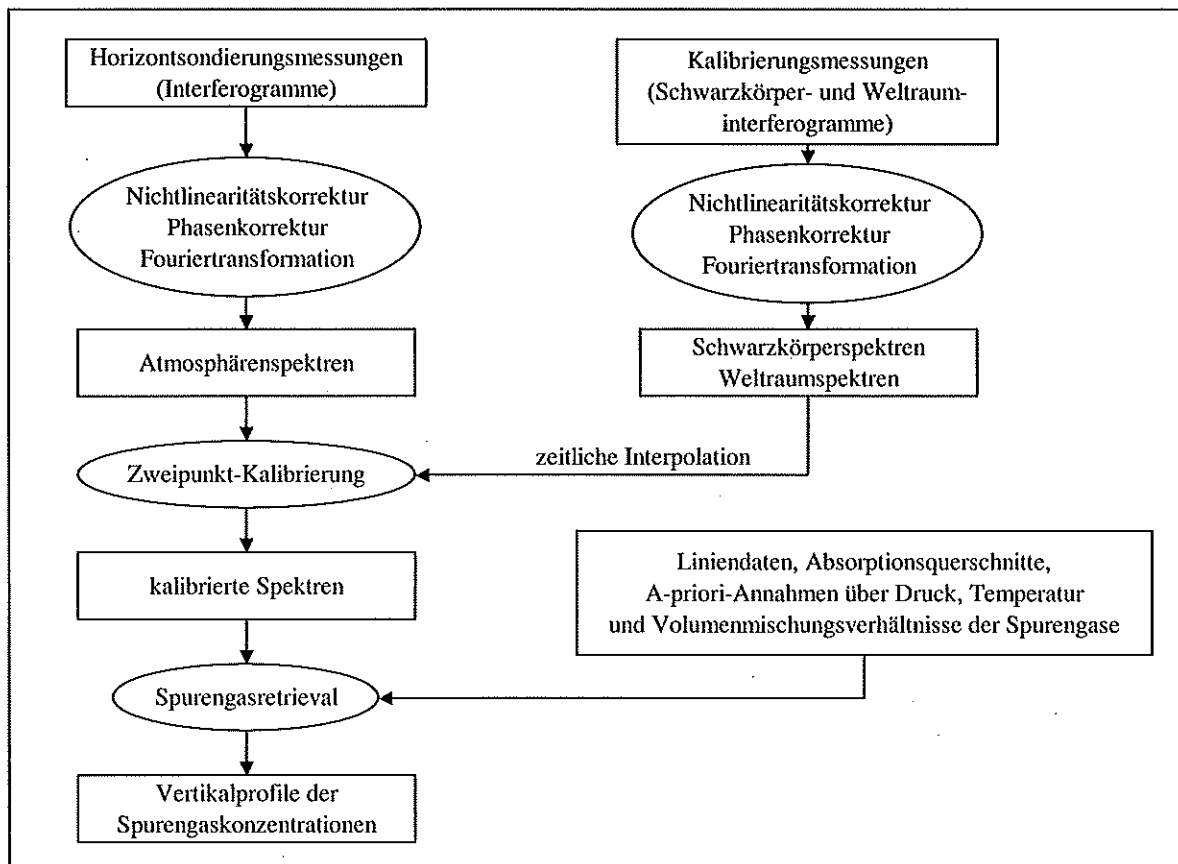


Abbildung 3.6: Von den gemessenen Interferogrammen zu den Spurengasprofilen. In den Rechtecken stehen die Produkte, die Prozesse sind in Ellipsen gezeichnet.

3.2.1 Meßablauf

Nach dem Start steigt der Ballon innerhalb von 1 3/4 bis 3 Stunden bis zur Gipfelhöhe auf, bei der sich Auftriebskraft und Gewichtskraft im Gleichgewicht befinden. Sobald die Gondel die Tropopause passiert hat, wird die Klappe des Instruments (vgl. Abb. 3.5) geöffnet, die den Kalt-raum am Boden und während des Aufstiegs vor eindringender Feuchtigkeit schützt. Während des weiteren Aufstiegs ist der Sehstrahl unter einem flachen Winkel ($+2^\circ$ bis $+0,5^\circ$) aufwärts gerichtet. Nach Erreichen der Gipfelhöhe wird im Horizontsondierungsverfahren die Atmosphäre schrittweise von Tangentenhöhen knapp unterhalb der Flughöhe bis hinunter in die Tropopausen-region abgetastet. Wenn die Troposphäre wolkenfrei ist, kann man in einigen Spektralbereichen (im Bereich der atmosphärischen Fenster) sogar noch tiefer messen. Um Informationen über die Spurengase oberhalb vom Ballon zu erhalten, wird zusätzlich ein Spektrum unter $+2^\circ$ gemessen. Aus der Aufwärtssondierung während des Aufstiegs können zwar auch Vertikalprofile abgeleitet werden, der Schwerpunkt der Messung liegt jedoch auf der Horizontsondierung.

Der Abstand der Tangentenhöhen und die Zeit, die pro Tangentenhöhe aufgewandt wird, hängt von der Zielsetzung der Messung ab. Obwohl das Gesichtsfeld des Instruments am Tangentepunkt eine vertikale Ausdehnung von bis zu 3 km hat, können durch ein feineres Abtasten (1 bis 1,5 km) starke vertikale Gradienten von Spurengasen, wie sie z.B. im Zusammenhang mit polaren Stratosphärenwolken im arktischen Winter oder durch Bildung von Filamenten in der Stratosphäre auftreten können, besser aufgelöst werden als bei 3-km-Schritten. Da die Dichte der Luft nach den hydrostatischen Grundlagen mit der Höhe abnimmt, wird auch die Spurengasdicke im allgemeinen geringer.³ Mit dem schwächeren Signal wird auch das Signal-zu-Rausch-Verhältnis (S/N) geringer. Um ein annähernd konstantes S/N zu erhalten, muß daher die Meßzeit pro Tangentenhöhe in etwa exponentiell zunehmen. Die minimale Meßzeit für eine Tangentenhöhe ist durch die Zeit für die Aufnahme eines Interferogramms gegeben. Diese liegt bei 10 bis 20 Sekunden. Aus Redundanzgründen werden für jede Höhe mindestens zwei Interferogramme gemessen. Daher werden in den unteren Höhen (bis 12,5 km) 2 Interferogramme pro Höhe gemessen, in den obersten Höhen bis zu 32.

Der exakte zeitliche Ablauf und die Richtung der Sequenz (von oben nach unten oder von unten nach oben) hängen von verschiedenen Faktoren ab. Um z.B. die zeitliche Entwicklung von Spurengaskonzentrationen zu verfolgen, die einen Tagesgang aufweisen, sollte bei Sonnenaufgang von oben nach unten gemessen werden (da die Sonne die oberen Atmosphärenschichten zuerst erreicht) und bei Sonnenuntergang von unten nach oben. Dabei sollte die Meßzeit pro Tangentenhöhe dem Sonnenstand angepaßt werden. Ein weiterer Aspekt ist die Richtung des Sehstrahls bezüglich der Bewegungsrichtung des Ballons. Da die tieferen Tangentepunkte weiter vom Ballon entfernt sind, wird bei Blickrichtung in Flugrichtung das Profil kompakter, wenn von unten nach oben gemessen wird. Bei entgegengesetzter Blickrichtung sollte von oben nach unten gemessen werden.

Die Horizontsondierungssequenzen können im voraus vorgegeben werden und laufen dann automatisch ab, indem in der Umkehrphase des Pendels, in der die Interferogrammaufnahme gestoppt ist, der Elevationswinkel verstellt wird. Jedoch können die Tangentenhöhen auch manuell eingestellt werden. Mit dem automatischen Meßmodus werden Verlustzeiten sehr gering gehalten, während die manuelle Steuerung eine flexible Modifikation des Meßprogramms erlaubt.

³Bei Gasen, deren Mischungsverhältnis mit der Höhe zunimmt, nimmt die Dichte entsprechend weniger stark ab.

3.2.2 Kalibrieren der Spektren

Bevor aus den atmosphärischen Spektren Spurengaskonzentrationen abgeleitet werden können, müssen sie kalibriert werden. Die Intensität, die zunächst in willkürlichen Einheiten vorliegt, muß in die spektralen Strahldichteinheiten $W / (cm^2 sr cm^{-1})$, abgekürzt r.u. (engl. radiation units), umgerechnet werden. Diese Zuordnung erfolgt durch eine Zweipunkt-Kalibrierung, bei der aus der Messung zweier bekannter Strahlungsquellen die Responsivität des Instruments und seine Eigenemission bestimmt werden. Zur Bestimmung der Eigenemission wird der kalte Weltraum (DS, deep space) verwendet, dessen Hintergrundstrahlung gleich null gesetzt werden kann.⁴ Als zweite bekannte Strahlungsquelle dient ein interner Hohlraumstrahler (BB, blackbody, vgl. Abschnitt 5.5), der in die untere Ebene des Kaltraums eingebaut ist (s. Abb. 3.2) und sich im thermischen Gleichgewicht mit seiner Umgebung befindet. Eine Kalibrierungssequenz besteht aus aufeinanderfolgenden Schwarzkörper- und Weltraummessungen. Damit ist der Zusammenhang zwischen einfallender Strahldichte \mathcal{L} und gemessenem Spektrum S eindeutig gegeben:

$$S_{atm} = \underbrace{\frac{S_{BB} - S_{DS}}{\mathcal{L}_{BB}}}_G \cdot \mathcal{L}_{atm} + S_{DS} \quad (3.5)$$

mit	\mathcal{L}_{atm}	spektrale Strahldichte des atmosphärischen Spektrums
	\mathcal{L}_{BB}	spektrale Strahldichte des Schwarzkörperspektrums
	S_{atm}	gemessenes atmosphärisches Spektrum
	S_{BB}	gemessenes Schwarzkörperspektrum
	S_{DS}	gemessenes Weltraumpektrum
	G	Instrumentresponsivität (engl. gain function)

Die Kalibrierungsgleichung für die gemessenen Spektren erhält man, indem man Gl. (3.5) nach \mathcal{L}_{atm} auflöst:

$$\mathcal{L}_{atm} = \frac{S_{atm} - S_{DS}}{S_{BB} - S_{DS}} \cdot \mathcal{L}_{BB} = S_{atm} \cdot \underbrace{\frac{\mathcal{L}_{BB}}{S_{BB} - S_{DS}}}_{(1/G)} - \underbrace{S_{DS} \cdot \frac{\mathcal{L}_{BB}}{S_{BB} - S_{DS}}}_{(\mathcal{L}_{Offset})} \quad (3.6)$$

Zusätzlich zu den Größen aus Gl. (3.5) wird hier noch der Offset \mathcal{L}_{Offset} eingeführt, der durch die Eigenstrahlung des Instruments gegeben ist. Alle hier aufgeführten Größen sind Funktionen der Wellenzahl κ .

Die Bestimmung der Instrumentresponsivität anhand von zwei Messungen ist nur dann zulässig, wenn die Responsivität für alle im Flug auftretenden Signalstärken konstant ist. Das Responsivitätsverhalten der Detektoren ist jedoch nichtlinear. Diese Nichtlinearität muß korrigiert werden, bevor Gl. (3.6) angewandt werden kann (vgl. Kap. 7).

Da sich Instrumentresponsivität und Offset im Laufe des Fluges ändern, müssen die Kalibrierungsmessungen mehrmals durchgeführt werden. Zwischen zwei Messungen wird linear interpoliert. Wie häufig und wie lange kalibriert werden sollte, wird in Kap. 5 untersucht.

⁴Für die Weltraummessungen verläuft die Sichtlinie des Instruments unter $+20^\circ$. Da sich die Atmosphäre auch oberhalb des Ballons noch fortsetzt, muß das Restsignal der Atmosphäre aus den Spektren eliminiert werden (s. Abschnitt 5.4).

3.2.3 Das Spurengasretrieval

Das Spurengasretrieval (eng. to retrieve: zurückgewinnen, wiedererlangen) ist ein Verfahren, um aus den gemessenen Spektren Vertikalprofile der Spurengaskonzentrationen abzuleiten.

Die von den Molekülen emittierte Strahlung wird entlang der Sichtlinie durch Absorption und Streuung geschwächt. Andererseits kann auch Strahlung in die Sichtlinie eingestreut werden, und weitere Moleküle entlang des Weges emittieren ebenfalls Strahlung. Im infraroten Spektralbereich kann die Streuung an Molekülen vernachlässigt werden. Lediglich Streuung an Aerosolteilchen $> 1 \mu\text{m}$ muß unter bestimmten Bedingungen berücksichtigt werden (siehe z.B. [Höpfner et al., 2002]). Die Strahldichte, die aus einer vorgegebenen Richtung an einem bestimmten Ort gemessen werden kann, wird durch die Strahlungsübertragungsgleichung beschrieben. Unter Vernachlässigung der Streuung und des Hintergrundterms, der für Messungen mit MIPAS-B2 durch die Emissionsstrahlung des Weltraums gegeben ist, lautet sie in ihrer integrierten Form [Chandrasekhar, 1960]:

$$\mathcal{L}_{\Delta\kappa} = \int_s \left[B_{\Delta\kappa}(T(s)) \cdot a_{tot,\Delta\kappa,s}^{vol} \cdot \tau_{\Delta\kappa,s} \right] ds \quad (3.7)$$

mit	$\mathcal{L}_{\Delta\kappa}$	Strahldichte im spektralen Intervall $\Delta\kappa$
	s	Wegkoordinate entlang der Sichtlinie
	$B(T)$	Planckfunktion in Abhängigkeit von der Temperatur
	a_{tot}^{vol}	Volumenabsorptionskoeffizient
	τ	atmosphärische Transmission

Der Volumenabsorptionskoeffizient und die Transmission hängen von den Spurengaskonzentrationen ab. Mit der Kenntnis von Druck, Temperatur und Spurengasverteilung entlang des Sehstrahls kann man unter Verwendung der Strahlungsübertragungsgleichung das Spektrum am Ort des Meßinstrumentes berechnen. Diese sogenannte „Vorwärtsrechnung“ erfolgt mit Hilfe des Programms KOPRA (Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm, [Stiller, 2000]). Die erforderlichen Liniendaten (Linienintensität und -position) und Absorptionsquerschnitte schwerer Moleküle werden einer Datenbank (HITRAN, High Resolution Transmission Molecular Spectroscopic Database, [Rothman et al., 1998]) entnommen.

Umgekehrt wird mit einer Inversionsrechnung aus den gemessenen Spektren unter Kenntnis von Druck, Temperatur und Richtung des Sehstrahls die Spurengasverteilung abgeleitet. Die Inversion der Strahlungsübertragungsgleichung ist im allgemeinen analytisch nicht möglich, außerdem ist die Lösung nicht eindeutig. Die Zerlegung der Atmosphäre in einzelne Tangentenschichten, die durch die Meßgeometrie bedingt ist (Abb. 3.4), ist eine künstliche Hilfskonstruktion; in der Realität ist das Profil kontinuierlich. Des weiteren liefert das Horizontsondierungsverfahren nur wenig Information über das Spurengasprofil oberhalb des Ballons. Daher werden Nebenbedingungen eingeführt, in denen z.B. eine gewisse Glattheit des Profils gefordert wird. Über einen Regularisierungsparameter wird bestimmt, wie stark die A-priori-Annahmen, die in die Inversionsrechnung eingehen, gewichtet werden. In spektraler Hinsicht ist das Gleichungssystem überbestimmt: Ein Gas zeigt im allgemeinen eine ganze Reihe von Emissionslinien, die sich aufgrund von Rauschen und systematischen Fehlern nicht exakt durch dieselbe Spurengaskonzentration wiedergeben lassen.

Für die Inversionsrechnung steht das Programm KOPRAFIT zur Verfügung [Höpfner, 2002]. Unter A-priori-Annahmen für Druck, Temperatur und Spurengasverteilung wird zunächst mit KOPRA für jede Tangentenhöhe ein synthetisches Spektrum berechnet. A-priori-Informationen

für Druck- und Temperaturprofil stammen aus Radiosondenaufstiegen in räumlicher und zeitlicher Nähe zum Ballonflug und vom ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts). Für die Spurengase werden Standardprofile für die jeweiligen atmosphärischen Bedingungen verwendet. Nun werden die freigegebenen Parameter iterativ so lange variiert, bis eine bestmögliche Übereinstimmung zwischen gemessenen Spektren und denen aus der Vorwärtsrechnung gefunden wird. Im Idealfall zeigt das Residuum zwischen Messung und Rechnung dann nur noch Rauschen. Als erster Schritt des Retrievals wird aus den Spektren das Temperaturprofil abgeleitet. Dazu werden die Linien von CO_2 herangezogen, da dieses Gas in der Atmosphäre ein konstantes Mischungsverhältnis aufweist, das sehr genau bekannt ist. In diesem Fall wird daher bei den Vorwärtsrechnungen die Spurengaskonzentration konstant gehalten und die Temperatur so lange variiert, bis Messung und Vorwärtsrechnung optimal übereinstimmen. Unter Verwendung der so bestimmten Temperatur werden anschließend die Vertikalprofile der übrigen Spurengase abgeleitet. Die Auswertung erfolgt in kleinen Auswertefenstern, Spektralbereichen von wenigen cm^{-1} Ausdehnung,⁵ in denen vorwiegend das gesuchte Gas starke Signaturen aufweist und möglichst nur kleine Störbeiträge von anderen Gasen vorhanden sind. Neben Temperatur und Spurengasprofil werden noch zwei eher instrumentspezifische Anpassungsparameter freigegeben: eine Verschiebung der Wellenzahlachse und ein (additiver) Offset. Die Zuordnung der Wellenzahlachse zu den Linien kann sowohl bei den gemessenen Spektren als auch in den spektroskopischen Daten für die Vorwärtsrechnung kleine Fehler aufweisen, die das Anpassungsergebnis verschlechtern, wenn sie nicht korrigiert werden. Ein Offset-Fehler kann z.B. entstehen, wenn die Eigenemission des Instruments bei der Kalibrierung nicht exakt bestimmt wurde (Kap. 5). Jedoch ist bei Anwesenheit von Wolken im Sehstrahl Vorsicht geboten, da diese einen Kontinuumsbeitrag liefern, der innerhalb eines Auswertefensters wie ein additiver Beitrag erscheint. Gleichzeitig beeinflussen Wolken aber durch Extinktion auch die spektralen Signaturen der Gase, was beim Retrieval ebenfalls berücksichtigt werden muß.

3.3 Übersicht über die MIPAS-Ballonflüge

Das radiometrische Verhalten des Instruments während eines Meßfluges hängt von vielen Faktoren ab. Die typischen Instrumenteigenschaften können durch die Analyse mehrerer Flüge unter verschiedenen Bedingungen besser quantifiziert werden als anhand eines einzelnen Fluges, der nicht unbedingt repräsentativ ist. Außerdem gibt der Überblick über mehrere Flüge einen Eindruck über die Variabilität der Instrumenteigenschaften. Daher werden in dieser Arbeit die Flüge 4 bis 10 von MIPAS-B2 (März 1997 bis Februar 2002) hinsichtlich ihres radiometrischen Verhaltens untersucht. Diese Flüge werden in diesem Abschnitt kurz beschrieben.

Tabelle 3.1 gibt einen Überblick über die Flüge. Die Flüge 4, 7, 9 und 10 erfolgten im polaren Winter, die Flüge 5, 6 und 8 in mittleren Breiten im Frühjahr/Sommer. Die vier spektralen Kanäle des Instruments waren bei den verschiedenen Flügen entsprechend den wissenschaftlichen Zielen mit unterschiedlichen Filtern bestückt. In Tabelle 3.2 sind in etwa die Halbwertsbreiten der Kanäle angegeben. Der Wert in Klammern bei Kanal 2 gibt den 20%-Wert vom Maximum an, da hier die rechte Filterflanke sehr flach verläuft. Die Spektralbereiche, die für die Ableitung der Spurengasprofile herangezogen werden, sind in Tabelle 3.3 angegeben. Im folgenden beziehen sich alle Angaben zu Genauigkeiten, S/N usw. auf diese Spektralbereiche, sofern nichts anderes angegeben ist.

⁵Für manche Gase werden Bereiche von einigen zehn cm^{-1} herangezogen.

	Ort	Datum	Uhrzeit (UT)	Gipfelhöhe	Tageszeit
Flug 4	Esrangle (Kiruna)	24.3.1997	17:30 - 20:30	29,5 km	Nacht
Flug 5	Gap	1./2.7.1997	22:25 - 04:42	39,0 km	Nacht/Tag
Flug 6	Aire sur l'Adour	7./8.5.1998	23:40 - 05:44	38,4 km	Nacht/Tag
Flug 7	Esrangle (Kiruna)	24.1.1999	03:30 - 09:44	32,1 km	Nacht/Tag
Flug 8	Aire sur l'Adour	29./30.4.1999	23:33 - 08:07	38,6 km	Nacht/Tag
Flug 9	Esrangle (Kiruna)	11.1.2001	12:00 - 16:37	28,4 km	(Tag)/Nacht
Flug 10	Esrangle (Kiruna)	12.2.2002	11:57 - 15:55	31,4 km	Tag/Nacht

Tabelle 3.1: Übersicht über die Flüge von März 1997 bis Februar 2002. Esrange liegt in Nordschweden (67,9 °N, 21,1 °E), Gap in Südostfrankreich (44,5 °N, 6,0 °E) und Aire sur l'Adour in Südwestfrankreich (43,7 °N, 0,2 °W).

	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	Einh.
Flug 4 und 5	771 - 982	1140 - 1351	1571 - 1691		cm ⁻¹
Flug 6	670 - 967	998 - 1345 (1525)	1577 - 1758	1790 - 2448	cm ⁻¹
Flug 7 und 8	765 - 986	1141 - 1351	1577 - 1758	1790 - 2448	cm ⁻¹
Flug 9	765 - 986	1122 - 1330	1577 - 1758	1873 - 1940	cm ⁻¹
Flug 10	765 - 986	1130 - 1525	1577 - 1758	1873 - 1940	cm ⁻¹

Tabelle 3.2: Übersicht über die in den Flügen 4 bis 10 abgedeckten Spektralbereiche.

	Spektralbereich	Gase
Kanal 1	770 - 970 cm ⁻¹	T (CO ₂), HNO ₃ , HO ₂ NO ₂ , ClONO ₂ , ClO, CCl ₄ , CFCl ₃ , CF ₂ Cl ₂ , CHF ₂ Cl, SF ₆
Kanal 2	1130 - 1290 cm ⁻¹	O ₃ , N ₂ O, N ₂ O ₅ , CH ₄ , H ₂ O, HDO, HOCl, COF ₂ , CF ₄
Kanal 3	1585 - 1645 cm ⁻¹	NO ₂ , H ₂ O
Kanal 4	1890 - 1940 cm ⁻¹	NO

Tabelle 3.3: Zur Spurengasprofilbestimmung verwendete Spektralbereiche sowie die in den jeweiligen Kanälen typischerweise ausgewerteten Gase. CO₂ wird zur Temperaturbestimmung verwendet. Besonders in den Kanälen 1 und 2 zeigen auch polare Stratosphärenwolken eine breitbandige, charakteristische Struktur.

Kapitel 4

Grundlagen der Fehlerrechnung

Bei den Fehlern einer Messung unterscheidet man im allgemeinen zwischen statistischen (oder zufälligen) Fehlern und systematischen Fehlern. Statistische Fehler ändern ihren Wert von Messung zu Messung unter sonst gleichen Bedingungen, sie können ebensogut positiv wie negativ sein, und bei einer hinreichend großen Zahl von Messungen derselben Größe unter gleichbleibenden Bedingungen streuen die Meßwerte (annähernd) gemäß einer Gaußverteilung um ihren arithmetischen Mittelwert.

Systematische Fehler sind Fehler, die sich bei der Wiederholung einer Messung unter gleichen Bedingungen nicht ändern. Sie können daher weder durch die mehrfache Wiederholung einer Messung quantifiziert werden, noch läßt sich der Fehler durch Mittelung über mehrere Messungen reduzieren. Systematische Fehler lassen sich nicht mit statistischen Methoden quantifizieren, sondern müssen unter Zuhilfenahme von Zusatzinformationen und weitergehenden Messungen abgeschätzt werden.

Eine Besonderheit sind diejenigen Fehler, die zwar statistische Ursachen haben, aber sich trotzdem im Endergebnis als systematische Fehler auswirken. Als Beispiel sei hier das Rauschen des Schwarzkörperspektrums genannt. Es ist statistischen Ursprungs, und wenn man die Schwarzkörpermessung wiederholt, ändert sich das Ergebnis innerhalb des Rauschens. Dennoch wirkt sich dieser Fehler systematisch auf alle Atmosphärenspektren aus, die mit Hilfe desselben Schwarzkörperspektrums kalibriert wurden. Eine Wiederholung der Messung des atmosphärischen Spektrums kann diesen Fehler nicht reduzieren.

In diesem Kapitel wird auf Quantifizierung von Meßfehlern und die Fehlerfortpflanzung auf abgeleitete Größen eingegangen. Bei der Quantifizierung von Meßfehlern wird zwischen systematischen und statistischen Fehlern unterschieden, bei der Fehlerfortpflanzung muß untersucht werden, ob die einzelnen Fehlerbeiträge voneinander abhängig oder unabhängig sind.

4.1 Quantifizierung von Meßfehlern

4.1.1 Statistische Fehler

Für eine Messung, die n mal wiederholt wird und bei der systematische Fehler gegenüber statistischen Fehlern vernachlässigt werden können, gilt:

- Der wahrscheinlichste Wert für das Ergebnis ist der Mittelwert \bar{x} aus den Einzelmessungen x_j :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_j \quad (4.1)$$

Dieser Wert wird auch Erwartungswert von x genannt.

- Die Stichproben-Standardabweichung:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x})^2} \quad (4.2)$$

ist ein Maß für die Streuung der einzelnen Meßwerte um den Mittelwert.

- Für $n \rightarrow \infty$ ist die Verteilung der Meßwerte durch eine Gauß- oder Normalverteilung gegeben:

$$f_{\bar{x},\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}} \quad (4.3)$$

Hierbei ist \bar{x} das Zentrum der Verteilung, und σ gibt ihre Breite an. Für unendlich viele Messungen ist σ gleich der Standardabweichung. Die Gaußverteilung ist eine sehr gute Näherung für die Verteilung der Meßwerte, wenn n hinreichend groß ist.

- Das Integral der Gaußverteilung von $\bar{x} - \sigma$ bis $\bar{x} + \sigma$ beträgt 68% des Integrals von $-\infty$ bis $+\infty$. Die Kenngröße σ gibt daher an, daß der Wert einer Einzelmessung mit einer Wahrscheinlichkeit von 68% innerhalb des Bereichs $\bar{x} \pm \sigma$ liegt. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Meßwert im Bereich von $\bar{x} \pm 2\sigma$ liegt, beträgt 95%, im 3σ -Bereich liegt sie bei 99,7%.

4.1.2 Systematische Fehler

Über den Umgang mit systematischen Fehlern schreibt [Squires, 1971]:

„Zufällige Fehler können mit statistischen Methoden abgeschätzt werden [...]. Systematische Fehler bieten sich nicht in einem so klar umrissenen Verfahren an. Das sicherste Mittel gegen sie ist es, sie als Effekte zu betrachten, die zu entdecken und auszuschalten sind. Eine allgemeine Vorschrift dafür gibt es nicht. Es ist eine Frage des Nachdenkens über die jeweilige, besondere Methode der Versuchsdurchführung und des ständigen Mißtrauens gegenüber der Apparatur.“

Für die Quantifizierung systematischer Fehler gibt es also kein Schema, sie müssen im allgemeinen sinnvoll abgeschätzt werden. Dies kann mit Hilfe geeigneter Zusatzinformationen erfolgen (z.B. Abschätzung von Umwelteinflüssen) oder durch gezielte weitergehende Messungen. Die verschiedenen Wege zur Abschätzung des systematischen Fehlers sollen an zwei Beispielen erläutert werden:

Beispiel 1

Das Emissionsvermögen des Schwarzkörpers beträgt nicht exakt 1, sondern ist gemäß Messungen der Reflektivität des Schwarzlacks und Rechnungen zu Hohlraumstrahlern lediglich größer als 0,998. Ein Emissionsvermögen von 1 stellt die physikalische Obergrenze dar, daher liegt der Wert für alle Frequenzen zwischen 0,998 und 1. Ein Fehler in der Bestimmung des Emissionsvermögens ist für alle Messungen gleich, damit ist der Fehler systematisch. In diesem Fall ist es sinnvoll, ein (mittleres) Emissionsvermögen $\epsilon = 0,999$ anzunehmen und einen (geschätzten) systematischen Fehler von $\Delta\epsilon = \pm 0,001$. Anders als beim statistischen Fehler läßt sich hier keine Wahrscheinlichkeit angeben, mit der der wahre Wert im angegebenen Fehlerbereich liegt. Die Abschätzung sollte allerdings so erfolgen, daß die Wahrscheinlichkeit, den wahren Wert innerhalb des angegebenen Bereichs zu finden, sehr hoch ist. Andererseits sollte die Abschätzung dieses Bereiches (und damit die geschätzte Größe des systematischen Fehlers) nicht zu großzügig bemessen sein, weil dies die angegebene Qualität der Messung unnötig mindert.

Beispiel 2

Das Rauschen im gemessenen Schwarzkörperspektrum führt zu einem systematischen Fehler in den kalibrierten Spektren, da sich der Fehler auf alle Spektren gleichermaßen auswirkt und sich durch Wiederholung der Atmosphärenmessung auch nicht ändert. Dennoch kann dieser systematische Fehler mit den Methoden der statistischen Fehlerrechnung quantifiziert werden, da seine Ursache statistischer Natur ist. Wenn zur Kalibrierung ein einzelnes Schwarzkörperspektrum verwendet werden soll, kann sein Fehler (aufgrund des Rauschens) z.B. dadurch bestimmt werden, daß man einmal einen Satz von vielen Schwarzkörperspektren aufnimmt und mit Gl. (4.2) die Standardabweichung für eine Einzelmessung bestimmt. Diese gibt dann den Fehler an, mit dem ein einzelnes Schwarzkörperspektrum behaftet ist, und der als systematischer Fehler in das kalibrierte Spektrum eingeht. Wie für statistische Fehler läßt sich auch in diesem Fall die Wahrscheinlichkeit angeben, mit der der wahre Wert innerhalb des Fehlerbereichs liegt.

4.2 Fehlerfortpflanzung

Wenn eine Größe von mehreren gemessenen Parametern abhängt, dann berechnet sich der Fehler dieser Größe mit Hilfe der Fehlerfortpflanzung. Sei $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ eine Funktion der Meßgrößen x_j , die jeweils mit den Fehlern Δx_j behaftet sind, dann ist:

$$f + \Delta f = f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \dots, x_n + \Delta x_n) \quad (4.4)$$

Wenn die Δx_j klein sind, kann man Gl. (4.4) in eine Taylorreihe entwickeln, die nach dem ersten Glied abgebrochen wird. Damit erhält man für den Fehler Δf :

$$\Delta f \approx \left| \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 \right| + \left| \frac{\partial f}{\partial x_2} \Delta x_2 \right| + \dots + \left| \frac{\partial f}{\partial x_n} \Delta x_n \right| = \sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_j} \Delta x_j \right| \quad (4.5)$$

Wenn das Vorzeichen der Fehler nicht bekannt ist (was meistens der Fall ist), dann müssen in der Summe die Beträge der einzelnen Fehler addiert werden.

Gl. (4.5) wird als „Größtfehleraddition“ bezeichnet, weil die einzelnen Fehlerbeiträge arithmetisch addiert werden. Damit wird für den Gesamtfehler der (ungünstige) Fall angenommen, daß alle Fehlerbeiträge dasselbe Vorzeichen haben. Bei Fehlern, die unabhängig voneinander

und statistischer Natur sind, kann jedoch davon ausgegangen werden, daß sich die einzelnen Fehlerbeiträge bis zu einem gewissen Grad kompensieren. In diesem Fall kann das Gaußsche Fehlerfortpflanzungsgesetz verwendet werden:

$$\sigma_f \approx \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^2 \sigma_{x_1}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^2 \sigma_{x_2}^2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^2 \sigma_{x_n}^2} = \sqrt{\sum_{j=1}^n \left(\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}\right)^2 \sigma_{x_j}^2\right)} \quad (4.6)$$

Bei der Fehlerfortpflanzung systematischer Fehler sind zwei Aspekte zu betrachten. Zum einen stellt sich die Frage, inwieweit bei systematischen Fehlern die Annahme gerechtfertigt ist, daß sie sich teilweise kompensieren, so daß die Gaußsche Fehlerfortpflanzung verwendet werden kann. Zum anderen muß unterschieden werden, ob die systematischen Fehler im Sinne eines Größtfehlers abgeschätzt wurden oder ob sie mit Zusatzmessungen und statistischen Methoden quantifiziert wurden. [Taylor, 1988] beschreibt dazu ein Beispiel, in dem eine Federkonstante aus einer an der Feder befestigten Masse m und der Schwingungsdauer T bestimmt werden soll. In der zugehörigen Fehlerrechnung soll der gesamte systematische Fehler aus den systematischen Fehlern von m und T bestimmt werden:

„Die Fehler von m und T sind sicher unabhängig, und es ist daher möglich, daß sie sich irgendwie gegenseitig aufheben. Deshalb erscheint es vernünftig, die quadratische Summe zu verwenden [...]. Ob wir die quadratische oder direkte Summe verwenden sollten, hängt in Wirklichkeit davon ab, was mit der Aussage, die Waage habe eine „systematische Unsicherheit von bis zu 1 Prozent“, gemeint ist. Wenn das bedeutet, daß die Meßabweichung *sicher* nicht größer als 1 Prozent ist (und entsprechendes für die Uhr), dann ist die direkte Addition angebracht [...]. Andererseits könnte es sein, daß eine Analyse aller Waagen im Labor gezeigt hat, daß sie einer Normalverteilung folgen und 70 Prozent von ihnen besser als auf 1 Prozent zuverlässig sind (und entsprechendes für die Uhren). In diesem Falle können wir die quadratische Addition [...] verwenden, mit der üblichen Bedeutung von 70 Prozent Vertrauen.“

Im allgemeinen ist es also sinnvoll, unabhängige systematische Fehler mit unbekanntem Vorzeichen ebenfalls quadratisch zu addieren, jedoch muß die Standardabweichung σ aus statistisch streuenden Messungen mit geschätzten Fehlern ins Verhältnis gesetzt werden.

Der „Vertrauensbereich“ läßt sich für einen geschätzten Wert schwer angeben, er sollte über 90 % liegen. Um mit Sicherheit jeden denkbaren Meßfehler in die Fehlerabschätzung einzuschließen, müßte man die Fehlerbalken unverhältnismäßig groß wählen, ebenso wie man den statistischen Fehler einer Einzelmessung nicht mit einem Vertrauensbereich von 100 % angeben kann. Wenn man den Vertrauensbereich eines Schätzwertes mit etwa 95 % angibt, dann korrespondiert dieser Wert mit dem 2σ -Bereich für statistische Fehler. Ein objektives Kriterium für den Vergleich von Schätzwerten mit statistischen Vertrauensbereichen gibt es nicht, man könnte ebenso den 90 %-Bereich oder den 98 %-Bereich wählen.

In dieser Arbeit werden systematische Fehler, für die es mit Hilfe von Zusatzmessungen oder Simulationen möglich ist, eine Standardabweichung anzugeben, mit dem 2σ -Wert der Streuung beziffert. Dieser 2σ -Wert wird bei der Berechnung des Gesamtfehlers genauso behandelt wie Fehler, die auf Schätzungen beruhen. Wenn die einzelnen Fehlerbeiträge unabhängig sind und davon auszugehen ist, daß die Wahrscheinlichkeit für einen positiven und einen negativen Fehler gleich groß sind, wird die Gaußsche Fehlerfortpflanzung angewandt. Der angegebene Gesamtfehler hat damit wieder einen Vertrauensbereich von 95 %.

Kapitel 5

Kalibrierungsfehler

In diesem Kapitel werden die verschiedenen Fehlerquellen untersucht und quantifiziert, die einen Einfluß auf die Instrumentresponsivität und den Offset haben. Da das Rauschen in den Spektren auch eine Auswirkung auf systematische Fehler hat, wird zunächst die rauschäquivalente spektrale Strahldichte (*NESR*, engl. noise equivalent spectral radiance) eingeführt. In Abschnitt 5.2 wird der direkte Einfluß des Rauschens auf die Kalibrierung quantifiziert. Im darauf folgenden Abschnitt wird das Driftverhalten des Instruments untersucht. Eine weitere Fehlerquelle der Kalibrierung, die in diesem Kapitel betrachtet wird, ist das Entfernen atmosphärischer Linien aus den gemessenen Weltraumspektren. Abschließend wird der interne Schwarzkörper charakterisiert.

Die Datenprozessierung birgt noch zwei weitere Fehlerquellen: die Phasenkorrektur und die Detektor-Nichtlinearität. Diese wirken sich jedoch auf atmosphärische Spektren ebenso aus wie auf Schwarzkörper- und Weltraumspektren und werden in den Kapiteln 6 und 7 behandelt.

5.1 Spektrale Rauschäquivalentleistung (*NESR*)

Die *NESR* ist ein Maß für das Rauschen in den Spektren. Das Rauschen selbst stellt zwar einen statistischen Fehler dar, jedoch erschwert es die exakte Prozessierung der Spektren und hat daher auch einen Einfluß auf die systematischen Fehler. Da die *NESR* in die Abschätzung mehrerer Fehlerquellen eingeht, wird in diesem Abschnitt auch ein Überblick über die *NESR* bei den verschiedenen Flügen gegeben.

Die *NESR* gibt an, welche Signalstärke in einem Wellenzahlintervall erforderlich ist, um ein S/N von 1 zu erhalten. Sie ist gegeben durch [Villemaire und Giroux, 1997]:

$$NESR = \frac{NEP}{A\Omega M \tau \delta\kappa \sqrt{t}} \quad (5.1)$$

mit	<i>NEP</i>	Rauschäquivalentleistung des Detektors (noise equivalent power)
	<i>AΩ</i>	Etendue
	<i>M</i>	Modulationseffizienz
	τ	Transmission des Instruments
	$\delta\kappa$	spektrale Auflösung
	<i>t</i>	Meßzeit

Die Größen, die in Gl. (5.1) eingehen, sind im folgenden kurz beschrieben. Dabei wird insbesondere auf die Wellenzahlabhängigkeit der *NESR* eingegangen.

- Die *NEP* beschreibt das Rauschverhalten des Detektors. Das Rauschen des Detektorsignals ist durch das Rauschen der Hintergrundphotonen limitiert (s. Abschnitt 3.1.3), daher ist die *NEP* proportional zur Wurzel der Gesamtzahl der auf den Detektor treffenden Photonen, unabhängig von ihrer Wellenzahl. Infolge der Planckverteilung der Hintergrundphotonen nimmt der mittlere Photonenstrom pro Kanal und damit die mittlere *NEP* zu den kurzwelligeren Kanälen hin ab. Innerhalb eines Kanals steigt die *NEP* linear mit der Wellenzahl, weil der Detektor ein Photonenzähler ist und die Leistung pro Photon mit der Wellenzahl zunimmt (vgl. auch Gl. (3.2)). Der maximale Anstieg der *NEP* innerhalb eines Kanals beträgt 26 %.
- Die *Etendue* des optischen Systems $A\Omega$ ist durch das Interferometer-Design vorgegeben und unabhängig von der Wellenzahl.
- Die *Modulationseffizienz* M ist wellenzahlabhängig, sobald das Interferometer nicht mehr perfekt justiert ist. Dann nimmt sie mit steigender Wellenzahl ab. Messungen vor Flug 10 haben jedoch gezeigt, daß die Modulationseffizienz keine signifikante spektrale Abhängigkeit aufweist, sondern in allen Kanälen ca. 80 % beträgt.
- Die *Transmission* τ hingegen variiert stark mit der Wellenzahl, was hauptsächlich auf die Transmissionseigenschaften der dichroitischen Strahlteiler und der Bandpaßfilter zurückzuführen ist. Die Transmission kann sich innerhalb eines Kanals um einen Faktor 2 und mehr ändern, diese Effekte sind somit deutlich stärker als die Wellenzahlabhängigkeit der *NEP*.
- Die *spektrale Auflösung* $\delta\kappa$ ist über die Interferogrammlänge und die Apodisation definiert. Das Apparateprofil, das sich aus diesen Größen ergibt und das letztlich die Auflösung bestimmt, wird mit zunehmender Wellenzahl breiter, das heißt, die Auflösung verschlechtert sich. Dieser Effekt beträgt weniger als 12 % über den gesamten Spektralbereich, für $\kappa = 2100 \text{ cm}^{-1}$ ist die spektrale Auflösung also maximal 12 % schlechter als für $\kappa = 700 \text{ cm}^{-1}$ [Lengel, 2002].
- Die *Meßzeit* für ein Interferogramm t ist durch die Pendelgeschwindigkeit gegeben und für alle Wellenzahlen gleich.

Abb. 5.1 zeigt die *NESR* (1σ) für Schwarzkörperspektren in allen Flügen, berechnet aus der Varianz aufeinanderfolgender kalibrierter Schwarzkörperspektren. In den Varianzspektren aufeinanderfolgender atmosphärischer Messungen spiegeln sich sowohl das Rauschen als auch Schwankungen in der Sichtlinie wider, während die Varianz der Schwarzkörperspektren nur durch das Rauschen bestimmt wird. Da der Photonenstrom auf den Detektor (und damit die *NEP*) im allgemeinen bei den Schwarzkörpermessungen größer ist als bei den Atmosphären- und Welt-raummessungen, kann die *NESR* der Schwarzkörperspektren als Obergrenze für die *NESR* der Flugspektren angesetzt werden. Zur besseren Vergleichbarkeit ist die *NESR* gemäß Gl. (5.1) jeweils auf eine Interferogrammdauer von 10 s und eine Interferogrammlänge von 14,5 cm normiert. Im spektralen Verlauf der *NESR* spiegelt sich vor allem die Filterform wider. Der Einfluß der Transmission überdeckt den Einfluß von *NEP*, Modulationseffizienz und spektraler Auflösung weitgehend. Weitere Faktoren, die sich in der *NESR* zeigen, sind Interferometerjustierung und elektrische Störungen in der Signalstrecke, die über dem Niveau des Photonenrauschens liegen. In Kanal 1 fällt die schlechte *NESR* von Flug 6 auf. In diesem Flug wurde ein breiteres Filter eingesetzt (vgl. Tabelle 3.2), das aufgrund eines Fabrikationsfehlers ein erheblich schlechteres

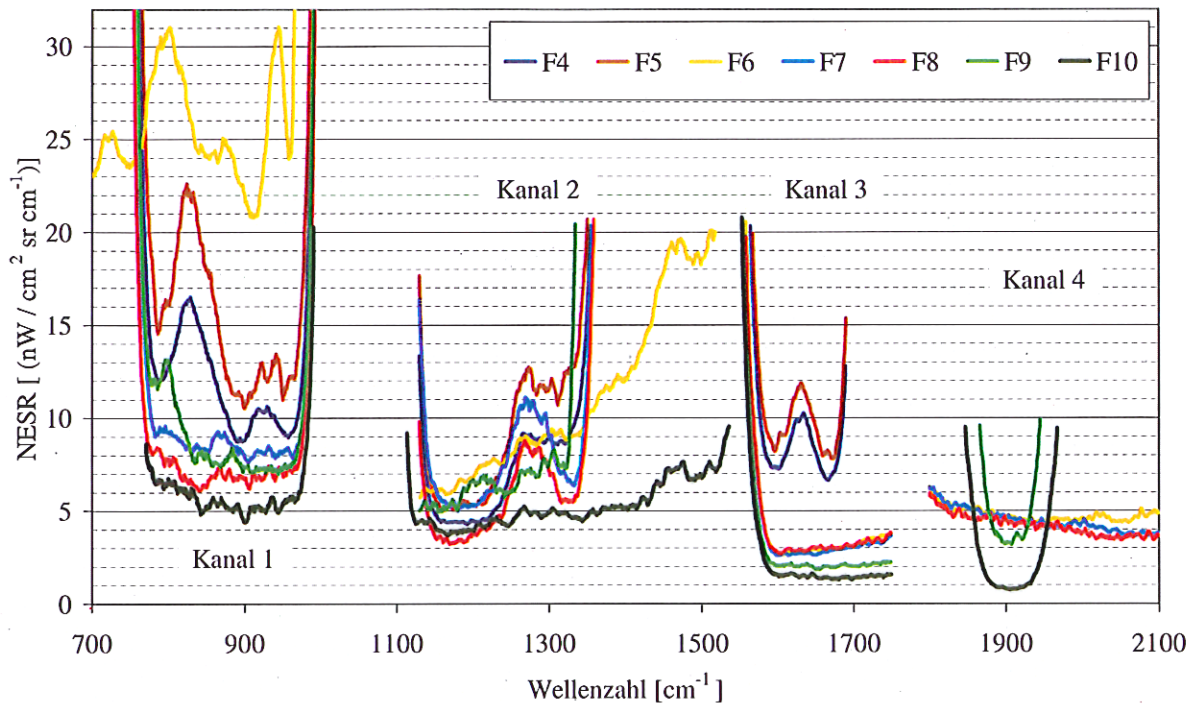


Abbildung 5.1: NESR für hochaufgelöste, apodisierte Einzelspektren aus Schwarzkörpermessungen (1σ), normiert auf eine Interferogrammdauer von 10 s.

Transmissionsverhalten zeigt als das Filter, das bei den übrigen Flügen eingesetzt wurde. Außerdem war durch das breitere Filter der Photonenstrom auf den Detektor und damit die *NEP* größer. Bei Flug 9 fällt im Vergleich zu Flug 7 und 8 auf, daß im Bereich von 750 bis 820 cm^{-1} trotz desselben optischen Aufbaus die *NESR* deutlich schlechter ist. Hierfür war eine elektrische Störung verantwortlich, die von der Regelung zur Stabilisierung der Sichtlinie verursacht wurde. Diese ist auch für die im Vergleich zu Flug 10 erheblich schlechtere *NESR* in Kanal 4 verantwortlich. Im Kanal 3 wurde die große *NESR* bei Flug 4 und 5 vermutlich durch ein schlechtes Bonding am Detektor verursacht. Mit dem neuen Detektorsystem, das seit Flug 6 eingesetzt wird, sind die *NESR*-Werte erheblich besser.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Fehlerbetrachtung für zwei Fälle durchgeführt. Einmal werden typische bzw. mittlere Werte, wie sie sich aus der Analyse von sieben Flügen ergeben, angegeben, parallel dazu wird eine konkrete Fehlerabschätzung für Flug 10 durchgeführt, da dieser Flug den aktuellen Zustand des Instruments wiedergibt. Am Beispiel von Flug 10 wird damit auch gezeigt, wie für zukünftige Flüge eine Fehlerrechnung durchgeführt werden kann.

Die *NESR* geht in die Abschätzung vieler systematischer Fehler ein, außerdem bietet sich ein Vergleich des systematischen Fehlers mit der Rauschamplitude an. Anhand von Abb. 5.1 werden folgende Werte für die *NESR* (1σ) in den verschiedenen Kanälen zugrunde gelegt:

	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	
typische Werte	8	6 - 9	3	4	nW / (cm ² sr cm ⁻¹)
Flug 10	6	5	1,5	1	nW / (cm ² sr cm ⁻¹)

Tabelle 5.1: Mittlere NESR-Werte für die vier spektralen Kanäle von MIPAS-B2 (1 σ).

5.2 Rauschen in den Schwarzkörper- und Weltraumspektren

5.2.1 Fehler in der Instrumentresponsivität

Das Rauschen in den Schwarzkörper- und Weltraumspektren trägt unter zwei Aspekten zum systematischen Fehler bei:

- Die Instrumentresponsivität wird niederaufgelöst berechnet (das heißt, das Spektrum hat einen größeren Stützstellenabstand), und anschließend wird auf den Stützstellenabstand des Atmosphärenspektrums fourier-interpoliert. Damit ist die Abhängigkeit der Stützstellen stärker als bei den Atmosphärenspektren.
- Für alle atmosphärischen Spektren einer Horizontsondierungssequenz werden dieselben zwei Messungen der Instrumentresponsivität herangezogen. Ein Fehler wirkt sich somit auf alle Atmosphärenspektren gleichartig aus.

Der Fehler durch das Rauschen sollte so gering gehalten werden, daß er keinen signifikanten Beitrag zum Gesamtfehler leistet. Das Rauschen kann zum einen durch Koaddition mehrerer Spektren reduziert werden, zum anderen durch eine Verringerung der spektralen Auflösung. Die spektrale Auflösung kann gegenüber den atmosphärischen Spektren soweit verringert werden, daß die instrumentspezifischen spektralen Strukturen gerade noch aufgelöst werden. Hierzu zählen insbesondere die Filterkanten des optischen Filters und das Channeling (vgl. Abschnitt 3.1.3). Um das Channeling vollständig auflösen zu können, darf die spektrale Auflösung nicht schlechter als 0,5 cm⁻¹ sein. Mit dieser Auflösung werden auch die Filterkanten unverfälscht wiedergegeben.

Für die erforderliche Zahl der Koadditionen gibt es kein eindeutiges Kriterium. Hier muß ein Kompromiß zwischen der Rauschreduktion in den Spektren und der erforderlichen Meßzeit gefunden werden. Messungen von 32 Schwarzkörper- und 16 Weltraumspektren pro Kalibrierungssequenz liefern in einer angemessenen Zeit ein hinreichend gutes S/N. Die höhere Zahl an Schwarzkörpermessungen ist insofern sinnvoll, als diese mit reduzierter spektraler Auflösung gemessen werden können und daher weniger Zeit benötigen.¹ Außerdem ist ein gutes S/N in den Schwarzkörperspektren für die Genauigkeit der instrumentellen Phase (Abschnitt 6.2) von Bedeutung.

Der Fehler in der Instrumentresponsivität $G = \frac{S_{BB} - S_{DS}}{L_{BB}}$ (Gl. (3.5)), der sich aufgrund des Rauschens in den Schwarzkörper- und Weltraumspektren ergibt, berechnet sich mit Hilfe des Gaußschen Fehlerfortpflanzungsgesetzes:

$$\left| \frac{\partial G}{\partial S_{DS}} \right| = \left| \frac{\partial G}{\partial S_{BB}} \right| = \frac{1}{L_{BB}} = \frac{G}{S_{BB} - S_{DS}} \quad (5.2)$$

¹In die Kalibrierung gehen die Weltraumspektren zwar auch nur mit reduzierter spektraler Auflösung ein, sie müssen aber mit hoher Auflösung gemessen werden, um die atmosphärischen Restbeiträge entfernen zu können (vgl. Abschnitt 5.4).

$$\Delta G = \frac{\sqrt{(\Delta S_{BB})^2 + (\Delta S_{DS})^2}}{\mathcal{L}_{BB}} \quad (5.3)$$

ΔS ist hier die Unsicherheit im niederaufgelösten, koaddierten Spektrum infolge des Rauschens. Diese kann aus der *NESR* für hochaufgelöste Einzelspektren von Schwarzkörpermessungen mit folgenden Überlegungen abgeleitet werden:

- Das Rauschen im gemessenen Spektrum ist über die Instrumentresponsivität mit der *NESR* verknüpft:

$$(\Delta S)_{\text{hochaufgel. Einzelsp.}} = G \cdot \text{NESR}$$

- Die Anzahl n der Spektren ist direkt proportional zur Meßzeit t . Durch die Koaddition von n Spektren verringert sich daher die *NESR* um den Faktor $\sqrt{1/n}$.
- Die spektrale Auflösung δ geht linear in die *NESR* ein. Da aber über die Interferogrammlänge die spektrale Auflösung direkt proportional zur Meßzeit ist, führt eine Reduktion der spektralen Auflösung um den Faktor c lediglich zu einer Erniedrigung der *NESR* um den Faktor $\sqrt{1/c}$.
- Die *NESR* ist proportional zur Wurzel des Photonenstroms. Dieser ist bei Weltraumspektren geringer als bei Schwarzkörperspektren, daher ist auch die *NESR* kleiner. Die *NESR* der Schwarzkörperspektren kann daher als Maximalabschätzung für die *NESR* der Weltraumspektren verwendet werden.

Für die Koaddition von 32 bzw. 16 Spektren und die Reduzierung der spektralen Auflösung von $0,0345 \text{ cm}^{-1}$ auf $0,5 \text{ cm}^{-1}$ ist der Zusammenhang zwischen ΔS und *NESR* wie folgt gegeben:

$$\Delta S_{BB} = G \cdot \text{NESR} \cdot \sqrt{\frac{1}{32}} \cdot \sqrt{\frac{0,0345 \text{ cm}^{-1}}{0,5 \text{ cm}^{-1}}} \quad (5.4)$$

$$\Delta S_{DS} \leq G \cdot \text{NESR} \cdot \sqrt{\frac{1}{16}} \cdot \sqrt{\frac{0,0345 \text{ cm}^{-1}}{0,5 \text{ cm}^{-1}}} = \sqrt{2} \Delta S_{BB} \quad (5.5)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (5.4) und (5.5) in Gl. (5.3) und Division durch G erhält man den relativen Fehler in der Instrumentresponsivität:

$$\frac{\Delta G}{G} \leq \sqrt{3} \frac{\text{NESR}}{\mathcal{L}_{BB}} \cdot \sqrt{\frac{0,0345}{32 \cdot 0,5}} \quad (5.6)$$

Da nach den Überlegungen aus Kap. 4 für die Quantifizierung von Fehlern, die mit statistischen Mitteln bestimmt werden können, der 2σ -Wert angegeben werden soll, muß in Gl. (5.6) für die *NESR* ebenfalls der 2σ -Wert eingesetzt werden.

Tabelle 5.2 gibt die Werte für $\frac{\Delta G}{G}$ jeweils am Anfang und Ende der Spektralbereiche der vier Kanäle an.

5.2.2 Fehler im Offset

Der Offset ist nach Gl. (3.6) gegeben als:

$$\mathcal{L}_{\text{Offset}} = \frac{S_{DS}}{S_{BB} - S_{DS}} \mathcal{L}_{BB} = \frac{S_{DS}}{G}$$

Der Fehler im Offset infolge des Rauschens der Schwarzkörper- und der Weltraumspektren berechnet sich zu:

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{L}_{\text{Offset}} &= \frac{1}{G} \sqrt{\frac{(S_{BB} \cdot \Delta S_{DS})^2 + (S_{DS} \cdot \Delta S_{BB})^2}{(S_{BB} - S_{DS})^2}} \\ &\leq \frac{1}{G} \frac{\sqrt{2 S_{BB}^2 + S_{DS}^2} \cdot \Delta S_{BB}}{S_{BB} - S_{DS}} = \frac{\sqrt{2 S_{BB}^2 + S_{DS}^2}}{S_{BB} - S_{DS}} \cdot NESR \cdot \sqrt{\frac{0,0345}{32 \cdot 0,5}}\end{aligned}\quad (5.7)$$

Hier ist wieder die Abschätzung $\Delta S_{DS} \leq \sqrt{2} \Delta S_{BB}$ eingegangen. Für eine Abschätzung der Größenordnung des Fehlers werden weitere Abschätzungen gemacht, die es ermöglichen, den Offsetfehler nur in Abhängigkeit der $NESR$ anzugeben. Bei den bisherigen Flügen waren die Weltraummessungen bislang immer kleiner als $0,12 S_{BB}$, jedoch wurden bei starker Reflexion des Fensters vom Kryostaten in den Kanälen 3 und 4 die Weltraumspektren teilweise stark negativ, so daß ihr Betrag beinahe den Betrag des Schwarzkörperspektrums erreichen konnte. Daher werden folgende Abschätzungen gemacht:

$$|S_{DS}| \leq |S_{BB}| \quad \text{und} \quad (S_{BB} - S_{DS}) \geq 0,88 S_{BB} \quad (5.8)$$

Damit erhält man für den Offsetfehler:

$$\Delta\mathcal{L}_{\text{Offset}} \leq 2 NESR \cdot \sqrt{\frac{0,0345}{32 \cdot 0,5}} \quad (5.9)$$

Die $NESR$ -Werte für hochaufgelöste Einzelspektren sowie die daraus resultierenden rauschbedingten Instrumentresponsivitäts- und Offsetfehler sind in Tabelle 5.2 aufgelistet. Im oberen Teil der Tabelle werden typische $NESR$ -Werte, wie sie sich aus den letzten Flügen ergeben haben, zugrunde gelegt, im unteren Teil wird die Rechnung für die Werte von Flug 10 durchgeführt.

	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	Einheit
Spektralbereich	770 - 970	1130 - 1290	1585 - 1645	1890 - 1940	cm^{-1}
\mathcal{L}_{BB} ($T = 217 \text{ K}$)	3310 - 1750	950 - 490	129 - 97	29 - 22,5	r.u.
typ. Werte: $NESR$ (2σ)	16	12 - 18	6	8	r.u.
$\Delta G/G$	0,04 - 0,08	0,11 - 0,30	0,38 - 0,50	2,3 - 3,9	%
$\Delta\mathcal{L}_{\text{Offset}}$	1,3	0,97 - 1,5	0,49	0,65	r.u.
Flug 10: $NESR$ (2σ)	12	10	3	2	r.u.
$\Delta G/G$	0,03 - 0,06	0,09 - 0,17	0,19 - 0,25	0,56 - 0,72	%
$\Delta\mathcal{L}_{\text{Offset}}$	0,97	0,81	0,25	0,17	r.u.

Tabelle 5.2: $NESR$ und daraus abgeleiteter Fehler der Instrumentresponsivität und des Offsets für typische Werte der $NESR$ und für Flug 10. „r.u.“ steht für die Strahldichte-einheiten [$\text{nW} / (\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$].

Der (relative) Skalierungsfehler infolge des Rauschens ist in Kanal 1 vernachlässigbar klein, kann aber in Kanal 4 aufgrund des erheblich geringeren Signals (ca. 1/100 des Signals in Kanal 1) einige Prozent ausmachen. Für Flug 10 liegt der Skalierungsfehler infolge des Rauschens in allen Kanälen unter 1%.

Der Offsetfehler wird mit zunehmender Wellenzahl kleiner, allerdings nimmt er deutlich langsamer ab als die Strahldichte des Schwarzkörpers. Wie stark der rauschbedingte Fehler zum Gesamtfehler beiträgt, wird in Kap. 8 diskutiert.

5.3 Drift von Instrumentresponsivität und Offset

Schwarzkörper- und Weltraumspektren werden in der Regel am Anfang und Ende einer Horizontsondierungssequenz gemessen, dazwischen wird linear interpoliert.

Das thermische Verhalten des Instruments hat einen wesentlichen Einfluß auf die Qualität der Kalibrierung. In Abb. 5.2 ist für die Flüge 4 bis 10 der Temperaturverlauf im Kaltraum während des Fluges gezeigt. Für jeden Flug sind zwei Temperaturkurven eingezeichnet. Der Sensor, mit dem die jeweils höhere Temperatur gemessen wurde, befindet sich oben im Kaltraum (über der Teleskopebene, vgl. Abb. 3.2), der zweite Sensor liegt unten in der Interferometerebene. Auf der unteren Temperaturkurve sind die Zeitpunkte der Kalibrierungsmessungen, das Erreichen der Gipfelhöhe und Sonnenauf- bzw. -untergang am Ballon eingezeichnet.

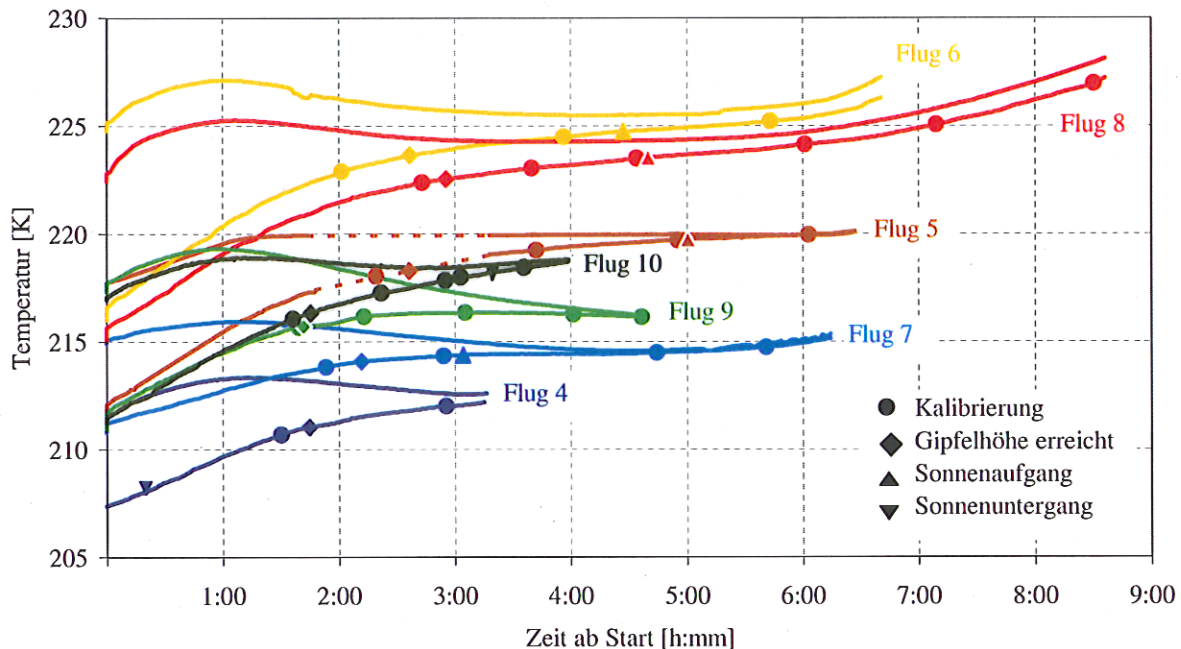


Abbildung 5.2: Temperaturverlauf der Optik bei den verschiedenen Flügen. Gezeigt ist die Temperatur im Kaltraum in der oberen und in der unteren Ebene. Die Zeitpunkte von Kalibrierungsmessungen, Erreichen der Gipfelhöhe, Sonnenauf- und Sonnenuntergang sind jeweils auf der Temperaturkurve für die untere Ebene eingezeichnet. Während des gestrichelt gezeichneten Bereichs bei Flug 5 standen aufgrund eines Teilausfalls der Elektronik keine Temperaturdaten zur Verfügung.

Der qualitative Temperaturverlauf ist bei allen Flügen ähnlich. Am Boden wird das Instrument mit Trockeneis gekühlt. Durch die Kühlung bildet sich im Kaltraum eine stabile Temperaturschichtung aus mit einer Temperaturdifferenz zwischen oben und unten von ca. 6 K. 10 bis 20 Minuten vor dem Start wird das Trockeneis entfernt, und das Instrument erwärmt sich. Während des Aufstiegs wird mit der Abnahme der Luftdichte der konvektive Wärmeaustausch geringer. Auf der Gipfelhöhe wird die Temperatur durch Strahlung bestimmt. Da die Oberseite des Instruments im Strahlungsaustausch mit dem Weltraum steht und die Unterseite mit der

Erde, kühlt sich der obere Teil des Instruments wieder ab, während sich der untere weiter erwärmt, so daß der Temperaturgradient im Instrument weiter abnimmt. Nach Sonnenaufgang wird eine gleichmäßige, langsame Erwärmung des Instruments beobachtet (insbesondere bei den Flügen 6, 7 und 8). Im Mittel ist die Instrumenttemperatur bei Flügen in mittleren Breiten höher als in polaren Breiten. Auch der Temperaturgradient im Instrument ist in mittleren Breiten im allgemeinen in der Anfangsphase größer.

Die Gipfelhöhe wird – abhängig von der Größe des Ballons – nach ca. 1 3/4 bis 3 Stunden erreicht. Zu diesem Zeitpunkt kühlt sich der obere Teil des Instruments bereits wieder ab, so daß während der ersten Horizontsondierungssequenz der Temperaturverlauf oben und unten im Instrument gegenläufig ist.

Die Abbildungen 5.3 und 5.4 zeigen den mittleren Verlauf von Instrumentresponsivität und Offset für die Flüge 4 bis 10 jeweils ab Erreichen der Gipfelhöhe. Aufgetragen ist jeweils die mittlere Änderung in einem Kanal, gemittelt über alle spektralen Stützstellen innerhalb des optischen Bandpaßfilters.

Aus Abb. 5.3 wird deutlich, daß die Variation der Instrumentresponsivität von Flug zu Flug sehr unterschiedlich ist. Im allgemeinen ist die Drift bei den arktischen Flügen (Flüge 4, 7, 9 und 10) deutlich kleiner als in mittleren Breiten (Flüge 5, 6 und 8). Die Instrumentresponsivität ändert sich hier von einer Messung zur nächsten im Mittel um kaum mehr als 2 %, bei den Flügen in mittleren Breiten hingegen treten im Extremfall Änderungen von 20 % auf (Flug 5). Eine Besonderheit bezüglich des Driftverhaltens stellt Flug 8 dar. Bei diesem Flug reagierte das Interferometer aufgrund eines Montagefehlers sehr empfindlich auf Temperaturänderungen, so daß während des Fluges häufig justiert werden mußte. Die Justierzeitpunkte sind in den Abbildungen durch gepunktete senkrechte Linien angedeutet. Zur besseren Vergleichbarkeit ist der Offset bei diesem Flug nicht zu den Meßzeitpunkten eingezeichnet, sondern interpoliert auf Zeitpunkt und Justierungszustand der Schwarzkörpermessungen. Bei Flug 10 wurde ebenfalls einmal justiert, bei den übrigen Flügen war die Justierung nach dem Aufstieg abgeschlossen. Änderungen in der Instrumentresponsivität werden hauptsächlich durch eine Dejustierung des Interferometers und durch eine Änderung der Detektortemperatur hervorgerufen:

- Eine Dejustierung des Interferometers führt zu einer schlechteren Modulationseffizienz und damit zu einer geringeren Gesamtresponsivität des Systems. Je kürzer die Wellenlänge des Lichts ist, desto empfindlicher reagiert die Modulationseffizienz auf eine Dejustierung. Daher sind im Fall einer Dejustierung die höheren Kanäle stärker betroffen (s. auch Abschnitt 3.1.2). Dieser Effekt ist bei der Instrumentresponsivität im Flug 8 aufgrund der relativ starken Dejustierung am deutlichsten zu sehen.
- Die Responsivität der Detektoren steigt mit ihrer Temperatur. Die Detektortemperatur ist während der Horizontsondierungsmessungen im allgemeinen bis auf ca. 40 mK stabil (siehe Abb. 5.5(a)). Eine Ausnahme stellt Flug 6 dar; hier driftet die Temperatur erheblich stärker. Die Temperaturschwankungen werden auf Druckschwankungen im Heliumtank und auf Temperaturänderungen im Kaltraum zurückgeführt. Messungen des Detektorsystems haben gezeigt, daß im Kanal 1 die Empfindlichkeit auf Temperaturänderungen am größten ist (siehe Abb. 5.5(b)). Es ist praktisch nicht möglich, einen quantitativen Zusammenhang zwischen Responsivität und Temperatur herzustellen, da für vier Detektoren nur ein Temperatursensor zur Verfügung steht und die tatsächliche Temperatur am Detektor von der thermischen Ankopplung an die Kaltfläche abhängt. Die gemessene Temperatur kann daher lediglich zur qualitativen Bestimmung der Temperaturänderungen dienen.

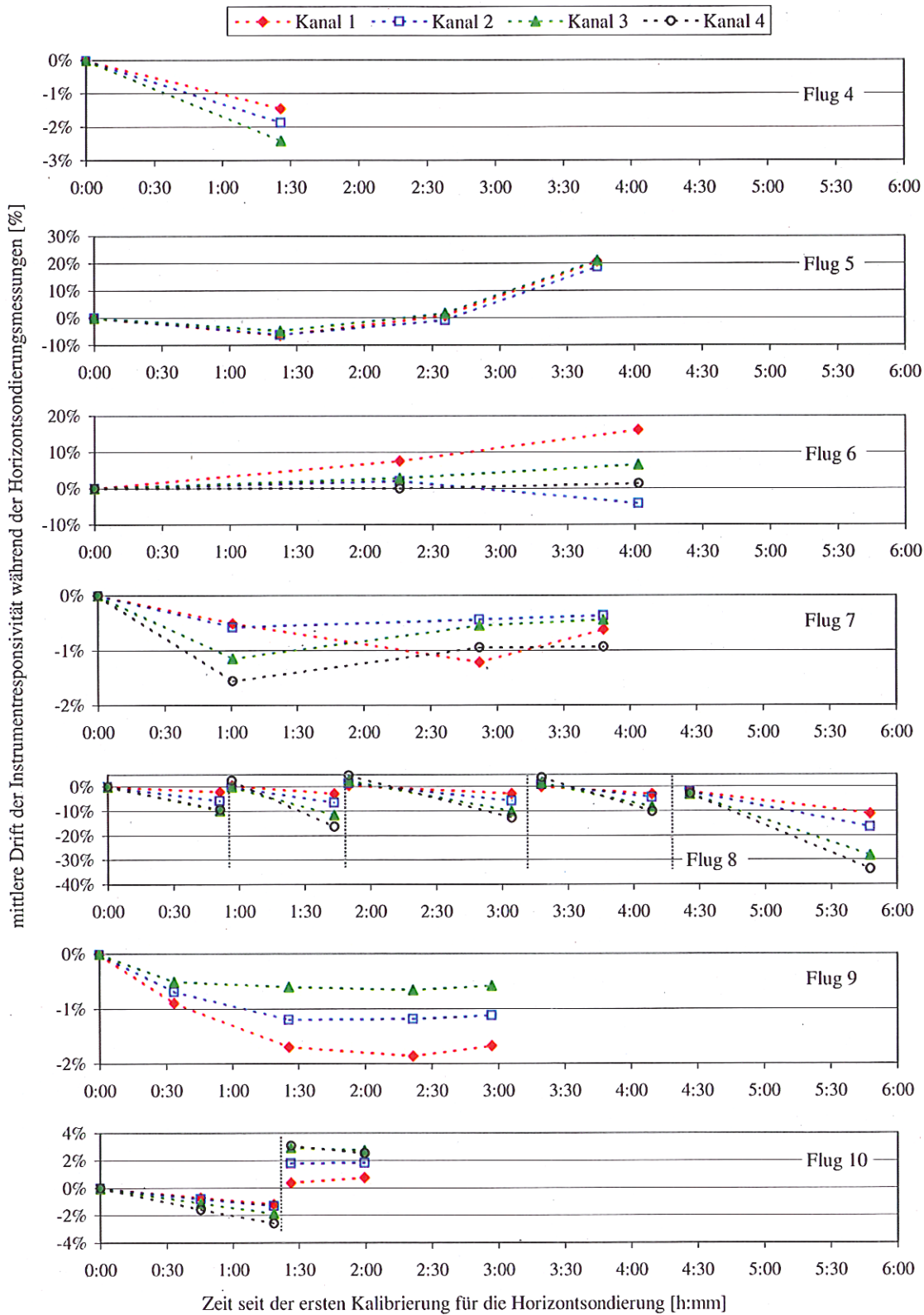


Abbildung 5.3: Drift der Instrumentresponsivität bei den Flügen 4 bis 10. Die y-Achse ist von Flug zu Flug unterschiedlich. Die gepunkteten Linien markieren Bereiche, in denen das Interferometer justiert wurde.

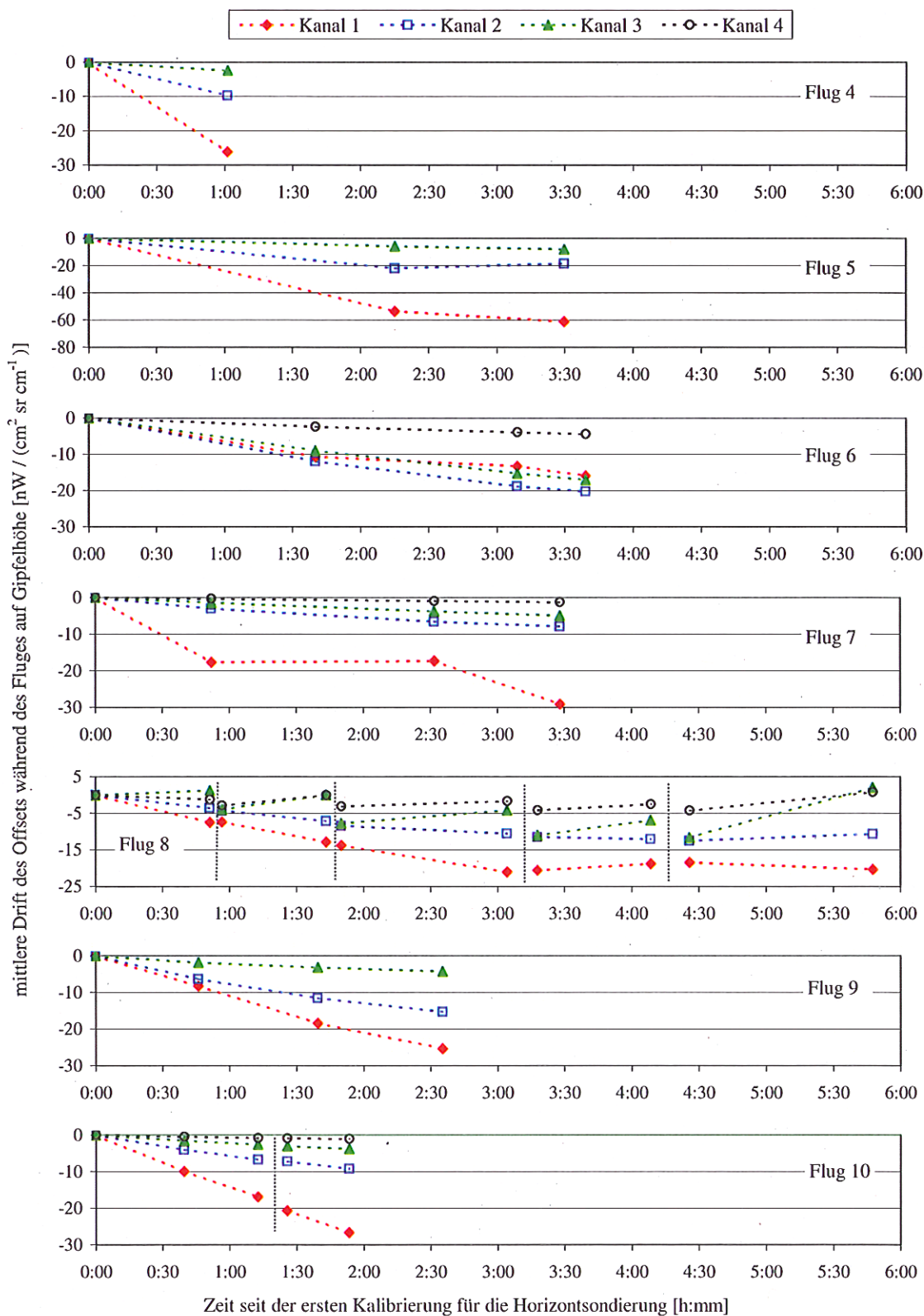


Abbildung 5.4: Drift des Offsets bei den Flügen 4 bis 10. Die y-Achse von Flug 5 umfasst im Vergleich zu den übrigen Flügen einen größeren Bereich. Justierungszeitpunkte sind durch gepunktete Linien markiert.

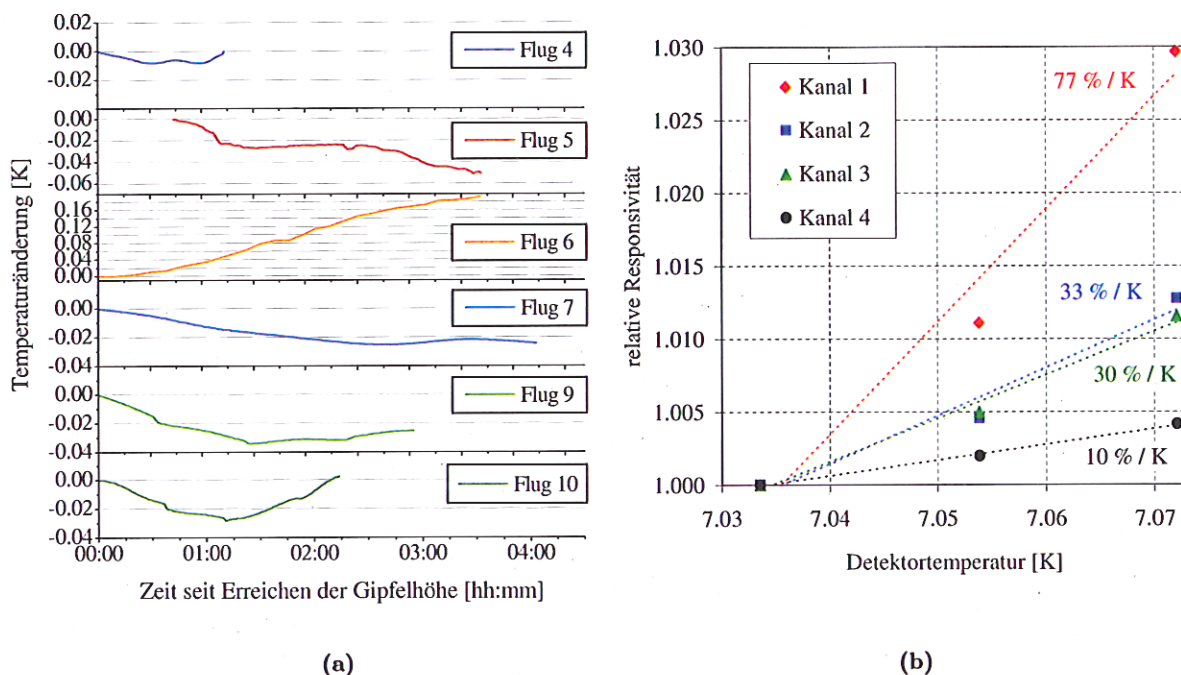


Abbildung 5.5: (a): Änderung der Detektortemperatur, während sich der Ballon auf Gipfelhöhe befindet. Für Flug 8 stehen keine Temperaturmeßdaten zur Verfügung. (b): Beispiel für die Änderung der Responsivität in Abhängigkeit von der Detektortemperatur aus einer Labormessung. Die Steigungen der jeweils durch die drei Meßpunkte gelegten Geraden veranschaulichen die Größenordnung, in der eine Responsivitätsänderung möglich ist. Für eine quantitative Analyse ist die Messung jedoch zu ungenau und zu schlecht reproduzierbar.

Mit diesen beiden Effekten läßt sich qualitativ erklären, warum die Instrumentresponsivität während des Fluges variiert und weshalb in einem Fall die langwelligen und in einem anderen die kurzwelligen Kanäle stärker betroffen sind. Der sehr starke Anstieg der Instrumentresponsivität bei Flug 5 um 20% innerhalb einer Stunde ist damit jedoch nicht zu erklären, zumal die Detektortemperatur in diesem Zeitraum sinkt. Eine mögliche Ursache hierfür könnte eine dünne Eisschicht auf den Spiegeln sein. Da während der Startvorbereitungen eine sehr hohe Luftfeuchtigkeit herrschte, die zwischenzeitlich sogar zu einem sichtbaren Beschlag der Spiegel geführt hat, ist es denkbar, daß beim Start noch eine dünne, unsichtbare Eisschicht auf einigen Spiegeln lag (eine Sichtkontrolle kurz vor dem Start ließ keinen Beschlag mehr erkennen). Diese Eisschicht hätte dann die Transmission durch das Instrument verringert. Wegen des geringen Dampfdrucks auf der Gipfelhöhe konnte das Eis im Laufe der Zeit sublimieren, so daß sich die Transmission verbesserte. Auch bei den Flügen 6 und 8 ist wegen der hohen Luftfeuchtigkeit am Boden ein Einfluß durch leichtes Vereisen der Spiegel denkbar.

Da die Effekte, die für die Drift der Instrumentresponsivität maßgebend sind, bei den einzelnen Flügen verschieden stark ausgeprägt sind, ist auch der Fehler durch die lineare Interpolation unterschiedlich groß. Wenn man als maximalen Interpolationsfehler die Hälfte der Differenz zweier aufeinanderfolgender Messungen abschätzt, dann beträgt dieser Fehler bei den arktischen

Flügen in der Regel weniger als 1 %, bei den Flügen in mittleren Breiten jedoch erreicht dieser Fehler 5 % und mehr und wird damit zum führenden Anteil am Gesamtfehler.

Das Driftverhalten ist im Detail nicht vorhersehbar, daher ist unabdingbar, in relativ kurzen Zeitabständen von 30 bis 60 Minuten Kalibrierungsmessungen durchzuführen, um den Interpolationsfehler klein zu halten. Dies gilt insbesondere für Flüge in mittleren Breiten.

Die Drift des Offsets (Abb. 5.4) ist im Verlauf der verschiedenen Flüge recht gleichmäßig. Für alle Flüge außer Flug 8 gilt, daß der Offset im Laufe des Fluges kleiner (bzw. stärker negativ) wird. Dies ist mit der thermischen Drift zu erklären. Bei der Eigenemission des Instruments sind zwei Strahlungsbeiträge zu unterscheiden: Beiträge, deren Quelle vor dem Interferometer liegt, und Beiträge, deren Quelle zwischen Interferometer und Detektor liegt. Wie in Abschnitt 6.1 erläutert wird, sind diese beiden Beiträge im Interferogramm um π zueinander phasenverschoben, das heißt, im Spektrum sind die Beiträge mit Quelle vor dem Interferometer positiv, solche mit Quelle zwischen Interferometer und Detektor negativ. Das resultierende Spektrum ist die Summe aus diesen Beiträgen und kann daher, wenn der zweite Beitrag überwiegt, auch negativ werden. Quellen für das Offsetspektrum sind hauptsächlich die Eigenemission der optischen Komponenten (bzw. Emission von Staub oder Eis auf den Spiegeln) und Reflexionen am Fenster des Detektorkryostaten. Da die Detektoroptik selbst auf weniger als 10 K gekühlt ist, leistet sie keinen nennenswerten Emissionsbeitrag. Wie aus Abb. 3.2 (S. 12) ersichtlich ist, stammt der positive Anteil der Strahlung hauptsächlich vom Einkoppelspiegel und aus der oberen Teleskop-Ebene des Instruments, während der negative Anteil aus der unteren Interferometer-Ebene stammt. Da sich im Laufe des Fluges im allgemeinen die untere Ebene stärker erwärmt als die obere bzw. sich die obere teilweise abkühlt (vgl. Abb. 5.2), nimmt der negative Beitrag stärker zu als der positive, das heißt, das Offsetspektrum wird in der Summe kleiner. Der Effekt ist im Kanal 1 am größten, weil sich aufgrund des spektralen Verlaufs der Planckfunktion hier bei gleicher Temperaturänderung die spektrale Strahldichte am stärksten ändert. Entsprechend ist der Effekt im Kanal 4 am schwächsten.

Eine Abweichung von dem hier beschriebenen Verlauf zeigen Flug 6 und Flug 8: Im Flug 6 ist die Drift des Offsets nicht im Kanal 1 am stärksten, sondern im Kanal 2. Es ist denkbar, daß hier der relativ starke Anstieg der Detektortemperatur während des Fluges eine Rolle spielt. Im Kanal 1, dessen Responsivität besonders empfindlich auf Temperaturänderungen reagiert, kann der Anstieg der Detektorresponsivität (der ja auch in der Instrumentresponsivität beobachtet wird) die negative Drift infolge der Temperaturänderungen des Instruments kompensieren.

Bei Flug 8 macht sich die relativ starke Dejustierung auch im Offset bemerkbar. In den Kanälen 3 und 4 sind bei diesem Flug die Weltraumspektren durchweg negativ (das heißt, die Strahlungsquellen zwischen Interferometer und Detektor überwiegen). Wird nun die Modulationseffizienz schlechter, dann wird der Betrag der Spektren kleiner, die Spektren selbst werden also weniger stark negativ.

Legt man für die Abschätzung des systematischen Offsetfehlers durch die lineare Interpolation dieselben Kriterien zugrunde wie bei der Instrumentresponsivität, so ergeben sich die in Tabelle 5.3 aufgeführten Fehlerwerte. Als „typischer Wert“ wurde hier jeweils das arithmetische Mittel über alle Kalibrierungssequenzen angesetzt. Allerdings variiert das Driftverhalten von Flug zu Flug sehr stark, so daß dieser Fehler für jeden Flug neu quantifiziert werden muß. Die Fehler von Flug 10 sind zum Teil erheblich geringer als die über alle Flüge gemittelten Fehler, weil die Instrumentresponsivität allgemein bei Flügen in der Arktis weniger driftet als in mittleren Breiten und weil seit Flug 9 besonders Wert darauf gelegt wird, in kurzen Zeitabständen Kalibrierungsmessungen durchzuführen, um den Fehler durch die Drift des Instruments gering

zu halten.

	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	Einheit
typ. Werte: $\Delta G/G$	1,9	2,0	2,7	3,8	%
$\Delta \mathcal{L}_{Offset}$	5,2	2,5	1,7	0,68	r.u.
Flug 10: $\Delta G/G$	0,26	0,23	0,34	0,53	%
$\Delta \mathcal{L}_{Offset}$	3,8	1,5	0,54	0,17	r.u.

Tabelle 5.3: Fehler in der Instrumentresponsivität und im Offset durch die Instrumentdrift für typische Werte und am Beispiel von Flug 10.

5.4 Bestimmen der Basislinie aus Weltraumspektren

Zur Bestimmung der Eigenemission des Instruments werden Spektren mit einem Elevationswinkel von $+20^\circ$ gegen den kalten Weltraum gemessen. Die Eigenemission des Weltraums ist vernachlässigbar, allerdings befinden sich im Sehstrahl noch Moleküle, deren isolierte Emissionslinien dem Geräteuntergrund überlagert sind. Diese Linien müssen aus den Weltraumspektren entfernt werden, bevor diese zur Bestimmung des Geräteuntergrundes verwendet werden können. Es wird davon ausgegangen, daß oberhalb des Ballons keine Signaturen mehr von breitbandig emittierenden Gasen (bzw. von Gasen, deren Linienstruktur von MIPAS-B2 nicht mehr aufgelöst werden kann und die daher breitbandig erscheinen) gemessen werden. In diesem Fall kann man das atmosphärische Signal gut vom Geräteuntergrund, der eine spektral niederaufgelöste Struktur aufweist, unterscheiden.

Die Linien werden aus dem Weltraumspektrum mit einem sogenannten Rasuralgorithmus entfernt [Trieschmann, 2000], der zunächst die Linien identifiziert: Dazu wird das Spektrum hochpaßgefiltert und mit einer Gaußfunktion gekreuzkorreliert.² Dadurch werden die Linien im Spektrum verstärkt. Das Kreuzkorrelationsspektrum wird anschließend differenziert. Eine Linie wird identifiziert, wenn die erste Ableitung einen Nulldurchgang aufweist und der Betrag der zweiten Ableitung über einem gewissen Schwellwert liegt. Die identifizierten Linien werden aus dem ursprünglichen Spektrum entfernt, indem an jede Linie eine Gaußfunktion angepaßt und subtrahiert wird. Schließlich wird das rasierte Spektrum geglättet, indem es – wie die Schwarzkörperspektren – mit niedriger spektraler Auflösung berechnet wird. Dieser Rasuralgorithmus erkennt die Basislinie nicht mehr, wenn sich Linienflügel überlappen. Auch Signaturen von Q-Zweigen lassen sich oft schwierig rasieren, weil ihre Linienform durch eine Gaußfunktion nur unzureichend modelliert wird.³ In Bereichen mit vielen kleinen Linien besteht außerdem das Problem, daß Rauschen und Linien nicht mehr sauber getrennt werden können. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit ein neues Rasurverfahren entwickelt, in dem die bisherige Rasur mit einer Simulation des atmosphärischen Spektrums kombiniert wird. Dieses „kombinierte Rasurverfahren“ umfaßt die folgenden Schritte:

1. In einem ersten Schritt wird das gemessene Spektrum nach der oben beschriebenen Methode rasiert und geglättet.

²Die Linienform der apodisierten Spektren kann sehr gut durch eine Gaußfunktion angenähert werden.

³Die Linien dieser Q-Zweige sind so dicht, daß sie von MIPAS-B2 nicht mehr spektral aufgelöst werden können.

2. Mit der so gewonnenen Basislinie werden eine vorläufige Instrumentresponsivität und ein vorläufiger Offset berechnet, mit deren Hilfe wiederum das gemessene Weltraumspektrum kalibriert wird.
3. Mit dem kalibrierten Spektrum wird ein Spurengasretrieval für die Säulengehalte oberhalb des Ballons durchführt (Abschnitt 3.2.3) mit dem Ziel, die atmosphärischen Signaturen über den gesamten spektralen Kanal optimal nachzubilden.⁴
4. Dieses simulierte Spektrum wird dann wieder mit der vorläufig bestimmten Instrumentresponsivität multipliziert und vom gemessenen Weltraumspektrum subtrahiert.
5. Übrig bleibt die gesuchte Basislinie, die wiederum geglättet wird.

Gegenüber dem einfachen Rasurverfahren, das die Basislinie nur aus Informationen aus dem Spektrum selbst ableitet, gehen in die kombinierte Rasur auch spektroskopische Liniendaten ein. Diese können fehlerbehaftet sein, allerdings hat sich gezeigt, daß es im allgemeinen – eventuell mit nachträglicher Skalierung – möglich ist, die Linienstruktur so gut nachzubilden, daß in der Differenz zwischen gemessenem und synthetischem Spektrum keine Linien mehr zu erkennen sind.

Um die Qualität des Rasurverfahrens zu quantifizieren, wurde es mit Hilfe von simulierten Spektren überprüft. Als Grundlage dienten Spektren, die in einer Vorwärtsrechnung mit Hilfe von KOPRA (Abschnitt 3.2.3) für einen Elevationswinkel von $+20^\circ$, einmal für die Situation von Flug 8 (mittlere geographische Breiten im Frühjahr, 38 km Flughöhe) und einmal für die Situation von Flug 9 (hohe geographische Breiten im Winter, 26 km Flughöhe⁵) berechnet wurden. Das atmosphärische Signal ist in mittleren Breiten aufgrund der höheren Temperatur generell größer, jedoch sind in den Spektren für Flug 9 aufgrund der niedrigen Flughöhe und der höheren Konzentration einiger Spurengase weitere Signaturen erkennbar, die wegen überlappender Linienflügel die Basislinie nicht eindeutig erkennen lassen (z.B. HNO_3 im Kanal 1). Diese Spektren wurden mit der Instrumentresponsivität für den jeweiligen Flug multipliziert und zu einem fiktiven Geräteuntergrund hinzuaddiert, der einem gemessenen Geräteuntergrund nachgebildet und praktisch rauschfrei ist. Zu dem simulierten unkalibrierten Weltraumspektrum wurde ein Rauschspektrum hinzuaddiert, wie es dem Rauschen eines aus 16 gemessenen Einzelspektren gewonnenen, koadierten Spektrums entspricht. Für das Rauschen wurden die typischen Werte für die *NESR* aus Tabelle 5.1 zugrunde gelegt. Die Abbildungen 5.6 und 5.7 zeigen das Ergebnis der Simulation für die Weltraumpektren zu Flug 9 in den Kanälen 1 und 2. Die rasierten Spektren zeigen dort, wo keine oder nur schmale Linien vorhanden sind, eine gute Übereinstimmung mit der Basislinie (Kanal 1: 800–860 und 925–975 cm^{-1}). In Bereichen, in denen sich die Linienflügel überlagern (CO_2 im Bereich um 790 cm^{-1} , HNO_3 bei 860–920 cm^{-1}), sind die rasierten Spektren systematisch zu groß. Hier kann mit dem kombinierten Rasurverfahren eine deutliche Verbesserung erzielt werden (grüne Kurven). Keine wesentliche Änderung zeigt sich hingegen bei Gasen, die nur eine breitbandige Struktur zeigen, da es hier keine Möglichkeit gibt, Geräteuntergrund und atmosphärische Signatur zu trennen. Ein Beispiel hierfür ist N_2O_5 im Kanal 2 bei 1250 cm^{-1} . Hier gibt es nur die Möglichkeit, die Signatur einer Standardatmosphäre vom

⁴Dabei ist es unerheblich, ob das Retrieval exakte Spurengaskonzentrationen liefert. Die Ergebnisse aus diesen Rechnungen werden nicht weiter verwendet. Wenn es nicht möglich ist, das gesamte, breitbandige Spektrum mit einer Einstellung für die verschiedenen Parameter nachzubilden, ist auch eine abschnittsweise Rechnung bzw. nachträgliches Skalieren einzelner Spektralbereiche möglich.

⁵Die Flughöhe betrug bei diesem Flug im Mittel 28 km, jedoch hatte die Gondel bei der ersten Kalibrierungsmessung die Gipfelhöhe noch nicht ganz erreicht.

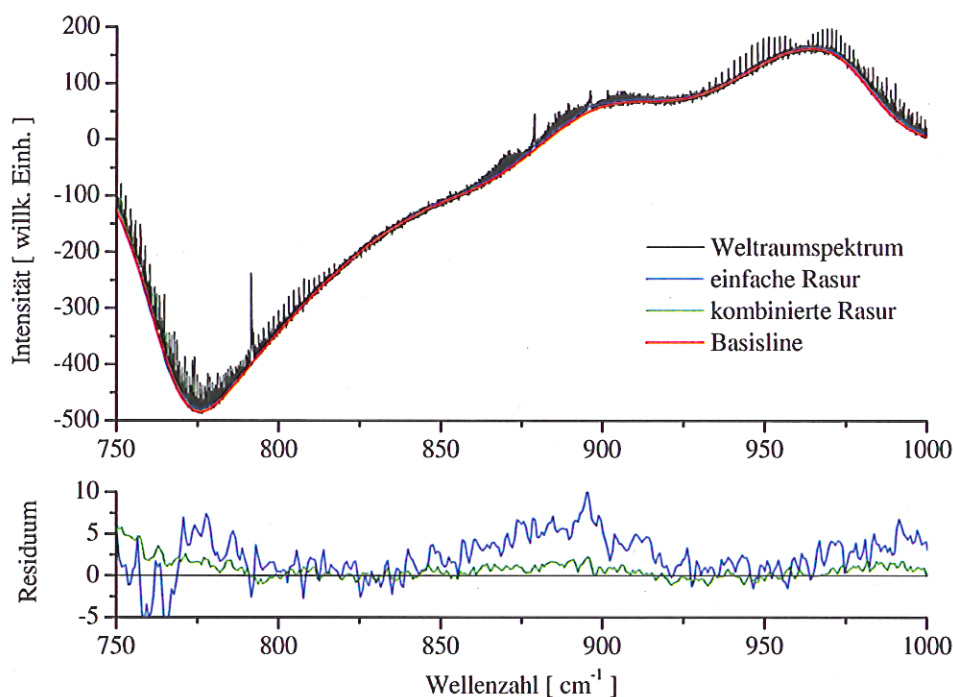


Abbildung 5.6: Rasur eines synthetischen Weltraumspektrums im Kanal 1 (Situation von Flug 9). Die Rasur mit Hilfe des Rasuralgorithmus ist blau gezeichnet, das Ergebnis der kombinierten Rasur grün und der ursprüngliche „wahre“ Offset rot. Das Residuum zeigt jeweils die Differenz zum wahren Offset.

gemessenen Spektrum zu subtrahieren. Dieses Verfahren ist allerdings nur zu empfehlen, wenn das Mischungsverhältnis des betroffenen Gases in der Stratosphäre gut bekannt ist und keinen starken Schwankungen unterliegt.

Für Flug 8 sind die Ergebnisse vergleichbar. Hier sind aufgrund der höheren Temperatur in der Stratosphäre die CO_2 -Linien im Spektrum stärker. Entsprechend stärker ist auch die Überlagerung der Linienflügel im Bereich um 790 cm^{-1} , so daß hier die Verbesserung des Gesamtergebnisses durch die kombinierte Rasur besonders deutlich wird. Im Bereich der HNO_3 -Signatur hingegen ist zwischen der einfachen und der kombinierten Rasur kaum ein Unterschied zu beobachten, da bei Flug 8 aufgrund der größeren Flughöhe und der geringeren HNO_3 -Konzentration das Restsignal von HNO_3 entlang der Sichtlinie erheblich kleiner ist.

Das kombinierte Rasurverfahren zeigt noch einen weiteren Vorteil: Gegenüber dem einfachen Verfahren ist die scheinbare Rauschamplitude sichtbar geringer. Das scheinbar erhöhte Rauschen beim einfachen Verfahren ist darauf zurückzuführen, daß beim Subtrahieren der Linien Unstetigkeitsstellen im Spektrum entstehen, die zwar durch die Reduzierung der spektralen Auflösung geglättet werden, aber immer noch deutlich über dem Niveau des Rauschens liegen. Um den Fehler in den kalibrierten Spektren entsprechend gering zu halten, müßte das Spektrum stärker geglättet werden. Bei einer niedrigeren spektralen Auflösung wird aber das Channeling nicht mehr aufgelöst, so daß es sich beim Kalibrieren nicht mehr heraushebt. In den Kanälen 3 und 4 kann mit dem erweiterten Rasurverfahren der Fehler auf das Rauschniveau gesenkt werden. In diesen Kanälen muß daher kein separater Rasurfehler betrachtet werden.

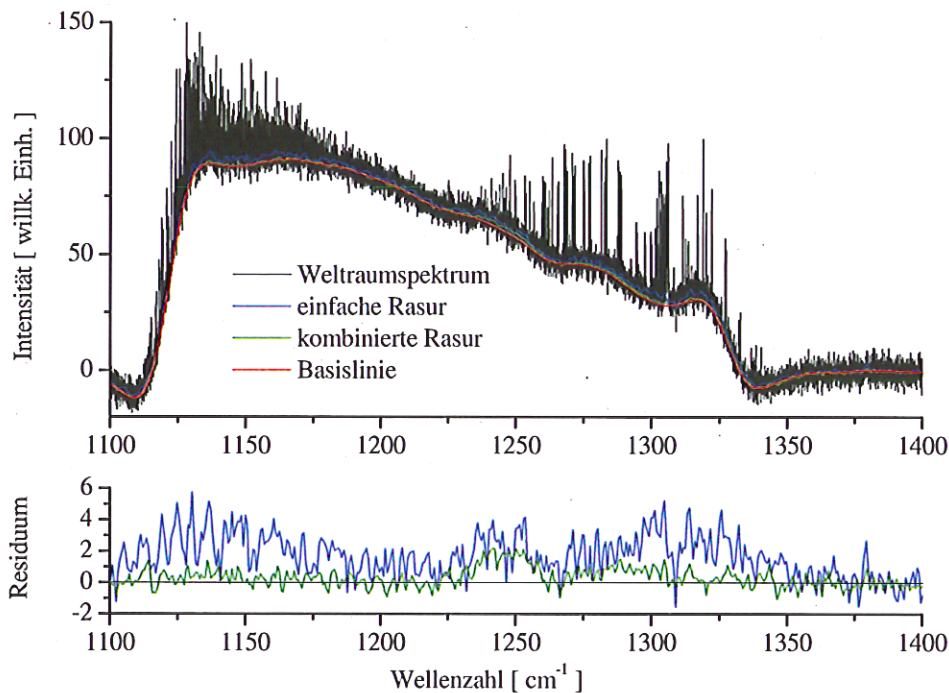


Abbildung 5.7: Rasur eines Weltraumspektrums im Kanal 2 (Situation von Flug 9). Erklärungen siehe Abb. 5.6.

In den Kanälen 1 und 2 ist der Fehler in der Offsetbestimmung der kalibrierten Spektren, der sich aus der Differenz des synthetischen Offsets zum Ergebnis des erweiterten Rasurverfahrens ergibt (maximale Differenz pro Kanal), durch

$$\Delta \mathcal{L}_{\text{Offset, Basislinie}} = \frac{S_{BB}}{S_{BB} - S_{DS}} \cdot \frac{\Delta S_{DS, \text{Basislinie}}}{G} \leq \frac{1}{0,88} \cdot \frac{\Delta S_{DS, \text{Basislinie}}}{G} \quad (5.10)$$

gegeben. Die sich daraus ergebenden Werte sind in Tabelle 5.4 zusammen mit den 2σ -Werten der typischen *NESR* für 16 koaddierte Spektren mit einer spektralen Auflösung von $0,5 \text{ cm}^{-1}$ angegeben. Der relative Fehler in der Instrumentresponsivität, der aufgrund einer fehlerhaften Basislinie entsteht, berechnet sich mit der Fehlerfortpflanzung zu:

$$\left[\frac{\Delta G}{G} \right]_{\text{Basislinie}} = \frac{\Delta S_{DS, \text{Basislinie}}}{G} \frac{1}{\mathcal{L}_{BB}} = \frac{\Delta S_{DS, \text{Basislinie}}}{S_{BB} - S_{DS}} \quad (5.11)$$

Die Ergebnisse für den relativen Fehler in der Instrumentresponsivität sind ebenfalls in Tabelle 5.4 aufgelistet. Für die Berechnung von \mathcal{L}_{BB} wurde wie in Abschnitt 5.2 eine Schwarzkörpertemperatur von 217 K angenommen. Die Ergebnisse zeigen, daß in den Kanälen 1 und 2 in einigen Spektralbereichen mit einem im Vergleich zum Rauschen etwa doppelt so großen Fehler zu rechnen ist.

Im Rahmen der Simulationsrechnungen wurde noch exemplarisch der Einfluß des Rauschens auf die Simulation des atmosphärischen Spektrums (Schritt 3 auf S. 41) untersucht. Dazu wurden für die Situation von Flug 9 für die Kanäle 1 bis 3 die simulierten unkalibrierten Spektren einmal entsprechend 16 Koadditionen verrauscht und einmal entsprechend 256 Koadditionen.

	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	Einheit
$NESR_{koad, \delta\kappa=0,5 \text{ cm}^{-1}} (2\sigma)$	1,1	0,79 - 1,2	0,40	0,53	r.u.
$\Delta\mathcal{L}_{Offset, Basislinie}$	2	1,2	–	–	r.u.
$[\Delta G/G]_{Basislinie}$	0,06 - 0,12	0,13 - 0,25	–	–	%

Tabelle 5.4: Fehler in Instrumentresponsivität und Offset durch Fehler in der Basislinie. Für den Fehler in der Basislinie wurde das Ergebnis aus den Simulationsrechnungen für die kombinierte Rasur verwendet. Diese Fehler sind sowohl für Flüge in mittleren Breiten als auch für arktische Flüge repräsentativ.

Die Differenz, die sich aus dem Spurengasretrieval für die beiden Fälle ergab, lag in Kanal 1 in der Größenordnung des Rauschens, in Kanal 2 einen Faktor 2 darunter und in Kanal 3 einen knappen Faktor 10 darunter. Diese Untersuchung zeigt, daß bezüglich der Rasur durch eine Verlängerung der Meßzeit für die Weltraumspektren keine wesentlichen Verbesserungen erzielt werden können.

5.5 Strahldichte des Schwarzkörpers

Die spektrale Strahldichte, die vom Schwarzkörper emittiert wird, ist über die Planckfunktion $B(T)$, die Temperatur des Schwarzkörpers T und sein Emissionsvermögen ε gegeben:

$$\mathcal{L}_{BB, emittiert} = \varepsilon_{BB} \cdot B(T_{BB}) \quad (5.12)$$

Wenn das Emissionsvermögen kleiner als 1 ist, muß für die Gesamtstrahlung, die vom Schwarzkörper ausgeht, noch die am Schwarzkörper reflektierte Strahlung betrachtet werden. In diesem Abschnitt werden der Einfluß eines Emissionsvermögens, das kleiner als 1 ist, sowie die Auswirkung eines Temperaturfehlers untersucht. Die Schwarzkörpertemperatur liegt in der Regel zwischen 210 und 225 K, für die Fehlerabschätzung wird jeweils der weniger günstige Fall betrachtet.

Emissionsvermögen

Der Schwarzkörper von MIPAS-B2 ist ein Hohlzylinder aus AlMg3 mit einer Länge von 270 mm und einem Öffnungsdurchmesser von 135 mm. Der Zylinder ist mit schwarzer Spezialfarbe (Herberts 1002E, [Lohregel und Hohn, 1990]) beschichtet, die über den gesamten mit MIPAS-B2 gemessenen Spektralbereich ein Emissionsvermögen von $0,975 \pm 0,010$ aufweist. Aufgrund der Hohlraum-Geometrie mit einem Längen-zu-Radius-Verhältnis von 4,0 berechnet sich daraus das mittlere Emissionsvermögen des Schwarzkörpers zu:

$$\varepsilon_{BB} = 0,9985 \pm 0,0007 \quad (5.13)$$

Die Rechnung ist in Anhang C wiedergegeben.

Nun soll noch betrachtet werden, wieviel Strahlung reflektiert wird. Der Reflektionsgrad beträgt maximal 0,0022. Die bei diesem Reflektionsgrad reflektierte Strahldichte wird in Anhang C für 2400 cm^{-1} zu $0,0019 B(T_{BB})$ bis $0,0033 B(T_{BB})$ abgeschätzt.

Die vom Schwarzkörper ausgehende Gesamtstrahlung setzt sich aus der emittierten und der reflektierten Strahlung zusammen:

$$\mathcal{L}_{BB} = \varepsilon_{BB} \cdot B(T_{BB}) + \mathcal{L}_{Reflexion} \quad (5.14)$$

Damit erhält man als Extremwerte für \mathcal{L}_{BB} :

$$\mathcal{L}_{BB, \min} = (0,9978 + 0,0019) B(T_{BB}) = 0,9997 B(T_{BB}) \quad (5.15)$$

$$\mathcal{L}_{BB, \max} = (0,9978 + 0,0033) B(T_{BB}) = 1,0011 B(T_{BB}) \quad (5.16)$$

Für diese Rechnung wurde das minimale Emissionsvermögen angenommen. Bei einem höheren Emissionsvermögen wird der Fehler durch die reflektierte Strahlung kleiner.

Bei der Kalibrierung der Spektren wird \mathcal{L}_{BB} über

$$\mathcal{L}_{BB} = B(T_{BB}) \quad (5.17)$$

berechnet. Der relative Fehler von \mathcal{L}_{BB} infolge eines Emissionsvermögens, das kleiner als 1 ist, wird daher zu maximal 0,11 % abgeschätzt. Für 770 cm^{-1} beträgt der Fehler nur 0,03 %.

Temperaturfehler

Die vom Schwarzkörper emittierte Strahldichte ist eine Funktion seiner Temperatur. Diese muß für eine exakte Kalibrierung daher sehr genau bekannt sein. Fehlerquellen in der Temperaturbestimmung sind:

- Fehler des Temperatursensors,
- eine inhomogene Temperaturverteilung an der Oberfläche des Schwarzkörpers und
- eine Temperaturdifferenz zwischen Oberfläche des Schwarzkörpers und Temperatursensor aufgrund der schlechten Wärmeleitfähigkeit des Schwarzlacks.

Der Meßfehler des Pt-100-Temperatursensors wurde vom Deutschen Kalibrierdienst im Bereich zwischen $-100 \text{ }^\circ\text{C}$ und $+50 \text{ }^\circ\text{C}$ zu maximal $\pm 0,05 \text{ }^\circ\text{C}$ bestimmt. Das Rauschen in der Elektronik läßt sich auf weniger als $0,008 \text{ K}$ (2σ) beziffern. Für eine sehr genaue Widerstandsmessung wird die Vierleitermeßtechnik verwendet, der Strom wird über einen temperaturkompensierten Referenzwiderstand bestimmt, und durch Mittelung über beide Stromrichtungen werden Abhängigkeiten von der Stromrichtung kompensiert.

Im Schwarzkörper sind drei Temperatursensoren angebracht: Sensor 1 im Boden in der Mitte, Sensor 2 im Boden am Rand und Sensor 3 in der Wand, 40 mm unterhalb der Austrittsöffnung des Schwarzkörpers. Für die Bestimmung der Schwarzkörpertemperatur wird Sensor 1 verwendet. Die Temperatur von Sensor 2 weicht während des Fluges um maximal 0,1 K von der Temperatur des Sensors 1 ab, die Temperatur des Sensors 3 um maximal 0,4 K. Für die Temperaturdifferenz zwischen Bodenfläche und oberem Rand des Schwarzkörpers wird daher eine Temperaturdifferenz von maximal 0,5 K mit einem linearen Temperaturprofil angenommen. Nach [Kohlrausch, 1996] führt diese Inhomogenität bei einem Längen-zu-Radius-Verhältnis von 4 zu einem Fehler in der Strahldichte, die einem Temperaturfehler von weniger als 0,008 K entspricht.

Der Temperaturfehler zwischen Oberfläche und Temperatursensor aufgrund der schlechten Wärmeleitfähigkeit des Schwarzlacks wird in Anhang C zu 0,004 K abgeschätzt.

Der Gesamtfehler in der Temperaturbestimmung des Schwarzkörpers ist daher kleiner als 0,07 K. Ein Temperaturfehler von 0,07 K führt bei einer Schwarzkörpertemperatur von 210 K bei 770 cm^{-1} zu einem Fehler in der spektralen Strahldichte von 0,2 %, bei 2400 cm^{-1} zu einem Fehler von 0,6 %.

Kapitel 6

Phasenkorrektur

Wie bereits in Abschnitt 2.2.3 erwähnt, sind die gemessenen Interferogramme mit einem Phasenfehler behaftet. Bevor die Spektren kalibriert werden, werden sie daher phasenkorrigiert. In diesem Kapitel wird zunächst auf die unterschiedlichen Strahlungsbeiträge eingegangen, aus denen sich das gemessene Interferogramm zusammensetzt. Anschließend wird die Phasenkorrektur, wie sie bei MIPAS-B2 angewandt wird, vorgestellt. Der Schwerpunkt dieses Kapitels liegt auf der Quantifizierung der Restphasenfehler nach erfolgter Phasenkorrektur.

6.1 Strahlungsbeiträge und ihre Phasen

Wenn die einzige Strahlungsquelle wie in Abb. 2.1 außerhalb des Interferometers und vor dem Strahlteiler liegt, dann muß das phasenkorrigierte Spektrum reell und positiv sein. Dieses Spektrum kann aus dem gemessenen, komplexen Spektrum durch eine Phasendrehung um $e^{-i\varphi}$ berechnet werden:

$$S_m(\kappa) = S(\kappa) \cdot e^{i\varphi} \quad \text{mit} \quad \varphi = \arctan 2 \left(\frac{\text{Im}(S_m(\kappa))}{\text{Re}(S_m(\kappa))} \right) \quad (6.1)$$

und

$$S(\kappa) = S_m(\kappa) \cdot e^{-i\varphi} \quad (6.2)$$

Hierbei ist $\arctan 2$ der erweiterte Arkustangens, der in einem Wertebereich von $-\pi$ bis π definiert ist (vgl. Anhang A).

In der Emissionsspektroskopie ist jedoch häufig die thermische Eigenstrahlung des Instruments nicht vernachlässigbar, und die einzelnen Strahlungsquellen und ihre Phasenbeziehungen zueinander müssen genauer untersucht werden. Insgesamt müssen drei Strahlungsbeiträge betrachtet werden:

- Strahlungsterme, deren Quellen vor dem Interferometer liegen: In diesem Fall werden die beiden Teilstrahlen im Interferometer auf dem Weg zum Detektor am Strahlteiler je einmal reflektiert und einmal transmittiert. Zu diesen Quellen zählt insbesondere die Strahlung der Atmosphäre, aber auch die Eigenemission optischer Komponenten, die im Strahlengang vor dem Interferometer liegen (Teleskop). Dieser Strahlungsbeitrag wird auch „Atmosphärenport“ genannt und ist in Abb. 6.1 grün eingezeichnet.
- Strahlungsbeiträge, deren Quellen auf der Detektorseite des Interferometers liegen: Hierzu zählen die Eigenemission optischer Komponenten zwischen Strahlteiler und Detektor und die Reflexion der Gerätehintergrundstrahlung am Fenster des Kryostaten. In diesem Fall

wird am Strahlteiler einer der beiden Teilstrahlen zweimal reflektiert, der andere zweimal transmittiert. Dieser Strahlungsbeitrag heißt „Detektorport“ (in Abb. 6.1 blau gezeichnet).

- Der Strahlungsbeitrag, der von der Eigenemission der strahlteilenden Schicht herrührt: Dieser Beitrag wird „Strahlteilerport“ genannt und ist in Abb. 6.1 rot dargestellt.

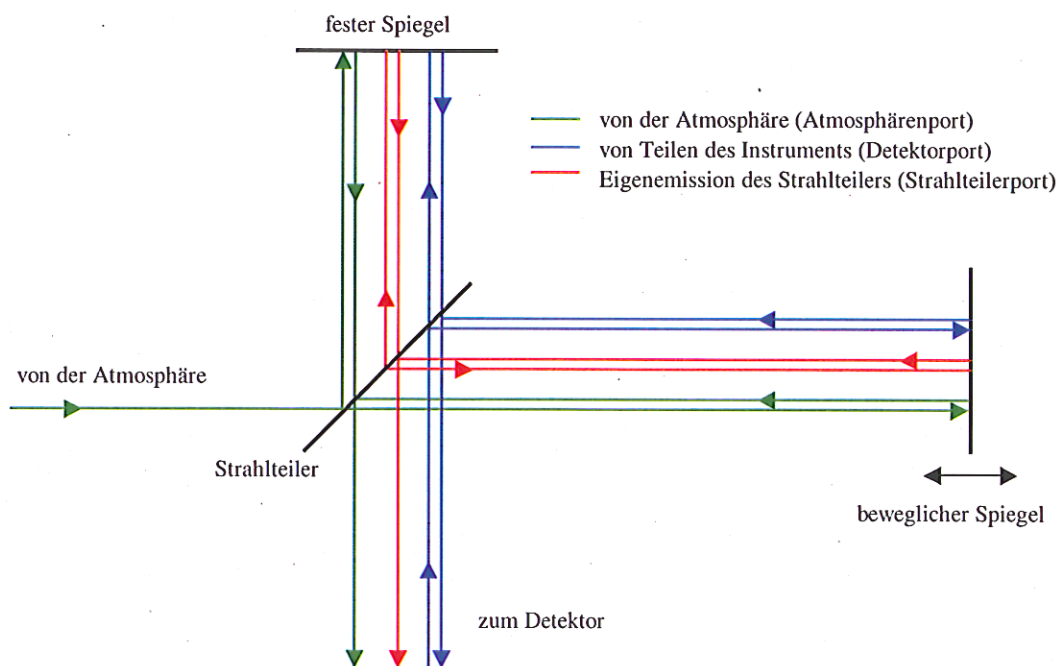


Abbildung 6.1: Strahlungsbeiträge im Interferometer. Zur besseren Verfolgung der Strahlen sind die an den Spiegeln reflektierten Strahlen gegenüber den einfallenden leicht versetzt gezeichnet.

Die in Abb. 6.1 dargestellten Strahlungsbeiträge haben unterschiedliche Phasen zueinander: Der Detektorport hat gegenüber dem Atmosphärenport eine Phase von π und der Strahlteilerport eine Phase von $\pi/2$. Eine Herleitung dieser Phasenbeziehung ist unter Nichtberücksichtigung der Absorption durch den Strahlteiler in [Trieschmann, 2000] gegeben.¹ In Abb. 6.2 sind die einzelnen Strahlungsbeiträge in der komplexen Ebene für zwei verschiedene Situationen gezeigt. Der Beitrag des Atmosphärenports liegt auf der positiven, der Beitrag des Detektorports auf der negativen reellen Achse. Der Beitrag des Strahlteilers liegt auf der imaginären Achse. Das Gesamtspektrum ist durch die vektorielle Summe der Einzelbeiträge gegeben. Aufgrund der unterschiedlichen Phasen der einzelnen Beiträge ist das Spektrum nicht mehr reell und positiv, sondern setzt sich aus einem Real- und einem Imaginärteil zusammen.

Zu der sogenannten „natürlichen Phase“ ϕ , die die Phasenlage des Gesamtspektrums beschreibt, kommt beim gemessenen Spektrum noch der Phasenfehler φ hinzu, der auf das diskrete Abtasten sowie optische und elektronische Laufzeitdifferenzen zurückzuführen ist (kleines Bild

¹Eine weitergehende Untersuchung der Strahlteileremission mit Berücksichtigung der Absorption zeigt, daß die Phasenbeziehungen zwischen den Ports etwas größer als $\pi/2$ bzw. π sind [Carli et al., 1999, Hase et al., 2001]. Auf die hier beschriebene Phasenkorrektur hat dieser Umstand jedoch keine Auswirkung.

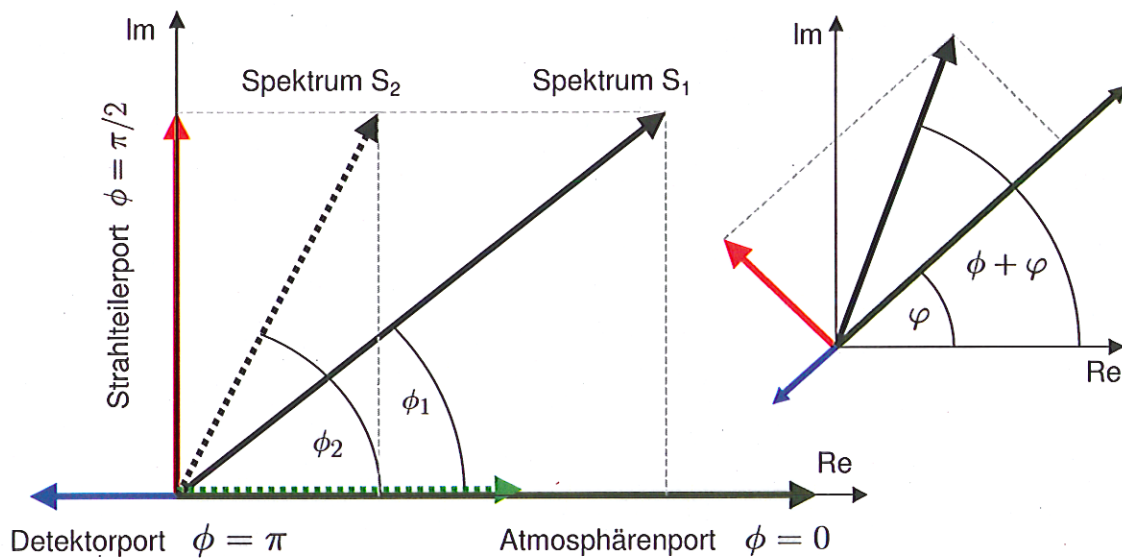


Abbildung 6.2: Die Phasenbeziehung der unterschiedlichen Strahlungsbeiträge im Interferometer für eine feste Wellenzahl. Das große Bild zeigt zwei Situationen (für zwei Wellenzahlen κ_1 und κ_2) mit unterschiedlichen Strahlungsbeiträgen von der Atmosphäre (S_1 mit dem atmosphärischen Beitrag in dunkelgrün, S_2 mit dem unterbrochen gezeichneten Beitrag in hellgrün). Das kleine Bild zeigt die Phasenbeziehung für eine feste Wellenzahl, wenn zur natürlichen Phase ϕ ein Phasenfehler φ hinzu kommt. Dann wird das gesamte Bild in der komplexen Ebene gedreht, und der Winkel zwischen reeller Achse und Magnitude ist die Summe der beiden Anteile $\phi + \varphi$.

in Abb. 6.2). Um diesen Phasenfehler muß das gemessene Spektrum korrigiert werden. Dazu wird es mit einer inversen Phasenfunktion multipliziert, die bewirkt, daß der Beitrag des Atmosphärenports auf der positiven reellen Achse zu liegen kommt. Die Phasenbestimmung nach Gl. 6.1 kann in dieser Situation nicht angewandt werden, da der Arkustangens nur die Summe aus natürlicher Phase und Phasenfehler $\phi + \varphi$ liefert [Revercomb et al., 1988, Blom et al., 1996]. Für die Phasenkorrektur muß ein Weg gefunden werden, um die beiden Phasenbeiträge ϕ und φ zu trennen. Trieschmann hat für das MIPAS-B2-Instrument ein neues Phasenkorrekturverfahren entwickelt [Trieschmann, 2000], das im folgenden Abschnitt 6.2 kurz wiedergegeben wird.

6.2 Die Phasenkorrektur von MIPAS-B2-Spektren

Im folgenden wird nur noch die zu korrigierende Phase φ betrachtet. Diese Phase setzt sich aus einem linearen Teil und einem nichtlinearen Teil zusammen. Der Versatz der x-Achse, der durch die diskrete Abtastung verursacht wird, führt nur zu einem linearen Phasenfehler. Optische und elektrische Laufzeitdifferenzen können sowohl lineare als auch nichtlineare Anteile enthalten. Die nichtlineare Phase ist auf instrumentspezifische Eigenschaften zurückzuführen und wird im folgenden als „instrumentelle Phase“ bezeichnet.

Die hier dargestellte Phasenkorrekturmethode beruht auf einigen Annahmen:

1. Die zu korrigierende Phase φ ist eine mit der Wellenzahl langsam veränderliche Funktion.
2. Im Fall von Schwarzkörperspektren ist die natürliche Phase ϕ annähernd null, da die Summe der Beiträge aus Atmosphären- und Detektorport deutlich größer ist als der Beitrag vom Strahlteilerport.
3. Nichtlineare Phaseneffekte (das heißt die instrumentelle Phase) ändern sich im Zeitrahmen von einigen Stunden nicht wesentlich. Lediglich die lineare Phase muß für jedes Interferogramm bestimmt werden.
4. Die Eigenemission des Instruments ist eine langsam mit der Wellenzahl variierende Funktion, das heißt, das Emissionsspektrum des Instruments enthält keine schmalbandigen Signaturen.

Zunächst wird mit Annahme 1 die Phase der Schwarzkörperspektren nach Gl. (6.1) mit niedriger spektraler Auflösung berechnet. Mit Annahme 2 können die nichtlinearen Phasenanteile aus der Schwarzkörperphase bestimmt werden, indem von dieser eine Gerade subtrahiert wird. Die so gewonnene instrumentelle Phase ist die Ausgangsphase zur Phasenkorrektur der nachfolgenden atmosphärischen Spektren bis zur nächsten Schwarzkörpermessung (mit Annahme 3). Zu dieser Phase wird eine lineare Phase

$$\varphi_{lin} = a_0 + a_1 \cdot (\kappa - \kappa_0) \quad (6.3)$$

addiert, deren Parameter a_0 und a_1 so bestimmt werden, daß im Imaginärteil des phasenkorrigierten Spektrums keine spektral hochaufgelösten Strukturen mehr zu erkennen sind (Annahme 4). κ_0 ist eine Wellenzahl in der Mitte des zu korrigierenden Spektralbereichs. Die einzelnen Schritte werden im folgenden im Detail erläutert:

Schwarzkörperphase und instrumentelle Phase

Bei den Schwarzkörperspektren wird in einem ersten Schritt die Strahlteileremission vernachlässigt, und die Phasenkorrektur erfolgt nach [Forman et al., 1966]: Die Phase φ wird nach Gl. (6.1) mit einer niedrigen Auflösung ($\delta\kappa \geq 1 \text{ cm}^{-1}$) berechnet (Annahme 1). Dadurch wird das Rauschen im Phasenspektrum erheblich reduziert, und das Rauschen im Spektrum wird gleichmäßig auf den Real- und Imaginärteil verteilt. Gegenüber dem Magnitudenspektrum wird das Rauschen im Realteil um den Faktor $\sqrt{2}$ verringert. Die Phasenkorrektur erfolgt im Ortsraum durch eine Faltung des Interferogramms mit der Fouriertransformierten der Phase:

$$IFG_{kor}(x) = IFG(x) \otimes FT^+ [e^{-i\varphi}] \quad (6.4)$$

Das phasenkorrigierte Spektrum erhält man nun aus dem phasenkorrigierten Interferogramm IFG_{kor} .

Die instrumentelle Phase φ_{instr} wird aus der Schwarzkörperphase bestimmt, indem (nach der Methode der kleinsten Abweichungsquadrate) eine Gerade an die Schwarzkörperphase angepaßt und subtrahiert wird.

Phase der atmosphärischen Spektren: die statistische Phasenkorrektur

Ausgangspunkt für die Phasenkorrektur der Atmosphärenspektren ist die instrumentelle Phase aus den Schwarzkörpermessungen. Mit der Annahme 3, daß sich die instrumentelle Phase zwischen Schwarzkörper- und Atmosphärenmessungen nur unwesentlich ändert, muß nur noch die

lineare Phase φ_{lin} berechnet werden. Dazu sind die beiden Parameter a_0 und a_1 aus Gl. (6.3) zu bestimmen.

Zur Bestimmung dieser Parameter wird die Information genutzt, daß Linien in den Spektren von atmosphärischen Gasen und damit aus dem Atmosphärenport stammen. Im phasenkorrigierten Spektrum müssen sie sich daher im Realteil wiederfinden, während der Imaginärteil dann nur noch die Strahlteileremission darstellt, die ein Teil des Emissionsspektrums des Instruments ist und daher nach Annahme 4 keine Linienstruktur enthält. Daraus ergeben sich für ein hochpaßgefiltertes Spektrum folgende Bedingungen:

- Die Korrelation zwischen Real- und Imaginärteil sollte verschwinden.
- Die Varianz über alle Punkte im Imaginärteil soll nur noch durch Rauschen, nicht jedoch durch Linien gegeben sein und daher im Falle der korrekten Phasenkorrektur minimal werden.

Die Hochpaßfilterung ist erforderlich, da Real- und Imaginärteil dieselben optischen Filter durchlaufen und dadurch der niederaufgelöste Anteil der Spektren korreliert ist. Das hochpaßgefilterte Strahlteilerspektrum liefert als Beitrag zur Varianz nur noch Rauschen. In der Praxis wird zur Erhöhung der Konvergenzgeschwindigkeit nicht die Varianz, sondern die Kurtosis, das heißt die vierte Potenz des hochpaßgefilterten Imaginärteils, minimiert. Mit Hilfe dieser beiden Kriterien werden a_0 und a_1 iterativ bestimmt und daraus die Phase φ_{lin} berechnet. Die Gesamtphase ergibt sich zu $\varphi = \varphi_{lin} + \varphi_{instr}$. Die eigentliche Phasenkorrektur erfolgt wie im Fall der Schwarzkörperspektren durch Faltung im Interferogrammraum (vgl. Gl. (6.4)).

Korrektur der instrumentellen Phase und der Schwarzkörperspektren um den Imaginärteil

Im ersten Schritt der Phasenbestimmung wurde bei den Schwarzkörperspektren der Imaginärteil vernachlässigt, und der Realteil wurde mit dem Betrag des Spektrums gleichgesetzt. Diese Vernachlässigung führt, sobald das Strahlteilerspektrum einige Prozent des Schwarzkörperspektrums übersteigt, zu einem signifikanten Fehler sowohl bei der Phasenbestimmung als auch in der Größe des Realteils. Deshalb wird in einem zweiten Schritt die Phase des Schwarzkörperspektrums unter Berücksichtigung des Imaginärteils berechnet. Der Imaginärteil wird mit der statistischen Methode aus einem atmosphärischen Spektrum bestimmt, das in zeitlicher Nähe zur Schwarzkörpermessung liegt, so daß davon ausgegangen werden kann, daß sich die Strahlteileremission in dieser Zeit nicht geändert hat. Die endgültige Phase des Schwarzkörpers berechnet sich damit zu:

$$\varphi_{BB} = \arctan 2 \left(\frac{\text{Im}(S_{BB,m}(\kappa))}{\text{Re}(S_{BB,m}(\kappa))} \right) - \arcsin \left(\frac{S_{BS}(\kappa)}{|S_{BB}(\kappa)|} \right) \quad (6.5)$$

mit $S_{BB,m}(\kappa)$ gemessenes Schwarzkörperspektrum (ohne Phasenkorrektur)
 $S_{BS}(\kappa)$ Strahlteilerspektrum (aus einem atmosphärischen Spektrum bestimmt)

Mit der instrumentellen Phase aus dieser iterativ bestimmten Schwarzkörperphase kann nun auch die Phase des atmosphärischen Spektrums erneut berechnet werden. Damit erhält man ein besseres Ergebnis für die Strahlteileremission, mit dem wieder die Schwarzkörperphase berechnet werden kann usw. In der Praxis hat sich gezeigt, daß im Extremfall, bei dem die Strahlteileremission knapp 22 % des Schwarzkörperspektrums betrug, nicht mehr als zwei Iterationen erforderlich waren. Bei weiteren Iterationen werden nur noch Änderungen weit unterhalb des Rausch-niveaus erzielt. Wenn die Strahlteileremission kleiner als 8 % des Schwarzkörperspektrums ist,

reicht eine Iteration aus. Der Restfehler in der Phase ist dann kleiner als 0,2 mrad, der Realteil des Schwarzkörperspektrums ändert sich bei weiteren Iterationen um weniger als 0,01 %. Ist die Strahlteileremission kleiner als 2 %, dann ist ihr Effekt auf das Schwarzkörperspektrum deutlich kleiner als das Rauschen und damit vernachlässigbar.

6.3 Phasenfehler

6.3.1 Auswirkung des Phasenfehlers

Um zu beurteilen, welche Ansprüche an die Genauigkeit der Phasenkorrektur gestellt werden sollten, wird in diesem Abschnitt kurz beschrieben, wie sich ein Phasenfehler auf die Spektren auswirkt. Zur Berechnung der kalibrierten Spektren nach Gl. (3.6) werden die gemessenen Spektren zunächst phasenkorrigiert, und von den phasenkorrigierten Spektren wird jeweils nur der Realteil verwendet.

Da nur der Realteil der phasenkorrigierten Spektren verwendet wird, wird hier auch nur der Fehler auf den Realteil betrachtet. Ein Phasenfehler $\Delta\varphi$ führt im Spektrum zum Fehler $\Delta(\text{Re}(S))_{\Delta\varphi}$ mit:

$$\Delta(\text{Re}(S))_{\Delta\varphi} = \underbrace{\text{Re}(S) \cdot (1 - \cos(\Delta\varphi))}_{(1)} + \underbrace{\text{Im}(S) \cdot \sin(\Delta\varphi)}_{(2)} \quad (6.6)$$

Der Ausdruck (1) führt für $\varphi \neq 0$ zu einer Skalierung des Spektrums. Damit dieser Skalierungsfehler unter 0,1 % bleibt, darf der Phasenfehler 44 mrad nicht überschreiten. Dann ist dieser Ausdruck vernachlässigbar. Der Imaginärteil $\text{Im}(S)$ stellt die Strahlteileremission dar. Da diese eine spektral niedrig aufgelöste Funktion ist, liefert der Term (2) einen additiven Beitrag zum Realteil des Spektrums, der lediglich die Basislinie des Spektrums verändert, während die Linien selbst unbeeinflusst bleiben. Mit der Näherung für kleine Werte von φ : $\sin(\Delta\varphi) \approx \Delta\varphi$ erhält man für den Fehler im Spektrum (mit $\Delta\varphi$ in rad):

$$\Delta(\text{Re}(S))_{\Delta\varphi} \approx \text{Im}(S) \cdot \Delta\varphi \quad (6.7)$$

Wie stark der Effekt auf die Basislinie ist, hängt neben der Größe des Phasenfehlers daher auch von der Größe des Imaginärteils ab. In Abb. 6.3 ist das Verhältnis von Realteil zu Imaginärteil für (phasenkorrigierte) Schwarzkörperspektren für die Flüge 4 bis 10 dargestellt. Da der Schwarzkörper und der Strahlteiler etwa die gleiche Temperatur haben, gibt das Verhältnis von Imaginär- zu Realteil ungefähr das Emissionsvermögen des Strahlteilers wieder. Der Strahlteiler zeigt vor allem im Bereich von Kanal 1 eine relativ starke Emission, die außerdem von einem Exemplar zum anderen recht unterschiedlich ist. Nach den Flügen 5, 7 und 9 wurde der Strahlteiler jeweils gegen einen neuen mit offensichtlich anderem Emissionsverhalten ausgetauscht. Die starken Unterschiede im Emissionsvermögen zwischen Flug 8 und Flug 9 für Wellenzahlen oberhalb von 1250 cm^{-1} können dadurch jedoch nicht erklärt werden.

Aufgrund der starken Strahlteileremission im Bereich von 700 bis 1000 cm^{-1} werden in Kanal 1 höhere Ansprüche an die Genauigkeit der Phasenbestimmung gestellt als in den übrigen Kanälen. In welcher Größenordnung der Phasenfehler liegen darf, ohne daß er maßgeblich zum Gesamtfehler beiträgt, sei im folgenden anhand der Instrumentresponsivität gezeigt: Die Auswirkung eines Phasenfehlers auf die Instrumentresponsivität berechnet sich mit der Fehlerfort-

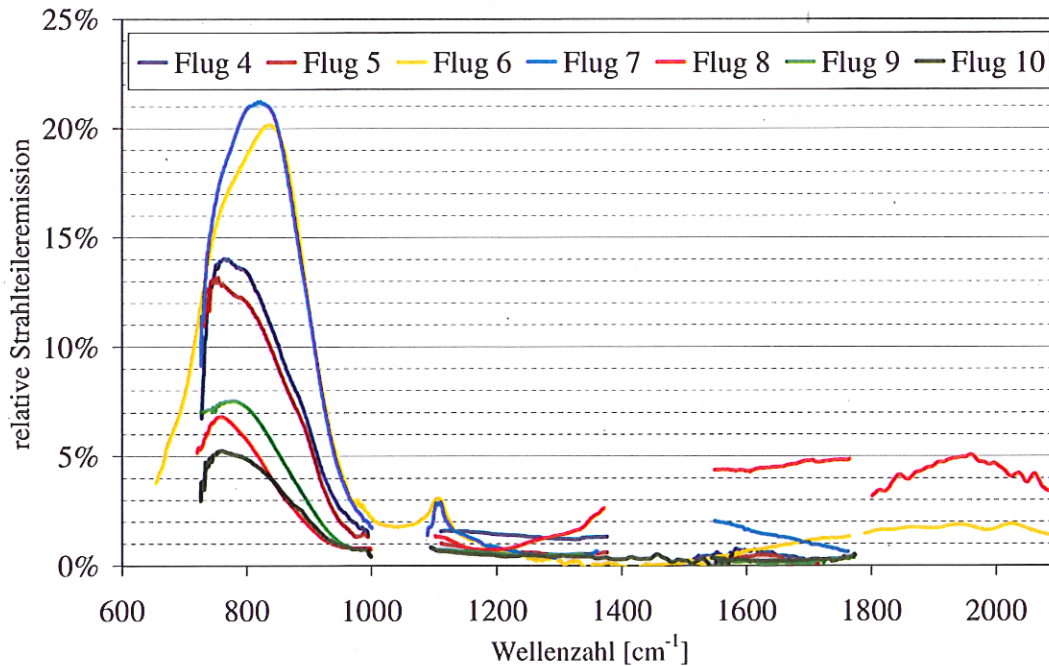


Abbildung 6.3: relative Strahlteileremission bei den Flügen 4 bis 10. Besonders im Bereich von Kanal 1 wird eine relativ starke Strahlteileremission beobachtet, in den Kanälen 2 und 3 liegt sie – mit Ausnahme von Kanal 3 in Flug 8 – unter 2%. In Kanal 4 hebt sich die Strahlteileremission außer in Flug 6 und Flug 8 nicht mehr vom Rauschen ab und ist hier für die übrigen Flüge nicht eingezeichnet.

pflanzung² zu:

$$\frac{\Delta G}{G} = \frac{\Delta S_{BB} + \Delta S_{DS}}{S_{BB} - S_{DS}} \quad (6.8)$$

Auch hier kann wieder die Abschätzung $S_{BB} - S_{DS} \leq 0,88 S_{BB}$ gemacht werden. Für ΔS_{BB} wird nach Gl. (6.7) der Ausdruck $\text{Im}(S_{BB}) \cdot \Delta\varphi_{BB}$ eingesetzt, für ΔS_{DS} entsprechend $\text{Im}(S_{DS}) \cdot \Delta\varphi_{DS}$. Der Imaginärteil ist für Schwarzkörper- und Weltraumspektren gleich, also $\text{Im}(S_{BB}) = \text{Im}(S_{DS}) = \text{Im}(S)$. Damit läßt sich Gl. (6.8) umschreiben zu:

$$\frac{\Delta G}{G} \leq \frac{\text{Im}(S) \cdot (\Delta\varphi_{BB} + \Delta\varphi_{DS})}{0,88 S_{BB}} \leq \frac{1}{4} (\Delta\varphi_{BB} + \Delta\varphi_{DS}) \quad (6.9)$$

Im letzten Schritt wurde $\frac{\text{Im}(S)}{S_{BB}} \leq 0,22$ eingesetzt. Bei einer relativen Strahlteileremission von annähernd 22%, wie sie in den Flügen 6 und 7 auftrat, muß der Phasenfehler $(\Delta\varphi_{BB} + \Delta\varphi_{DS})$ also unter 20 mrad bleiben, damit der relative Fehler in der Instrumentresponsivität 0,5% nicht überschreitet. Im Falle einer schwächeren Strahlteileremission ist die Anforderung an die Genauigkeit der Phase entsprechend geringer.

In den Fehler des Offsets geht die Strahlteileremission ebenfalls linear ein. Auch hier steigen also die Anforderungen an die Genauigkeit der Phase mit der Stärke der Strahlteileremission.

²Da die Phasenfehler von Schwarzkörper- und Weltraumspektrum nicht unabhängig sind, wird hier die Größtfehleraddition angewandt.

In den folgenden Abschnitten wird nun untersucht, welche Genauigkeit bei der Phasenkorrektur erreicht wird. Dabei wird in der Regel wieder von 32 Schwarzkörpermessungen und 16 Welt-raummessungen ausgegangen. Für die Berechnung der Phase werden die Interferogramme der beiden Pendelrichtungen getrennt prozessiert, da nur Interferogramme einer Pendelrichtung phasengleich sind und koaddiert werden können. Für die Berechnung eines Phasenfehlers stehen also nur 16 Schwarzkörper- bzw. 8 Weltraummessungen zur Verfügung. Da jedoch der Phasenfehler annähernd linear in den Fehler des Spektrums eingeht und die phasenkorrigierten Spektren gemittelt werden, wird hierbei auch über die Fehlerbeiträge gemittelt. Daher können für die Berechnung des Phasenfehlers direkt 32 Schwarzkörper- und 16 Weltraummessungen zugrunde gelegt werden.

6.3.2 Phase des Schwarzkörperspektrums und instrumentelle Phase

Die Genauigkeit der Schwarzkörperphase hängt vom Rauschen des Schwarzkörperspektrums und von der Kenntnis des Strahlteilerspektrums ab. Zunächst soll der Fehler durch Rauschen abgeschätzt werden, danach wird auf den systematischen Fehler der Strahlteileremission eingegangen.

Fehler durch Rauschen

Zur Berechnung des Fehlers der Schwarzkörperphase $\Delta\varphi_{BB}$ wird von Gl. (6.5) ausgegangen. Der zweite Term dieser Gleichung trägt nur zum Fehler bei, wenn die Strahlteileremission bei der Berechnung der Schwarzkörperphase berücksichtigt werden muß,³ also generell in Kanal 1 und bei Flug 8 auch in den Kanälen 3 und 4. Für die Berechnung des Fehlers durch Rauschen werden daher zwei Fälle unterschieden. Die Berechnung dieses Fehlers erfolgt ausführlich in Anhang D. Wenn der Imaginärteil nicht berücksichtigt werden muß, ist der Fehler durch

$$\Delta\varphi_{BB,rau} = \frac{\Delta S_{BB}}{|S_{BB}|} \quad (6.10)$$

gegeben. Wenn die Strahlteileremission in die Phasenberechnung mit eingeht, erhöht sich der Fehler durch Rauschen auf:

$$\Delta\varphi_{BB,rau} = 2,25 \frac{\Delta S_{BB}}{|S_{BB}|} \quad (6.11)$$

ΔS_{BB} kann wie in Gl. (5.4) aus der *NESR* eines hochaufgelösten Einzelspektrums bestimmt werden. Die instrumentelle Phase wird aus der Schwarzkörperphase durch Subtraktion einer Geraden berechnet. Das Rauschen in der instrumentellen Phase und in der Schwarzkörperphase ist daher gleich:

$$\Delta\varphi_{instr,rau} = \Delta\varphi_{BB,rau} \quad (6.12)$$

In Tabelle 6.1 sind die typischen Fehler durch das Rauschen und einen systematischen Fehler in der Strahlteileremission aufgelistet. Der Phasenfehler steigt mit der Wellenzahl an, weil das S/N entsprechend schlechter wird. Mit Ausnahme von Kanal 4 ist für alle Kanäle der Beitrag zum Fehler durch das Rauschen so gering, daß er keinen nennenswerten Beitrag zum Gesamtfehler liefert.

³Der Fehler, den man durch Nichtberücksichtigen der Strahlteileremission macht, wird im Zusammenhang mit dem systematischen Fehler der Strahlteileremission untersucht.

Systematischer Fehler der Strahlteileremission

Nun fehlt noch eine Abschätzung für den systematischen Fehler der Strahlteileremission S_{BS} . In Kanal 1 stammen die Beiträge zu diesem Fehler aus dem Fehler der Phasenkorrektur für das atmosphärische Spektrum und aus dem Fehler, den man mit der Annahme macht, daß das Strahlteilerspektrum zeitlich konstant ist. Der Fehler im Imaginärteil durch den Phasenfehler im atmosphärischen Spektrum beträgt ca. 3%, durch die thermische Drift des Instruments ändert sich die Strahlteileremission zwischen den atmosphärischen Messungen direkt vor und nach einer Schwarzkörpermessung typischerweise um nicht mehr als 2%. Daher wird der relative Fehler im Imaginärteil auf 5% abgeschätzt. In den übrigen Kanälen entsteht der systematische Fehler durch die Vernachlässigung der Strahlteileremission, die maximal 2% des Schwarzkörperspektrums ausmacht. Eine Ausnahme stellen hier wieder die Kanäle 3 und 4 in Flug 8 dar, die bei diesem Flug wie Kanal 1 behandelt werden müssen.

Beim Einfluß der Strahlteileremission muß zwischen Schwarzkörperphase und instrumenteller Phase unterschieden werden. Während sich der Fehler in der Schwarzkörperphase aus Gl. (6.5) direkt mit der Fehlerfortpflanzungsrechnung bestimmen läßt, tragen zum Fehler der instrumentellen Phase nur nichtlineare Anteile des Phasenfehlers bei, die hier exemplarisch abgeschätzt werden.

Der Fehler in der Schwarzkörperphase berechnet sich zu:

$$\Delta\varphi_{BB, \Delta S_{BS}} = \frac{\partial\varphi}{\partial S_{BS}} \cdot \Delta S_{BS} \stackrel{(D.9)}{\leq} \frac{1,03 \Delta S_{BS}}{|S_{BB}|} \quad (6.13)$$

Der Einfluß des Imaginärteils auf die Schwarzkörperphase im Kanal 1 wurde exemplarisch für Flug 7 und Flug 8 untersucht. Flug 7 stellt mit einer maximalen Strahlteileremission von knapp 22% einen Extremfall dar, die Strahlteileremission von Flug 8 ist in ihrer Größenordnung typisch für die letzten Flüge. Für einen relativen Fehler in der Strahlteileremission von 5% ergibt sich ein Fehler in der Schwarzkörperphase von 11 bzw. 4 mrad. Der Fehler in der instrumentellen Phase ist kleiner als 3 mrad.

Bei einer relativen Strahlteileremission von weniger als 2%, wie sie typischerweise in den Kanälen 2 bis 4 auftritt, beträgt der Fehler in der Schwarzkörperphase maximal 20 mrad. Der dadurch verursachte Fehler im Schwarzkörperspektrum beträgt nach Gl. (6.7) nicht mehr als 0,04%. In der instrumentellen Phase hebt sich der Effekt durch die Vernachlässigung der Strahlteileremission nicht mehr vom Rauschen ab.

	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	
$\Delta\varphi_{BB, \text{rau}}$	0,4 - 0,6	0,4 - 1,5	2 - 4	14 - 20	mrad
$\Delta\varphi_{BB, \Delta BS}$	4 - 11	10 - 20	0 - 20	0 - 20	mrad
$\Delta\varphi_{instr, \text{rau}}$	0,4 - 0,6	0,4 - 1,5	2 - 4	14 - 20	mrad
$\Delta\varphi_{instr, \Delta BS}$	1 - 3	< 1	< 2	< 10	mrad

Tabelle 6.1: Typische Fehler in der Schwarzkörperphase und der instrumentellen Phase infolge des Rauschens und des systematischen Fehlers in der Strahlteileremission. Für die Fehler infolge des Rauschens wurden die typischen NESR-Werte aus Tabelle 5.1 zugrunde gelegt. Außerdem wurde von der Koaddition von 32 Interferogrammen und von einer spektralen Auflösung von 1 cm^{-1} ausgegangen. Die systematischen Fehler in der Strahlteileremission wurden für die Flüge 7 und 8 untersucht, können aber für alle Flüge zugrunde gelegt werden.

6.3.3 Phase des atmosphärischen Spektrums

Fehlerbeiträge für den Phasenfehler des atmosphärischen Spektrums sind die Fehler in der Bestimmung der instrumentellen Phase φ_{instr} aus Abschnitt 6.3.2 und Fehler in der Annahme, daß sich die instrumentelle Phase zeitlich nicht ändert. Eine weitere Fehlerquelle ist die Genauigkeit der statistischen Phasenkorrektur, die von der Linienstärke und dem Rauschen in den atmosphärischen Spektren abhängt.

Variabilität der instrumentellen Phase

In Abb. 6.4 sind für die Flüge 4 bis 10 die Differenzen der instrumentellen Phasenanteile aufeinanderfolgender Schwarzkörpersequenzen einer Pendelrichtung gezeigt. Diese geben sowohl das Rauschen als auch Drifteffekte der instrumentellen Phase wieder. Während in den Kanälen 1 und 2 systematische Änderungen der instrumentellen Phase auftreten, die deutlich über dem Niveau des Rauschens liegen, ist der Fehler in den Kanälen 3 und 4 im wesentlichen vom Rauschen dominiert. Der typische Gesamtfehler der instrumentellen Phase wird anhand von Abb. 6.4 für die Kanäle 1 und 2 auf 4 bzw. 10 mrad abgeschätzt. In den Kanälen 3 und 4 sind im allgemeinen keine systematischen Abweichungen vom Rauschen erkennbar. Die Ursache für die starken Änderungen in der instrumentellen Phase im Kanal 1 bei den Flügen 4 und 5 kann nachträglich nicht mehr geklärt werden, da sie mit einem Strahlteiler und einem Detektorsystem auftraten, die nur bis 1997 eingesetzt wurden. Da in den nachfolgenden Flügen keine so starke zeitliche Änderung der instrumentellen Phase mehr auftrat, wird für das bestehende System von einer stabileren instrumentellen Phase ausgegangen.

Für Flug 10 sind die Differenzen der aufeinanderfolgenden instrumentellen Phasen nochmals in Abb. 6.5 gezeigt. In diesem Flug beträgt die Variabilität der instrumentellen Phase 2 bis 8 mrad in den Kanälen 1 bis 4. Das Rauschen ist zum einen aufgrund der besseren *NESR* geringer, zum anderen wurde bei diesem Flug die spektrale Auflösung auf 2 cm^{-1} in Kanal 1 bzw. auf 4 cm^{-1} in den übrigen Kanälen verringert, da sich gezeigt hat, daß systematische Strukturen auch bei der geringeren Auflösung noch unverfälscht wiedergegeben werden.

Fehler der statistischen Phasenkorrekturmethode

Die Genauigkeit der statistischen Phasenkorrektur wurde in dieser Arbeit mit Hilfe von simulierten Spektren untersucht. Hierzu wurden simulierte, unverrauschte Spektren für die atmosphärischen Bedingungen von Flug 7 unter verschiedenen Elevationswinkeln verwendet. Bei Flug 7 waren die Temperaturen in der Stratosphäre sehr niedrig, so daß insbesondere bei den oberen Tangentenhöhen die Emissionslinien im Vergleich zu anderen Flügen sehr klein waren. Aufgrund der schwachen Linien ist die statistische Phasenkorrektur entsprechend schwierig, so daß eine Fehlerbetrachtung bei diesem Flug als Obergrenze für den Phasenfehler angenommen werden kann.

Aus den simulierten Spektren wurden mit Hilfe der Instrumentresponsivität und des Offsets unkalibrierte reelle Spektren berechnet. Als simuliertes imaginäres Spektrum diente ein stark geglätteter, gemessener Imaginärteil aus Flug 7. Aus diesen Real- und Imaginärteilen wurde mit einer FFT ein Interferogramm mit einem Phasenfehler $\varphi = 0$ erzeugt. Von diesem Interferogramm wurde dann mit der statistischen Phasenkorrekturmethode die Phase bestimmt, die im Idealfall wieder null ergeben müßte. Allerdings ist dies selbst bei unverrauschten Spektren nicht exakt der Fall. Mit dem Phasenkorrekturalgorithmus wird eine Phase von bis zu 1,6 mrad ermittelt.

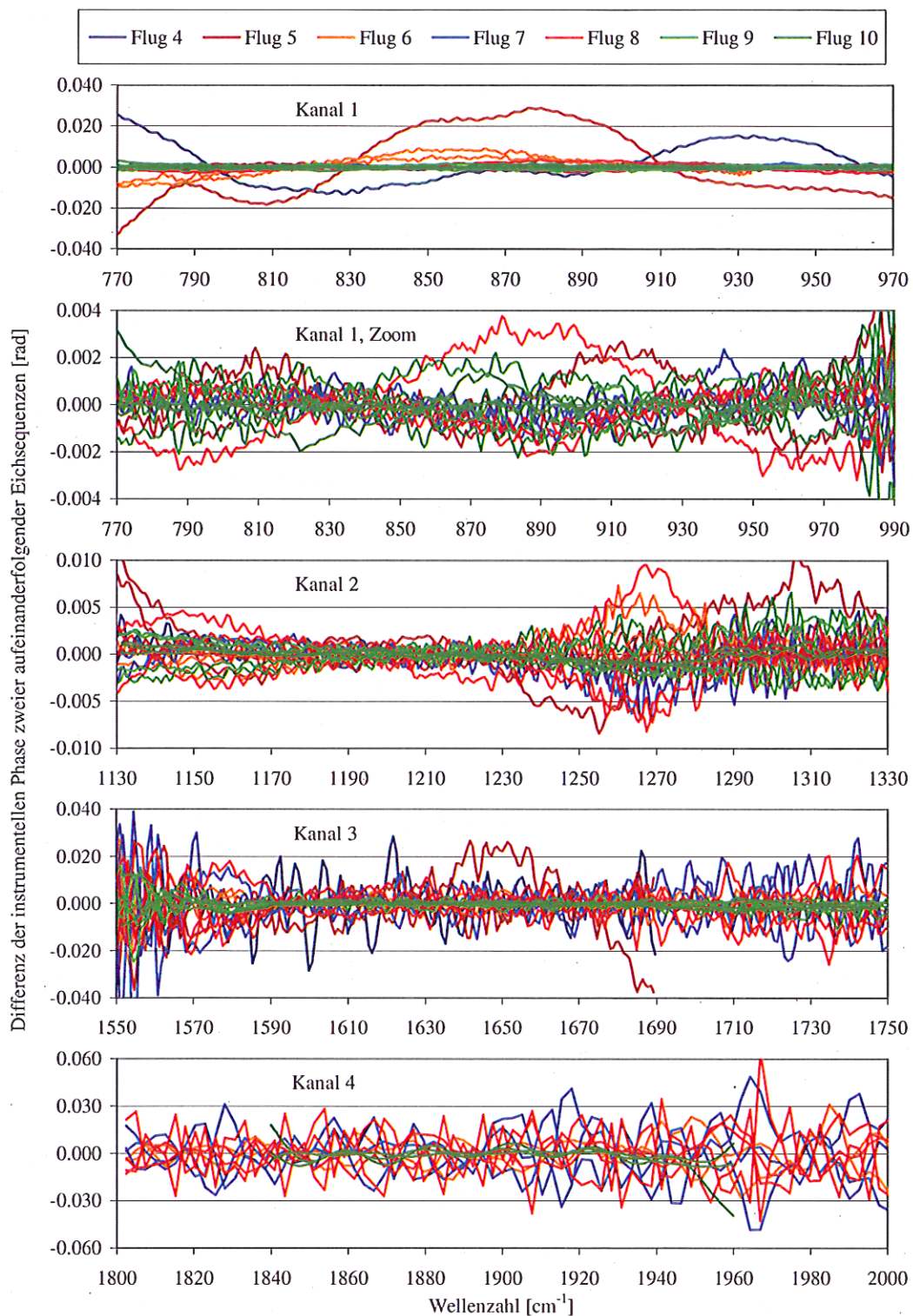


Abbildung 6.4: Differenzen der instrumentellen Phase aufeinanderfolgender Schwarzkörpermessungen in den Flügen 4 bis 10. Dargestellt sind alle vier Kanäle, Kanal 1 ist mit zwei verschiedenen Skalierungen gezeigt.

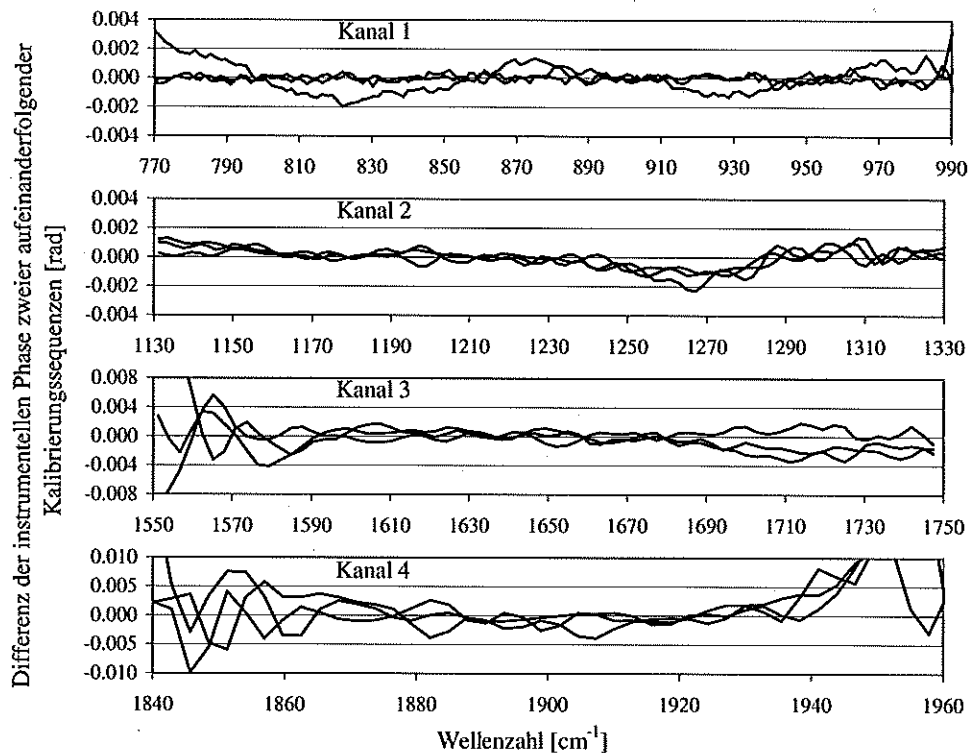


Abbildung 6.5: Differenzen der instrumentellen Phase aufeinanderfolgender Schwarzkörpermessungen in Flug 10.

Um die Phasenkorrektur unter realistischen Bedingungen zu testen, wurde sowohl zum Real- als auch zum Imaginärteil des Spektrums je ein normalverteiltes Rausch-Spektrum hinzugefügt, das mit einem Zufallsgenerator erzeugt wurde und dem Rauschen von Flug 7 entspricht. Die Rausch-Spektren von Real- und Imaginärteil haben die gleiche Standardabweichung, sind jedoch voneinander unabhängig. Um einen ausreichenden Datensatz für eine statistische Betrachtung zu erhalten, wurden für jede Situation 50 Interferogramme generiert und anschließend phasenkorrigiert. Aus den jeweils 50 Phasenspektren wurde zu jeder spektralen Stützstelle die Standardabweichung berechnet.

In Abb. 6.6 ist der Phasenfehler in Kanal 1 für alle Elevationswinkel einer Horizontsondierungssequenz, bestimmt nach obiger Methode, dargestellt. Die Zahl der koaddierten Interferogramme pro Tangentenhöhe ist in Tabelle 6.2 angegeben.

Elevationswinkel	-0,71°	-1,89°	-2,58°	-3,12°	-3,57°	-3,97°	-4,33°	-4,65°
Anzahl IFGs	16	15	10	11	8	7	5	8

Tabelle 6.2: Elevationswinkel und Zahl der koaddierten Interferogramme für Flug 7.

Der Phasenfehler hat für alle Elevationswinkel im Bereich um 800 cm^{-1} ein Minimum, am Rand des Spektralbereichs nimmt der Phasenfehler zu. Der Fehler ist für alle Elevationswinkel bis auf den obersten im Bereich bis 970 cm^{-1} kleiner als 11 mrad , für den obersten

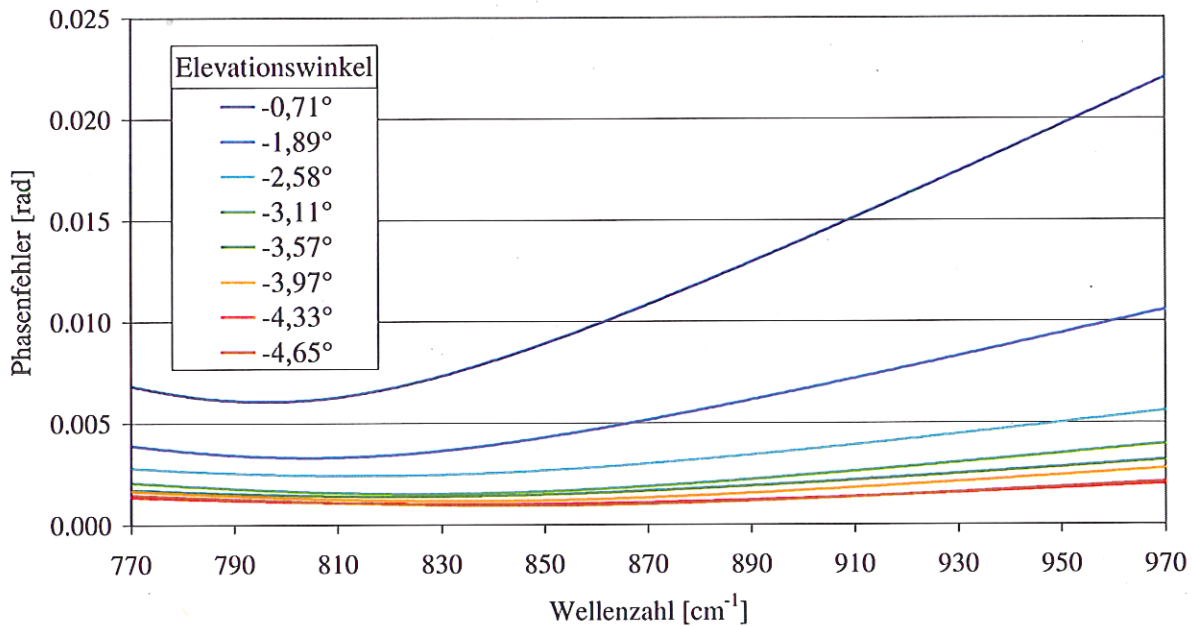


Abbildung 6.6: Fehler der statistischen Phasenkorrektur für simulierte Spektren in Kanal 1. Angegeben sind die 2σ -Werte der Phasenfehler. Die Signalstärke und das Rauschen entsprechen der Situation von Flug 7 für koaddierte Spektren. Die Anzahl der Koadditionen ist in Tabelle 6.2 angegeben.

Elevationswinkel beträgt er maximal 22 mrad. Im Bereich um 800 bis 850 cm^{-1} , in dem die Strahlteileremission besonders stark ist, ist der Phasenfehler kleiner als 5 mrad und damit in der Größenordnung, in der auch der Fehler der instrumentellen Phase liegt. In den übrigen Kanälen liegt der Phasenfehler für alle Tangentenhöhen unter 30 mrad.

Mit einer weiteren Simulationsrechnung wurde die Abhängigkeit des Fehlers der statistischen Phasenkorrektur vom Rauschen untersucht. Dazu wurde der Phasenfehler für drei Elevationswinkel ($-0,71^\circ$, $-3,11^\circ$ und $-4,65^\circ$ entsprechend der obersten, einer mittleren und der untersten Tangentenhöhe) berechnet, jeweils mit dem Rauschen eines Einzelspektrums und dem Rauschen für 4, 16 und 64 koaddierte Interferogramme. Das Rauschen halbiert sich also jeweils. Für die untersuchten Fälle halbiert sich mit dem Rauschen auch etwa der Phasenfehler, das heißt, durch Koaddition von n Interferogrammen wird der Phasenfehler um etwa \sqrt{n} kleiner. Da auch für die unverrauschten Spektren noch ein Phasenfehler auftritt, ist diese Proportionalität von Rauschamplitude und Phasenfehler nicht für beliebig große n gültig, innerhalb der Zahl der Koadditionen, die üblicherweise durchgeführt werden, kann sie aber als gute Näherung angenommen werden.

In der bisherigen Betrachtung blieb der instrumentelle Phasenfehler unberücksichtigt. Ein Fehler in der instrumentellen Phase kann durch die statistische Phasenkorrektur nicht behoben werden, da diese nur eine lineare Änderung der Phase ermöglicht. Daher wird erwartet, daß sich die Fehler der instrumentellen Phase und der statistischen Phase addieren. Es gibt aber

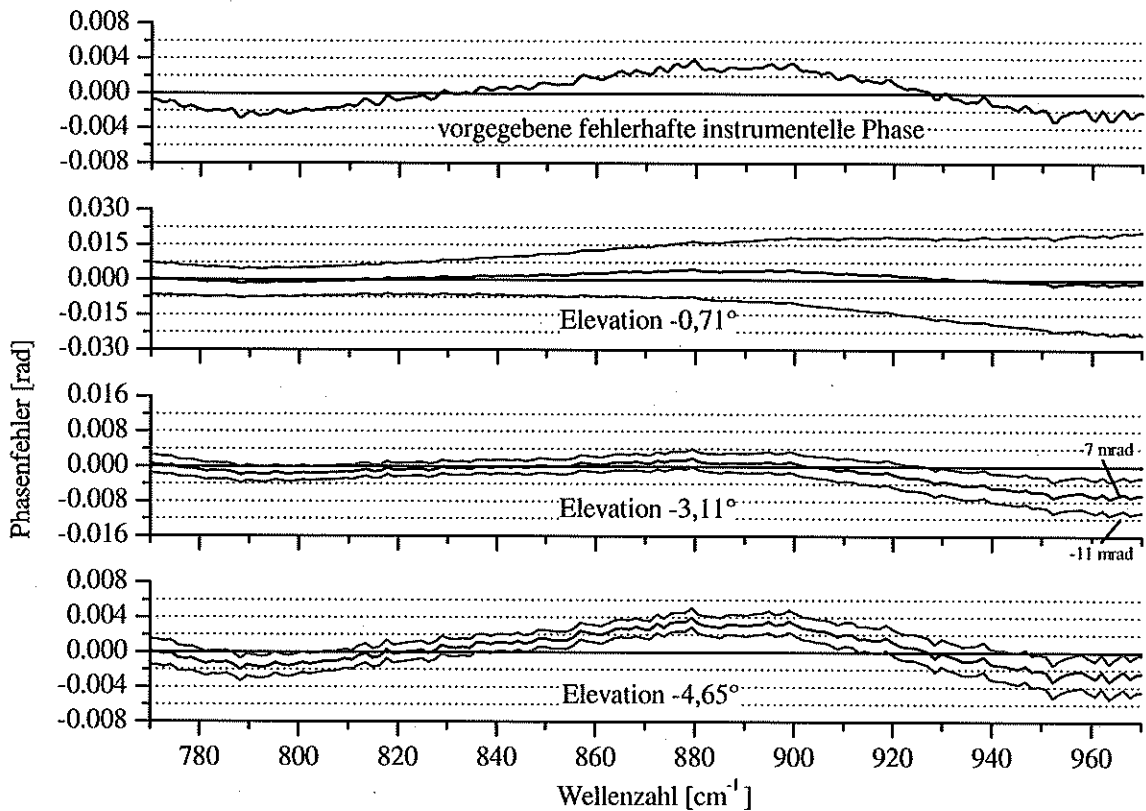


Abbildung 6.7: Phasenfehler bei einer falschen instrumentellen Phase, Kanal 1. Das Rauschen entspricht den koaddierten Spektren von Flug 7. In schwarz ist jeweils der Mittelwert aus 50 simulierten Phasenspektren gezeichnet, die grauen Kurven geben den 2σ -Bereich der Streuung der 50 Werte um den Mittelwert an.

auch Situationen, in denen ein Fehler in der instrumentellen Phase den Gesamtfehler zusätzlich verstärkt. Dies wird anhand von simulierten Spektren für Kanal 1 in Flug 7 gezeigt. In Abb. 6.7 ist das Ergebnis der statistischen Phasenkorrektur für drei Elevationswinkel gezeigt, wenn eine fehlerhafte instrumentelle Phase vorgegeben wurde. Der Fehler der instrumentellen Phase beträgt dabei maximal ± 4 mrad. Da die statistische Phasenkorrektur die Phase nur linear ändern kann, bleibt die Form der fehlerhaften instrumentellen Phase erhalten. Beim obersten Elevationswinkel ($-0,71^\circ$) wird der Gesamtfehler durch die Unsicherheit in der statistischen Phasenkorrektur dominiert (graue Linien), hier fällt der Fehler der instrumentellen Phase (schwarze Linie) nicht ins Gewicht. Beim untersten Elevationswinkel ($-4,65^\circ$) ist die Situation umgekehrt: Der Fehler wird vom Fehler der instrumentellen Phase dominiert. Eine Auffälligkeit zeigt sich beim mittleren Elevationswinkel $-3,11^\circ$. Hier wirkt sich die statistische Phasenkorrektur so aus, daß im Bereich kleiner Wellenzahlen (ca. $770\text{--}900\text{ cm}^{-1}$) der Beitrag des instrumentellen Phasenfehlers mit 2 mrad kleiner ist als der Fehler der vorgegebenen instrumentellen Phase. Dafür wird der Fehler durch die instrumentelle Phase bei 970 cm^{-1} im Mittel mit 7 mrad knapp doppelt so groß wie der Fehler der instrumentellen Phase. In diesem Fall ist daher der Gesamtfehler mit 11 mrad größer als die Summe des Fehlers der vorgegebenen instrumentellen Phase (4 mrad) und des Fehlers der statistischen Phasenkorrektur (4 mrad).

Um diesem Effekt Rechnung zu tragen, wird im Kanal 1 zum Fehler der instrumentellen Phase noch ein Fehler von 4 mrad als möglicher ungünstiger Einfluß auf die statistische Phasenkorrektur hinzugefügt („Einfluß der instrumentellen Phase“ in Tabelle 6.3). Im Kanal 2 konnte diese überproportionale Verstärkung des Gesamtphasenfehlers nicht nachgewiesen werden, in den Kanälen 3 und 4 liegen systematische Änderungen der instrumentellen Phase innerhalb des Rauschens und können daher keinen Einfluß wie in Kanal 1 ausüben.

Grenzen der statistischen Phasenkorrektur

Im vorigen Abschnitt wurde gezeigt, daß die statistische Phasenkorrektur im allgemeinen Ergebnisse liefert, deren Fehler unter 30 mrad liegen. Wenn jedoch die Linien in den Spektren zu klein werden, versagt diese Methode, da die Linien das Kriterium sind, mit dem die Strahlteileremission von den übrigen Strahlungsbeiträgen getrennt wird. Im Flug 7 waren die Emissionslinien bei den Weltraumspektren aufgrund einer sehr niedrigen Temperatur der Atmosphäre extrem schwach (Abb. 6.8). Die statistische Phasenkorrektur zeigt in diesem Fall sogar für die unverrauschte Simulation einen Fehler von 150 mrad, mit einem realistischen Rauschen (Koaddition von 24 Interferogrammen) liegt der Fehler bei 780 mrad. Der Fehler im kalibrierten Spektrum durch einen

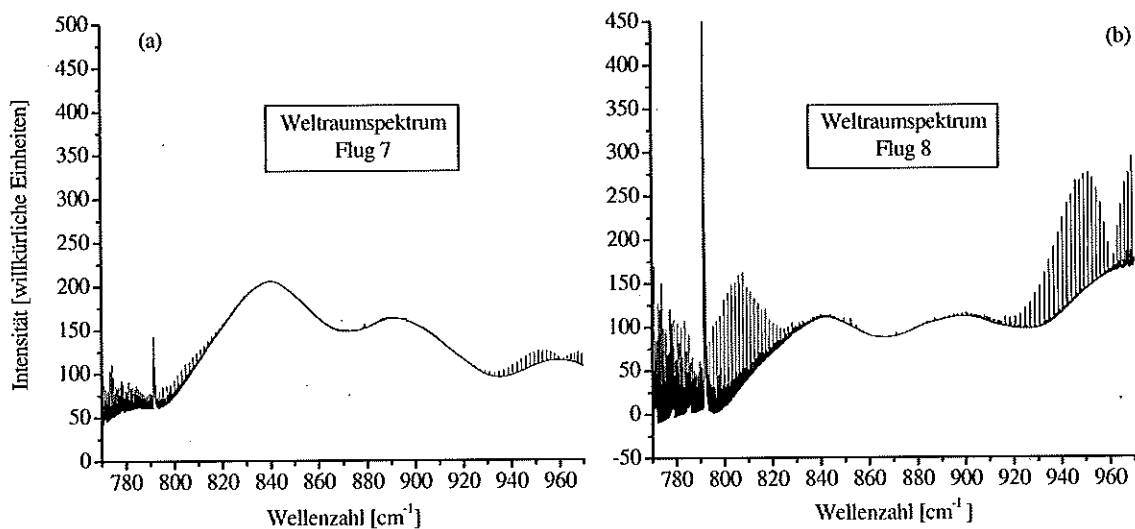


Abbildung 6.8: Simuliertes Weltraumspektrum von Kanal 1, Flug 7 (a) und Flug 8 (b).

so großen Phasenfehler würde den Gesamtfehler dominieren, daher muß hier zur Phasenkorrektur anders verfahren werden. Wenn das Instrument so stabil ist, daß sich die Phase innerhalb von einigen 10 Minuten nur wenig (10 bis 20 mrad) ändert, so kann zur Phasenkorrektur eine Phase verwendet werden, die aus einem atmosphärischen Spektrum in zeitlicher Nähe bestimmt wurde. Abb. 6.9 zeigt die Änderung der Phasen der Atmosphärenspektren einer Horizontsondierungssequenz von Flug 7. Da allen Phasenspektren dieselbe instrumentelle Phase zugrunde liegt, werden hier nur lineare Änderungen bestimmt. Innerhalb von 15 Minuten driftet die Phase bei diesem Flug um maximal 15 mrad, das heißt, wenn man für die Phasenkorrektur des Welt-

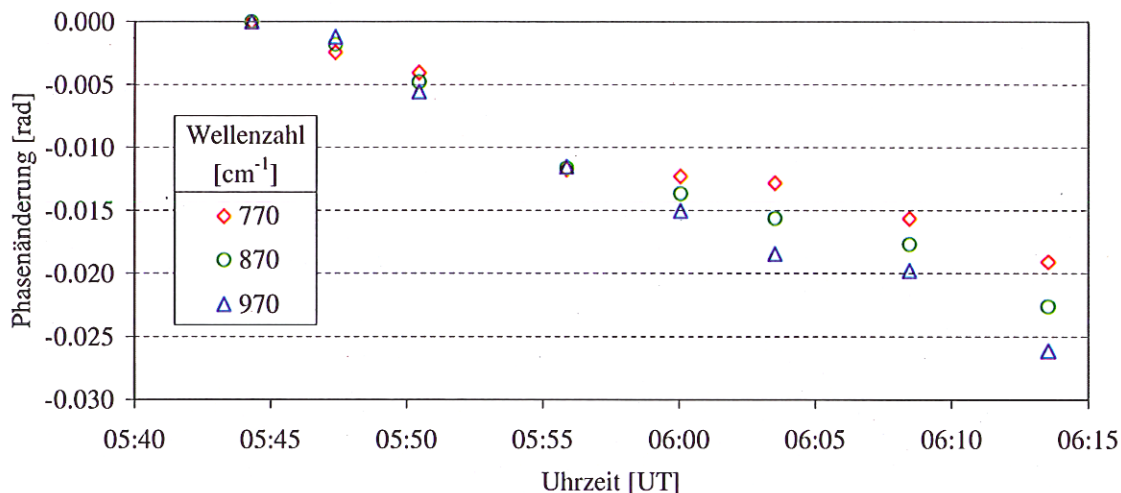


Abbildung 6.9: Änderung der Phasenspektren im Verlauf einer Horizontsondierungssequenz, Kanal 1. Gezeigt ist die Änderung der Phase für fünf verschiedene Wellenzahlen. Im Mittel ergibt sich eine Drift von ca. 50 mrad pro Stunde

raumspektrums die Phase eines atmosphärischen Spektrums verwendet, die zeitlich nicht mehr als 15 Minuten entfernt liegt und die selbst eine Unsicherheit von 10 mrad aufweist, dann beträgt der Gesamtphasenfehler für das Weltraumpektrum maximal 25 mrad. Eine Kontrolle, ob die Annahme der hinreichenden Phasenstabilität gerechtfertigt ist, besteht darin zu überprüfen, ob das Weltraumpektrum und das Spektrum der obersten Tangentenhöhe in den Spektralbereichen um 840 und 940 cm^{-1} in der Basislinie annähernd übereinstimmen.⁴ Eine weitere Möglichkeit ist, den Imaginärteil zu überprüfen, der ebenfalls nur langsam variiert. Unter Zuhilfenahme dieser Kriterien sollte es in jedem Fall möglich sein, den Phasenfehler für das Weltraumpektrum unter 25 mrad zu halten. Auch in den übrigen Kanälen ist es eventuell besser, die Phase des Weltraumpektrums aus einem in zeitlicher Nähe liegenden Atmosphärenspektrum zu bestimmen, als die statistische Phasenkorrektur direkt auf das Weltraumpektrum anzuwenden.

Diese Probleme treten nur in polaren Breiten bei sehr niedrigen Temperaturen auf, in mittleren Breiten ist der Phasenfehler der statistischen Phasenkorrektur auch für Weltraumpektren kleiner als 15 mrad.

Bestimmung des Fehlers der statistischen Phasenkorrektur mit der Fehlerfortpflanzungsrechnung

Theoretisch läßt sich der Fehler in der statistischen Phasenkorrektur auch direkt aus dem Rauschen von Real- und Imaginärteil bestimmen, indem die Gesetze der Fehlerfortpflanzung auf den Formalismus der statistischen Phasenkorrektur angewandt werden. Trieschmann hat diese Fehlerrechnung für die statistische Phasenkorrektur durchgeführt [Trieschmann, 2000], jedoch werden in seiner Rechnung diverse Näherungen gemacht. Daher wurde für diese Arbeit die unabhängige Methode mit Hilfe simulierter Spektren entwickelt, die in diesem Kapitel vorgestellt wurde. Ein Vergleich der beiden Methoden zur Fehlerbestimmung zeigt, daß der Fehler, der von Trieschmann

⁴Dieses Kriterium kann nur angewandt werden, wenn die oberste Tangentenhöhe in zeitlicher Nähe zum Weltraumpektrum gemessen wurde, da die Basislinie ebenfalls driftet.

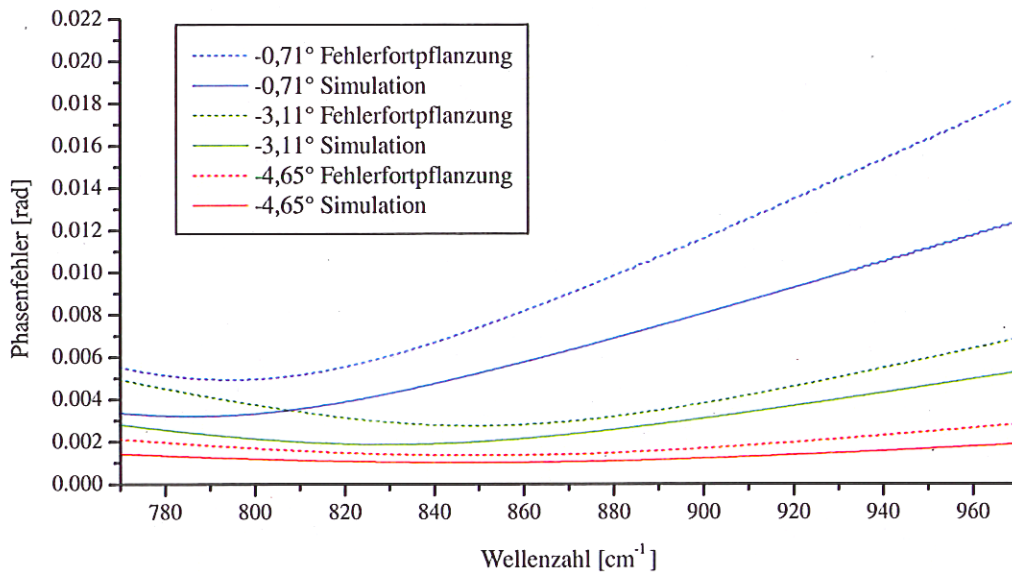


Abbildung 6.10: Vergleich der Berechnung des Phasenfehlers der statistischen Phasenkorrektur. Gezeigt sind drei Beispiele im Kanal 1 für drei verschiedene Elevationswinkel. Beim Elevationswinkel $-0,71^\circ$ entspricht das Rauschen 16 koaddierten Spektren, bei den beiden anderen Winkeln entspricht es Einzelspektren.

aus dem Rauschen der Spektren berechnet wird, in der Größenordnung dem 2σ -Wert entspricht, der sich aus der Phasenkorrektur der simulierten Spektren ergibt. Allerdings ist der von Trieschmann berechnete Wert immer größer⁵ (um 0 bis 80 %, im Mittel etwa um 30 %). Nachdem die Berechnung des Restfehlers der statistischen Phasenkorrektur mit einem unabhängigen Verfahren validiert wurde, kann der von Trieschmann berechnete Wert als großzügige Abschätzung für den 2σ -Wert des Phasenfehlers verwendet werden. Die Methode von Trieschmann hat den Vorteil, daß der Phasenfehler direkt aus dem gemessenen Interferogramm bestimmt wird und die aufwendigen Simulationsrechnungen entfallen.

6.3.4 Zusammenfassung des Phasenfehlers

Nachdem die einzelnen Beiträge zum Phasenfehler untersucht und quantifiziert wurden, wird in diesem Abschnitt der Gesamt-Phasenfehler bestimmt. Dieser setzt sich aus mehreren Beiträgen zusammen, wobei zwischen dem Phasenfehler der Schwarzkörperspektren und dem Fehler der atmosphärischen Spektren unterschieden werden muß.

⁵Eine Ausnahme stellen die Weltraumspektren bei einigen arktischen Flügen dar, in denen die statistische Phasenkorrektur aufgrund der extrem schwachen atmosphärischen Signatur einen großen Fehler liefert und nicht mehr angewandt werden kann. In dieser Situation ist der von Trieschmann angegebene Fehler zu klein.

Für Schwarzkörperspektren müssen folgende Fehler betrachtet werden:

- der Fehler der instrumentellen Phase infolge des Rauschens und
- der Fehler, der durch die Unsicherheit im Imaginärteil verursacht wird.

Für atmosphärische Spektren sind die Fehlerbeiträge:

- der Fehler der instrumentellen Phase infolge von Rauschen, Drifteffekten und einem fehlerbehafteten Strahlteilerspektrum und
- der Fehler der statistischen Phasenkorrektur.

Die einzelnen Fehlerbeiträge werden als Größtfehler arithmetisch addiert, da sie nicht unabhängig sind. In Kanal 1 hat sich gezeigt, daß unter ungünstigen Bedingungen der Gesamtfehler sogar größer als die Summe der einzelnen Fehlerbeiträge sein kann (vgl. Abb. 6.7). Um diesen Effekt zu berücksichtigen, wird in Kanal 1 ein zusätzlicher Fehler zum instrumentellen Phasenfehler hinzugefügt, der mit „Einfluß der instrumentellen Phase“ bezeichnet wird. In Tabelle 6.3 sind typische Ergebnisse für die einzelnen Fehlerbeiträge zusammengestellt. Da die Qualität der statistischen Phasenkorrektur stark von der Intensität der atmosphärischen Signatur in den Spektren abhängt, werden für den Fehler der statistischen Phasenkorrektur hier Werte für Flug 7 und Flug 8 angegeben, um den Unterschied zwischen Messungen in polaren und mittleren Breiten zu illustrieren. Für Flug 7 werden die Werte für die oberste Tangentenhöhe angegeben, da für die Weltraumpektren nicht direkt die statistische Phasenkorrektur angewandt wird, sondern Informationen über die Phasenstabilität genutzt werden. Für Flug 8 wird der Fehler der statistischen Phasenkorrektur für Weltraumpektren angegeben; für atmosphärische Spektren ist er entsprechend kleiner.

Auch hier wird wieder, zusätzlich zu den typischen Werten, eine Fehlerbetrachtung für Flug 10 aufgeführt.

Der Gesamtphasenfehler des Schwarzkörperspektrums setzt sich aus dem Rauschen und dem Restfehler in der Bestimmung der Strahlteileremission zusammen. Die Drifteffekte aus der instrumentellen Phase haben hier keinen Einfluß, da die Schwarzkörperphase nicht zeitlich interpoliert werden muß. Das Rauschen wurde gemäß Gl. (6.10) bzw. (6.11) mit den *NESR*-Werten aus Tabelle 5.1 berechnet. Unter „Strahlteileremission“ ist der Fehler aufgeführt, der infolge eines falschen bzw. vernachlässigten Strahlteilerspektrums in Gl. (6.5) entsteht. Dieser Fehler liefert nur einen Beitrag zum Schwarzkörperspektrum, bei atmosphärischen Spektren wird er größtenteils mit der statistischen Phasenkorrektur eliminiert.

Der Gesamtphasenfehler für Atmosphären- und Weltraumpektren setzt sich aus dem Fehler der instrumentellen Phase und dem Fehler aus der statistischen Phasenkorrektur zusammen. Der Fehler der instrumentellen Phase wurde aus Abb. 6.4 bzw. für Flug 10 aus Abb. 6.5 bestimmt und enthält sowohl Rauschen als auch Drifteffekte. Für den Fehler der statistischen Phasenkorrektur wurden für die Flüge 7 und 8 die Ergebnisse aus den Simulationsrechnungen herangezogen. Für Flug 10 wurde der Fehler aus der Fehlerfortpflanzungsrechnung gemäß Seite 61 berechnet. Der kleinere Wert bezieht sich etwa auf die Mitte des Spektralbereichs, der größere Wert wird am Rand erreicht. Für niedrigere Tangentenhöhen und stärkere Linien ist der Phasenfehler kleiner.

Der Phasenfehler liegt im allgemeinen im Bereich von 10 bis 50 mrad. Für Schwarzkörperspektren wird der Phasenfehler hauptsächlich von der Unsicherheit in der Strahlteileremission bestimmt. Bei den atmosphärischen Messungen dominiert im polaren Winter für große Tangentenhöhen

der Fehlerbeitrag der statistischen Phasenkorrektur, in mittleren Breiten ist der Einfluß durch die statistischen Phasenkorrektur und durch die Drift in der instrumentellen Phase von der gleichen Größenordnung.

Für Flug 10 ist der Phasenfehler im Schwarzkörperspektrum kleiner als bei einer typischen Situation, da bei diesem Flug die Strahlteileremission vergleichsweise gering war. Der Gesamtfehler für atmosphärische Spektren liegt trotz der arktischen Temperaturen im Bereich der Phasenfehler für Flug 8 und ist um ca. einen Faktor 2 besser als bei Flug 7, was auf das bessere S/N und stärkere Linien als im Flug 7 zurückzuführen ist.

Für den Fehler in den Weltraumspektren wurde zum Phasenfehler der obersten Tangentenhöhe noch die Phasenänderung hinzuaddiert, die aufgrund der zeitlichen Drift zwischen Atmosphärenmessung und Weltraummessung auftreten kann. Die Drift wurde analog zu Abb. 6.9 bestimmt. Auch für die Weltraumspektren bleibt hier der Gesamtfehler unter 50 mrad.

Die Auswirkung der Phasenfehler auf die kalibrierten Spektren wird in Kap. 8 diskutiert.

Fehlerquelle	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	Einheit
Schwarzkörperspektren, typische Situation					
Rauschen $\Delta\varphi_{BB,rau}$	0,4 - 0,6	0,4 - 1,5	2 - 4	14 - 20	mrاد
Strahlteileremission $\Delta\varphi_{BB,\Delta BS}$	11	10 - 20	0 - 20	0 - 20	mrاد
Gesamt, BB	12	12 - 22	12 - 24	14 - 40	mrاد
Atmosphärische Spektren Flug 7					
instrumentelle Phase φ_{instr}	4	10	4	20	mrاد
Einfluß d. instr. Phase	4	-	-	-	mrاد
stat. Phasenkor.	6 - 22	11 - 43	7 - 43	-	mrاد
Gesamt	14 - 30	21 - 53	11 - 50	20	mrاد
Weltraumpektren Flug 8					
instrumentelle Phase φ_{instr}	4	10	4	20	mrاد
Einfluß d. instr. Phase	4	-	-	-	mrاد
stat. Phasenkor.	4 - 9	5 - 13	6 - 7	3 - 5	mrاد
Gesamt	12 - 17	15 - 23	17 - 18	23 - 25	mrاد
Flug 10					
Schwarzkörperspektren					
Rauschen $\Delta\varphi_{BB,rau}$	0,3 - 0,4	0,2 - 0,5	0,5 - 0,6	1 - 3	mrاد
Strahlteileremission $\Delta\varphi_{BB,\Delta BS}$	3	10	5	0	mrاد
Gesamt, BB	4	11	6	3	mrاد
Atmosphärische Spektren Flug 10					
instrumentelle Phase φ_{instr}	2	3	4	5	mrاد
Einfluß d. instr. Phase	2	-	-	-	mrاد
stat. Phasenkor.	4 - 9	6 - 8	6 - 13	-	mrاد
Gesamt, atm	8 - 13	9 - 11	10 - 17	5	mrاد
Driftfehler für DS	3 - 15	11 - 15	2 - 25	-	mrاد
Gesamt, DS	11 - 28	20 - 26	12 - 42	5	mrاد

Tabelle 6.3: Beiträge zum Phasenfehler für Schwarzkörperspektren und für atmosphärische Spektren für Messungen im polaren Winter und in mittleren Breiten. In Kanal 4 ist keine statistische Phasenkorrektur erforderlich, wenn keine Strahlteileremission meßbar ist. Weitere Erläuterungen siehe Text.

Kapitel 7

Detektor-Nichtlinearität

In diesem Kapitel wird das Linearitätsverhalten des Detektors eingehend untersucht. Zunächst wird erläutert, wie sich eine Nichtlinearität des Detektors äußert. In Abschnitt 7.2 wird ein Verfahren vorgestellt, das es erlaubt, die Parameter der Nichtlinearität aus Interferogrammen, die während des Fluges gemessen wurden, abzuleiten und den Einfluß der Nichtlinearität auf die Kalibrierung zu korrigieren. Abschließend wird die Genauigkeit des Verfahrens untersucht und der Restfehler der Nichtlinearitätskorrektur angegeben.

7.1 Grundlagen zur Nichtlinearität

7.1.1 Auswirkung auf die Kalibrierung

Die Zweipunkt-Kalibrierung nach Gl. (3.6) setzt voraus, daß die Responsivität des Systems konstant ist. Labormessungen mit dem Detektorsystem unter Verwendung eines Schwarzkörpers variabler Temperatur als Strahlungsquelle haben jedoch gezeigt, daß die Detektorspannung nicht direkt proportional zur einfallenden Strahlungsleistung ist. Die Detektorresponsivität R ist gegeben durch das Verhältnis der Änderung der Ausgangsspannung U zur Änderung der auf den Detektor fallenden Strahlungsleistung P :

$$R = \frac{dU(P)}{dP} \quad (7.1)$$

Die Kurve $U(P)$ steigt zwar monoton, die Responsivität nimmt aber mit steigender Strahlungsleistung ab. Was bedeutet dies nun für die gemessenen Interferogramme? In Abb. 7.1 sind die Auswirkungen auf eine Weltraum- und eine Schwarzkörpermessung (oder allgemeiner: auf eine Messung bei niedriger und eine bei hoher Strahlungsleistung) schematisch dargestellt. Die Abbildung illustriert einen stark nichtlinearen Verlauf der Detektorspannung in Abhängigkeit von der Strahlungsleistung. Die beiden Rauten markieren jeweils die mittlere Strahlungsleistung für eine Weltraum- und eine Schwarzkörpermessung, $(P_{DS,0}, U_{DS,0})$ und $(P_{BB,0}, U_{BB,0})$. Diese entsprechen jeweils dem Gleichlichtanteil im Interferogramm (vgl. Abschnitt 2.1, Gl. (2.1)). Die grauen Striche zeigen die mittlere Responsivität der Weltraum- bzw. Schwarzkörpermessung in dem Bereich, der von der modulierten Strahlung (auf der Abszisse) bzw. dem gemessenen Interferogramm (auf der Ordinate) überstrichen wird.

Bei der Schwarzkörpermessung ist die mittlere Strahlungsleistung auf den Detektor größer als bei der Weltraummessung, und entsprechend ist die Responsivität kleiner. Trotz der großen

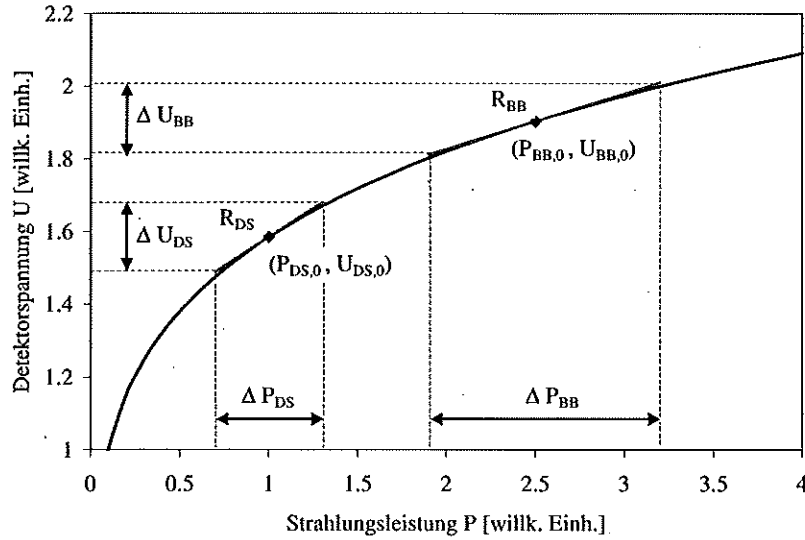


Abbildung 7.1: Prinzipzeichnung Nichtlinearität. Zur Verdeutlichung des Effekts ist die Nichtlinearität stark übertrieben gezeichnet. R_{DS} und R_{BB} bezeichnen die Steigungen an den Punkten $(P_{DS,0}, U_{DS,0})$ und $(P_{BB,0}, U_{BB,0})$.

Änderung der Strahlungsleistung ΔP_{BB} innerhalb des Interferogramms ist daher der Dynamikbereich im gemessenen Interferogramm ΔU_{BB} nur wenig größer als bei der Weltraummessung. Das Verhältnis der Intensitäten in den gemessenen Spektren S_{BB}/S_{DS} ist daher kleiner als das Verhältnis der Strahlungsleistung P_{BB}/P_{DS} . Die Intensität der Atmosphärenmessungen liegt (außer bei sehr niedrigen Tangentenhöhen) zwischen der Intensität der Weltraum- und der Schwarzkörpermessung. Für die Interferogramme $IFG_{BB}(x)$ und $IFG_{DS}(x)$ gilt näherungsweise:

$$\begin{aligned} IFG_{BB}(x) &= (U_{BB}(x) - U_{BB,0}) = R_{BB} \cdot (P_{BB}(x) - P_{BB,0}) \\ IFG_{DS}(x) &= (U_{DS}(x) - U_{DS,0}) = R_{DS} \cdot (P_{DS}(x) - P_{DS,0}) \end{aligned} \quad (7.2)$$

Wie aus Abb. 7.1 ersichtlich ist, stimmen die Gleichungen (7.2) nicht exakt, da hier der Verlauf $U(P)$ innerhalb des Dynamikbereichs eines Interferogramms linear angenähert wird. Die Auswirkungen des nichtlinearen Kurvenverlaufs innerhalb eines Interferogramms werden in Abschnitt 7.1.2 diskutiert. Für eine – innerhalb der linearen Näherung – korrekte Zuordnung von spektraler Intensität zu Strahldichte mit Hilfe der Zweipunkt-Kalibrierung (3.6) muß die Responsivität für alle Interferogramme gleich sein. Da dies für die gemessenen Interferogramme offensichtlich nicht erfüllt ist, müssen sie auf die gleiche Responsivität R_0 normiert werden:¹

$$IFG_{kor, BB}(x) = \frac{R_0}{R_{BB}} \cdot IFG_{BB}(x) = F_{kor, BB} \cdot IFG_{BB}(x) \quad (7.3)$$

$$IFG_{kor, DS}(x) = \frac{R_0}{R_{DS}} \cdot IFG_{DS}(x) = F_{kor, DS} \cdot IFG_{DS}(x) \quad (7.4)$$

$$IFG_{kor, atm}(x) = \frac{R_0}{R_{atm}} \cdot IFG_{atm}(x) = F_{kor, atm} \cdot IFG_{atm}(x) \quad (7.5)$$

¹Ob diese Korrektur im Interferogramm- oder im Spektralraum durchgeführt wird, ist wegen der Linearität der Fouriertransformation gleichwertig (vgl. Anhang A).

Hierbei kann R_0 frei gewählt werden. Um diese Korrektur durchzuführen, muß für jedes Interferogramm die mittlere Responsivität bestimmt werden. Wenn alle Interferogramme auf die gleiche Responsivität normiert sind, kann die Zweipunkt-Kalibrierung (3.6) angewandt werden.

7.1.2 Auswirkung der Nichtlinearität innerhalb eines Interferogramms

Bei der Interferogrammaufnahme wird nicht das gesamte Spannungssignal gemessen, sondern nur der Wechselspannungsanteil, der dem Wechsellichtanteil entspricht. Das Interferogramm ist also AC-gekoppelt (AC: engl. alternate current). Der Gleichlichtanteil entspricht dem Gleichspannungs- oder DC-Wert (DC: engl. direct current), der separat gemessen wird.

Wie schon erwähnt, ist auch im Dynamikbereich eines Interferogramms der Verlauf $U(P)$ nicht streng linear. Für das AC-gekoppelte Interferogramm IFG läßt sich der funktionale Zusammenhang $IFG(P)$ als Taylorentwicklung um $P = P_0$ darstellen, wobei P_0 der Gleichlichtanteil des Interferogramms (vgl. Abschnitt 2.1) ist:²

$$IFG(P) \approx \underbrace{IFG(P_0)}_{=0} + \underbrace{\frac{d IFG}{dP}}_{c_1} (P - P_0) + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{d^2 IFG}{dP^2}}_{c_1^2 \cdot c_2} (P - P_0)^2 + \underbrace{\frac{1}{6} \frac{d^3 IFG}{dP^3}}_{c_1^3 \cdot c_3} (P - P_0)^3 \quad (7.6)$$

Die Vorfaktoren sind Konstanten, deren Bezeichnungen so gewählt wurden, daß Gl. (7.8) eine einfache Form erhält. Zur Vereinfachung wird das (fiktive) Interferogramm eines linearen Detektors eingeführt mit:

$$U_{lin} = c_0 + c_1 \cdot P \quad \text{und} \quad IFG_{lin}(P) = c_1 \cdot (P - P_0) \quad (7.7)$$

mit den Konstanten c_0 und c_1 und dem Gleichlichtanteil P_0 .

Mit Gl. (7.7) kann man Gl. (7.6) umschreiben zu:

$$IFG(P) \approx IFG_{lin}(P) + c_2 \cdot IFG_{lin}^2(P) + c_3 \cdot IFG_{lin}^3(P) \quad (7.8)$$

Für das gemessene Spektrum $S(\kappa)$ erhält man aus Gl. (7.8) durch Fouriertransformation unter Verwendung des Faltungssatzes (Anhang A):

$$S(\kappa) \approx S_{lin}(\kappa) + c_2 \cdot S_{lin}(\kappa) \otimes S_{lin}(\kappa) + c_3 \cdot S_{lin}(\kappa) \otimes S_{lin}(\kappa) \otimes S_{lin}(\kappa) \quad (7.9)$$

Das Spektrum, das man im Falle eines linearen Detektors erhalten würde, wird also mit sich selbst gefaltet. Der Effekt der Faltung wird in Abb. 7.2 am Beispiel eines Rechteck-Spektrums demonstriert.

Da für die Faltung auch der negative Wellenzahl-Bereich relevant ist, ist dieser hier ebenfalls gezeigt. Der oberste Graph zeigt das ursprüngliche Spektrum, entsprechend dem ersten Term von Gl. (7.9). Der zweite Graph zeigt den quadratischen Term, der dritte den kubischen. Der vierte Graph zeigt das durch die Nichtlinearität verzerrte Spektrum, das sich aus der Summe der oberen drei Terme zusammensetzt.

Die quadratischen Artefakte zeigen in drei Bereichen ein von null verschiedenes Signal. Diese Bereiche liegen bei der doppelten Wellenzahl des ursprünglichen Spektrums sowie symmetrisch zu $\kappa = 0$ und sind jeweils doppelt so breit wie das ursprüngliche Spektrum. Die Bereiche des kubischen Artefakts erscheinen in dreimal so breiten Bereichen wie das ursprüngliche Spektrum. Sie liegen bei der dreifachen Wellenzahl sowie symmetrisch zur mittleren Wellenzahl des Spektrums.

²Die Reihenentwicklung wird hier nach dem dritten Glied abgebrochen, da sich gezeigt hat, daß bei MIPAS-B2-Spektren Beiträge höherer Ordnungen nicht mehr zu erkennen sind.

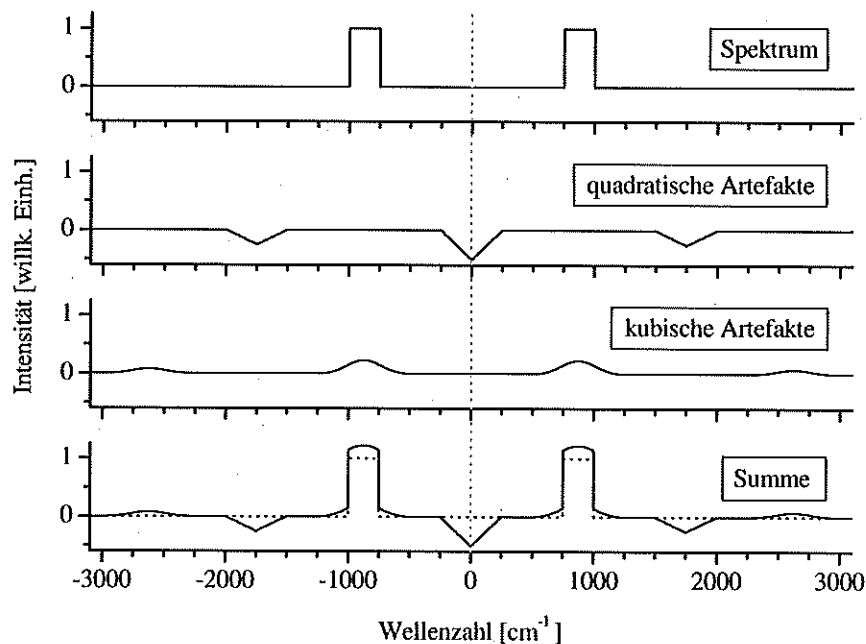


Abbildung 7.2: Auswirkung eines nichtlinearen Detektors auf das gemessene Spektrum. Die quadratischen Artefakte entstehen durch die Faltung des unverfälschten Spektrums mit sich selbst ($S \otimes S$), die kubischen Artefakte entstehen durch Faltung der quadratischen Artefakte mit dem Spektrum ($(S \otimes S) \otimes S$). Bei den mit MIPAS-B2 gemessenen Spektren ist der Vorfaktor c_2 aus Gl. 7.9 immer negativ, daher sind die quadratischen Artefakte negativ gezeichnet. Im untersten Bild ist neben der Summe aus linearem, quadratischem und kubischem Beitrag gestrichelt auch das ursprüngliche Spektrum eingezeichnet.

In dem Beispiel aus Abb. 7.2, das an ein Schwarzkörperspektrum von Kanal 1 angelehnt ist, ergeben sich damit die Grenzen aus Tabelle 7.1 (nur für positive Wellenzahlen, für negative gilt Entsprechendes). Anhand dieser Grenzen zeigt sich, daß das quadratische Artefakt vollständig außerhalb des nominellen Spektralbereichs liegt. Dies gilt für alle bei MIPAS-B2 verwendeten Spektralkanäle.³ Damit wird das Spektrum durch das quadratische Artefakt auch nicht verfälscht. Allerdings ist bei der Datenreduktion (Abschnitt 2.2.1) dafür Sorge zu tragen, daß sämtliche Signale außerhalb des nominellen Spektralbereichs durch ein digitales Filter unterdrückt werden, um Fehler durch Aliasing zu vermeiden.⁴

Beim kubischen Artefakt ist die Situation anders. Neben dem Beitrag bei der dreifachen Wellenzahl, der ebenfalls nicht stört, gibt es noch einen Beitrag im nominellen Spektralbereich, der dem eigentlichen Spektrum überlagert ist. Die Analyse der MIPAS-B2-Spektren zeigt jedoch, daß dieser Beitrag in der Flugsituation kleiner als 0,12% ist. Er wird daher nicht korrigiert, sondern lediglich bei der Fehlerbetrachtung (Abschnitt 7.3.5) berücksichtigt.

³Nur wenn die Kanäle so breit wären, daß $2k_{min} < k_{max}$ wäre, gäbe es eine Überlagerung von Spektrum und quadratischem Artefakt.

⁴Die Aliasing-Effekte, die trotz der Digitalen Filterung auftreten, machen im Spektrum weniger als 0,1% des Signals aus und müssen nicht weiter beachtet werden.

Signatur	Wellenzahlbereich [cm ⁻¹]		
Spektrum		750 - 1000	
quadratisches Artefakt	0 - 250		1500 - 2000
kubisches Artefakt		500 - 1250	2250 - 3000

Tabelle 7.1: Spektrale Bereiche, in denen Artefakte auftreten, am Beispiel von Kanal 1.

Vor der Anwendung der Kalibrierungsgleichung (3.6) werden daher gemäß den Überlegungen aus Abschnitt 7.1.1 alle Spektren auf die gleiche Responsivität skaliert, eine Korrektur der nichtlinearen Verzerrung innerhalb eines Interferogramms ist nicht erforderlich.

7.2 Quantifizierung der Nichtlinearität

7.2.1 DC-gekoppelte Messungen

Zur Korrektur der Nichtlinearität ist es erforderlich, zu jedem Punkt der Kurve $U(P)$ (Abb. 7.1) die Responsivität $R(P) = \frac{dU}{dP}$ zu kennen. Das Nächstliegende ist daher, mit einer bekannten Strahlungsquelle im Labor die Abhängigkeit $U(P)$ zu vermessen, durch die Meßpunkte eine analytische Funktion zu legen und diese zu differenzieren. Der Mittelwert U_0 zu jedem Interferogramm ist sein DC-Wert, der im Rahmen der Housekeeping-Daten (Abschnitt 3.1.5) erfaßt wird. Zu diesem Wert kann nun $P_0(U_0)$ bestimmt werden und damit $R(P_0)$.

Dieses Verfahren wurde für MIPAS-B2-Flüge von 1998 bis 2001 angewandt. In der Praxis zeigte sich jedoch, daß sich mit diesem Verfahren die Responsivität aus diversen Gründen nicht mit der gewünschten Genauigkeit bestimmen läßt:

- Es ist schwierig, im Labor so niedrige Schwarzkörpertemperaturen zu erreichen, daß eine Strahlungsintensität vergleichbar mit der eines Weltraumspektrums vorliegt.
- Wie in Abschnitt 5.3 beschrieben, reagiert die Responsivität sehr empfindlich auf kleine Änderungen der Detektortemperatur. Im allgemeinen ist die Detektortemperatur bei der Labormessung nicht exakt gleich der Temperatur im Flug, so daß sich die Ergebnisse der Labormessung nur bedingt auf die Flugsituation übertragen lassen.
- Ein weiteres Problem stellt die analytische Funktion dar, die durch die Meßpunkte gelegt wird. Es hat sich gezeigt, daß eine Kurve der Form $y = a + b \cdot x^c$ mit den drei Parametern a , b und c den Kurvenverlauf über weite Bereiche recht gut wiedergibt, andererseits ist auch die Beschreibung der Kurve mit einem Polynom zweiten, dritten oder vierten Grades sinnvoll (entsprechend einer Taylorentwicklung der unbekanntenen Kurve $U(P)$). Insbesondere bei einem Polynom (aber auch bei der oben genannten Funktion) hängt die so bestimmte Responsivität jedoch teilweise sehr stark vom gewählten Meßbereich ab, durch den die analytische Kurve gelegt wird.
- Die Bestimmung der Responsivität direkt aus den Meßpunkten über den Differenzenquotienten ist ebenfalls sehr ungenau, weil bei kleinen Differenzen Rauschfehler große Auswirkungen haben. Auch eine Glättung der Meßkurve durch Mittelung über mehrere Meßpunkte vor der Bildung des Differenzenquotienten liefert kein zufriedenstellendes Ergebnis.

Ein weiterer Nachteil dieser Methode ist der vergleichsweise große Meß- und Zeitaufwand. Für die Labormessung muß der Kryostat aus dem Instrument ausgebaut werden, und die Messung selbst dauert knapp zwei Tage.

Um bei der Quantifizierung der Nichtlinearität eine höhere Genauigkeit zu erzielen, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Verfahren ausgearbeitet, das es ermöglicht, die Nichtlinearität im Flug zu bestimmen und die Responsivität mit hoher Genauigkeit zu ermitteln. Dieses Verfahren nutzt die Nichtlinearitäts-Artefakte in den Spektren und wird im folgenden Abschnitt vorgestellt.

7.2.2 Analyse unreduzierter Interferogramme

Wie in Abschnitt 7.1.2 dargestellt, führt die Nichtlinearität des Detektors zu einer Verzerrung des Interferogramms und zu Artefakten in den gemessenen Spektren. Aus der Größe der Artefakte kann der Verlauf der Kurve $U(P)$ abgeleitet werden (siehe z.B. [Abrams et al., 1994, Hase, 2000]). Die Artefakte können nur gemessen werden, wenn die Datenreduktion (Abschnitt 2.2.1) ausgeschaltet ist und das mit einem Stützstellenabstand $\Delta x = 633$ nm abgetastete Interferogramm vollständig übertragen wird. Ein solches Interferogramm wird unreduziertes Interferogramm genannt.

Bis 2001 wurde im MIPAS-Ballonexperiment eine Interferometerelektronik verwendet, in der das Aufnehmen unreduzierter Interferogramme im Flug nicht vorgesehen war. Das Messen unreduzierter Interferogramme war nur im Labor mit einer speziellen Testsoftware möglich, die auch nur eingeschränkt funktionierte. Daher stehen aus dem Zeitraum vor 2001 nur wenige Messungen unreduzierter Interferogramme zur Verfügung. Seit Flug 10 wird eine neue Interferometerelektronik eingesetzt, die es zusammen mit der angepassten Onboard-Software ermöglicht, in einem bestimmten Meßmodus auch während des Fluges unreduzierte Interferogramme aufzunehmen und zu übertragen. Damit sind die technischen Voraussetzungen erfüllt, um die Nichtlinearitätsparameter direkt aus Spektren abzuleiten, die unter Flugbedingungen gemessen wurden, und man umgeht das Problem, daß sich die Labormessungen nur eingeschränkt auf die Flugsituation übertragen lassen.

Ausgangsbasis für die Quantifizierung der Nichtlinearität ist Gl. (7.8). Das gemessene Interferogramm wird mit IFG benannt, und IFG_{lin} bezeichnet ein Interferogramm, das man mit einem linearen Detektor gemessen hätte. Dessen Fouriertransformierte S_{lin} darf entsprechend auch keine Artefakte zeigen. Nun wird aus dem gemessenen Interferogramm IFG und zwei Startwerten für c_2 und c_3 ein korrigiertes Interferogramm IFG_{kor} berechnet mit:⁵

$$IFG = IFG_{kor} + c_2 \cdot IFG_{kor}^2 + c_3 \cdot IFG_{kor}^3 \quad (7.10)$$

IFG_{kor} wird anschließend fouriertransformiert. Von dem Spektrum S_{kor} wird die Größe des quadratischen Artefakts (das heißt die Fläche zwischen der Kurve und der Nulllinie in dem Bereich, in dem das quadratische Artefakt erwartet wird) berechnet. Nun wird mit einem Minimierungsalgorithmus⁶ zunächst der Parameter c_2 so lange variiert, bis das quadratische Artefakt im Spektrum S_{kor} minimal ist. Mit dem auf diese Weise gefundenen Wert für c_2 und einem Startwert für c_3 wird dann die Größe des kubischen Artefakts von S_{kor} berechnet und analog c_3 so lange variiert, bis das kubische Artefakt minimal ist. Mit dem neuen Wert für c_3 wird in einem nächsten

⁵Die Lösung einer kubischen Gleichung ist in Anhang E angegeben.

⁶Minimum-Suche mit dem Goldenen Schnitt, siehe z.B. [Press et al., 1988].

Iterationsschritt wieder das quadratische Artefakt durch Variation von c_2 minimiert usw. Im allgemeinen sind zwei Iterationen ausreichend; um die Konvergenz des Verfahrens zu gewährleisten, werden bei der Rechnung daher vier Iterationsschritte durchgeführt.⁷

Es mag verwunderlich erscheinen, daß der Parameter c_2 einen Einfluß auf das kubische Artefakt hat und der Parameter c_3 das quadratische beeinflusst, da nach Gl. (7.9) c_2 nur im quadratischen und c_3 nur im kubischen Term erscheint. Gl. (7.9) bezieht sich auf das Spektrum eines linearen Interferogramms S_{lin} , jedoch ist das berechnete Interferogramm zum Spektrum S_{kor} – in Abhängigkeit der verwendeten Werte für c_2 und c_3 – während des Minimierungsverfahrens im allgemeinen nicht linear. Erst wenn S_{kor} keine Nichtlinearitätsartefakte mehr aufweist, sind die beiden Artefakte und ihre Parameter voneinander entkoppelt.

Anstelle des iterativen Verfahrens wäre es auch denkbar, c_2 und c_3 simultan in einem zweidimensionalen Minimierungsverfahren zu bestimmen. Aufgrund der sehr unterschiedlichen Größe der quadratischen und der kubischen Artefakte führt dieses Verfahren aber leicht zu großen Fehlern im Parameter c_3 .

Wenn die Artefakte im korrigierten Spektrum S_{kor} minimiert sind, dann ist – im Rahmen der kubischen Näherung – $IFG_{kor} = IFG_{lin}$. Über die beiden Parameter c_2 und c_3 ist mit Gl. (7.8) und der Beziehung $IFG = U - U_0$ der Zusammenhang zwischen der gemessenen Detektorspannung U und der Spannung eines linearen Detektors U_{lin} gegeben:

$$\begin{aligned} U - U_0 &= U_{lin} - U_0 + c_2(U_{lin} - U_0)^2 + c_3(U_{lin} - U_0)^3 \\ U &= U_{lin} + c_2(U_{lin} - U_0)^2 + c_3(U_{lin} - U_0)^3 \end{aligned} \quad (7.11)$$

Der gesuchte Zusammenhang $U(P)$ ist – innerhalb des Bereichs, in dem die kubische Näherung gültig ist – über Gl. (7.7) gegeben:

$$U(P) = c_0 + c_1 P + c_1^2 c_2 (P - P_0)^2 + c_1^3 c_3 (P - P_0)^3 \quad (7.12)$$

Für die Berechnung der Responsivität $R = \frac{dU}{dP}$ wird die Strahlungsleistung P nicht explizit benötigt; die Responsivität läßt sich auch mit den Gleichungen (7.11) und (7.7) als Funktion von U_{lin} ausdrücken:

$$R(P) = \frac{dU}{dP} = \frac{dU}{dU_{lin}} \cdot \frac{dU_{lin}}{dP} = c_1 \cdot \left(1 + 2c_2(U_{lin} - U_0) + 3c_3(U_{lin} - U_0)^2 \right) \quad (7.13)$$

U_0 ist nach wie vor der DC-Wert des unreduzierten Interferogramms, aus dem die Parameter c_2 und c_3 abgeleitet wurden. Mit den Gleichungen (7.11) und (7.13) kann man nun $R(U)$ berechnen. Gl. (7.11) liefert – über die hier nicht angegebene Umkehrfunktion – $U_{lin}(U)$, und aus Gl. (7.13) erhält man $R(U_{lin})$.

Die Berechnung des Korrekturfaktors aus Gl. (7.3) sei im folgenden am Beispiel eines Weltraumspektrums gezeigt; für die übrigen Spektren ist das Verfahren identisch. Die Responsivität für das Weltraumspektrum wird mit den Gleichungen (7.11) und (7.13) berechnet. Hierbei ist $U = U_{DS_0}$ der DC-Wert des Weltrauminterferogramms (vgl. Abb. 7.1). $U_{DS_0, lin}$ ist der Wert, der aus Gl. (7.11) mit $U = U_{DS_0}$ berechnet wird. Damit erhält man für die Responsivität R_{DS} den Ausdruck:

$$R_{DS} = c_1 \cdot \left(1 + 2c_2(U_{DS_0, lin} - U_0) + 3c_3(U_{DS_0, lin} - U_0)^2 \right) \quad (7.14)$$

⁷Da die Nichtlinearitätsbestimmung für jeden Flug nur ein- oder zweimal durchgeführt wird, ist es nicht notwendig, mit Hilfe eines Abbruchkriteriums die Rechenzeit zu minimieren.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann $R_0 = c_1$ gesetzt werden. Damit berechnet sich der Korrekturfaktor $F_{kor, DS}$, mit dem das Weltrauminterferogramm skaliert werden muß, zu:

$$F_{kor, DS} = \frac{R_0}{R_{DS}} = \frac{1}{1 + 2c_2(U_{DS_0, lin} - U_0) + 3c_3(U_{DS_0, lin} - U_0)^2} \quad (7.15)$$

Entsprechend erhält man für die Korrekturfaktoren der Schwarzkörper- und Atmosphäreninterferogramme:

$$F_{kor, BB} = \frac{R_0}{R_{BB}} = \frac{1}{1 + 2c_2(U_{BB_0, lin} - U_0) + 3c_3(U_{BB_0, lin} - U_0)^2} \quad (7.16)$$

$$F_{kor, atm} = \frac{R_0}{R_{atm}} = \frac{1}{1 + 2c_2(U_{atm_0, lin} - U_0) + 3c_3(U_{atm_0, lin} - U_0)^2} \quad (7.17)$$

Wie gut die Methode der Minimierung der Artefakte in der Praxis funktioniert, soll im folgenden Absatz gezeigt werden. Da zur Bestimmung der Nichtlinearität nur die Intensität der Artefakte minimiert werden muß, ist es naheliegend, Magnitudenspektren zu verwenden. Dies hat aber zwei Nachteile: Erstens geht die Information über das Vorzeichen der Artefakte verloren, und zweites ist das Rauschen eines Magnitudenspektrums im Mittel nicht null, sondern positiv. Dies führt bei der Minimierung der Artefakte im allgemeinen dazu, daß die Korrekturterme etwas überschätzt werden. Daher werden hier Spektren verwendet, bei denen für die Phasenkorrektur nicht der erweiterte Arkustangens (Gl. (A.5), Anhang A) verwendet wird, sondern der einfache Arkustangens:

$$S(\kappa)_\varphi = S_m(\kappa) \cdot e^{-i\varphi} \quad \text{mit} \quad \varphi = \arctan\left(\frac{\text{Im}(S_m(\kappa))}{\text{Re}(S_m(\kappa))}\right) \quad (7.18)$$

Durch diese Phasenkorrektur kommen Werte mit der Phase im Bereich $[-\pi/2 \dots \pi/2]$ auf die positive reelle Achse zu liegen, und Werte mit der Phase im Bereich $[\pi/2 \dots 3\pi/2]$ werden in der komplexen Ebene auf die negative reelle Achse gedreht. Das phasenkorrigierte Spektrum ist also reell, aber im Gegensatz zum Magnitudenspektrum nicht notwendigerweise positiv. Da die Phase des Rauschens statistisch verteilt ist, ist das Spektrum in dem Bereich, in dem es nur Rauschen enthält, im Mittel null.

Abb. 7.3 zeigt die Artefakte von unreduzierten Schwarzkörperspektren der Kanäle 1 bis 3, die während Flug 10 gemessen wurden.⁸ Für diese Spektren wurden 32, 27 bzw. 25 Interferogramme koaddiert. Das Maximum ist jeweils auf 1 normiert.

Die Abbildung zeigt, daß die Nichtlinearitätskorrektur des quadratischen Artefakts in allen Kanälen im Bereich um $\kappa = 0$ gut funktioniert. Hier ist nach der Korrektur nur noch Rauschen zu erkennen. Bei der doppelten Wellenzahl des nominellen Spektralbereichs hingegen ist besonders in den Kanälen 1 und 3 nach wie vor ein Signal zu erkennen. Eine mögliche Erklärung für dieses Signal ist ein Artefakt, das entsteht, wenn die Strahlung auf dem Weg von der Quelle zum Detektor das Interferometer zweimal durchläuft. Die beiden Teilstrahlen erfahren dann den doppelten optischen Gangunterschied $2x$. Da bei der Fouriertransformation aber nur der einfache Gangunterschied x angenommen wird, erscheint dieses Signal bei der doppelten Frequenz des eigentlichen Signals:

$$S_{\text{Artefakt}}(\kappa) = \int IFG(x) \cdot e^{i2\pi\kappa(2x)} = \int IFG(x) \cdot e^{i2\pi(2\kappa)x} \quad (7.19)$$

⁸Labormessungen hatten gezeigt, daß im Kanal 4 keine Nichtlinearitätsartefakte erkennbar sind, daher wurden während des Fluges keine unreduzierten Interferogramme von diesem Kanal aufgenommen, und es wird keine Nichtlinearitätskorrektur durchgeführt. Eine Abschätzung zur Nichtlinearität im Kanal 4 wird in Abschnitt 7.3.2 gegeben.

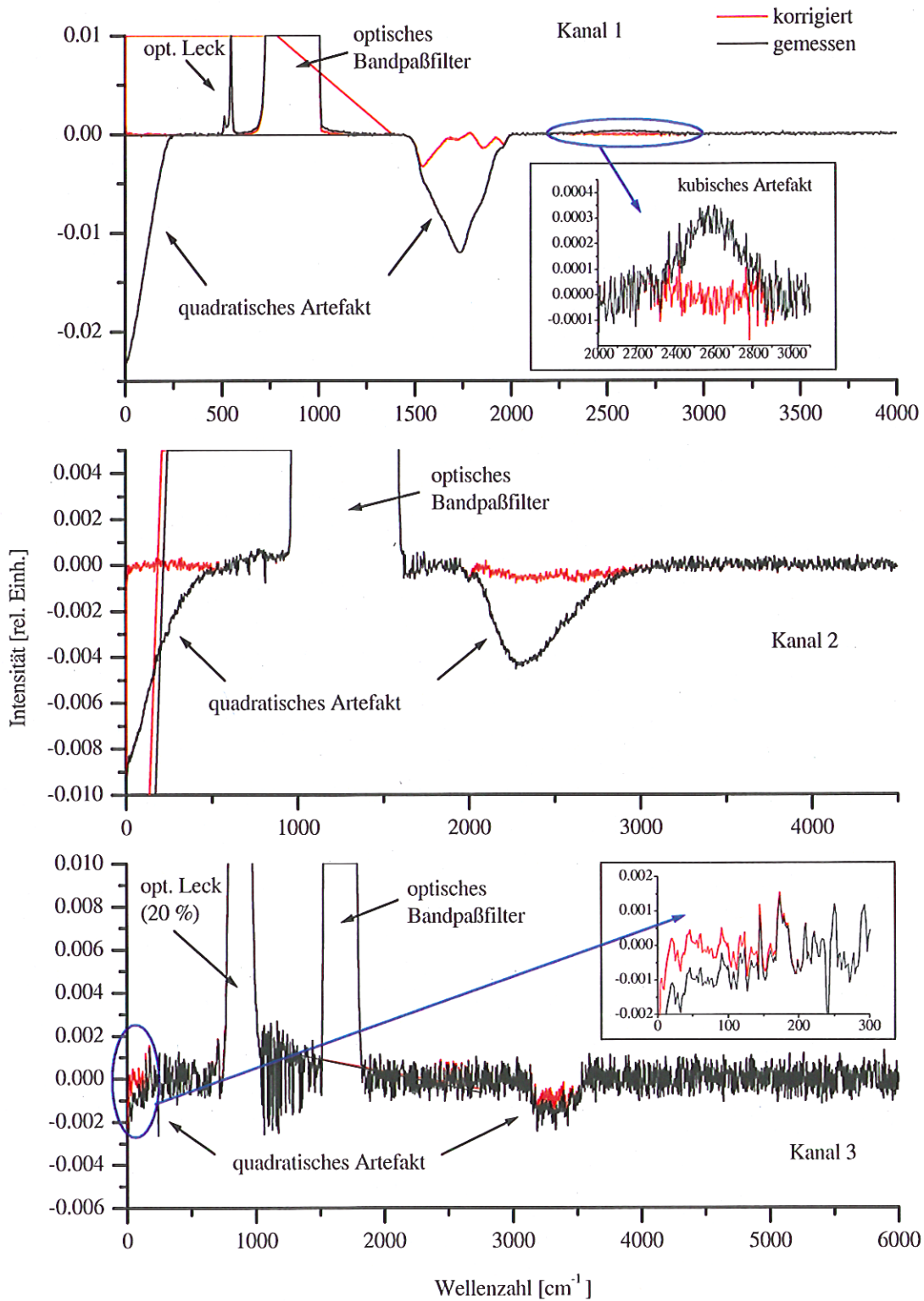


Abbildung 7.3: Korrektur der Detektor-Nichtlinearität durch Minimierung der Artefakte. Das Maximum der Spektren im Bereich der optischen Bandpaßfilter ist jeweils auf 1 normiert.

Ursachen dafür, daß ein Teil der Strahlung das Interferometer zweimal durchläuft, sind Reflexionen an optischen Komponenten im Strahlengang. In Frage kommen hier das Fenster des Kryostaten, die optischen Bandpaßfilter und die Detektoren selbst. Die optischen Komponenten sind alle anti-reflex-beschichtet, so daß die Restreflexion nur wenige Prozent beträgt. Das reicht jedoch aus, um ein Signal in der Größenordnung der Nichtlinearitätsartefakte zu erzeugen. Der Bereich des quadratischen Artefakts beim doppelten nominellen Spektralbereich ist daher zur Quantifizierung der Nichtlinearität nicht geeignet. Statt dessen muß der Bereich um $\kappa = 0$ verwendet werden. Dieser birgt jedoch die Schwierigkeit, daß das Signal für sehr kleine Wellenzahlen durch das Hochpaßfilter unterdrückt wird. Daher dürfen bei der Minimierung des Artefakts die ersten 10 bis 20 cm^{-1} nicht betrachtet werden.

Das kubische Artefakt bei der dreifachen Wellenzahl des nominellen Spektralbereichs läßt sich in Kanal 1 ebenfalls so gut korrigieren, daß im korrigierten Spektrum nur noch Rauschen zu sehen ist. Die Größe des kubischen Artefakts beträgt 0,03 % des Maximums. Das Artefakt im nominellen Spektralbereich ist dreimal so groß wie das bei der dreifachen Wellenzahl, beträgt also immer noch weniger als 0,1 % des Maximums. In den Filterflanken wird der relative Fehler durch das kubische Artefakt etwas größer, da das Artefakt dreimal so breit wie der eigentliche Filter ist. Dennoch wird in dem für das Spurengasretrieval verwendeten Bereich ein Fehler von 0,12 % nicht überschritten.

In den Kanälen 2 und 3 ist das kubische Artefakt praktisch nicht mehr erkennbar. Der Versuch, hieraus einen Parameter c_3 zu bestimmen, führt zu unverhältnismäßig großen Fehlern. Daher wird in diesen beiden Kanälen nur eine quadratische Korrektur durchgeführt. Da das kubische Artefakt im Rauschen untergeht, ist auch sein Effekt auf das Spektrum im nominellen Spektralbereich im Rauschniveau und muß nicht weiter berücksichtigt werden.

Die Größe der Parameter c_2 und c_3 allein sagt noch nicht viel über das Ausmaß der Nichtlinearität aus. Wie in Abschnitt 7.1.1 erläutert, ist der größte Fehler, der durch eine nicht korrigierte Nichtlinearität hervorgerufen wird, die unterschiedliche Skalierung der Schwarzkörper-, Atmosphären- und Weltraumpektren. Als Maß für die Nichtlinearität ist es daher sinnvoll anzugeben, wie stark sich die Responsivität vom Spektrum mit dem größten Gleichlichtanteil von der Responsivität des Spektrums mit dem geringsten Gleichlichtanteil unterscheidet. (Der Gleichlichtanteil ist maßgebend für die mittlere Responsivität des entsprechenden Interferogramms.) In Tabelle 7.2 wird für Flug 10, ausgehend von einer Messung unreduzierter Interferogramme während des Fluges, die Responsivität – relativ zu R_0 – für das Spektrum mit dem größten und dem kleinsten DC-Wert einer Meßsequenz (Horizontsondierungssequenz inklusive vorhergehender und nachfolgender Kalibrierungssequenz) angegeben. Die letzte Spalte zeigt, daß bei diesem Flug die Responsivität innerhalb einer Sequenz in Kanal 1 um maximal 8,5 % variiert, in Kanal 2 um 3,1 % und in Kanal 3 um 0,7 %.

	U_0 [V]	U_{min} [V]	U_{max} [V]	$R(U_{min})/R_0$	$R(U_{max})/R_0$	$\Delta R = \frac{R(U_{min}) - R(U_{max})}{R(U_{max})}$
Kanal 1	1,064	0,760	1,080	1,0799	0,9961	8,42 %
Kanal 2	0,493	0,325	0,503	1,0290	0,9983	3,08 %
Kanal 3	0,305	0,208	0,313	1,0057	0,9995	0,62 %

Tabelle 7.2: Auswirkung der Nichtlinearität auf die Kanäle 1 bis 3 in Flug 10. U_0 ist der DC-Wert der unreduzierten Interferogramme, U_{min} und U_{max} sind die DC-Werte der Weltraum- bzw. Schwarzkörpermessungen. Die letzte Spalte gibt die relative Responsivitätsänderung an.

7.3 Fehler der Nichtlinearitätskorrektur

In Abschnitt 7.1 wurde gezeigt, wie sich eine nicht konstante Responsivität des Systems äußert, und in Abschnitt 7.2 wurde eine Methode zur Quantifizierung und rechnerischen Kompensation der Nichtlinearität vorgestellt, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. In den folgenden Abschnitten wird nun untersucht, welche Genauigkeit mit diesem Korrekturverfahren bei MIPAS-B2-Spektren erreicht werden kann und welche systematischen Fehler bleiben. Die Fehlerangaben für die Bestimmung der Nichtlinearität werden im folgenden immer auf die maximale Responsivitätsänderung ΔR (also die letzte Spalte in Tabelle 7.2) bezogen. Die Fehlerangaben beziehen sich immer auf die Gesamt-Responsivität und gelten im Fall der maximalen Responsivitätsänderung ΔR . Ein Fehler von 0,15 % im Kanal 1 bedeutet also, daß ΔR zwischen 8,27 und 8,57 % liegt.

7.3.1 Rauschen

Die Güte der Minimierung der Artefakte wird durch das Rauschen in den Interferogrammen beeinflusst. Um die Fehler in der Bestimmung der Parameter infolge des Rauschens zu bestimmen, wurden – ähnlich wie bei der Quantifizierung des Phasenfehlers – Interferogramme künstlich verrauscht. Ausgangsbasis waren hier jedoch keine simulierten Interferogramme, sondern gemessene, für die mindestens 256 Einzelinterferogramme koaddiert wurden, wodurch das Rauschen in den Spektren sehr gering ist. Zu diesen Ausgangsspektren wurde ein weißes Rauschen addiert, das in seiner Amplitude dem Rauschen der Spektren entspricht, die im Flug zur Bestimmung der Nichtlinearität gemessen wurden. Von 50 auf diese Weise erzeugten Spektren wurden die Nichtlinearitätsparameter und daraus die maximalen Responsivitätsänderungen bestimmt. Die Variation der maximalen Responsivitätsänderung ist als der 2σ -Wert der Streuung gegeben. Diese Werte liegen für Kanal 1 bei 0,016 %, für Kanal 2 bei 0,028 % und für Kanal 3 bei 0,056 %.

7.3.2 Abbruch der Reihenentwicklung

Die Kurve $U(P)$ wird für Kanal 1 in eine Taylorreihe bis zum 3. Glied entwickelt. Ein Artefakt vierter Ordnung ist nur mit Mühe zu erkennen und hebt sich überhaupt nur vom Rauschen ab, wenn sehr viele Interferogramme koaddiert werden. Um abzuschätzen, welchen Einfluß die vierte Ordnung maximal haben kann, wird ein Spektrum herangezogen, für das 256 Interferogramme koaddiert wurden. Ausgehend von diesem Spektrum wird zunächst das Spektrum eines linearen Interferogramms erzeugt, indem außerhalb des Bereichs des optischen Bandpaßfilters das Spektrum durch Rauschen ersetzt wird.⁹ Dieses lineare Spektrum wird fouriertransformiert, und das daraus gewonnene Interferogramm wird mit den nach Abschnitt 7.2.2 gefundenen Parametern wieder nichtlinear verzerrt. Nun wird ein Parameter für die vierte Ordnung c_4 hinzugefügt, dergestalt daß sich das hieraus ergebende Artefakt bei der vierfachen Wellenzahl eindeutig vom Rauschen im gemessenen Spektrum abhebt. Das Ergebnis dieser Methode ist in Abb. 7.4 gezeigt. Bereits im gemessenen Spektrum läßt sich ein Artefakt vierter Ordnung erahnen, im simulierten Spektrum tritt dieses Artefakt jedoch deutlicher hervor. Damit ist sichergestellt, daß die Abschätzung nicht zu klein ist. Nun wird die Responsivitätsänderung einmal mit und einmal ohne c_4 berechnet. Mit der maximalen Differenz dieser Ergebnisse wird der Fehler durch den Abbruch der Taylorreihe abgeschätzt, der in Tabelle 7.3 angegeben wird.

⁹Das Rauschen wird mit einem Zufallsgenerator erzeugt, die Rauschamplitude wird aus der Standardabweichung des gemessenen Spektrums im Bereich von $4000 - 6000 \text{ cm}^{-1}$ bestimmt.

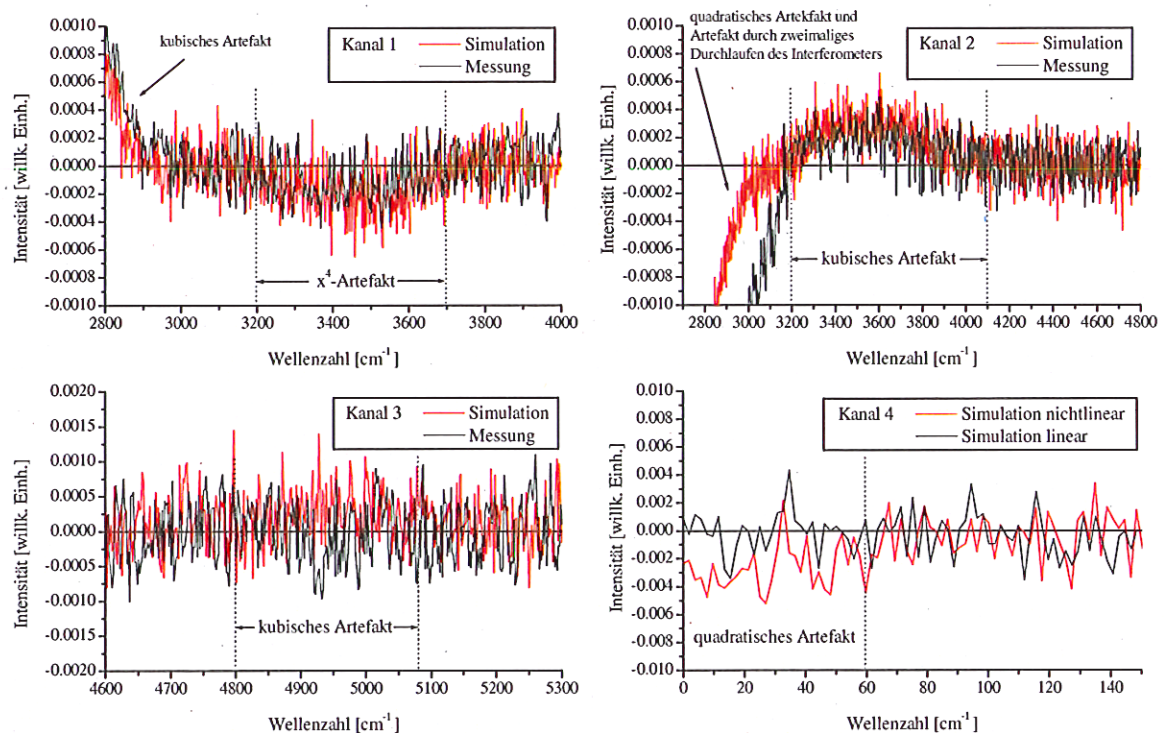


Abbildung 7.4: Zur Abschätzung des Fehlers durch Abbruch der Taylorreihe. Gezeigt sind für die Kanäle 1 bis 3 die Ergebnisse von Messungen und Simulationsrechnungen im Spektralbereich des ersten vernachlässigten Artefakts. In Kanal 4 ist die Simulation eines linearen Spektrums und die Simulation eines nichtlinearen Spektrums gezeigt. Erläuterungen hierzu siehe Text.

Für die Kanäle 2 und 3 wird entsprechend verfahren, allerdings wird hier die Taylorreihe bereits nach dem zweiten Glied abgebrochen, und mit der oben beschriebenen Methode wird die Größe des dritten Gliedes abgeschätzt. In diesen beiden Kanälen stehen für die Untersuchung Spektren aus 480 bzw. 422 Interferogrammen zur Verfügung. In Kanal 4 wird die Taylorreihe bereits nach dem linearen Glied abgebrochen, daher muß die Größe des quadratischen Gliedes abgeschätzt werden. Dies gestaltet sich jedoch als ausgesprochen schwierig. Der Spektralbereich bei der doppelten Wellenzahl des nominellen Bereichs kann nicht verwendet werden, da dem gesuchten Effekt hier das Artefakt überlagert ist, das dadurch entsteht, daß ein Teil der Strahlung das Interferometer zweimal durchläuft. Der Effekt bei 0 cm^{-1} ist ebenfalls schwer zu beobachten, da der Kanal 4 nur ca. 100 cm^{-1} breit ist und daher das quadratische Artefakt auch nur im Bereich von 0 bis 100 cm^{-1} zu beobachten ist. Die ersten 20 cm^{-1} sind jedoch durch das Hochpaßfilter verfälscht und können ebenfalls nicht verwendet werden.

Eine Labormessung mit 183 koaddierten Interferogrammen (Abb. 7.5) zeigt zusätzlich zu den erwarteten Effekten eine Störung im Bereich von 700 bis 1800 cm^{-1} , die in ihrer Form sehr stark den invertierten Kanälen 1 bis 3 ähnelt. Außerdem ist im Bereich von 0 bis 200 cm^{-1} , also genau dort, wo gegebenenfalls das quadratische Artefakt zu erkennen sein müßte, ein leicht positives Signal zu beobachten, dessen Ursprung nicht geklärt werden kann. Daher ist es nicht möglich,

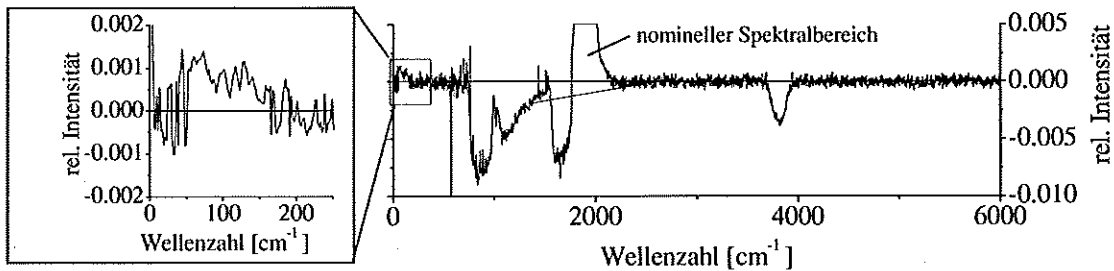


Abbildung 7.5: Gemessenes Spektrum aus 183 koaddierten unreduzierten Interferogrammen in Kanal 4. Das Maximum des Spektrums ist auf 1 normiert, der nominelle Spektralbereich liegt bei ca. 1800 - 2000 cm^{-1} .

aus den gemessenen Spektren die Größe des quadratischen Artefakts zu ermitteln. Um wenigstens abzuschätzen, wie groß ein Artefakt sein muß, damit es sich aus dem Rauschen heraushebt, wurde hier – wie bei den anderen Kanälen auch – zunächst ein lineares Interferogramm erzeugt, indem beim Spektrum die Bereiche außerhalb des nominellen Spektralbereichs durch Rauschen ersetzt wurden. Das Spektrum des nichtlinear verzerrten Interferogramms wurde hier aber nicht mit dem gemessenen Spektrum, sondern mit dem Spektrum des linearen Interferogramms verglichen.

	U_0 [V]	U_{min} [V]	U_{max} [V]	$(\Delta R_{NL})_n$ [%]	$(\Delta R_{NL})_{n+1}$ [%]	max. Fehler [%]
Kanal 1	0,891	0,760	1,080	8,96	9,12	0,17
Kanal 2	0,383	0,325	0,503	3,73	3,55	-0,24
Kanal 3	0,258	0,250	0,313	0,52	0,45	-0,08
Kanal 4	0,200	0,171	0,239	0	0,27	0,28

Tabelle 7.3: Fehler in der Nichtlinearitätsbestimmung durch Abbrechen der Taylorreihe. Die Spalten mit dem Index n bzw. $n + 1$ bezeichnen die relative Responsivitätsänderung zwischen U_{min} und U_{max} analog zu Tabelle 7.2, einmal bei einer Taylorentwicklung der Detektorfunktion bis zum n -ten Glied ($n = 3$ für Kanal 1, $n = 2$ für die Kanäle 2 und 3, $n = 1$ für Kanal 4) und einmal bei einer Entwicklung bis zum $n + 1$ -ten Glied, wobei der Vorfaktor des $n + 1$ -ten Gliedes wie im Text beschrieben abgeschätzt wurde. Der maximale Fehler ist nicht notwendigerweise durch die Differenz der Responsivitätsänderungen für U_{min} und U_{max} gegeben.

Der Fehler in der Responsivität infolge des Abbruchs der Taylorentwicklung ist in Tabelle 7.3 dargestellt. Demnach beträgt der Skalierungsfehler maximal 0,3 %. Anders als bei allen bisherigen Betrachtungen ist der Fehler durch das Vernachlässigen der nächsthöheren Ordnung nicht unbedingt für die Weltraumspektren (also die Werte mit den niedrigsten DC-Werten) am größten. Dies wird im folgenden für Kanal 2 näher erläutert.

Abb. 7.6 zeigt den berechneten Verlauf der Detektorresponsivität für Kanal 2 mit einer Reihenentwicklung bis zur zweiten und bis zur dritten Ordnung. Es zeigt sich, daß der Betrag der Differenz zwischen den beiden Kurven bei $U = 0,38$ V ein lokales Maximum hat. Der Verlauf in Kanal 3 ist ähnlich, während in den Kanälen 1 und 4 kein lokales Maximum auftritt. Daher wird in den Kanälen 1 und 4 die Differenz bei $U = U_{min}$ für die Fehlerabschätzung herangezogen, während in den Kanälen 2 und 3 das lokale Maximum der Differenz verwendet wird.

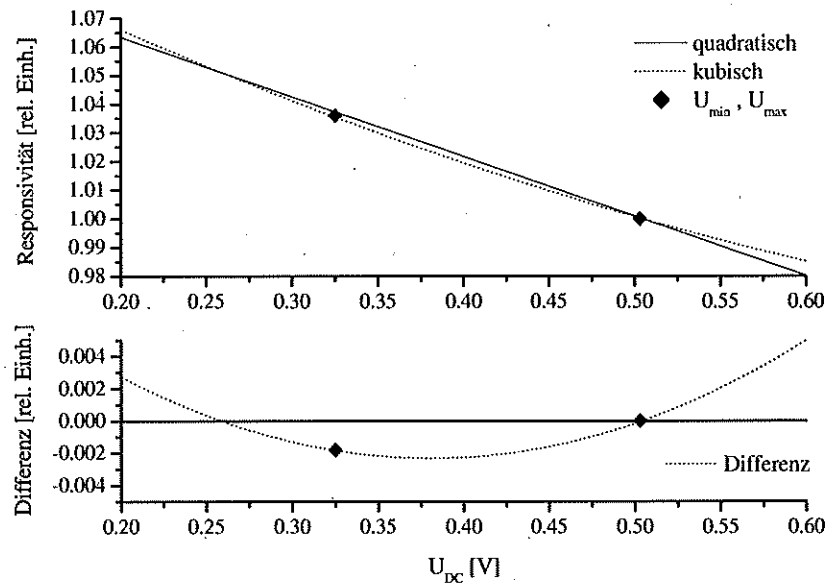


Abbildung 7.6: Unterschied in der Responsivität beim Abbruch der Taylorreihe nach dem zweiten bzw. dritten Glied in Kanal 2. Die Punkte auf der Kurve markieren die Positionen von U_{min} und U_{max} .

7.3.3 Einfluß der Detektortemperatur

Wie in Abschnitt 5.3 beschrieben, hat die Detektortemperatur einen starken Einfluß auf die Responsivität. Für die Quantifizierung der Nichtlinearität ist zwar nur das Verhältnis der Responsivitätswerte bei verschiedener Hintergrundstrahlung von Bedeutung, das weitgehend unabhängig von der Temperatur ist [Kleinert, 1998], jedoch bewirkt dieselbe Strahlungsleistung P bei einer höheren Detektortemperatur größere Spannungswerte als bei einer niedrigeren Temperatur. Da die Spannungswerte U für die Quantifizierung der Nichtlinearität zugrunde gelegt werden, entsteht ein Fehler, wenn die Messung der unreduzierten Interferogramme bei einer anderen Detektortemperatur erfolgt als die Messung der Interferogramme, auf die die Korrektur angewandt wird. Dieser Sachverhalt ist in Abb. 7.7 in einer Prinzipzeichnung veranschaulicht. Gezeigt ist die Detektorspannung in Abhängigkeit von der Strahlungsleistung für zwei verschiedene Detektortemperaturen (Messungen a und b mit $T_a < T_b$). Für die gleiche Strahlungsleistung P_1 ist der zugehörige Spannungswert U_{1a} kleiner als U_{1b} . Für P_2 gilt Entsprechendes. Da eine Änderung der Detektortemperatur in erster Linie eine Skalierung der Funktion bewirkt, ist das Verhältnis R_{1a}/R_{2a} etwa gleich dem Verhältnis R_{1b}/R_{2b} , das heißt, das relative Nichtlinearitätsverhalten des Detektors ändert sich nicht.

Für die Korrektur der Nichtlinearität werden aber nicht die Werte der Strahlungsleistung P_1 und P_2 zugrunde gelegt, sondern die Werte U_1 und U_2 . Wenn nun der Kurvenverlauf $U(P)$ aus einer Messung bei der Temperatur T_a abgeleitet wird und die Spannungswerte aus Messungen bei der Temperatur T_b stammen, dann wird statt des gesuchten Responsivitätsverhältnisses R_{1b}/R_{2b} bzw. R_{1a}/R_{2a} das Verhältnis R'_{1a}/R'_{2a} abgeleitet. Der Fehler, den man dabei macht, muß in der Fehlerbetrachtung berücksichtigt werden.

Im Verlauf von Flug 10 wurden zwei Sequenzen von unreduzierten Interferogrammen gemessen, die erste bei Erreichen der Gipfelhöhe um 13:25 UT, die zweite um 14:55 UT. In Abb. 7.8 ist der Verlauf der Detektortemperatur für Flug 10 dargestellt. Die Messungen der unreduzierten In-

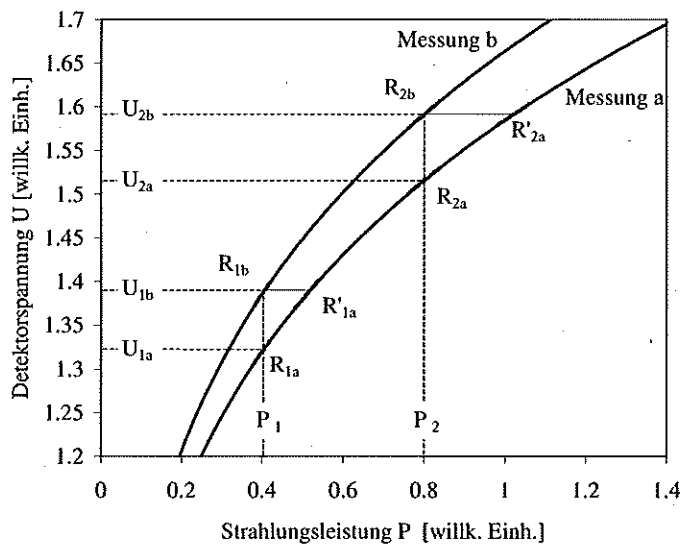


Abbildung 7.7: Einfluß der Detektortemperatur auf die Bestimmung der Nichtlinearitätsparameter. Erläuterungen siehe Text.

terferogramme erfolgten etwa zu den Zeiten der maximalen bzw. minimalen Detektortemperatur. Um den Einfluß der Detektortemperatur auf die Nichtlinearitätsparameter abzuschätzen, werden die Ergebnisse aus dem Flug mit Ergebnissen aus Labormessungen verglichen. In Abb. 7.9 ist für 7 bzw. für 8 Messungen die Responsivitätsänderung in Abhängigkeit von der Detektortemperatur aufgetragen. Der Zusammenhang zwischen Responsivitätsänderung und Detektortemperatur kann mit einer linearen Ausgleichsrechnung beschrieben werden. Damit läßt sich der Fehler abschätzen, den man aufgrund der Temperaturdrift während des Fluges macht. Für eine maximale Temperaturdifferenz von 0,03 K auf Gipfelhöhe ergibt sich für Kanal 1 ein maximaler Fehler in der Responsivitätsänderung von 0,18 %. In Kanal 2 beträgt der Fehler 0,13 % und in Kanal 3 noch 0,04 %. Dies deckt sich auch mit den Werten, die sich in Kanal 2 und 3 aus den beiden Messungen während des Fluges ergeben. Aufgrund von Telekommandoproblemen während der Messung 1 stehen für Kanal 1 nur Daten aus der Messung 2 zur Verfügung.

7.3.4 Fehler der Spannungsmessung

Bei der Korrektur der Detektor-Nichtlinearität wird die Responsivität aus einer AC-gekoppelten Messung bestimmt, für die Berechnung der Korrekturfaktoren (Gl. (7.15)) werden jedoch die DC-Werte der Interferogramme verwendet. Daher führt ein Fehler in der Spannungsmessung auch zu einem Fehler in den Korrekturfaktoren. Fehlerquellen hierfür sind die Genauigkeit in der Bestimmung der elektrischen Verstärkung und das Rauschen des DC-Wertes. Das Rauschen in den Interferogrammen wurde bereits in Abschnitt 7.3.1 betrachtet.

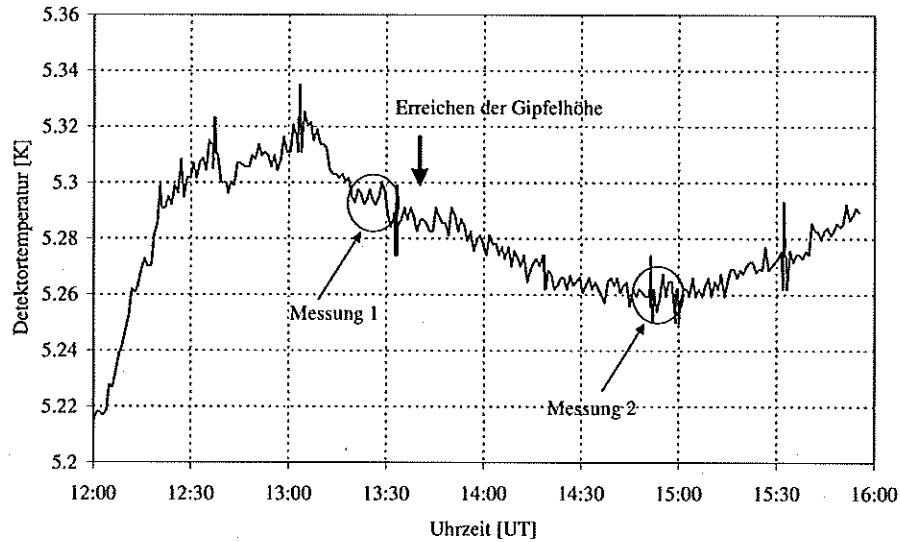


Abbildung 7.8: Änderung der Detektortemperatur im Verlauf von Flug 10. Die beiden Zeitpunkte, in denen unreduzierte Interferogramme zur Bestimmung der Nichtlinearität aufgenommen wurden, sind mit „Messung 1“ und „Messung 2“ gekennzeichnet.

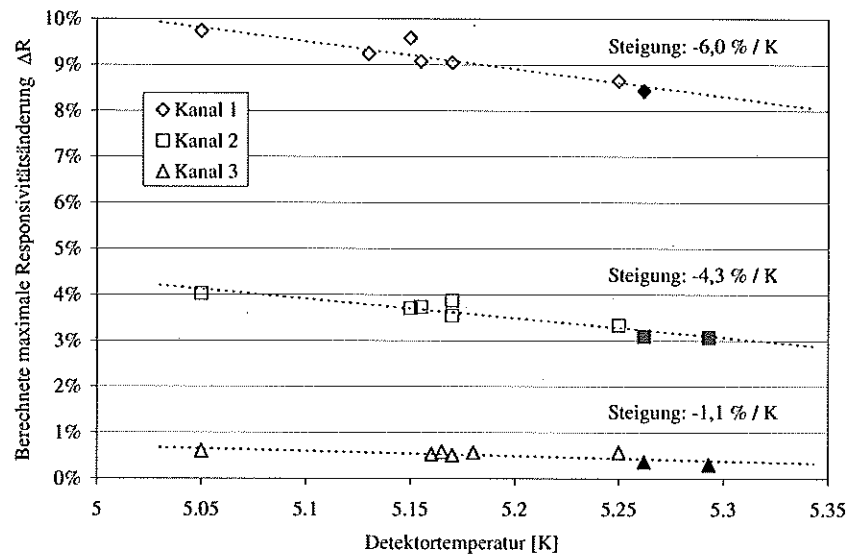


Abbildung 7.9: Abhängigkeit der abgeleiteten maximalen Responsivitätsänderung von der Detektortemperatur bei der Messung der Nichtlinearitätsparameter. Labormessungen sind mit offenen Symbolen gekennzeichnet, Messungen während des Fluges mit ausgefüllten.

Genauigkeit der elektrischen Verstärkung

Das AC-gekoppelte Detektorsignal, also die Interferogrammmessung, wird mit einem Verstärker mit RC-Glied verstärkt. Dabei berechnet sich der Verstärkungsfaktor aus den beiden Widerständen in der Verstärkerschaltung. Die Widerstände wurden mit einem Multimeter vermessen, für das im verwendeten Meßbereich eine Genauigkeit von 0,3 bis 0,8 % angegeben wird. Der daraus resultierende Fehler im Verstärkungsfaktor liegt bei 0,4 bis 0,9 %. Aus dieser Unsicherheit ergibt sich in den Kanälen 1 bis 3 für die maximalen Responsivitätsänderung ein Fehler von 0,04 %, 0,01 % und 0,003 %.

Rauschen der DC-Werte

Die DC-Werte der Detektoren werden mit 4 Hz aufgenommen, und ein Einzelwert wird mit einer Genauigkeit von 0,3 mV aufgelöst. Der Mittelwert über ein Interferogramm, das innerhalb von 10 s gemessen wird, weist damit ein Rauschen von 0,05 mV auf. Der Effekt dieses Fehlers auf die Bestimmung der Korrekturfaktoren ist vernachlässigbar.

7.3.5 Gesamtfehler der Nichtlinearitätsbestimmung

Der Gesamtfehler in der Nichtlinearitätsbestimmung setzt sich aus den folgenden, in diesem Kapitel untersuchten Fehlerquellen zusammen:

- Einfluß des kubischen Artefakts im Bereich des optischen Bandpaßfilters
- Rauschen in den Interferogrammen
- Abbruch der Taylorentwicklung
- Drift der Detektortemperatur
- Fehler in der Verstärkung

Die einzelnen Beiträge werden als Größtfehler addiert. Der maximale Gesamtfehler, der sich daraus ergibt, ist in Tabelle 7.4 aufgeführt. Der hier angeführte Fehler ist (im Rahmen der Abschätzung) der maximale Fehler für ein unkalibriertes Spektrum. Wie sich der Fehler bei der Kalibrierung auswirkt, wird in Kap. 8 diskutiert.

	kub. Artef.	Rauschen	Taylor	T_{Det}	Verst.	gesamt	Einheit
Kanal 1	0,12	0,016	0,19	0,18	0,04	0,55	%
Kanal 2	–	0,028	0,19	0,13	0,01	0,36	%
Kanal 3	–	0,056	0,015	0,04	0,003	0,12	%
Kanal 4	–	–	0,28	–	–	0,28	%

Tabelle 7.4: Fehler der maximalen Responsivitätsänderung bei der Bestimmung der Nichtlinearität. Die erste Spalte beziffert den Fehler, der durch das nichtberücksichtigte kubische Artefakt im nominellen Spektralbereich entsteht (nur Kanal 1). Die weiteren Abkürzungen: Taylor: Fehler durch Abbruch der Taylorentwicklung, T_{Det} : Fehler durch Änderungen der Detektortemperatur, Verst.: Fehler durch Ungenauigkeiten in der Verstärkung.

Kapitel 8

Gesamtfehler

In den Kapiteln 5 bis 7 wurden die einzelnen Fehlerquellen untersucht, die zum systematischen Fehler in den kalibrierten Spektren beitragen. In diesem Kapitel wird der sich aus diesen Quellen ergebende Gesamtfehler abgeschätzt, und es wird analysiert, in welchem Maße die einzelnen Quellen zum Gesamtfehler beitragen.

8.1 Beiträge zum Gesamtfehler

Das kalibrierte Spektrum wird mit der Kalibrierungsgleichung (3.6) berechnet:

$$\mathcal{L}_{atm} = S_{atm} \cdot \frac{1}{G} + \mathcal{L}_{Offset}$$

mit der Instrumentresponsivität:

$$G = \frac{\mathcal{L}_{BB}}{S_{BB} - S_{DS}}$$

und dem Offset:

$$\mathcal{L}_{Offset} = S_{DS} \cdot \frac{\mathcal{L}_{BB}}{S_{BB} - S_{DS}}$$

Für die in dieser Arbeit untersuchten unabhängigen Fehlerquellen werden die Auswirkungen auf die Skalierung, den Offset und das kalibrierte Spektrum berechnet. Der Gesamtfehler wird als die quadratische Summe der unabhängigen Einzelbeiträge angegeben. Die einzelnen Beiträge werden in den folgenden Abschnitten aufgeführt.

Rauschen in den Schwarzkörper- und Weltraumpektren

Zur Kalibrierung der atmosphärischen Spektren werden Spektren von Schwarzkörper- und von Weltraummessungen herangezogen. In Abschnitt 5.2 wurden Instrumentresponsivitäts- und Offsetfehler in den Gleichungen (5.6) und (5.7) abgeschätzt:

$$[\Delta G/G]_{rau} \leq \sqrt{3} \frac{NESR}{\mathcal{L}_{BB}} \cdot \sqrt{\frac{0,0345}{32 \cdot 0,5}}$$

$$\Delta \mathcal{L}_{Offset, rau} \leq \frac{\sqrt{2 S_{BB}^2 + S_{DS}^2}}{S_{BB} - S_{DS}} \cdot NESR \cdot \sqrt{\frac{0,0345}{32 \cdot 0,5}}$$

Analog berechnet sich der Fehler im kalibrierten Spektrum zu:

$$\Delta \mathcal{L}_{atm,rau} = \frac{\sqrt{(S_{atm} - S_{DS})^2 + 2(S_{BB} - S_{atm})^2}}{S_{BB} - S_{DS}} \cdot \sqrt{\frac{0,0345}{32 \cdot 0,5}} \cdot NESR \quad (8.1)$$

Die Schwarzkörper- und Weltraummessungen erfolgen jeweils vor und nach einer Horizontsondierungssequenz. Zwischen diesen Messungen wird linear interpoliert. In die kalibrierten Spektren gehen daher die Spektren $S_{BB,1}$ und $S_{BB,2}$, die vor und nach der Horizontsondierungssequenz zu den Zeiten t_1 und t_2 gemessen werden, mit folgender Gewichtung ein:

$$S_{BB} = \frac{t_2 - t}{t_2 - t_1} S_{BB,1} + \frac{t - t_1}{t_2 - t_1} S_{BB,2} \quad (8.2)$$

mit S_{BB}	auf den Zeitpunkt des atmosphärischen Spektrums interpoliertes Schwarzkörperspektrum
$S_{BB,1/2}$	Schwarzkörperspektren vor bzw. nach der Horizontsondierungssequenz
t	Zeitpunkt der atmosphärischen Messung
$t_{1/2}$	Zeitpunkte der Schwarzkörpermessungen

Unter der Voraussetzung, daß $\Delta S_{BB,1} = \Delta S_{BB,2}$ und daß die beiden Beiträge statistisch unabhängig sind, beträgt der Rauschfehler des interpolierten Spektrums:

$$\Delta S_{BB} = \underbrace{\frac{\sqrt{(t_2 - t)^2 + (t - t_1)^2}}{(t_2 - t_1)}}_{(*)} \cdot \Delta S_{BB,1} \leq \Delta S_{BB,1} \quad (8.3)$$

Wenn t zwischen t_1 und t_2 liegt, dann nimmt der Ausdruck (*) aus Gl. (8.3) Werte zwischen $\sqrt{1/2}$ und 1 an und wird hier mit 1 abgeschätzt. Für den Rauschfehler des interpolierten Spektrums wird also der Fehler einer Kalibrierungsmessung verwendet. Für die Weltraummessungen gilt Entsprechendes.

Fehler durch die Drift von Instrumentresponsivität und Offset

Als maximaler Interpolationsfehler wurde in Abschnitt 5.3 die Hälfte der Differenz zwischen den Kalibrierungsmessungen vor und nach der Horizontsondierungssequenz angenommen. Der Interpolationsfehler ist umso größer, je größer der zeitliche Abstand zur nächsten Kalibrierungsmessung ist. Zur Abschätzung des zeitlichen Verlaufs des Interpolationsfehlers ΔG_{Drift} und des Offsetfehlers $\Delta \mathcal{L}_{Offset, Drift}$ wird angenommen, daß beide proportional zum Zeitabstand zur nächsten Kalibrierungsmessung sind. Für $t = t_1$ ist der Interpolationsfehler null, zwischen t_1 und $\frac{t_1+t_2}{2}$ wächst er linear. Für größere Zeiten fällt er wieder linear, bis er bei $t = t_2$ wieder null erreicht:

$$[\Delta G/G]_{Drift} = \frac{1}{2} \frac{|G_1 - G_2|}{G} \cdot \left(1 - \frac{|t - \frac{t_2+t_1}{2}|}{\frac{t_2-t_1}{2}} \right) \quad (8.4)$$

$$\Delta \mathcal{L}_{Offset, Drift} = \frac{|\mathcal{L}_{Offset,1} - \mathcal{L}_{Offset,2}|}{2} \cdot \left(1 - \frac{|t - \frac{t_2+t_1}{2}|}{\frac{t_2-t_1}{2}} \right) \quad (8.5)$$

Für die Berechnung des Driftfehlers im kalibrierten Spektrum ist zu beachten, daß Instrumentresponsivität und Offset nicht unabhängig voneinander sind. Der Fehler in der Drift dieser beiden Größen läßt sich auch nicht auf unabhängige Meßgrößen zurückführen. Insbesondere die Drift der

Schwarzkörpertemperatur (und damit der Strahldichte des Schwarzkörpers \mathcal{L}_{BB}) und die Drift des gemessenen Schwarzkörperspektrums S_{BB} sind sehr stark korreliert. Daher wird der Fehler im kalibrierten Spektrum aus den Fehlern der Instrumentresponsivität und des Offsets berechnet, wobei die Größtfehleraddition verwendet wird:

$$\Delta\mathcal{L}_{atm, Drift} = S_{atm} \cdot \Delta G_{Drift} + \Delta\mathcal{L}_{Offset, Drift} \quad (8.6)$$

Fehler in der Bestimmung der Basislinie

In Abschnitt 5.4 wurde die Problematik atmosphärischer Signaturen in den Weltraumpektren behandelt. Es hat sich gezeigt, daß nach Entfernen der Linien aus den Spektren nur noch in den Kanälen 1 und 2 in einigen Spektralbereichen ein systematischer Fehler in der Basislinie zu erkennen ist. Von diesem Fehler sind nur die Weltraumpektren betroffen. Die Auswirkungen dieses Fehlers auf Instrumentresponsivität (Gl. (5.11)), Offset (Gl. (5.10)) und kalibriertes Spektrum berechnen sich zu:

$$\begin{aligned} [\Delta G/G]_{Basislinie} &= \frac{\Delta S_{DS, Basislinie}}{G} \frac{1}{\mathcal{L}_{BB}} \\ \Delta\mathcal{L}_{Offset, Basislinie} &= \frac{\Delta S_{DS, Basislinie}}{G} \frac{S_{BB}}{S_{BB} - S_{DS}} \\ \Delta\mathcal{L}_{atm, Basislinie} &= \frac{\Delta S_{DS, Basislinie}}{G} \frac{|S_{BB} - S_{atm}|}{S_{BB} - S_{DS}} \end{aligned} \quad (8.7)$$

Fehler in der Strahldichte des Schwarzkörpers

Der Fehler in der Strahldichte des Schwarzkörpers wurde in Abschnitt 5.5 quantifiziert. Ein Emissionsvermögen, das kleiner als 1 ist, führt zu Restreflexionen der Strahlung aus der Umgebung. Die relativen Abweichungen in der Strahldichte, die sich daraus gegenüber einem Emissionsvermögen von 1 ergeben, hängen von der Temperatur und der Wellenzahl ab. Dies gilt auch für die Auswirkungen eines Fehlers in der Schwarzkörpertemperatur auf die Strahldichte. Die Gleichungen (8.8) bis (8.10) geben an, wie sich ein Fehler in der Strahldichte des Schwarzkörpers auf Instrumentresponsivität, Offset und kalibriertes Spektrum auswirken:

$$[\Delta G/G]_{\mathcal{L}_{BB}} = \frac{\Delta\mathcal{L}_{BB}}{\mathcal{L}_{BB}} \quad (8.8)$$

$$\Delta\mathcal{L}_{Offset, \mathcal{L}_{BB}} = \mathcal{L}_{Offset} \cdot \frac{\Delta\mathcal{L}_{BB}}{\mathcal{L}_{BB}} \quad (8.9)$$

$$\Delta\mathcal{L}_{atm, \mathcal{L}_{BB}} = \mathcal{L}_{atm} \cdot \frac{\Delta\mathcal{L}_{BB}}{\mathcal{L}_{BB}} \quad (8.10)$$

Fehler in der Phasenbestimmung

Sowohl die atmosphärischen als auch die Schwarzkörper- und Weltraumpektren weisen Restfehler in der Phase auf. Diese wurden in Kap. 6 quantifiziert. Die Fortpflanzung des Phasenfehlers auf das Spektrum erfolgt nach Gl. (6.7):

$$\Delta S_{\Delta\varphi} \approx \text{Im}(S) \cdot \Delta\varphi$$

Hierbei ist der Imaginärteil für alle Spektren, die in die Kalibrierungsgleichung eingehen, etwa gleich groß. Der Phasenfehler der verschiedenen Spektren ist nicht unabhängig, da allen Spektren

dieselbe instrumentelle Phase zugrunde liegt. Daher wird die Größtfehleraddition angewandt. Auch hier werden Instrumentresponsivität und Offset wieder getrennt berechnet. Der Fehler durch den Phasenfehler im atmosphärischen Spektrum hat nur einen Einfluß auf den Offset und führt zu keinem Skalierungsfehler (solange die Näherung $1 - \cos \varphi \approx 1$ gültig ist.¹) Die Beiträge der Phasenfehler zum Fehler in der Instrumentresponsivität, dem Offset und dem kalibrierten Spektrum lauten:

$$[\Delta G/G]_{\Delta\varphi} = \text{Im}(S) \cdot \frac{\Delta\varphi_{BB} + \Delta\varphi_{DS}}{S_{BB} - S_{DS}} \quad (8.11)$$

$$\Delta\mathcal{L}_{\text{Offset}, \Delta\varphi} = \frac{\text{Im}(S)}{G} \cdot \left[\frac{S_{DS} \cdot \Delta\varphi_{BB} + S_{BB} \cdot \Delta\varphi_{DS}}{S_{BB} - S_{DS}} + \Delta\varphi_{\text{atm}} \right] \quad (8.12)$$

$$\Delta\mathcal{L}_{\text{atm}, \Delta\varphi} = \frac{\text{Im}(S)}{G} \cdot \left[\frac{|S_{\text{atm}} - S_{DS}| \cdot \Delta\varphi_{BB} + |S_{BB} - S_{\text{atm}}| \cdot \Delta\varphi_{DS}}{S_{BB} - S_{DS}} + \Delta\varphi_{\text{atm}} \right] \quad (8.13)$$

Fehler in der Nichtlinearitätskorrektur

Für die verwendete Zweipunktkalibrierung müssen alle Interferogramme auf dieselbe Responsivität skaliert werden (vgl. Kap. 7). Die Kalibrierungsgleichung lautet damit für die Spektren \tilde{S} , die bezüglich der Nichtlinearität noch nicht korrigiert sind:

$$\mathcal{L}_{\text{atm}} = \frac{\frac{R_0}{R_{\text{atm}}} \tilde{S}_{\text{atm}} - \frac{R_0}{R_{DS}} \tilde{S}_{DS}}{\frac{R_0}{R_{BB}} \tilde{S}_{BB} - \frac{R_0}{R_{DS}} \tilde{S}_{DS}} \cdot \mathcal{L}_{BB} = \frac{\frac{R_{BB}}{R_{\text{atm}}} \tilde{S}_{\text{atm}} - \frac{R_{BB}}{R_{DS}} \tilde{S}_{DS}}{S_{BB} - \frac{R_{BB}}{R_{DS}} \tilde{S}_{DS}} \cdot \mathcal{L}_{BB} \quad (8.14)$$

Für den Fehler im kalibrierten Spektrum müssen also die Fehler der Responsivitätsverhältnisse $\Delta \frac{R_{BB}}{R_{\text{atm}}}$ und $\Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}}$ betrachtet werden. Da diese Fehler nicht unabhängig sind, wird die Größtfehleraddition verwendet.

$$\Delta\mathcal{L}_{\text{atm}, NL} = \frac{1}{G} \left[\frac{|S_{BB} - S_{\text{atm}}|}{S_{BB} - S_{DS}} |\tilde{S}_{DS}| \cdot \Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}} + \tilde{S}_{\text{atm}} \cdot \Delta \frac{R_{BB}}{R_{\text{atm}}} \right] \quad (8.15)$$

Für die Fehlerabschätzung kann $\tilde{S} \approx S$ gesetzt werden. Um zu unterscheiden, welcher Anteil des Fehlers multiplikativ und welcher additiv auf das Spektrum wirkt, wird das gemessene atmosphärische Spektrum S_{atm} in den atmosphärischen Anteil S_{linie} und die durch die Eigenemission des Instruments vorgegebene Basislinie S_{basis} zerlegt. Dabei ist die Basislinie durch das Weltraumspektrum gegeben:

$$S_{\text{atm}} = S_{\text{linie}} + S_{\text{basis}} = S_{\text{linie}} + S_{DS} \quad (8.16)$$

Einsetzen der Beziehung (8.16) in Gl. (8.15) liefert:²

$$\Delta\mathcal{L}_{\text{atm}, NL} = \frac{1}{G} \left[|S_{DS}| \cdot \left(\Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}} + \Delta \frac{R_{BB}}{R_{\text{atm}}} \right) + S_{\text{linie}} \cdot \left(\Delta \frac{R_{BB}}{R_{\text{atm}}} - \frac{|S_{DS}|}{S_{BB} - S_{DS}} \Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}} \right) \right] \quad (8.17)$$

Dieser Ausdruck kann mit

$$\Delta\mathcal{L}_{\text{atm}, NL} \leq \frac{1}{G} \left[S_{\text{linie}} \cdot \Delta \frac{R_{BB}}{R_{\text{atm}}} + |S_{DS}| \cdot \left(\Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}} + \Delta \frac{R_{BB}}{R_{\text{atm}}} \right) \right] \quad (8.18)$$

¹Bei dem maximal abgeschätzten Phasenfehler von 58 mrad ist der Fehler durch diese Näherung kleiner als 0,2%, in den meisten Fällen ist er kleiner als 0,1%.

²Hierbei wird $S_{BB} - S_{\text{atm}} > 0$ angenommen. Dies ist im allgemeinen für Tangentenhöhen oberhalb ca. 10 km in den verwendeten Auswertefenstern gewährleistet. Für tiefere Tangentenhöhen muß die Rechnung entsprechend angepaßt werden.

abgeschätzt werden. Der erste Term beschreibt eine Skalierung des atmosphärischen Spektrums und wird mit dem Fehler in der Instrumentresponsivität zusammengefaßt,³ der zweite Term beschreibt eine langsam mit der Wellenzahl variierende Funktion, die einen additiven Beitrag zum Fehler liefert und zum Offset gezählt wird. Der Fehler in der maximalen Responsivitätsänderung $\Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}}$ wurde in Tabelle 7.4 (S. 82) abgeschätzt. Für die atmosphärischen Spektren ist nicht nur die Responsivitätsänderung kleiner, sondern auch ihr Fehler. Der Fehler $\Delta \frac{R_{BB}}{R_{atm}}$ kann daher mit $\Delta \frac{R_{BB}}{R_{atm}} \leq \Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}}$ abgeschätzt werden. Damit erhält man für die Fehlerbeiträge:

$$[\Delta G/G]_{NL} = \Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}} \quad (8.19)$$

$$\Delta \mathcal{L}_{Offset, NL} = \frac{2 \cdot S_{DS}}{G} \Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}} \quad (8.20)$$

$$\Delta \mathcal{L}_{atm, NL} = \frac{1}{G} \left[(S_{atm} + S_{DS}) \cdot \Delta \frac{R_{BB}}{R_{DS}} \right] \quad (8.21)$$

8.2 Summe der einzelnen Fehlerbeiträge

Im vorigen Abschnitt wurden die Auswirkungen der folgenden Fehlerquellen auf das kalibrierte Spektrum untersucht:

- Rauschen in den Schwarzkörper- und Weltraummessungen
- Drift von Instrumentresponsivität und Offset
- Fehler in der Basislinie durch atmosphärische Restsignaturen
- Fehler im Emissionsvermögen des Schwarzkörpers
- Fehler in der Schwarzkörpertemperatur
- Phasenfehler
- Fehler in der Nichtlinearitätskorrektur

Diese Fehler sind weitgehend unabhängig voneinander. Das Rauschen beeinflusst zwar sowohl die Genauigkeit der Phasenbestimmung als auch die Güte der Nichtlinearitätskorrektur, jedoch sind die Auswirkungen auf das kalibrierte Spektrum von so unterschiedlicher Art, daß die Fehler als unabhängig betrachtet werden können. Daher werden die hier aufgezählten Fehler gemäß der Gaußschen Fehlerfortpflanzung (vgl. Abschnitt 4.2) addiert. In Abb. 8.1 sind die Skalierungs- und Offsetfehler von Flug 10 für die Tangentenhöhen 31,3 km, 21,0 km und 10,5 km aufgeführt.

Der Gesamt-Skalierungsfehler liegt im Bereich von 0,5 bis 2 % und wird vor allem in mittleren Tangentenhöhen, die einen großen zeitlichen Abstand zu den Kalibrierungsmessungen haben, von dem Fehler durch die zeitliche Drift der Instrumentresponsivität dominiert. In den oberen und unteren Tangentenhöhen stammt in Kanal 1 der größte Beitrag vom Fehler der Nichtlinearitätskorrektur. In den Kanälen 2 bis 4 ist der Beitrag der Nichtlinearitätskorrektur weniger bedeutend, dafür nimmt der Beitrag durch den Temperaturfehler zu, und der Beitrag des Rauschens in den Schwarzkörper- und Weltraumspektren gewinnt ebenfalls an Bedeutung. In Kanal 1 liefert der

³Der relative Fehler in der Instrumentresponsivität ist genauso groß wie ein relativer Skalierungsfehler: $\frac{\Delta G}{G} = \frac{\Delta(1/G)}{1/G}$. Daher kann ein relativer Skalierungsfehler wie ein relativer Fehler in der Instrumentresponsivität behandelt werden.

Fehler in der Phasenkorrektur – aufgrund der vergleichsweise starken Strahlteileremission – für Wellenzahlen unterhalb von 850 cm^{-1} noch einen Beitrag zum Gesamtfehler. Der Beitrag des Phasenfehlers stammt dabei größtenteils vom Fehler des Weltraumpektrums; der Fehler durch den Phasenfehler im Schwarzkörperspektrum liegt unter 0,02 %

Insgesamt steigt der Skalierungsfehler mit der Wellenzahl an. Die Drift der Instrumentresponsivität wird hauptsächlich durch die Änderung der Interferometerjustierung infolge des thermischen Verzugs hervorgerufen. Da die Modulationseffizienz für große Wellenzahlen empfindlicher auf den Justierungszustand des Interferometers reagiert, ist in den kurzwelligen Kanälen die Drift der Instrumentresponsivität stärker. Auch die Fehler in der Strahldichte des Schwarzkörpers und der Fehler durch das Rauschen nehmen mit steigender Wellenzahl zu.

Für den Offsetfehler ist die Bilanz ähnlich. Auch hier ist der dominierende Beitrag der Fehler durch die zeitliche Interpolation der Kalibrierungsmessungen. In Kanal 1 sind noch die Beiträge durch Fehler in der Phasenkorrektur von Bedeutung. Im langwelligen Bereich (für Wellenzahlen unterhalb von 800 cm^{-1}) kommen noch Beiträge aufgrund der Nichtlinearität hinzu. In den Kanälen 2 bis 4 stammt der zweite große Beitrag neben dem Driftfehler vom Rauschen der Kalibrierungsmessungen. In den Kanälen 1 und 2 hat in einigen Spektralbereichen auch der Fehler durch die Rasur der Linien noch einen erkennbaren Anteil am Gesamtfehler.

Die Offsetfehler, die nur durch Skalierungsfehler entstehen, z.B. Fehler in der Strahldichte des Schwarzkörpers, sind proportional zum Betrag des Weltraumpektrums. In den Bereichen, in denen die Intensität des Weltraumpektrums null ist, ist auch der Offsetfehler durch einen Skalierungsfehler null. Das erklärt die starke spektrale Abhängigkeit der Beiträge zum Offsetfehler durch Skalierungsfehler.

Der Offsetfehler nimmt mit steigender Wellenzahl ab, weil die temperaturbedingten Änderungen in der vom Instrument emittierten Strahldichte für kürzere Wellenlängen geringer sind. Das Rauschen, das proportional zur *NESR* ist, nimmt ebenfalls bei größeren Wellenzahlen ab.

Der Gesamtfehler setzt sich aus Skalierungs- und Offsetfehler zusammen. Auch beim Gesamtfehler stammt der Hauptbeitrag von der Interpolation der Kalibrierungsmessungen.

Die Auswirkung einiger Fehlerquellen auf die Größe des Gesamtfehlers variiert mit der Tangentenhöhe. Insbesondere ist der Interpolationsfehler in der Mitte einer Horizontsondierungssequenz, bei einem großen zeitlichen Abstand zu den Kalibrierungsmessungen, größer als bei den oberen und unteren Tangentenhöhen, deren Messungen in zeitlicher Nähe zu einer Kalibrierungsmessung erfolgen. Auch der Phasenfehler des atmosphärischen Spektrums ändert sich mit der Tangentenhöhe. Dieser Fehler ist bei niedrigen Tangentenhöhen kleiner als in großen Höhen. Da jedoch der Gesamt-Phasenfehler im kalibrierten Spektrum vom Phasenfehler des Weltraumpektrums dominiert wird, fällt diese Höhenabhängigkeit nicht ins Gewicht.

In Abb. 8.2 sind die Fehlerspektren der systematischen Gesamtfehler für drei verschiedene Tangentenhöhen gezeigt. Außerdem sind die Fehler infolge von Skalierungsfehlern und die Offsetfehler dargestellt. Zum Vergleich sind die 2σ -Werte der *NESR* ebenfalls eingezeichnet. Diese Werte gelten für 2, 8 bzw. 20 koaddierte Interferogramme in 10,5 und 21 bzw. 31,3 km Höhe. Da Skalierungs- und Offsetfehler nicht unabhängig und teilweise gegenläufig sind, ist der Gesamtfehler teilweise kleiner als die Summe aus Skalierungs- und Offsetfehler. Der Gesamtfehler kann auch kleiner werden als der Offsetfehler allein.

Bei der obersten Tangentenhöhe wird der Gesamtfehler vom Offsetfehler dominiert. In Kanal 1 ist der systematische Fehler bis zu einem Faktor 5 größer als der 2σ -Wert der *NESR*. Der Skalierungsfehler liegt jedoch weitgehend unterhalb des Rauschniveaus. In den übrigen Kanälen

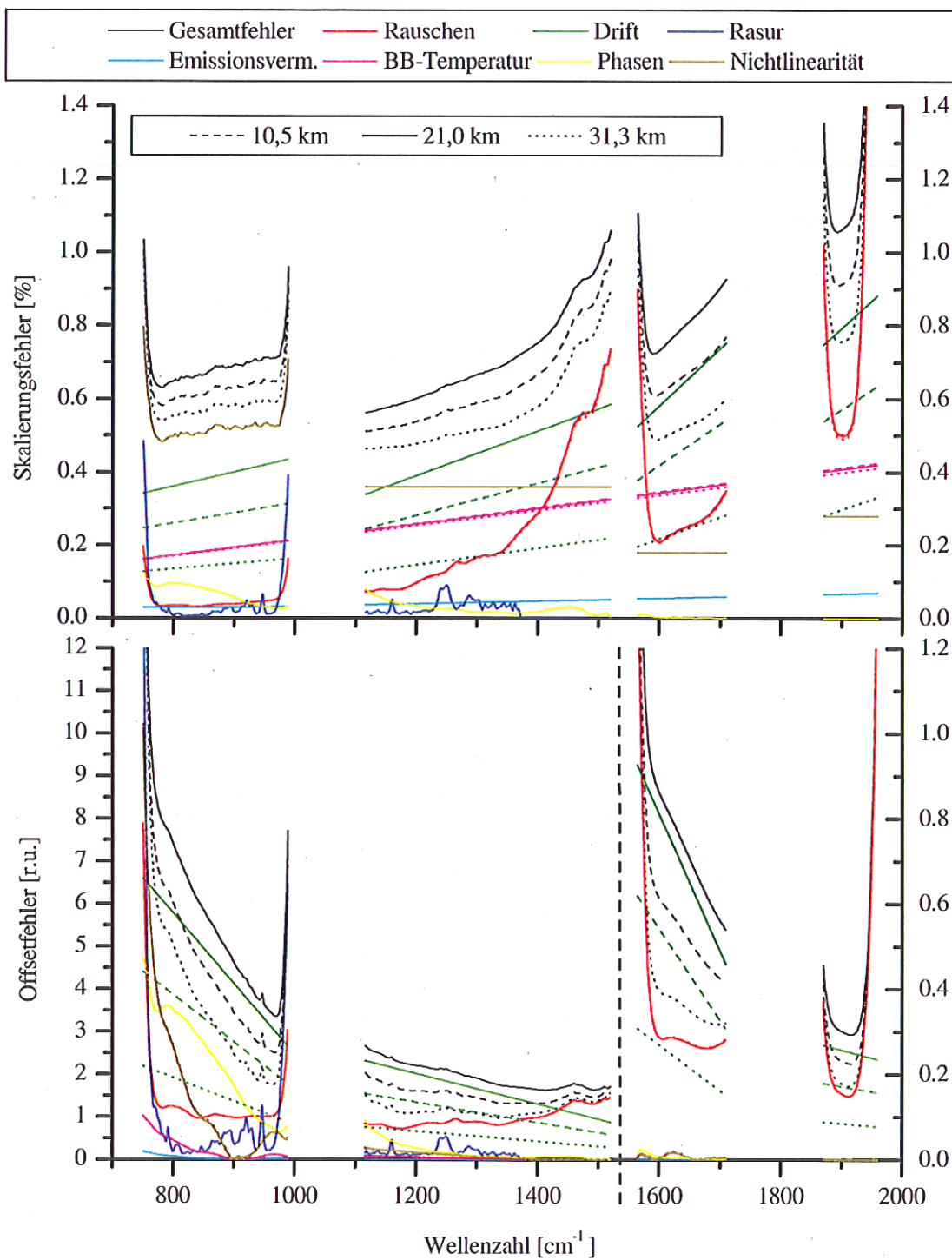


Abbildung 8.1: Beiträge zum Skalierungs- und zum Offsetfehler des kalibrierten Spektrums für Flug 10 und die Tangentenhöhen 31,3 km, 21,0 km und 10,5 km. Angegeben sind jeweils die 2σ -Werte. Der Offsetfehler ist für die Kanäle 1 und 2 auf der linken Achse aufgetragen, für die Kanäle 3 und 4 auf der rechten. Weitere Erläuterungen siehe Text.

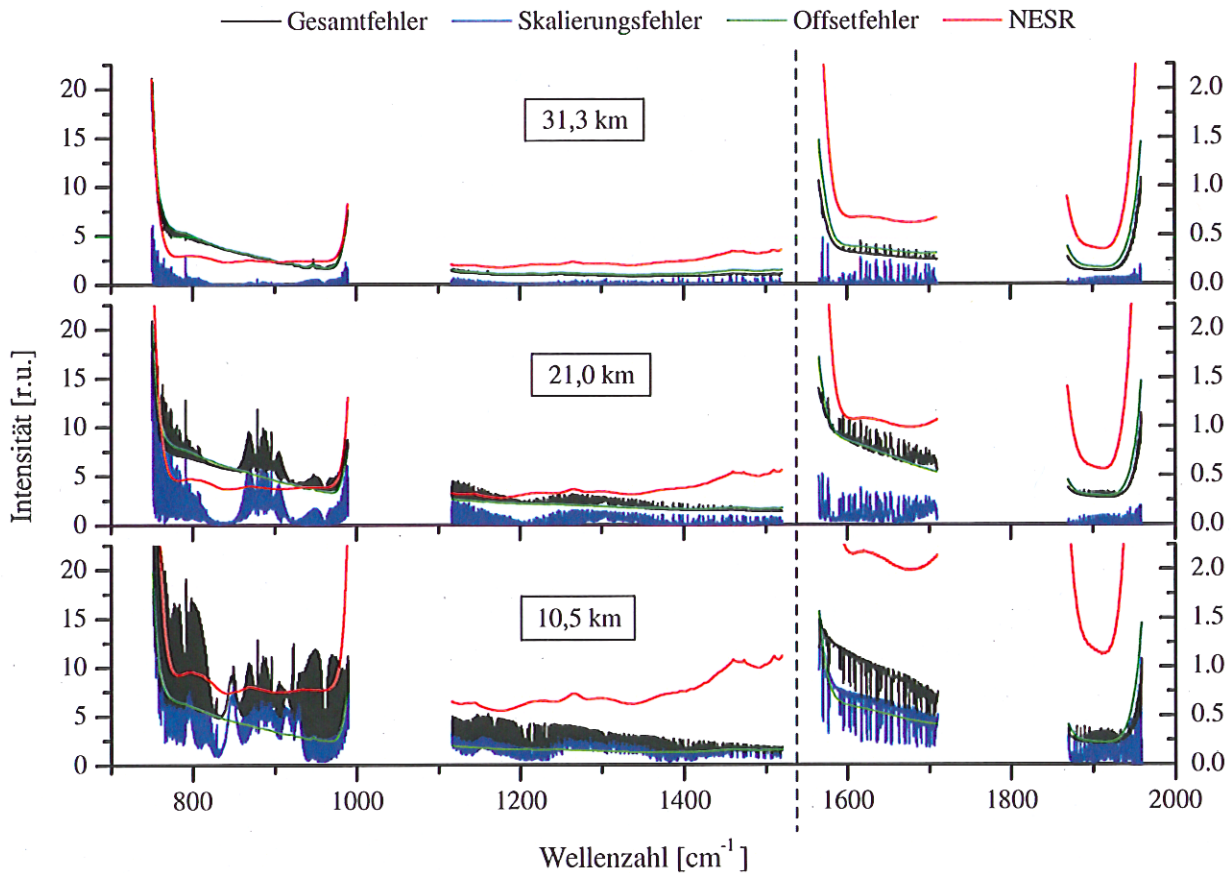


Abbildung 8.2: Gesamtfehler (2σ) des kalibrierten Spektrums für verschiedene Tangentenhöhen. Zum Vergleich sind die 2σ -Werte der *NESR* für die koaddierten Spektren ebenfalls eingezeichnet. Die Kanäle 1 und 2 sind auf der linken Achse aufgetragen, die Kanäle 3 und 4 auf der rechten.

ist der gesamte systematische Fehler kleiner als die *NESR*.

In den tieferen Tangentenhöhen gewinnt der Skalierungsfehler zunehmend an Bedeutung. Bei einer Tangentenhöhe von 10,5 km dominiert der Skalierungsfehler in den Kanälen 1 und 2 den Gesamtfehler, in den Kanälen 3 und 4 sind die Skalierungs- und Offsetbeiträge ausgeglichen. Auch hier liegt der systematische Fehler in den Kanälen 2, 3 und 4 unterhalb des Rauschniveaus. In Kanal 1 liegt bei den tieferen Tangentenhöhen nicht nur der Offsetfehler, sondern auch der Skalierungsfehler über dem Rauschniveau.

8.3 Beurteilung der Fehlerquellen

Das Rauschen in den Kalibrierungsmessungen ist in Kanal 1 von untergeordneter Bedeutung. In den übrigen Kanälen wird es jedoch unter einigen Bedingungen zur größten Fehlerquelle (vgl. Abb. 8.1). Das Rauschen kann durch eine weitere Verringerung der spektralen Auflösung und durch eine längere Meßzeit weiter reduziert werden. Eine Verringerung der spektralen Auflösung führt dazu, daß sich das Channeling bei der Kalibrierung nicht mehr heraushebt. Wenn jedoch die Rauschamplitude deutlich größer ist als die Amplitude des Channeling, dann ist eine Verringerung der spektralen Auflösung zur Reduzierung des Rauschens sinnvoll. Da die Amplitude des Channeling von der Justierung abhängt, muß hier für jeden Flug und jeden Kanal entschieden werden, wie stark die spektrale Auflösung reduziert werden kann. Eine Verlängerung der Meßzeit für die Kalibrierungsmessungen kann in Abhängigkeit von der insgesamt zur Verfügung stehenden Zeit erwogen werden.

Die Drift von Instrumentresponsivität und Offset ist trotz der im Flug 10 vergleichsweise häufig durchgeführten Kalibrierungsmessungen eine dominierende Fehlerquelle. Um noch häufiger zu kalibrieren, müßten Horizontsondierungssequenzen unterbrochen werden. Diese sollten jedoch zeitlich möglichst kompakt gehalten werden, um alle Tangentschichten bei annähernd derselben Situation zu vermessen. Da die Drift hauptsächlich von der thermischen Drift des Instruments verursacht wird, kann hier durch die thermische Stabilisierung des Instruments eine Verbesserung erzielt werden.

Der Fehler in der Basislinie durch atmosphärische Restsignaturen ist nur in den Kanälen 1 und 2 von Bedeutung. Vor allem breitbandige Signaturen führen zu Fehlern in den Spektren. Hier könnte durch das im folgenden beschriebene iterative Verfahren noch eine Verbesserung erzielt werden: Aufgrund der Meßgeometrie enthalten die atmosphärischen Spektren auch Informationen über den Säulengehalt der Gase über der Ballonhöhe. Im ersten Schritt wird zur Bestimmung der Basislinie verfahren wie in Abschnitt 5.4 beschrieben. Aus dem anschließenden Spurengasretrieval wird der Säulengehalt über dem Ballon bestimmt, und dieser geht in einem zweiten Schritt in die Simulation des Weltraumpektrums ein. Dieses Verfahren ist allerdings recht aufwendig. Wie schnell das Verfahren konvergiert und wie genau diese Methode ist, muß mit Hilfe von Simulationsrechnungen untersucht werden.

Die Fehler in der Bestimmung der Strahldichte des Schwarzkörpers könnten nur mit erheblichem konstruktiven Aufwand verringert werden, der angesichts des relativ kleinen Beitrags dieser Fehler zum Gesamtfehler nicht gerechtfertigt ist.

Der Phasenfehler trägt in Kanal 1 maßgeblich zum Gesamtfehler bei, in den übrigen Kanälen fällt er wegen der geringen Strahlteileremission nicht ins Gewicht. Die Auswirkungen des Phasenfehlers könnten durch einen Strahlteiler mit schwächerer Eigenemission verringert werden. Bislang konnte jedoch für MIPAS-B2 kein solcher Strahlteiler gefunden werden. Der Phasenfehler selbst kann – besonders bei den Weltraumspektren – ebenso wie der Driftfehler durch eine bessere thermische Stabilität des Instruments reduziert werden, da das Phasenspektrum des Weltraumpektrums bei arktischen Bedingungen durch Interpolation bestimmt werden muß.

Die Genauigkeit der Nichtlinearitätskorrektur kann kaum weiter gesteigert werden. Die führenden Fehler sind hier der Abbruch der Taylorentwicklung und der Einfluß der Detektortemperatur. Um die Taylorentwicklung weiterzuführen, ist ein sehr gutes S/N und damit eine sehr große Anzahl an Interferogrammen erforderlich. Dies würde während des Fluges zu viel Zeit in Anspruch nehmen. Da die Detektortemperatur unter anderem von der Temperatur im Kaltraum abhängt, könnte auch hier die thermische Stabilisierung des Kaltraums noch Verbesserungen bringen.

Kapitel 9

Auswirkungen systematischer Fehler in den Spektren auf die Spurengasprofile

In dieser Arbeit wurden die Fehlerquellen quantifiziert, die zu einem systematischen Fehler im kalibrierten Spektrum führen. In Kap. 8 wurde gezeigt, wie sich die einzelnen Fehler in die kalibrierten Spektren fortpflanzen. Welchen Einfluß systematische Fehler in den kalibrierten Spektren auf das Spurengasretrieval haben, hängt auch von den Retrieval-Parametern ab. So spielt z.B. die Wahl des Regularisierungsparameters und die damit verbundene Wichtung der Nebenbedingungen eine gewisse Rolle. Ebenso wird das Ergebnis zu einem gewissen Grad davon beeinflusst, welche Parameter vorgegeben und welche angepaßt werden.

In diesem Kapitel wird anhand von vier Beispielen gezeigt, wie sich systematische Fehler im Spurengasretrieval auswirken können. Im ersten Beispiel wird untersucht, wie sich ein Skalierungsfehler äußert, der gleichartig auf das gesamte Spektrum wirkt. Ein solcher Fehler kann z.B. durch eine Ungenauigkeit in der Schwarzkörpertemperatur auftreten. Am Beispiel von N_2O_5 wird der Effekt eines Rasurfehlers demonstriert, wenn im Weltraumspektrum noch eine Signatur von N_2O_5 vorhanden ist. Am Beispiel des ebenfalls breitbandig emittierenden Gases CCl_4 wird der Einfluß eines Offsetfehlers durch einen Fehler in der Phasenkorrektur analysiert, und abschließend wird die Auswirkung der Detektor-Nichtlinearität auf das Spurengasretrieval gezeigt.

Die Spurengasretrieval wurden mit den am IMK zur Verfügung stehenden Strahlungsübertragungs- und Inversionsprogrammen [Stiller, 2000, von Clarmann, 1994, Clough et al., 1986] durchgeführt. Die Profile der unverfälschten Spektren wurden im Rahmen der standardmäßigen Auswertung bestimmt [Wetzel et al., 2002a, Stowasser, 2002, Wiegele et al., 2002]. Um die Auswirkungen der systematischen Fehler in den Spektren auf die Spurengasprofile zu untersuchen, wurde neben den unverfälschten Spektren jeweils ein Satz Spektren mit dem entsprechenden Fehler erzeugt. Mit diesen fehlerbehafteten Spektrensätzen wurden die Inversionsrechnungen erneut durchgeführt.

9.1 Skalierungsfehler

Der Einfluß eines Skalierungsfehlers wurde am Beispiel einer Horizontsondierungssequenz von Flug 4 in Kanal 1 untersucht. Um den Effekt des Skalierungsfehlers deutlich zu erkennen, wurden alle Spektren mit dem Faktor 0,95 skaliert. Für ein Spurengasretrieval wird zunächst aus den gemessenen Spektren das Temperaturprofil abgeleitet. Diese Information geht dann in das Spurengasretrieval mit ein (vgl. Abschnitt 3.2.3). In Abb. 9.1(a) ist das Temperaturprofil für die

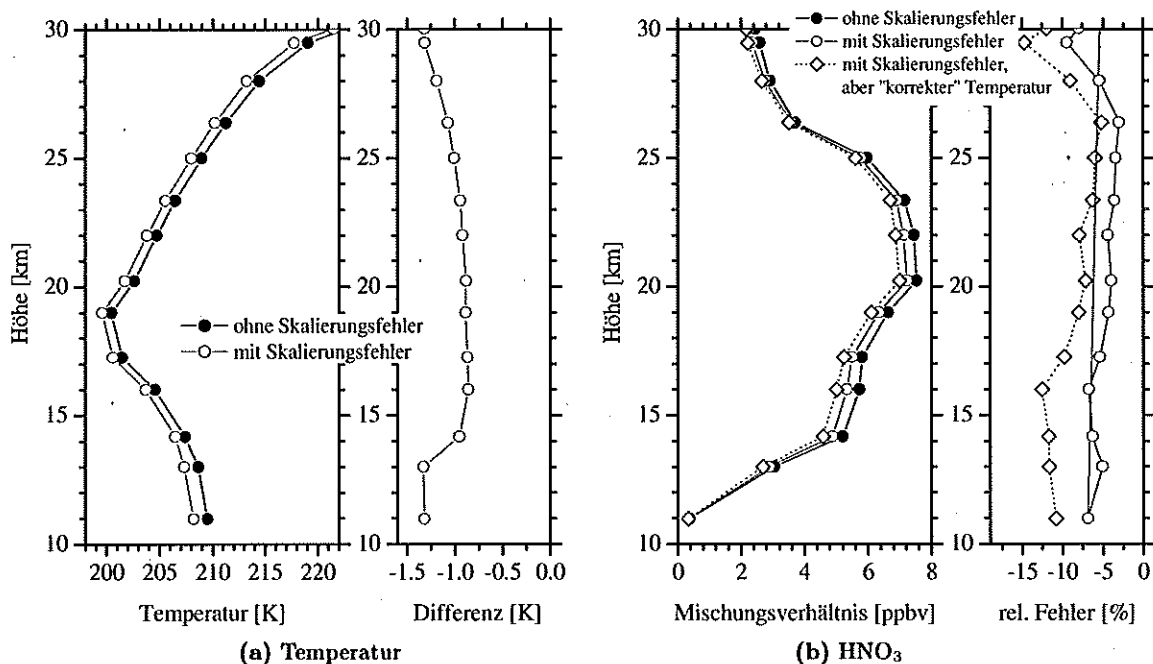


Abbildung 9.1: Einfluß eines Skalierungsfehlers auf die Temperatur (a) und die Konzentration von HNO₃ (b). Das HNO₃-Profil aus den Spektren mit Skalierungsfehler wurde mit beiden in Abb. 9.1(a) bestimmten Temperaturprofilen abgeleitet. Die „korrekte“ Temperatur ist hier die Temperatur, die aus den Spektren ohne Skalierungsfehler abgeleitet wurde.

Spektren mit und ohne Skalierungsfehler gezeigt. Durch den Skalierungsfehler wird die Temperatur um ca. 1 K kleiner. Der Fehler zeigt eine geringe Höhenabhängigkeit. Abb. 9.1(b) zeigt das Vertikalprofil von HNO₃, ebenfalls aus den Spektren mit und ohne Skalierungsfehler abgeleitet. Zusätzlich ist noch das Profil gezeigt, das man aus den Spektren mit Skalierungsfehler erhält, wenn man die „korrekte“ Temperatur vorgibt, also die Temperatur, die man aus den Spektren ohne Skalierungsfehler ableiten würde. In dieser Situation ist der Gesamtfehler im HNO₃-Profil größer, als wenn sowohl die Temperatur als auch die Spurengaskonzentration aus den Spektren mit Skalierungsfehler abgeleitet werden. Es gibt also eine Rückkopplung zwischen Temperaturfehler und Fehler im Spurengasprofil: Wenn die Linien in den Spektren zu klein sind, dann wird entsprechend eine zu niedrige Temperatur abgeleitet. Da die Intensität einer spektralen Linie im allgemeinen sowohl mit der Temperatur als auch mit der Spurengaskonzentration zunimmt, wird die abgeleitete Spurengaskonzentration für die meisten Gase größer, wenn eine zu niedrige Temperatur angenommen wird. Damit wird der Skalierungsfehler teilweise kompensiert. In dem hier gezeigten Beispiel wird der Fehler im Spurengasprofil durch diesen Effekt von etwa 10% auf 5% halbiert. Wie effektiv dieser kompensatorische Effekt ist, hängt von der Wellenlänge ab und wird davon bestimmt, wie stark die Linienintensität von der Temperatur abhängt. Diese Kompensation erfolgt nur, wenn der Skalierungsfehler in den Spektralbereichen, aus denen die Temperatur abgeleitet wird, ähnlich groß ist (und in dieselbe Richtung geht) wie in den Spektralbereichen, aus denen das jeweilige Spurengasprofil abgeleitet wird. Gleichartige Fehler über den gesamten Spektralbereich werden z.B. durch Fehler in der Temperatur des Schwarzkörpers

verursacht, während Fehler in der Bestimmung des Korrekturfaktors für die Nichtlinearität von Kanal zu Kanal unterschiedlich sind, innerhalb eines Kanals jedoch keine spektrale Abhängigkeit zeigen. Auch Fehler in der Drift der Kalibrierungsmessungen zeigen innerhalb eines Kanals im allgemeinen nur eine schwache spektrale Abhängigkeit und gehen bei vielen Flügen für alle Kanäle in dieselbe Richtung. Da dieser Fehler den Gesamtfehler dominiert, ist davon auszugehen, daß für die meisten Gase der Fehler in der Temperatur kompensatorisch wirkt. Der relative Fehler in den Spurengasprofilen liegt in derselben Größenordnung wie der ursächliche Skalierungsfehler. Im Bereich von einigen Prozent kann für die meisten Gase davon ausgegangen werden, daß die Fehlerfortpflanzung linear verläuft. Für Flug 10 sollte daher der Fehler im Spurengasretrieval, der durch Skalierungsfehler verursacht wird, im allgemeinen nicht größer als 1 bis 2% sein.

9.2 Offsetfehler durch atmosphärische Restsignaturen

Offsetfehler beeinflussen die Ergebnisse des Spurengasretrievals vor allem, wenn die spektrale Signatur des Gases in den gemessenen Spektren breitbandig erscheint,¹ da in solchen Fällen der instrumentelle Offset von der spektralen Signatur nur schwer zu trennen ist. Ein Beispiel für ein breitbandig erscheinendes Gas ist N_2O_5 . Bei diesem Gas besteht das Problem, daß im Weltraumspektrum noch eine signifikante Signatur dieses Gases vorhanden sein kann, sich diese jedoch nicht von der Eigenemission des Instruments unterscheiden läßt (vgl. Abschnitt 5.4). Um diesen Einfluß zu untersuchen, wurde daher ein N_2O_5 -Retrieval mit zwei Sätzen von Spektren durchgeführt. Für einen Satz wurde die Simulation des Weltraumspektrums ohne N_2O_5 durchgeführt, für den anderen Satz wurde eine N_2O_5 -Signatur von ca. $1 \text{ nW}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ Stärke im Weltraumspektrum verwendet. Dies wird für die Situation von Flug 9 als realistische Abschätzung betrachtet. Der Effekt in den simulierten Weltraumspektren und die daraus resultierende Differenz in den kalibrierten atmosphärischen Spektren sind in Abb. 9.2 dargestellt. Der absolute Fehler im Weltraumspektrum pflanzt sich nahezu direkt in das kalibrierte Spektrum fort. Der Einfluß auf die Skalierung dagegen ist minimal. Wenn im Weltraumspektrum zu wenig N_2O_5 angenommen wird, dann wird dieser Anteil dem Instrument zugeschlagen und von den atmosphärischen Spektren subtrahiert. Deren N_2O_5 -Signatur ist dann ebenfalls zu schwach. Die aus den beiden Spektrensätzen abgeleiteten Vertikalprofile sind in Abb. 9.3 gezeigt. Wie zu erwarten ist, wird die abgeleitete N_2O_5 -Konzentration geringer, wenn die Signatur in den Spektren zu schwach ist. Sowohl der absolute als auch der relative Fehler nimmt nach oben hin zu. Offensichtlich erniedrigt der Retrieval-Algorithmus die Spurengaskonzentration vor allem in den oberen Höhen, um die zu schwache Signatur in den Spektren zu kompensieren. Die Spektren der tieferen Tangentenhöhen enthalten aufgrund der Meßgeometrie auch Strahlungsbeiträge aus höheren Atmosphärenschichten. Daher wird bei den tieferen Tangentenhöhen der Fehler im Weltraumspektrum bereits teilweise durch die Erniedrigung der Konzentration in den oberen Schichten kompensiert, so daß hier die Auswirkung auf das Retrieval geringer ist. Im Bereich der obersten Tangentenhöhe liegt der Fehler in dem hier gezeigten Beispiel bei 6%. Die Unsicherheit in den spektroskopischen Daten, die für das Retrieval herangezogen werden, liegen für N_2O_5 im Bereich von 10% (2σ) und damit über den radiometrischen Fehlern.

¹Die Signatur erscheint breitbandig, wenn die einzelnen Linien so dicht nebeneinanderliegen, daß sie mit MIPAS-B2 nicht mehr spektral aufgelöst werden können.

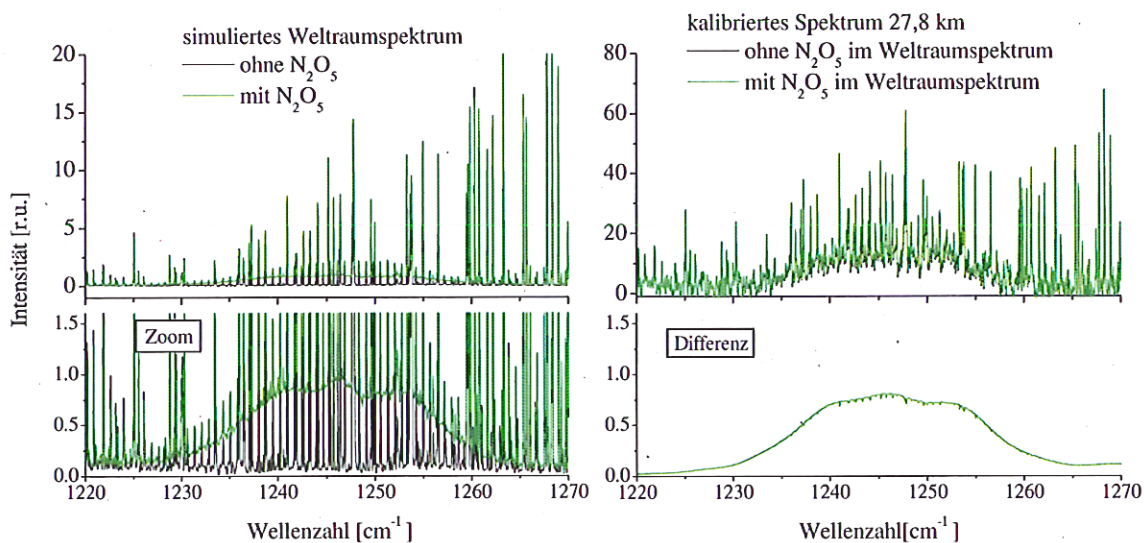


Abbildung 9.2: Einfluß einer aus den Weltraumspektren nicht entfernten N_2O_5 -Signatur auf die kalibrierten Spektren. Links ist die N_2O_5 -Signatur in den simulierten Weltraumspektren gezeigt, rechts ist der Unterschied in den kalibrierten Spektren der obersten Tangentenhöhe gezeigt. Für die tieferen Tangentenhöhen ist der Effekt ähnlich.

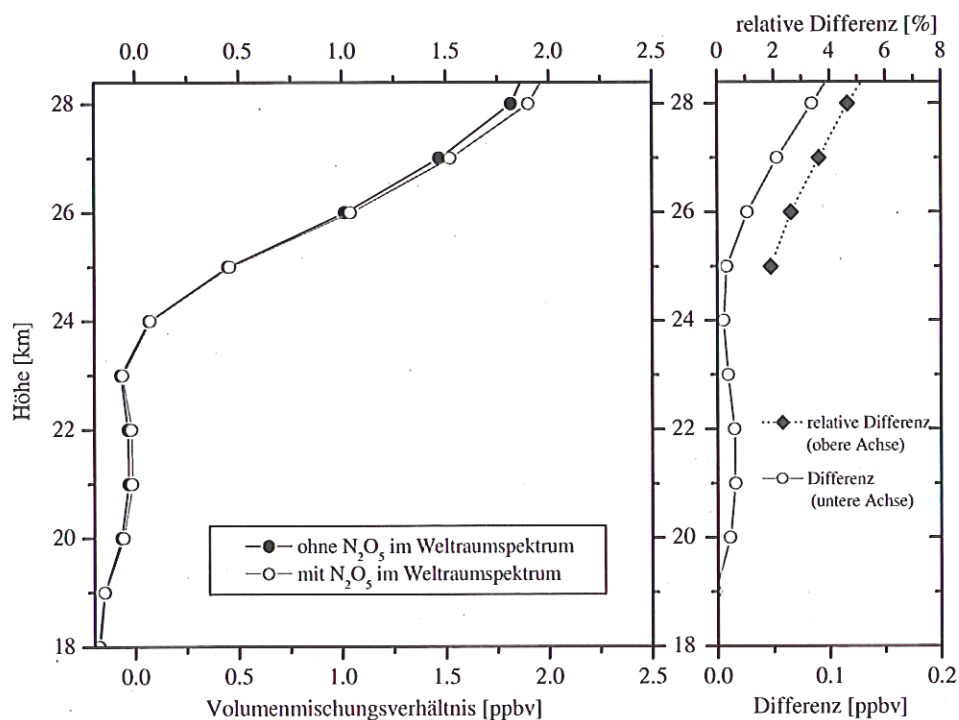


Abbildung 9.3: Einfluß einer aus den Weltraumspektren nicht entfernten N_2O_5 -Signatur auf das abgeleitete Vertikalprofil. In der rechten Graphik ist auf der oberen Achse die relative Differenz zwischen den beiden Situationen eingezeichnet, auf der unteren Achse die absolute Differenz. Unterhalb von 25 km ist das Volumenmischungsverhältnis praktisch null (das Retrieval kann hier sogar leicht negative Werte ausgeben), daher ist für die niedrigeren Tangentenhöhen die Angabe eines relativen Fehlers nicht mehr sinnvoll.

9.3 Offsetfehler durch Phasenfehler

Der Offsetfehler wird in Kanal 1 vom Fehler in der Phasenkorrektur und vom Driftfehler dominiert. Der Einfluß eines Phasenfehlers wird exemplarisch für das Vertikalprofil von CCl_4 untersucht, das im Spektralbereich von $786 - 806 \text{ cm}^{-1}$ abgeleitet wird. Als Phasenfehler wird der in Tabelle 6.3 (S. 65) für Flug 10 abgeschätzte Phasenfehler des Weltraumspektrums $\Delta\varphi_{DS}$ herangezogen. Mit

$$S_{DS, \Delta\varphi} = S_{DS} + \Delta\varphi \cdot \text{Im}(S_{DS}) \quad (9.1)$$

wird ein durch einen Phasenfehler verfälschtes Weltraumspektrum erzeugt, mit dem die atmosphärischen Spektren kalibriert werden. Die durch den Phasenfehler verursachte Differenz in den kalibrierten Spektren ist für die Tangentenhöhen von 10,8 km und 27,8 km in Abb. 9.4 dargestellt. Der Phasenfehler verursacht innerhalb des Auswertefensters einen nahezu konstanten

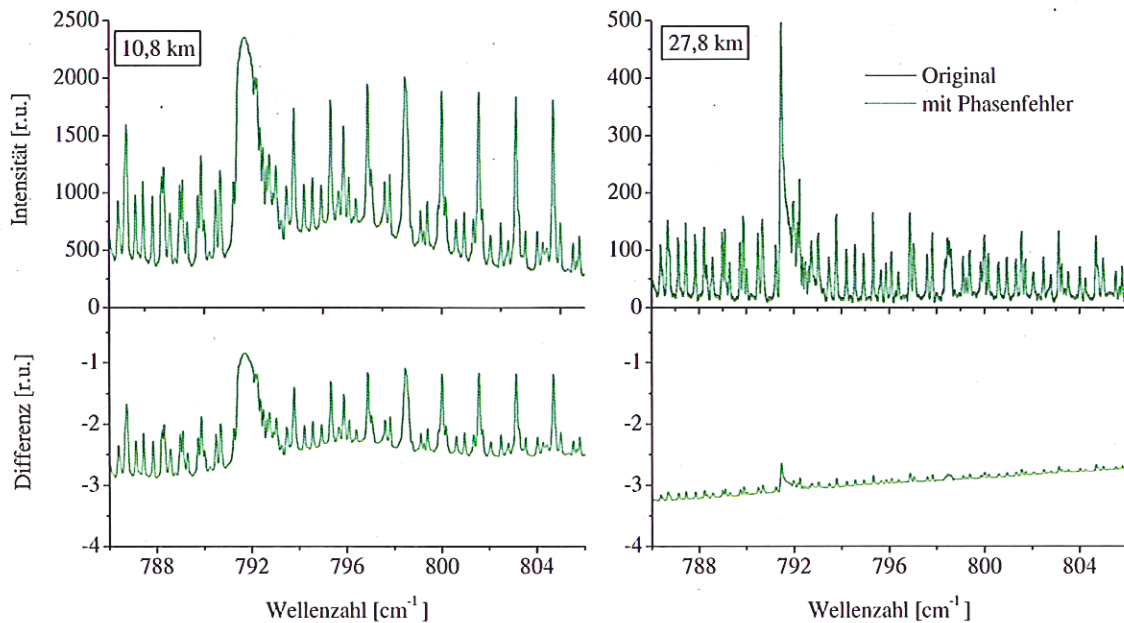


Abbildung 9.4: Einfluß eines Phasenfehlers auf die kalibrierten Spektren im Bereich, in dem das Spurengas CCl_4 ausgewertet wird. Während der Fehler in den oberen Höhen hauptsächlich additiv erscheint, ist in den unteren Höhen der Effekt durch die Skalierung in der gleichen Größenordnung wie der additive Beitrag. Bei der Differenz wurde das Originalspektrum vom Spektrum mit Phasenfehler subtrahiert.

Offset. Da der Phasenfehler im Weltraumspektrum auch die Skalierung beeinflusst, zeigt sich in der Differenz der Spektren mit und ohne Phasenfehler auch eine Linienstruktur, besonders in den unteren Tangentenhöhen, in denen der absolute Skalierungsfehler wegen der höheren Strahldichte größer ist. Ein Fehler durch die Drift des Offsets wirkt sich auf die kalibrierten Spektren ähnlich aus.

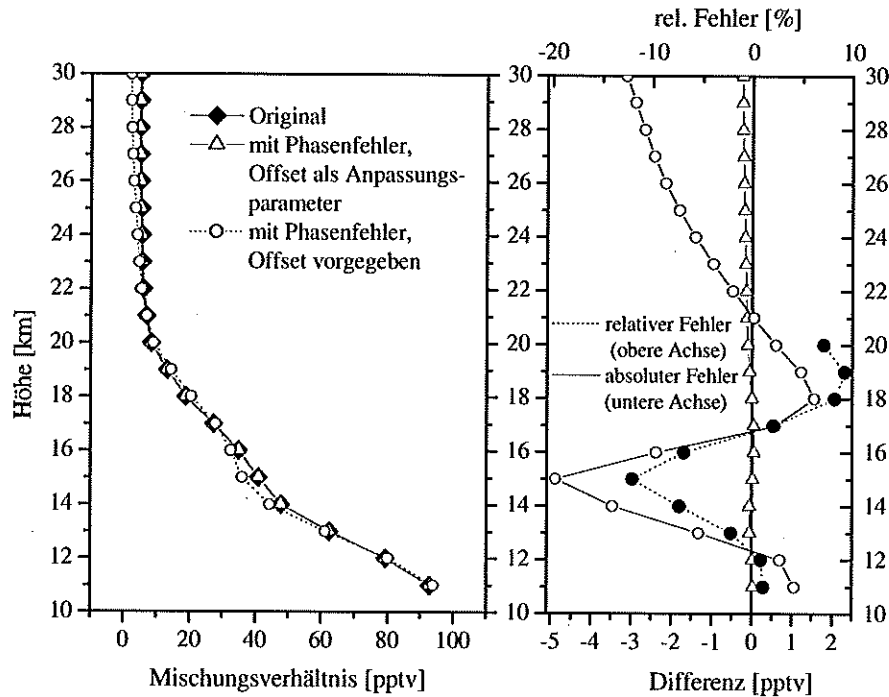


Abbildung 9.5: Einfluß eines Phasenfehlers auf das CCl_4 -Retrieval. Im linken Bild sind die Vertikalprofile gezeigt, die Differenzen zur Originalversion sind im rechten Bild angegeben. Das Originalprofil im linken Bild ist größtenteils von dem mit Dreiecken gezeichneten Profil verdeckt. Die ausgefüllten Kreise im rechten Bild markieren den relativen Fehler und beziehen sich auf die obere Achse.

Abb. 9.5 zeigt die Ergebnisse der Retrieval-Rechnungen. Neben dem Profil aus den unverfälschten Spektren (Rauten) sind die Profile für einen simulierten Phasenfehler eingezeichnet. Dabei wurde in einem Test der Offset als Anpassungsparameter freigegeben (Dreiecke); in einem zweiten Test wurde der Offset nicht angepaßt, statt dessen wurde der Offset vorgegeben, der sich aus den unverfälschten Spektren ergeben hatte (Kreise). Im rechten Teil der Abbildung ist die Differenz der Profile zum unverfälschten Profil gezeigt. Für das mit Kreisen gezeichnete Profil ist bis 20 km zusätzlich der relative Fehler angegeben. Oberhalb von 20 km ist die Angabe eines relativen Fehlers nicht mehr sinnvoll, da das Mischungsverhältnis dort nahe null ist. Das Spurengasprofil, bei dem der Offset als Anpassungsgröße freigegeben wurde, zeigt praktisch keine Abweichung zum ursprünglichen Profil. Wenn der Offset jedoch als bekannt vorausgesetzt und vorgegeben wird, dann ergeben sich im abgeleiteten Spurengasprofil Abweichungen von 10% und mehr. Dieses Beispiel zeigt, daß sich radiometrische Fehler sehr unterschiedlich auswirken können, abhängig davon, welche zusätzlichen Annahmen in das Spurengasretrieval eingehen.

Beim Vergleich der abgeleiteten Vertikalprofile fällt auf, daß die Konzentration, die aus den Spektren mit Phasenfehler bei vorgegebenem Offset abgeleitet wird, nicht systematisch zu gering ist (obwohl die Strahldichte in den Spektren systematisch zu niedrig ist). Im Bereich unter 12 km und zwischen 17 und 20 km ergibt sich dennoch eine positive Abweichung. Hier zeigt sich der Einfluß von weiteren Retrievalparametern. Ob der Offset vorgegeben oder angepaßt wird, wirkt sich auch auf die Regularisierung aus. Diese beeinflusst wiederum das abgeleitete Spurengasprofil, so daß der hier dargestellte Test keine eindeutige Fehlerzuordnung erlaubt. Das Beispiel zeigt jedoch, daß nach Möglichkeit der Offset als Anpassungsparameter freigegeben werden sollte.

9.4 Nichtlinearität

In diesem Abschnitt wird am Beispiel von Flug 7 gezeigt, wie sich die Detektor-Nichtlinearität auf die Spurengasprofile auswirkt, wenn sie nicht korrigiert wird. Bei der Nichtlinearitätskorrektur werden alle Spektren mit einem Korrekturfaktor skaliert, der vom DC-Wert und damit von der Tangentenhöhe abhängt (vgl. Kap. 7). Da die Schwarzkörper- und Weltraumspektren ebenfalls skaliert werden, wirkt sich die Nichtlinearitätskorrektur sowohl in der Skalierung als auch im Offset aus. Der Skalierungsfehler nimmt mit der Tangentenhöhe zu und liegt in den Kanälen 1 und 2 zwischen 4,5 und 7% bei der untersten bzw. obersten Tangentenhöhe.

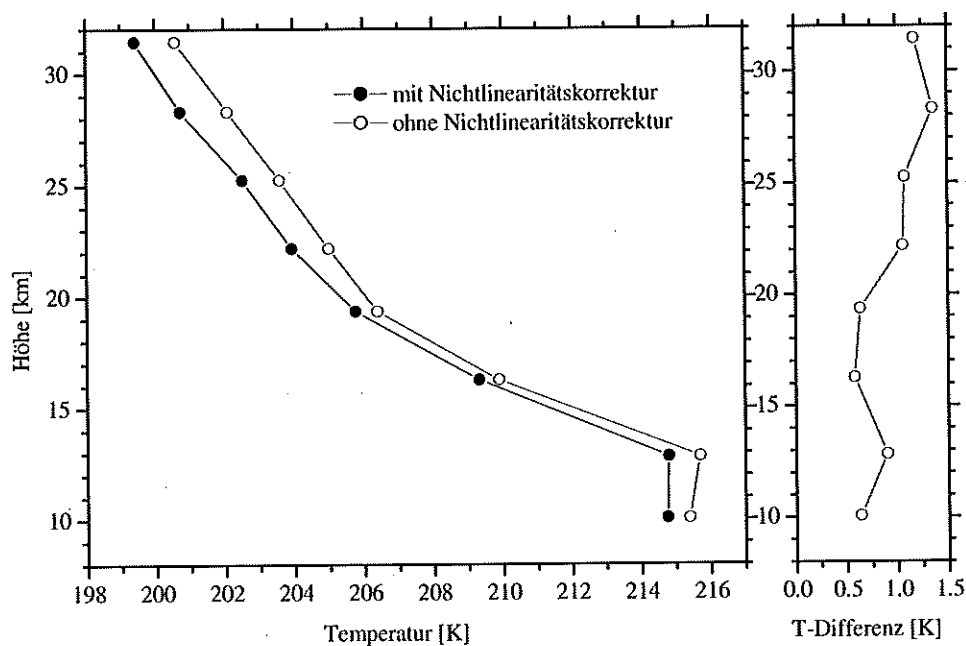


Abbildung 9.6: Abgeleitetes Temperaturprofil für Spektren mit und ohne Nichtlinearitätskorrektur.

Abb. 9.6 zeigt das aus den Spektren abgeleitete Temperaturprofil mit und ohne Nichtlinearitätskorrektur. Durch die Nichtlinearität ist die Strahldichte in den kalibrierten Spektren zu groß, entsprechend höher ist auch die abgeleitete Temperatur, wenn die Spektren nicht korrigiert werden. Der Effekt ist in großen Höhen stärker, weil sich hier die Nichtlinearität stärker auswirkt. In Abb. 9.7 ist das abgeleitete Spurengasprofil für HNO_3 mit und ohne Nichtlinearitätskorrektur dargestellt. Auch die Spurengaskonzentrationen werden zu groß, wenn die Nichtlinearität nicht korrigiert wird. Allerdings tritt auch hier – wie im Falle des reinen Skalierungsfehlers – ein gewisser kompensatorischer Effekt durch die zu hohe Temperatur auf. Der Fehler in den Spurengasprofilen liegt in der Größenordnung von 5% und ist damit etwa so groß wie der Skalierungsfehler in den Spektren. Allerdings ist beim Vertikalprofil von HNO_3 keine systematische Zunahme mit der Höhe mehr zu erkennen.

Für das Verständnis der chemischen und dynamischen Prozesse in der Stratosphäre sind nicht nur die einzelnen Spurengasprofile von Bedeutung, sondern auch die Korrelationen der

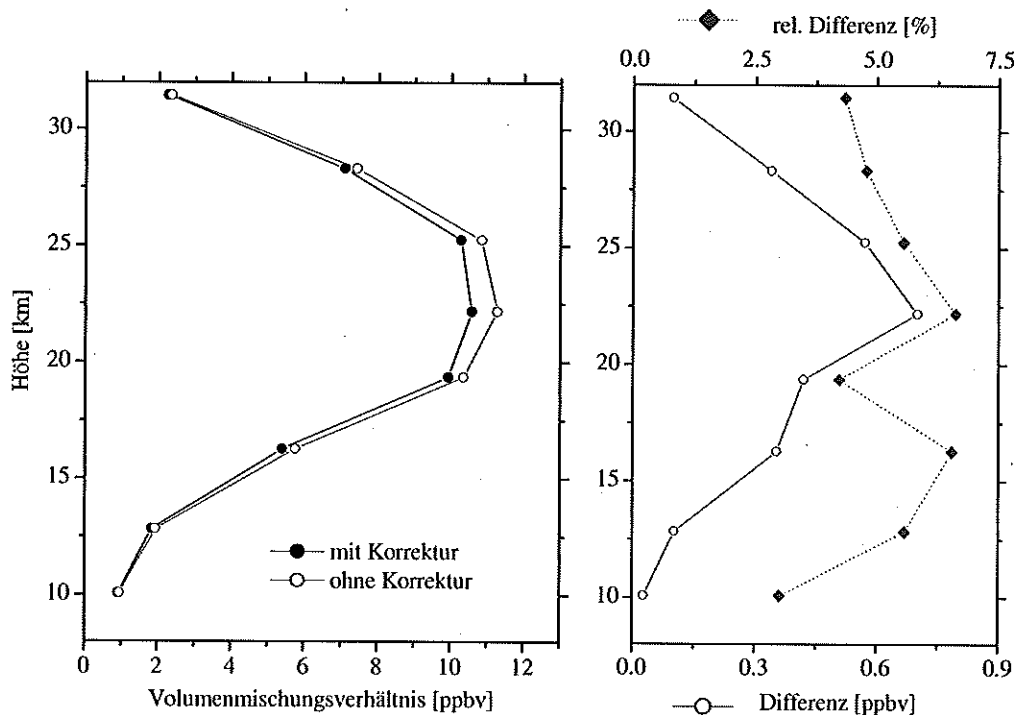


Abbildung 9.7: Einfluß der Detektor-Nichtlinearität auf die abgeleitete Konzentration von HNO_3 . Temperatur und HNO_3 wurden in beiden Fällen jeweils aus demselben Spektrensatz abgeleitet. In der rechten Graphik ist auf der oberen Achse die relative Differenz aufgetragen, auf der unteren Achse die absolute.

Gase untereinander.² So kann man z.B. anhand der N_2O - NO_y -Korrelation³ die Stärke von Denitrifizierungsprozessen abschätzen, und zusammen mit der N_2O - CH_4 -Korrelation können diese von Mischungsprozessen zwischen Luftmassen innerhalb und außerhalb des Polarwirbels unterschieden werden. Diese Korrelationen werden durch Skalierungsfehler, wie sie durch die Detektor-Nichtlinearität auftreten, ebenfalls beeinflusst. In Abb. 9.8 sind die N_2O - CH_4 -Korrelation und die N_2O - NO_y -Korrelation für Flug 7 mit und ohne Nichtlinearitätskorrektur dargestellt.

Da die Mischungsverhältnisse der einzelnen Gase ohne Nichtlinearitätskorrektur allgemein zu groß sind, befinden sich die Punkte auf der N_2O - CH_4 -Kurve ohne Korrektur weiter rechts und weiter oben als mit Korrektur. Zum Vergleich ist eine mittlere Korrelation eingezeichnet, die aus In-situ-Ballonmessungen im Zeitraum von 1988 – 1992 abgeleitet wurde [Engel et al., 1996]. Da die Mischungsverhältnisse von N_2O und CH_4 annähernd proportional sind, ändert sich die Korrelation durch die Nichtlinearität nur wenig. Wenn die Skalierungsfehler in den Auswertefenstern von N_2O und CH_4 stark unterschiedlich wären, würde dies die Steigung der Korrelation beeinflussen. Allerdings liegen die Auswertefenster für beide Gase in Kanal 2, damit ist auch der Skalierungsfehler für beide Gase gleich.

Anders ist die Situation bei der N_2O - NO_y -Korrelation. N_2O dient als Quellgas für die Stick-

²Zur Bedeutung der Korrelationen siehe z.B. [Stowasser, 2002].

³ NO_y steht für die stickstoffgewichtete Summe der reaktiven Stickoxidverbindungen in der Stratosphäre.

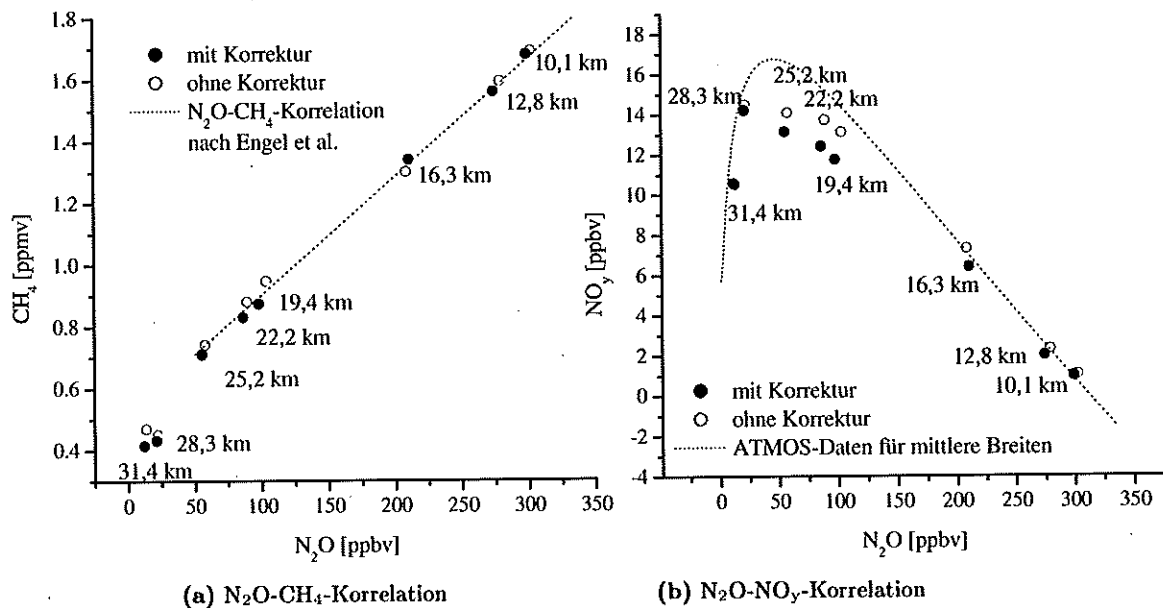


Abbildung 9.8: Einfluß der Detektor-Nichtlinearität auf abgeleitete Korrelationen. Erläuterungen siehe Text.

stoffverbindungen in der Stratosphäre und nimmt mit der Höhe aufgrund von Photolyse und Oxidation ab. Da N_2O die Hauptquelle für stratosphärisches NO_y darstellt, besteht in der unteren Stratosphäre eine Antikorrelation zwischen beiden Gasen. In großen Höhen überwiegen auch bei NO_y die Abbauprozesse, so daß die Mischungsverhältnisse hier positiv korreliert sind. In Abb. 9.8(b) ist eine Standard-Korrelation für mittlere Breiten, abgeleitet aus Daten des ATMOS-Experiments (Atmospheric Trace Molecule Spectroscopy Experiment), gezeigt [Michelsen et al., 1998]. Abweichungen von dieser Korrelation bei Messungen im Polarwirbel weisen auf Denitrifizierungs- oder Mischungsprozesse hin.

Die Detektor-Nichtlinearität führt bei der N_2O - NO_y -Korrelation zu deutlichen Änderungen im Ergebnis. Die Punkte sind ohne Korrektur aufgrund der höheren Mischungsverhältnisse, die für die einzelnen Gase abgeleitet werden, in der Regel wieder nach rechts und nach oben verschoben. Infolge der Antikorrelation führt diese Verschiebung jedoch zu einer erheblichen Abweichung der Punkte von der Korrelationskurve, die sich mit Nichtlinearitätskorrektur ergibt. Ohne Nichtlinearitätskorrektur würden daher Denitrifizierungsprozesse oder Mischungsprozesse von Luftmassen innerhalb und außerhalb des Polarwirbels unterschätzt werden.

Diese Betrachtung zeigt, daß es zur Beurteilung der Auswirkungen von Fehlerquellen nicht ausreicht, nur den Einfluß auf die einzelnen Spurengasprofile zu analysieren. Da durch die Detektor-Nichtlinearität alle kalibrierten Spektren systematisch zu groß werden, sind auch alle abgeleiteten Spurengaskonzentrationen systematisch zu groß. Bei der Bildung von Korrelationen können sich die Fehler der einzelnen Profile wie im Fall der N_2O - CH_4 -Korrelation kompensieren, allerdings können sie sich auch wie bei der N_2O - NO_y -Korrelation ungünstig verstärken.

Bei Skalierungsfehlern im Bereich von 1 % (2σ), wie sie nach der Fehleranalyse von Flug 10 zu erwarten sind, ist der durch radiometrische Fehler bedingte Fehler in den abgeleiteten Spurengasprofilen ebenfalls in dieser Größenordnung und damit deutlich kleiner als Fehler in den spektroskopischen Daten, die typischerweise im Bereich von 5 bis 20 % (2σ) liegen.

Anders ist die Situation beim Instrumentoffset. Fehler in der Rasur können Fehler von einigen Prozent verursachen. Hier sollte untersucht werden, ob der Fehler durch iteratives Anpassen des Weltraumpektrums verkleinert werden kann. Dieses Problem ist umso größer, je geringer die Flughöhe ist. Langsam variierende Offsetfehler wie Drift- und Phasenfehler zeigen hingegen kaum einen Einfluß auf das Retrieval, wenn der Offset als Anpassungsparameter freigegeben wird. Wird der Offset hingegen als bekannt vorausgesetzt und vorgegeben, so ändert sich in dem in dieser Arbeit untersuchten Beispiel das abgeleitete Volumenmischungsverhältnis im 10 %-Bereich. Allerdings spielen bei diesen Abweichungen auch andere Parameter (wie z.B. die Gewichtung der A-priori-Informationen) eine Rolle.

Für die Ableitung der meisten Spurengase stellt der Instrumentoffset kein Problem dar, da er als Parameter mit angepaßt werden kann. Von Bedeutung ist eine gute Kenntnis des Offsets allerdings dann, wenn nicht nur Liniensignaturen von Gasen zur Ableitung von Volumenmischungsverhältnissen herangezogen werden, sondern auch atmosphärische Kontinua, wie sie in Gegenwart von Wolken oder Aerosolen auftreten, berücksichtigt werden müssen. Auch für die Ableitung von Wolkenparametern selbst ist eine genaue Bestimmung des Instrumentoffsets sehr wichtig. Wie stark sich Offset und Kontinuum gegenseitig beeinflussen, sollte in weitergehenden Studien untersucht werden.

Kapitel 10

Schlußbemerkungen

Ziel dieser Arbeit war eine eingehende Charakterisierung der radiometrischen Genauigkeit des Instruments MIPAS-B2. Zu den untersuchten Einflußfaktoren zählen Instrumentparameter wie das Signal-zu-Rausch-Verhältnis, thermische Stabilität des Instruments und Genauigkeit des zur Kalibrierung verwendeten Schwarzkörpers, aber auch die Auswirkungen der Datenprozessierung. So sind für den radiometrischen Fehler in den kalibrierten Spektren auch die Phasenkorrektur und die Korrektur der Detektor-Nichtlinearität von Bedeutung. Die Analyse des radiometrischen Verhaltens von MIPAS-B2 sollte zeigen, in welchen Bereichen eine Optimierung erforderlich und möglich ist. Ebenso sollte die Datenprozessierung auf Verbesserungsmöglichkeiten untersucht werden.

Da das radiometrische Verhalten des Instruments bei den einzelnen Flügen zum Teil recht unterschiedlich war, wurden sieben Meßflüge analysiert, die im Frühjahr/Sommer in mittleren Breiten sowie im arktischen Winter erfolgt waren. Die Drift von Instrumentresponsivität und thermischer Eigenemission ist im allgemeinen bei Flügen in mittleren Breiten stärker als im arktischen Winter, jedoch gibt es – vor allem in mittleren Breiten – auch starke Unterschiede von Flug zu Flug. Insgesamt hat sich gezeigt, daß häufigere Kalibrierungsmessungen erforderlich sind, um den Fehler durch die zeitliche Interpolation klein zu halten. Bei früheren Flügen betrug der Zeitabstand zwischen zwei Kalibrierungsmessungen etwa ein bis zwei Stunden. Dieser Abstand sollte auf ca. 30 Minuten gesenkt werden.

Um sicherzustellen, daß die Phasenkorrektur und Entfernung atmosphärischer Restsignaturen aus den Weltraumspektren mit hinreichender Genauigkeit erfolgen kann, wurden bei früheren Flügen in einer Kalibrierungssequenz bis zu 70 Weltrauminterferogramme gemessen. Für ein gutes Signal-zu-Rausch-Verhältnis in den Schwarzkörperspektren wurden hier ähnlich viele Spektren koaddiert. Dies führte trotz der großen Zeitabstände dazu, daß etwa ein Drittel der auf Gipfelhöhe zur Verfügung stehenden Meßzeit für Kalibrierungsmessungen aufgewandt werden mußte. (Eine Kalibrierungssequenz dauerte typischerweise 20 Minuten.) Daher war ein Ziel dieser Arbeit zu untersuchen, inwiefern die Meßzeit für die Kalibrierungsmessungen verkürzt werden kann.

Die in dieser Arbeit vorgeschlagene Kombination von 32 Schwarzkörper- und 16 Weltrauminterferogrammen erfordert eine Meßzeit von knapp fünf Minuten pro Kalibrierungssequenz. Der Skalierungsfehler infolge des Rauschens ist in diesem Fall nur im Kanal 4 von Bedeutung. Hier kann jedoch – in Abhängigkeit von der Stärke des Channeling – der Fehler noch verringert werden, indem die spektrale Auflösung weiter reduziert wird.

Der Fehler in den Kalibrierungsmessungen wird jedoch nicht nur vom Rauschen bestimmt, sondern auch von der Qualität der Phasenkorrektur und der Entfernung atmosphärischer Rest-

signaturen aus den Weltraumpektren. Auch hier muß sichergestellt werden, daß durch die Verkürzung der Meßzeit die Qualität der Kalibrierung nicht wesentlich beeinträchtigt wird.

Zur Quantifizierung der Genauigkeit der Phasenkorrektur wurden in dieser Arbeit Simulationsrechnungen durchgeführt. Es hat sich gezeigt, daß die statistische Phasenkorrektur bei Messungen im arktischen Winter aufgrund der geringen Linienintensität in den Weltraumpektren zu großen Fehlern führen kann. Da andererseits die thermische Stabilität des Instruments und damit auch die zeitliche Stabilität der Phase im Vergleich zu Flügen in mittleren Breiten relativ groß ist, kann der Phasenfehler reduziert werden, indem die Phaseninformation aus einem atmosphärischen Spektrum gewonnen wird, das in zeitlicher Nähe zu den Weltraumpektren gemessen wurde. Für dieses Verfahren erweist es sich als Vorteil, wenn die Kalibrierungsmessungen wenig Zeit in Anspruch nehmen. Das Rauschen in den Weltraumpektren hat bei diesem Verfahren keinen Einfluß auf die Qualität der Phasenkorrektur.

Der Einfluß atmosphärischer Restsignaturen auf die Kalibrierung wurde ebenfalls anhand von Simulationsrechnungen untersucht. Bei der bisher angewandten sogenannten „Rasur“, bei der die atmosphärischen Linien in den Weltraumpektren mit Hilfe eines mathematischen Algorithmus erkannt und entfernt wurden, führten die dadurch entstandenen Unstetigkeitsstellen zu einem scheinbar erhöhten Rauschen in den Spektren. In Bereichen, in denen die atmosphärischen Linien sehr dicht beieinander liegen, erscheint die Eigenemission des Instruments systematisch zu groß. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit ein „erweitertes Rasurverfahren“ entwickelt, bei dem die atmosphärische Signatur mit Hilfe eines Strahlungsübertragungsprogramms modelliert und anschließend vom gemessenen Spektrum subtrahiert wird. Damit konnte der Fehler durch die atmosphärische Restsignatur in kritischen Spektralbereichen um ca. einen Faktor 3 verringert werden und in weiten Spektralbereichen auf das Rauschniveau abgesenkt werden.

Die Untersuchungen dieser Arbeit haben also gezeigt, daß es – zum Teil mit neuen Prozessierungsverfahren – möglich ist, die Zeit für eine Kalibrierungssequenz um etwa einen Faktor vier zu verringern, ohne wesentliche Qualitätseinbußen hinnehmen zu müssen. Obwohl bei Flug 10 die Kalibrierungsmessungen in relativ kurzen Zeitabständen von ca. 30 Minuten erfolgten, wurde hierfür nur noch ein Fünftel der Meßzeit auf Gipfelhöhe aufgewandt. Durch die angepaßten Prozessierungsverfahren steht mehr Meßzeit für atmosphärische Messungen zur Verfügung, und der relative Interpolationsfehler kann deutlich unter 1 % gesenkt werden.

Das erweiterte Rasurverfahren zeigt noch einen weiteren Vorteil: Da es auch noch bei starker Überlappung von Linienflügeln gute Ergebnisse liefert, können damit auch Weltraumpektren, die während des Aufstiegs gemessen werden, zur Kalibrierung herangezogen werden. Aufgrund der niedrigeren Ballonhöhe ist bei diesen Spektren die Basislinie nicht mehr unmittelbar zu erkennen und kann nur durch die Modellierung der atmosphärischen Signaturen gewonnen werden. Mit Hilfe des neuen Rasurverfahrens wurden bei Flug 9 erstmals auch Aufstiegsmessungen kalibriert und für die Ableitung von Vertikalprofilen herangezogen.

Die Gesamtübersicht der einzelnen Fehlerquellen zeigt, daß trotz der erheblichen Verbesserungen, die bei der Interpolation der Kalibrierungsmessungen erzielt wurden, dieser Fehler nach wie vor einer der führenden ist. Zur weiteren Reduktion des Fehlers könnte noch häufiger kalibriert werden. Dafür müßten jedoch die Horizontsondierungssequenzen unterbrochen werden. Allerdings ist es insbesondere bei der Beobachtung von Tag-Nacht-Variationen wichtig, zeitlich kompakte Profile zu messen. Daher wird durch konstruktive Maßnahmen eine Reduktion der thermischen Drift angestrebt: Anstelle der Kühlung mit CO₂-Platten wurde ein Kühlsystem entwickelt, bei dem flüssiger Stickstoff in das Instrument eingeleitet wird [Friedl-Vallon, 2002]. Damit kann ein Temperaturgradient von weniger als 1 K im Instrument erzielt werden, und die

Temperatur ist über ein Regelventil einstellbar. Diese Kühlung erfolgt – wie die CO₂-Kühlung auch – nur vor dem Start. Dennoch wird erwartet, daß die thermische Drift geringer wird, wenn der Kaltraum zum Zeitpunkt des Starts isotherm ist. Ein weiterer Vorteil der Stickstoff-Kühlung ist, daß mit dem verdampfenden Stickstoff gleichzeitig der Kaltraum gespült wird und so das Eindringen von Wasser und CO₂ verhindert wird. Damit sollten Probleme durch Eis und Wasserdampf im Instrument, wie sie zum Teil bei Flügen in mittleren Breiten aufgetreten sind, in Zukunft verhindert werden. Das neue Kühlsystem soll erstmals bei Flug 11 eingesetzt werden.

Die zweite wesentliche Fehlerquelle neben der Drift der Instrumenteigenschaften ist die Detektor-Nichtlinearität. Die Parameter für die Nichtlinearitätskorrektur wurden von 1998 bis 2001 anhand von Labormessungen bestimmt, in denen die Detektorspannung als Funktion der einfallenden Strahlung gemessen und daraus die Detektor-Responsivität berechnet wurde. Diese Methode erwies sich jedoch als ungenau und aufwendig. Insbesondere hatte sich gezeigt, daß die Detektortemperatur einen signifikanten Einfluß auf die abgeleiteten Nichtlinearitätsparameter hat und die Temperatur im Flug im allgemeinen von der Temperatur im Labor abweicht. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Nichtlinearitätskorrektur entwickelt, bei der die Detektor-Responsivität aus Artefakten in den Spektren abgeleitet wird. Mit dieser Methode können die Nichtlinearitätsparameter mit hoher Genauigkeit aus Spektren bestimmt werden, die während des Fluges gemessen werden. Die Fehleranalyse zeigt, daß mit dieser Methode der nichtlinearitätsbedingte Skalierungsfehler auf 0,5 % und weniger reduziert werden kann.

Mit den in dieser Arbeit entwickelten Methoden zur Fehlerabschätzung ist es möglich, für künftige Flüge die systematischen Fehler in den kalibrierten Spektren operationell zu berechnen. Dazu wurden Fehler, die auf Rauschen zurückzuführen sind, so abgeschätzt, daß sie direkt aus der rauschäquivalenten spektralen Strahldichte (*NESR*) berechnet werden können. Die Abschätzungen zu den Fehlern in der Schwarzkörperstrahlung und zu Fehlern durch Entfernen atmosphärischer Linien aus den Weltraumspektren sollten auf alle künftigen Flüge anwendbar sein. Für den Fehler der Phasenkorrektur wurde mit Hilfe von Simulationsrechnungen gezeigt, daß der von Trieschmann berechnete Phasenfehler [Trieschmann, 2000] im allgemeinen zur Fehlerabschätzung herangezogen werden kann. Der Fehler durch die zeitliche Interpolation kann direkt aus den Schwarzkörper- und Weltraumspektren errechnet werden, die zur Kalibrierung verwendet werden. Lediglich bei der Abschätzung des Fehlers infolge der Detektor-Nichtlinearität sind abhängig von der Drift der Detektortemperatur zusätzliche Rechnungen zur Fehlerbestimmung erforderlich. Der Fehler durch den Abbruch der Taylorreihe muß erneut abgeschätzt werden, wenn der Spektralbereich und damit der mittlere Photonenstrom auf die Detektoren geändert wird.

Da sich Skalierungs- und Offsetfehler unterschiedlich auf die Fehler in den Spurengasprofilen auswirken, wird zur Beurteilung der radiometrischen Genauigkeit der Gesamtfehler in einen Skalierungsanteil und einen additiven Anteil zerlegt. Für Flug 10, der den aktuellen Zustand des Instruments wiedergibt, beträgt der Skalierungsfehler ca. 0,5 bis 1,2 % (2σ) und wird vom Fehler durch die Drift der Kalibrierungsmessungen dominiert. Im langwelligen Spektralbereich liefert der Fehler durch die Detektor-Nichtlinearität ebenfalls einen signifikanten Beitrag, während mit steigender Wellenzahl der Rauschfehler und der Fehler der Schwarzkörpertemperatur an Bedeutung gewinnen.

Der Offsetfehler liegt im Bereich von 9 bis 0,3 nW/(cm² sr cm⁻¹) (2σ) und beträgt damit 0,4 bis 1,2 % des Schwarzkörperspektrums. Auch der Offsetfehler wird von der Drift der Kalibrie-

rungsmessungen dominiert. Im Kanal 1 liefert aufgrund der relativ starken Strahlteileremission auch die Unsicherheit in der Phasenkorrektur des Weltraumspektrums einen signifikanten Beitrag.

Die Auswirkungen von Skalierungs- und Offsetfehlern auf die abgeleiteten Spurengaskonzentrationen sind grundsätzlich verschieden. Skalierungsfehler pflanzen sich in erster Näherung linear in das Spurengasprofil fort. Allerdings tritt ein kompensatorischer Effekt auf, wenn Temperatur und Spurengaskonzentrationen aus Spektren mit dem gleichen Skalierungsfehler (oder einem Fehler des gleichen Vorzeichens und der gleichen Größenordnung) abgeleitet werden. In diesem Fall ist der relative Fehler im Spurengasprofil ähnlich groß wie der Skalierungsfehler in den kalibrierten Spektren. Bei der Bildung von Korrelationen zwischen verschiedenen Gasen kann sich der Skalierungsfehler – je nach Korrelation – kompensieren oder verstärken. Dieser Effekt muß vor allem beachtet werden, wenn die Gase antikorreliert sind.

Wenn der Offset als Anpassungsparameter freigegeben wird, haben Offsetfehler, die innerhalb eines Auswertefensters weitgehend konstant sind, auf die abgeleiteten Konzentrationen von Gasen mit Liniensignaturen praktisch keine Auswirkung. Fehler, die durch die Rasur der Linien entstehen, können jedoch bei Gasen, die nur breitbandige Signaturen zeigen, das Spurengasretrieval beeinflussen. In Gegenwart eines atmosphärischen Kontinuums durch Wolken oder Aerosole gewinnt der Offsetfehler an Bedeutung, da atmosphärisches Kontinuum und Instrumentoffset in den Spektren schlecht voneinander zu trennen sind. Ein Instrumentoffset ist rein additiv, während ein atmosphärisches Kontinuum auch die Transmission der Strahlung und damit die Liniensignaturen beeinflusst. Wenn ein solches Kontinuum fälschlicherweise als Offset betrachtet wird, führt dies daher auch zu einem Fehler in den abgeleiteten Spurengasprofilen. Dieses Problem tritt vor allem in tiefen Tangentenhöhen oder in Anwesenheit von polaren Stratosphärenwolken auf.

Bei der Auswertung der mit MIPAS-B2 gemessenen Horizontsondierungssequenzen zeigt sich praktisch über alle Flüge hinweg in den kalibrierten Spektren eine systematische Zunahme des Offsets mit abnehmender Tangentenhöhe. Dieser Offset liegt in Kanal 1 im Bereich von einigen zehn $\text{nW}/(\text{cm}^2 \text{sr cm}^{-1})$ und damit deutlich über dem Fehlerniveau. Auch durch Wolken oder Aerosole kann der Offset nicht vollständig erklärt werden. Eine mögliche Ursache für diese Signatur in den Spektren könnte Streulicht von der Erde oder von tief liegenden Wolkenschichten sein, das am Einkoppelspiegel in den Strahlengang eingestreut wird. Nachdem am IMK die Möglichkeiten geschaffen wurden, um den Einfluß von Streulicht auf die Spektren mit dem Strahlungsübertragungsprogramm KOPRA zu berechnen, soll diese Thematik in Zukunft eingehend untersucht werden.

Mit der vorliegenden Arbeit wurden zum einen die Voraussetzungen dafür geschaffen, in Zukunft die radiometrische Genauigkeit für alle Flüge operationell bestimmen zu können, zum anderen konnte die radiometrische Genauigkeit besonders bezüglich der Drift der Kalibrierungsmessungen, der Rasur und der Nichtlinearitätskorrektur erheblich verbessert werden. Mit einer radiometrischen Genauigkeit im 1 %-Bereich ist der instrumentelle Fehler deutlich kleiner als der spektroskopische Fehler der meisten Spurengase, der typischerweise im Bereich von 5 bis 20 % (2σ) liegt. Damit sind MIPAS-B2-Messungen auch zur Validierung spektroskopischer Daten geeignet [Oelhaf et al., 2001]. Das größte weiterhin bestehende Problem ist der ungeklärte Offset in den Spektren, der vermutlich durch Streulicht verursacht wird.

Literaturverzeichnis

- [Abrams et al., 1994] Abrams, M. C., G. C. Toon, R. A. Schindler, *Practical example of the correction of Fourier-transform spectra for nonlinearity*, Applied Optics, Vol. 33, No. 27, pp. 6307–6314, 1994.
- [Blom et al., 1996] Blom, C. E., M. Höpfner, Ch. Weddigen, *Correction of phase anomalies of atmospheric emission spectra by the double-differencing method*, Applied Optics, Vol. 35, No. 15, pp. 2649–2652, 1996.
- [Bronstein und Semendjajew, 1991] Bronstein, I. N., K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, 25. Auflage, Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/Main, 1991.
- [Brüche, 1960] Brüche, E., *100 Jahre Spektralanalyse*, Physikalische Blätter, 16, S. 320–323, 1960.
- [Burkert et al., 1983] Burkert, P., F. Fergg, H. Fischer, *A compact high resolution Michelson interferometer for passive atmospheric sounding (MIPAS)*, IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing GE-21, 345, 1983.
- [Carli et al., 1999] Carli, B., L. Palchetti, P. Raspollini, *Effect of beam-splitter emission in Fourier transform spectroscopy*, Applied Optics, Vol. 38, pp. 7475–7480, 1999.
- [Chandrasekhar, 1960] Chandrasekhar, S., *Radiative Transfer*, Dover Publ., New York, 1960.
- [von Clarmann, 1994] Clarmann, T. von, *RAT: A computational tool for the retrieval of atmospheric trace gas profiles from infrared spectra*, Rep. KfK 5423, Forschungszentrum Karlsruhe, Karlsruhe, 1994.
- [Clough et al., 1986] Clough, S. A., F. X. Kneizys, E. P. Shettle, G. P. Anderson, *Atmospheric radiance and transmittance: FASCOD2*, Proceedings of the 6th Conference on Atmospheric Radiation, May 1986, pp. 141–144, Am. Meteorol. Soc., Boston, Mass., 1986.
- [Connes, 1961] Connes, J., *Recherches sur la spectroscopie par transformation de Fourier*, Revue d'Optique, Année 40, No. 2, pp. 45–79, 116–140, 171–190, 231–265, 1961.
- [Davis et al., 2001] Davis, S. P., M. C. Abrams, J. W. Brault, *Fourier Transform Spectrometry*, Acad. Press, San Diego, 2001.
- [Engel et al., 1996] Engel, A., C. Schiller, U. Schmidt, R. Borchers, H. Ovarlez, J. Ovarlez, *The total hydrogen budget in the Arctic winter stratosphere during the European Arctic Stratospheric Ozone Experiment*, J. Geophys. Res., Vol. 101, pp. 14495–14503, 1996.

- [Farman et al., 1985] Farman, J. C., B. G. Gardiner, J. D. Shanklin, *Large Losses of Total Ozone in Antarctica Reveal Seasonal ClO_{rx}/NO_{rx} Interaction*, Nature, Vol. 315, pp. 207–210, 1985.
- [Fischer, 1992] Fischer, H., *Remote Sensing of Atmospheric Trace Constituents using Fourier Transform Spectroscopy*, Berichte der Bunsen-Gesellschaft f. phys. Chemie, Bd. 96, Nr. 3, S. 306–314, 1992.
- [Fischer und Oelhaf, 1996] Fischer, H., H. Oelhaf, *Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb-emission spectrometers*, Applied Optics, Vol. 35, pp. 2787–2796, 1996.
- [Forman et al., 1966] Forman, M. L., W. H. Steel, G. Vanasse, *Correction of Asymmetric Interferograms Obtained in Fourier Spectroscopy*, Journ. of the Optical Society of America, Vol. 56, No. 1, pp. 59–63, 1966.
- [Friedl-Vallon et al., 1999] Friedl-Vallon, F., G. Maucher, H. Oelhaf, O. Trieschmann, G. Wetzel, H. Fischer, *The balloon-borne Michelson interferometer for passive atmospheric sounding (MIPAS-B2). Instrument and results*, Larer, A.M. [Hrsg.], Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research III: Proc. of SPIE's 44th Annual Meeting, Denver, Colorado, July 19–21, 1999, SPIE Proceedings Series 3756, pp. 9–16, Bellingham, Washington, 1999.
- [Friedl-Vallon, 2002] Friedl-Vallon, F., *persönliche Mitteilung*, 2002.
- [Griffith und de Haseth, 1986] Griffith, P. R., J. A. de Haseth, *Fourier Transform Infrared Spectrometry*, Chemical Analysis, Vol. 83, Wiley, New York, 1986.
- [Hase, 2000] Hase, F., *Inversion von Spurengasprofilen aus hochaufgelösten bodengebundenen FTIR-Messungen in Absorption*, Dissertation im Fach Physik, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, FZKA 6512, Karlsruhe, 2000.
- [Hase et al., 2001] Hase, F., O. Trieschmann, Ch. Weddigen, *Response of Fourier-transform spectrometers to absorption and emission in a homogeneous single-layer beamsplitter*, Applied Optics, Vol. 40, pp. 5078–5087, 2001.
- [Höpfner et al., 2002] Höpfner, M., H. Oelhaf, G. Wetzel, F. Friedl-Vallon, A. Kleinert, A. Lengel, G. Maucher, H. Nordmeyer, N. Glatthor, G. Stiller, T.v. Clarmann, H. Fischer, C. Kröger, T. Deshler, *Evidence of scattering of tropospheric radiation by PSCs in mid-IR limb emission spectra: MIPAS-B observations and KOPRA simulations*, Geophys. Res. Lett., Vol. 29, No. 8, 10.1029/2001GL014443, 2002.
- [Höpfner, 2002] Höpfner, M., *persönliche Mitteilung*, 2002.
- [Keim, 1995] Keim, C., *Sichtlinienstabilisierung des MIPAS-B2 Experimentes*, Diplomarbeit im Fach Physik, Institut für experimentelle Kernphysik, Universität Karlsruhe, 1995.
- [Kimmig, 2001] Kimmig, W., *Das Abtastverfahren der Interferogramme des flugzeuggetragenen Fourier-Spektrometers MIPAS-STR*, Dissertation im Fach Physik, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, FZKA 6665, Karlsruhe, 2001.

- [Kingston, 1978] Kingston, R. H., *Detection of Optical and Infrared Radiation*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1978.
- [Kirchhoff, 1859] Kirchhoff, G., *Ueber die Fraunhofer'schen Linien*, Monatsberichte der kgl. Akad. der Wissenschaften zu Berlin, S. 662–665, Oktober 1859.
auch enthalten in: Ostwald's Klassiker der exakten Wissenschaften, Nr. 100, Leipzig, 1898.
- [Kleinert, 1998] Kleinert, A., *Charakterisierung des IR-Detektorsystems der MIPAS-Emissions-experimente*, Diplomarbeit im Fach Physik, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, 1998.
- [Kohlrausch, 1996] Kohlrausch, F., *Praktische Physik*, herausgegeben von V. Kose und S. Wagner, 24. Auflage, B.G.Teubner Verlag, Stuttgart, 1996.
- [Lengel, 2000] Lengel, A., *Multiple-line deconvolution of MIPAS-B2 high altitude spectra as a method to retrieve the ILS from flight data*, 5th Workshop on Infrared Emission Measurements by FTIR, Quebec, Feb. 9-11, 2000.
- [Lengel, 2002] Lengel, A., *persönliche Mitteilung*, 2002.
- [Lohrengel und Hohn, 1990] Lohrengel, J., R. Hohn, *Gesamtemissionsgrad von zwei neuartigen schwarzen Beschichtungen*, PTB-Mitteilungen 100 5/90, Physikalisch Technische Bundesanstalt, Braunschweig, 1990.
- [Maucher, 1999] Maucher, G., *Das Sternreferenzsystem von MIPAS-B2: Sichtlinien-Bestimmung für ein ballongetragenes Spektrometer zur Fernerkundung atmosphärischer Spurengase*, Dissertation im Fach Physik, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, FZKA 6227, Karlsruhe, 1999.
- [Michelsen et al., 1998] Michelsen, H. A., G. L. Manney, M. R. Gunson, R. Zander, *Correlations of stratospheric abundances of NO_y, O₃, N₂O, and CH₄ derived from ATMOS measurements*, J. Geophys. Res., 103, pp. 28347–28359, 1998.
- [Norton und Beer, 1976] Norton, R. H., R. Beer, *New Apodization functions for Fourier Spectroscopy*, Journ. of the Optical Society of America, Vol. 66, No. 3, pp. 259–264, 1976.
Dazu auch:
Norton, R. H., R. Beer, *Erratum to New Apodization functions for Fourier Spectroscopy*, Journ. of the Optical Society of America, Vol. 67, No. 3, p. 419, 1977.
- [Nyquist, 1928] Nyquist, H., *Certain Topics in Telegraph Transmission Theory*, Transactions A.I.E.E., pp. 617–644, 1928.
- [Oelhaf et al., 2001] Oelhaf, H., G. Wetzela, M. Höpfner, F. Friedl-Vallon, N. Glatthor, G. Maucher, G. Stiller, O. Trieschmann, T. von Clarmann, M. Birk, G. Wagner, *Interconsistency checks of ClONO₂ retrievals from MIPAS-B spectra by using different bands and spectroscopic parameter*, Proc. Int. Radiation Symposium St. Petersburg/Russia, 24-29 July 2000, W.L. Smith & Y.M. Timofeyev (Eds.), pp. 615-618, Deepak Publ., 2001.
- [Petroff und Stapelbroek, 1986] Petroff, M. D., M. G. Stapelbroek, *Blocked Impurity Band Detectors*, U.S. Patent No 4568960, 1986.

- [Press et al., 1988] Press, W. H., B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, 1988.
- [Revercomb et al., 1988] Revercomb, H.E., H. Buijs, H. B. Howell, D. D. LaPorte, W. L. Smith, L. Stromovsky, *Radiometric calibration of IR Fourier transform spectrometers: solution to a problem with the High-Resolution Interferometer Sounder*, Applied Optics, Vol. 27, No. 15, pp. 3210–3218, 1988.
- [Rothman et al., 1998] Rothman, L. S., C.P. Rinsland, A. Goldman, S.T. Massie, D.P. Edwards, J.-M. Flaud, A. Perrin, C. Camy-Peyret, V. Dana, J.-Y. Mandin, J. Schroeder, A. McCann, R.R. Gamache, R.B. Wattson, K. Yoshino, K.V. Chance, K.W. Jucks, L.R. Brown, V. Nemtchinov, P. Varanasi, *The HITRAN Molecular Spectroscopic Database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 Edition*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 60, pp. 665–710, 1998.
- [Seefeldner und Keim, 1995] Seefeldner, M., C. Keim, *The pointing and the star reference system of the MIPAS-B2 gondola, Part 1: The pointing system*, Proc. 12th ESA Symposium on Rocket and Balloon Programmes and Related Research, Lillehammer, Norway, May 29 to June 1, 1995, ESA SP-370, pp. 505–510, 1995.
- [Squires, 1971] Squires, G. L., *Meßergebnisse und ihre Auswertung*, de Gruyter, Berlin, 1971.
- [Stiller, 2000] Stiller, G. P. (Editor) with contributions from T. v. Clarmann, A. Dudhia, G. Echle, B. Funke, N. Glatthor, F. Hase, M. Höpfner, S. Kellmann, H. Kemnitzer, M. Kuntz, A. Linden, M. Linder, G. P. Stiller, S. Zorn, *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA)*, Wissenschaftliche Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, FZKA 6487, 2000.
- [Stowasser, 2002] Stowasser, M., *Prozessstudien zur Ozonchemie in mittleren und hohen Breiten anhand von MIPAS-B Daten*, Dissertation im Fach Meteorologie, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, FZKA 6781, Karlsruhe, 2002.
- [Stowasser et al., 2002] Stowasser, M., H. Oelhaf, R. Ruhnke, M. Chipperfield, G. Wetzel, F. Friedl-Vallon, A. Kleinert, A. Lengel, W. Kouker, G. Maucher, H. Nordmeyer, O. Trieschmann, T. v. Clarmann, H. Fischer, *A Characterisation of the warm 1999 Arctic winter, by observations and modeling: NO_y partitioning and dynamics*, J. Geophys. Res., 107(D19), 4376, doi: 10.1029/2001JD001217, 2002.
- [Szmulowicz und Madarsz, 1987] Smulowicz, F., F. L. Madarsz, *Blocked impurity band detectors - An analytic model: Figures of merit*, J. Appl. Physics, 62 (6), pp. 2533–2540, 1987.
- [Taylor, 1988] Taylor, J. R., *Fehleranalyse*, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1988.
- [Trieschmann, 2000] Trieschmann, O., *Phasenkorrektur und Radiometrie gekühlter Fourierspektrometer: Charakterisierung des Instrumentes MIPAS-B2*, Dissertation im Fach Physik, IMK, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, FZKA 6411, Karlsruhe, 2000.
- [Villemaire und Giroux, 1997] Villemaire, A., J. Giroux, *FTS Sensitivity Calculation: the definite formula*, Proceedings of the 7th International Workshop on Atmospheric Science from Space Using Fourier Transform Spectrometry, Oberpfaffenhofen, May 1997.

- [Wetzel et al., 2002a] Wetzel, G., H. Oelhaf, R. Ruhnke, M. Höpfner, F. Friedl-Vallon, A. Kleinert, A. Lengel, G. Maucher, H. Nordmeyer, H. Fischer, *NO_y partitioning and budget in the Arctic winter 2001: MIPAS-B observations and KASIMA simulations*, Geophys. Res. Abstracts, Vol. 4, EGS02-A-00114, 2002.
- [Wetzel et al., 2002b] Wetzel, G., H. Oelhaf, R. Ruhnke, F. Friedl-Vallon, A. Kleinert, W. Kouker, G. Maucher, Th. Reddmann, M. Seefeldner, M. Stowasser, O. Trieschmann, T. von Clarmann, H. Fischer, *NO_y partitioning and budget and its correlation with N₂O in the Arctic vortex and in summer mid-latitudes in 1997*, J. Geophys. Res., 107(D16), 4280, doi: 10.1029/2001JD000916, 2002.
- [Wiegele et al., 2002] Wiegele, A., G. Wetzel, H. Oelhaf, F. Friedl-Vallon, M. Höpfner, A. Kleinert, A. Lengel, G. Maucher, H. Nordmeyer, R. Ruhnke, H. Fischer, *Chlorine partitioning and budget at polar and middle latitudes derived from MIPAS-B observations in comparison to model results*, 6th Europ. Symp. Strat. Ozone, Göteborg, 2-6 Sept., 2002.

Anhang A

Einige Funktionen und Eigenschaften der Fouriertransformation

Einige Funktionen

$$\text{Delta - Funktion : } \delta(x - a) = \begin{cases} \infty & : x = a \\ 0 & : x \neq a \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) dx = 1$$

$$\text{Kamm - Funktion : } \sqcup_D(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n \cdot D) \quad (\text{A.2})$$

$$\text{Rechteck - Funktion : } \text{RECT}(x) = \begin{cases} 1 & : |x| < \frac{1}{2} \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

$$\text{SINC - Funktion : } \text{SINC}(x) = \frac{\sin x}{x} \quad (\text{A.4})$$

$$\text{erweiterter Arkustangens : } \arctan 2(x) = \begin{cases} \arctan\left(\frac{\text{Im}(x)}{\text{Re}(x)}\right) & : \text{Re}(x) > 0 \\ \arctan\left(\frac{\text{Im}(x)}{\text{Re}(x)}\right) + \pi & : \text{Re}(x) < 0, \text{Im}(x) > 0 \\ \arctan\left(\frac{\text{Im}(x)}{\text{Re}(x)}\right) - \pi & : \text{Re}(x) > 0, \text{Im}(x) < 0 \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Eigenschaften der Fouriertransformation

	Ortsraum x	Wellenzahlraum κ
Fouriertransformation	$IFG(x) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\kappa) e^{i2\pi\kappa x} d\kappa$	$S(\kappa) = \int_{-\infty}^{\infty} IFG(x) e^{-i2\pi\kappa x} dx$
Linearität	$IFG_1(a_1 x) + IFG_2(a_2 x)$	$a_1 \cdot S_1(\kappa) + a_2 \cdot S_2(\kappa)$
Verschiebungssatz	$IFG(x + a)$	$e^{i2\pi\kappa a} \cdot S(\kappa)$
Faltungssatz	$IFG_1(x) \cdot IFG_2(x)$	$S_1(\kappa) \otimes S_2(\kappa)$
Faltung	$f(x) \otimes g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x - x') g(x') dx'$	
Parseval Theorem	$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) ^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} F(\kappa) ^2 d\kappa$	

Einige Funktionen und ihre Fouriertransformierten

Ortsraum x	Wellenzahlraum κ
Rechteckfunktion: $\text{RECT}\left(\frac{x}{2L}\right)$	Sincfunktion: $2L \cdot \text{SINC}(2\pi\kappa L)$
Kosinusfunktion: $\cos(2\pi\kappa_0 x)$	δ -Funktion: $\frac{1}{2} \cdot [\delta(\kappa + \kappa_0) + \delta(\kappa - \kappa_0)]$
Kammfunktion: $\text{KAMM}_D(x)$	Kammfunktion: $\text{KAMM}_{\frac{1}{D}}(\kappa)$
Gaußfunktion: $e^{-a^2 x^2}$	Gaußfunktion: $\frac{\sqrt{\pi}}{a} \cdot e^{-\frac{\pi^2 \kappa^2}{a^2}}$

Anhang B

Rauschen im Spektrum im Fall einer monochromatischen Quelle

Die folgende Betrachtung soll zeigen, daß die in Abschnitt 2.2.2 gemachte Näherung der vom optischen Gangunterschied x unabhängigen Rauschamplitude im Interferogramm keine zwingende Voraussetzung ist, um im Spektrum eine konstante Rauschamplitude zu erhalten.

Die spektrale Verteilung des Rauschens sei dazu für den Fall einer monochromatischen Quelle $S(\kappa) \propto \delta(\kappa - \kappa_0)$ und eines Interferometers mit einer perfekten Modulation demonstriert. Sei $N_{ph,0}(\kappa_0)$ die Zahl der Photonen, die pro Abtastintervall das Interferometer durchlaufen, dann ist die Zahl der den Detektor treffenden Photonen pro Zeiteinheit gegeben durch:

$$N_{ph}(x) = \frac{1}{2} N_{ph,0} \cdot (1 + \cos(2\pi\kappa_0 x)) \quad (\text{B.1})$$

Das Photonenrauschen ist damit gegeben durch:

$$N_{rau}(x) = \zeta(x) \cdot \sqrt{N_{ph}(x)} = \zeta(x) \cdot \sqrt{\frac{N_{ph,0}}{2}} \cdot \sqrt{(1 + \cos(2\pi\kappa_0 x))} \quad (\text{B.2})$$

Das Interferogramm ist wiederum die Summe aus Signal und Rauschen:¹

$$IFG(x) = N_{ph}(x) + N_{rau}(x) \quad (\text{B.3})$$

Die Fouriertransformierte des Signals ist wieder die eingestrahlte Linie $\delta(\kappa - \kappa_0)$. Die Fouriertransformierte des Rauschens ist:

$$\begin{aligned} S_{rau}(\kappa) &= FT^{-1} \left(\zeta(x) \cdot \sqrt{\frac{N_{ph,0}}{2}} \cdot \sqrt{(1 + \cos(2\pi\kappa_0 x))} \right) \\ &= \sqrt{\frac{N_{ph,0}}{2}} \cdot FT^{-1}(\zeta(x)) \otimes FT^{-1} \left(\sqrt{(1 + \cos(2\pi\kappa_0 x))} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Die Fouriertransformierte von weißem Rauschen ist wieder weißes Rauschen $\zeta(\kappa)$. Die Fouriertransformierte der Wurzelfunktion ist nicht ohne weiteres analytisch zu berechnen. Wenn man die Funktion jedoch in eine Taylorreihe entwickelt, so zeigt sich, daß sich die Wurzelfunktion

¹Auf den Responsivitätsfaktor, der dem Photonenstrom eine Detektorspannung zuordnet, wird bei dieser Betrachtung verzichtet.

als Summe von Delta-Funktionen annähern läßt (vgl. hierzu auch Kap. 7). Die Faltung eines Spektrums mit einer Delta-Funktion bewirkt lediglich eine Verschiebung des Spektrums:

$$S(\kappa) \otimes \delta(\kappa - \kappa_0) = S(\kappa - \kappa_0) \quad (\text{B.5})$$

Somit wird $S_{rau}(\kappa)$ – abgesehen von einem Vorfaktor – ausgedrückt als die Summe von Spektren, die weißes Rauschen darstellen. Diese Spektren sind nun nicht unabhängig voneinander, sondern gehen aus einem Spektrum hervor, das jeweils um einen Betrag $n \cdot \kappa_0$, $n \in \mathbb{N}$, gegenüber dem ursprünglichen Rauschspektrum verschoben ist. In der Praxis macht sich diese Abhängigkeit jedoch nicht bemerkbar, so daß sich Gl. (B.4) schreiben läßt als:

$$S_{rau}(\kappa) \approx \sqrt{\frac{N_{ph,0}}{2}} \cdot \tilde{\zeta}(\kappa) \quad (\text{B.6})$$

mit:

$$\tilde{\zeta}(\kappa) = \sum_{n=-N}^N \zeta(\kappa - n \cdot \kappa_0) \quad (\text{B.7})$$

Diese Betrachtung zeigt, daß die Rauschamplitude auch im Fall einer monochromatischen Quelle und ohne unmodulierte Hintergrundstrahlung unabhängig von der Wellenzahl ist.

Im Fall von polychromatischer Strahlung addieren sich die Rauschbeiträge der verschiedenen Frequenzen quadratisch, so daß sich als Summe wieder weißes Rauschen ergibt. Das Gleiche gilt auch für unmodulierte Strahlung.

Anhang C

Zur Berechnung der Strahldichte des Schwarzkörpers

Emissionsvermögen eines Hohlraumstrahlers

Für einen zylindrischen Hohlraum mit diffus reflektierenden Wänden kann das Emissionsvermögen durch die empirische Gl. (C.1) gut approximiert werden (nach [Kohlrausch, 1996], S. 345):

$$(1 - \varepsilon)_{l/r} = \frac{1 - \varepsilon_0}{\varepsilon_0} \left[1 + \left(\frac{l}{r} \right)^2 \right]^{-1} - \frac{(1 - \varepsilon_0)^2}{\varepsilon_0} \left[1 + \left(\frac{l}{r} \right)^2 \right]^{-3/2} \quad (\text{C.1})$$

Hierbei ist l die Länge des Zylinders, r ist der Radius der Bodenfläche, und ε_0 ist das Emissionsvermögen der Innenwand.

Das Längen-zu-Radius-Verhältnis l/r beträgt 4. Mit $\varepsilon_0 = 0,965$ erhält man $\varepsilon = 0,9978$, und mit $\varepsilon_0 = 0,985$ ergibt sich $\varepsilon = 0,9992$. Das Emissionsvermögen des Schwarzkörpers wird daher angegeben mit:

$$\varepsilon_{BB} = 0,9985 \pm 0,0007 \quad (\text{C.2})$$

Abschätzung der vom Schwarzkörper reflektierten Strahlung

Die Strahlung, die auf den Schwarzkörper fällt, stammt aus dem Instrument, wobei verschiedene Quellen zu betrachten sind:

1. Strahlung, die von den Komponenten und Wänden des Kaltraums emittiert wird,
2. Strahlung aus der Haube über dem Einkoppelspiegel und
3. Strahlung, die über den Einkoppelspiegel auf den Schwarzkörper gelenkt wird und die über den Strahlteiler zum Teil vom Schwarzkörper selbst stammt, zum Teil aus dem Detektor-kryostaten.

Der Raumwinkelanteil, aus dem Strahlung der Quelle 1 auf den Schwarzkörper fällt, macht etwa 50 % des Halbraums aus, der Raumwinkelanteil von Quelle 2 etwa 37 %, und der Anteil von Quelle 3 etwa 13 % [Trieschmann, 2000]. Um den Einfluß der reflektierten Strahlung abzuschätzen, wird für jede Quelle der maximale und der minimale Beitrag betrachtet:

1. Die Temperatur des Instruments liegt zwischen 0 und 4 K über der Temperatur des Schwarzkörpers.

2. Die Temperatur der Haube über dem Einkoppelspiegel liegt zwischen 0 und 7 K über der Temperatur des Schwarzkörpers.
3. Der Strahlteiler transmittiert maximal 60% der Strahlung, die vom Detektorkryostaten stammt. Der übrige Anteil stammt vom Schwarzkörper selbst bzw. von den optischen Komponenten im Strahlengang, die in der Regel etwa die gleiche Temperatur wie der Schwarzkörper haben. Dieser Strahlungsbeitrag liegt also zwischen 0,4 und 1,0 $B(T_{BB})$.

Damit ergibt sich für den maximalen Strahlungsbeitrag, der vom Schwarzkörper reflektiert wird:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{Reflexion, max} &= 0,0022 \cdot [0,5 B(T_{BB} + 4 \text{ K}) + 0,37 B(T_{BB} + 7 \text{ K}) + 0,13 B(T_{BB})] \\ &\leq 0,0022 \cdot [0,5 \cdot 1,4 + 0,37 \cdot 1,7 + 0,13] B(T_{BB}) \\ &= 0,0033 B(T_{BB}) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Die Abschätzung für $B(T_{BB} + 4 \text{ K})$ und $B(T_{BB} + 7 \text{ K})$ erfolgte für eine Schwarzkörpertemperatur von 210 K und für 2400 cm^{-1} . Für den minimalen Strahlungsbeitrag erhält man:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{Reflexion, min} &= 0,0022 \cdot [0,5 B(T_{BB}) + 0,37 B(T_{BB}) + 0,13 \cdot 0,4 B(T_{BB})] \\ &= 0,0019 B(T_{BB}) \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Abschätzung der Temperaturdifferenz zwischen abstrahlender Oberfläche und Temperatursensor

Die Bodenfläche des Schwarzkörpers steht im Strahlungsaustausch mit der Umgebung. Diese Umgebung ist hauptsächlich durch die Innenwand des Zylinders gegeben, allerdings fällt unter einem Raumwinkel von 0,7 sr Strahlung von außen auf die Bodenfläche. Diese Strahlung stammt vom Einkoppelspiegel, der darüberliegenden Haube und dem oberen Bereich des Kaltraums. Für eine Maximalabschätzung wird hier angenommen, daß die gesamte Strahlung, die von außen auf die Bodenfläche des Schwarzkörpers fällt, von der Haube des Einkoppelspiegels stammt, der 7 K wärmer ist als der Schwarzkörper und mit einem Emissionsvermögen von 1 emittiert. Bei einer Schwarzkörpertemperatur von 225 K beläuft sich die Strahlungsbilanz an der Bodenfläche des Schwarzkörpers zu

$$\Delta P = A \cdot \sigma_B \cdot \left[\frac{\Omega_{umg}}{2\pi \text{ sr}} \cdot T_{umg}^4 - \left(1 - \frac{\Omega_{umg}}{2\pi, \text{ sr}} \right) \cdot T_{BB}^4 \right] \quad (\text{C.5})$$

$$\Delta P = A \cdot 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ K}^4} \left[\frac{0,7}{2\pi} \cdot (232 \text{ K})^4 + \frac{2\pi - 0,7}{2\pi} (225 \text{ K})^4 - (225 \text{ K})^4 \right] \quad (\text{C.6})$$

$$\frac{\Delta P}{A} = 2,3 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad (\text{C.7})$$

Damit ergibt sich für die Temperaturdifferenz aufgrund der Wärmeleitung:

$$\Delta T = \frac{\Delta P}{A} \frac{d}{\Lambda} = 0,004 \text{ K} \quad (\text{C.8})$$

mit ΔP Differenz zwischen einfallender und emittierter Strahlung

A Bodenfläche des Schwarzkörpers

d Schichtdicke des Schwarzlacks, $d = 360 \mu\text{m}$

Λ Wärmeleitfähigkeitskoeffizient des Schwarzlacks, $\Lambda = 0,25 \frac{\text{W}}{\text{m} \cdot \text{K}}$

Anhang D

Berechnung des Fehlers in der instrumentellen Phase durch Rauschen

Für die Berechnung des Fehlers in der instrumentellen Phase durch Rauschen wird unterschieden, ob die Strahlteileremission bei der Berechnung der Phase berücksichtigt werden muß oder nicht. Zunächst wird der Fehler für den Fall ohne, anschließend für den Fall mit Strahlteileremission berechnet. Dabei werden Abschätzungen so getroffen, daß sich der Fehler wieder als Funktion der *NESR* darstellen läßt.

In dem Fall, in dem die Strahlteileremission nicht in die Berechnung der Schwarzkörperphase eingeht, sind Phase und Phasenfehler durch folgende Beziehungen gegeben:

$$\varphi_{BB} = \arctan 2 \left(\frac{\text{Im}(S_{BB,m})}{\text{Re}(S_{BB,m})} \right) \quad (\text{D.1})$$

$$\begin{aligned} \Delta\varphi_{BB,rau} &= \sqrt{\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\text{Re}(S_{BB})} \Delta\text{Re}(S_{BB}) \right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial\text{Im}(S_{BB})} \Delta\text{Im}(S_{BB}) \right)^2} \\ &= \sqrt{\left(\frac{\text{Im}(S_{BB}) \cdot \Delta\text{Re}(S_{BB})}{\text{Re}(S_{BB})^2 + \text{Im}(S_{BB})^2} \right)^2 + \left(\frac{\text{Re}(S_{BB}) \cdot \Delta\text{Im}(S_{BB})}{\text{Re}(S_{BB})^2 + \text{Im}(S_{BB})^2} \right)^2} \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

$\Delta\text{Re}(S_{BB})$ und $\Delta\text{Im}(S_{BB})$ sind die jeweiligen Rauschwerte der einzelnen Beiträge. Die Rauschbeiträge des Real- und des Imaginärteils der Schwarzkörpermessung sind unabhängig voneinander und von gleicher Amplitude, da die Phase des Rauschens gleichmäßig verteilt ist. Anders ausgedrückt: Das Rauschen im Interferogramm enthält gleichermaßen symmetrische und antisymmetrische Anteile. Damit ist:

$$\Delta(\text{Re}(S_{BB})) = \Delta(\text{Im}(S_{BB})) = \Delta S_{BB} \quad (\text{D.3})$$

Mit Gl. (D.3) und der Beziehung $|S_{BB}| = \sqrt{\text{Re}(S_{BB})^2 + \text{Im}(S_{BB})^2}$ vereinfacht sich Gl. (D.2) zu:

$$\Delta\varphi_{BB,rau} = \frac{\Delta S_{BB}}{|S_{BB}|} \quad (\text{D.4})$$

Der Zusammenhang zwischen der *NESR* eines hochaufgelösten Einzelspektrums und dem Rauschen des koaddierten, niederaufgelösten Spektrums ist gemäß den Überlegungen auf Seite 32

gegeben über:

$$\Delta S_{BB} = G \cdot NESR \cdot \sqrt{\frac{0,0345}{32 \cdot 1}} < 0,033 G \cdot NESR \quad (D.5)$$

Das Phasenspektrum kann im allgemeinen mit einer geringeren spektralen Auflösung berechnet werden als das reelle Spektrum. Hier wird eine Auflösung von 1 cm^{-1} zugrunde gelegt.

Wenn bei der Berechnung der Schwarzkörperphase der Imaginärteil berücksichtigt werden muß, dann ist der Fehler infolge des Rauschens gegeben durch:

$$\Delta \varphi_{BB,rau} = \sqrt{\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \text{Re}(S_{BB})} \Delta \text{Re}(S_{BB})\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \text{Im}(S_{BB})} \Delta \text{Im}(S_{BB})\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial S_{BS}} \Delta S_{BS}\right)^2} \quad (D.6)$$

Das Rauschen im Strahlteilerspektrum S_{BS} muß separat vom Rauschen im Real- und Imaginärteil des Schwarzkörperspektrums betrachtet werden, da es aus einem atmosphärischen Spektrum berechnet wurde (Abschnitt 6.2) und daher auch mit einem anderen Rauschen behaftet ist als das Schwarzkörperspektrum. Da die Rauschamplitude des Schwarzkörperspektrums als Obergrenze für das Rauschen in den Spektren verwendet werden kann, wird $\Delta S_{BS} = \Delta S_{BB}$ abgeschätzt. Die partiellen Ableitungen berechnen sich folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial \text{Re}(S_{BB})} &= \frac{\text{Im}(S_{BB})}{|S_{BB}|^2} + \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{S_{BS}}{|S_{BB}|}\right)^2}} \cdot \frac{S_{BS} \cdot \text{Re}(S_{BB})}{|S_{BB}|^3} \\ &= \frac{\text{Im}(S_{BB})}{|S_{BB}|^2} + \frac{\text{Re}(S_{BB})}{|S_{BB}|^2} \cdot \underbrace{\left[\frac{\frac{S_{BS}}{S_{BB}}}{\sqrt{1 - \left(\frac{S_{BS}}{|S_{BB}|}\right)^2}} \right]}_{(1)} \end{aligned} \quad (D.7)$$

Für die mit MIPAS-B2 gemessenen Werte $\frac{|S_{BS}|}{|S_{BB}|} < 0,22$ ist der Ausdruck (1) aus Gl. (D.7) kleiner als 1. Da außerdem gilt $\text{Re}(S_{BB}) + \text{Im}(S_{BB}) \leq \sqrt{2} \cdot |S_{BB}|$ vereinfacht sich (D.7) zu:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \text{Re}(S_{BB})} \leq \frac{\text{Im}(S_{BB}) + \text{Re}(S_{BB})}{|S_{BB}|^2} \leq \frac{\sqrt{2}}{|S_{BB}|} \quad (D.8)$$

Analog wird $\frac{\partial \varphi}{\partial \text{Im}(S_{BB})}$ ebenfalls zum Ausdruck (D.8) abgeschätzt. Für $\frac{\partial \varphi}{\partial S_{BS}}$ ergibt sich mit $S_{BS} \leq 0,22 |S_{BB}|$:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial S_{BS}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{S_{BS}}{|S_{BB}|}\right)^2}} \cdot \frac{1}{|S_{BB}|} \leq \frac{1,03}{|S_{BB}|} \quad (D.9)$$

Für den aus dem Rauschen resultierenden systematischen Fehler in der Phase erhält man somit:

$$\begin{aligned} \Delta \varphi_{BB,rau} &= \sqrt{\left(\frac{\sqrt{2}}{|S_{BB}|} \Delta S_{BB}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{2}}{|S_{BB}|} \Delta S_{BB}\right)^2 + \left(\frac{1,03}{|S_{BB}|} \Delta S_{BB}\right)^2} \\ &= 2,25 \frac{\Delta S_{BB}}{|S_{BB}|} \end{aligned} \quad (D.10)$$

Anhang E

Lösung einer kubischen Gleichung

Die Lösung einer kubischen Gleichung

$$x^3 + rx^2 + sx + t = 0 \quad (\text{E.1})$$

ist nach [Bronstein und Semendjajew, 1991], S. 131, wie folgt gegeben:

Zunächst wird mit $y = x + r/3$ Gl. (E.1) in die reduzierte Form (E.2) überführt:

$$y^3 + py + q = 0 \quad (\text{E.2})$$

Mit den Hilfsgrößen

$$D = (p/3)^3 + (q/2)^2 \quad (\text{E.3})$$

$$u = \sqrt[3]{-q/2 + \sqrt{D}} \quad (\text{E.4})$$

$$v = -p/(3u) \quad (\text{E.5})$$

erhält man die Lösungen für y :

$$y_1 = u + v \quad (\text{E.6})$$

$$y_2 = -\frac{u+v}{2} + \frac{u-v}{2}i\sqrt{3} \quad (\text{E.7})$$

$$y_3 = -\frac{u+v}{2} - \frac{u-v}{2}i\sqrt{3} \quad (\text{E.8})$$

Die Lösungen x_k erhält man aus den y_k mit

$$x_k = y_k - r/3, \quad k = 1, 2, 3 \quad (\text{E.9})$$

Symbolverzeichnis

a_j	Parameter
a_{tot}^{vol}	Volumenabsorptionskoeffizient
A	Fläche
$B(T)$	Planckfunktion in Abhängigkeit der Temperatur T
c, c_j	Konstante
d	Dicke, Strecke
F_{kor}	Korrekturfaktor
G	Instrumentresponsivität (gain function)
h	Plancksches Wirkungsquantum
j	Index
l	Länge
L	(einseitige) Interferogrammlänge
\mathcal{L}	(spektrale) Strahldichte
M	Modulationseffizienz
n	Brechungsindex
n, N	natürliche Zahl, Teilchenzahl
N	Menge der natürlichen Zahlen
P	(Strahlungs-)Leistung
r	Radius
R	Responsivität (des Detektors)
S	Spektrum
t	Zeit
T	Temperatur
U	Spannung
x	Ortskoordinate
z	Höhe
δ	δ -Funktion (Anhang A)
$\delta\kappa$	spektrale Auflösung
Δ	Unsicherheit einer Meßgröße
ε	Emissionsvermögen
ζ	weißes Rauschen
η	Quantenwirkungsgrad
ϑ	(halber) Öffnungswinkel, Einfallswinkel
κ	Wellenzahl
λ	Wellenlänge
Λ	Wärmeleitungskoeffizient
ν	Frequenz
σ	Standardabweichung
σ_B	Stefan-Boltzmann-Konstante
τ	Transmission
ϕ	Phase
φ	Phasenfehler
Ω	Raumwinkel

Verzeichnis der Abkürzungen

AC	alternate current, Wechselstrom
AHRS	attitude and heading reference system
ATMOS	Atmospheric Trace Molecule Spectroscopy Experiment
BB	blackbody, Schwarzkörper
BIB	blocked impurity band
BLIP	background limited infrared photodetector
BS	beamsplitter, Strahlteiler
CCD	charged coupled device
DC	direct current, Gleichstrom
DFT	Diskrete Fouriertransformation
DS	deep-space, Weltraum
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
FFT	fast Fourier transform, schnelle Fouriertransformation
FT	Fouriertransformation
FZK	Forschungszentrum Karlsruhe
GPS	global positioning system
HITRAN	High-resolution Transmission Molecular Absorption Database
IFG	Interferogramm
ILS	instrumental line shape, Apparatfunktion
IMK	Institut für Meteorologie und Klimaforschung
IR	infrarot
KOPRA	Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm
LMI	Längenmeßinterferogramm
LOS	line of sight, Sichtlinie
MIPAS	Michelson-Interferometer für passive atmosphärische Sondierung
NEP	noise equivalent power, Rauschäquivalentleistung
NESR	noise equivalent spectral radiance, rauschäquivalente spektrale Strahldichte
NL	Nichtlinearität
OPD	optical path difference, optischer Gangunterschied
r.u.	radiation units, spektrale Strahldichteeinheiten
S/N	signal-to-noise-ratio; Signal-zu-Rausch-Verhältnis
SE	Spiegelecke

Abbildungsverzeichnis

2.1	Prinzipskizze eines Michelson-Interferometers	4
2.2	Kontinuierliches Interferogramm mit diskreten Abtastpunkten und zugehöriges Spektrum.	6
3.1	Das Doppelpendelinterferometer.	11
3.2	Das Optikmodul von MIPAS-B2.	12
3.3	Strahlengang	13
3.4	Meßgeometrie bei der Horizontsondierung.	15
3.5	Gondel und Ballon	17
3.6	Von den gemessenen Interferogrammen zu den Spurengasprofilen	18
5.1	<i>NESR</i>	30
5.2	Temperaturverlauf der Optik bei den verschiedenen Flügen	34
5.3	Drift der Instrumentresponsivität	36
5.4	Drift des Offsets	37
5.5	Detektortemperatur und Responsivitätsänderung	38
5.6	Rasur im Kanal 1	42
5.7	Rasur im Kanal 2	43
6.1	Strahlungsbeiträge im Interferometer	47
6.2	Die Phasenbeziehung der unterschiedlichen Strahlungsbeiträge	48
6.3	relative Strahlteileremission bei den Flügen 4 bis 10	52
6.4	Differenzen der instrumentellen Phase aufeinanderfolgender Schwarzkörpermessungen	56
6.5	Differenzen der instrumentellen Phase aufeinanderfolgender Schwarzkörpermessungen in Flug 10	57
6.6	Fehler der statistischen Phasenkorrektur für simulierte Spektren in Kanal 1	58
6.7	Phasenfehler bei einer fehlerbehafteten instrumentellen Phase, Kanal 1	59
6.8	Simuliertes Weltraumspektrum für Kanal 1 für Flug 7 und Flug 8	60
6.9	Änderung der Phasenspektren im Verlauf einer Horizontsondierungssequenz, Kanal 1	61
6.10	Vergleich der Berechnung des Phasenfehlers der statistischen Phasenkorrektur	62
7.1	Prinzipzeichnung Nichtlinearität	67
7.2	Auswirkung eines nichtlinearen Detektors auf das Spektrum	69
7.3	Korrektur der Detektor-Nichtlinearität durch Minimierung der Artefakte	74
7.4	Zur Abschätzung des Fehlers durch Abbruch der Taylorreihe	77
7.5	Zur Abschätzung des Fehlers durch Abbruch der Taylorreihe, Kanal 4	78

7.6	Unterschied in der Responsivität beim Abbruch der Taylorreihe nach dem zweiten bzw. dritten Glied	79
7.7	Einfluß der Detektortemperatur auf die Bestimmung der Nichtlinearitätsparameter	80
7.8	Detektortemperatur im Verlauf von Flug 10	81
7.9	Abhängigkeit der abgeleiteten Responsivitätsänderung von der Detektortemperatur	81
8.1	Beiträge zum Skalierungs- und zum Offsetfehler des kalibrierten Spektrums	89
8.2	Gesamtfehler des kalibrierten Spektrums für verschiedene Tangentenhöhen	90
9.1	Einfluß eines Skalierungsfehlers auf die Temperatur und die Konzentration von HNO_3	93
9.2	Einfluß einer aus den Weltraumspektren nicht entfernten N_2O_5 -Signatur auf die kalibrierten Spektren	95
9.3	Einfluß einer aus den Weltraumspektren nicht entfernten N_2O_5 -Signatur auf das abgeleitete Vertikalprofil	95
9.4	Einfluß eines Phasenfehlers auf die kalibrierten Spektren	96
9.5	Einfluß eines Phasenfehlers auf das CCl_4 -Retrieval	97
9.6	Abgeleitetes Temperaturprofil für Spektren mit und ohne Nichtlinearitätskorrektur	98
9.7	Einfluß der Detektor-Nichtlinearität auf die abgeleitete Konzentration von HNO_3	99
9.8	Einfluß der Detektor-Nichtlinearität auf abgeleitete Korrelationen	100

Tabellenverzeichnis

3.1	Übersicht über die Flüge von März 1997 bis Februar 2002	23
3.2	Übersicht über die in den Flügen 4 bis 10 abgedeckten Spektralbereiche	23
3.3	Zur Spurengasprofilbestimmung verwendete Spektralbereiche	23
5.1	<i>NESR</i> -Werte	31
5.2	<i>NESR</i> und daraus abgeleiteter Fehler der Instrumentresponsivität und des Offsets	33
5.3	Fehler durch die Instrumentdrift	40
5.4	Fehler in Instrumentresponsivität und Offset durch Fehler in der Basislinie	44
6.1	Typische Fehler in der Schwarzkörperphase und der instrumentellen Phase	54
6.2	Elevationswinkel und Zahl der koaddierten Interferogramme, Flug 7	57
6.3	Beiträge zum Phasenfehler	65
7.1	Spektrale Bereiche, in denen Artefakte auftreten, am Beispiel von Kanal 1	70
7.2	Auswirkung der Nichtlinearität auf die Kanäle 1 bis 3 in Flug 10	75
7.3	Fehler in der Nichtlinearitätsbestimmung durch Abbrechen der Taylorreihe	78
7.4	Fehler bei der Bestimmung der Nichtlinearität	82