

OPTIMIERUNG DER
PARAMETERAUSWAHL FÜR EIN
OPERATIONELLES OFF-LINE-
RETRIEVAL VON SPURENGAS-
VERTIKALPROFILIEN AUS MIPAS-
DATEN

Dissertation der Fakultät Physik an der

Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von

Jörg Steinwagner aus Amberg

München, 14. Mai 2004

1. Gutachter: Prof. Dr. Heinrich Quenzel
2. Gutachter: Prof. Dr. Robert Sausen

Tag der mündlichen Prüfung: 28.6.2004

Zusammenfassung

Optimierung der Parameterauswahl für ein operationelles off-line-Retrieval von Spurengasvertikalprofilen aus MIPAS-Daten

Seit März 2002 ist der Umweltsatellit ENVISAT erfolgreich im Einsatz. ENVISAT trägt eine Reihe von Messinstrumenten zur Fernerkundung der Erdatmosphäre. MIPAS, als eines dieser Instrumente, soll durch seine Konzeption als horizontal sondierendes Infrarotspektrometer helfen, die Kenntnisse über die chemischen Zusammenhänge in der mittleren Atmosphäre zu erweitern. Dazu misst MIPAS Infrarotemissionen von Spurengasen wie H_2O , O_3 , CH_4 , NO_2 , N_2O , HNO_3 . Weiterhin ermittelt MIPAS globale Druck- und Temperaturprofile.

Aus den kalibrierten Messungen werden in der Prozessierungskette durch iterative Rechenverfahren (Retrievals) Vertikalprofile von Spurengasen erzeugt. Hierzu werden die Messungen mit simulierten Spektren eines Vorwärtsmodells verglichen. Bei jedem Vergleich werden Modellierungsparameter systematisch geändert bis es zu einer Übereinstimmung mit den Vergleichsgrößen kommt, die innerhalb der Vorgaben festgelegter Abbruchkriterien liegt. Verbesserungen im Rechenverfahren sind zum einen durch Anpassungen in den Nebenbedingungen (Regularisierung), die nötig sind, um die mathematisch möglichen Lösungen der Rechnung von den physikalisch sinnvollen zu trennen, möglich. Zum anderen sind Anpassungen in der Behandlung bestimmter systematischer Fehler notwendig und schließlich ist man daran interessiert, durch Wolkeneinflüsse unbrauchbare Messungen auszusondern.

Um ein Maß für die Verbesserungen zu erhalten, werden in dieser Arbeit Kriterien definiert und diskutiert, anhand derer verschiedene parametrisierte Rechenverfahren hinsichtlich ihrer Güte verglichen werden können. Die Kriterien sind: Höhenauflösung (Averaging Kernel), Informationsgehalt und Anzahl der Freiheitsgrade sowie herkömmliche Kriterien wie Standardabweichungen.

Das Thema Regularisierung wird durch eine Vergleichsstudie zwischen einem selbst entwickelten Ansatz (Höhenabhängige Matrix, HoMa), einem noch nicht bei operationellen Spurengasretrievals eingesetzten Verfahren (Maximale-Entropie-Methode, MEM2) und den Standardmethoden Optimal Estimation und Tikhonov behandelt. Es stellt sich heraus, dass die spezialisierten Verfahren HoMa und MEM2 gegenüber den etablierten Verfahren unter Zugrundelegung der oben erwähnten Kriterien Vorteile bieten, was Transparenz der Verfahren, Diagnosemöglichkeiten und Qualität der erhaltenen Profile angeht. Besonders hervorzuheben sind die Ergebnisse von MEM2, das ohne Vorwissen (*a priori*-Annahmen) auskommt.

Bei der Behandlung systematischer Fehler zeigt sich, dass es sich hierbei um einen unverzichtbaren Bestandteil jedes Retrievals handelt. Die Rechnungen mit Simulationsdaten ergeben bei Hinzunahme der Korrekturterme dramatische Verbesserungen in den Ergebnissen, wenn systematische Fehler vorliegen.

Der Komplex, der sich mit der Berücksichtigung von Wolken in den Messungen befasst, zeigt die Weiterentwicklung einer etablierten Idee. Durch genaue Analyse von Wolkenindizes lassen sich Messungen retten, die andernfalls als durch Wolken kontaminiert ausgesondert worden wären. Dieses Verfahren kann dazu beitragen, wichtige Erkenntnisse aus den unteren Atmosphäreschichten zu erhalten.

Ein Vergleich der Ergebnisse der Arbeit mit unabhängigen Ergebnissen des ROSE-Modells zeigt viel versprechende Übereinstimmungen.

INHALTSVERZEICHNIS

Kapitel 1	EINFÜHRUNG	1
1.1	Zweck der ENVISAT-Mission	1
1.2	Die Rolle von MIPAS innerhalb der ENVISAT-Mission	4
1.3	Struktur der vorliegenden Arbeit	5
Kapitel 2	EXPERIMENT	7
2.1	Die Plattform – ENVISAT	7
2.2	Das Instrument – MIPAS	9
2.3	MIPAS im internationalen wissenschaftlichen Umfeld	14
Kapitel 3	THEORIE	15
3.1	Der Begriff „Retrieval“ und seine Komponenten	15
3.2	Der MIPAS-Prozessor im Überblick	17
3.3	Strahlungstransfer	21
3.3.1	Abhängigkeiten der berechneten Spektren	22
3.3.1.1	Der diskrete Fall	24
3.3.2	Jakobi-Matrizen	26
3.3.2.1	Microwindows	26
3.3.2.2	Aufbau der Jakobi-Matrizen	27
3.4	Inversionsrechnung	29
3.4.1	Grundlagen	29
3.4.1.1	Beispiel zum Least-Squares-Problem	30
3.4.1.2	Die Bestandteile einer Regularisierung in der vorliegenden Arbeit	34
3.4.1.3	Die iterative Bestimmung des Lösungsprofils	34
3.4.1.4	Beispiel zur iterativen Lösung	37

3.4.2	Verwendete Verfahren	41
3.4.2.1	Das Optimal-Estimation-Verfahren	41
3.4.2.2	Das Tikhonov-Verfahren	42
3.4.2.2.1	Beispiel zur Tikhonov-Regularisierung	43
3.4.2.3	Das Levenberg-Marquardt-Verfahren	45
3.4.2.4	Zusammenfassung	46
3.5	Gütekriterien und Analysewerkzeuge für ein Retrieval	47
3.5.1	Wann ist ein Retrieval „gut“?	47
3.5.1.1	Der Averaging Kernel	48
3.5.1.2	Der Begriff des Informationsgehalts	51
3.5.2	Wann ist ein Kriterium „gut“ ?	54
3.5.2.1	Der Begriff des Freiheitsgrades	55
3.5.2.2	Anpassung von Größenordnungen	56
3.5.2.3	Herkömmliche Methoden	57
3.6	Optimierung der Parameterauswahl	58
3.6.1	Wo besteht Bedarf an Optimierung?	58
3.6.2	Verbindung zur verwendeten Mathematik	60
3.6.3	Verbindung zur Meteorologie	60
Kapitel 4	PRAXIS	61
4.1	Regularisierung	61
4.1.1	Fragestellung - Regularisierung bei Spurengasretrievals	61
4.1.2	Überblick über Regularisierungsverfahren	62
4.1.3	Profilformabhängige Regularisierung mit HoMa (Höhenabhängige Matrix)	64
4.1.3.1	Aufbau des Glättungsoperators	64
4.1.3.2	Aufbau des Gewichtungsopeators	66
4.1.3.3	Eigenschaften und Besonderheiten von HoMa	69
4.1.4	HoMa in der vorliegenden Arbeit	71
4.1.4.1	Simulationsdaten	71
4.1.4.2	Größen zur Fehleranalyse in der Simulation	71
4.1.4.3	Anwendung von HoMa auf Simulationsdaten	72
4.1.4.4	MIPAS-Flugdaten	75
4.1.4.5	Anwendung von HoMa auf Flugdaten	76
4.1.5	Die Maximale-Entropie-Methode (MEM2)	81
4.1.5.1	Beschreibung der Methode	81

4.1.5.2	Aufbau des Operators	82
4.1.5.3	Die Nebenbedingung bei MEM2	83
4.1.5.4	Eigenschaften und Besonderheiten von MEM2	84
4.1.6	MEM2 in der vorliegenden Arbeit	85
4.1.6.1	Simulationsdaten	85
4.1.6.2	Größen zur Fehleranalyse in der Simulation	85
4.1.6.3	Anwendung von MEM2 auf Simulationsdaten	85
4.1.6.4	MIPAS-Flugdaten	87
4.1.6.5	Anwendung von MEM2 auf Flugdaten	87
4.1.7	Vergleich mit etablierten Methoden	91
4.1.7.1	Anwendung bei Verwendung von simulierten Daten	91
4.1.7.2	MIPAS-Flugdaten	93
4.1.7.3	Anwendung, Optimal-Estimation mit <i>a priori</i>	94
4.1.7.4	Anwendung, Tikhonov	97
4.1.8	Zusammenfassung und Gegenüberstellung der Ergebnisse	101
4.2	Systematische Fehler	104
4.2.1	Fragestellung	104
4.2.1.1	Theorie	104
4.2.2	Anwendung auf simulierte Daten	106
4.2.2.1	Voraussetzungen für die durchgeführten Arbeiten	106
4.2.2.2	Verwendete Größen zur Fehleranalyse	107
4.2.2.3	Die Anwendung der Korrekturen in der vorliegenden Arbeit	108
4.2.2.4	Zusammenfassung	111
4.3	Wolkenerkennung	112
4.3.1	Fragestellung	112
4.3.1.1	Theorie	112
4.3.1.2	Die Wolkenerkennung in der vorliegenden Arbeit	113
4.3.2	Anwendung der Wolkenerkennung bei KOPRA-Spektren	114
4.3.2.1	Besonderheiten durch das Field of View von MIPAS	114
4.3.2.2	Verwendete Szenarien	115
4.3.3	Anwendung des Wolkenindex auf simulierte Daten	117
4.3.4	Zusammenfassung	120
Kapitel 5	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	122
5.1	Zusammenfassung	122
5.2	Ausblick	124

Anhang		126
Anhang A (Retrieval)		126
A.I	Berechnung der Ableitungen bei MEM2	126
A.I.1	Definitionen	126
A.I.2	Ableitungen	126
A.I.2.1	Herleitung der ersten Ableitung	126
A.I.2.2	Ergebnis 1, erste Ableitung	128
A.I.2.3	Herleitung der zweiten Ableitung	129
A.I.2.4	Ergebnis 2, zweite Ableitung	130
A.II	Besetzungsmatrizen	131
A.II.1	Besetzungsmatrizen für Rechnungen mit simulierten Daten	131
A.II.2	Besetzungsmatrizen für Rechnungen mit Flugdaten	132
A.III	Verwendete Microwindows und Submicrowindows	134
A.III.1	Bei Simulationen verwendete Microwindows	134
A.III.2	Bei Rechnungen mit Flugdaten verwendete Microwindows und Submicrowindows	134
A.IV	Verwendete Gitter	142
A.IV.1	Bei Simulationen verwendete Gitter	142
A.IV.2	Bei Rechnungen mit Flugdaten verwendete Gitter	142
A.V	Programme	143
Anhang B (Mathematik)		144
B.I	Lineare Algebra	144
B.I.1	Determinante	144
B.I.2	Eigenschaften spezieller Matrizen	144
B.I.3	Normen	144
B.I.4	Zusammenhang zwischen Singulärwerten und Eigenwerten	145

Anhang C (Physik)	147
C.I Nicht-SI-Einheiten	147
C.I.1 ppmv	147
C.II Formelsammlung	147
C.II.1 Umrechnung Wellenzahl – Wellenlänge – Frequenz	147
C.III Konstanten und Vorsätze	149
Abbildungsverzeichnis	150
Tabellenverzeichnis	155
Abkürzungsverzeichnis	157
Literaturverzeichnis	160
Danksagung	165
Lebenslauf	166

„Nur Einer hat mich verstanden und der hat mich auch nicht verstanden“ – G.W.F. Hegel

Meiner Familie.

Kapitel 1 EINFÜHRUNG

1.1 Zweck der ENVISAT-Mission

In den späten 80er Jahren des letzten Jahrhunderts gab die ESA einer Expertengruppe, der LISA Consultancy Group, den Auftrag, die Möglichkeiten und Anforderungen von tangential beobachtenden Atmosphären-Messinstrumenten (Limb soundern) zu untersuchen. Es sollten Spezifikationen für Instrumente erarbeitet werden, die in der Lage sein sollten, in einem großen spektralen Bereich zu messen. Zudem sollten die Beobachtungen auf polar umlaufenden Orbits erfolgen. Die Expertengruppe erarbeitete bis 1990 drei hauptsächliche Bereiche, auf die der Fokus in der Erforschung der mittleren Atmosphäre zu legen sei [20]. Diese Bereiche gliederten sich in

Atmosphärenchemie

Um die Chemie der Atmosphäre zu verstehen, muss man die Verteilung von Spurengasen in der Atmosphäre kennen.

Klimatologie

Die quantitative Kenntnis der Spurengasverteilung in der Atmosphäre ist unerlässlich, um die durch zeitliche Schwankungen der Spurengaskonzentrationen verursachten Änderungen des Strahlungshaushaltes auf das Erdklima erfassen zu können.

Operationelle Meteorologie

Der Einfluss des Strahlungshaushaltes der unteren Stratosphäre und der oberen Troposphäre auf die Gesamtatmosphäre ist für die operationelle Meteorologie eine wichtige Größe.

Eine große Anzahl von Atmosphärenparametern wie Temperatur, Druck und Spurengase (Spezies) muss vermessen werden, um diesen wissenschaftlichen Anforderungen gerecht zu werden. Hierzu benötigt man mehrere Instrumente, die alle in verschiedenen Bereichen des elektromagnetischen Spektrums messen, weil ein einzelnes Instrument diese Aufgabe nicht erfüllen kann. Leichte Moleküle mit permanenten Dipolmomenten wie OH, HO₂ oder ClO haben durch Rotationsenergie bedingte spektrale Charakteristika, die v. a. im fernen Infrarot oder im Bereich der Mikrowellen angesiedelt sind. Die elektromagnetischen Signaturen schwererer Moleküle, wie NO₂ oder HNO₃, können durch die Analyse von spektralen Merkmalen im mittleren Infrarotbereich identifiziert und gemessen werden.

Da kein einzelnes Instrument die benötigten Spektralbereiche alleine abdecken konnte, schlug die Gruppe ein Paket von drei komplementär arbeitenden Instrumenten (mittleres Infrarot, fernes Infrarot, Mikrowelle) als das Herzstück einer polar umlaufenden Mission zur Untersuchung der mittleren Atmosphäre vor.

Die Expertengruppe kam zu dem Schluss, dass der am besten geeignete Typ von Messinstrument für den mittleren Infrarotbereich ein tangential beobachtendes, passiv messendes Gerät sei. Um die benötigten spektralen Bereiche abzudecken, musste es sich um ein Interferometer handeln. Die Hauptanforderungen umriss die Gruppe mit den Stichwörtern

- simultan (Messung aller beteiligten Spezies gleichzeitig),
- global (polare Orbits) und
- tageslichtunabhängig.

Im Wesentlichen wurden die Empfehlungen der LISA Consultancy Group bei der Gesamtverwirklichung der danach bewilligten ENVISAT-Mission durch den Einsatz mehrerer Instrumente mit nahezu komplementären Messbereichen zur Atmosphärenbeobachtung verwirklicht. Die Ziele der ENVISAT-Mission wurden von der ESA wie folgt umrissen [26]

- Die mit den ERS-Satelliten begonnenen Erdbeobachtungen, inklusive der Radarmessungen, sollen kontinuierlich weitergeführt werden.
- Die ERS-Missionen, insbesondere die Ozean- und Eis-Missionen, sollen erweitert werden.
- Die Anzahl der Beobachtungsparameter muss ausgeweitet werden, um der Tatsache des wachsenden Wissens über Größen, welche die Umwelt beeinflussen, Rechnung zu tragen.
- Es soll ein wichtiger Beitrag zu Umweltstudien geleistet werden, insbesondere im Bereich der Atmosphärenchemie und der Ozeanforschung (dies beinhaltet auch meeresbiologische Aspekte).

Diese Hauptziele sind verbunden mit den beiden nachrangigen Aufgaben

- Effektive Überwachung der Erdressourcen;
- Besseres Verständnis von Vorgängen auf der festen Erde;

Die Ozeane, das Festland mit seinem Artenreichtum an Flora und Fauna, die eisbedeckten Regionen (Kryosphäre) und die Atmosphäre (Troposphäre, Stratosphäre und Mesosphäre) sind Teile eines vernetzten Gesamtsystems. Änderungen in einzelnen Teilen dieses Systems haben Auswirkungen auf andere Teile des Systems.

Die ENVISAT-Mission ist ein wichtiges Element, um Langzeitstudien zur Umweltbeobachtung zu etablieren und fortzuführen und sie dient neben den wissenschaftlichen Zielen durch die Bereitstellung einer großen Vielzahl von Daten auch der Entwicklung von operationellen und kommerziellen Anwendungen. Die Daten, die aus der ENVISAT-Mission stammen, dienen zudem auf globalem Maßstab dem Verständnis von klimatischen Prozessen und helfen dabei, Klima- und Vorhersagemodelle zu verbessern. Der Nutzen auf regionaler Ebene liegt bspw. in den Möglichkeiten zur Beobachtung von Schnee- und Eisbedeckungsgraden oder der Überwachung von landwirtschaftlichen Entwicklungen.

Tabelle 1 zeigt die jeweiligen Beiträge der einzelnen Instrumente zu den Aufgabengebieten der ENVISAT-Mission. Zu den einzelnen Instrumenten finden sich in Kapitel 2 weiterführende Informationen.

	ASAR	GOMOS	RA-2	MERIS	MIPAS	MWR	LR	SCIA	AATSR	DORIS
Atmosphäre										
Wolken				X	X			X	X	
Wasserdampf		X		X	X	X			X	
Strahlungsbilanz		(X)		X	(X)	X		(X)	X	
Temperatur / Druck		X		X	X			X		
Spurengase		X			X			X		
Aerosole		X		X	X			X	X	
Turbulenz		X								
Land										
Oberflächentemperatur						(X)			(X)	
Pflanzenbewuchs	X			X					X	
Land- und Forstwirtschaft	X			(X)					(X)	
Topologie	X		X				X		X	X
Geologie und Topographie	X		(X)						X	
Hydrologische Parameter	X		(X)	X		(X)			X	
Überschwemmungen	X									
Feuer									X	
Ozean										
Ozean Farbe				X						
Ozean Oberflächentemperatur									X	
Oberflächentopographie			X				X			X
Trübung				X						
Wellencharakteristik	X		X							
Oberflächenwind	X		X							
Strömungseigenschaften	X		X							
Topologie des Meeresbodens			X							
Globale Zirkulation			X						X	
Ozeanische Frontensysteme	X			X					(X)	
Küstendynamik	X			X						
Ölverschmutzung	X									
Natürlicher Film	X									
Schiffsverkehr	X									
Eis										
Seeis-Kartierung	X		X	X		(X)				
Seeis-Bewegung	X		X	X						
Seeis-Prozesse	X									
Schiffsrouten	X									
Temperatur									X	
Schneebedeckung	X			X					X	
Topographie	X		X				X			X
Bewegung von Eisschollen	X		X	X		(X)				

Tabelle 1. Beiträge der Messinstrumente zu den Missionszielen von ENVISAT
(x)= experimentell [26]

1.2 Die Rolle von MIPAS innerhalb der ENVISAT-Mission

Die ENVISAT-Mission wird mit ihrer einzigartigen Zusammenstellung von Messinstrumenten dabei helfen, drängende Fragen der Umweltentwicklung im globalen und regionalen Maßstab zu klären. Zu diesen Fragen gehören auch

- Schmelzen die Polkappen? Wenn ja: wie schnell?
- Wie ist der Zustand des Regenwaldes?
- Wie ist der Zustand der El-Nino-Strömung?
- Welche Konzentrationen von Treibhausgasen finden wir tatsächlich in der Atmosphäre vor?
- Wächst das Ozonloch?

Bei der Beantwortung solcher Fragen kann das Messinstrument MIPAS einen wichtigen Beitrag leisten. Dabei handelt es sich insbesondere um Fragen, die sich um Atmosphärenchemie drehen. Auch die Kenntnis bzw. Ableitung der Temperatur und des Druckes als zentrale meteorologische Größen fällt darunter. Die Daten, die MIPAS sammelt, sind, wie bereits erwähnt, Teilaspekte eines empfindlichen Gesamtsystems. Somit ist die geeignete Auswertung der Daten eine wichtige Aufgabe. Aus diesem Grund ist bei der Archivierung, Aufbereitung und Interpretation der Daten auf äußerste Sorgfalt und genaue Auswahl der verwendeten Parameter zu achten. Die Kriterien, nach denen die Daten prozessiert werden, müssen durchdacht und zugänglich sein.

MIPAS entspricht durch seine Konzeption den in Abschnitt 1.1 angeführten technischen Erfordernissen für ein Messinstrument zur passiven Fernerkundung von Spurengasen in der mittleren Atmosphäre. Es misst Emissionslinien der Atmosphäre im mittleren Infrarotbereich zwischen vier und 14 Mikrometern. In diesem Teil des Spektrums findet man die elektromagnetischen Signaturen einer großen Zahl wichtiger Moleküle wie bspw. der NO_y -Spurengasfamilie, aber auch Emissionslinien des Quellgases N_2O sind hier feststellbar.

Ein weiteres wichtiges Merkmal dieses Spektralbereiches ist, dass die emittierten Signale hier am stärksten in der Amplitude sind, denn für 250 K liegt das Maximum der Planck-Kurve bei etwa $11\mu\text{m}$.

Zudem sind Instrumente für den mittleren Infrarotbereich in der Regel in kompakterer Bauweise zu realisieren als Instrumente für den fernen Infrarotbereich. Die Erfahrungen, die am Institut für Meteorologie und Klimaforschung in Karlsruhe mit einer ballongestützten Variante des Instrumentes, MIPAS-B, bereits in den späten 80er und 90er Jahren des letzten Jahrhunderts gesammelt wurden, prädestinierten das Instrument für einen Einsatz in der ENVISAT-Mission. Die bereits absolvierten Messkampagnen mit MIPAS-B zeigten auch, dass gekühlte Michelson-Interferometer sich sehr gut zur simultanen Beobachtung von verschiedenen Spurengasen eignen [37].

Bei den MIPAS Ballonkampagnen wurden erfolgreich Spurengas-Vertikalprofile von O_3 , H_2O , CH_4 , N_2O , NO_2 und viele weitere bestimmt. Weitere Einzelheiten zu MIPAS finden sich in Kapitel 2.2 oder bei [37].

1.3 Struktur der vorliegenden Arbeit

Kapitel 2 befasst sich mit den technischen Gegebenheiten der ENVISAT-Mission und präsentiert die grundlegenden Parameter, die für MIPAS-Messungen bedeutend sind.

Das Thema in Kapitel 3 sind die theoretischen Grundlagen der vorliegenden Arbeit. Das Retrieval als mathematisches Berechnungsschema ermöglicht es, aus den von MIPAS aufgezeichneten Interferogrammen und daraus abgeleiteten Spektren Vertikalprofile von Spurengasen zu bestimmen. Abschnitt 3.1 erläutert und veranschaulicht den zentralen Begriff des Retrievals als Summe eines Vorwärtsmodells und der eigentlichen Inversionsrechnung.

Abschnitt 3.2 befasst sich mit der Beschreibung des DLR-Prozessors als operationelle Implementierung eines Retrievalverfahrens, um die wichtigsten Abläufe deutlich zu machen.

In 3.3 werden die grundlegenden Gedanken des infraroten Strahlungstransfers behandelt. Dabei werden wichtige Zusammenhänge erklärt (Bedeutung der Temperatur) und zentrale Größen vorgestellt (Jakobi-Matrizen).

Die Darstellungen in 3.4 gehen auf die Inversionsrechnung im Detail ein, zeigen Grundlagen, stellen spezielle Erfordernisse, die das Instrument MIPAS stellt, dar und präsentieren etablierte Methoden zur Lösung des Problems. Es handelt sich hierbei u. a. um eine mathematische Fragestellung, die nicht analytisch lösbar ist. Das Problem wird daher numerisch mittels Newton-Iteration näherungsweise gelöst (3.4.1.3). Die im vorliegenden Retrieval realisierten Ansätze für die Formulierung einer notwendigen Nebenbedingung zur numerischen Lösung des Problems (Levenberg-Marquardt, Optimal Estimation und Tikhonov) werden ebenfalls dargestellt (3.4.2.1 ff). Insbesondere Optimal Estimation und das Tikhonov-Verfahren bieten den Rahmen für eines der Ziele der Arbeit, das in der optimalen Auswahl von Regularisierungsparametern besteht.

Abschnitt 3.5 widmet sich den Größen zur Bewertung des Retrievals. Hinsichtlich der Optimierungen werden als Kriterien der Averaging Kernel (3.5.1.1), der Informationsgehalt (3.5.1.2), das Konzept der Freiheitsgrade (3.5.2.1) und retrievalspezifische Größen (3.5.2.2 ff) vorgestellt und diskutiert.

Die Notwendigkeit von Optimierungen und die Anwendungsfelder dieser Optimierungen werden in 3.6 aufgezeigt und die Wichtigkeit akkurater Parameterauswahl betont. Es wird eine Verbindung zwischen der mathematischen Fragestellung und physikalischen Größen hergestellt.

In Kapitel 4 stehen die eigenen Arbeiten und die praktische Anwendung im Mittelpunkt. Die Optimierungsfelder werden konkretisiert (physikalische Parameterauswahl, Berücksichtigung systematischer Fehler und Regularisierung) und die praktische Anwendung und Auswirkung der bereits umrissenen Optimierungen anhand von ausgewählten realen Datensätzen aus MIPAS-Messungen und Simulationen werden gezeigt

Zunächst werden zwei Regularisierungsverfahren ausführlich vorgestellt. Es handelt sich dabei zum einen um eine Eigenentwicklung (HoMa, 4.1.3) und zum anderen um die Anwendung eines Konzepts, das bisher nicht bei Spurengasretrievals eingesetzt wurde (Maximale-Entropie-Methode, 4.1.5). Beide Methoden werden sowohl anhand von Simulationsdaten als auch anhand realer MIPAS-Orbitdaten mit Hilfe der in Kapitel 3 definierten Kriterien analysiert. In Abschnitt 4.1.7 führen wir dann einen Vergleich der Alternativmethoden mit den etablierten Verfahren durch und fassen die Erkenntnisse in 4.1.7.5 noch einmal zusammen.

Abschnitt 4.2 greift die Fragestellung der Behandlung bestimmter systematischer Fehler in der Retrievalrechnung auf. Es wird eine Korrekturbehandlung präsentiert und die Ergebnisse werden anhand von Simulationsdaten bewertet.

In 4.3 schließlich befassen wir uns mit der Frage, wie man durch Wolken kontaminierte Messungen in der Profilberechnung erfassen und berücksichtigen kann. Es wird ein bereits operationell verwendetes Verfahren gezeigt (4.3.1 ff.) und dessen Anwendung demonstriert (4.3.4).

Kapitel 5 widmet sich der Zusammenfassung der Ergebnisse. Die Arbeit schließt mit einem Ausblick auf noch offene und untersuchenswerte Fragestellungen.

Kapitel 2 EXPERIMENT

2.1. Die Plattform - ENVISAT

In Kapitel 1 wurde bereits berichtet, dass auf ENVISAT eine Vielzahl von Messinstrumenten zum Einsatz kommen. Der ENVISAT-Start erfolgte am 1. März 2002 mit einer Ariane-5-Rakete. ENVISAT umrundet die Erde, während seiner auf 5 Jahre angelegten Mission, auf einem sonnensynchronen Orbit (Überquerung des Äquators immer zur gleichen Zeit) in einer mittleren Höhe von 800 km mit einer Umlaufzeit von ca. 101 Minuten. Die Inklination der Umlaufbahn beträgt 98° .

Bild 1 zeigt die Anordnung der insgesamt zehn wissenschaftlich genutzten Instrumente auf ENVISAT und Tabelle 2 gibt einen Überblick über die einzelnen Instrumente und ihre jeweiligen Einsatzgebiete. Die Abkürzungen sind im Abkürzungsverzeichnis erläutert.

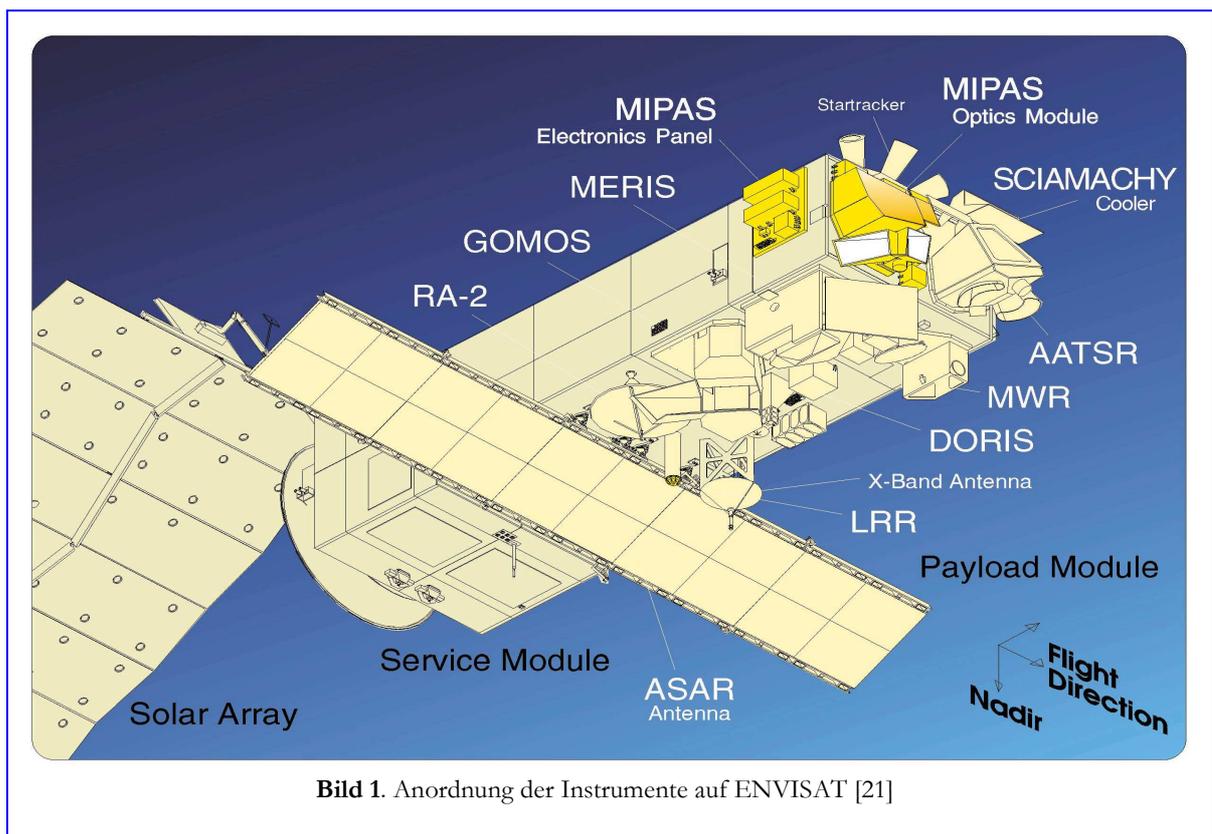


Bild 1. Anordnung der Instrumente auf ENVISAT [21]

Instrument	Spektralbereiche	Einsatzgebiet
GOMOS	250-675 nm, 756-773 nm, 926-952 nm	Beobachtung der Ozonkonzentration in der Stratosphäre
SCIAMACHY	8 Kanäle: 240 – 314 nm, 309 – 405 nm, 394 – 620 nm, 604 – 805 nm, 785 – 1050 nm, 1000 – 1750 nm, 1940 – 2040 nm, 2265 – 2380 nm	Bestimmung von Spurengas- und Aerosolkonzentrationen in der Atmosphäre
MIPAS	5 Kanäle: 4,15 – 14,6 μm	Sammlung von Informationen über chemische und physikalische Prozesse in der mittleren Atmosphäre
MERIS	15 Kanäle: 390 – 1040 nm	Meeresbiologie, Meerwasserqualität, Pflanzenwuchs auf Land, Wolken und Wasserdampfgehalt der Atmosphäre
ASAR	5,331 GHz	wetter- und tageslichtunabhängige Erdbeobachtung mit Radar
AATSR	0,55 μm , 0,67 μm , 0,87 μm , 1,6 μm , 3,7 μm , 10,7 μm , 12 μm	Messung der Ozeanoberflächentemperatur
RA-2	13,575 GHz, 3,2 GHz	Messung des Abstandes Erde-Satellit. Bestimmung der Höhe der Ozeanoberfläche
MWR	23,8 GHz, 36,5 GHz	Korrektur für RA-2 Daten
DORIS	2,036 GHz	hochgenaue Positionsangabe
LRR	694 nm, 532 nm	Positionsbestimmung des Satelliten

Tabelle 2. Instrumente auf ENVISAT und deren Einsatzgebiete [22]

2.2 Das Instrument - MIPAS

Die Zielsetzung von MIPAS ist die Bestimmung von Vertikalprofilen von Druck, Temperatur und Spurengasen wie O_3 , H_2O , CH_4 , N_2O , NO_2 und HNO_3 zur Verbesserung unserer Kenntnisse der Stratosphärenchemie und der Klimatologie. Weiterhin sollen die chemische Zusammensetzung, die Dynamik und die Strahlungsbilanz der mittleren Atmosphäre studiert werden. Außerdem ist eine Überwachung des stratosphärischen Ozons und von FCKWs angestrebt [19].

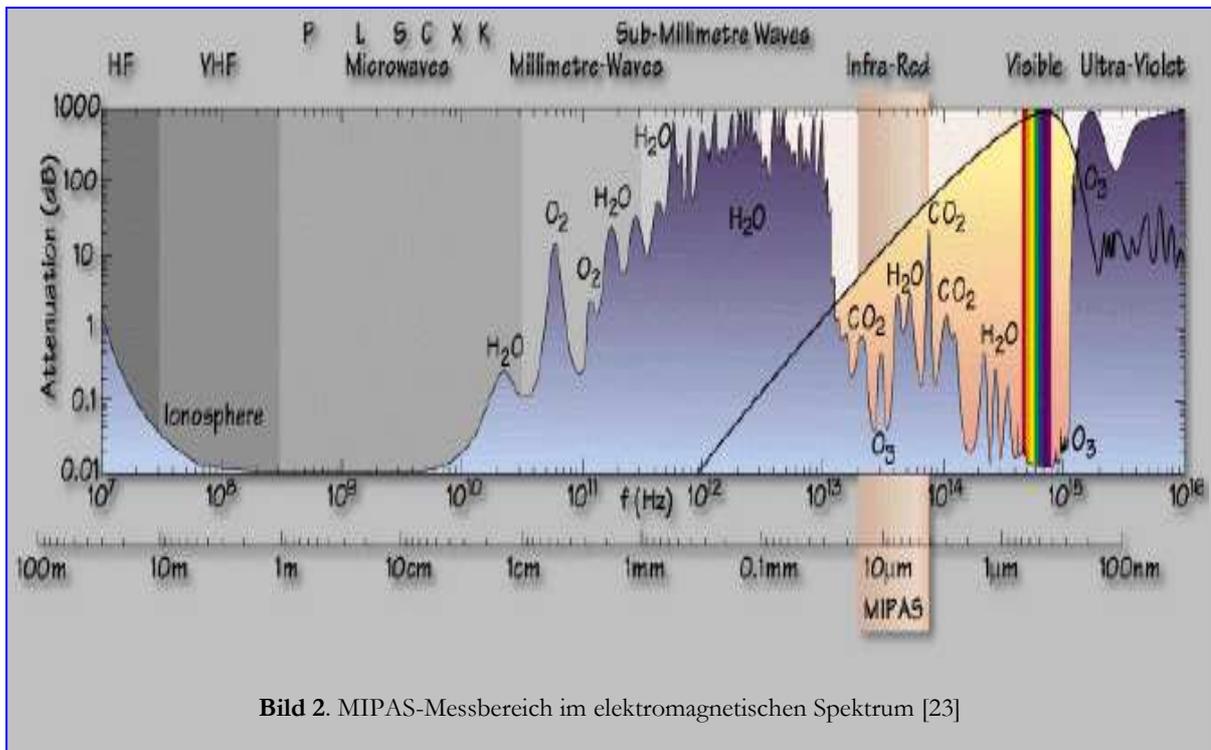


Bild 2. MIPAS-Messbereich im elektromagnetischen Spektrum [23]

Um das zu verwirklichen, werden Strahlungsemissionen von Atmosphärenbestandteilen im Infrarotbereich des elektromagnetischen Spektrums gemessen und ausgewertet.

Bild 2 veranschaulicht die Lage des Messbereiches von MIPAS im elektromagnetischen Spektrum mit Bezug auf verschiedene Spurengase.

MIPAS ist ein hochauflösendes, gekühltes Fourier-Spektrometer. Die Kühlung von MIPAS trägt dazu bei, das Eigenrauschen des Instruments klein zu halten. Dadurch wird einer Beeinflussung der Messungen durch Rauscheffekte entgegen gewirkt. MIPAS vermisst dabei die Atmosphäre in tangentialer Blickrichtung als sogenanntes Limb-Messgerät (Bild 4). Das Instrument deckt den Infrarotbereich zwischen 4,1 μm und 14,6 μm in fünf spektralen Bereichen ab, die als Kanäle bezeichnet werden (Tabelle 3). Das Auflösungsvermögen von MIPAS beträgt 0,035 cm^{-1} FWHM oder 0,06 nm bei 4,15 μm (Umrechnung Wellenzahlen-Wellenlängen siehe Anhang C.II.1). Das Auflösungsvermögen bezogen auf apodisierte Spektren beträgt 0,05 cm^{-1} . Eine weitere wichtige Größe in diesem Zusammenhang ist die Instrumental Line Shape (ILS). Grob gesagt führt die ILS dazu, dass die reale Messung einer idealen Emissionslinie instrumentenspezifische Eigenschaften widerspiegelt [28].

Das genannte Auflösungsvermögen führt rechnerisch zu ca. 60.000 abgetasteten Spektralpunkten bei jeder Messung. Tabelle 3 zeigt die Einteilung der Kanäle, in denen MIPAS misst, in Einheiten von Mikrometern und Wellenzahlen sowie die Rauschwerte der einzelnen Kanäle (NESR). Die $NESR_{APO}$ Werte sind Rauschwerte, die nach der so genannten Apodisierung der Spektren entstehen. Bei der Apodisierung werden Überschwingeffekte in den Spektren, die bei der Fouriertransformation der Interferogramme entstehen, gedämpft. Ein Grund für solche Effekte sind technische Randbedingungen bei der Aufnahme der Interferogramme [3][5][29].

Kanäle	A	AB	B	C	D
Abdeckung in Wellenzahlen [cm^{-1}]	685 - 970	1020 - 1170	1215 - 1500	1570 - 1750	1820 - 2410
Abdeckung in Mikrometern [μm]	14,6 - 10,3	9,8 - 8,6	8,2 - 6,7	6,4 - 5,7	5,5 - 4,2
NESR [$nW/(cm^2 sr cm^{-1})$]	50	40	20	6	4,2
$NESR_{APO}$ [$nW/(cm^2 sr cm^{-1})$]	30,35	24,28	12,14	3,64	2,55

Tabelle 3. MIPAS Spektralbereiche und NESR-Werte [61]

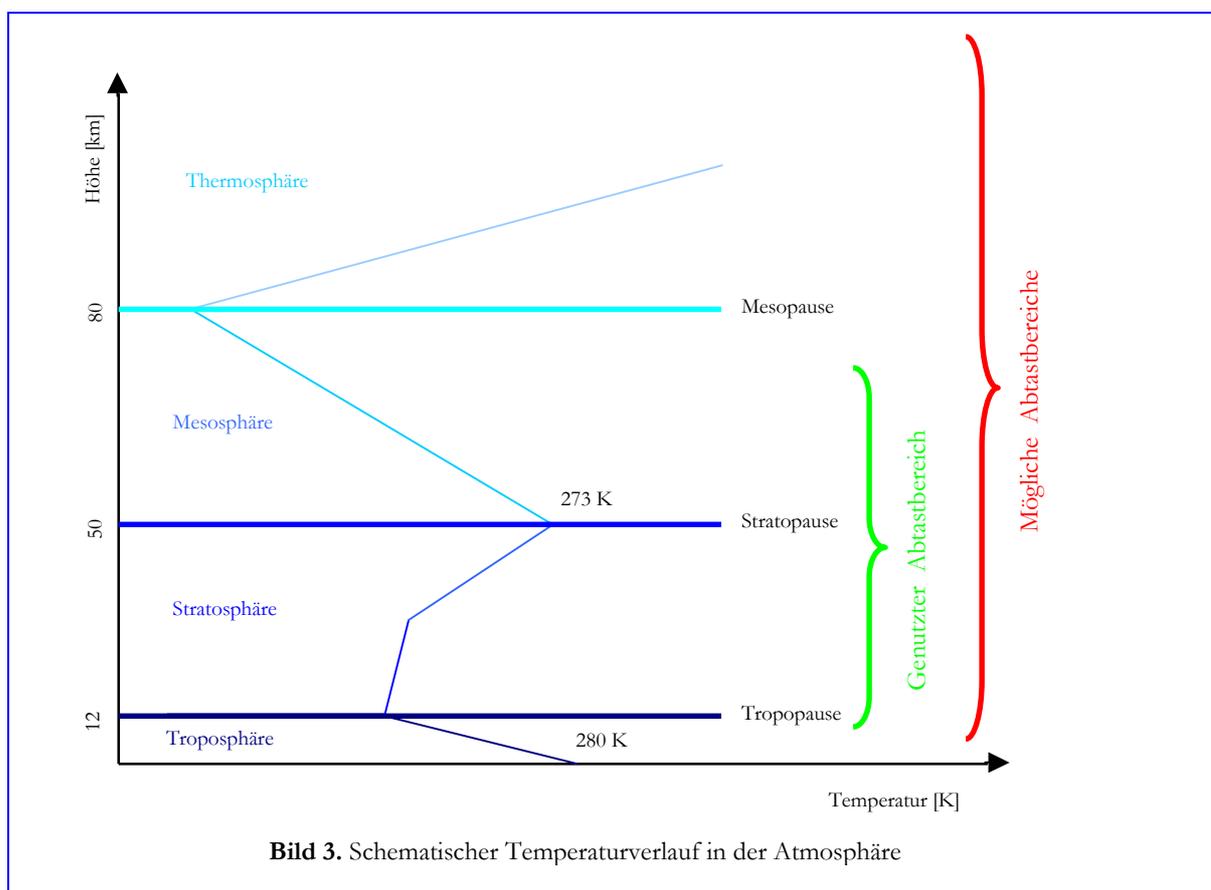
Die NESR-Werte sind ein wichtiger Parameter bei der Gewinnung von Spurengasprofilen aus spektralen Messungen. Das in Kapitel 3 noch im Detail erläuterte Rechenverfahren ist in zentralen Punkten von den NESR-Werten abhängig. Anschaulich lässt sich formulieren: Ist das am Detektor erhaltene Signal aufgrund der emittierten Strahldichte geringer als das Rauschen in den Kanälen, dann kann man ohne aufwändige Rechnungen keine verwertbaren Informationen aus dem Signal gewinnen. Stärker rauschbehaftete Messwerte werden daher beim Retrieval (Kapitel 3) schwächer gewichtet als schwächer verrauschte Daten.

MIPAS kann als passives Infrarotmessgerät sowohl auf der Nacht- als auch auf der Tagseite des ENVISAT-Orbits messen. Die Azimut-Scan-Richtung liegt in der Regel entgegengesetzt zur Flugrichtung. Durch diese Anordnung ist eine globale Überdeckung gewährleistet. Bild 4 macht die geometrischen Verhältnisse klar. Es ist nur das optische Modul von MIPAS schematisch dargestellt. Wie aus Bild 4 ebenfalls hervorgeht, kann MIPAS auch Messungen senkrecht zur Flugrichtung machen. Dieser Betriebsmodus dient für spezielle Untersuchungen. ENVISAT hat eine polumlaufernde Flugbahn mit einer Inklination von 98° , deswegen ist die Blickrichtung von MIPAS im Wesentlichen in Nord-Süd-Richtung. Die seitwärts gerichtete Detektoröffnung hingegen eignet sich, um Phänomene in der Atmosphäre zu untersuchen, die Ost-West-Verläufe zeigen. Zu solchen Phänomenen gehören bspw. Flugrouten von Verkehrsmaschinen. Um einen

anthropogenen Einfluss des Luftverkehrs untersuchen zu können, müsste man in diesem Fall seitwärts gerichtet messen.

Technisch ist MIPAS in der Lage, Messungen ab einer Tangentenhöhe von fünf bis 150 Kilometern zu machen (Bild 5). Die nach unten hin abnehmende Transmission der Atmosphäre stellt, neben der Existenz von Wolken, ein schwieriges Problem in der Fernerkundung mit Limb-Messgeräten dar, weil sie Beobachtungen von Gasen in der Troposphäre enorm schwierig macht. Auf der anderen Seite sind in großen Höhen nicht mehr genug emittierende Moleküle vorhanden, um ein verwertbares Signal am Detektor zu verursachen bzw. das Signal ist schwächer als das Rauschen in den Kanälen. Aus diesem Grund werden die Beobachtungen mit MIPAS im Normalbetrieb auf Tangentenhöhen von etwa 7 km bis 70 km durchgeführt. Das ist ausreichend, um Fragestellungen zu untersuchen, welche die Atmosphärenchemie der mittleren Höhenlagen betreffen.

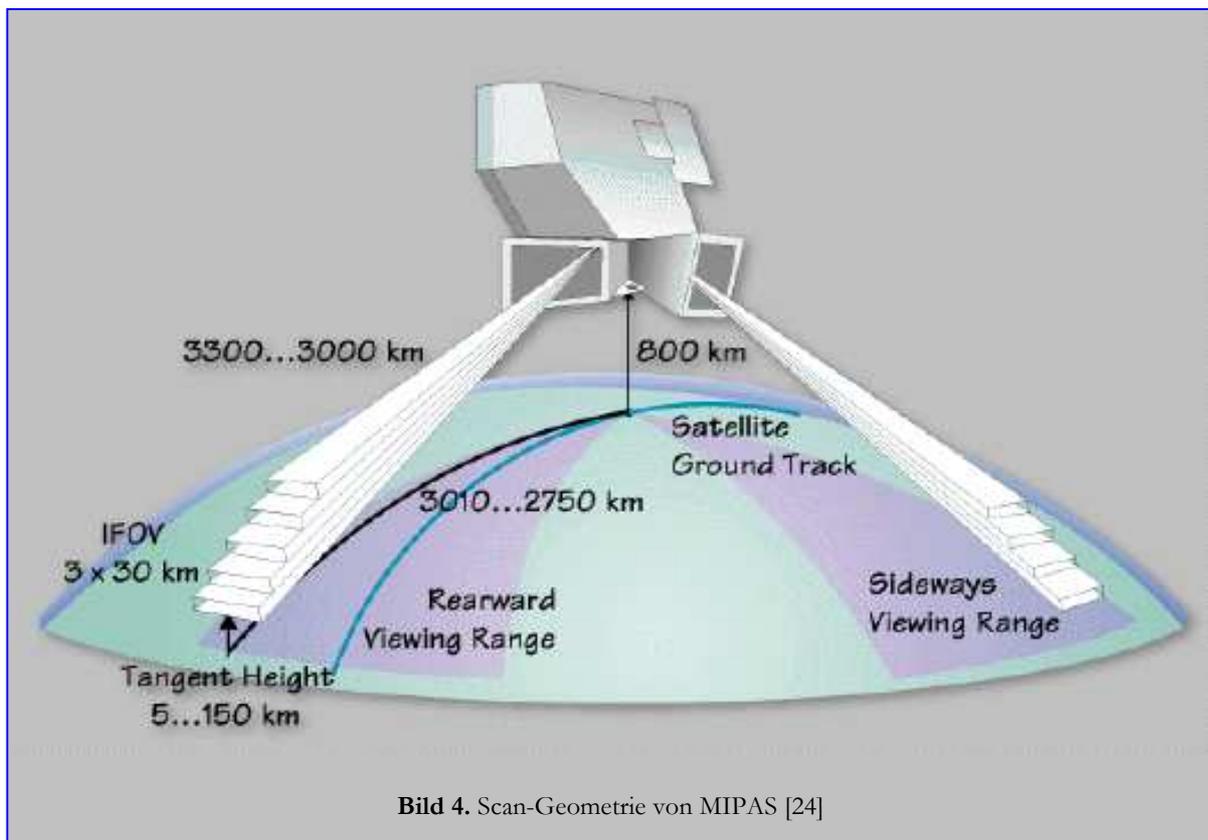
Bild 3 veranschaulicht die Einteilung der Atmosphäre gemäß dem prinzipiellen Temperaturverlauf in der Atmosphäre [47]. Die Höhen und Temperaturen sind lediglich exemplarisch eingetragen, um Größenordnungen zu veranschaulichen. Die markierten Bereiche zeigen den nominellen (rot) und den in der vorliegenden Arbeit genutzten (grün) Abtastbereich des Instruments.



Die Messungen verlaufen in der Regel in Schritten von etwa drei Kilometern. Das führt bei einer kompletten Vertikalsondierung (Scan) zu 15-21 Messungen (Sweeps), je nachdem wie grob und/oder regelmäßig das Abtastgitter gewählt wird. Eine solche Sequenz dauert je nach Anzahl

der Sweeps inklusive dem Zurückklappen des Spiegels in die Ausgangsposition etwa 85 Sekunden. In dieser Zeit bewegt sich der Fußpunkt des Satelliten (vgl. Bild 4) um ca. 500 km, das bedeutet, dass entsprechende Sweeps zweier aufeinander folgender Scans etwa 500 km auseinander liegen.

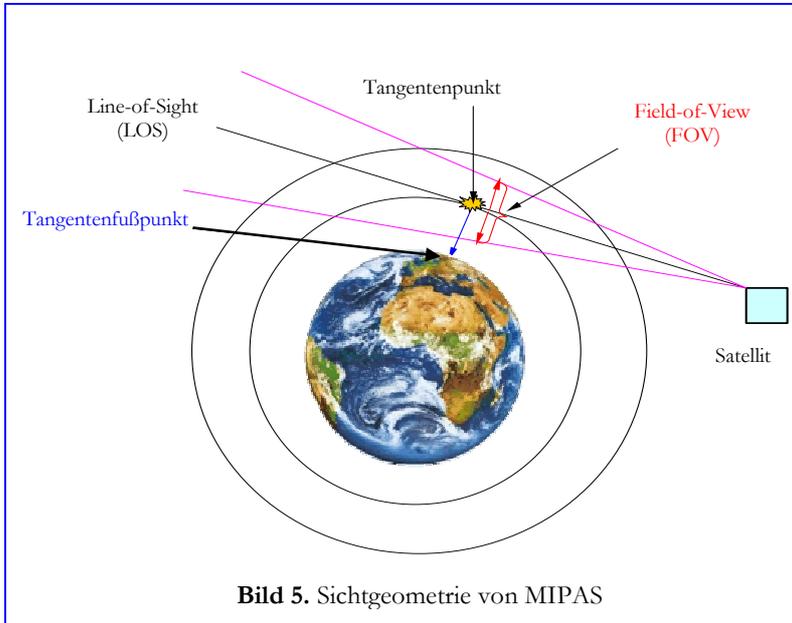
Das Instrument führt darüber hinaus in bestimmten zeitlichen Abständen Kalibrationsmessungen durch. Damit die Messungen nicht durch unbekannte instrumentelle Offsets, d. h. durch systematische Auf- oder Abschläge des Instruments auf das Messsignal, verfälscht werden, wird nach einer festgelegten Anzahl von Messungen eine Messung des kalten Weltraums vorgenommen. Da der Weltraum eine bekannte Temperatur von etwa 2,3 K aufweist, kann man durch Vergleiche bestimmen, ob das Instrument diesen Wert immer in gleicher Weise reproduziert. Weitere Kalibrationsmessungen werden mit einem mitgeführten Schwarzkörper durchgeführt.



Durch Vergleiche mit der nominellen Bahnberechnung von ENVISAT wird kontinuierlich überprüft, ob die errechneten Informationen bzgl. der Position noch korrekt sind, bzw. welche Abweichungen vorliegen. Das mechanische Herzstück von MIPAS, der klappbare Spiegel sowie die feine Zugmechanik, werden ebenfalls regelmäßig kontrolliert. Abweichungen, die hier auftreten, können sonst zu Effekten führen, welche die Sichtlinie des Gerätes (engl. Line-of-Sight, LOS) beeinflussen.

Ein Problem bei Fourier-Spektrometern ist eine ungleichmäßige Ausleuchtung des Sichtfeldes (engl. Field-of-View, FOV). Bei MIPAS wurde versucht diesem Problem durch die Konstruktion der Optik zu begegnen. Aus Bild 4 entnimmt man, dass das optische Modul von MIPAS einen gewissen Öffnungswinkel aufweist. Das führt dazu, dass nur Strahlung aus einem bestimmten

Raumwinkelsegment in das Messinstrument gelangt. Dieses Raumwinkelsegment wird als Gesichtsfeld (FOV) bezeichnet. Das vertikale FOV bei MIPAS beträgt 0,9 mrad, das horizontale FOV beträgt 9 mrad. Die Werte stellen einen Kompromiss zwischen optimaler Höhengauflösung und notwendiger Öffnung zum Auffangen ausreichender Menge an Strahlung dar. Bild 5 veranschaulicht den Strahlengang einer Messung mit MIPAS, wenn man die Atmosphäre in konzentrische Kugelschalen einteilt. Am etwa 3000 km vom Satelliten entfernten Tangentenpunkt hat das FOV, trotz des vergleichsweise kleinen Öffnungswinkels am Gerät, eine vertikale Ausdehnung von etwa drei Kilometern. Die Breite des FOV am Tangentenpunkt beträgt, durch die Instrumenteigenschaften und die Geometrie vorgegeben, ca. 30 km. Als horizontales Auflösungsvermögen lassen sich am Tangentenpunkt 30 km x 300 km angeben und als vertikales Auflösungsvermögen etwa 3 km.



Aus Bild 5 entnimmt man ebenfalls, dass der Sichtstrahl in der Schicht, in der sich der Tangentenpunkt befindet, den längsten Weg zurücklegt. Somit ist davon auszugehen, dass das empfangene Signal zu einem überwiegenden Teil Information aus der Schicht des Tangentenpunktes, also vom Ort der gewünschten Messung, enthält.

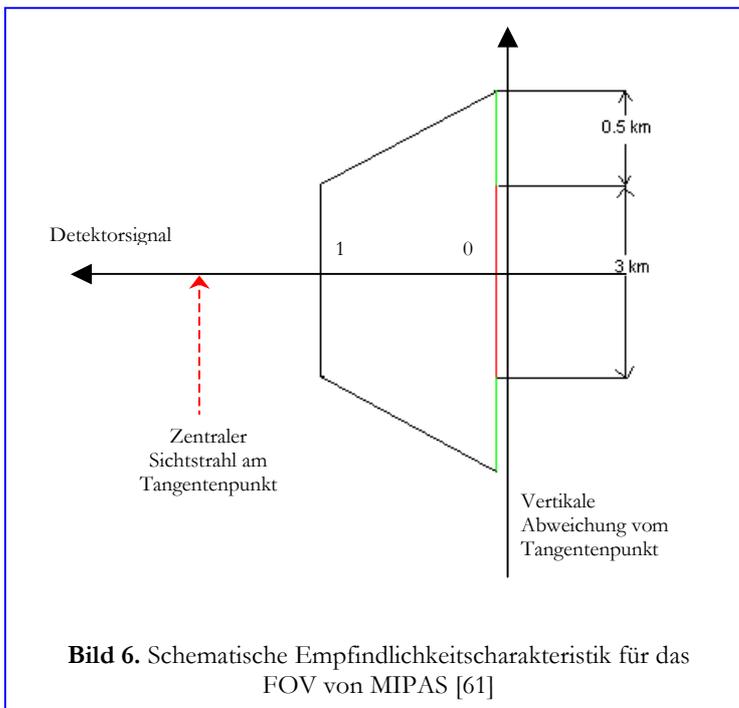


Bild 6 zeigt schematisch den Verlauf der Empfindlichkeit des MIPAS-Detektors am Tangentenpunkt in Abhängigkeit vom Winkel. Alle Sichtstrahlen, die den Detektor in der grünen Zone treffen, werden nur noch mit linear abnehmender Empfindlichkeit registriert. Sichtstrahlen, die von zu weit außerhalb des ideal empfindlichen FOV des Detektors stammen, werden durch diese Anordnung gänzlich ausgesondert. Damit und durch die Nutzung von weiteren Blenden im Gerät wird das Einfallen von Streulicht aus der Atmosphäre soweit wie möglich unterbunden.

2.3 MIPAS im internationalen wissenschaftlichen Umfeld

Die vorliegenden Untersuchungen mit MIPAS-Daten wurden am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Oberpfaffenhofen durchgeführt. Für die Arbeiten wurde u. a. eine am DLR entwickelte Software benutzt. Genauerer hierzu folgt in den Abschnitten 3.1 und 3.2.

MIPAS-Daten werden aufgrund ihrer Bedeutung für das Klimaverständnis auch von anderen bedeutenden europäischen Institutionen für Untersuchungen herangezogen. Hierfür existieren bei diesen Einrichtungen ähnliche Voraussetzungen an Hard- und Softwareumgebung wie beim DLR. Bei den Einrichtungen handelt es sich bspw. um [37][59]

- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Deutschland
- Forschungszentrum Karlsruhe, Deutschland
- Oxford University, England
- Rutherford Appleton Laboratory, England
- Istituto di Fisica Applicata "Nello Carrara", Italien
- Instituto de Astrofísica de Andalucía CSIC, Spanien

Die genannten Institutionen waren an der Vergleichsstudie AMIL2DA beteiligt, bei der verschiedene so genannte Prozessoren miteinander verglichen wurden [63]. Prozessoren sind, im vorliegenden Zusammenhang, Softwareumgebungen, die es ermöglichen, aus MIPAS-Messungen Produkte wie Profile oder Kartierungen zu erzeugen und die MIPAS-Daten damit einer breiteren Anwendung und Interpretation zugänglich zu machen (Abschnitt 3.2). Durch Studien wie AMIL2DA ist es möglich, die in Abschnitt 4.1 präsentierten Ergebnisse in einen internationalen wissenschaftlichen Kontext einzuordnen. Zudem sind einigermaßen zuverlässige Startwerte in Form von Profilen für bestimmte Teile der genannten Prozessoren, die man durch Studien mit voneinander unabhängigen Softwareprodukten gewinnen kann, unerlässlich. Dazu mehr in Kapitel 3.

Zu diesen Startwerten gehören die Ergebnisse so genannter NRT-Prozessoren. Bei NRT-Prozessoren handelt es sich um Software, die innerhalb kürzester Zeit nach den MIPAS-Messungen (bspw. drei Stunden) Produkte in Form von Spurengasprofilen erzeugt, wie z. B. der NRT-Prozessor, der an der Universität Bologna und dem Istituto di Fisica Applicata "Nello Carrara" im Auftrag der ESA entwickelt wurde. Eine NRT-Prozessierung von Daten wird bspw. erforderlich, wenn die errechneten Daten als Eingangswerte für Vorhersagemodelle dienen sollen, die auf aktuelle Werte von Produkten wie Temperatur angewiesen sind.

Die NRT-Verarbeitung stellt besondere Anforderungen an die Software und an die gesamte Verarbeitungskette vom Instrument bis zu den verarbeitenden Institutionen [54]. Diese zeitnah entstehenden Produkte können als Startwerte für off-line-Prozessoren verwendet werden, die ihre Berechnungen nicht zeitnah zu den Messungen vollziehen müssen. Ein NRT-Prozessor kann dazu beitragen, off-line-Prozessoren mit aktuellen Informationen zu versorgen. Meist hilft diese Vorgehensweise, um die Genauigkeit der von den off-line-Prozessoren berechneten Produkte zu optimieren.

Kapitel 3 THEORIE

3.1 Der Begriff „Retrieval“ und seine Komponenten

Die hier besprochene Level-2-off-line-Prozessierung (Retrieval) arbeitet nach folgendem Prinzip: Aus kalibrierten Spektren werden durch wiederholtes Abarbeiten von genau definierten Algorithmen und Verarbeitung von vorgegebenen Parametern Profile von Atmosphärenbestandteilen und korrelierten Hilfsgrößen bis zu einer bestimmten Genauigkeit abgeleitet.

Bild 7 veranschaulicht das Prinzip des Retrievals, wie es am DLR durchgeführt wird. Zu sehen ist ein von MIPAS gemessenes Interferogramm aus dem Kanal B, aufgenommen in 40,7 km Höhe. Aus Sequenzen solcher, pro Tangentenhöhe aufgezeichneter Interferogramme (Level-0-Produkte), werden durch Fourier-Transformation Spektren errechnet. Durch Hinzufügen von geographischen, zeitlichen und technischen Informationen entstehen kalibrierte Spektren (Level-1-Produkte), die von der ESA verteilt werden. Diese Spektren dienen als Ausgangsmaterial für die Generierung von Level-2-Produkten im DLR. Mit diesen Spektren werden die, von einem Vorwärtsmodell auf Grundlage von Atmosphärenparametern (Temperatur, Spurengasprofile), errechneten Spektren verglichen. Grundlage für ein derartiges Modell ist die Simulation des Strahlungstransfers in der Atmosphäre (Abschnitt 3.3). Der zweite wichtige Bestandteil des Retrievals, die Inversionsrechnung (Abschnitt 3.4), ermittelt u. a. aus dem Vergleich der gemessenen mit den simulierten Spektren ein verbessertes Profil des zu berechnenden Atmosphärenbestandteils, in diesem Fall der Temperatur. Fällt der Vergleich anhand vorher festgelegter Kriterien nicht gut genug aus, wird mit dem errechneten Profil ein neues Spektrum simuliert, d. h. das Problemlösungsverfahren (z.B. Least-Squares) wird unter Variation festgelegter Parameter so lange wiederholt (iteriert) bis ein Ergebnis gefunden ist, das den geforderten Kriterien entspricht. Die zugehörigen ermittelten Profile geben dann den Zustand der Atmosphäre im Rahmen des Modells wieder.

In der Regel ist die Aufgabenstellung für ein Retrieval zu komplex, um analytisch gelöst zu werden, deswegen benötigt man iterative Verfahren (Abschnitt 3.4.1.3).

Ist das Vertrauen in das Modell berechtigterweise groß genug, kann man, wenn die Kriterien für das Retrievalergebnis erfüllt sind, davon ausgehen, den tatsächlichen Zustand der Atmosphäre hinreichend genau zu beschreiben. Damit ist es möglich, das Retrievalergebnis als Grundlage für wissenschaftliche Aussagen über die Atmosphäre zu nutzen.

Genauso wichtig wie ein möglichst gutes Vorwärtsmodell und die optimale Auswahl der Inversionsparameter und –algorithmen ist die Vorbereitung, Aufbereitung, Übergabe und Verarbeitung der Eingabeparameter und Ergebnisse. Ohne einen geeigneten, möglichst versatilen, aber dennoch nachvollziehbaren Ablauf ist ein Retrieval nicht behandelbar. Das Gesamtpaket aus off-line bereitgestellten Anteilen, Verwaltung, Vorwärtsmodell und Inversionsrechnung wird als Prozessor bezeichnet.

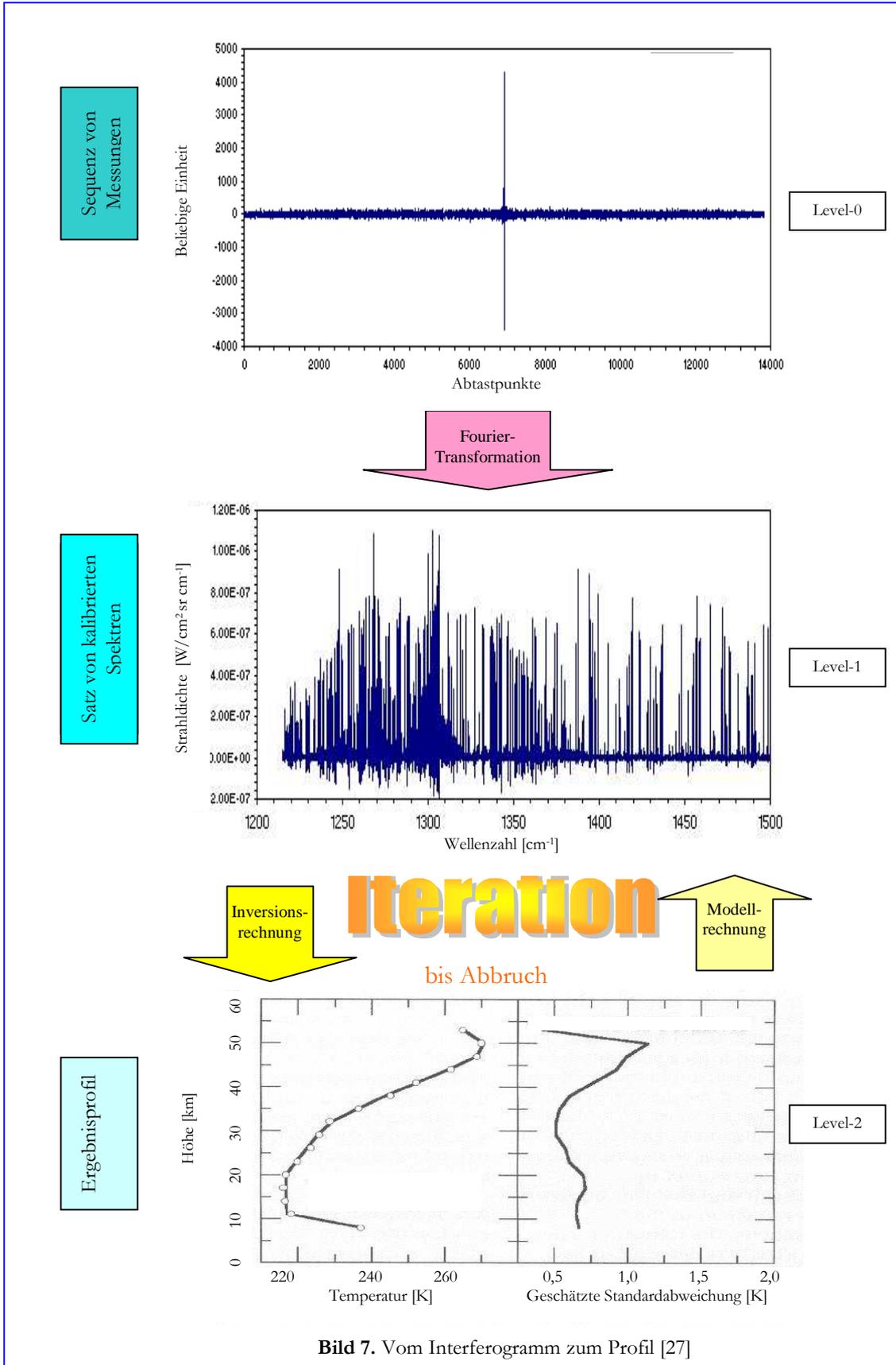


Bild 7. Vom Interferogramm zum Profil [27]

Das Rechenverfahren des Level-2-off-line-Prozessors, der am DLR in Oberpfaffenhofen in der MIPAS-Datenverarbeitung im Einsatz ist, arbeitet nach den oben genannten Gesichtspunkten. In den folgenden Abschnitten werden die drei Hauptkomponenten des DLR-Prozessors detailliert besprochen. Abschnitt 3.2 geht auf die Parametrisierung und den Ablauf der Prozessierung ein, Abschnitt 3.3 befasst sich mit den Grundlagen des Strahlungstransfers, sofern sie für das Verständnis des Vorwärtsmodells wichtig sind, und Abschnitt 3.4 zeigt die Einzelheiten der Inversionsrechnung auf.

3.2 Der MIPAS-Prozessor im Überblick

Der MIPAS-Level-2-off-line-Prozessor des DLR benötigt eine Vielzahl von zum Teil verwandten, zum Teil aber auch sehr verschiedenen Parametern.

Das in Abbildung 8 dargestellte Schema gibt einen Überblick über die erste Komponente des verwendeten Prozessors und die Einteilung der Parameter nach generellen, orbit-, scan-, sweep- und caserelevanten Kriterien. Als Case werden die jeweiligen zu retrievelnden Atmosphärenbestandteile bezeichnet, wobei in der untersten Ebene die eigentliche Iteration geschieht. Die Zielparameter sind örtlich und zeitlich genau zugeordnete Druck-, Temperatur-, Offset-, Gradienten-, Aerosol-, Line-of-Sight- und Spurengasprofile, die zusammen mit den anderen Vorwärtsmodellparametern bei der Vorwärtsrechnung (Strahlungstransferrechnung) Spektren erzeugen, welche möglichst nahe an den gemessenen liegen sollen. Die Spurengasprofile gehören zu den Parametern, die pro Iteration neu angepasst werden. Zur Anpassung der Profile pro Iteration werden verschiedene Größen benötigt, um aus bisher vorliegenden Profilen verbesserte zu errechnen. Abbildung 8 zeigt die für das Retrieval benötigten Parameter aufgeschlüsselt nach der aufgezählten Einteilung.

Um das Retrieval in der vorliegenden Form nutzen zu können, müssen einige Parameter off-line, d. h. nicht innerhalb der Retrievalrechnung, vorbereitet werden. Diese Parameter werden entweder in Datenbanken gesammelt und bei Bedarf vom Retrieval abgefragt oder direkt nach einer vorbereitenden Behandlung in das Retrieval gespeist. Zu den Parametern, die nach einer Aufbereitung in das Retrieval gespeist werden, gehören u. a. off-line berechnete Regularisierungsparameter, auf die in Kapitel 4 im Detail eingegangen wird.

Datensätze, die in den erwähnten Datenbanken bereitgestellt werden, sind bspw. off-line generierte Atmosphärengasprofile, die als Anfangswerte für die Vorwärtsmodellrechnung (Init-Guess) dienen, spektroskopische Daten von Molekülen (HITRAN-Datenbankinformationen) oder die sogenannten Level-1b-Daten (kalibrierte Spektren), die pro Orbit vorliegen.

Im Anschluss werden für das Retrieval spezifische, aber ansonsten global gültige Parameter wie z.B. die Auswahl des Orbits, festgelegt.

Es folgt das Einlesen aller für den ausgewählten Orbit relevanter Parameter. Dies geschieht in der Regel, indem Informationen aus den bereitgestellten Datenbanken geholt werden. An dieser Stelle werden Plausibilitätsprüfungen der Daten vorgenommen und eine erste Auswahl bspw. nicht durch Wolken kontaminierter Spektren getroffen. Weiterhin geschieht hier das wichtige Setup der Kovarianzmatrizen der Messung unter Berücksichtigung von systematischen Fehlern, die ein Maß für die Güte der Ergebnisse darstellen (siehe Abschnitt 3.4).

Der nächste Schritt beschäftigt sich mit der Bereitstellung von scanrelevanten Parametern. Ein Scan ist eine komplette Vertikalsondierung der Atmosphäre von der untersten ausgewählten Tangentenhöhe bis zur höchsten ausgewählten nahe einer bestimmten Geolokation im Orbit (Tangentenfußpunkt des mittleren Sweeps). Die einzelnen Messungen eines Scans bezeichnet man als Sweeps. Es werden die für einen Scan nötigen Profilinformatoren sowie alle mathematischen und physikalischen Vorbedingungen, die für diesen Scan kennzeichnend sind und die Rechnung im Weiteren beeinflussen, eingelesen. Dazu gehört die Verwertung der Angabe des Messgitters, also die Festlegung, welche Sweeps zu einem bestimmten Scan gehören sollen. Die Informationen, welche Sweeps aufgrund von Kontamination durch Wolken ausgelassen oder speziell behandelt werden sollen, werden ebenfalls an dieser Stelle einbezogen.

Im Anschluss daran erfolgt die Festlegung von Parametern, die spezifisch für einen bestimmten Case sind. Als Case wird der zu retrievende Atmosphärenbestandteil bezeichnet. Im Falle eines Spurengases wäre der Case also bspw. O_3 . Auf dieser Ebene geschieht auch das mathematische Setup des eigentlich zu lösenden Problems und je nach den Vorgaben werden die benötigten Größen eingelesen. Die vorliegenden Informationen werden (außer für Druck) innerhalb gewisser Grenzen linear auf ein vereinbartes Diskretisierungsgitter interpoliert. An dieser Stelle werden off-line vorbereitete Regularisierungsinformationen zur Lösung des Least-Squares-Problems eingelesen.

Es folgt die Übergabe der aufbereiteten Parameter an das Vorwärtsmodell. Im Wesentlichen bekommt das Vorwärtsmodell vorverarbeitete Profilinformatoren, spektrale Datenbankinformationen und Instrumentenparameter mitgeteilt. Das Vorwärtsmodell liefert simulierte Spektren und Ableitungsmatrizen (Jakobi-Matrizen, „K-Matrizen“) zurück. Diese Matrizen spielen in der gesamten Rechnung eine zentrale Rolle. In den Abschnitten 3.3 (Strahlungstransfer), 3.4 (Inversion) und 3.5 (Gütekriterien) wird auf die K-Matrizen näher eingegangen.

Die Ausgabeparameter des Vorwärtsmodells stellen die Eingangsparameter für den Retrievalkern (Inversionsrechnung), der als nächstes Glied in der Prozessierungskette folgt, dar. In diesem Teil werden die Korrekturen zur Verbesserung des aktuellen Profils errechnet und ausgeführt. Außerdem werden Abbruchkriterien angewendet, um zu testen, ob das erhaltene Profil die Lösung innerhalb der gewünschten Genauigkeit ist. Ist das Ergebnis nicht zufrieden stellend, wird das errechnete Profil an das Vorwärtsmodell für eine weitere Iteration zurückgegeben, ansonsten wird das Retrieval beendet und die Ausgabe- und Logdateien werden geschlossen.

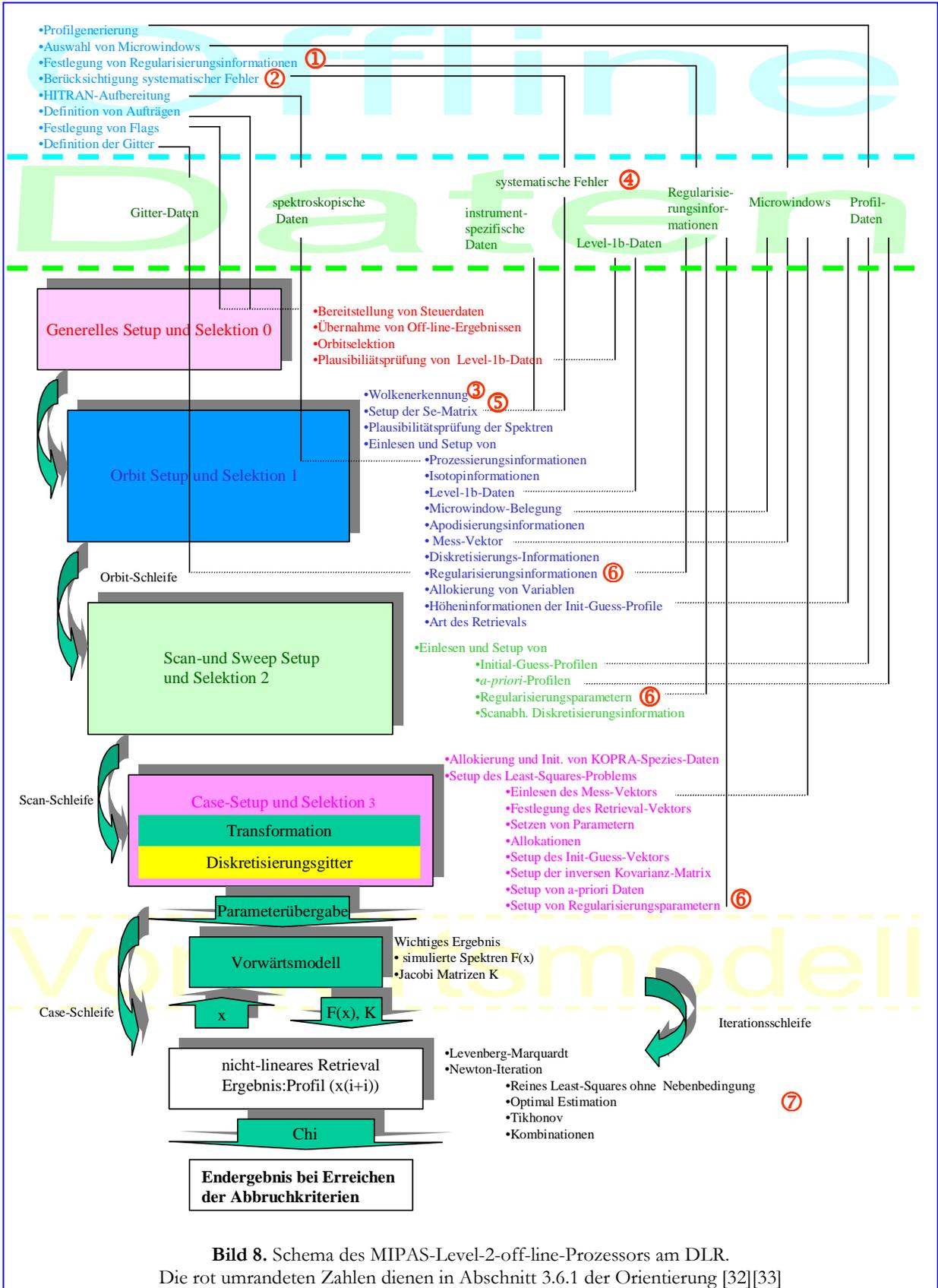


Bild 8. Schema des MIPAS-Level-2-off-line-Prozessors am DLR.
 Die rot umrandeten Zahlen dienen in Abschnitt 3.6.1 der Orientierung [32][33]

Die Reihenfolge der Retrievals der Zielparameter ist nicht völlig beliebig, da es sich herausgestellt hat, dass eine bestimmte Abfolge die Ergebnisse verbessert [59]. Das liegt daran, dass die einzelnen Spezies als Störgase voneinander in gewissem Grad abhängig sind. Es besteht zum einen eine physikalische Abhängigkeit, zum anderen gibt es aufgrund des im Retrieval verwendeten Global-Fit-Ansatzes [7], mathematische Abhängigkeiten der Größen untereinander. Der Begriff „Global Fit“ wird in Abschnitt 3.4.1 erläutert. Die Reihenfolge des Retrievals lautet im Normalfall

- Temperatur
(+ horizontale Gradienten und Kontinuum (Aerosolprofile), Offset)
- zusammen mit Line-of-Sight

Diese Größen haben einen direkten physikalischen Einfluss auf alle nachfolgenden Spezies. Insbesondere die korrekt ermittelte Sichtlinie (Line-of-Sight) ist ausschlaggebend, da ein zu hoch oder zu niedrig anvisierter Tangentialpunkt falsche Informationen für die Vorwärtsrechnung bereitstellt. Aber auch der Temperatur als zentraler strahlungsrelevanter Größe im infraroten Spektralbereich (Abschnitt 3.3.1) kommt eine entscheidende Bedeutung zu. Der Druck wird hydrostatisch nachgeführt, d. h. im Wesentlichen anhand der barometrischen Höhenformel berechnet.

Die Reihenfolge der weiteren Spezies im Retrieval lautet für die von der ESA zur Untersuchung vorgeschlagenen Gase [9]

- H_2O (+ horizontale Gradienten, Kontinuum und Offset),
- O_3 (+ horizontale Gradienten, Kontinuum und Offset),
- CH_4 (+ horizontale Gradienten, Kontinuum und Offset),
- HNO_3 (+ horizontale Gradienten, Kontinuum und Offset),
- N_2O (+ horizontale Gradienten, Kontinuum und Offset),
- NO_2 (+ horizontale Gradienten, Kontinuum und Offset).

Bezieht man bei der Rechnung jeweils die horizontalen Gradienten mit ein wird klar, warum sich durch die Hinzunahme von weiteren Zielen Abhängigkeiten ergeben. Ein horizontaler Gradient liegt dann vor, wenn es entlang der Sichtlinie bei einer Messung von MIPAS innerhalb einer simulierten Schicht der Atmosphäre zu ansteigenden oder abfallenden Stoffmengen einer Spezies oder entsprechenden Änderungen der Temperatur kommt. Das Auftreten eines solchen Gradienten ändert das Strahlungsfeld gegenüber dem Fall eines homogen verteilten Gases oder homogen verteilter Temperatur und führt somit zu anderen Spektren, was für die Vorwärtsrechnung bedeutsam ist.

Das Ergebnis des Retrievals nach Durchlaufen der Prozessierungskette ist ein berechnetes Profil (Temperaturprofil, Gasprofil, Aerosolprofil, Line-of-Sight, Gradientenprofil etc.), das ggf. als Endergebnis betrachtet wird oder wie beschrieben als erneutes Startprofil für eine weitere Iteration dient.

Das Retrieval ist nicht auf die obige Liste an Gasen beschränkt. Diese stellt lediglich die Auswahl der Gase dar, die von der ESA vorgeschlagen wurden. Weitere Gase, an denen man interessiert ist und die retrieved werden können, sind z. B. Chlorverbindungen wie ClONO_2 [36].

3.3 Strahlungstransfer

Die zweite Hauptkomponente des MIPAS-Level-2-off-line-Prozessors des DLR neben der Verwaltung und der Inversionsrechnung stellt die Strahlungstransferrechnung oder Vorwärtsmodellierung dar.

In der Vorwärtsmodellierung werden auf Grundlage eines möglichst genauen Modells der Atmosphäre Spektren berechnet. Diese Spektren dienen als Vergleich zu den Messspektren. Die Güte dieses Vergleichs ist ein Kriterium, das herangezogen werden kann, um zu entscheiden, ob das Retrieval beendet ist oder ob noch weiter iteriert werden muss.

Für die Inversionsrechnung (Abschnitt 3.4) benötigt man außerdem Ableitungen dieser Spektren bezüglich den zu retrievelnden Größen. Wir verwenden als Startparameter vertikale Höhenprofile von Temperatur, Spurengasen oder anderen Hilfsgrößen. Deswegen müssen die errechneten Spektren eine direkte Abhängigkeit von diesen Profilen zeigen, damit Ableitungen bestimmt werden können. Des Weiteren muss das Vorwärtsmodell die Gegebenheiten des Strahlungstransports im Infraroten berücksichtigen. Zu guter Letzt muss das Vorwärtsmodell an die besonderen Erfordernisse bezüglich der Messgeometrie angepasst sein.

All diese Anforderungen werden von dem Karlsruher Modell KOPRA [64], das hier verwendet wird, erfüllt. Das Modell hat zudem viele Erweiterungen implementiert, auf die hier im Detail nicht eingegangen wird. Dazu gehören die Berücksichtigung von

- Horizontalen Gradienten,
- Berechnungen ohne lokales, thermodynamisches Gleichgewicht (NLTE),
- Streuung und
- Ellipsoidalen Atmosphärenschalen.

Für die Atmosphärenschalen wurden lokale Radien angenommen, sodass die tatsächliche Form des Geoids in den Rechnungen zugrunde liegt.

Im weiteren Verlauf dieses Abschnittes werden die prinzipiellen Ideen des Strahlungstransports im Infraroten vorgestellt. Da in dieser Arbeit nicht die Parametrisierung des Vorwärtsmodells im Vordergrund steht, reduziert sich dies im Wesentlichen auf folgende vier Punkte

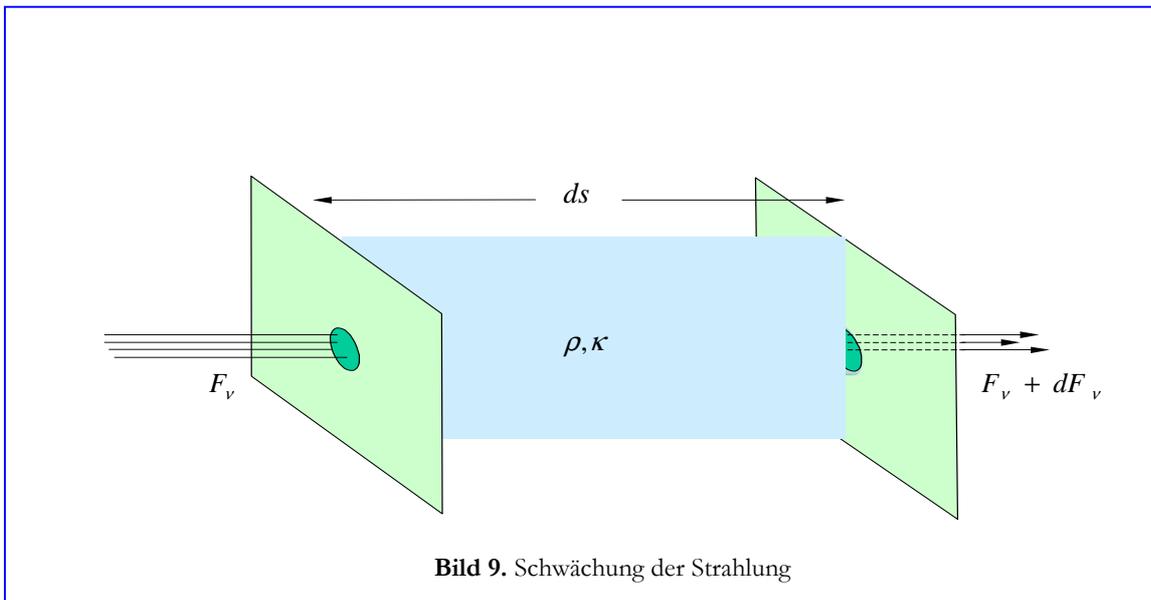
- Strahlungstransportgleichung im Infraroten;
- Temperaturabhängigkeit der Spektren;
- Abhängigkeit der Spektren vom Volumenmischungsverhältnis der betrachteten Spezies;
- Ableitungen der Spektren (Jakobi-Matrizen, K-Matrizen);

Die Beschränkung auf diese vier Punkte ist für die weiteren Betrachtungen ausreichend, denn sie stellen die Zusammenhänge mit den Größen her, die auch in der Inversionsrechnung von Be-

deutung sind. Alle anderen Parameter, die KOPRA in einer großen Zahl benötigt, werden als gegeben und optimal angenommen, sofern sie in keinem unmittelbaren Zusammenhang mit der Inversionsrechnung stehen.

3.3.1 Abhängigkeiten der berechneten Spektren

Passiert elektromagnetische Strahlung der Strahldichte $F(\nu, s)$ [$\text{nW}/(\text{m}^2 \text{sr cm}^{-1})$] und der Wellenzahl ν [cm^{-1}] längs eines Weges s [m] eine homogene Schicht der Dicke ds , dann wird diese Strahlung aufgrund von Absorption in der Schicht um einen Betrag $dF(\nu, s)$ geschwächt. Bild 9 illustriert diesen Zusammenhang.



Den Betrag der Schwächung leitet man mit Hilfe von Bild 9 ab

$$dF(\nu, s) = -F(\nu, s)\kappa(\nu, s)\rho_{abs}(s)ds \quad (3.1)$$

$\kappa(\nu, s)$	Absorptionskoeffizient	$[\text{m}^2/(\text{Zahl der Moleküle})]$
$\rho_{abs}(s)$	Absorberdichte	$[(\text{Zahl der Moleküle})/\text{m}^3]$
$-F(\nu, s)$	Strahldichte	$[\text{nW}/(\text{m}^2 \text{sr cm}^{-1})]$
ds	Schichtdicke	[m]
ν	Wellenzahl	$[\text{cm}^{-1}]$

Die betrachtete Schicht absorbiert nicht nur, sondern emittiert, wie jede Materie, auch Strahlung in Abhängigkeit von der Temperatur T .

Nimmt man lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE) an, so kann die emittierte Strahldichte durch die Planck-Funktion beschrieben werden [64].

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

h	Planck-Konstante	[Js]
T	Temperatur	[K]
c	Vakuum-Lichtgeschwindigkeit	[m/s]
ν	Wellenzahl	[m ⁻¹]
k	Boltzmann-Konstante	[J/K]

In der Schicht ds wird die Strahldichte $B(\nu, T(s))\kappa(\nu, s)\rho_{abs}(s)ds$ emittiert. Damit gilt für die gesamte Strahldichteänderung in differentieller Form die Schwarzschild-Gleichung [64]

$$dF(\nu, s) = (-F(\nu, s) + B(\nu, T(s))\kappa(\nu, s)\rho_{abs}(s))ds \quad (3.3)$$

Im Infraroten wird wegen der starken $1/\lambda^4$ -Abhängigkeit der Intensität von der Wellenlänge λ die Rayleigh-Streuung vernachlässigt [64].

Um die Strahldichte zu erhalten, muss man (3.3) integrieren. Dies führt auf

$$F(\nu, s_1) = F(\nu, s_0)\tau(\nu, s_0, s_1) + \int_{s_0}^{s_1} B(\nu, T(s))\kappa(\nu, s)\rho_{abs}(s)\tau(\nu, s, s_1)ds \quad (3.4)$$

In Gleichung (3.4) wird die starke Temperaturabhängigkeit der berechneten Strahldichten $F(\nu, s_1)$ deutlich. Gleichung (3.4) enthält die Transmission zwischen s_0 und s_1 [64]

$$\tau(\nu, s_0, s_1) = \exp\left(-\int_{s_0}^{s_1} \kappa(\nu, s)\rho_{abs}(s)ds\right) \quad (3.5)$$

Die Transmission ist Teil einer Reihe von Größen, in denen die starke Abhängigkeit von $F(\nu, s_1)$ von der Stoffmenge und somit dem Volumenmischungsverhältnis deutlich wird.

In dem Ausdruck für die Transmission sind die speziesspezifischen Volumenabsorptions- und Extinktionskoeffizienten $\kappa(\nu, s)$ der durchstrahlten Materie enthalten. Diese Koeffizienten lassen sich in Kenntnis der speziesspezifischen Linienintensität $A_{gn}(T_{kin}(s), \nu)$ eines Überganges n und der zugehörigen Profildfunktion $\Phi_{gn}(\nu, p(s), T_{kin}(s))$ berechnen und man gewinnt [64]

$$\kappa_{gn}(\nu, s) = A_{gn}(T_{kin}(s), \nu) \cdot \Phi_{gn}(\nu, p(s), T_{kin}(s)) \quad (3.6)$$

g Spezies
 n Übergang

In (3.6) erkennt man wieder die starke Druck – und Temperaturabhängigkeit.

In die Profildfunktionen gehen die Volumenmischungsverhältnisse der jeweiligen Spezies über die Lorentz- und Dopplerprofildfunktionen direkt ein, sodass man die Profildfunktion als

$$\Phi_{gn}(\nu, p(s), T_{kin}(s), VMR_g) \quad (3.7)$$

schreiben kann [64].

$F(\nu, s_1)$ enthält also starke Abhängigkeiten von den Grundparametern, die im Retrieval zur Verfügung stehen. Dies sind

- Temperatur
- Druck und
- Volumenmischungsverhältnisse der zu untersuchenden Spurengase und Störgase in Form von vertikalen Höhenprofilen.

3.3.1.1 Der diskrete Fall

Den vorangegangenen Betrachtungen fehlt noch die Umsetzung auf den diskreten Fall und die besonderen Bedingungen der Horizontsondierung.

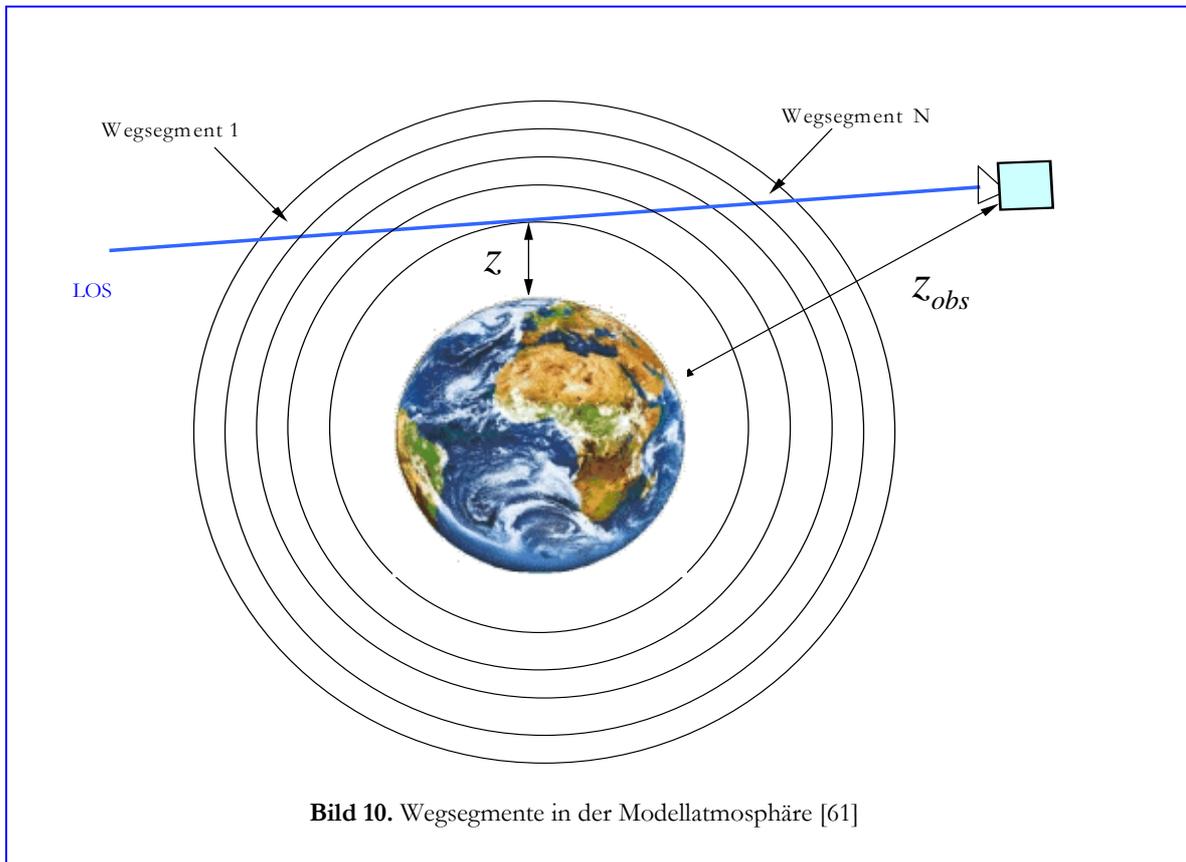
Hierzu wird die Atmosphäre lokal in konzentrische, kugelsymmetrische, homogene Schichten eingeteilt (siehe Bild 10). Es wird entsprechend dem Geoidmodell der Erde der lokale Erdradius benutzt.

Die von der Strahlung zurückgelegten Wegstrecken in den Schichten werden als Wegsegmente bezeichnet [61]. Damit ergibt sich für die Strahlung, die am Messgerät aus einer Tangentenhöhe z ankommt [64]

$$F(\nu) = \sum_{i=1}^N [(1 - \tau_i(\nu)) B(T_i, \nu) \prod_{k=i+1}^N \tau_k] \quad (3.8)$$

i Wegsegmentindex
 τ_i Transmission des Wegsegments i

Will man horizontale Gradienten mit in die Berechnung einbauen, muss man dies an dieser Stelle in der Konstruktion der Atmosphärensichten berücksichtigen. Die Schichten sind dann nicht mehr homogen. Das ändert nichts an den grundlegenden Prinzipien, die beschrieben worden sind, muss aber bspw. in der Transmission über die Säulengehalte berücksichtigt werden.



Für die Transmission ohne horizontale Gradienten erhält man nach kurzer Umformung [64]

$$\tau_i(\nu) = \exp\left(-\sum_{g=1}^G k_{ig}(\nu) u_{ig}\right) \quad (3.9)$$

$k_{ig}(\nu)$	Absorptionskoeffizient
u_{ig}	Säulengehalt
g	Spezies

3.3.2 Jakobi-Matrizen

In Abschnitt 3.2 wurde bereits angesprochen, dass die Inversionsrechnung als Eingangsparameter einerseits die berechneten Spektren $F(\mathbf{v}, s_1)$ (s_1 ist die Tangentenhöhe) und andererseits die Ableitungen der Spektren nach Retrievalgrößen (Jakobi-Matrizen, K-Matrizen)

$$\partial F_i / \partial x_j^g \quad (3.10)$$

benötigt. Hierbei steht F_i für die i -te berechnete Strahldichte und x_j^g stellt das j -te Element aus dem Retrievalvektor der Spezies g dar. Der Retrievalvektor ist ein Vektor, in dem die zu berechnenden Profilwerte stehen. Die Retrievalvektoren im vorliegenden Retrieval sind wie folgt aufgebaut ([...] bedeutet optional)

- Höhenaufgelöste Line-of-Sight;
- Höhenaufgelöste Profile (Temperatur, Spurengase);
- Höhenaufgelöste Gradientenprofile;
- [Höhenaufgelöster Offset;]
- Höhenaufgelöste Kontinuumsprofile;

Falls man nicht an allen oben genannten Komponenten einer zu retrievelnden Spezies interessiert ist, können Teile weggelassen werden. Bspw. ist die Line-of-Sight ein optionaler Bestandteil des Temperaturretrievals, aber nicht eines Spurengasretrievals. Das reduziert die Dimension des aktuell verwendeten Vektors erheblich.

Durch Beziehung (3.10) entstehen Ableitungsmatrizen (Jakobi-Matrizen, K-Matrizen) mit großen Dimensionen. Diese Matrizen haben, wie man sich leicht überlegt, in der Regel eine Rechteckform, wobei eine Seite des Rechtecks der Anzahl m der berechneten Spektralpunkte (=Anzahl der Messpunkte) entspricht und die andere Seite der Anzahl n der Elemente im Retrievalvektor die ggf. mit der Anzahl der zu retrievelnden Spezies und Hilfsgrößen multipliziert wird. So genannte Microwindows haben sich in diesem Zusammenhang als hilfreich für die Reduzierung der Anzahl der Spektralpunkte erwiesen.

3.3.2.1 Microwindows

Microwindows sind wenige, spezifisch ausgewählte Spektralbereiche, in denen man mit einer deutlichen Antwort des Messsignals der gerade untersuchten Spezies ohne starke Beeinflussung durch andere Spezies rechnet. Man benutzt daher pro Spezies einen Satz von Microwindows. Dieser Satz wird pro Tangentenhöhe unterschiedlich angewendet.

Dieser Zusammenhang lässt sich recht anschaulich als Matrix formulieren. In Bild 11 ist beispielhaft eine so genannte Besetzungsmatrix für Microwindows schematisch dargestellt. Die senkrechte Achse symbolisiert die Tangentenhöhen, in diesem Fall also 10 Tangentenhöhen. Die waagrechte Achse steht für die Microwindows, in diesem Fall also ebenso 10 Microwindows.

	Microwindows →									
Tangentenhöhen ↓	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1
	1	1	1	0	0	1	0	1	1	1
	0	0	1	1	1	0	1	1	1	0
	1	1	0	1	0	0	0	1	0	0
	0	0	0	1	1	1	0	1	0	0
	1	1	1	1	0	1	1	1	1	1
	0	1	1	1	1	0	0	1	0	1
	1	0	1	0	1	1	0	1	0	1
	1	0	1	0	1	0	0	1	0	1
	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0

Bild 11. Beispielhafte Besetzungsmatrix für Microwindows

Vereinbart man vorher von links nach rechts steigende und von unten nach oben fallende Indizes, so kann man die erste linke Spalte Microwindow 1 zuordnen, die zweite Spalte Microwindow 2 usw. Die oberste Zeile (Zeile 1) entspricht der untersten Tangentenhöhe, die unterste Zeile (Zeile 10) entspricht der obersten Tangentenhöhe.

Eine „1“ an der Indexposition (2,1) (Zeile, Spalte) bedeutet also, dass man bei einer Messung in der Tangentenhöhe 2 das Microwindow 1 verwendet. Dies gilt entsprechend für alle anderen Microwindows und Tangentenhöhen, bei denen ebenfalls eine „1“ steht. Diese Art Matrix wird als Besetzungsmatrix bezeichnet.

Eine Liste pro Spezies, in der eine Zuordnung der Spaltenindizes zu den jeweiligen Microwindows (Spektralbereichen) gemacht wird, ist noch erforderlich.

In Anhang A.II finden sich die im vorliegenden Retrieval verwendeten Besetzungsmatrizen. Anhang A.III. enthält die spektrale Zuordnung der jeweils verwendeten Microwindows pro Spezies. Die Bestimmung der Microwindows für die vorliegenden Untersuchungen wurde an der Universität Oxford mit einem eigenen Berechnungsverfahren durchgeführt [70] [11].

3.3.2.2 Aufbau der Jakobi-Matrizen

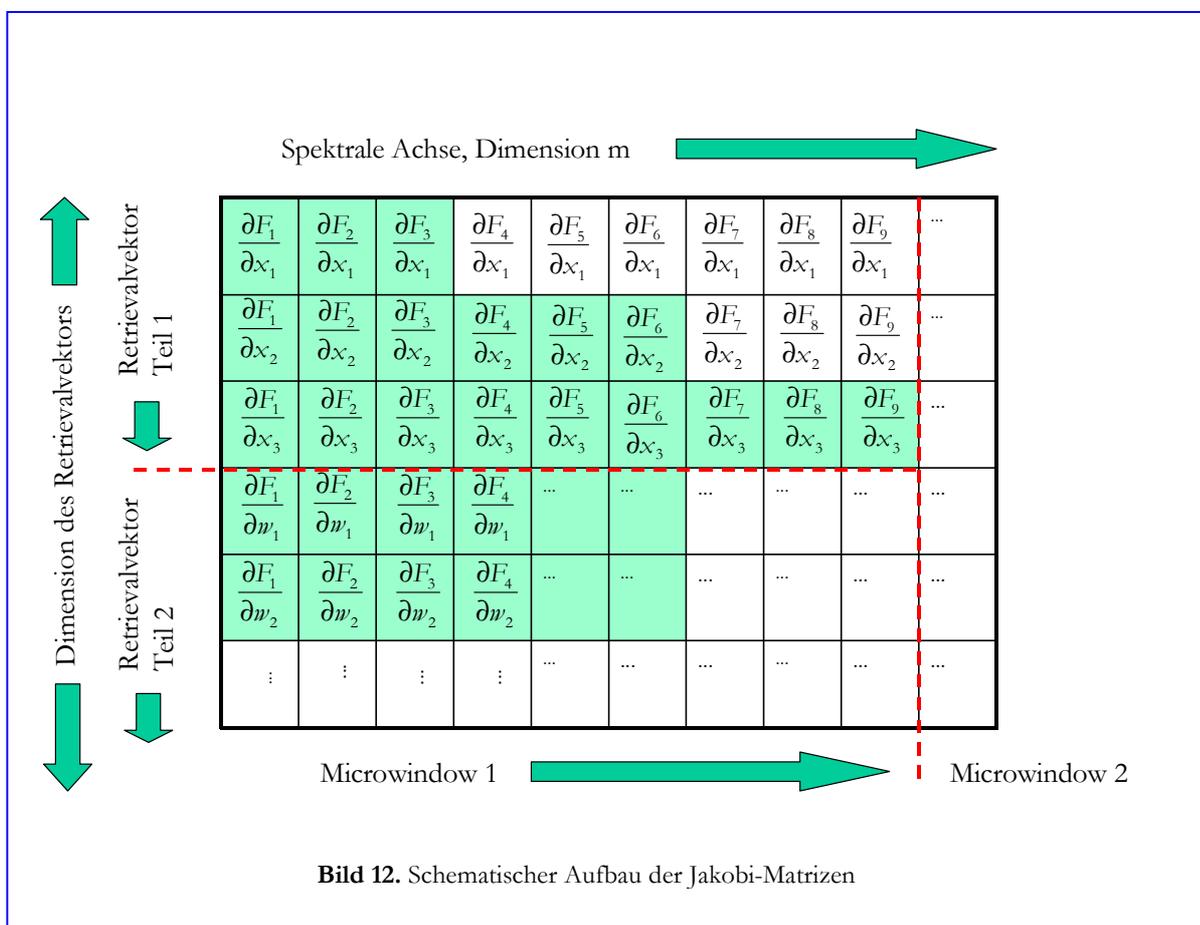
Die Auswahl der Microwindows hat einen direkten Einfluss auf die Belegung und Größe der Jakobi-Matrizen.

Da man nur ausgewählte Spektralbereiche pro Tangentenhöhe bei der Rechnung heranzieht, ist klar, dass man auch nur berechnete Strahldichten, die in diesen Spektralbereichen liegen bzgl. Änderungen von Teilen des Retrievalvektors berücksichtigen muss. Zusätzlich müssen nur Änderungen des Volumenmischungsverhältnisses in Betracht gezogen werden, falls diese Änderungen Auswirkungen auf die berechneten Strahldichten haben können.

Anhand von Bild 10 kann man sich anhand des Verlaufs eines Sichtstrahls noch einmal verdeutlichen, dass eine Änderung der Stoffmenge in einer Schicht, durch die der Sichtstrahl nicht mehr geht, keine Änderung der Strahldichte, die man am Satelliten misst, nach sich ziehen kann. Das

heißt insbesondere, dass Änderungen an Profilwerten in Tangentenhöhen unterhalb der aktuellen Messtangentenhöhe, keine Änderung der Strahldichte entlang des aktuellen Sichtstrahls nach sich ziehen. Mathematisch ausgedrückt: $\frac{\partial F_i}{\partial x_j^s} = 0$ für $z < z_{\text{aktuell}}$.

Mit diesen Überlegungen ergibt sich durch das Scanraster von MIPAS schematisch der in Bild 12, durch die farbige Hinterlegung dargestellte, treppenförmige Aufbau der Jakobi-Matrizen für ein fiktives Beispiel mit einem zweiteiligen Retrievalvektor, der aus den Komponenten x_i und w_i besteht. Alle farblosen Teile ergeben sich zu Null. Eine für das Verständnis wichtige Zusatzinformation ist, dass die, den Strahldichten F_i entsprechenden Messungen im Messvektor \vec{y} , fortlaufend nummeriert sind. Jeder „Treppenabsatz“ repräsentiert demzufolge einen Wechsel der Tangentenhöhe. Die Höhenstufen, auf denen die Profilwerte x_i und w_i definiert sind, laufen von oben (größte Höhe, kleinster Index) nach unten (kleinste Höhe, größter Index).



3.4 Inversionsrechnung

Die Inversionsrechnung ist die dritte Komponente des MIPAS-Level-2-Offline-Prozessors am DLR. Hier wird der Zusammenhang zwischen Messung und Simulation hergestellt.

3.4.1 Grundlagen

Das Ziel eines Profilretrievals ist, aus einer begrenzten Zahl von Messungen, die an bestimmten Tangentenhöhen erfolgen, ein Profil zu erhalten. Den Ausgangspunkt stellen kalibrierte Spektren dar, die durch eine Fouriertransformation und die nachfolgenden Kalibrierungsschritte aus den Interferogrammen des MIPAS-Instruments gewonnen wurden. Das gewünschte Ergebnis sind global verteilte, örtlich und zeitlich genau zugeordnete Profile von Spurengasen bzw. der Temperatur und des Drucks in der Atmosphäre. In Abschnitt 3.1. wurde die grundlegende Idee des Retrievals, das auf dem Vergleich von realen Messungen mit Simulationen fußt, als iteratives Rechenverfahren erläutert.

Einen Zusammenhang zwischen Profildaten und simulierten Messungen kann man durch Verwendung eines Strahlungstransportmodells, hier KOPRA, herstellen. Das Modell benötigt eine Vielzahl von Parametern, um eine Atmosphäre zu simulieren, die letztlich mit den Messungen vergleichbare Spektren erzeugt. Der wichtigste Parameter für das Vorwärtsmodell ist jeweils ein aktuelles Profil der zu untersuchenden Spezies, also der angenommene Zustand der Atmosphäre. Man kann die Simulation von Spektren folgendermaßen mathematisch formulieren [61][58]

$$\vec{y} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{\epsilon} \quad (3.11)$$

\vec{y} steht für die Messung (Spektren), \vec{F} repräsentiert das verwendete Vorwärtsmodell und \vec{x} stellt den Zustand der Atmosphäre (Temperatur, Spurengasprofil und zu retrievelnde Hilfsgrößen) dar. $\vec{\epsilon}$ symbolisiert die Fehler, die sowohl bei den Messungen als auch beim Vorwärtsmodell vorhanden sind.

Diese an sich simple Beziehung trägt bei genauerer Betrachtung schon eine Reihe von Problemen in sich

- \vec{F} ist im Allgemeinen nicht-linear.
- Kleine Änderungen in \vec{y} und/oder \vec{F} führen zu nicht tolerierbaren Änderungen in \vec{x} . Diese Änderungen sind durch den nicht vorhersehbaren Fehler $\vec{\epsilon}$ gegeben.

Will man den Zustand der Atmosphäre, also \vec{x} , als Ergebnis erhalten, so wäre es nötig, (3.11) zu invertieren. Dies ist jedoch im allgemeinen (nicht-linearen) Fall analytisch nicht möglich und deshalb wird ein anderer Weg gewählt. Findet man ein Profil \vec{x} , für das der Unterschied zwischen Messung \vec{y} und Simulation $\vec{F}(\vec{x})$ minimal wird, hat man eine Lösung des Problems gefunden. Dies lässt sich mit Hilfe der so genannten 2-Norm (Anhang B) mathematisch formulieren

$$\min(\|\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})\|_{\vec{y}}^2) \quad (3.12)$$

(„gewichtetes Least-Squares-Problem“)

Wegen $\vec{\epsilon}$ ist jedoch kein ideales Ergebnis zu erwarten. $S_{\vec{\epsilon}}^{-1}$ stellt im allgemeinen Falle eine pro Spektralwert unterschiedliche Gewichtungsmatrix dar, die das Rauschen der Messwerte berücksichtigt. Dadurch können die einzelnen Beiträge der Differenz in (3.12) entsprechend ihrer (physikalischen) Bedeutung gewichtet in die Rechnung eingebracht werden.

Fragestellungen wie in (3.12) formuliert, lassen sich aufgrund ihrer diskreten Natur (Messungen und Profilwerte liegen auf Gittern vor) als Gleichungssysteme verstehen. Man bedient sich zur Lösung dieser Gleichungssysteme der linearen Algebra und den Gesetzmäßigkeiten des Vektor- und Matrizenkalküls. Es wird mathematisch eine Transformation aus dem Vektorraum der Profile \vec{x} in den Raum der Messungen \vec{y} vorgenommen. Allgemein bezeichnen wir diese Transformation hier mit \vec{F} . Das verwendete Vorwärtsmodell stellt somit eine Transformation in diesem Sinne dar.

Die Zusammenhänge zwischen Profilen und Messung sind im vorliegenden Fall nicht linear, daher ist die Berechnung der inversen Transformation, \vec{F}^{-1} nicht trivial. Die Anzahl der Punkte des Messgitters ist i. d. R. vom Profilhitter verschieden, mithin sind die Dimensionen des Messvektors \vec{y} und des Profilvektors \vec{x} ungleich. Man spricht dann, je nachdem, ob man mehr Messungen als Profilwerte hat oder umgekehrt, von über- oder unterbestimmten Gleichungssystemen.

Dies und die Existenz von $\vec{\epsilon}$ führen dazu, dass es i. A. keine eindeutige Lösung für das Problem (3.12) gibt. Aus diesem Grund muss man Annahmen für Nebenbedingungen formulieren, die dafür sorgen, dass das Zielprofil \vec{x} , welches (3.12) minimieren soll, gewisse Vorgaben erfüllt. Solche Vorgaben können bspw. die Glattheit des Profils betreffen. Diese Beschränkung auf eine bestimmte Menge von möglichen Lösungen erreicht man durch Regularisierung (Formulierung einer Nebenbedingung), denn die Zielprofile sollen regulär, also bspw. glatt und physikalisch sinnvoll, sein. Man will also die mathematisch möglichen Lösungen von den physikalisch sinnvollen trennen. Mathematisch kann man das so ausdrücken

$$\min \left(\left\| \vec{y} - \vec{F}(\vec{x}) \right\|_{S_{\vec{\epsilon}}^{-1}}^2 + N(\vec{x}) \right) \quad (3.13)$$

- $N(\vec{x})$ steht hier allgemein für eine Nebenbedingung, die man als zusätzliche Forderung an das Lösungsprofil \vec{x} stellt.

Die geschilderten Zusammenhänge lassen sich zum besseren Verständnis anhand eines einfachen, gleichwohl sehr synthetischen, Beispiels veranschaulichen.

3.4.1.1. Beispiel zum Least-Squares-Problem

Wir betrachten eine fiktive, verrauschte Messung \vec{y} mit 10 Messpunkten und die Ergebnisse einer Vorwärtsmodellrechnung $\vec{F}(\vec{x})$ mit 10 simulierten Spektralpunkten. Bild 13 oben zeigt das synthetische Messspektrum (blaue Linie) und die simulierten Strahldichten (rote Linie). Für die notwendige Illustration der Zusammenhänge reicht das fiktive Rauschverhalten aus.

Es soll nun ein Profil \vec{x} ermittelt werden, für das $\vec{F}(\vec{x})$ möglichst nahe an \vec{y} liegt, oder anders ausgedrückt, für das die Summe der Quadrate der Beträge der grünen Balken (Differenz zwischen Messung und Simulation) minimal wird.

Bild 13 unten zeigt exemplarisch drei mögliche Profile einer fiktiven Spezies, die zusammen mit der restlichen Atmosphäre die Strahldichten, die in \vec{y} als Messungen vorliegen, verursacht haben sollen.

Diese angenommenen Profile können aus unterschiedlichsten Quellen, bspw. aus Ergebnissen anderer Berechnungen, aus klimatologischen Informationen oder aus Schätzungen, stammen. Profil 1 sei ein Profil von dem wir annehmen, dass es dem wahren Profil nahe ist. In diesem Profil könnten bspw. statistisch gewonnene Erfahrungswerte stecken. Die Kurven sind in fiktiven Volumenmischungsverhältnissen gegen die Höhe aufgetragen und sollen durch Werte auf je fünf Höhenstufen definiert sein. Wie deutlich zu sehen ist, unterscheiden sich die Kurven nicht grundsätzlich. Der Unterschied liegt eher im Detail.

Profil 2 und 3 haben einen „unruhigen“ Verlauf. Besonders Profil 3 zeigt Merkmale, die man aufgrund von Erfahrungswerten nicht von einem Profil eines Atmosphärenbestandteils erwarten würde. Zu diesen Merkmalen gehört der zackartige Verlauf. Da wir an glatten Profilen interessiert sind, liegt es somit nahe, eine Nebenbedingung $N(\vec{x})$ zu formulieren, die dafür sorgt, dass sich ein von uns retrievedes Zielprofil in etwa so verhält wie Profil 1.

Wir formulieren eine Bedingung, welche die Abweichung des Lösungsprofils von Profil 1 beschreibt und lösen (3.12) unter Berücksichtigung dieser Nebenbedingung. Solch eine Nebenbedingung könnte folgendermaßen formuliert werden

$$N(\vec{x}) = \|\vec{x} - \vec{x}_{\text{Profil1}}\|_{S_{\text{Profil1}}^{-1}}^2 \quad (3.14)$$

\vec{x} stellt das zu ermittelnde Profil dar.

Als Ausgangsprofil für die erste Rechnung wählt man, unter Zugrundelegung der obigen Betrachtungen, Profil 2. Wir beziehen eine allgemeine Gewichtungsmatrix S_{Profil1}^{-1} mit ein, um Informationen, die in dem Profil, von dem wir am meisten wissen (Profil 1), stecken, stärker oder schwächer zu gewichten, ähnlich wie im Fall von S_{ε}^{-1} . Zum Thema der optimalen Bestimmung der Gewichtungsterme folgen noch ausführliche Betrachtungen in Kapitel 4.

Im nächsten Schritt untersuchen wir, welche Rolle die einzelnen Terme von (3.13) spielen, wenn wir das Beispiel zugrunde legen. Für die S_{ε} - und die S_{Profil1} -Matrix wählen wir zunächst einfache Diagonalmatrizen

$$S_{\varepsilon} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & j \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$S_{\text{Profil1}} = \begin{pmatrix} k & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & t \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

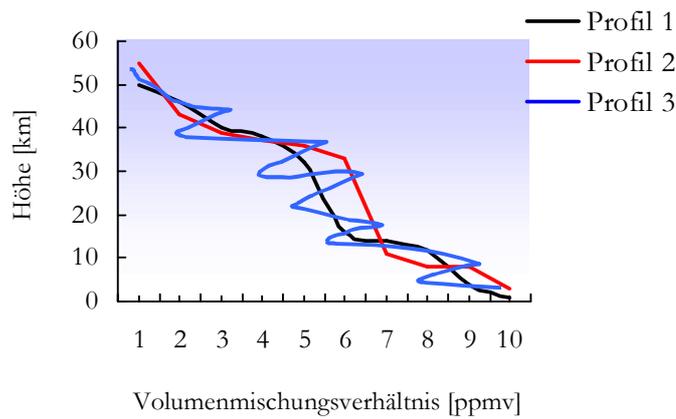
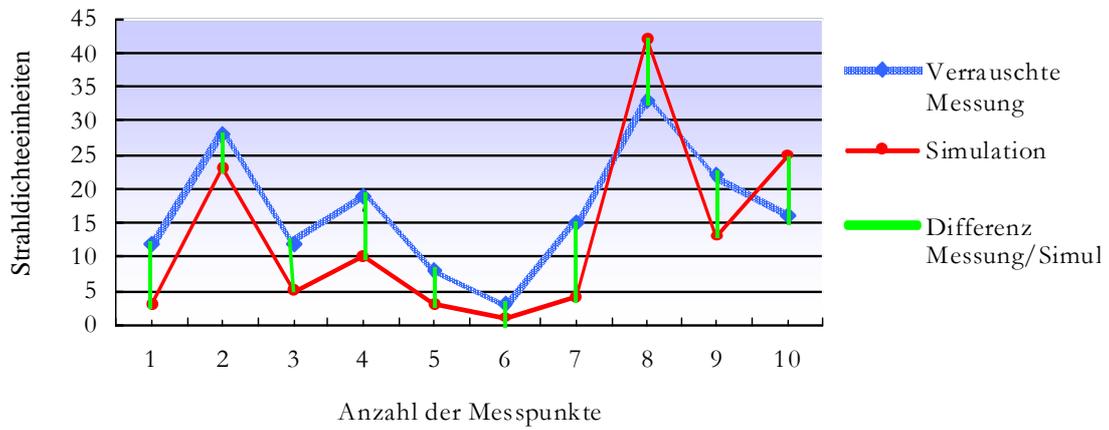


Bild 13. Oben: Fiktive Messung, Simulation und Abweichung
Unten: Höhenprofile einer fiktiven Spezies

Die jeweiligen Diagonalen werden mit Platzhaltern ungleich null besetzt. An Stelle der Platzhalter stehen in einer realen Rechnung z.B. statistische Informationen wie Profilvarianzen oder Rauschinformationen. Zu bestimmen ist in diesem speziellen Fall also das Minimum von

$$\left\| \vec{y} - \vec{F}(\vec{x}) \right\|_{S_e^{-1}}^2 + \left\| \vec{x} - \vec{x}_{\text{Profil}} \right\|_{S_{\text{Profil}}^{-1}}^2 \quad (3.17)$$

Der Ausdruck lässt sich in Matrizen-Form schreiben und wir erhalten

$$\begin{pmatrix} y_1 - F_1(\vec{x}) \\ y_2 - F_2(\vec{x}) \\ \vdots \\ y_{10} - F_{10}(\vec{x}) \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} a^{-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b^{-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & j^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 - F_1(\vec{x}) \\ y_2 - F_2(\vec{x}) \\ \vdots \\ y_{10} - F_{10}(\vec{x}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_1 - x_{\text{Pr\ddot{a}ofil1}}^1 \\ \vdots \\ x_5 - x_{\text{Pr\ddot{a}ofil1}}^5 \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} k^{-1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & o^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 - x_{\text{Pr\ddot{a}ofil1}}^1 \\ \vdots \\ x_5 - x_{\text{Pr\ddot{a}ofil1}}^5 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Die Matrizen sind in der einfachen Form gewählt, weil eine höhere Anzahl von Elementen keine wesentlichen neuen Erkenntnisse bringen, sondern in diesem Fall die Darstellbarkeit negativ beeinflussen würde.

Führt man die Multiplikationen durch, gewinnt man

$$\begin{aligned} & (y_1 - F_1(\vec{x}))^2 \cdot a^{-1} + (y_2 - F_2(\vec{x}))^2 \cdot b^{-1} + \dots + (y_{10} - F_{10}(\vec{x}))^2 \cdot j^{-1} + \\ & + (x_1 - x_{\text{Pr\ddot{a}ofil1}}^1)^2 \cdot k^{-1} + \dots + (x_5 - x_{\text{Pr\ddot{a}ofil1}}^5)^2 \cdot o^{-1} = M \end{aligned} \quad (3.19)$$

Der Skalar M ist das Ergebnis, das minimiert werden soll. Wenn M ein Minimum annimmt, hat man das optimale Profil zur Berechnung benutzt. Ist das Minimum nach einer Berechnung noch nicht erreicht worden, nimmt man ein verbessertes Profil, um die Berechnung erneut durchzuführen.

In der Regel wählt man das aktuelle Ergebnis der Berechnung und benutzt es wieder als Eingangsprofil. Dieser Vorgang der Wiederholung, mit Verwendung verbesserter Profile, ist mathematisch gesehen eine Iteration. Man kennt hierzu verschiedenste Verfahren, mittels deren Hilfe man sich iterativ an das optimale Profil heranarbeitet. Im Abschnitt 3.4.1.3 wird darauf noch näher eingegangen.

Aus (3.19) lassen sich nun beispielhaft einige, für das weitere Verständnis zentrale, Dinge ablesen: Neben der Differenz aus Messung und Simulation sowie der geforderten Nebenbedingung sind die Einträge in den Matrizen S_{ϵ}^{-1} und $S_{\text{Pr\ddot{a}ofil1}}^{-1}$ (allg. Gewichtungsooperatoren) entscheidend bei der Bestimmung des Minimums. Dies bezieht sich sowohl auf die Beträge der Werte, als auch auf die Belegung der Matrizen. Falls die Matrizen zusätzlich Nebendiagonalelemente enthalten, beeinflussen diese bei der Summenbildung den Wert des zu errechnenden Minimums durch eine andere Gewichtung der Elemente der beteiligten Vektoren.

Man kann sich leicht klarmachen, dass eine geschickte Wahl der Matrizenelemente, auch hinsichtlich des Vorzeichens, das Ergebnis maßgeblich beeinflussen wird. Dies ist der Effekt, den man bei der optimalen Ausgestaltung der so genannten Gewichtungsooperatoren (hier Matrizen) ausnutzt.

Zur Ausgestaltung dieser Gewichtungsterme folgt, wie bereits erwähnt, ein eigener Abschnitt, nicht zuletzt, weil dies einer der zentralen Inhalte der vorliegenden Arbeit ist.

In der Wahl der Einträge der Matrizen ist man nicht frei, denn eine grundsätzliche Randbedingung, die immer erfüllt sein muss, ist der physikalische Sinngehalt der Ergebnisse und man ist daran interessiert ein Minimum des Gesamtausdruckes zu bestimmen. Des Weiteren werden wir noch sehen, dass es aufwändig ist, das in (3.13) beschriebene Problem zu lösen. Dadurch entstehen zusätzliche mathematische Notwendigkeiten, die an die Operatoren gestellt werden. Diese Notwendigkeiten werden ebenfalls noch in einem späteren Abschnitt dargelegt.

3.4.1.2 Die Bestandteile einer Regularisierung in der vorliegenden Arbeit

Aus dem Beispiel in 3.4.1.1 zieht man die Erkenntnis, welche Bedeutung die einzelnen Terme, die sich aus (3.13) ergeben, erhalten. Ein wichtiger Teil der vorliegenden Arbeit beschäftigt sich mit der optimalen Auslegung einer Regularisierung $R(\vec{x})$, die sich wiederum wesentlich aus der Formulierung der Nebenbedingung ergibt. Die Regularisierung ermöglicht es, physikalisch sinnvolle Lösungen zu ermitteln und ist damit ein immens wichtiger Bestandteil des Retrievals.

Wir fassen die zentralen Punkte zusammen: Um eine Regularisierung $R(\vec{x})$ optimal auslegen zu können, benötigt man im Wesentlichen zwei Teile

- Die Nebenbedingung $N(\vec{x})$ und
- Gewichtungsoperatoren

Im weiteren Verlauf werden Verfahren vorgestellt, die es ermöglichen, Nebenbedingungen und Gewichtungsoperatoren objektiv und optimal zu bestimmen.

Die Wahl der Nebenbedingung ist relativ frei und nur vom Problem selbst abhängig. Deswegen haben sich in der Literatur verschiedene Ansätze entwickelt, um geeignete Nebenbedingungen zu formulieren. Das hier verwendete Retrieval kann u. a. auf zwei, noch im Detail in eigenen Abschnitten (3.4.2) beschriebene, Ansätze zur Formulierung von Nebenbedingungen zurückgreifen

- Optimal Estimation unter Hinzunahme von *a priori*-Wissen und
- Tikhonov

Die Ausgestaltung der Gewichtungsoperatoren ist für jeden der genannten Ansätze ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit und wird für die verschiedenen Ansätze ebenfalls in eigenen Abschnitten (3.4.2 und 4.3 ff.) erläutert werden.

Zusätzlich kann noch das sog. Levenberg-Marquardt-Verfahren (3.4.2.3) realisiert werden.

Um zu erkennen, an welcher Stelle und wie die Regularisierung in der eigentlichen Rechnung wirkt, ist es zwingend notwendig, sich zunächst mit der Mathematik der Inversionsrechnung, insbesondere der Iterationsformel, auseinander zu setzen.

Im Anschluss daran werden die einzelnen Teile der Regularisierung und die Methoden zu ihrer Gewinnung im Detail präsentiert.

3.4.1.3 Die iterative Bestimmung des Lösungsprofils

Wir haben bereits festgestellt, dass (3.13) analytisch nicht lösbar ist. Das liegt daran, dass \vec{y} mit Rauschen behaftet ist, dass ein überbestimmtes Problem vorliegt und dass \vec{F} sich i. A. nicht trivial invertieren lässt. Wir erinnern uns, dass \vec{F} die Repräsentation eines komplexen Vorwärtsmodells ist, das einen nicht-linearen Zusammenhang zwischen Profilen und Strahldichten herstellt. Der zentrale Punkt an dieser Stelle ist somit, wie man das Profil oder allgemeiner das zu retrievelnde Profil, welches die endgültige Lösung repräsentiert, erhält.

\vec{x} ist im weiteren Verlauf ein allgemeiner speziesspezifischer Retrievalvektor, d. h. in \vec{x} seien alle Größen enthalten, die man als Ziele in einem Retrieval einer bestimmtem Spezies erhalten möchte. Dies umfasst Profilinformatoren eines zu retrievelnden Atmosphärenbestandteiles sowie Anteile, die Informationen zu horizontalen Gradienten, Kontinuum, Line-of-Sight oder Offset beinhalten. Da \vec{x} diese Informationen in der Regel höhenaufgelöst enthält und bei jeder Iteration jeweils der gesamte Retrievalvektor upgedatet wird, spricht man auch von einem Global Fit [44]. Damit ist die globale Anpassung aller untersuchten Größen auf allen Höhen gleichzeitig gemeint. (3.13) und (3.17) entnimmt man eine implizite Abhängigkeit von \vec{x} .

Im nicht-linearen Fall, also wenn der Zusammenhang zwischen Profil und Messung sich nicht über eine lineare Transformation herstellen lässt, ist das Auffinden einer Lösung, die den Nebenbedingungen genügt, aus den bereits genannten Gründen i. A. nicht analytisch möglich. Daher muss das Lösungsprofil mittels geeigneter Iterationsverfahren ermittelt werden.

Im vorliegenden Retrieval wird hierzu die Newton-Iteration verwendet. Alternativ kann auch das Levenberg-Marquardt-Iterationsschema benutzt werden, darauf wird an dieser Stelle noch nicht eingegangen. Das Thema Levenberg-Marquardt wird in Abschnitt 3.4.2.3 behandelt.

Im Folgenden wird nun kurz die Mathematik beleuchtet, die über die Newton-Iteration letztlich zu einem Ausdruck führt, anhand dessen sich die Bedeutung der Regularisierung (also Nebenbedingung und Gewichtung) demonstrieren lässt.

Diese Darstellung geht weit über das obige Beispiel aus Bild 13 hinaus, weil hier eine allgemeine geschlossene Lösung zur Ermittlung des Zielprofils gegeben wird. Dabei wird jedoch von denselben Prinzipien ausgegangen. Sei

$$M(\vec{x}) = (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}))^T S_\epsilon^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})) + N(\vec{x}) \quad (3.20)$$

der Ausdruck, wie in (3.13) beschrieben, der im Least-Squares-Sinne minimiert werden soll. Die Nebenbedingung wird verallgemeinert durch $N(\vec{x})$ beschrieben.

S_ϵ^{-1} ist die Inverse der Kovarianzmatrix der spektralen Größe \vec{y} , also ein Maß für das Rauschen dieser Parameter. Die Einträge auf der Diagonalen von S_ϵ errechnen sich als die Quadrate der NESR-Werte, die für jeden Kanal des Instruments bereichsweise definiert sind. Es ist allgemein möglich, S_ϵ auch als symmetrische Matrix mit Nebendiagonalelementen zu beschreiben (im Falle der Apodisierung von Spektren [58]). Da S_ϵ eine Kovarianzmatrix ist, erhalten die Nebendiago-

nalelemente dadurch die Bedeutung von Korrelationen. Die Diagonalelemente sind Varianzen bzw. Gewichtungsfaktoren im Falle der Inversen. Damit wird gewährleistet, dass die Unsicherheiten in der Messung durch Rauschen bei der Berechnung des Minimums von (3.13) entsprechend gewichtet werden.

Um das Extremum von (3.20) zu finden, bildet man die Ableitung von $M(\vec{x})$ nach \vec{x} , $\vec{M}_x(\vec{x})$, und setzt

$$\vec{M}_x(\vec{x}) = 0. \quad (3.21)$$

Man erhält dann [61]

$$\begin{aligned} \nabla_x((\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}))^T S_\varepsilon^{-1}(\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})) + N(\vec{x})) &= \\ &= -2(\nabla_x \vec{F}(\vec{x}))^T S_\varepsilon^{-1}(\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})) + \nabla N(\vec{x}) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \\ K^T S_\varepsilon^{-1}(\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})) - \frac{1}{2} \nabla N(\vec{x}) &\stackrel{!}{=} 0 = \vec{M}_x(\vec{x}) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Es liegt ein implizites, nicht-lineares Problem vor, deswegen bietet sich die Verwendung der Newton-Iterationsmethode an. Sei k die aktuelle Iteration, dann ist [55]

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k - [\nabla(\vec{M}_x(\vec{x}_k))]^{-1} \vec{M}_x(\vec{x}_k) \quad (3.23)$$

Dafür ist die Berechnung der zweiten Ableitung von M nötig. Das führt auf

$$\begin{aligned} \nabla \vec{M}_x(\vec{x}) &= \nabla K^T S_\varepsilon^{-1}(\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})) - K^T S_\varepsilon^{-1} \nabla((\vec{y} - \vec{F}(\vec{x})) + \nabla N(\vec{x})) \approx \\ &\approx -K^T S_\varepsilon^{-1}(-K) + \nabla(\nabla N(\vec{x})) = K^T S_\varepsilon^{-1} K + \nabla(\nabla N(\vec{x})) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Der erste Term wurde vernachlässigt. Setzt man (3.22) und (3.24) in (3.23) ein, erhält man

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \left(K_k^T S_\varepsilon^{-1} K_k + \nabla(\nabla N(\vec{x}_k)) \right)^{-1} \left(K_k^T S_\varepsilon^{-1}(\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_k)) - \frac{1}{2} \nabla N(\vec{x}_k) \right) \quad (3.25)$$

sowie

$$S_j^{-1} = \left(K_k^T S_\varepsilon^{-1} K_k + \nabla(\nabla N(\vec{x}_k)) \right) \quad (3.26)$$

Gleichung (3.25) ist die im Retrievalkern (Abschnitt 3.2) der Inversionsrechnung verwendete Iterationsformel in einer allgemeinen Form. Gleichung (3.26) bezeichnen wir als Informationsmatrix. Die Ausgestaltung der Regularisierungsterme $\nabla(\nabla N(\vec{x}_k))$ bzw. $\frac{1}{2} \nabla N(\vec{x}_k)$ variieren mit

der Wahl der verwendeten Nebenbedingung (siehe Abschnitt 3.4.2). Wird auf $N(\vec{x}_k)$ verzichtet erhält man einen Ausdruck für das Least-Squares-Verfahren ohne Nebenbedingung.

Man erkennt insbesondere die für das Retrieval zentralen Größen

- Der verbesserte Retrievalvektor, der für die nächste Iteration verwendet wird: \vec{x}_{k+1} ;
- Der Eingangsvektor für das Vorwärtsmodell: \vec{x}_k ;
- Die vom Vorwärtsmodell bereitgestellten Jakobi-Matrizen K_k ;
- Der Nebenbedingungsterm: $N(\vec{x}_k)$;
- Die Kovarianzmatrix der Messung, ggf. inklusive systematischer Fehler: S_ϵ^{-1} ;
- Die vom Vorwärtsmodell simulierten Spektren: $\vec{F}(\vec{x}_k)$;
- Die Messungen: \vec{y} ;

Die zentrale Bedeutung der Nebenbedingung $N(\vec{x}_k)$ bzw. der sich aus ihnen ableitenden Terme (=Regularisierung) für das Auffinden eines optimalen Ergebnisses wird aus (3.25) bereits sehr deutlich.

Im Anschluss wird durch ein Beispiel eine vertiefende Darstellung gegeben, wie die einzelnen Terme in (3.25) beim Auffinden des optimalen Profils zusammenspielen. Dabei liegt das Hauptaugenmerk darauf, zu vermitteln, wie aus Informationen aus völlig unterschiedlichen mathematischen und physikalischen Räumen, letztlich ein verbessertes Profil pro Iteration entsteht.

3.4.1.4 Beispiel zur iterativen Lösung

Zur Illustration des Beispiels bedienen wir uns Bild 14. Für die Regularisierung nehmen wir, wie in Beispiel 3.4.1.1, einen Ausdruck der Form

$$N(\vec{x}) = \|\vec{x} - \vec{x}_{\text{Profil}}\|_{S_{\text{Profil}}^{-1}}^2 \quad (3.27)$$

an. Dies liegt nahe, weil man an diesem Ausdruck sehr schön einige Eigenschaften demonstrieren kann, die vielen Regularisierungen gemeinsam ist. Wie man mathematisch im Einzelnen zum Aussehen des Regularisierungstermes im vorliegenden Beispiel gelangt, ist an dieser Stelle nebensächlich und kann bspw. bei T. Steck [61] oder C. D. Rodgers [55] nachvollzogen werden. Im Anhang in A.I findet sich eine detaillierte Rechnung, in der die entsprechenden Terme für ein Verfahren berechnet werden, das in 4.1.5 beschrieben wird (MEM2).

Wir betrachten erneut ein fiktives Beispiel, bei dem zur Messung nur ein Microwindow mit 10 Spektralpunkten in allen Höhen benutzt werden soll. Eine Microwindow-Besetzungsmatrix (siehe 3.3.2.1) würde in unserem Beispiel aus einer Spalte mit zehn Zeilen bestehen, wobei in jeder Zeile eine eins stünde. Diese Wahl reduziert die Zahl der Messpunkte und trägt somit, wie wir im Anschluss sehen werden, zu überschaubaren Dimensionen der Matrizen bei.

Der erste zentrale Punkt der Inversion ist die Anpassung der hinsichtlich der Dimensionen grundsätzlich verschiedenen Parameter. Spurengasprofile liegen i. d. R. auf einem Höhengitter vor. Im Beispiel von Bild 14 sind diese Profile von unten (unterster Profilwert) nach oben (oberster Profilwert) aufgetragen. Wie wir in Kapitel 2 erfahren haben, misst MIPAS typischerweise auf 17 Tangentenhöhen. Es ist sinnvoll, die zu retrievelnden Profilwerte auf einem Gitter zu berechnen, das innerhalb dieser Tangentenhöhen liegt. Wir wählen in unserem Beispiel aus Darstellbarkeitsgründen 10 Tangentenhöhen. Der Spurengasprofilvektor hat demnach die Dimension $n = 10$ oder, um allgemein in Begriffen des Matrizenkalküls zu bleiben, $n \times 1$ (einspaltige Matrix).

In Kapitel 2 haben wir gesehen, dass MIPAS enorm viele Spektralpunkte pro Sweep liefert (~ 60.000). Aus dieser großen Zahl von Messungen greift man durch die Auswahl der Microwindows den Teil heraus, den man für die Berechnung benötigt. Diese wiederum sind durch unterschiedliche Anzahlen von Spektralpunkten charakterisiert. Typische Microwindows bei MIPAS haben je zwischen ca. zehn und 200 Spektralpunkten. Eine MIPAS-Messung besteht aus der Gesamtheit der Sweeps eines Scans. In unserem Fall bestehen die benötigten Scan-Daten also aus Abtastungen an zehn Spektralpunkten auf je zehn Höhen, somit ergibt sich als Gesamtanzahl gemessener Strahldichten $m = 100$. Die m Strahldichtewerte aller Messungen auf allen Tangentenhöhen werden im Messvektor \vec{y} sortiert abgelegt. Man kann sich also leicht überlegen, dass enorm große Vektoren entstehen können.

Die Anzahl und spektrale Zuordnung der simulierten Messpunkte in $\vec{F}(\vec{x}_k)$ muss der Anzahl und Zuordnung der Werte in \vec{y} entsprechen. Wie man in Bild 14 und (3.25) sieht, erhält man somit u. U. Terme mit enorm unterschiedlichen Dimensionen. Diese Dimensionen müssen aufeinander abgestimmt werden. Das Ziel ist, wie wir wissen, ein Profil. Deshalb müssen alle Terme auf die Dimension n des Retrievalvektors bezogen werden.

Wir gehen die Ausdrücke der ersten Symbolzeile in Bild 14 von links nach rechts durch, um einen quantitativen Eindruck der Dimensionsverhältnisse zu erhalten. Zu sehen ist jeweils eine schematische Repräsentation der einzelnen Größen, die einen Hinweis auf deren spezielle Eigenschaften liefert.

Besteht der Retrievalvektor, wie in unserem Beispiel, nur aus einem Spurengasprofil (ohne Hilfsgrößen) in aufsteigender Höhe von oben nach unten, so ist die Dimension n gleich der Anzahl der Gitterpunkte des Höhengitters, auf dem die Profilwerte errechnet werden sollen. Der Retrievalvektor hat also die Dimension $n \times 1$ (Vektor oder einspaltige Matrix).

Die K-Matrizen (Jakobi-Matrizen) stellen die Mittler zwischen dem Raum, in dem die Profile definiert sind (dem Profilraum), und dem Raum der Messungen dar. Die Dimension der K-Matrizen ist demnach $n \times m$, weil man m Messungen (lange Seite der K-Matrix) hat. Die schmale Seite der K-Matrizen entspricht in unserem Beispiel den n Höhenstufen des Profilvektors, also kleine Höhen oben und große Höhen unten. In Bild 14 ist die Treppenform der K-Matrizen, die in 3.3.2.2 erläutert wurde, angedeutet.

Die S_e^{-1} -Matrix ist die Inverse der Kovarianzmatrix der Messung. Kovarianzmatrizen sind ein Werkzeug, um die Varianzen vektorieller Größen und Abhängigkeiten (Korrelationen) verschie-

dener Vektorelemente untereinander zu erfassen. Inverse Kovarianzmatrizen dienen als Gewichtsoperatoren. Kovarianzmatrizen und somit auch ihre Inversen sind positiv definit und symmetrisch (Anhang B.I.3). Die hier verwendete Kovarianzmatrix enthält Rauschwerte, also die Varianzen der Messung. Da jeder Messpunkt mit Rauschen behaftet ist, ergibt sich eine $m \times m$ Matrix. Aus dieser Matrix wird die Inverse mit derselben Dimension bestimmt.

Die folgende Matrix S_{Profil}^{-1} ist ein Gewichtsoperator, der sich aus dem Vergleichsprofil ableitet, das wir bei der Formulierung der Nebenbedingung zugrunde gelegt haben. Die Dimension ist $n \times n$. Diese Matrix kann bspw. ebenfalls die Inverse einer Kovarianzmatrix sein, dann würde sie in unserem Fall eine Gewichtung des Vorwissens darstellen, weil wir das Vergleichsprofil als Vorwissen verwendet haben. Dies sieht man an der zweiten Stelle, wo die Matrix verwendet wird noch deutlicher, weil sie dort direkt auf den Profilvektor angewendet wird. Wie erwähnt folgt noch ein eigener Abschnitt (siehe 4.1), der die Konstruktion dieser zentralen Terme als Bestandteil einer optimalen Regularisierung zum Thema hat. Die Gewichtungsterme sind i. d. R. symmetrisch und positiv definit, insbesondere immer dann, wenn sie aus einer Kovarianzmatrix hervorgehen.

Der Messvektor \vec{y} und der Vektor der simulierten Messungen $\vec{F}(\vec{x}_k)$ haben jeweils die Dimension $m \times 1$.

Die beiden letzten Ausdrücke sind Profile und haben daher die Dimension $n \times 1$. \vec{x}_k ist das jeweils aktuelle Profil und \vec{x}_{Profil} (das Vergleichsprofil s. o.) stellt bspw. ein so genanntes *a priori*-Profil dar. Darin können Informationen über das zu retrievelnde Profil stecken, von denen man annimmt, dass sie die Realität korrekt beschreiben. Man nimmt also Vorwissen (*a priori*-Wissen), um dieses in die Nebenbedingung einfließen zu lassen. Dieses *a priori*-Profil bleibt während der gesamten Rechnung unverändert.

Geht man nun die einzelnen Terme in Bild 14 durch, erkennt man, dass letztlich ein Profil der Dimension n entsteht.

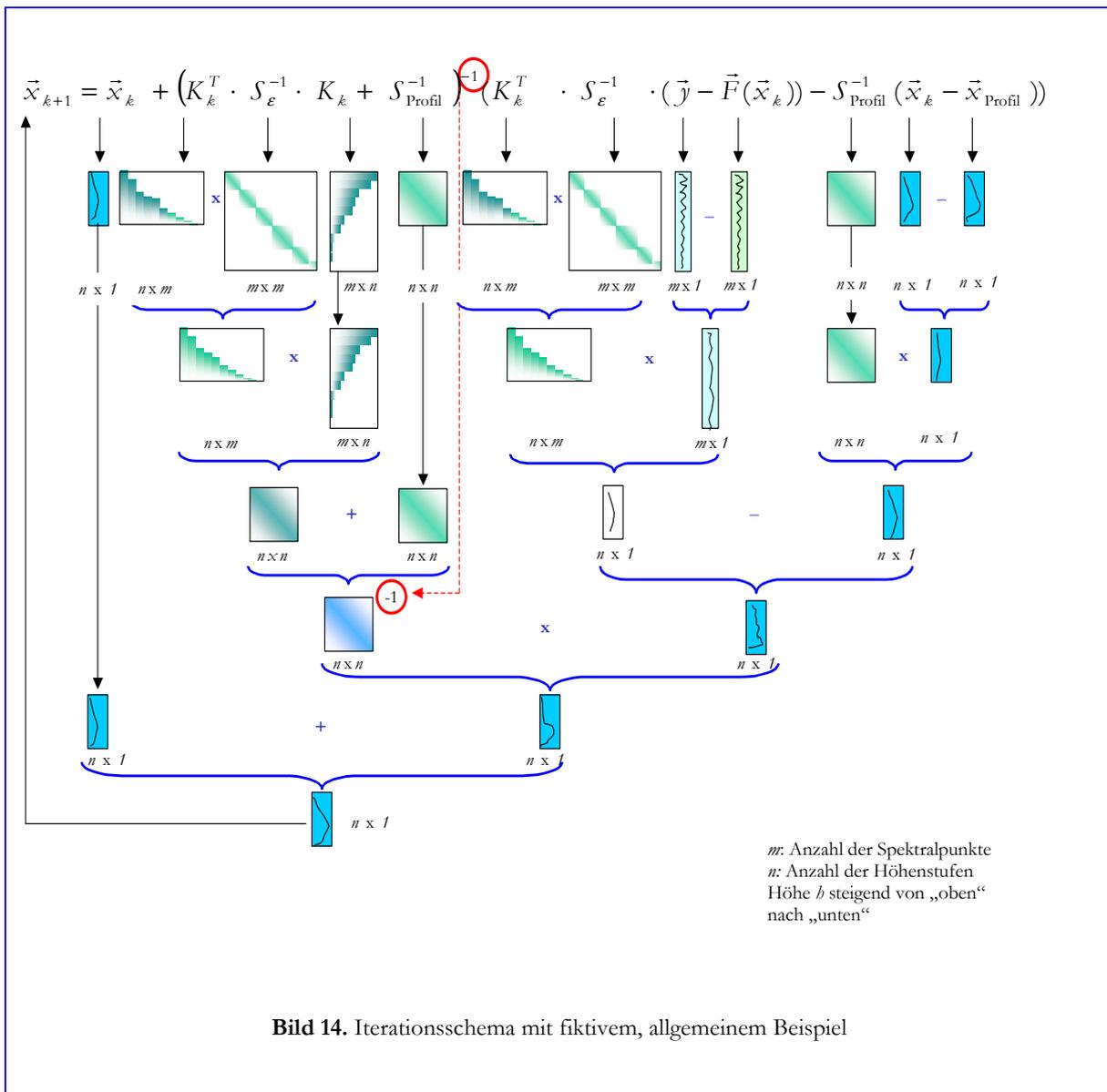
Die erste wichtige Aufgabe der Inversion, die Transformation des Messraumes auf den Profilraum, ist damit erfüllt.

Die zweite und ebenso wichtige Aufgabe der Inversion, in Gestalt von (3.25), ist die iterative Optimierung eines Profils unter Beachtung der Regularisierungsvorschriften. Man startet mit einem Profil \vec{x}_0 ($k = 0$), dem so genannten Init-Guess. Dieses Profil wird iterativ verbessert, um das Profil im Sinne von (3.20) zu optimieren. Dies geschieht in wesentlichen in drei Schritten. Wir orientieren uns wieder an Bild 14. Der zentrale Punkt ist die Differenz zwischen Messung \vec{y} und Simulation $\vec{F}(\vec{x}_k)$. Diese Differenz von Strahldichten muss in den Profilraum „übersetzt“ werden. Das geschieht durch die Multiplikation mit $K_k^T S_{\epsilon}^{-1}$. Dies ist die rauschgewichtete Matrix der Strahldichteänderungen pro Profilwertänderungen. Das Ergebnis der Multiplikation ist ein Profil, welches der Strahldichtedifferenz zwischen \vec{y} und $\vec{F}(\vec{x}_k)$ entspricht. Gleichzeitig muss jedoch auch die Nebenbedingung erfüllt werden.

Diese Differenz muss auf geeignete Art und Weise gewichtet werden, weil man bspw. die zusätzlichen Informationen durch das Vorwissen nur in bestimmten Höhenbereichen des Retrievals in die Rechnung einbringen möchte. Es ergibt sich somit ein durch Vorwissen gewichtetes Differenzprofil. Der Unterschied aus dem so ermittelten Profil und dem aus dem Messraum transformierten Profil stellt damit im Wesentlichen die Korrektur dar, die man an das Ausgangsprofil anbringen will.

Das Ergebnis muss nun noch unter dem Gesichtspunkt des Gesamtretrievalfehlers gesehen werden, der durch die Matrix (3.26) beschrieben wird.

Durch die Multiplikation der eben beschriebenen Profildifferenzen mit der Inversen der (3.26) entsprechenden Matrix in unserem Beispiel (Bild 14) wird der Berechnungsvorgang abgeschlossen. Man erhält das Korrekturprofil, das auf das Eingangsprofil aufsummiert wird. Diese Kette stellt einen geschlossenen Lösungsweg zur Auffindung eines optimalen Profils dar.



Man erkennt, dass die beschriebene Kette von einer Vielzahl von Parametern bestimmt wird, ohne deren optimale Ausgestaltung das Ziel nicht erreicht werden kann. Insbesondere die Regularisierung stellt hier ein breites Anwendungsfeld für Optimierungen bereit. In den folgenden Teilen der Arbeit wird darauf im Besonderen eingegangen.

3.4.2 Verwendete Verfahren

Wie bereits mehrmals erwähnt, existieren verschiedene Möglichkeiten, um das Inversionsproblem (3.13) bzw. 3(20) zu lösen. Es werden drei etablierte Verfahren unterschieden

- Optimal Estimation
- Tikhonov
- Levenberg-Marquardt

3.4.2.1 Das Optimal Estimation-Verfahren

Bei diesem Verfahren ist das Ergebnis des Retrievals das Ergebnis der „besten Schätzung“. Dies wird erreicht, indem man als Nebenbedingung so genanntes *a priori*-Wissen mit in das Retrieval aufnimmt. Dieses *a priori*-Wissen wird mit einer Gewichtung versehen. Die Gewichtung erfolgt über die Inverse der Kovarianzmatrix des *a priori*-Profils. Das kann im Extremfall dazu führen, dass das *a priori*-Wissen über- oder unterbewertet wird und somit das tatsächliche Ergebnis zu stark bzw. zu schwach beeinflusst. Werden die erforderlichen Parameter jedoch geschickt gewählt, ist die Hinzunahme von *a priori*-Wissen sowie das Einbringen von statistischer Information in Form der Kovarianzmatrizen als Randbedingung ein mächtiges Werkzeug beim Auffinden der „besten Schätzung“. Man verwendet folgenden Ausdruck [61]

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \left(K_k^T S_\epsilon^{-1} K_k + S_a^{-1} \right)^{-1} \left(K_k^T S_\epsilon^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_k)) - S_a^{-1} (x_k - x_a) \right) \quad (3.28)$$

S_a ist die Kovarianzmatrix der *a priori*-Profile \vec{x}_a . Sie enthält statistische Annahmen über die Schwankungen der Werte in den *a priori*-Profilen. Die Angaben in S_a und in \vec{x}_a sollten Quellen entstammen, die unabhängig vom Retrieval sind.

Man erkennt in Gleichung (3.28) die Äquivalenz der *a priori*-Terme zu den Regularisierungstermen in Iterationsformel (3.25). Das Optimal Estimation-Verfahren, wie in [61] beschrieben, ist durch die Differenzbildung $(x_k - x_a)$ weitgehend Bias-frei, d. h. (bekannte) systematische Effekte, die sowohl in den Eingangsprofilen wie auch den *a priori*-Profilen vorhanden sein können, gehen bei der Gewichtung durch die S_a^{-1} -Matrix nicht oder nur sehr schwach in die Rechnung ein.

Das ist beispielsweise dann hilfreich, wenn man die Vermutung hat, dass das wahre Zielprofil und das Init-Guess-Profil (Startprofil der Vorwärtsrechnung) intensitätsverschoben sind. Der Effekt ist, dass die Rechnung nur die Form des zu iterierenden Profils verbessert, ohne Beeinflussung durch den Bias.

Die Ausgestaltung der Matrix S_a bleibt an dieser Stelle noch weitgehend offen, denn sie wird durch das Optimal Estimation-Verfahren nicht fest vorgegeben. In der Regel benutzt man für die Elemente der S_a -Matrix einen Ansatz, der in festzulegender Art vom Abstand zweier Profilwerte $f(z_i - z_j)$ abhängt [55][61][41]

$$[S_a]_{ij} = [S_a]_{ii} \exp(f(z_i - z_j)) \quad (3.29)$$

, wobei die Diagonalelemente $[S_a]_{ii}$ bspw. die Varianzen der Profilwerte sind. Der Optimal Estimation-Ansatz ist von einer physikalischen Herangehensweise geprägt und erfordert in der Regel die Justierung einer Vielzahl von Parametern, speziell bei der optimalen Formulierung der S_a -Matrix. Zudem ist die Wirkung dieser Parameter auf die Gewichtungsmatrizen (inverse Kovarianzmatrizen) nicht direkt ersichtlich.

3.4.2.2 Das Tikhonov-Verfahren

Das Tikhonov-Verfahren setzt auf eine starke Glättung der zu retrievelnden Profile. Hierzu wird als Nebenbedingung [67]

$$\alpha \|L\bar{x}\|^2 = \alpha \bar{x}^T L^T L \bar{x} \quad (3.30)$$

im Sinne von (3.13) gefordert. α stellt einen skalaren Regularisierungsparameter dar, dessen Betrag angibt, wie stark die Nebenbedingung gewichtet werden soll. Je größer α gewählt wird, desto stärker wirkt sich die Nebenbedingung in Form einer Glättung aus. Von Hansen stammt ein Verfahren zur Bestimmung von α (L-Kurven-Verfahren)[31].

Diese Nebenbedingung wird im Sinne von (3.25) durch folgenden mathematischen Ausdruck in der Iterationsformel umgesetzt

$$\bar{x}_{k+1} = \bar{x}_k + (K_k^T S_\varepsilon^{-1} K_k + \alpha L^T L)^{-1} (K_k^T S_\varepsilon^{-1} (\bar{y} - \bar{F}(\bar{x}_k)) - \alpha L^T L \bar{x}_k) \quad (3.31)$$

$L^T L$ ist ein Regularisierungsoperator, ähnlich wie die Inverse der Kovarianzmatrix in (3.28). Der Operator L kann verschiedene Formen haben

$$L_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ (entspricht der Einheitsmatrix)} \quad (3.32)$$

$$L_1 = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times n} \quad (3.33)$$

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-2) \times n} \quad (3.34)$$

Je mehr Nebendiagonalelemente man hinzunimmt, desto mehr zusätzliche Elemente des Retrievalvektors werden in die Rechnung miteinbezogen. Je höherwertiger die L -Operatoren werden, desto stärker fällt die Glättung aus.

3.4.2.2.1 Beispiel zur Tikhonov-Regularisierung

Von besonderem Interesse ist der $L_1^T L_1$ -Operator, weil er als stark glättender Regularisierungsterm oft verwendet wird, deswegen erläutern wir die Wirkung der Tikhonov-Regularisierung an einem Beispiel mit dem $L_1^T L_1$ -Operator.

Die Matrix L_1 bildet im Wesentlichen die diskrete Form der ersten Ableitung. Somit besteht die Nebenbedingung, die durch (3.30) allgemein formuliert wird, darin, möglichst ein Profil zu errechnen, das Ableitungen enthält, die (3.25) minimieren. Kleine Ableitungen, erhält man i. A. dann, wenn ein Kurvenverlauf keine großen Änderungen aufweist, also keine „Zacken“, Sprünge o. ä.. Anders formuliert: ist die untersuchte Kurve einigermaßen glatt, so wird (3.30) klein sein.

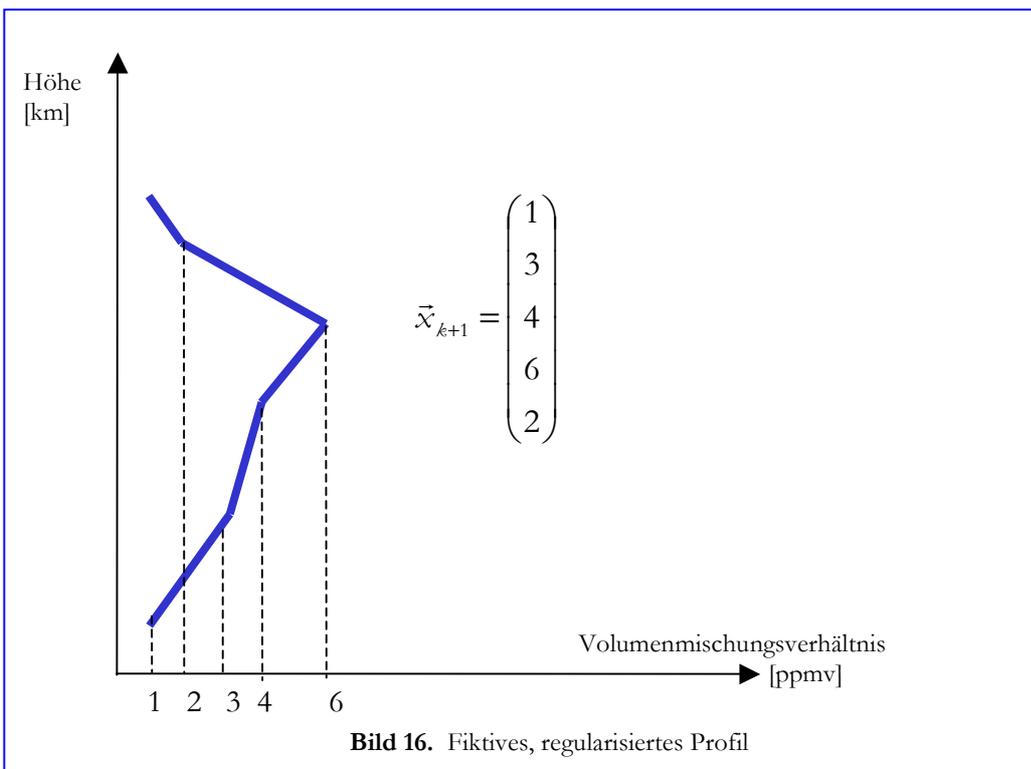
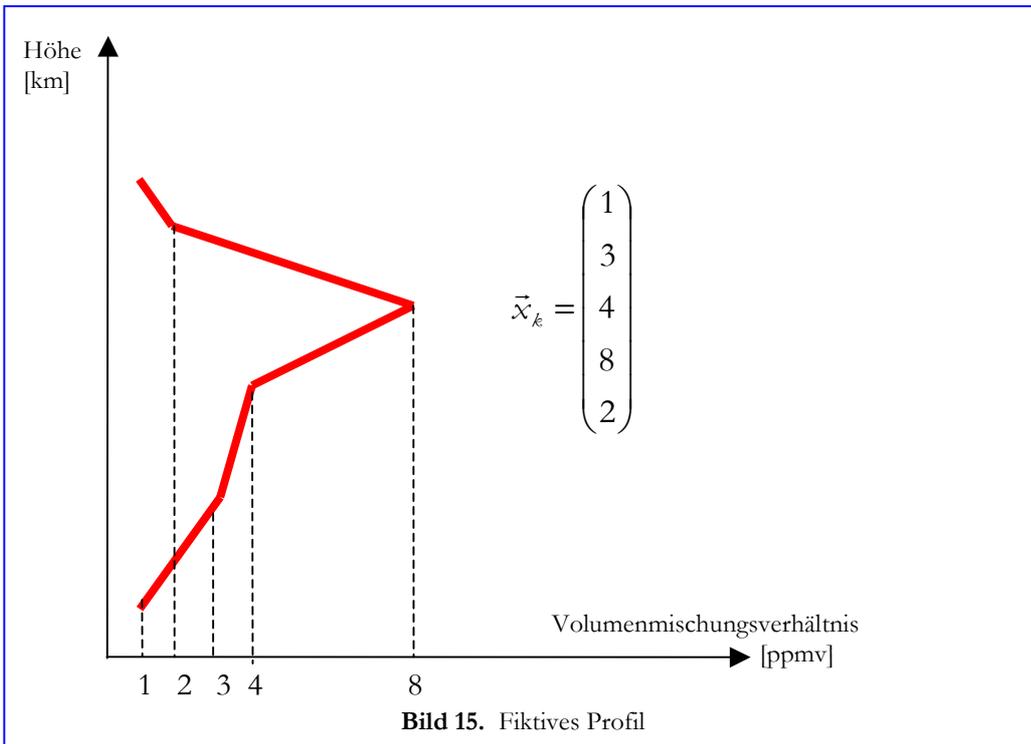
Wir demonstrieren die Wirkung der Tikhonov-Regularisierung an einem Beispiel (Bild 15). Das rote Profil ist ein fiktives Profil eines Spurengases in der Atmosphäre. Die Nebenbedingung lautet in unserem Beispiel $\alpha \|L_1 \vec{x}\|^2 = \alpha \vec{x}^T L_1^T L_1 \vec{x}$ mit

$$L_1^T L_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.34.b)$$

Das Ergebnis der Gesamtmultiplikation ist somit ein Skalar. In unserem Beispiel wählen wir $\alpha = 1$. Sei \vec{x}_k der in der Iteration k berechnete Profilvektor, der für das rote Profil in Bild 15 steht.

Man erhält für $\vec{x}_k^T L_1^T L_1 \vec{x}_k$ den Wert 57. Die Iteration, in der \vec{x}_{k+1} berechnet wird, sorgt u. a. auf Grund der Umsetzung der Nebenbedingung für ein verbessertes Profil \vec{x}_{k+1} .

Wir berechnen $\vec{x}_{k+1}^T L_1^T L_1 \vec{x}_{k+1}$ zu 25. Somit erfüllt das verbesserte Profil \vec{x}_{k+1} die Nebenbedingung, indem es zu einer Minimierung von (3.30) beiträgt.



Man kann drei für die Tikhonov-Regularisierung grundlegende Dinge festhalten

- Je näher sich das Profil an ein konstantes (d. h. insbesondere glattes) Profil annähert, desto kleiner wird $\vec{x}_{k+1}^T L_1^T L_1 \vec{x}_{k+1}$.
- Die Glättung kann nicht direkt durch Multiplikation eines Operators mit einem Profil demonstriert werden, sondern ihre Wirkung wird erst in der Anwendung der Nebenbedingung (d. h. in der Iterationsformel) ersichtlich.
- Die Glättung von Profilen durch das Tikhonov-Verfahren ist sehr stark.

Diese Verbesserung des Profils (Glättung) steht natürlich in Konkurrenz zu anderen Effekten, wie Rauschen, die durch die verschiedenen Terme in (3.25) repräsentiert werden.

Die beschriebene Regularisierung ist homogen bzgl. des Profilverlaufs, somit wird die erforderliche Gewichtung der Nebenbedingung u. U. für Teile des Profils als zu hoch oder zu niedrig angesetzt. Man erhält dann ggf. über- oder unterregularisierte Profelsegmente oder entfernt Merkmale aus den Profilen, die man eigentlich gerne untersucht hätte. Dies kann dazu führen, dass man einerseits glatte Profile ohne physikalischen Aussagewert erhält oder andererseits Lösungen, die zwar das Problem (3.13) erfüllen, aber nicht in der Atmosphäre auftreten.

3.4.2.3 Das Levenberg-Marquardt-Verfahren

Das Levenberg-Marquardt-Verfahren stellt ein Iterationsschema, das ohne die Formulierung einer Nebenbedingung auskommt, dar. Es ist die bevorzugte Variante der ESA bei der Level-2-Prozessierung von MIPAS-Daten und wird deshalb an dieser Stelle der Vollständigkeit halber gezeigt. Man kann einen Ausdruck finden, der (3.25) formal gleicht. Zur Berechnung des Profils dient dann

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \left(K_k^T S_\epsilon^{-1} K_k + \lambda I \right)^{-1} \left(K_k^T S_\epsilon^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_k)) \right) \quad (3.35).$$

Der wesentliche Parameter ist λ . Die Wahl von λ kann gemäß dem Verfahren von Press *et al.* [50] erfolgen

- Wenn sich die Abweichung der Messung von der Simulation in einem Iterationsschritt vergrößert, wird λ erhöht. \vec{x}_k wird nicht upgedatet und es wird der nächste Versuch gemacht.
- Wenn sich die Abweichung der Messung von der Simulation in einem Iterationsschritt verkleinert, wird \vec{x}_k aufgefrischt und λ für den nächsten Schritt verkleinert.

λ kann nach Marquardts Vorschlag jeweils um den Faktor 10 vergrößert, respektive verkleinert werden. Am DLR und dem IFAC wurden auch andere Faktoren getestet. Es stellte sich heraus, dass λ spezies- und subspeziesabhängig ist (d.h. auch die Offset-, Kontinuums und LOS-Anteile des Retrievalvektors erfordern einen eigenen Parameter) und beschränkt werden muss.

3.4.2.4 Zusammenfassung

Die vorgestellten Verfahren zur Formulierung einer Nebenbedingung, um die Inversionsaufgabe (3.13) zu lösen, haben wie beschrieben alle ihre jeweiligen Vor- und Nachteile.

In Kapitel 4 werden wir bei den Anwendungen das neu entwickelte Verfahren HoMa (**H**öhenabhängige **M**atrix) kennen lernen, das es ermöglicht, einige der Vorteile wie Bias-Freiheit oder starke Glättung herauszugreifen und zu kombinieren. Weiterhin wird dort die stark von den bisher beschriebenen Verfahren abweichende Methode MEM2 (**M**aximale-**E**ntropie-**M**ethode) erläutert, durch die eine Nebenbedingung und die zugehörigen Gewichtsanteile formuliert werden können, ohne auf *a priori*-Wissen angewiesen zu sein.

Die genannten Alternativmethoden weisen, obwohl sie eigenständige Verfahren darstellen, zahlreiche Merkmale der oben gezeigten etablierten Verfahren auf. Deswegen ist die Kenntnis dieser Elementarmethoden unerlässlich für das weitere Verständnis.

Der MIPAS-Prozessor beherrscht auch Kombinationen der drei vorgestellten Verfahren. Diese Kombinationen sind jedoch für die vorliegende Arbeit nicht von zentralem Interesse. Vielmehr sind es die Eigenschaften der einzelnen Verfahren, die es gestatten, durch Auswahl der jeweils besten Eigenschaften und möglichst weniger Parameter zu einer optimalen Methode zu gelangen.

3.5 Gütekriterien und Analysewerkzeuge für ein Retrieval

3.5.1 Wann ist ein Retrieval „gut“?

In den vorangegangenen Abschnitten war die Rede von Kriterien, anhand derer entscheidbar ist, ob ein Retrieval sein Ziel erreicht hat.

Diese so genannten Abbruchkriterien basieren i. d. R. auf Vergleichen zwischen errechneten und gemessenen Größen oder auf Vergleichen zwischen zwei aufeinander folgenden Rechnungen. Tabelle 4 gibt einen Überblick über die beim DLR im vorliegenden MIPAS-Retrieval verwendeten Abbruchkriterien. Erreicht oder unterschreitet die Retrievalrechnung im Laufe der Iterationen eine oder mehrere dieser Vergleichsgrenzen, so wird das Retrieval beendet.

Das Erreichen oder Unterschreiten dieser Grenzen liefert aber noch keine Aussage darüber, welche Qualität das Retrievalergebnis hat. Es ist denkbar, dass ein Retrieval bereits nach zwei Iterationen ein Ergebnis liefert, denn man kann bspw. die Regularisierung so groß wählen (d.h. so stark einschränkende Nebenbedingungen formulieren), dass das Retrieval als Ergebnis immer wieder das Ausgangsprofil liefert. Somit würde sich von einem Iterationsschritt zum nächsten keine merkliche Änderung einstellen, also wäre das Kriterium der Unterschreitung der Differenz zweier aufeinander folgender Rechenergebnisse ideal erfüllt. Das Ergebnis ist aber weitgehend wertlos, weil das Ausgangsprofil bereits bekannt ist.

Um die Qualität des Retrievals beurteilen zu können, muss zunächst ein allgemeiner Maßstab bzw. einzelne Kriterien gefunden werden, anhand derer eine Beurteilung über die Qualität erfolgen kann.

Bezeichnung des Kriteriums	Ausdruck, aus dem das Kriterium berechnet wird	Bemerkung
Maximale Anzahl der Iterationen	k	Das Retrieval wird beendet, wenn die maximale Anzahl von Iterationen erreicht ist.
Differenz von retriavelten Parametern $diff_{\max}$	$\max(abs(\vec{x}_i - \vec{x}_{i+1}))$	Unterschreitet die maximale absolute Differenz zweier Retrievalparameter in aufeinander folgenden Iterationsschritten einen Wert, wird das Retrieval beendet.
Differenz von Chi-Quadrat χ_{diff}^2	$abs((\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_i))^T S_{\epsilon}^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_i)) - (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_{i+1}))^T S_{\epsilon}^{-1} (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_{i+1})))$	Unterschreitet die absolute Differenz zweier Chi-Quadrat Ausdrücke in aufeinander folgenden Iterationsschritten einen Wert, wird das Retrieval beendet.
Lineares Chi-Quadrat χ_{lin}^2	$\ K(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i) - (\vec{y} - \vec{F}(\vec{x}_i))\ _{S_{\epsilon}^{-1}}^2$	Unterschreitet das lineare Chi-Quadrat einen Wert, wird das Retrieval beendet.

Tabelle 4. Abbruchkriterien beim MIPAS-Prozessor des DLR [33]

3.5.1.1 Der Averaging Kernel

Die Retrievalergebnisse des MIPAS-Prozessors am DLR sind höhenaufgelöste Vertikalprofile der gewählten Spezies. Somit kann als ein Maß für die Güte eines solchen Retrievals die erzielte Höhenauflösung dienen.

Ein Instrument, um die Höhenauflösung zu untersuchen, stellt der Averaging Kernel dar [55][2]. Im linearen Fall, wenn das Retrievalergebnis schon nahe an der Lösung ist, kann man die Abhängigkeit des Ergebnisses vom tatsächlichen Zustand durch eine lineare Beziehung annähern [61] [55]

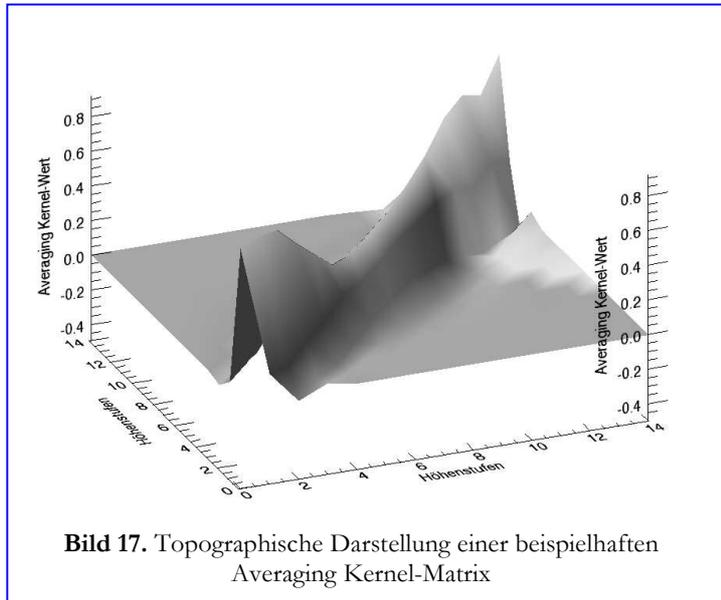
$$\hat{\vec{x}} = G\vec{y} = G[K\vec{x} + \vec{\epsilon}] = A(\vec{x}) + G\vec{\epsilon} \quad (3.36)$$

- G Sensitivität des Retrievals bezüglich der Messung (Gain-Matrix)
- K Lineare Abbildung, die das Profil auf die Messung bezieht (Jakobi-Matrix)
- A Averaging Kernel
- $\vec{\epsilon}$ Fehlergröße

Zieht man den Averaging Kernel als Instrument heran, kann man entweder die Zeilen oder die Spalten der Matrix als Werkzeug zur Bestimmung der Höhenauflösung benutzen. Wir schließen

uns an dieser Stelle den Ausführungen von T. Steck an und betrachten die Halbwertsbreite der Spalten des Averaging Kernels als maßgebliche Größe [62].

A ist eine quadratische, nichtsymmetrische Matrix, deren Dimension gleich der Anzahl Gitterpunkte ist, auf der das jeweilige Profil vorliegt. Sie gibt ein Maß dafür, welche Teile des aktuellen in der Iteration k verwendeten Profils in die Berechnung des Ergebnisses von Iteration $k+1$ einfließen.



Die Summe der Einträge pro Spalte (Zeile) von A ist eins. Ist A eine Einheitsmatrix, so wird das Ergebnis \hat{x} , abgesehen vom Rauschen, ideal durch das Profil \vec{x} widergespiegelt. Sind die Spalten von A nicht nur auf der Diagonalen besetzt, so wird, um den Ergebniswert \hat{x}_i zu reproduzieren, ein Bruchteil des Profilwertes x_i mit Bruchteilen von anderen Profilwerten x_{i-n}, x_{i+n} aufsummiert. Damit erhalten benachbarte Profilwerte Einfluss auf das Ergebnis bei Position i . Diese Position entspricht einem Gitterpunkt des Gitters, auf dem die zu berechnenden Profile vorliegen, im ein-

fachsten Fall also einer Höhenstufe eines Höhengitters.

Je mehr Nebendiagonalelemente in einer Spalte vorhanden sind, desto mehr Information aus anderen Höhenbereichen fließt in die Abbildung eines Profilwertes bei Höhenstufe i (3.36) oder anders ausgedrückt: die Abbildung ist unscharf.

Im Fall höhen aufgelöster Profile steht der Index i wie gesagt für eine Höhenstufe. Weil die Summe der Spalten des Averaging Kernels auf eins normiert ist, kann man die mit Werten besetzten Spalten als Maß für eine Höhenauflösung nehmen.

In der Literatur hat sich als Maß die „Breite“ der Besetzung einer Spalte etabliert, weil man dadurch einen Überblick gewinnt in welchen Höhenstufen der Averaging Kernel viele Nebendiagonalelemente enthält und somit eine schlechte Auflösung repräsentiert.

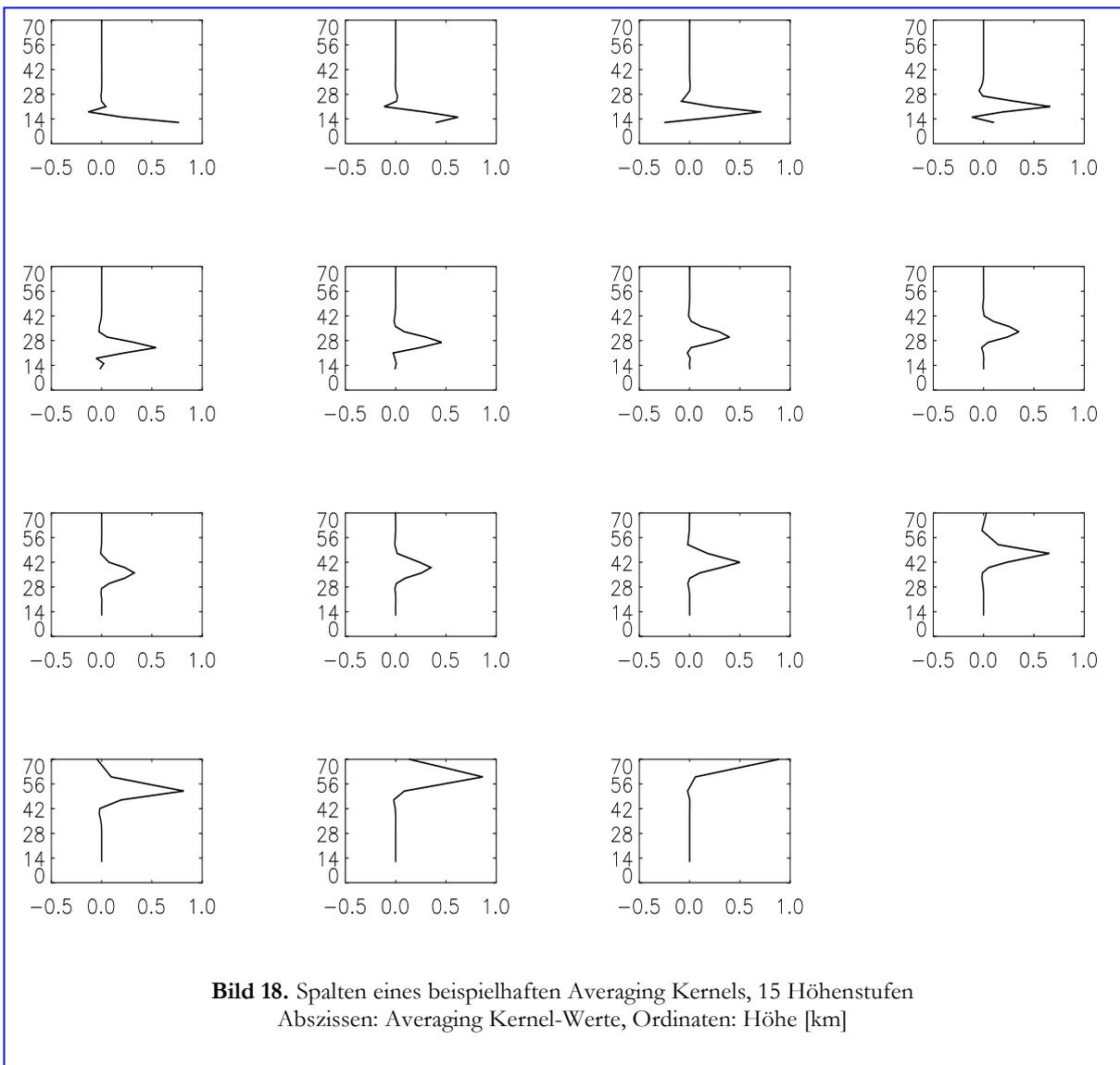
Bild 17 veranschaulicht diese Zusammenhänge. Zu sehen ist eine Averaging Kernel-Matrix in der isometrischen „Draufsicht“. Es sind die Einträge der Matrix gezeigt, wobei die Illustration aus Darstellungsgründen die diskreten Werte interpoliert.

Man erhält einen Eindruck davon, wie die Matrix aufgebaut ist: Sie wird von Einträgen auf der Diagonalen, wobei die Größe der Einträge zu den Nebendiagonalelementen hin abnimmt. Die Summe der Einträge einer Spalte ergibt den Wert eins. Weil es sich ganz eindeutig nicht um eine Einheitsmatrix handelt, hat die Struktur auf der Diagonalen eine gewisse Breite.

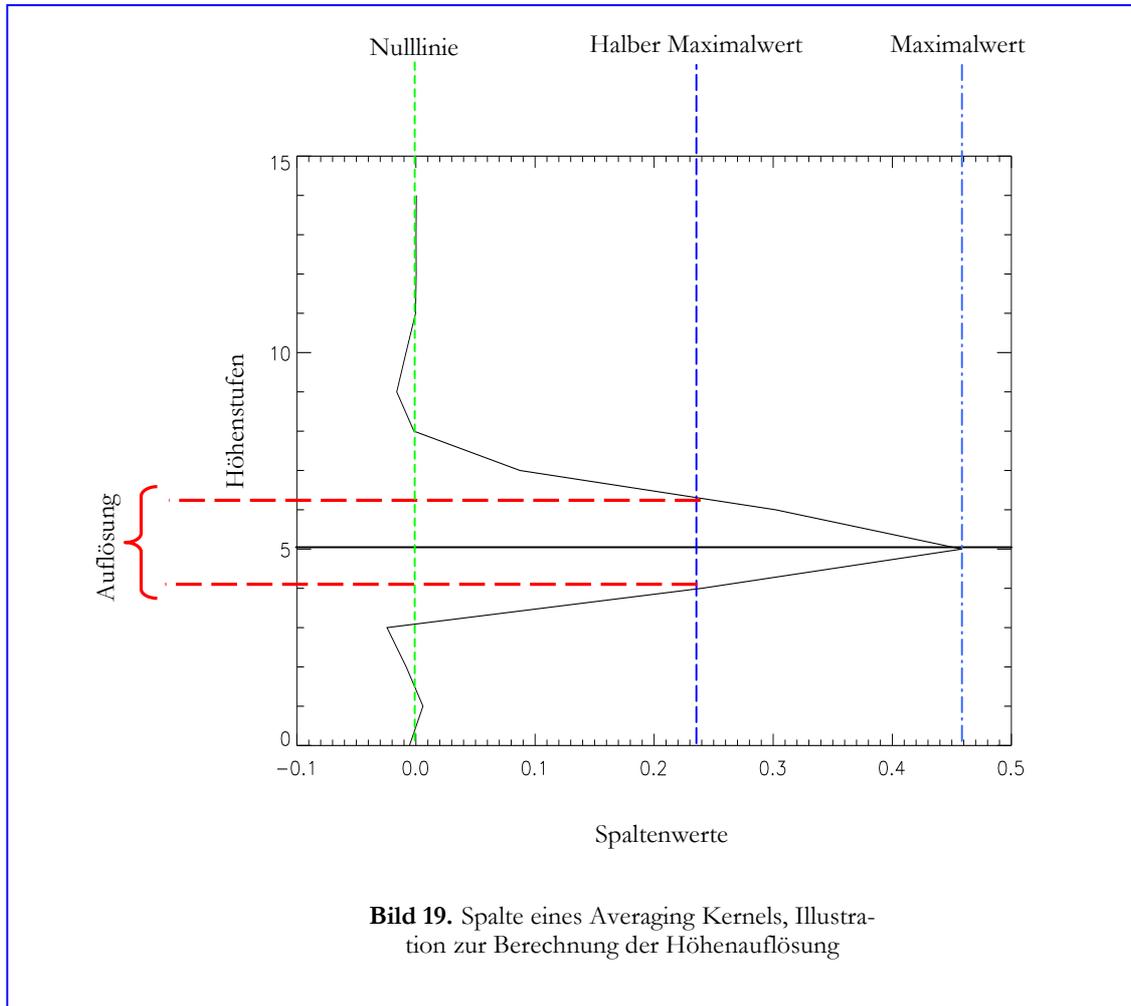
Die Halbwertsbreite dieser Struktur ist ein Maß für die Höhenauflösung. Man erkennt in Bild 17, wie sich der Averaging Kernel zu größeren Höhenstufen hin verbreitert. Dieses Verhalten zeigt sich auch in der Detailbetrachtung.

In Bild 18 sind die Spalten eines beispielhaften Averaging Kernels aufgetragen. Die Abbildung zeigt zeilenweise von links nach rechts die zu den einzelnen Höhenstufen gehörigen Spalten, wobei links oben die unterste Höhenstufe zu sehen ist. Man erkennt die korrespondierenden Einträge: Wo in der „Draufsicht“ eine Verbreiterung der Diagonalstruktur zu sehen ist, zeigen sich in den Abbildungen der Spalten Kurven mit breitem Verlauf und wegen der Normierung Maximalbeträge von kleiner als eins.

Die Werte, auf denen diese Kurven pro Spalte definiert sind, ergeben sich aus den Spalteneinträgen. Die Halbwertsbreite, bildlich gesprochen die „Verschmierung“ der Spalteneinträge, der aufgetragenen Kurven ist das erwähnte Maß zur Abschätzung der Höhenauflösung. In Bild 19 ist eine einzelne Spalte des Beispiels aufgetragen. Man ermittelt die Halbwertsbreite der gezeichneten



Kurve und leitet daraus die in der Höhenstufe des Maximalwertes gültige Höhenauflösung ab.



Findet man, dass in einer Spalte j der Wert der Halbwertsbreite an drei zusammenhängenden Indexpositionen $(j-1, j)$, (j, j) und $(j+1, j)$ nicht unterschritten wird und handelt es sich im einfachsten Fall um ein äquidistantes Gitter mit einer Gitterkonstanten von 1 km, dann beträgt die Auflösung in der Höhenstufe j 3 km.

Die beste erreichbare Höhenauflösung entspricht dem jeweiligen Gitter. Dies ist allerdings nur ein theoretischer Wert, da ein idealer Averaging Kernel eine Einheitsmatrix wäre. Für die Einträge in dieser Matrix (Spitzen auf der Diagonalen) ließe sich kein FWHM errechnen. Die Averaging Kernels der in Abschnitt 3.4 beschriebenen Verfahren lassen sich durch folgenden Ausdruck verallgemeinert beschreiben [61]

$$A = [K^T S_{\epsilon}^{-1} K + \nabla(\nabla N(\vec{x}_k))]^{-1} K^T S_{\epsilon}^{-1} K \quad (3.37).$$

Man erkennt insbesondere wieder den wichtigen Einfluss der Nebenbedingung bzw. der Regularisierung. Dies sieht man anschaulich in Bild 17. Die Form der Diagonalstruktur ist durch die Regularisierung stark mitbestimmt. Ohne Regularisierung erhielte man eine Einheitsmatrix und somit eine glatt verlaufende Diagonalstruktur. Wegen (3.37) wirken sich Änderungen der Regularisierung direkt auf den Averaging Kernel und damit wegen der beschriebenen Eigenschaften des Averaging Kernels auf die Höhenauflösung aus. Ist die Regularisierung an Profileigenschaften gekoppelt, ergibt sich dadurch eine Rückwirkung der Eigenschaften des Profilverlaufs auf den Averaging Kernel. Mit anderen Worten: Berücksichtigt man bei der Regularisierung den Profilverlauf, erhält man je nach Auswahl der Regularisierung ein mehr oder minder optimal höhenaufgelöstes Ergebnis. Diese Zusammenhänge werden in der Anwendung in Abschnitt 4.1 noch klarer, wo verschiedene Regularisierungsverfahren verglichen werden.

Lässt man den Regularisierungsterm weg, ergibt sich der Averaging Kernel zu einer Einheitsmatrix. Wird der Regularisierungsterm zu sehr betont, überwiegt er in Ausdruck (3.37) gegenüber den anderen Termen. Dies hat eine Verschlechterung der Höhenauflösung zur Folge, weil die Spalten (Zeilen) des Averaging Kernels durch die Abweichung von der Gestalt einer Einheitsmatrix und aufgrund der Normierung der Summen der Spalten und Zeilenelemente auf eins Einträge in Nebendiagonalelementen erhalten müssen. Man ist also gezwungen, ein geeignetes Verhältnis zwischen Regularisierung und gewünschter Höhenauflösung zu finden.

Auch ein Retrieval, das eine sehr gute Höhenauflösung aufweist, muss noch keine optimalen Ergebnisse liefern. Um beurteilen zu können, ob ein gut höhenaufgelöstes Retrievalergebnis auch möglichst korrekte Ergebnisse liefert, muss man noch weitere Werkzeuge bemühen.

(3.37) ist nur eine Möglichkeit einen Averaging Kernel zu definieren. Es finden sich in der Literatur noch zahlreiche andere Ausdrücke. Für die vorliegende Arbeit ist (3.37) jedoch die relevante Form.

3.5.1.2 Der Begriff des Informationsgehalts

Als Maßstab für die Qualität eines Retrievalergebnisses kann darüber hinaus der Informationsgehalt dienen, d.h. man analysiert ein Retrievalergebnis in Hinblick auf die „Neuigkeiten“, die es enthält.

Die Informationstheorie kennt den Informationsgehalt im Sinne von Shannon [55]. Ursprünglich konzipiert, um die Kapazitäten von Informationskanälen zu beschreiben, hat der Begriff eine viel breitere Anwendung gefunden. Shannon definierte den Informationsgehalt als Entropie von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. Diese Formulierung ist stark verknüpft mit der Entropie, wie sie aus der Thermodynamik bekannt ist.

Der Shannon-Informationsgehalt für diskrete Informationssysteme lässt sich in Analogie zur Gibbs-Definition der thermodynamischen Entropie wie folgt definieren [55]

$$S(P) = -q \sum_i p_i \ln p_i \quad (3.38)$$

q	in der Informationstheorie = 1, in der Thermodynamik die Boltzmann-Konstante (Anhang C.III)
p_i	Wahrscheinlichkeit, dass das System sich im Zustand i befindet
P	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Der kontinuierliche Fall unterscheidet sich im Wesentlichen nur durch den Wechsel von diskreten Ausdrücken zu analytischen. Rodgers verwendet in seiner Darstellung den natürlichen Logarithmus (\ln), wobei in der Nachrichtentechnik oft der duale Logarithmus (\lg) benutzt wird. Die Darstellungen unterscheiden sich aber nicht prinzipiell

$$S(P) = -\int P(y) \ln(P(y)) dy \quad (3.39)$$

Der Messfehler wird nach Rodgers als eine von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen abhängige Größe beschrieben [55]

$$\text{Mittelwert} \quad \bar{y} = \int y P(y) dy \quad (3.40)$$

$$\text{Varianz} \quad \sigma^2 = \int (y - \bar{y})^2 P(y) dy \quad (3.41).$$

Man nimmt für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eine Gaußform an

$$P(y) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \sigma} \exp\left\{-\frac{(y - \bar{y})^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (3.42)$$

bzw. in Matrix-/Vektorschreibweise

$$P(\vec{y}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |S_\epsilon|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\vec{y} - \vec{\bar{y}})^T S_\epsilon^{-1} (\vec{y} - \vec{\bar{y}})\right\} \quad (3.43).$$

S_ϵ ist die Kovarianzmatrix der Messung, also das Analogon zu σ im skalaren Fall. $|S_\epsilon|$ ist die Determinante der Matrix S_ϵ und n ihre Dimension.

S_ϵ darf nicht singular werden, was jedoch nur dann der Fall wäre, wenn man einen Wert perfekt, also ohne Varianz, gemessen hätte. Dabei würde es sich allerdings nicht um eine echte physikalische Messung gehandelt haben und demzufolge könnte man den Messwert aussondern.

Aufgrund der Eigenschaften von Matrizen und Determinanten (Anhang B) kann man (3.43) umformulieren und erhält

$$P(\vec{y}) = \prod_i \frac{1}{(2\pi\lambda_i)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{(\vec{y} - \vec{\bar{y}})^2}{\lambda_i}\right\} \quad (3.44)$$

λ_i Eigenwerte von S_ε

Wendet man (3.38) auf (3.44) an, ergibt sich die Entropie im diskreten Fall zu

$$S(P(\vec{y})) = \sum_{i=1}^m \ln(2\pi e \lambda_i)^{1/2} = \dots = m \ln(2\pi e)^{1/2} + \frac{1}{2} \ln |S_\varepsilon| \quad (3.45)$$

Wenn man an der Änderung der Entropie als Maßzahl interessiert ist, muss also die Entropie vor der Messung mit der Entropie nach der Messung verglichen werden. Die Differenz ist der Informationsgehalt H

$$H = \frac{1}{2} \ln |S_{\text{vor}}| - \frac{1}{2} \ln |S_{\text{nach}}| = -\frac{1}{2} \ln |S_{\text{nach}} S_{\text{vor}}^{-1}| \quad (3.46)$$

Auf das hier vorliegende Retrieval bezogen ergibt sich Folgendes: Die inverse Kovarianzmatrix S_{vor}^{-1} , die den Zustand vor der Messung beschreibt, ist im Falle einer *a priori*-Nebenbedingung die Inverse der *a priori*-Kovarianzmatrix bzw. im Falle der Maximalen-Entropie-Methode (4.1.5) die Regularisierungsmatrix, die sich aus dem Init-Guess errechnet.

Die entsprechenden Matrizen werden gemäß (3.25) mit $\nabla(\nabla N(\vec{x}))$ bezeichnet. S_{vor}^{-1} entspricht also $\nabla(\nabla N(\vec{x}))$ (Regularisierungsoperator). Zur besseren Lesbarkeit substituieren wir $\nabla(\nabla N(\vec{x}))$ allgemein mit R^{-1} .

Die Kovarianzmatrix, die den Zustand nach der Messung erfasst, ist die Informationsmatrix (3.26), denn sie stellt die Kovarianzmatrix des Retrievals dar. Es ergibt sich damit konkret für den Informationsgehalt H folgender Ausdruck (man beachte das Vorzeichen) [61][55]

$$H = \frac{1}{2} \ln |S_\varepsilon^{-1} R| = \frac{1}{2} \ln |(K^T S_\varepsilon^{-1} K + R^{-1}) R| = \quad (3.47)$$

$$\frac{1}{2} \ln |R^{1/2} K^T S_\varepsilon^{-1} K R^{1/2} + I| = \frac{1}{2} \ln |\tilde{K}^T \tilde{K} + I|$$

$$\text{mit } \tilde{K} = S_\varepsilon^{-1/2} K R^{1/2} \quad (3.48)$$

Wegen der Eigenschaften von Determinanten (Anhang B) lässt sich (3.48) auch folgendermaßen schreiben

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \ln(1 + \sigma_i^2) \quad (3.49)$$

σ_i Singulärwerte von \tilde{K}

Nimmt man den Averaging Kernel zu Hilfe, ergibt sich für den Informationsgehalt H nach kurzer Rechnung [55]

$$H = -\frac{1}{2} \ln |I - A| \quad (3.50)$$

Wie man (3.48) entnimmt, ist zur Berechnung des Informationsgehalts die Kenntnis einer *a priori*-Kovarianzmatrix oder eines inversen Regularisierungsoperators erforderlich. Im Falle einer Tikhonov-Regularisierung (Abschnitt 3.4.2.2) oder beim Maximalen-Entropie-Verfahren (Abschnitt 4.1.5), wird jedoch kein *a priori*-Wissen benötigt, somit erhält man auch keine *a priori*-Kovarianzmatrix. Zudem sind die verwendeten Regularisierungsoperatoren i. A. nicht invertierbar.

Mit (3.50) ist man dennoch in der Lage den Informationsgehalt, zumindest formal, zu errechnen, denn der Averaging Kernel lässt sich aus Größen bestimmen, die ohne explizite *a priori*-Kovarianzmatrix oder inverse Regularisierungsoperatoren auskommen [62]. Die so ermittelten Werte für den Informationsgehalt haben nur eingeschränkten Nutzwert. Der Informationsgehalt lässt streng genommen nur die Aussage zu, welchen Einfluss eine veränderbare Gewichtung bei unverändertem *a priori*-Wissen auf das Retrieval hat. Interpretiert man bspw. die Glattheitsforderung bei Tikhonov als *a priori*-Wissen, dann kann man keineswegs ein Ergebnis das mit Optimal Estimation unter Hinzunahme von *a priori*-Wissen regularisiert wurde mit dem durch das Tikhonov-Verfahren regularisierte Ergebnis auf Basis des Informationsgehaltes vergleichen. Voraussetzung für einen ordnungsgemäßen Vergleich sind identische Annahmen für das *a priori*-Wissen. Die in Kapitel 4 genannten Informationsgehalte sind unter diesem Gesichtspunkt zu werten.

3.5.2 Wann ist ein Kriterium „gut“?

Die vorgestellten Kriterien geben Anhaltspunkte, um zu entscheiden, ob ein Retrievalergebnis gewissen Anforderungen genügt oder nicht. Unglücklicherweise sind diese Kriterien alleine zu global, um ein Retrievalergebnis genau zu untersuchen. So lässt der Informationsgehalt zwar Aussagen über die Gesamtgüte eines Ergebnisses zu. Allerdings sagt der Informationsgehalt dadurch nichts darüber aus, ob eine der Messungen nahezu perfekt erfolgte und der Rest der Messungen keinen signifikanten Beiträge enthalten oder ob das Ergebnis aus Beiträgen besteht, die alle einen ähnlichen Informationsgehalt tragen.

Man benötigt also ein Werkzeug, das Auskunft über die Verteilung der Teile eines Ergebnisses enthält, bei denen sich der Informationsgehalt geändert hat, um ggf. Nachbesserungen in der Parametrisierung des Retrievals gezielt vornehmen zu können.

3.5.2.1 Der Begriff des Freiheitsgrades

Ein Konzept, das wertvolle Dienste leistet und aufs Engste mit dem Begriff des Informationsgehaltes und des Averaging Kernels verknüpft ist, stellen die so genannten Freiheitsgrade (engl. degrees of freedom) dar [61][55] [56].

Dieses Konzept wird von Rodgers ([55] [56]) formuliert. Es leistet insbesondere eine Unterscheidung zwischen Freiheitsgraden des Retrievalergebnisses, die dem Messsignal, also letztlich dem wahren Profil zugerechnet werden können (degrees of freedom for signal, dfs) und solchen, die dem Rauschen zugeordnet werden (degrees of freedom for noise, dfn). Die Elemente, die den Freiheitsgraden entsprechen, die dem Rauschen zugeordnet werden, dienen nicht einer Verbesserung des Informationsgehaltes des Ergebnisses.

Rodgers zeigt einen Zusammenhang zwischen den dfs und Gleichung (3.50). Damit lassen sich die dfs als von den Singulärwerten σ_i von \tilde{K} abhängige Größen schreiben

$$dfs = \sum_{i=1}^m \frac{\sigma_i^2}{1 + \sigma_i^2} \quad (3.51)$$

m Anzahl der Höhenstufen

Gleichung (3.51) zeigt insbesondere, dass nur Werte für $\sigma_i \geq 1$ einen merklichen Beitrag zu den dfs leisten. Eine ähnliche Aussage lässt sich auch für den Informationsgehalt ableiten, wenn man sich (3.50) im Hinblick auf die Eigenschaften des Logarithmus ansieht. Somit kann man durch eine Analyse der Singulärwerte σ_i entscheiden, ob eine Maßnahme wie die Anpassung der Regularisierung die Freiheitsgrade des Ergebnisses günstig beeinflusst, also die dfs erhöht oder senkt. Ebenso ergibt sich ein Ausdruck für die dfn

$$dfn = \sum_{i=1}^m \frac{1}{1 + \sigma_i^2} \quad (3.52)$$

Man kann das Prinzip der Freiheitsgrade anschaulich so formulieren: Jede gute Messung einer Komponente des wahren Profils trägt zu den Freiheitsgraden des Signals bei, jede schlechte Messung zu den Freiheitsgraden des Rauschens. Damit ist offensichtlich die Summe aus den Freiheitsgraden gleich der Anzahl der Gesamtfreiheitsgrade, mithin der Zahl der Höhenstufen, auf der die jeweils untersuchte Spezies vermessen wird. Damit gewinnt die Auswahl des Gitters eine Bedeutung hinsichtlich der Güte eines Retrievals.

Nimmt man die Formulierung des Averaging Kernels hinzu, ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen den dfs und dem Averaging Kernel

$$dfs = tr(\mathcal{A}) \quad (3.53)$$

\mathcal{A} Averaging Kernel wie in (3.50) definiert
 tr Spur (der Matrix)

Gleichung (3.53) enthält eine fast anschauliche Interpretation des Konzepts der Freiheitsgrade. Je mehr Nebendiagonalelemente der Averaging Kernel enthält, je breiter er also ist bzw. je schlech-

ter die Höhengauflösung ausfällt und je kleiner die Werte auf der Diagonalen damit sind (der Averaging Kernel ist normiert), desto geringer wird der Wert für dfs .

Je stärker die Regularisierung ist, umso geringer fällt das Ergebnis der Summenbildung für die Freiheitsgrade des Signals aus. Das führt im Extremfall dazu, dass die Regularisierung die möglichen Lösungen auf das Ausgangsprofil reduziert bzw. zu einem Ergebnis, das keinerlei Freiheitsgrade durch die Messung enthält: Das Ergebnis ist wertlos

Da der Wert für die Freiheitsgrade mit den Singulärwerten von \tilde{K} aus (3.48) verknüpft ist, ergibt sich ein Zusammenhang, der den Einfluss der Regularisierung anhand der Singulärwerte deutlich werden lässt. D. h. im Falle von *a priori*-Wissen kann man durch Analyse der Freiheitsgrade unterscheiden, welcher Anteil des Inversionsergebnisses auf das Vorwissen und welcher auf die Messung zurückzuführen ist. Schreibt man den Informationsgehalt und die dfs komponentenweise pro Höhengitterpunkt, so erhält man eine Zuordnung, aus wie vielen signifikanten Teilen sich der Informationsgehalt eines Retrievalergebnisses zusammensetzt. Damit lassen sich beispielsweise Ergebnisse, bei denen die Anzahl der signifikanten dfs unterhalb 20% der Anzahl der Gitterpunkte des Retrievalergebnisses liegt, aussondern. Man kann jedoch im Falle von vorhandenem *a priori*-Wissen noch einen Schritt weiter gehen.

Die Singulärwerte einer beliebigen $n \times m$ -Matrix A sind positiv [65]. Bei der maschinell gestützten Singulärwertzerlegung einer Matrix werden die Singulärwerte, durch die in der Arbeit verwendeten Hilfsmittel größensortiert zurückgegeben, d.h. man verliert eine vorhandene Höhenzuordnung der Singulärwerte. Bei der Eigenwertzerlegung einer quadratischen Matrix tritt diese Sortierung nicht auf. Die Eigenwerte λ_i einer quadratischen, symmetrischen Matrix $A^T A$ errechnen sich aus den Singulärwerten σ_i wie folgt

$$\lambda_i = \sigma_i^2 \quad (3.54)$$

Für $x \in C^n$ gilt $x^T (A^T A)x = \|Ax\|_2^2 \geq 0$ d.h. A ist positiv semidefinit und somit sind die Eigenwerte größer oder gleich null.

Mit diesem Vorwissen kann man einen eindeutigen Zusammenhang zwischen den Eigenwerten der Matrix $\tilde{K}^T \tilde{K}$ und somit den Singulärwerten von \tilde{K} und dem Höhengitter des Retrievalergebnisses ziehen. Das ermöglicht eine höhengauflöste Analyse des Informationsgehaltes des Retrievalergebnisses, allerdings nur sofern *a priori*-Wissen, respektive eine *a priori*-Kovarianzmatrix, vorhanden ist.

3.5.2.2 Anpassung von Größenordnungen

Ein wichtiger Schritt bei der Einschätzung der Tauglichkeit eines Analyse Kriteriums ist der Vergleich von Größenordnungen in den entscheidenden Termen.

Man kann befriedigende Retrievalergebnisse erhalten, wenn man rein mathematische Betrachtungen anstellt. Jedoch ist die Verwendung von physikalisch sinnvollen Größenordnungen und daraus abgeleiteten Größenordnungen von korrelierten Größen ein nicht zu unterschätzender Baustein für sinnvolle und physikalisch tragbare Retrievalergebnisse. Das reicht von der Hinterfragung von Größenordnungen von physikalischen Parametern (hinsichtlich ihrer physikalischen

Einheiten) bis zur Analyse von Größenordnungen von Fehlergrößen. So ist ein erster Schritt bei der optimalen Auswahl von Parametern die Analyse der Größe der Einträge in den einzelnen Matrizen der Informationsmatrix (3.26). Sind in einem Retrieval die genannten Anforderungen an die Informationsmatrix nicht gegeben, muss man die Parametrisierung verändern. Zudem läuft man bei großen Matrizen immer Gefahr numerische Fehler zu erhalten, wenn die Größenordnungen der Matrizeneinträge zu stark variieren. Dieses Problem ist unter dem Schlagwort Konditionierung bekannt [48].

Einen wichtigen Bestandteil einer gelungenen Regularisierung stellt die erste Auswahl des Regularisierungsparameters dar, der die Skalierung der Regularisierung bestimmt. Oft wird er mit λ bezeichnet, nicht zu verwechseln mit den Singulärwerten, oder im Falle der Tikhonov-Regularisierung mit α . Wird dieser Parameter unpassend gewählt, sind die Einträge des Regularisierungsterms in der Regel um Größenordnungen von den Einträgen von $K^T S_\epsilon^{-1} K$ verschieden. Dadurch entsteht eine Über- oder Unterregularisierung des Retrievals.

Dieses Verhalten lässt sich mit den gezeigten Methoden analysieren und früher oder später erhält man die richtige Größenordnung für λ oder α durch schrittweise Anpassung. Der einfachere Weg ist jedoch eine Größenordnungsanalyse der Einträge der Matrix $K^T S_\epsilon^{-1} K$, um den Regularisierungsparameter schon am Anfang richtig zu dimensionieren. Dieses Vorgehen bietet sich an, weil die Werte, die in der Matrix $K^T S_\epsilon^{-1} K$ stehen, einerseits vom Instrument und andererseits von dem als optimal parametrisiert angenommenen Vorwärtsmodell vorgegeben sind. Außerdem lässt es sich automatisieren.

3.5.2.3 Herkömmliche Methoden

In diesem Zusammenhang erfolgt noch ein Verweis auf die herkömmliche Darstellung mit Fehlerbalken. Ein großer Teil des Retrievals beschäftigt sich ausschließlich mit der Berücksichtigung von Fehlern, die auf die unterschiedlichsten Weisen behandelt werden.

Die Quadrate der Diagonalelemente der Informationsmatrix (3.26) stellen die höhenaufgelösten Varianzen des Gesamtretrievals, je nach Regularisierung, dar. Wir verzichten auf eine Darstellung dieser Varianzen in Form von Fehlerbalken und geben statt dessen die Varianzen als Höhenprofile wieder. Dies erfolgt aus Übersichtsgründen. Wenn, wie in Kapitel 4, Ergebnisse von Simulationen als Referenzen verwendet werden können, dann werden die Ergebnisse der Berechnungen auf die Referenzdaten bezogen. Die folgenden Fehlergrößen werden bei der Analyse der Ergebnisse an entsprechender Stelle herangezogen

Relative Standardabweichung

$$rel.\,rms = \sqrt{\sum_i \left((x_i^k - x_{i,ref}) / x_{i,ref} \right)^2 / n} \quad (3.55)$$

Absolute Standardabweichung

$$abs.rms = \sqrt{\sum_i (x_i^k - x_{i,ref})^2 / n} \quad (3.56)$$

Relative Differenz

$$rel.diff = (x_i^k - x_{i,ref}) / x_{i,ref} \quad (3.57)$$

k	Anzahl der Iterationen
i	Höhenstufe
n	Gesamtzahl der Höhenstufen, auf denen der retrievede Profilwert ungleich dem Referenzwert ist

Diese drei Ausdrücke dienen bei Vorhandensein eines Referenzwertes zur Beurteilung, wie stark ein Profil von dem als korrekt angenommenen Referenzprofil abweicht.

3.6 Optimierung der Parameterauswahl

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir gesehen, dass die durchzuführende Retrievalrechnung aus einer großen Zahl von Einzelschritten besteht.

Jeder dieser Schritte bietet Raum für Verbesserungen in der Parameterauswahl und eine Untersuchung des gesamten Parameterraumes würde den Rahmen der vorliegenden Arbeit bei weitem sprengen. Aus diesem Grund beschränken wir uns auf eine Auswahl von Parametern, von der wir annehmen dürfen, dass eine Optimierung die Ergebnisse des MIPAS-Level-2-Retrievals qualitativ verbessern wird.

Wir haben gesehen, dass besonders für die Regularisierung eine Vielzahl von Größen existiert, die man aufgrund der immer wieder hervorgehobenen Bedeutung der Regularisierung für das Retrieval besonders sorgfältig auswählen muss. Aber es gibt noch eine Reihe weiterer Felder, in denen Optimierungsarbeit zu leisten ist. Der folgende Abschnitt zeigt, wo Bedarf an Verbesserung besteht und stellt die zu leistende Arbeit in den Kontext der verwendeten Mathematik und der Meteorologie.

3.6.1 Wo besteht Bedarf an Optimierungen?

Bei einer großen Anzahl von Testläufen im Umfeld der Prozessorentwicklung und -validierung hat sich gezeigt, dass Optimierungen bei der Parameterauswahl zu qualitativ besseren Ergebnissen führen. Aus diesem Grund ist eine systematische Vorgehensweise zur Auswahl und Festlegung der Parameter nötig. Als Parameter stehen grundsätzlich zur Auswahl

- Parameter, die vor einem Retrieval-Lauf festgelegt werden müssen (Vorprozessierung);
- Parameter, die in das Vorwärtsmodell eingehen;
- Parameter, die zur Inversion benötigt werden;

Die folgende Aufstellung nennt die Felder, aus denen die Parameter stammen, die im Rahmen dieser Dissertation in eine Optimierung einbezogen wurden, und zeigt anhand der Nummerierung, an welcher Stelle in der Prozessierung man auf sie trifft (siehe Bild 8, Abschnitt 3.2).

- Auswahl der Nebenbedingung ⑥

Die Auswahl der Nebenbedingung und somit der Regularisierung ist von der zu retrievelnden Spezies und dem Vorhandensein von Vorwissen abhängig. Man hat die Wahl zwischen den herkömmlichen Methoden, wie sie in Abschnitt 3.4.2 beschrieben wurden, oder Ansätzen wie HoMa (4.1.3) und MEM2 (4.1.5)
- Festlegung der Regularisierungsinformation ①

Hierzu gehört als zentrale Fragestellung die Bestimmung der Gewichtungsmatrizen und die Bestimmung einer passenden Skalierungsgröße, um die Stärke der Regularisierung festzulegen.
- Kombinationen von Regularisierungen ⑦

Durch Kombinationen von unterschiedlichen Eigenschaften verschiedener Regularisierungen versucht man, die optimale Methode, die mit möglichst wenig Nachteilen behaftet ist, zu erreichen.
- Berücksichtigung systematischer Fehler ② ④ ⑤

Die Berücksichtigung systematischer Fehler (Abschnitt 4.2) ist wünschenswert, weil man dadurch Folgefehler vermeidet.
- Wolkenerkennung ③

Die Wolkenerkennung (Abschnitt 4.3) ist insbesondere beim Limb sounding hinsichtlich der Fehlerpropagation von besonderem Interesse

3.6.2 Verbindung zur verwendeten Mathematik

Die oben angeführten Optimierungsfelder haben direkte Auswirkungen auf die Elemente in Gleichung (3.25) aus Abschnitt 3.4.1.3.

- Die Auswahl der Nebenbedingung $N(\vec{x})$ legt die zur Problemstellung optimal passende Regularisierung fest.
- Die Festlegung der Regularisierungsparameter ermöglicht die optimale Bestimmung der regularisierungsrelevanten Größen in $N(\vec{x})$ (Bspw. Vorwissen, Gewichtungsmatrizen.).
- Die Kombination von Regularisierungen ermöglicht die Generierung von optimalen Regularisierungsausdrücken, auch für spezielle Fälle.

- Die Berücksichtigung systematischer Fehler führt zu einer Optimierung der Kovarianzmatrix der Messung S_{ϵ}^{-1} . Die Wolkenerkennung hilft dabei, unbrauchbare Messungen \bar{y} auszusondern.

3.6.3 Verbindung zur Meteorologie

Bei den retrieveden Profilen handelt es sich um Größen wie global verteilte Temperatur, Ozonmengen oder Profile anderer atmosphärenphysikalisch bedeutsamer Spurengase. Eine genaue Handhabung der mathematischen Einflussmöglichkeiten und die Kenntnis der Mechanismen der Datenaufbereitung und –verarbeitung sind von entscheidender Bedeutung, um die Ergebnisse korrekt zu deuten und Erkenntnisse nachvollziehbar zu halten.

In Zukunft werden global verteilte, zeitlich und örtlich hochaufgelöste Daten eine immer wichtigere Rolle im Bereich der Klimaforschung spielen. Diese Daten finden Eingang in Klima- und Wettermodelle (ECMWF, DWD) und immer mehr auch in so genannte Weltmodelle wie SIBERIA II [68]. Diese Modelle haben eine holistische Modellierung zum Ziel, d. h. dass sie sowohl bspw. Biosphären- als auch Atmosphären- und Ozeanendaten verarbeiten, um so Rückschlüsse auf Wechselwirkungen zwischen diesen Sphären zu erhalten wie z. B. die Wirkung anthropogen induzierter Klimaänderungen auf Organismen.

Umso entscheidender ist es, Verfahren zu entwickeln, die diese Daten in einer hohen Qualität bereitstellen, denn je komplexer die Modelle werden, die mit den Daten arbeiten, desto komplexer werden auch etwaig vorhandene Fehler weiterverarbeitet und propagiert.

Die in den folgenden Abschnitten vorgestellten Optimierungen folgen den beschriebenen Auswahlkriterien. Obgleich sie nur eine kleine Auswahl von möglichen Parametern betreffen, erzielt man mit diesen Verbesserungen signifikante Ergebnisverbesserungen.

KAPITEL 4 PRAXIS

4.1 Regularisierung

Die klassischen Regularisierungstechniken wie Tikhonov oder die Hinzunahme von *a priori*-Wissen bei Optimal Estimation weisen Schwachstellen auf, insbesondere wenn es um Höherauflösung oder die Erfassung von Feinstrukturen in zu retrievelnden Profilen geht.

Aus diesem Grund war es erforderlich, neue gedankliche Ansätze zu implementieren und zu testen, um zu einer optimalen Methode zu gelangen. Dazu ist es hilfreich, sich zunächst die auftretenden Probleme zu vergegenwärtigen.

4.1.1 Fragestellung - Regularisierung bei Spurengasretrievals

Spurengasprofile schwanken zum Teil stark in der Größenordnung der Einheiten, in der sie in der Natur vorkommen, wir betrachten das Volumenmischungsverhältnis (engl. VMR) in ppmv. Die Werte für Ozon liegen beispielsweise in der Troposphäre um 0,1 ppmv. Die Werte weiter oben, in ca. 50 km Höhe, liegen in derselben Größenordnung. Dazwischen allerdings kann der Wert für Ozon auf 8 ppmv oder mehr anschwellen. Somit kann man davon ausgehen, dass das am Satelliten erhaltene Signal ebenfalls in der Stärke variiert.

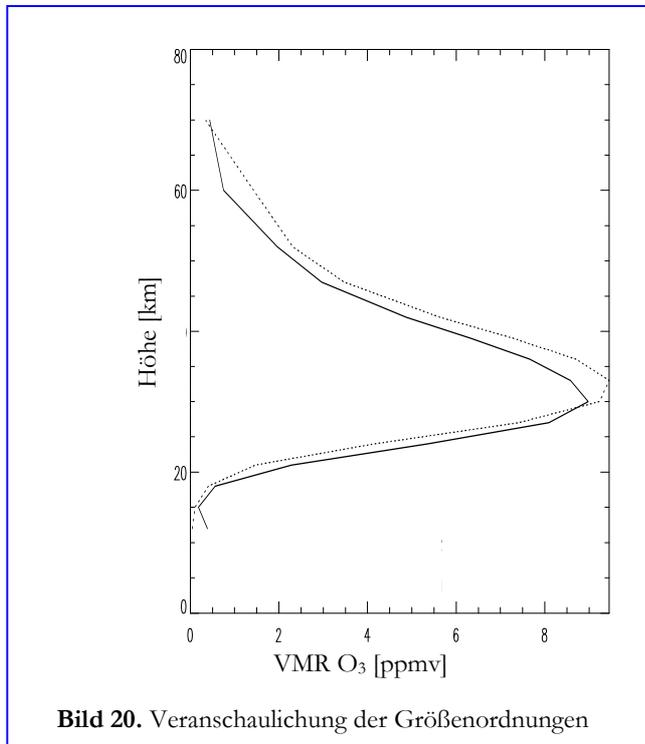
Aber auch Spurengase mit nahezu höhenkonstantem Volumenmischungsverhältnis verursachen aufgrund des Einflusses von Temperatur und Druck auf das Emissionsverhalten von Gasen unterschiedliche Strahldichten, vgl. Abschnitt 3.3.1 Gleichung (3.6).

Das NESR der Messdaten weist darüber hinaus pro Kanal eine unterschiedliche Charakteristik auf, allerdings ändert sich diese Charakteristik nur wenig mit der Tangentenhöhe. Je kleiner der Anteil der Nutzinformation am empfangenen Signal ist, je stärker sich also das Rauschen auswirkt, desto stärker muss regularisiert werden, wenn keine zusätzlichen Messungen vorliegen, um Rauscheffekte zu unterdrücken bzw., um im Sinne der Inversionsaufgabe (3.13) eine Lösung unter Beachtung der Nebenbedingung zu erhalten.

Die Messsignale aus den unteren Atmosphärenbereichen sind zwar stark, jedoch stellen sich aufgrund der nach unten hin zunehmenden Dichte der Atmosphäre Probleme durch Einwirkungen anderer Atmosphärenbestandteile wie Aerosole ein. Diese Einwirkungen können dazu führen, dass Emissionslinien oder allgemeiner spektrale Charakteristika von Spurengasen nicht mehr aufgelöst werden können, weil das Emissionsverhalten der Spurengase durch Superpositionseffekte maskiert wird.

Durch Sättigungseffekte in der Emission in den unteren Atmosphärenschichten verbreitern sich Emissionslinien, anstatt an Stärke zuzunehmen. Dadurch werden an sich unterscheidbare Linien „verschmiert“. Das führt dazu, dass man auf Spektralbereiche ausweichen muss, die zwar nicht so stark beeinträchtigt werden, aber auch keine optimalen Messungen hinsichtlich der Signalamplitude ermöglichen.

Regularisiert man bei einem Profilverlauf wie dem von Ozon (Bild 20) über den gesamten Höhenbereich so, wie das Profil es in den oberen Bereichen erfordern würde, dann würde man zwar ein glattes Gesamtprofil erhalten. Allerdings würde das Ergebnisprofil bspw. im Falle einer Tikhonov-Regularisierung so stark an das Startprofil (Init-Guess) gebunden, dass man dieses wieder als Ergebnis bekäme. Das Retrieval würde dann stabile Ergebnisse liefern, die allerdings keinen wissenschaftlichen Wert besäßen, weil alle neuen Informationen durch die Überregularisierung vernichtet würden.



Andererseits kann man durch die geeignete höhenabhängige Auswahl von so genannter *a priori*-Information dafür sorgen, dass man dadurch den Weg für eine stabile und sinnvolle Lösung absteckt. Die Regularisierung soll dafür sorgen, die mathematisch möglichen Lösungen von den physikalisch sinnvollen zu trennen. Diese Möglichkeit ist durch die beschränkte Auswahl von zuverlässigem *a priori*-Wissen leider in der Regel verschlossen. Speziell bei weniger gut untersuchten Spurengasen liegt naturgemäß wenig *a priori* verfügbares Wissen vor. Aber auch für gut untersuchte Spezies ist es unter Umständen schwer, an verlässliches *a priori*-Wissen zu kommen. Will man zum Beispiel Retrievals von Spurengasen im Bereich des polaren Vortex durchführen, stößt man schnell an die Grenzen aktuell gültiger Informationen.

Es ist also wünschenswert, Verfahren zur Regularisierung zur Verfügung zu haben, die entweder ohne *a priori*-Wissen auskommen und dennoch gute Ergebnisse im Sinne von Abschnitt 3.5 liefern oder die beim Rückgriff auf *a priori*-Wissen nur dort stärker regularisieren, wo man es benötigt.

Es ist also wünschenswert, Verfahren zur Regularisierung zur Verfügung zu haben, die entweder ohne *a priori*-Wissen auskommen und dennoch gute Ergebnisse im Sinne von Abschnitt 3.5 liefern oder die beim Rückgriff auf *a priori*-Wissen nur dort stärker regularisieren, wo man es benötigt.

4.1.2 Überblick über Regularisierungsverfahren

Wir fassen noch einmal zusammen, was wir bisher über Regularisierung wissen und zeigen, wo die im Anschluss besprochenen Verfahren ansetzen. Die Regularisierung, wie sie bisher in der vorliegenden Arbeit behandelt wurde, besteht aus zwei Komponenten

- Nebenbedingung
- Gewichtung

Tabelle 5 gibt einen Überblick, wie sich die herkömmlichen Verfahren bezüglich dieser Einteilung verhalten und wie sich die, im Anschluss beschriebenen, Alternativverfahren davon abgrenzen.

Die Eigenschaften von Optimal Estimation und Tikhonov sind in den entsprechenden Abschnitten bereits erläutert worden. HoMa und MEM2 werden im Anschluss jeweils im Detail diskutiert.

Anhand von simulierten Testläufen und echten MIPAS-Flugdaten werden die Möglichkeiten der Verfahren in der praktischen Anwendung von Spurengasretrievals demonstriert und die Unterschiede zu den vorgestellten etablierten Verfahren aufgezeigt.

Verfahren	Nebenbedingung	Gewichtung der Nebenbedingung durch	Bemerkung
Optimal Estimation unter Hinzunahme von <i>a priori</i>-Wissen (Abschnitt 3.4.2.1)	$\ (\vec{x} - \vec{x}_a)\ _{S_a^{-1}}^2$	S_a^{-1}	<ul style="list-style-type: none"> • S_a^{-1} wird aus S_a berechnet • Viele Parameter
Tikhonov (Abschnitt 3.4.2.2)	$\alpha \ L\vec{x}\ $	$\alpha \cdot L^T \cdot L$	<ul style="list-style-type: none"> • Glättungsverfahren • Keine Höhenabhängigkeit
Höhenabhängige Matrix (HoMa) (Abschnitt 4.1.3 ff)	$\ L_c(\vec{x} - \vec{x}_a)\ _{S_b^{-1}}^2$	$L_c^T \cdot S_b^{-1} \cdot L_c$	<ul style="list-style-type: none"> • Profilformabhängige Gewichtung und Glättung • Direkte Bestimmung der relevanten Größen S_b^{-1} und L_c • Überschaubare Anzahl von freien Parametern
Maximale-Entropie-Methode (MEM2) (Abschnitt 4.1.5 ff)	$\gamma \cdot S(\vec{x})$	$\nabla(\gamma \cdot S(\vec{x}))$ bzw. $\nabla(\nabla(\gamma \cdot S(\vec{x})))$	<ul style="list-style-type: none"> • Profilformabhängiges Glättungsverfahren • Unabhängig von <i>a priori</i>-Wissen • Nicht-linear

Tabelle 5. Merkmale von in der Arbeit verwendeten Regularisierungsverfahren

4.1.3 Profilformabhängige Regularisierung mit HoMa (Höhenabhängige Matrix)

Das Ziel von HoMa ist es, eine Matrix zu erhalten, die einerseits als Gewichtungoperator für die Nebenbedingung, andererseits als Glättungsoperator, falls eine Regularisierung notwendig erscheint, dient. Zudem sollte die Matrix invertierbar sein, um ggf. Rückschlüsse auf physikalische Größen wie Varianzen der *a priori*-Profilwerte zu ermöglichen. Dabei soll gewährleistet sein, dass durch den Einsatz der Matrix keine zusätzlichen unerwünschten Einflüsse durch die Art und Weise der Konstruktion der Matrix entstehen.

Die Nebenbedingung im Sinne von HoMa lässt sich folgendermaßen formulieren

$$k \cdot \|L_C(\bar{x} - \bar{x}_a)\|_{S_b}^2 = k \cdot (\bar{x} - \bar{x}_a)^T L_C^T S_b L_C (\bar{x} - \bar{x}_a) \quad (4.1)$$

Die gesuchte Matrix setzt sich also aus „starr“ Anteilen und profilformabhängigen Anteilen zusammen. Ein Regularisierungsparameter k sorgt dabei speziesabhängig für die Bestimmung der korrekten Größenordnung der Einträge der Matrix.

Um die geforderten Eigenschaften zu erfüllen, greifen wir auf eine Kombination aus Gewichtung durch *a priori*-Wissen durch S_b und Glättung durch das Tikhonov-Verfahren mittels L_C zurück

$$k \cdot L_C^T S_b L_C \quad (4.2).$$

Der Aufbau und die Eigenschaften der beiden Teile werden im Folgenden beschrieben. Ähnliche Ansätze wurden von A. Doicu *et al.* beschrieben [13][14][15][16].

4.1.3.1 Aufbau des Glättungsoperators

Das Gerüst für den zu erstellenden Regularisierungsoperator stellt eine Linearkombination aus Tikhonov-Operatoren dar [14]. Dies bietet sich an, weil die Tikhonov-Operatoren glättende Wirkung haben, was eine der geforderten Eigenschaften ist. Man bildet also

$$L^T L = \sum_{i=0}^n \alpha_i L_i^T L_i \quad (4.3)$$

$$\sum_{i=0}^n \alpha_i = 1, \quad \alpha_i > 0 \quad (4.4)$$

Gleichung (4.4) dient durch die Normierung dazu, die Größenordnungen der α_i gegeneinander klar abgrenzen zu können. Die Operatoren L_i sind in Abschnitt 3.4.2.2 beschrieben. Um eine ausreichende Glättung zu erreichen, genügt es i. d. R. $i = 0, 1$ zu wählen.

$$\begin{aligned} 0 < \alpha_0 << \alpha_1 \\ \alpha_0 &\neq 0 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Der entstehende Operator zeigt die für eine Kovarianzmatrix grundsätzlich nötigen Eigenschaften

- positive Definitheit (Anhang B.I.3)
- Invertierbarkeit
- Symmetrie (aufgrund der Eigenschaften der Tikhonov-Operatoren (3.32) – (3.34))

Es wird nun auch klar, wozu man die Konstruktion mit der Linearkombination benötigt. Durch die Hinzunahme der Einheitsmatrix im Form von L_0 wird der Gesamtoperator invertierbar. Das ist nötig, weil $L_1^T L_1$ für sich genommen nicht invertierbar ist. Das sieht man, wenn man sich die Summen der Spalten (Zeilen) von $L_1^T L_1$ ansieht

$$L_1^T L_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & : \\ 0 & -1 & \dots & \dots & 0 \\ : & : & : & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.6).$$

Sie ergeben sich jeweils zu null, was bedeutet, dass $L_1^T L_1$ singular ist.

Wählt man α_0 sehr klein, dann ist der Einfluss der Einheitsmatrix auf die Funktion des Operators als Glättungsoperator minimal. In der vorliegenden Arbeit haben sich die Werte 0,01 für α_0 und 0,99 für α_1 als optimal erwiesen.

Die notwendige Invertierbarkeit und positive Definitheit von $L^T L$ kann man nachweisen, indem man

$$L^T L = \alpha_0 L_0^T L_0 + \alpha_1 L_1^T L_1 = \alpha_0 I + \alpha_1 L_1^T L_1 \quad (4.7)$$

als die spezielle in der vorliegenden Arbeit verwendeten Form von (4.3) zerlegt und sich die Einzelteile genauer ansieht.

Ein oft verwendetes Kriterium zur Entscheidung, ob eine Matrix invertierbar ist, besteht in der Prüfung, ob die Determinante ungleich null ist. Die Determinante kann man als das Produkt der Eigenwerte berechnen. Hierzu bildet man

$$\alpha_0 I + \alpha_1 L_1^T L_1 = \alpha_0 V^T V + \alpha_1 V^T \Sigma^2 V = V^T (\alpha_0 I + \alpha_1 \Sigma^2) V \quad (4.8).$$

Das ist die Darstellung von (4.7) in Eigenwerten bzw. Singulärwerten. Für $L_1^T L_1$ erhält man die entsprechende Darstellung indem man den Operator in die Komponenten L_1 und L_1^T zerlegt und als Singulärwertzerlegung schreibt

$$L_1 = U^T \Sigma V \quad (4.9)$$

und

$$L_1^T = V^T \Sigma U \quad (4.10)$$

Σ ist eine Diagonalmatrix, welche die Singulärwerte von L_1 enthält. U und V sind unitäre Matrizen, die bei der Zerlegung entstehen. Wegen der Unitarität gilt

$$V^T V = I \quad (4.11)$$

und

$$U^T U = I \quad (4.12)$$

mit I als der Einheitsmatrix. Bildet man

$$L_1^T L_1 = V^T \Sigma^2 V \quad (4.13)$$

erhält man auf der rechten Seite einen Ausdruck, der die quadratischen Singulärwerte (Eigenwerte) von $L_1^T L_1$ enthält [50].

Analog gewinnt man die Darstellung für den einfachen Fall von $L_0^T L_0$. Da es sich dabei nur um die Einheitsmatrix handelt, ist die Darstellung in Eigenwerten trivial, insbesondere sind alle Eigenwerte größer null.

Die Eigenwerte der Matrix (4.8) sind sicher nicht null, wie man aus (4.13) und der Tatsache, dass die Eigenwerte der Einheitsmatrix alle ungleich null sind, ablesen kann, damit ist $L^T L$ also invertierbar, weil die Determinante ungleich null ist.

Die positive Definitheit lässt sich ebenfalls aus (4.13) und (4.8) ableiten, denn die Elemente der Matrix Σ^2 sind positiv und die Eigenwerte der Einheitsmatrix I sind ebenfalls größer null. Damit sind die Eigenwerte $(\alpha_0 I + \alpha_1 \Sigma^2)$, für $\alpha_i > 0$, der Matrix $L^T L$ alle positiv und größer null. Dies ist die Bedingung für positive Definitheit.

Für die Anwendung in (4.2) muss noch die Cholesky-Zerlegung von $L^T L$ berechnet werden und man erhält dann den benötigten Operator L_C . Die Cholesky-Zerlegung stellt im Wesentlichen das Analogon zur Wurzel bei Skalaren dar. Wegen der oben beschriebenen besonderen Eigenschaften von $L^T L$ existiert eine solche Zerlegung.

4.1.3.2. Aufbau des Gewichtungsoptors

Das Gerüst (4.3) wird nun mit globalen Eigenschaften des zu erwartenden Profils ausgestattet. Die Idee hierbei ist, dass der Einfluss des Vorwissens dort betont werden soll, wo man starke

Wirkungen des Rauschens oder Einflüsse aufgrund der Opazität der Atmosphäre vermutet. An den Stellen, wo man ein starkes und relativ unbeeinflusstes Signal erwartet, soll der Einfluss der Glättung durch die Konstruktion des Tikhonov-Operators überwiegen.

Neben der speziesabhängigen Profilform gibt es noch weitere physikalisch begründete Umstände, die Auswirkungen auf die Notwendigkeit von höhenabhängiger Profilregularisierung haben. Bspw. erwartet man Einflüsse des Rauschens im Signal (und dadurch auf das Profil) in großen Höhen, wo man aufgrund der nach oben hin abnehmenden Stoffmengen schwache Emissionen der Spurengase zugrunde legen kann. Einflüsse aufgrund der abnehmenden Transmission der Atmosphäre kann man dagegen in den unteren Regionen der Atmosphäre erwarten, seien sie anthropogenen (Umweltverschmutzung) oder natürlichen Ursprungs (bspw. Staub in der unteren Stratosphäre durch Vulkanausbrüche). Im Vordergrund steht jedoch immer die Profilform, weil die Regularisierung letztlich ein Vorgang ist, der sich rein im Profilraum abspielt, in den alle anderen Größen aufwändig transformiert werden.

Variante 1

Die Profilform kann man auf verschiedene Weisen in eine Form bringen, in der sie als Gewichtung dienen kann. Eine Methode besteht darin, das Profil einzulesen und die Profilwerte als Elemente einer Diagonalmatrix zu verstehen (Annahme hier: Die Varianz folgt dem Profilverlauf). Die so erhaltene Matrix kann leicht invertiert werden und verfügt über alle Eigenschaften, die man für eine Kovarianzmatrix benötigt, sofern keine Profilwerte gleich null auftreten.

Diese Variante eignet sich gut für Fälle, in denen man so genannte Schichtgase wie Ozon vorliegen hat, die in bestimmten Höhen signifikante Strahldichten bei der Messung erzeugen. Bei solchen Verhältnissen ist man in der Regel daran interessiert, an den Stellen des Profils stark zu regularisieren, wo die Messwerte starken Beeinflussungen unterliegen, also in den unteren und oberen Schichten.

Variante 2

Eine andere Möglichkeit die Profilform auch bei Quellgasen zu berücksichtigen ist, ein *a priori*-Profil der zu retrievelnden Spezies, das auf einem festgelegtem Höhengitter definiert ist, einzulesen und an der Symmetrieachse, die durch das arithmetische Mittel des Maximal- und Minimalwertes festgelegt wird, zu spiegeln. Bild 21 veranschaulicht dies anhand eines fiktiven Beispiels. Die gestrichelte Linie symbolisiert die Lage der Spiegelachse. Dadurch erhält man, unter Einbeziehung obiger Überlegungen, ein noch unskaliertes Profil der benötigten Gewichtungstärke der Regularisierung für das Vorwissen. Die lineare Transformation (Spiegelung) garantiert darüber hinaus, dass man ein Abbild des zu untersuchenden Profils erhält, das nicht durch u. U. unbekannte, funktionale Abhängigkeiten beeinflusst wird. Insbesondere ist das damit entstehende Gewichtungsprofil nicht verzerrt oder gestaucht, sondern formtreu zum Bezugsprofil. Das Gewichtungsprofil geht durch eine Spiegelung an einer Parallelen zur Ordinate (Höhenachse) aus dem Spurengasprofil hervor. Dies kann man mathematisch folgendermaßen ausdrücken

$$x_{\text{neu}}^i = -(x_{\text{alt}}^i - 2x_{\text{sp}}) \quad (4.14)$$

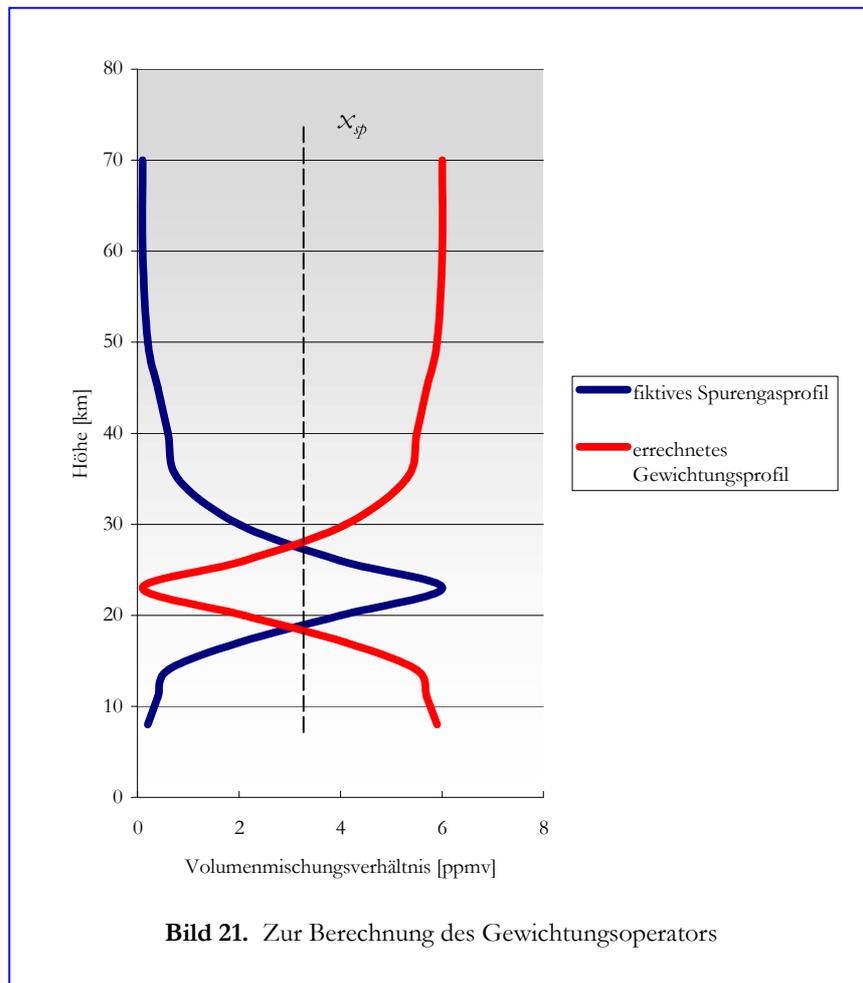
x_{neu}^i der i-te neue Profilwert

- x_{alt}^i der i-te alte Profilwert
- x_{sp}^j Position der Spiegelachse auf der Abszisse

Da man nur eine Dimension zu betrachten hat, ist es für den Nachweis der Formtreue ausreichend, zu testen, ob die Abbildung (Spiegelung) paarweise Werte im gleichen Abstand reproduziert, d. h. ob die Abstandsbeträge unter der Abbildung invariant sind. Also

$$|x_{\text{neu}}^i - x_{\text{neu}}^j| = |-(x_{\text{alt}}^i - 2x_{\text{sp}}) + (x_{\text{alt}}^j - 2x_{\text{sp}})| = |x_{\text{alt}}^j - x_{\text{alt}}^i| \tag{4.15}$$

Damit ist die Formtreue hinreichend gezeigt.



Nun wird eine Diagonalmatrix S_b definiert, deren Einträge aus den Werten des unskalierten, gespiegelten Profils der Gewichtung bestehen. Auf eine feste Zuordnung der Höhen ist dabei zu achten, d. h. man muss berücksichtigen, in welcher Reihenfolge die Einträge höhensortiert sind.

Im nächsten Schritt wird

$$L_C^T(\kappa \cdot S_b)L_C \quad (4.16)$$

mit $\kappa \neq 0$ als Skalierungsgröße der Regularisierung gebildet und man erhält eine Regularisierungsmatrix mit den eingangs geforderten Eigenschaften. Der Parameter κ wird in den Abschnitten, wo HoMa zu Anwendung kommt jeweils angegeben.

Die Matrix weist außerdem die folgenden Eigenschaften auf, wodurch sie die formalen Anforderungen an eine Kovarianzmatrix bzw. deren Inverse erfüllt

- positiv definit (aufgrund entsprechender Eigenschaften des verwendeten Tikhonov-Operators und Bildung quadratischer Elemente);
- invertierbar (aufgrund entsprechender Eigenschaften des verwendeten Tikhonov-Operators und Multiplikation mit nichtsingulären Matrizen);
- symmetrisch (aufgrund entsprechender Eigenschaften des verwendeten Tikhonov-Operators und Multiplikation mit diagonalen Matrizen);

Der einzige freie Parameter bei der Bildung dieser Matrix ist hierbei κ als Regularisierungsparameter. Die α_i werden einmal am Anfang global festgelegt. Die Skalierung durch κ ist wie in Abschnitt 3.5.2.2 beschrieben ein wichtiger Faktor bei der Bestimmung der optimalen Regularisierung und muss je nach Spezies ermittelt werden. In der vorliegenden Arbeit geschah dies i. d. R. durch Größenordnungsvergleich oder empirisch durch manuelle Anpassung unter Beachtung der Kriterien aus Abschnitt 3.5.

Die Anwendungsbeispiele in den folgenden Abschnitten verwenden Variante 2.

Die Berechnung der Matrizen erfolgt bei beiden Varianten gemäß Abschnitt 3.2 off-line. Dazu werden *a priori*-Profile auf gegebenem Höhengitter in ASCII-Code von einem, in IDL-Code geschriebenen Programm, eingelesen und verarbeitet. Dieses Programm verlangt als Inputparameter den Speicherort (Verzeichnis) der Profildatei und die Angabe des Regularisierungsparameters κ sowie der α_i . Es liefert die berechneten Matrizen in einer ASCII-codierten Ausgabedatei zurück (Anhang A.V).

4.1.3.3 Eigenschaften und Besonderheiten von HoMa

Aus dem oben beschriebenen Glättungsoperator zusammen mit der Gewichtungsmatrix gewinnt man einen Regularisierungsoperator, der entsprechend den Gegebenheiten des zu erwartenden Profils einfach konfiguriert werden kann. An den Stellen, wo eine starke Glättung nötig ist, wird stark geglättet und ansonsten genug Spielraum für das Retrieval gelassen, um den natürlichen Profilverlauf nachbilden zu können. Will man die Korrelationen der Profilwerte der einzelnen Höhen stärker betonen, kann man höherwertigere Tikhonov-Operatoren zusätzlich in (4.2) einfügen. Zudem ist das Verfahren bezüglich der Nebenbedingung Bias-frei.

Ein wesentliches Unterscheidungsmerkmal zu Regularisierungsverfahren, die mit Kovarianzmatrizen arbeiten, ist die erwähnte Formtreue bei Variante 2. Bildet man Kovarianzmatrizen wie in Abschnitt 3.4.2.1, so erhält man nur eine schwache generelle Profilabhängigkeit in den Gewichtungsmatrizen, weil man i. d. R. Varianzen

$$\sigma_a^2 = (\bar{x} - \bar{\bar{x}})^2 \quad (4.17),$$

mit $\bar{\bar{x}}$ als klimatologischem Mittelwert (*a priori*-Wissen) und \bar{x} als Init-Guess-Profil, als Diagonalelemente für die *a priori*-Matrizen verwendet. Multipliziert man derartige Gewichtungsmatrizen, die durch Inversion aus *a priori*-Kovarianzmatrizen nach 3.4.2.1 gebildet wurden, mit Profilen (siehe 3.4.1) gehen u. U. durch Untergewichtung von einzelnen Merkmalen gegenüber dem „normalen“ Verlauf eines Profils, die bei der Varianzbildung zwangsläufig geschieht, wichtige Informationen verloren, die in den *a priori*-Profilen vorhanden sind. Die Varianzen (4.17) beruhen zudem meist auf Annahmen für Mittelwerte, die nicht für das aktuelle Profil zutreffen müssen.

Nicht zu unterschätzen ist letztlich auch, dass HoMa ein direktes Verfahren zur Gewinnung einer Gewichtungsmatrix darstellt. Alle Größen, die bei HoMa in die Berechnung fließen, wirken sich direkt auf die Gewichtungsmatrix aus. Die Beurteilung der Gewichtung im Hinblick auf eine Regularisierung ist somit durchschaubarer als bei Verfahren, die den „Umweg“ über eine Kovarianzmatrix gehen. Die Größe, die bspw. im Fall von Optimal Estimation unter Hinzunahme von *a priori*-Wissen als Gewichtungsmatrix verwendet wird, ist nicht die Kovarianzmatrix selbst, sondern ihre Inverse (Abschnitt 3.4.2).

Gegenüber dem Tikhonov-Verfahren als reinem Glättungsverfahren besteht der Vorteil von HoMa in der profilformabhängigen, also höhenabhängigen, Glättung der Profile. Das Tikhonov-Verfahren glättet auf allen Höhenstufen eines Profils, abhängig vom skalaren Regularisierungsparameter α , gleichmäßig stark (siehe 3.4.2.2) und hat Schwächen bei Profilen mit starken Änderungen im Verlauf. Da die meisten Profile aber charakteristische Verläufe zeigen, ist dieses globale Vorgehen nicht immer optimal [61].

4.1.4 HoMa in der vorliegenden Arbeit

Um die Wirkung von HoMa zu demonstrieren, werden Ergebnisse von Beispielrechnungen gezeigt, die im Rahmen von Simulationen entstanden sind, um spezielle Effekte gezielt untersuchen zu können. Im Anschluss daran beschäftigen wir uns mit der Frage, wie es um die Tauglichkeit von HoMa bei der Verwendung von MIPAS-Flugdaten bestellt ist. Die in den Rechnungen verwendeten Höhengitter sind in Anhang A.IV explizit aufgeführt.

4.1.4.1 Simulationsdaten

Im Regelbetrieb ermittelt MIPAS Spektren, wie in Kapitel 2 beschrieben, auf 15-17 Höhenstufen von ca. 6 km bis etwa 70 km Höhe, mit zunehmenden Abstand der Gitterpunkte nach oben. In den Simulationen wurden Spektren auf 46 Höhenstufen zwischen 8 km und 53 km, mit realistischen Rauschannahmen, simuliert. Die größere Dichte der Höhenstufen soll den möglichen Informationsgehalt der Messungen ausnutzen, um u. a. die Auffindung von Feinstrukturen zu ermöglichen, die bei größeren Abtastschritten sonst nicht oder nur unvollständig in den Messungen auftauchen würden. Technisch ist MIPAS in der Lage, Abtastschritte in Abständen ab 1 km zu realisieren.

Die Simulationen beziehen sich auf Profilretrievals, die in einem Atmosphärenszenario stattfinden, bei dem einige Besonderheiten simuliert wurden. Zum einen wurden an dem Referenzprofil, dem „wahren“ Profil, auf dessen Grundlage die simulierten Spektren erzeugt wurden, Modifikationen in Form von Spitzen, sog. Feinstrukturen, vorgenommen. Das nachfolgende Retrieval muss zeigen, ob es in der Lage ist, auch bei Feinstrukturen in den Profilverläufen, sofern deren Ursachen in den Spektren vorhanden sind, das wahre Profil zu bestimmen. Diese Feinstrukturen findet man bspw. in der Natur, wenn bei Ozon Schichtungen ausbilden. Zum anderen wurden die Init-Guess- und *a priori*-Profile als unterschiedlich und jeweils um 5 km gegeneinander höhenverschoben angenommen, um nachzuweisen, dass das Retrievalverfahren, welches auf die Profilform wirkt und nicht auf die globalen Profileigenschaften, durch die Regularisierung in dieser wichtigen Eigenschaft nicht beeinträchtigt wird.

Die beschriebenen Voraussetzungen ermöglichen es, zu demonstrieren, ob das Ziel von HoMa, dort stark zu regularisieren, wo es nötig ist und sich dort, wo man viel Information aus der Messung erwartet, wenig zu regularisieren, erreicht werden kann.

4.1.4.2 Größen zur Fehleranalyse in der Simulation

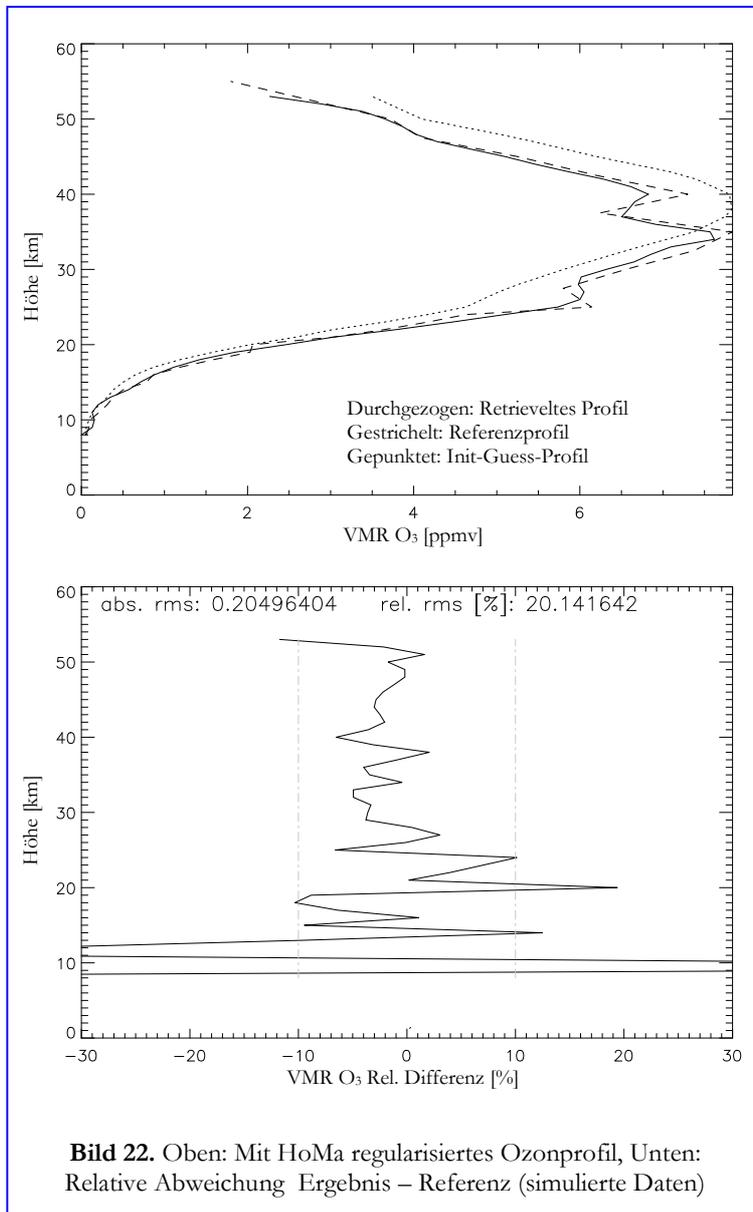
Bei den folgenden Betrachtungen standen Referenzprofile als Simulationseingaben zur Verfügung, deswegen sind Abweichungen jeweils auf diese Referenzdaten bezogen. Wir verwenden die in Abschnitt 3.5.2.3 beschriebenen Größen

- Relative Standardabweichung
- Absolute Standardabweichung
- Relative Differenz

Diese drei Fehlergrößen dienen bei Vorhandensein eines Referenzwertes zur Beurteilung, wie stark ein retrievedes Profil von dem als korrekt anzunehmenden Profil abweicht. Die Größen sind jeweils in den unteren Teilen der entsprechenden Abbildungen dargestellt.

4.1.4.3. Anwendung von HoMa auf Simulationsdaten

Bild 22 zeigt das Ergebnis einer Retrievalrechnung für Ozon, die unter den oben genannten Voraussetzungen durchgeführt wurde. Der Regularisierungsparameter k wurde auf den Wert 1 gesetzt, dadurch erhielten die Einträge in der Regularisierungsmatrix die Größenordnung der Einträge des zweiten Terms in der für das Beispiel gültigen Informationsmatrix (3.26). Dieses Vor-



gehen gewährleistet, dass nicht von vornherein eine Überregularisierung eintritt, was zwar zu glatten Profilen führt, aber gleichzeitig die erreichbare Höhenauflösung inakzeptabel reduziert. Diese Zusammenhänge ergeben sich aus der Definition des Averaging Kernels (Abschnitt 3.5.1.1). Die Werte für die α_i entsprechen den Festlegungen aus Abschnitt 4.1.3.1.

Man erkennt deutlich, dass das Ergebnis nahe am Referenzprofil liegt. Auch die Feinstrukturen bei 25 km und 35 km werden gut nachgebildet.

Lediglich bei den Strukturen, die sich auf der „Unterseite“ des Ozonbauches befinden, zeigt das Ergebnis Schwächen. Dieses Verhalten stellt man auch bei Anwendung anderer Verfahren fest. Die Erklärung liegt in der konzentrischen Schichtung der Modellatmosphäre. Will man Informationen von einem Tangentenpunkt auf der Unterseite des Profils erhalten, dann muss hierzu Information aus Strahlung ausgewertet werden, die einen Weg entlang einer Sichtlinie zurückgelegt hat, der durch alle über dem Tangentenpunkt liegenden Schichten der Modellatmosphäre hindurch geht.

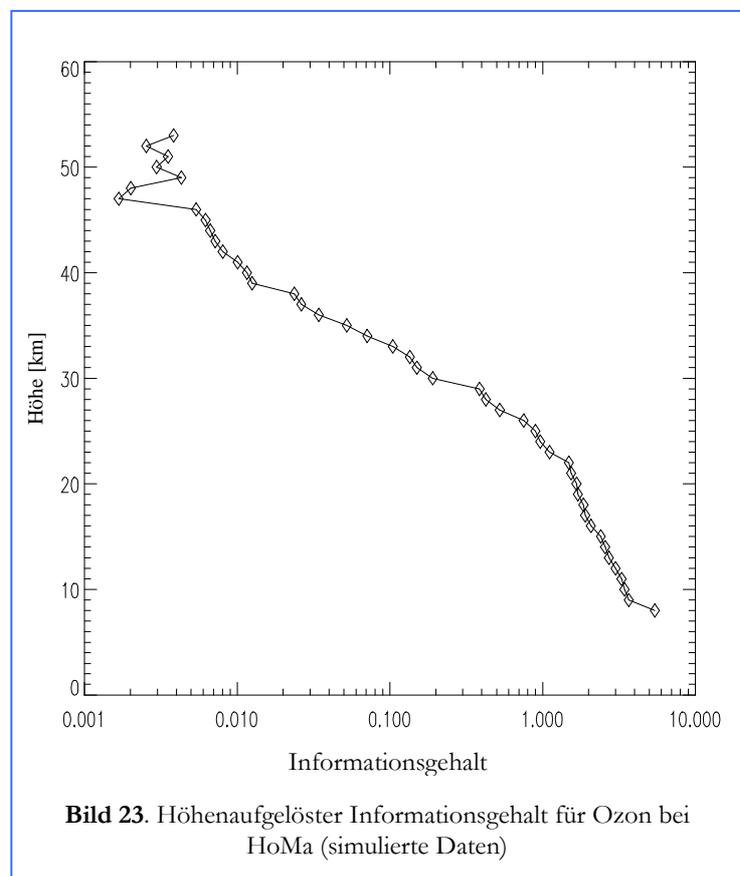
Durch diese starke Überlagerung von Informationen aus verschiedenen Höhenbereichen tritt eine Maskierung von Effekten auf, die bei „freier Sicht“ feststellbar wären. Zudem erhält man durch die Anwendung der starken Regularisierung in den unteren Höhenbereichen ein glattes Profil, das zwar noch im Wesentlichen dem Profilverlauf entspricht, aber kleine Unebenheiten im Sinne der optimalen Lösung korrigierend ausgleicht.

In den unteren Höhenbereichen des Profils ergeben sich auf Grund der kleinen absoluten ppmv-Beträge große relative Abweichungen, obwohl das Retrievalergebnis von der Referenz absolut gesehen nur sehr wenig abweicht. Aus Bild 22 unten entnimmt man, dass der absolute Fehler bei 0,2 ppmv liegt. Die großen relativen Abweichungen trotz der in den unteren Regionen starken Regularisierung des Profils, lassen sich auf die Transmissionsverhältnisse der Atmosphäre in diesen Höhen zurückführen. Dadurch kommt es zu starken Einflüssen anderer Atmosphärenbestandteile (Aerosole), die in dieser Höhe in wesentlich höheren absoluten Stoffmengen vorliegen, als das vergleichsweise seltene Ozon. Dort sind die aerosolbedingten spektralen Signaturen stärker ausgeprägt als die von Ozon.

Das Profilretrieval bei MIPAS-Daten beruht darauf, möglichst feine spezieabhängige spektrale Merkmale noch nachzubilden, deswegen verschlechtern Überlagerungen dieser spektralen Störgrößen durch sog. Kontinuumseinflüsse die Ergebnisse. Unter Kontinuumseinflüssen versteht man in diesem Zusammenhang die breitbandigen Emissionen von Atmosphärenbestandteilen (z. B. von Wasserdampf oder Aerosol).

Zudem tritt in den tiefen Atmosphärenschichten das Problem der Sättigung auf, was dazu führen kann, dass sich die Strahldichte nicht mehr signifikant mit dem Atmosphärenparameter ändert. Dadurch gehen ebenfalls spektrale Signaturen verloren.

In den oberen Atmosphärenschichten besteht das Problem darin, dass sich die schwachen Strahldichten nicht mehr zuverlässig vom Rauschen trennen lassen. Dadurch wird eine Änderung der Strahldichten mit den Profilwerten kaum noch wahrgenommen, was zu kleinen Einträgen in den Jakobi-Matrizen führt. Unterschiedliche Größenordnungen in den Einträgen von Matrizen führen zu numerischen Beeinträchtigungen in der Genauigkeit bspw. bei der Durchführung von Matrixinversionen oder -zerlegungen, wie sie im vorliegenden Retrieval ausgiebig genutzt werden.



Man ermittelt für das HoMa-Beispiel einen globalen Informationsgehalt von etwa 51. Diese Zahl ist für sich genommen nicht aussagekräftig, sondern erhält erst eine Bedeutung, wenn man sie mit Informationsgehalten gleichartiger Rechnungen vergleicht.

Trägt man den höhenaufgelösten Informationsgehalt (Abschnitt 3.5.2, Programm *read_se.pro* in Anhang A.V) nach 3.5.1.2 und 3.5.2.1 für das Retrievalergebnis auf (Bild 23), so ergibt sich eine Kurve, deren Werte zu größeren Höhen hin abnehmen. Dieses Verhalten erklärt sich aus den nach oben hin kleiner werdenden absoluten Informationsgehaltswerten, die den Profilwerten pro Höhe zugeordnet werden können. Der Informationsgehalt enthält Ableitungen von Strahldichtewerten nach Profilwertänderungen. Deren Beträge nehmen nach oben hin ab. Der praktische Effekt ist, dass man den Informationsgehalt eines Profilwertes in 40 km Höhe nicht ohne weiteres mit dem Informationsgehalt in 8 km Höhe vergleichen kann. Man kann jedoch die entsprechenden Informationsgehalte verschieden stark regularisierter Rechnungen höhenaufgelöst miteinander vergleichen, um zu sehen, welche Rechnung in welchen Höhen einen Zugewinn oder Verlust an Information erzielt hat. Das geht natürlich nur in den Fällen, in denen das Retrieval auf Grund der besonderen Konstruktion für eine solche Analyse zugänglich ist. HoMa ist ein Verfahren, das es durch seinen Aufbau ermöglicht, solche Analysen zu bewerkstelligen. Andere Verfahren, wie das von Tikhonov scheiden an diesem Punkt prinzipbedingt aus (Abschnitt 3.5.1.2).

Dem höhenaufgelösten Informationsgehalt kann man jedoch auch ohne Vergleich bereits entnehmen, ab welcher Höhe keine neuen Informationen hinzukommen, bzw. wann die Regularisierung oder andere Einflüsse, wie Rauschen, so überwiegen, dass durch die Messung keine neuen Informationen mehr in die Rechnung einfließen. Dies ist der Fall, wenn der Informationsgehalt stagniert, also insbesondere, wie in Bild 23 zu erkennen ist, ab etwa 46 km Höhe immer um den selben Wert nahe null pendelt. Ab dieser Höhe kann man davon ausgehen, dass das Ergebnis der Rechnung hauptsächlich durch die Regularisierung bestimmt ist.

Die Anzahl der Freiheitsgrade des Signals beträgt für das aktuelle Beispiel 21, es handelt sich also um eine starke Regularisierung, da die maximale Zahl möglicher Freiheitsgrade für das Signal, wenn wir nur eine Spezies ohne Hilfsgrößen betrachten, bei 46 liegt. Dies entspricht der Anzahl der Retrievalgitterpunkte bei den vorliegenden Simulationen. Die Fragestellung war jedoch nicht, die Anzahl der Freiheitsgrade global möglichst zu maximieren, sondern nur für Bereiche, wo man davon profitiert.

Der Averaging Kernel und die daraus abgeleitete vertikale Auflösung zeigen, wie sich die Idee der profilformabhängigen Regularisierung in der Höhenauflösung niederschlägt. Man erkennt in Bild 24, dass im Bereich von 8 - 23 km und dann wieder ab etwa 40 km, wo die Regularisierung jeweils stark ist, die Höhenauflösung abnimmt und sich an den Stellen, wo die profilformabhängige Regularisierung greift, zunimmt. Die Höhenauflösung erhält somit durch die Regularisierung eine adaptive Struktur. Der entsprechende Averaging Kernel ist in Bild 24 rechts in einer topographischen Weise, gewissermaßen in „Draufsicht“, dargestellt.

Der Averaging Kernel ist eine quadratische Matrix, deren Dimension der Anzahl der Retrievalparameter entspricht. Im vorliegenden Fall hat er also die Dimension 46. Man sieht in der Darstellung die Bereiche, in denen die Regularisierung auf Grund der Profilforminformation schwächer ist, an dem „Bäuchlein“ etwas oberhalb der Mitte.

Der Averaging Kernel ist in seinen Maximaleinträgen auf eins normiert, deswegen lässt sich diese Darstellung gut nutzen, um Ergebnisse verschiedener Rechnungen hinsichtlich ihres Auflösungsvermögens zu vergleichen.

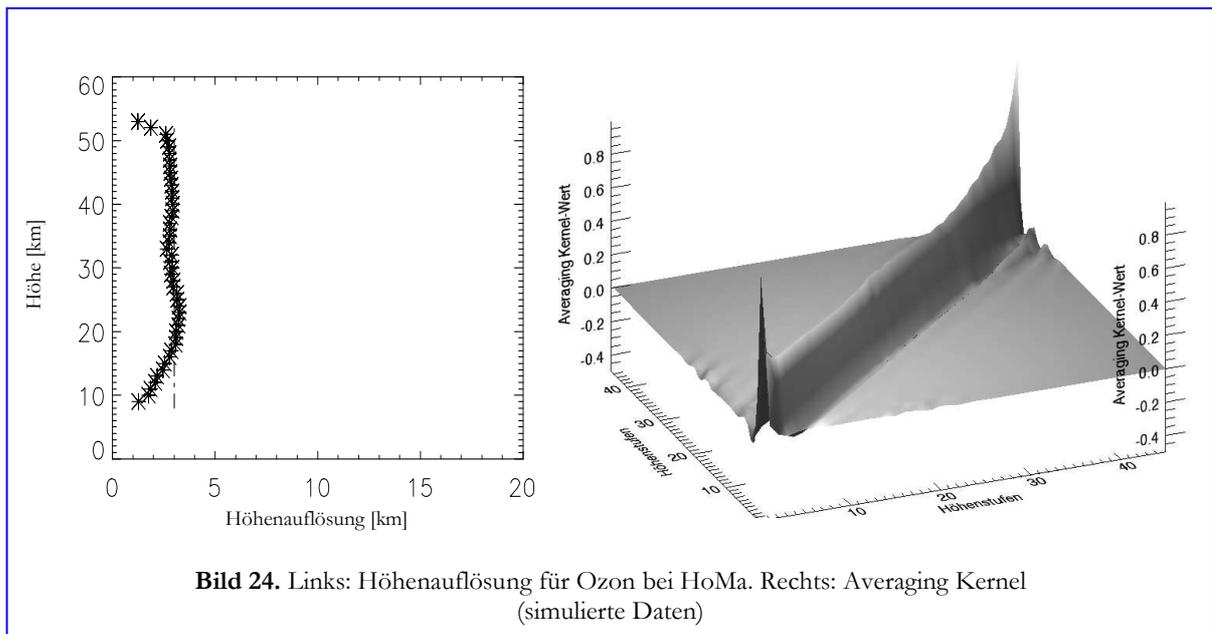
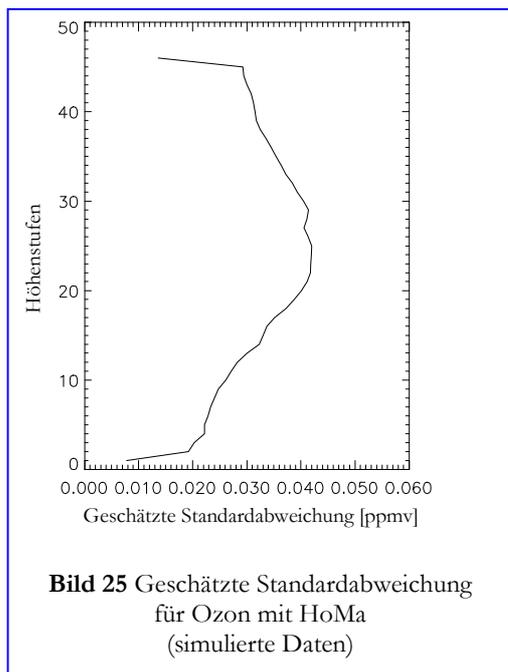


Bild 25 zeigt die geschätzte höhenaufgelöste Standardabweichung in ppmv des regularisierten Ergebnisses. Sie ist erwartungsgemäß über alle Höhenbereiche sehr klein.



Wir können somit für das aktuelle Beispiel festhalten, dass die erzielten Ergebnisse hinsichtlich der Erwartungen an das Regularisierungsverfahren zufrieden stellen. Doch wie schon angedeutet, erschließt sich der wahre Wert des vorgestellten Verfahrens erst bei einem Vergleich mit anderen Methoden.

4.1.4.4 MIPAS-Flugdaten

Die folgenden Ergebnisse liegen, im Unterschied zu den vorhergehenden Rechnungen, auf Gittern mit 15 Höhenstufen vor. Dies liegt daran, dass MIPAS im Regelbetrieb Messungen auf 17 Tangentenhöhen vornimmt, bei denen die beiden untersten Messungen oft von Wolken beeinträchtigt sind. Daher wählen wir ein Höhengitter, das von 12 km bis 68 km reicht, wobei das Gitter nicht äquidistant angenommen ist, sondern nach oben hin gröber wird (Anhang A.IV). Dadurch reduziert sich die Menge der Messdaten und der zu

leistende Rechenaufwand erheblich. Die absoluten Zahlen in den folgenden Betrachtungen lassen sich somit zwar nicht mit den Zahlen aus den Simulationen vergleichen. Das ist aber hinsichtlich eines Vergleiches der beschriebenen Verfahren mit Blick auf ihre Eigenschaften relativ zueinander unerheblich.

Die Messungen stammen aus dem MIPAS-Orbit 2081, Scan 21. Die geografischen Koordinaten des Tangentialpunkts der obersten Messung (erster Sweep) lauten 5,7 Grad nördliche Breite und -23,4 Grad westliche Länge. Es handelt sich also um äquatoriale Verhältnisse. Das Datum des Scans ist der 24. Juli 2002. Der Orbit wurde ausgewählt, weil er bereits Gegenstand einer Studie war, bei der Retrievalverfahren verschiedener wissenschaftlicher Institutionen miteinander verglichen wurden (Abschnitt 2.3). Dadurch werden die im Folgenden dargestellten Untersuchungen in einen Kontext gestellt und die Ergebnisse können hinsichtlich ihrer Plausibilität eingeordnet werden. Dies ist wichtig, weil Referenzdaten naturgemäß nicht vorhanden sind. Wegen des Fehlens von Referenzdaten fallen die Betrachtungen zu relativen und absoluten Abweichungen bezüglich dieser Daten weg. Ansonsten verfolgen wir bei der Analyse die gleiche Strategie wie in 4.1.4.1. Die Init-Guess- und *a priori*-Profile sind gegeneinander um 5 km höhenversetzt.

4.1.4.5 Anwendung von HoMa auf Flugdaten

In Abschnitt 3.2 wurde erwähnt, dass es sich beim Retrieval als vorteilhaft herausgestellt hat, die jeweiligen Spezies in einer festgelegten Reihenfolge abzuarbeiten. Abschnitt 3.3 beschreibt den Strahlungstransfer im Infraroten grundsätzlich. Dabei wurde die tragende Rolle der Temperatur klar. Es liegt also nahe, das Temperaturprofil möglichst zuerst zu berechnen, damit man ein realistisches Temperaturprofil zum Retrieval der nachfolgenden Spezies zur Verfügung hat. Für die folgenden Ergebnisse wurden die selben Werte für α_i verwendet wie bei den simulierten Daten.

Temperatur

Die folgenden Abbildungen zeigen deshalb zuerst das jeweils retrievede Temperaturprofil und dann das auf der Grundlage dieses Temperaturprofils bestimmte Spurengasprofil von Ozon. Man kann grob vorwegnehmen, dass ein Retrieval ohne genau bestimmtes Temperaturprofil keine zuverlässigen Ergebnisse produzieren kann. Im Falle der Simulationen war das angenommene Temperaturprofil exakt bekannt, im realen Messfall ist eine Abschätzung nur begrenzt im Rahmen von Vorwissen bspw. aus klimatologischen Quellen (ECMWF) möglich.

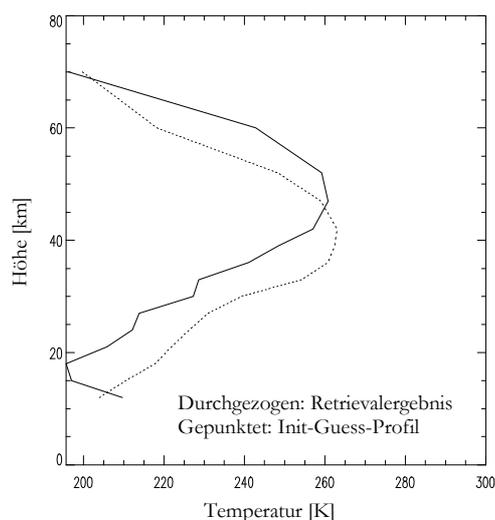


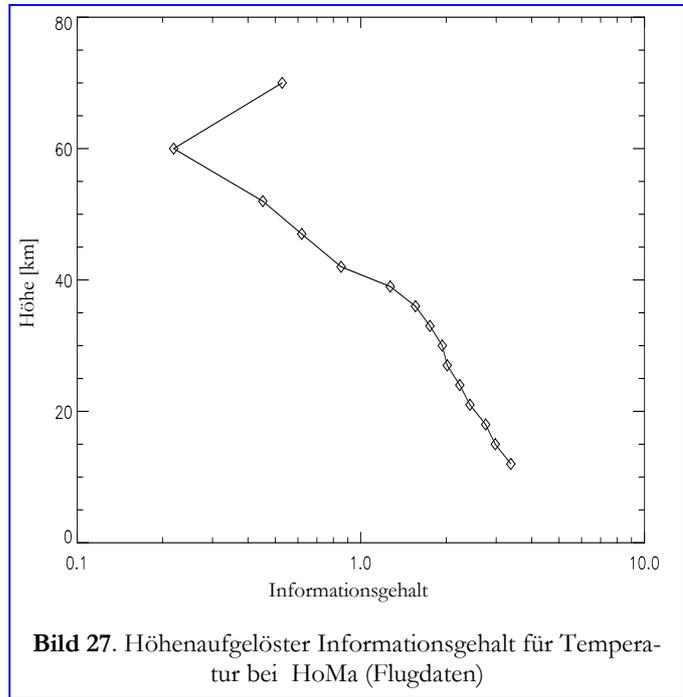
Bild 26. Temperaturprofil bei Regularisierung mit HoMa (Flugdaten)

Bild 26 zeigt das Temperaturprofil für den mit HoMa regularisierten Fall. Der Skalierungsparameter k wurde mit 100 festgelegt. Es ist gut zu erkennen, dass das berechnete Profil (durchgezogene Linie) sich von Startwert (gestrichelte Linie) löst. In den unteren Bereichen des Profils ist zudem die Inversion bis zum Beginn der Stratosphäre zu erkennen. Dieser Teil ist im Init-Guess-Profil überhaupt nicht enthalten und im verwendeten *a priori*-Profil nur ansatzweise. Die errechneten Werte decken sich, was die Lage des Temperaturma-

ximums und –minimums sowie den Verlauf des Profils angeht, weitgehend mit den Ergebnissen der AMIL2DA-Studie für diesen Orbit [63]. Auch Vergleiche mit klimatologischen ermittelten Tabellenwerten bestätigen dies [44].

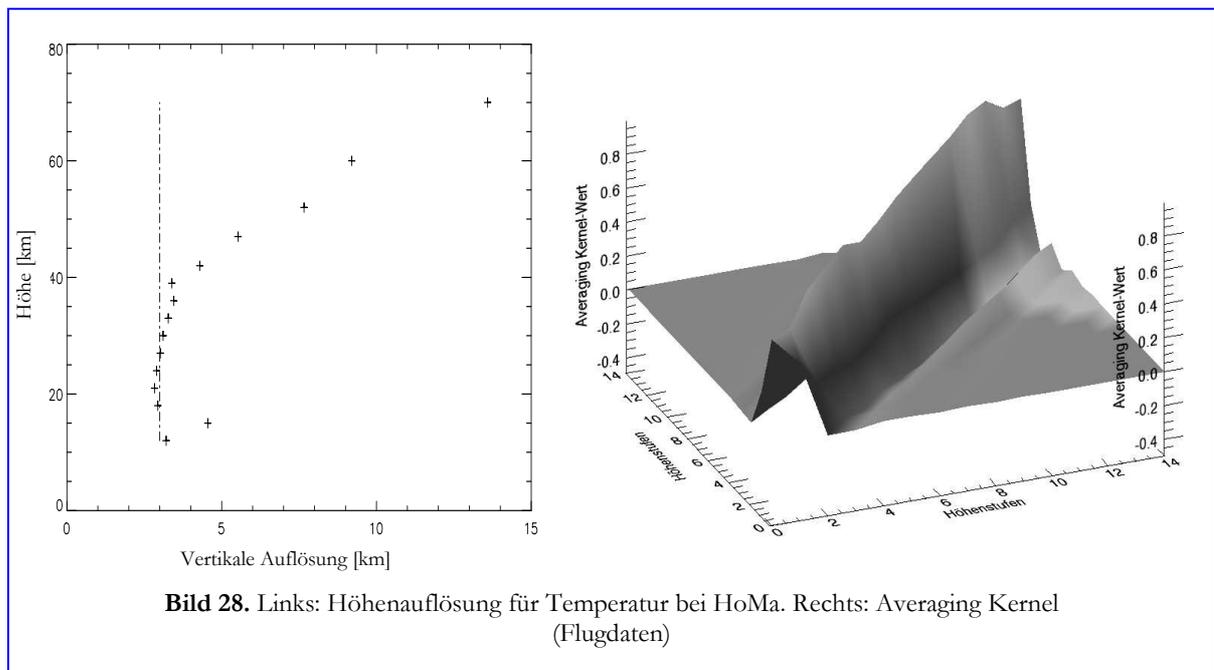
Das lässt den Schluss zu, dass das gezeigte berechnete Profil den Temperaturverlauf der Atmosphäre bei den gegebenen Orbitbedingungen hinreichend genau beschreibt. Das Profil zeigt einen im Großen und Ganzen glatten Verlauf und ist frei von extremen Überschwingeffekten, die typisch sind für Profile, die starke Änderungen im Profilverlauf aufweisen.

Das Ergebnis weist 11,4 Freiheitsgrade auf und ist damit als schwach regularisiert einzustufen. Wir erinnern uns: die maximale Anzahl Freiheitsgrade entspricht der Zahl der Retrievalgitterpunkte, in diesem Fall also 15. Man ermittelt einen globalen Informationsgehalt von 26,9 für das Temperaturprofil.



Der höhenaufgelöste Informationsgehalt (Bild 27) zeigt hohe Werte in den interessanten Gebieten zwischen 12 km und 40 km und wird erst oberhalb von 50 km diffus, wenn man bei zwei Punkten überhaupt davon sprechen kann. Bemerkenswert ist, dass die Kurve sehr steil ist.

Betrachten wir noch die erzielte Höhenauflösung in Bild 28. Man erkennt wieder einen stark pro-



filformadaptiven Verlauf der Höhengauflösung. Man sieht eine Zunahme der Höhengauflösung mit Abnahme der Regularisierungsstärke (vergleiche Averaging Kernel), die sich durch die Berechnungsformeln für die profilformabhängige Gewichtung aus Abschnitt 4.1.3 und dem Zusammenhang des Regularisierungsterms mit dem Averaging Kernel ergibt. Die erreichte Höhengauflösung liegt bis in eine Höhe von 60 km in einem vertretbaren Bereich zwischen drei und sieben Kilometer.

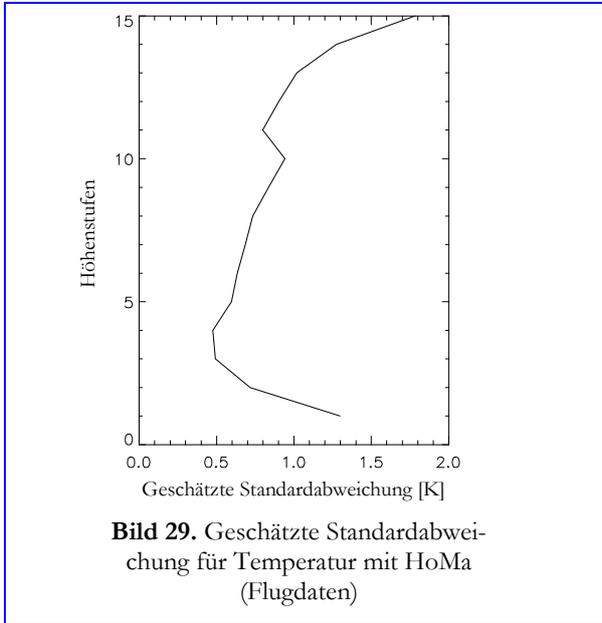


Bild 29. Geschätzte Standardabweichung für Temperatur mit HoMa (Flugdaten)

Die Kennzahlen und Eckwerte für die errechnete Temperatur sehen vielversprechend aus und man kann durchaus davon ausgehen, dass man damit eine belastbare Grundlage für die weiteren Berechnungen geschaffen hat.

Bild 29 zeigt den höhengauflösten Verlauf (Höhenstufen) der geschätzten Standardabweichung für das mit HoMa regularisierte Temperaturretrieval in Kelvin. Die Abweichung liegt zwischen 1,75 K und 0,45 K und zeigt einen fast konstanten Verlauf von der siebten Höhenstufe bis zur dreizehnten (Zuordnung Höhenstufen-Höhengitter siehe (Anhang A.IV).

Ozon

Im nächsten Schritt sehen wir uns die Ergebnisse für ein Ozonretrieval aus MIPAS-Flugdaten auf Grundlage der eben präsentierten Temperaturdaten an.

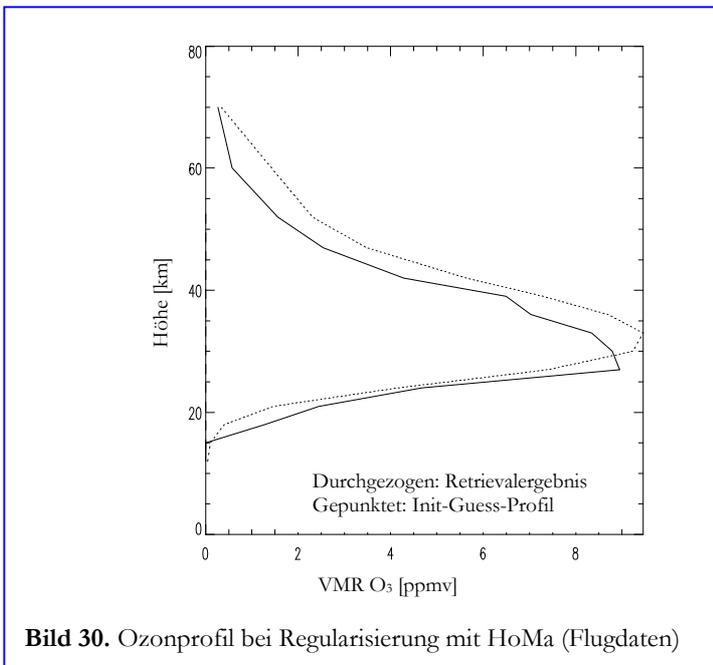


Bild 30. Ozonprofil bei Regularisierung mit HoMa (Flugdaten)

Bild 30 illustriert das ermittelte Ozonprofil für $k = 300$. Es zeigt einen markanten Verlauf, besonders an der Oberseite des Profils ist eine Ausbuchtung zu erkennen, deren Ursprung sich aber nicht zweifelsfrei auf das Retrieval schieben lässt, sondern es muss die Möglichkeit in Betracht gezogen werden, dass es sich um einen natürlichen Effekt handelt. Ansonsten ist das Profil sehr glatt und zeigt keine Auffälligkeiten. Das Retrieval löst sich vom Init-Guess-Profil und die absoluten ppmv-Werte sowie die Lage des Maximums entsprechen den Erwartungen, die man für dieses Profil aus anderen Berech-

nungen wie bspw. AMIL2DA hat. Der Informationsgehalt des Ergebnisses liegt bei 23 und die Zahl der Freiheitsgrade beträgt 10,9. Wir erhalten also, wie schon im Fall der Temperatur, ein ansprechendes Ergebnis bei insgesamt nur leichter, aber gezielt eingesetzter, Regularisierung.

Der höhenaufgelöste Informationsgehalt zeigt ähnlich wie bei der Temperatur bis etwa 50 km Höhe eine relativ schwache Abnahme der Informationsgehalte. Vergleicht man den Verlauf des Graphen mit den aus Simulationsdaten berechneten Informationsgehalten aus Bild 23 mit den Daten aus Bild 31, so erkennt man einen schwächeren Abfall der Werte aus den Flugdaten über den gleichen Höhenbereich. Dies rührt von einer noch nicht idealen Parametrisierung der instrumentellen Linienformdaten her.

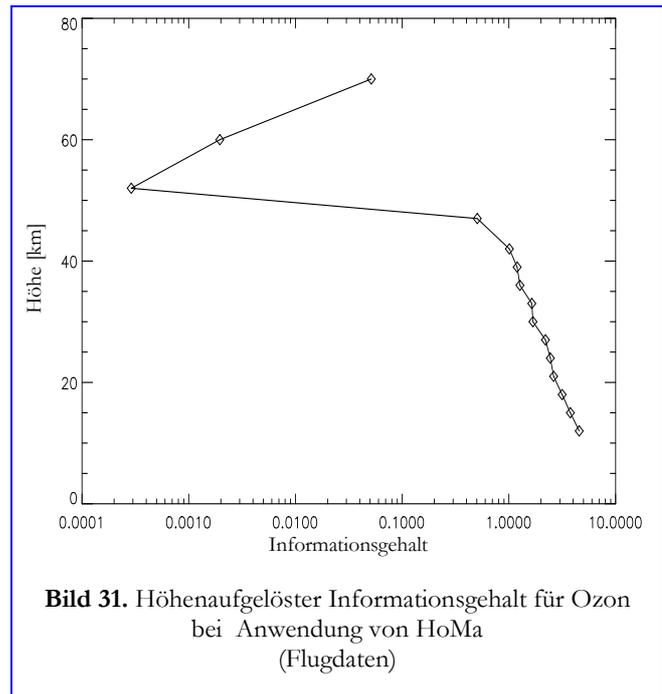


Bild 31. Höhenaufgelöster Informationsgehalt für Ozon bei Anwendung von HoMa (Flugdaten)

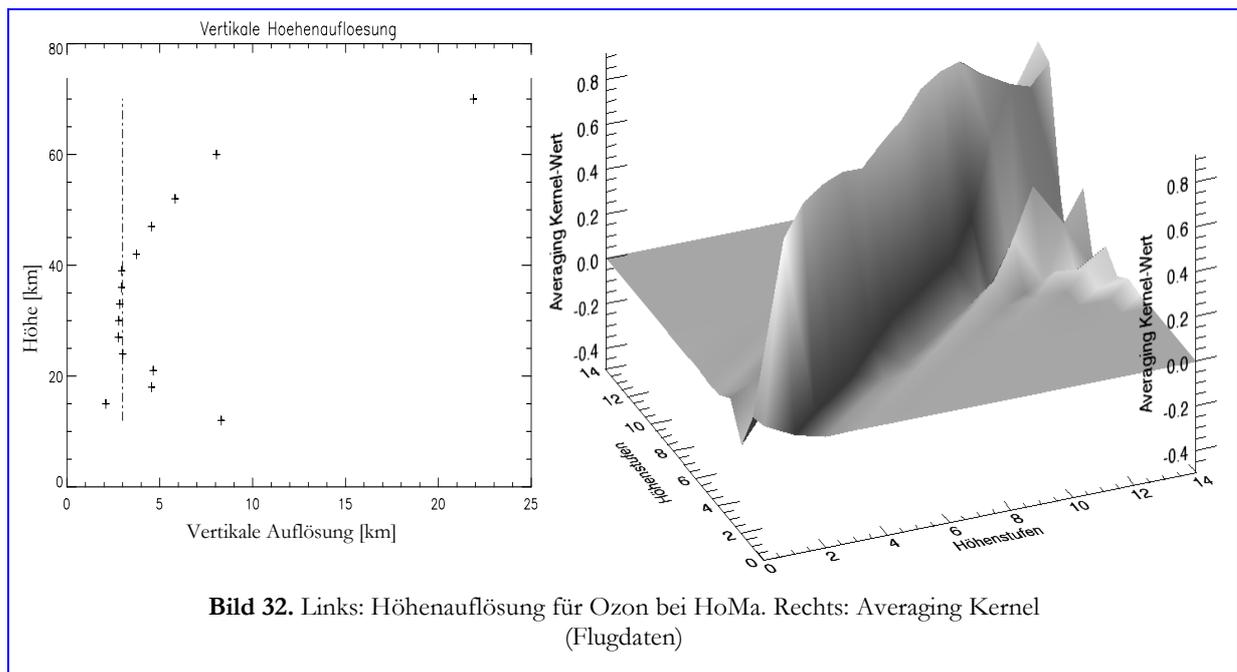


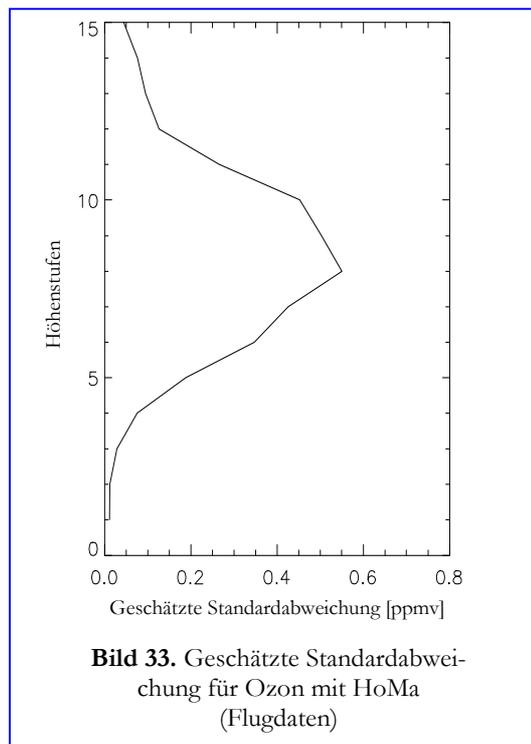
Bild 32. Links: Höhenauflösung für Ozon bei HoMa. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)

Die erzielte Höhenauflösung des Ozonretrievals ist in Bild 32, neben der Darstellung des zugehörigen Averaging Kernels, aufgetragen. Wieder wird ein strukturierten Verlauf der Höhenauflösung, die sich an der Stärke der Regularisierung und somit letztlich an der Profilform orientiert, erkennbar. Die Auflösung liegt bis 60 km Höhe in einem Bereich von drei bis sieben Kilometern,

wobei der Bereich, in dem die Auflösung bei 3 km liegt, sich über die „interessanten“ Gebiete erstreckt, die den Ozonbauch beinhalten.

In Bild 32 kommt besonders deutlich der Zusammenhang der vertikalen Auflösung mit dem Averaging Kernel heraus. Im oberen Teil der rechten Darstellung, sieht man das Auffächern der Spalten des Averaging Kernels, was mit einer starken Abnahme der vertikalen Auflösung einhergeht, wie man Bild 32 links entnimmt. Die Breite der Spalten des Averaging Kernels ist wie in Abschnitt 3.5.1.1 beschrieben, ein Maß für das vertikale Auflösungsvermögen.

Bild 33 zeigt den Verlauf der geschätzten Standardabweichung für das mit HoMa regularisierte Ozonretrieval in ppmv über die Höhenstufen aufgetragen. Der Verlauf ähnelt dem Profilverlauf. Dies rührt aus der Profilformabhängigkeit der Regularisierung. Wir erinnern uns, dass die geschätzte Standardabweichung aus den quadrierten Diagonalelementen der Informationsmatrix besteht. Diese Matrix wird stark vom Regularisierungsterm beeinflusst (siehe (3.26)). Da die Regularisierung bei HoMa dort schwächer wird, wo hohe Profilwerte auftreten, ergibt sich der Verlauf in Bild 33, gewissermaßen als Fingerabdruck des Profils.



Wir wenden uns nun zunächst der Maximalen-Entropie-Methode zu und untersuchen nach der Erklärung der theoretischen Zusammenhänge die Ergebnisse, die unter Anwendung der Maximalen-Entropie-Methode im Rahmen von Simulationen und unter Zugrundelegung von realen Flugdaten entstanden sind.

Im Anschluss daran, ziehen wir etablierte Verfahren für weitere Vergleiche heran und gewinnen dadurch einen Gesamtüberblick sowie eine Einschätzung der vorgestellten Verfahren.

4.1.5 Die Maximale-Entropie-Methode (MEM2)

Die Maximale-Entropie-Methode in der Form, wie sie in der vorliegenden Arbeit genutzt wird, zielt darauf ab, das Extremum des Vektors der zweiten Differenzen, der aus dem Profil abgeleitet wird, zu bestimmen. Dadurch wird eine starke Glättung des zu retrievelnden Profils erreicht. Auf Grund der verwendeten Parametrisierung erhält die Methode den Zusatz „2“, Näheres dazu in den folgenden Abschnitten.

4.1.5.1 Beschreibung der Methode

In Abschnitt 3.5.1.2, Gleichung (3.38), wurde die Definition des Shannon-Informationsgehalts für diskrete Informationssysteme als Analogie zur physikalischen Entropie gezeigt

$$S(P) = -k \sum_i p_i \ln p_i \quad (4.18)$$

k	in der Informationstheorie = 1, in der Thermodynamik die Boltzmann-Konstante
p_i	Wahrscheinlichkeit, dass das System sich im Zustand i befindet
P	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

In der Physik ist die Entropie ein Maß für die Unordnung eines Systems. In der Informationstheorie ist die Entropie ein Maß für den Informationsgehalt einer Nachricht.

Die Kernaussage von Gleichung (4.18) lässt sich folgendermaßen formulieren: Die Entropie einer Gesamtinformation („Nachricht“) ist die Summe der Entropien aller Einzelinformationen („Einzelnachrichten“).

Ausgehend von dieser Überlegung kann man für die Entropie im informationstechnischen Sinne folgende Eigenschaften angeben

$$0 \leq S(P) \leq \ln(n) \quad (4.19),$$

wobei n die Gesamtzahl von Informationen ist. D. h. insbesondere die Entropie hat eine untere und eine obere Schranke.

Das Minimum $S(P) = 0$ wird angenommen, wenn keinerlei Ungewissheit über die von P erzeugte Information besteht. Das bedeutet P darf nur ein Element x haben und dieses Element hat die Wahrscheinlichkeit eins, mathematisch heißt das

$$S(P) = -p(x_i) \cdot \ln(p(x_i)) = -1 \ln(1) = 0 \quad (4.20)$$

$S(P) = \ln(n)$ nimmt ein Maximum genau dann an, wenn völlige Ungewissheit über die von P erzeugte Information herrscht, d. h. wenn alle Elemente $x_i, i = 1..n$, die gleiche Wahrscheinlichkeit $1/n$ haben.

$$S(P) = -\sum_{i=1}^n p_i \cdot \ln(p_i) = -n \cdot \frac{1}{n} \cdot \ln\left(\frac{1}{n}\right) = -\ln\left(\frac{1}{n}\right) = \ln(n) \quad (4.21)$$

4.1.5.2 Aufbau des Operators

Bei der Maximalen-Entropie-Methode nimmt der Nebenbedingungsterm $N(\vec{x}_k)$ in (3.25) folgende Gestalt an [52]

$$\mathcal{H}(\vec{x}) = -\gamma \sum_{i=1}^N q_i \ln(q_i) \quad (4.22)$$

$$\text{mit } q_i = \frac{x_i}{\sum_{i=1}^N x_i} \quad (4.23)$$

$\gamma < 0$ Regularisierungsparameter
 x_i Profilwerte

Der Profilvektor \vec{x} wird als Ergebnis einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aufgefasst. Gleichung (4.22) hat die in (4.19) - (4.21) geschilderten Eigenschaften. Der Ansatz (4.22) kann weiter verallgemeinert werden, indem man nicht die Profilwerte zugrunde legt, sondern eine Funktion davon, also

$$\gamma_\alpha S_\alpha(\vec{x}) = -\gamma_\alpha \sum_{i=1}^N q_i \log q_i \quad (4.24)$$

$$q_i = \frac{p_i}{\sum_{i=1}^N p_i} \quad (4.25)$$

$$\vec{p} = \Delta^\alpha \vec{x}, \quad \alpha = 0, 1, 2, \dots \quad (4.26)$$

$\gamma_\alpha < 0$ Regularisierungsparameter
 Δ^α Diskretisierungsoperator in der
 Art eines Tikhonov-Operators (siehe (4.28))

Wir treffen für die oben dargestellten Größen die folgenden Annahmen [52]

$$\left. \begin{array}{l} \vec{p} = \Delta^\alpha \vec{x} \\ \alpha = 2 \end{array} \right\} \Rightarrow p_i = x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} + 2(x_{\max} - x_{\min}) + \zeta, \quad (4.27)$$

mit

$i = 1, \dots, N$ und $x_0, x_{N+1} = 0$ sowie $\zeta \approx 10^{-15}$ als globale rechnerische Hilfsgröße

somit ergeben sich die entscheidenden Bauteile von (4.24) zu

$$p = \sum_{i=1}^N p_i = -(x_1 + x_n) + N(2(x_{\max} - x_{\min}) + \zeta) \quad (4.28)$$

In diesem Fall sind wir also daran interessiert, eine Gleichverteilung der p_i zu erreichen. Dies führt dazu, dass das Ergebnis sich jeweils lokal einem Polynom zweiter Ordnung annähert, das die Lösung (das Ergebnisprofil) am besten, mithin am glattesten, beschreibt [52]. Wegen der Wahl von $\alpha = 2$ bezeichnen wir die Methode im Weiteren kurz als MEM2 (**M**aximale-**E**ntropie-**M**ethode für $\alpha = 2$). Wählt man andere Werte für α , ergeben sich unterschiedlich ausgestaltete Operatoren, grob gesagt ist α ein Maß dafür wie viele Profilwerte in (4.27) pro p_i herangezogen werden.

Es sollen explizit keine periodischen Randbedingungen für die Profile gelten, weil solche Randbedingungen für atmosphärische Profile i. d. R. physikalisch nicht haltbar sind, d. h. es werden insbesondere beliebige Profilverläufe zugelassen. Man kann sich i. A. nicht darauf verlassen, dass Profile in definierten Höhen jeweils bestimmte Profilwerte aufweisen, wie es bei periodischen Randbedingungen nötig wäre. Dies führt zwar bei der Berechnung der einzelnen Ableitungen von (4.22), wie sie wegen (3.25) nötig sind, zu erheblich komplexeren Termen, aber es ist gewährleistet, dass man nicht zusätzliche Fehler durch den Regularisierungsterm verursacht. Die dazugehörigen Ausdrücke finden sich im Anhang A.I, weil sie an dieser Stelle nicht zu einem tieferen Verständnis beitragen.

Dem Autor ist aus der Literatur kein Fall bekannt, bei dem die Methode unter Zugrundelegung der genannten Annahmen auf das operationelle Retrieval von Spurengasprofilen angewendet wurde, somit stellen die folgenden Betrachtungen Neuland dar.

4.1.5.3 Die Nebenbedingung bei MEM2

Mit den getroffenen Vereinbarungen können wir die Nebenbedingung für MEM2 somit wie folgt formulieren

$$S_\alpha(\vec{x}) = -\sum_{i=1}^N \frac{p_i}{\bar{p}} \log\left(\frac{p_i}{\bar{p}}\right) \quad (4.29).$$

Die Nebenbedingung bei MEM2, im Sinne von (3.12), lautet somit

$$\gamma_\alpha S_\alpha(\vec{x}) \quad (4.30).$$

Das Ziel des Retrievals ist es dann, in diesem Fall folgendes Minimum zu bestimmen

$$\min(\mathcal{D}[(\vec{y} - F(\vec{x})), \gamma_\alpha S_\alpha(\vec{x})]) \quad (4.31),$$

wobei \mathcal{D} eine Norm ist (z.B. die euklidische Norm).

Man ist also daran interessiert, dass alle Werte der zweiten Differenz p_i die gleiche Unsicherheit im Informationsgehalt haben, damit wird letztlich eine Gleichverteilung dieser Werte erreicht. Die praktische Nebenwirkung ist eine Glättung des Profils. Die Nebenbedingung kann durch (4.30) zu einer Lösung im Sinne von (3.12) beitragen, weil $\gamma_\alpha < 0$ vorausgesetzt wird.

Wenn also gemäß (4.22) die Entropie der Eingangsgröße (Funktion der Profilwerte) maximiert wird, so erzielt man durch eine geschickte Wahl von $\gamma_\alpha < 0$, dass $\gamma_\alpha S_\alpha(\vec{x})$ ein Minimum annimmt.

Die Bestimmung des Minimums von $S_\alpha(\vec{x})$ nach (4.20) würde für den vorliegenden Fall keine Lösung darstellen, da die Voraussetzung in diesem Fall wäre, dass man jeweils nur einen Profilwert bzw. eine Differenz betrachten würde und dass man diesen Wert bereits mit der Wahrscheinlichkeit eins, also exakt, kennen müsste. Das ist nicht möglich, wie wir in Kapitel 3 gesehen haben. Eine Gewichtung mit einer Matrix, wie bei anderen Regularisierungsverfahren, ist für (4.30) nicht möglich, weil (4.29) ein Skalar ist und auch gar nicht nötig, weil der Profilvektor selbst die Form der Nebenbedingung bestimmt.

4.1.5.4 Eigenschaften und Besonderheiten der Methode

Der Vorteil der Methode gegenüber dem Tikhonov-Verfahren besteht in der profilformabhängigen und daher in einer unter Umständen besser höhenangepassten Glättung. Da der Zweck des Verfahrens darin besteht, eine gleichförmige Verteilung von Information zu erreichen, werden Teile des Profils, die unterschiedliche Informationen in sich tragen („Zacken“, Unregelmäßigkeiten) schwächer gewichtet, also geglättet, wohingegen Teile, deren Informationsgehalt nahe des gleichverteilten Wertes liegen, stärker gewichtet werden. Dies kann zwar in Teilen zu einem unruhigeren Profilverlauf führen, ist jedoch in der Gesamtheit, profilformabhängig, glättend wirksam.

Der Vorteil gegenüber dem Optimal Estimation-Verfahren (3.4.2.1) besteht in der Unabhängigkeit von MEM2 von *a priori*-Wissen. Dadurch wird eine mögliche Quelle von unrichtigen Annahmen ausgeklammert. Weiterhin existiert bei MEM2 nur ein freier Parameter, der Regularisierungsparameter γ_α .

MEM2 ist zudem ein semi-adaptives Regularisierungsverfahren, d. h. die Berechnung der Ableitungen erfolgt nach jeder Iteration auf Grundlage der verbesserten Profile erneut, wobei jedoch der Regularisierungsparameter γ_α pro Iteration unverändert bleibt. Für die Bestimmung von γ_α war bis zur Fertigstellung der vorliegenden Arbeit noch kein vollständig operationelles Verfahren vorhanden, das sich in der verwendeten Retrievalrechnung hätte einsetzen lassen. Die in der Arbeit verwendeten Werte sind empirisch anhand einer Vielzahl von Testrechnungen ermittelt worden.

MEM2 wird in der Literatur bei seinen Anwendungen in Temperaturretrievals als Verfahren beschrieben, das sich besonders für Fälle eignet, bei denen man von einem zuverlässigen Initial-Guess-Wert und einem erwarteten ruhigen Profilverlauf (glatte 2. Ableitung des Profils) für die zu retrievelnde Spezies ausgehen kann [52].

Diese Aussage wird u. a. Gegenstand der folgenden Untersuchungen sein, bei denen wir wie im Fall von HoMa zuerst Ergebnisse von Simulationsrechnungen untersuchen und dann MEM2 auf reale Flugdaten anwenden.

4.1.6 MEM2 in der vorliegenden Arbeit

Um die Wirkung von MEM2 zu demonstrieren, werden Ergebnisse von Beispielrechnungen gezeigt, die im Rahmen von Simulationen entstanden sind. Im Anschluss daran wird die Tauglichkeit des Verfahrens anhand echter MIPAS-Daten untersucht.

4.1.6.1 Simulationsdaten

Das Setup für die Simulationen ist im Prinzip identisch mit dem im Fall von HoMa, mit einigen systembedingten Anpassungen.

Zum einen fällt für MEM2 die Notwendigkeit eines *a priori*-Profils weg, zum anderen wurden die Simulationen mit einem möglichst guten Init-Guess-Profil gestartet, denn in 4.1.5 wurde die Vermutung geäußert, dass die Maximale-Entropie-Methode auf ein gutes Startprofil angewiesen ist. Die Feinstrukturen im Referenzprofil wurden beibehalten, weil zu erwarten ist, dass die Methode wegen des feinen 46-Punkte-Retrievalgitters, trotz der stark glättenden Wirkung des Verfahrens, vorhandene Feinstrukturen auflöst. γ wurde mit $-6,5 \cdot 10^4$ festgelegt.

4.1.6.2 Größen zur Fehleranalyse in der Simulation

Es werden dieselben Größen wie in Abschnitt 4.1.4.2. zur Fehleranalyse verwendet. Dies sind

- Relative Standardabweichung (rel. rms)
- Absolute Standardabweichung (abs. rms)
- Relative Differenz

Die Größen sind wieder jeweils in den unteren Teilen der entsprechenden Abbildungen höhenaufgelöst dargestellt.

4.1.6.3 Anwendung auf Simulationsdaten

Bild 34 zeigt das Ergebnis eines Retrievallaufes für Ozon unter Anwendung der Maximalen-Entropie-Methode. Die Feinstrukturen werden, trotz der stark glättenden Wirkung, nachgebildet. In den oberen und unteren Bereichen des Profils, wo die ppmv-Werte sehr gering sind, zeigen sich starke relative Abweichungen von deutlich mehr als 10 %. Der absolute Fehler hält sich mit etwa 0,33 ppmv in den Grenzen, die wir aus den anderen Berechnungen erwarten können. Für das Ergebnis ermittelt man einen globalen Informationsgehalt von 76,4 bei 24,3 Freiheitsgraden. Der Wert für den Informationsgehalt ist einerseits sicherlich auf den idealen Init-Guess zurückzuführen, andererseits auf den, gegenüber den anderen Simulationen, hohen Anteil von Freiheitsgraden.

Die Höhenauflösung ist, wie man Bild 35 entnimmt, über alle Höhenbereiche besser als 3 km und weist eine leichte Adaption an den Profilverlauf auf, die von der direkten Abhängigkeit des Regularisierungsterms vom Profil herrührt. Im rechten Teil der Abbildung ist der Averaging Kernel in der bereits bekannten Weise dargestellt. Man erkennt die „Aufweichung“ in den middle-

ren Höhenbereichen, die mit der abnehmenden Höhenauflösung im linken Teil des Bildes korrespondiert.

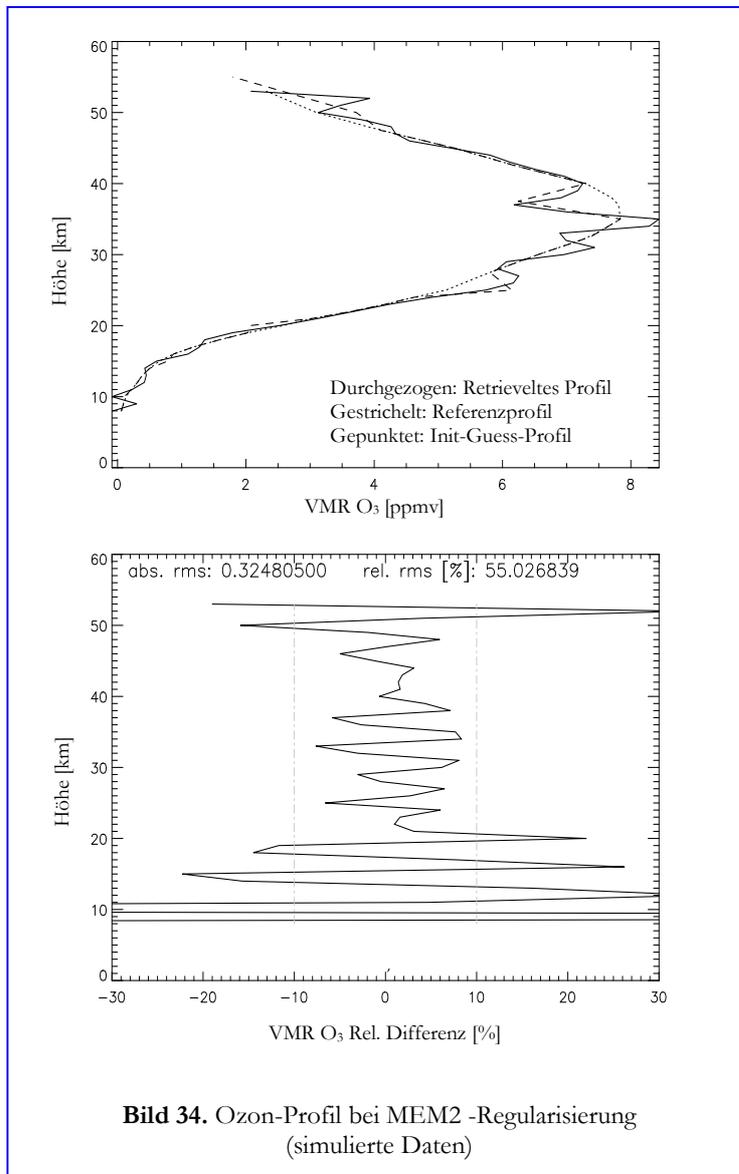


Bild 36 zeigt den Verlauf der geschätzten Standardabweichung für das Ergebnis mit MEM2. Sie liegt in den Maximalbeträgen um einen Faktor 4 niedriger als im Fall von HoMa. Der Profilverlauf zeichnet sich nicht ganz so deutlich ab.

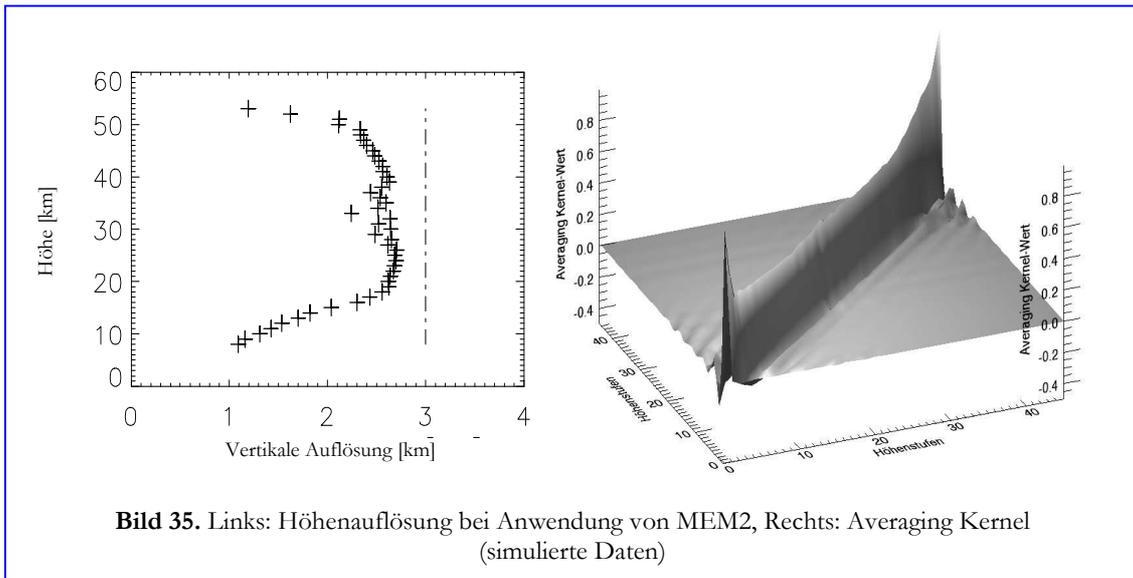


Bild 35. Links: Höhengitter bei Anwendung von MEM2, Rechts: Averaging Kernel (simulierte Daten)

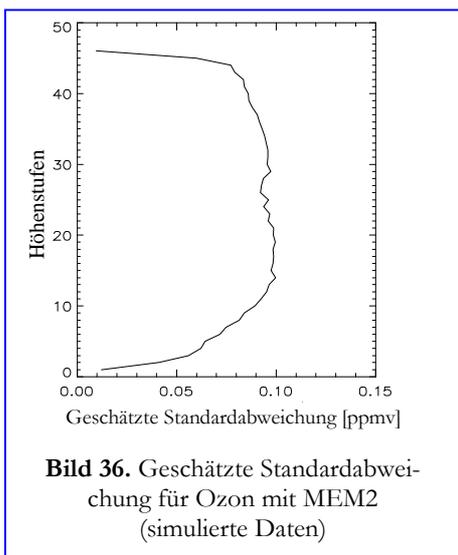


Bild 36. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit MEM2 (simulierte Daten)

4.1.6.4 MIPAS-Flugdaten

Wie schon im Falle von HoMa liegen die folgenden realen Daten auf einem nach oben hin gröber werdenden Höhengitter von 12 km bis 70 km vor. Die ansonsten verwendeten Parameter sind wieder dieselben, wie im Fall der HoMa-Regularisierung. Dadurch wird die größtmögliche Vergleichbarkeit gewährleistet, was insbesondere für die Maximale-Entropie-Methode wichtig ist, weil sie, wie wir in Abschnitt 4.1.5 gesehen haben, grundsätzlich von den herkömmlichen Methoden verschieden ist.

Der empirisch ermittelte Regularisierungsparameter γ für die Temperatur beträgt $-2,6 \cdot 10^4$ und für Ozon $-6,5 \cdot 10^4$.

4.1.6.5. Anwendung vom MEM2 auf Flugdaten

Die Anwendung der Maximalen-Entropie-Methode bei operationellen Spurengasretrievals ist, wie bereits erwähnt, weitgehend Neuland. Zwar trifft dies bereits auf die gezeigten Simulationsdaten zu, aber die Anwendung auf reale Flugdaten ist sicherlich die Königsdisziplin, in der sich ein Verfahren beweisen muss.

Wir betrachten, wie bereits im Fall von HoMa, zuerst die Ergebnisse der maximalen Entropie-Methode im Zusammenhang mit der Temperatur als wichtige Basisgröße und wenden uns danach dem Spurengas Ozon zu.

Temperatur

Bild 37 zeigt das Temperaturprofil, das analog schon im HoMa-Fall (Bild. 26) berechnet wurde. Alle Parameter sind identisch bis auf das verwendete Regularisierungsverfahren. Man erkennt sehr gut, dass sich das Ergebnis von Init-Guess-Profil löst und eine eigenständige Lösung annimmt. Auch in diesem Fall ist die Inversion in den unteren Teilen des Profils zu erkennen, obwohl sie in den Startprofilen nicht enthalten ist. Die Höhe und Amplitude des Temperaturmaximums stimmen im Wesentlichen mit den Ergebnissen überein, die man erwarten konnte.

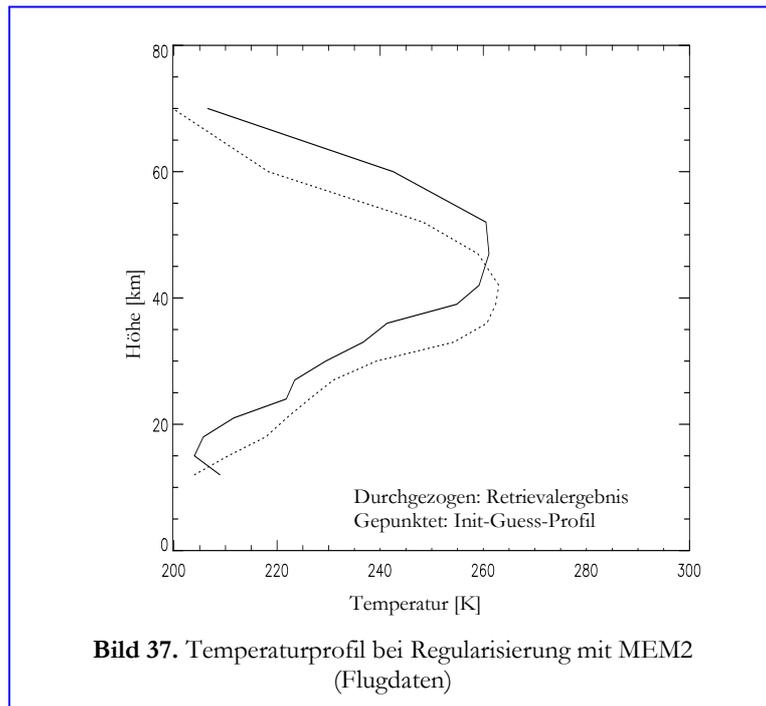


Bild 37. Temperaturprofil bei Regularisierung mit MEM2 (Flugdaten)

Lediglich die Lage und Ausprägung des Minimums bei etwa 15 km scheint zu hoch zu sein. Wie bei HoMa erkennt man auf der Unterseite des Profils einen strukturierten Verlauf, während der Teil oberhalb von 40 km sehr glatt ist. Dies hängt natürlich auch mit dem nach oben hin gröber werdenden Gitter zusammen.

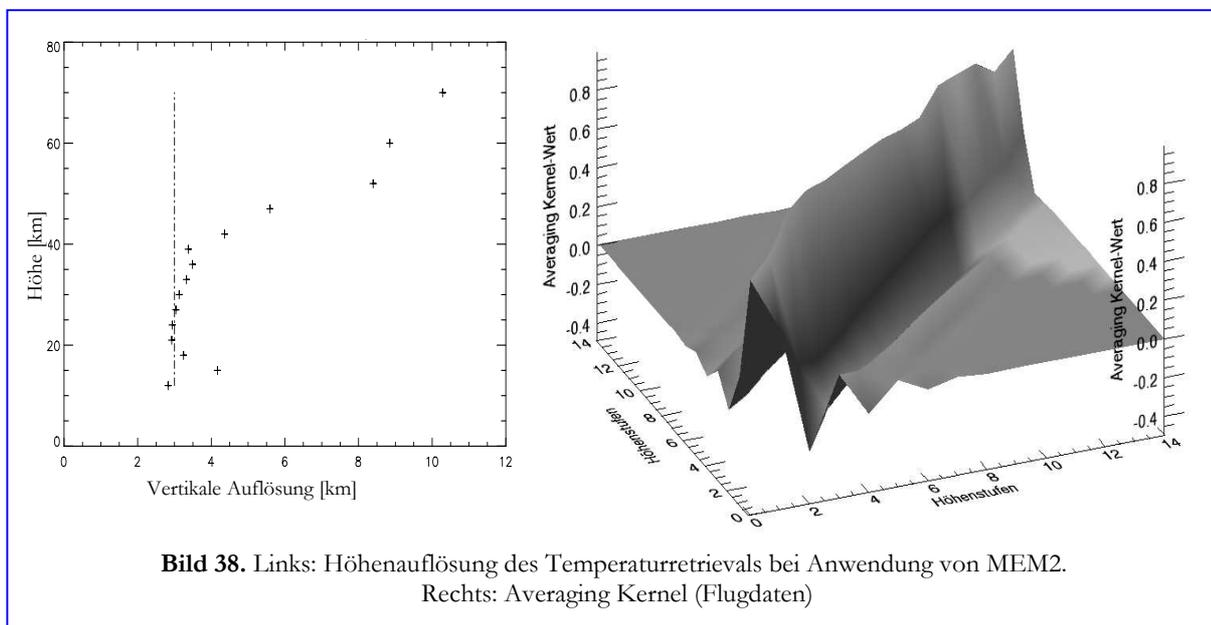
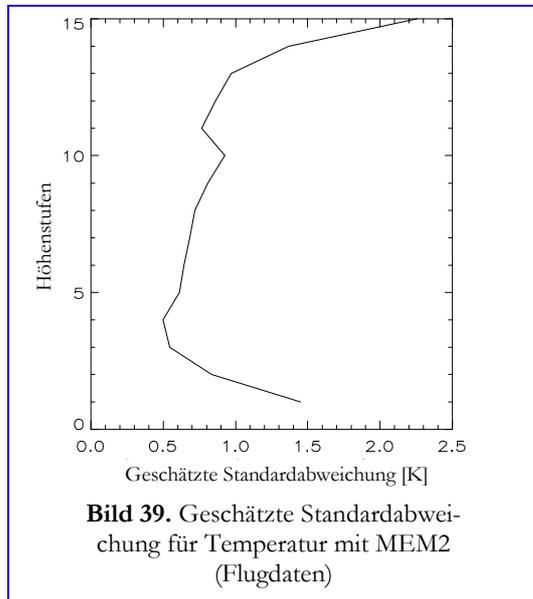


Bild 38. Links: Höhenauflösung des Temperaturretrievals bei Anwendung von MEM2. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)

Das Ergebnis weist einen Informationsgehalt von 34,5 bei 11,7 Freiheitsgraden auf und ist damit kaum regularisiert. Dadurch erklären sich auch die relativ stark ausgeprägten Strukturen an der Unterseite des Profils. Einen höhenaufgelösten Informationsgehalt kann man prinzipbedingt nicht angeben.

Die in Bild 38 dargestellte Höhenauflösung zeigt einen markanten Verlauf, der wie im Fall von HoMa (Bild 28) durch den direkten Einfluss der Profilwerte auf den Regularisierungsoperator zu Stande kommt.



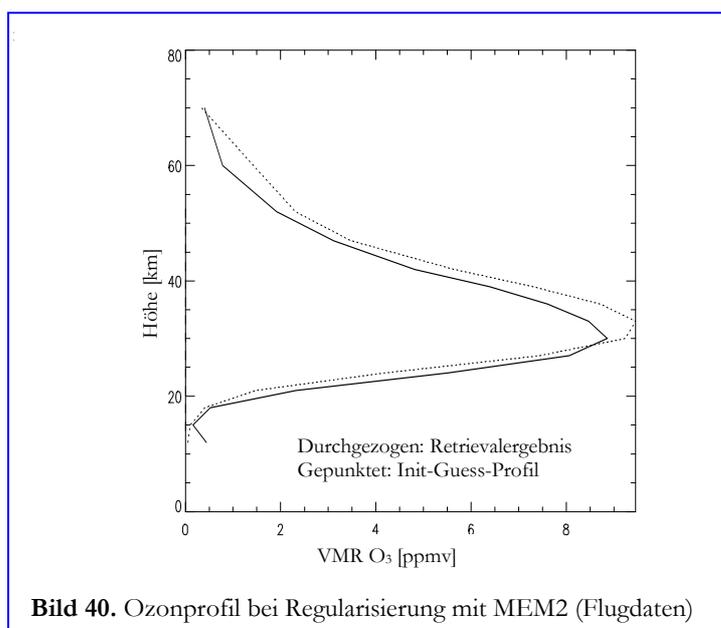
Im Vergleich zu HoMa ist die Höhenauflösung im Detail nicht so gut und sie beginnt bereits bei etwa 30 km Höhe den idealen Richtwert von 3 km Höhenauflösung zu verlassen. Deutlich zu erkennen ist die Analogie der Breite der Averaging Kernel Spalteneinträge zur Höhenauflösung.

Bild 40 zeigt den Verlauf der geschätzten Standardabweichung des Temperaturretrievals bei Anwendung von MEM2 in Kelvin. Der Verlauf ist nahezu identisch zum Verlauf im HoMa-Fall und liegt in weiten Teilen bei einem sehr guten Wert von wenig mehr als 0,5 K.

Ozon

Setzen sich die viel versprechenden Ergebnisse für die Temperatur bei Ozon fort? Bild 39 zeigt das Ergebnis für die Maximale-Entropie-Methode bei der Anwendung auf Ozon. Wie bereits erwähnt, ist das Verfahren bisher nach Kenntnis des Autors im Zusammenhang mit Spurengasretrievals nur für Temperatur eingesetzt worden, deshalb sind die nachfolgenden Betrachtungen besonders hervorzuheben.

Das Ozonprofil zeigt einen geradezu klassischen Verlauf über beinahe alle Höhenstufen. Lediglich der unterste Profilwert scheint nicht natürlichen Ursprungs zu sein. Das Profil ist bemerkenswert glatt und auch am Maximum bei etwa 30 km, wo man die stärksten Änderungen der Profilwerte feststellen kann, zeigen sich keine Überschwingeffekte. Das Ergebnis löst sich vom Init-Guess-Profil und nimmt eine eigenständige Form an.

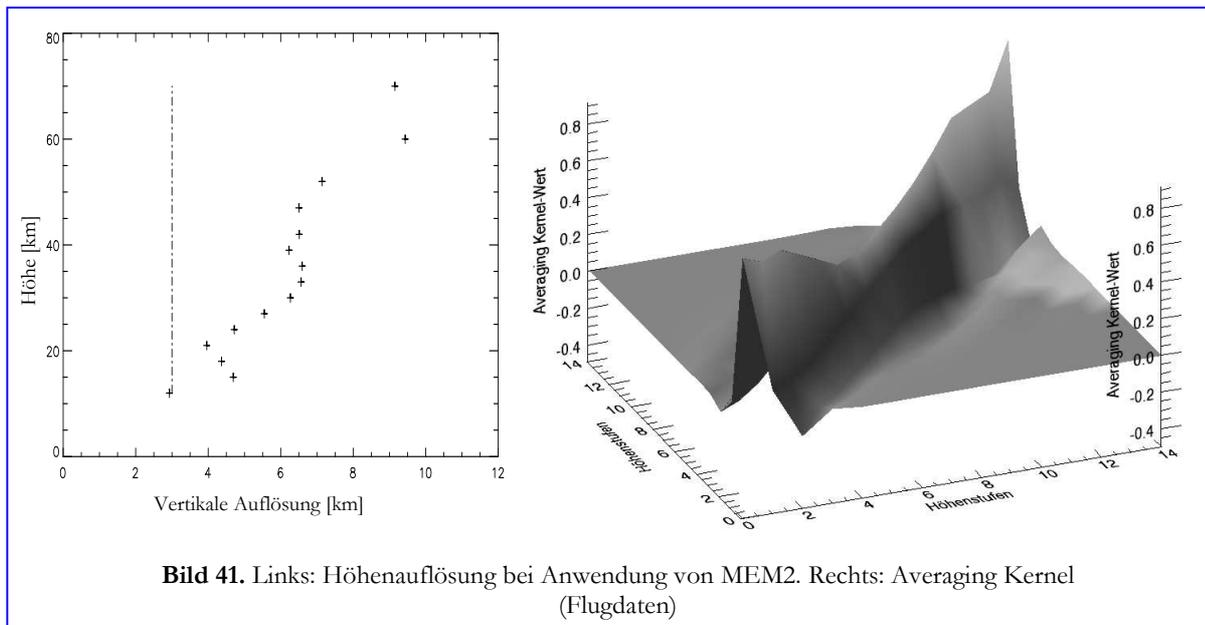


Im Vergleich mit dem Ergebnis der Rechnung, die mit HoMa reguliert wurde (vgl. Bild 30), sieht man auch hier, dass das Init-Guess-Profil wohl im Gegensatz zur realen Lösung um einige Kilometer höhenverschoben zu sein scheint. Die Tatsache, dass beide Rechnungen zu einem ähnlichen Ergebnis in dieser Hinsicht gelangen, spricht dafür, dass das wahre Profil den Retrievalergeb-

nissen ähnelt.

Der Informationsgehalt des vorliegenden Ergebnisses beträgt 26,0 bei 9,6 Freiheitsgraden. Damit liegt man für die Freiheitsgrade in der Größenordnung der entsprechenden Werte von HoMa. Aus den bekannten Gründen ist die Angabe eines höhenaufgelösten Informationsgehalts für die MEM2-Technik nicht möglich und ein Vergleich der Informationsgehalte verbietet sich.

Bild 41 zeigt die mit der aktuellen Parametrisierung erzielte Auflösung. Die Höhenauflösung für



Ozon liegt im Wesentlichen zwischen vier und sieben Kilometern. Das ergibt ein moderates Anstiegsverhalten über etwa 40 km Höhenunterschied. In der rechten Hälfte der Darstellung sieht man, wie der Averaging Kernel nach oben hin auffächert, was zu der festgestellten schlechteren Höhenauflösung führt.

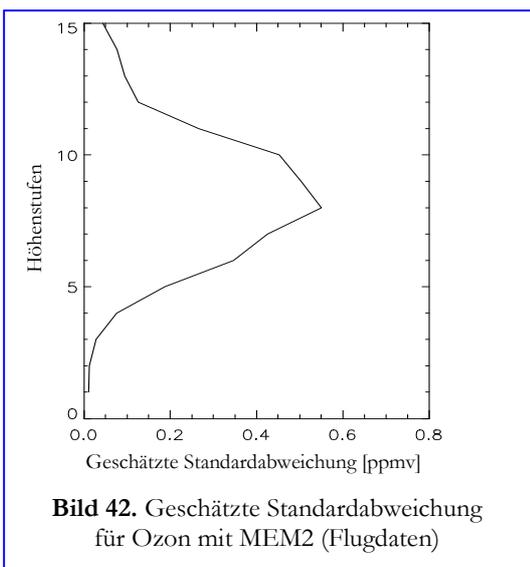


Bild 42 schließlich zeigt die Standardabweichung des Ergebnisses für Ozon, das mit MEM2 regularisiert wurde. Die Werte liegen in ihren Maxima etwas höher als im Fall von HoMa, aber der Verlauf ist wieder stark am Profil orientiert.

Im Weiteren befassen wir uns nun mit den in Abschnitt 3.4.2 vorgestellten Verfahren Optimal Estimation unter Hinzunahme von *a-priori*-Wissen und Tikhonov. Diese etablierten Methoden werden mit den vorgestellten Alternativen HoMa und MEM2, anhand der bekannten Kennzahlen, verglichen und eine Einschätzung vorgenommen.

4.1.7 Vergleich mit etablierten Methoden

4.1.7.1 Anwendung bei Verwendung simulierter Daten

Zum Vergleich betrachten wir Ergebnisse von Retrievalläufen für Ozon, die zum einen mit einem nicht höhenaufgelösten Optimal Estimation-Verfahren unter Hinzunahme von *a priori*-Wissen und zum anderen mit dem Tikhonov-Verfahren regularisiert wurden.

Zur Schaffung einer fairen Vergleichsbasis wurden die Regularisierungsparameter der einzelnen Verfahren, ausgehend von bereits vorhandenen Parametrisierungen aus am DLR durchgeführten Vorarbeiten, je nach Verfahren angepasst. Es zeigte sich, dass die größenordnungsmäßige Übereinstimmung von Einträgen korrespondierender Matrizen unterschiedlicher Verfahren einen guten Anhaltspunkt für die Wahl der optimalen Parameter liefert. Dies führte zu folgender Festlegung der für die Vergleichsmethoden wichtigen Größen:

Der Regularisierungsparameter λ erhielt im Tikhonov-Fall den Wert 65. Die Diagonalelemente der höhenkonstanten *a priori*-Matrix wurden mit dem Wert 75 festgelegt. Es wurde eine übliche Belegungsvariante für die Matrix benutzt, bei der die Nebendiagonalelemente linear mit dem Abstand von der Diagonalen verkleinert werden. Die restliche Parametrisierung ist identisch mit der aus 4.1.4.1 bzw. 4.1.6.1.

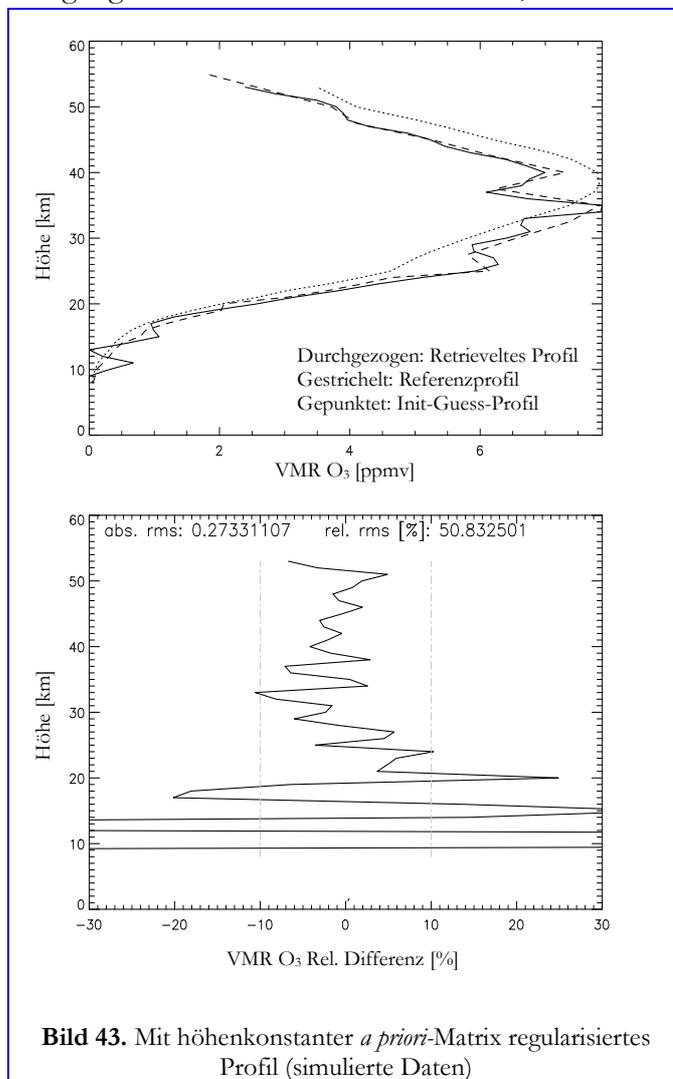


Bild 43. Mit höhenkonstanter *a priori*-Matrix regularisiertes Profil (simulierte Daten)

Optimal Estimation mit höhenkonstanter Regularisierung

Bild 43 zeigt das Ergebnis einer Rechnung mit Optimal Estimation und einer höhenunabhängigen Regularisierungsmatrix.

Man erkennt im unteren Teil des Bildes die höheren relativen und absoluten Abweichungen gegenüber den Ergebnissen aus 4.1.4.3. Der globale Informationsgehalt ergibt sich zu 45,29 Die Anzahl der Freiheitsgrade berechnet sich zu 19,5.

Interessant ist der Vergleich der höhenaufgelösten Informationsgehalte. Bild 44 zeigt die Kurven für beide Beispiele. Man sieht, dass beide Graphen einen sehr ähnlichen Verlauf zeigen. Der Unterschied liegt im Detail: Im Bereich von etwa 20–35 km ist der Informationsgehalt des HoMa-Beispiels im Mittel höher als der des herkömmlich regulierten Falles. In diesem Bereich befindet die

Unterseite des „Ozonbauches“. Wie bereits erwähnt wurde, ist gerade dieser Bereich besonders interessant, weil man wegen der Sichtgeometrie (mangelnder „Kontrast“) nur schwer an Informationen hierüber gelangen kann. Insbesondere wenn dort Strukturen vermutet werden, ist ein möglichst hoher Informationsgehalt von Vorteil.

Der Punkt, an dem der Informationsgehalt beginnt, einen diffusen Verlauf zu nehmen, liegt in dem Fall der reinen *a priori*-Regularisierung niedriger als im HoMa-Fall. Die Festlegung fällt etwas schwer, aber ab 41 km Höhe kann man sicher von einem stagnierenden Informationsgehalt sprechen. Betrachtet man das Profil in Bild 42 genauer, sieht man, dass gerade in diesem kritischen Bereich größere relative Abweichungen vorliegen als im HoMa-Fall. Wie beschrieben ergeben sich diese Unterschiede aus den unterschiedlichen Annahmen für das *a priori*-Wissen.

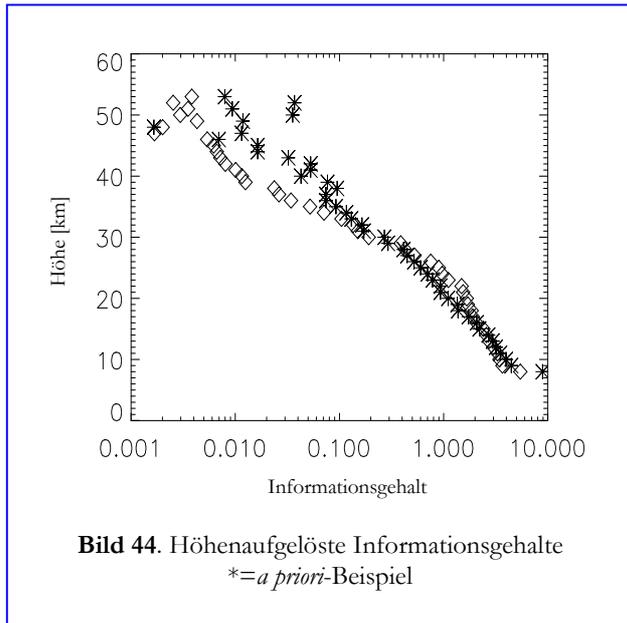


Bild 44. Höhenaufgelöste Informationsgehalte
*=*a priori*-Beispiel

Die gleichförmige Regularisierung durch das nicht profilmformadaptive Verfahren schlägt sich in einer nahezu gleichmäßigen Auflösung von etwa 3 km über alle Höhenbereiche nieder und entspricht damit in etwa den Verhältnissen, wie sie bei HoMa und MEM2 bereits festgehalten sind.

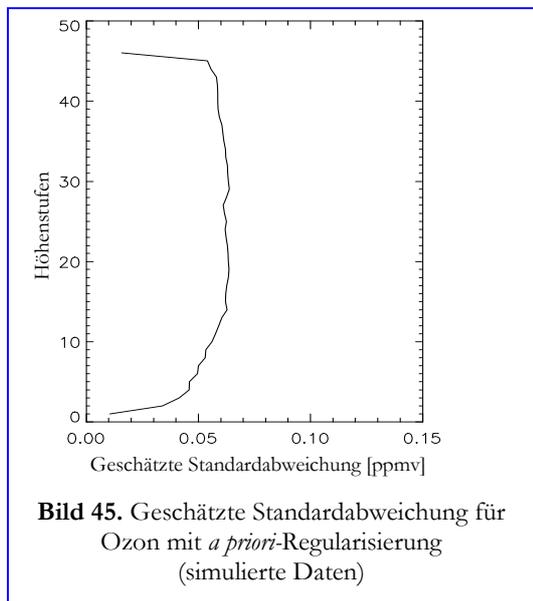


Bild 45. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit *a priori*-Regularisierung (simulierte Daten)

Bild 45 zeigt den Verlauf der geschätzten Standardabweichung, die bei fast konstanten 0,05 ppmv liegt und damit wesentlich höher als bspw. bei MEM2.

Tikhonov-Verfahren

Im nächsten Schritt ziehen wir ein mit dem Tikhonov-Verfahren regularisiertes Beispiel als Vergleich heran. Bild 46 illustriert die bereits bekannten Zusammenhänge für diesen Fall.

Wie schon im vorhergehenden Beispiel erkennt man größere relative und absolute Abweichungen vom Referenzprofil als im Fall von HoMa und zwar nicht nur in den unteren Bereichen des Profils, sondern in allen Höhen.

Der globale Informationsgehalt im Tikhonov-Fall, der nach Gleichung (3.50) formal angegeben werden kann, liegt bei 44,11. Die Zahl der Freiheitsgrade für das Signal wird mit 19,88 errechnet und liegt damit in einem ähnlichen Bereich wie bei den anderen Verfahren.

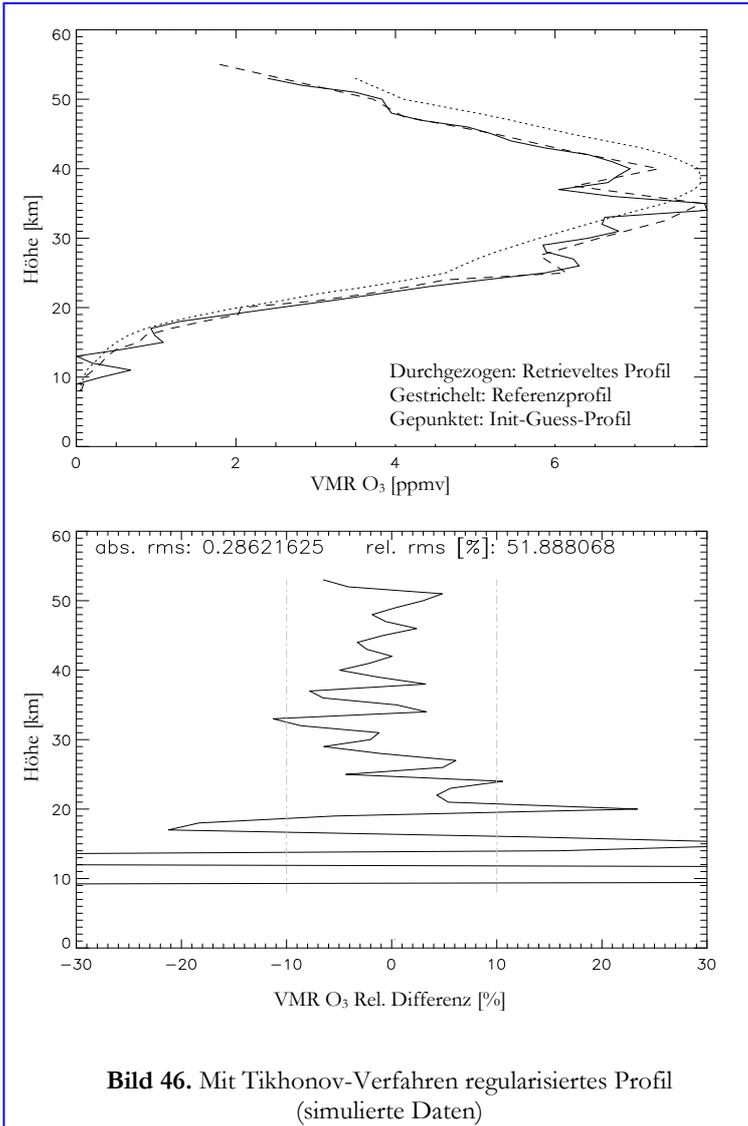


Bild 46. Mit Tikhonov-Verfahren regularisiertes Profil (simulierte Daten)

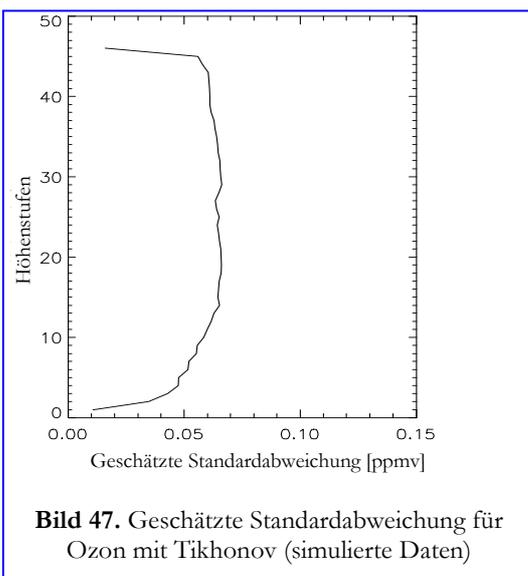


Bild 47. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit Tikhonov (simulierte Daten)

Eine höhenaufgelöste Analyse der Informationsgehalte ist nicht möglich, weil das Tikhonov-Verfahren kein *a priori*-Wissen nutzt. Somit kann keine *a priori*-Kovarianzmatrix vorhanden sein, die man bei der Berechnung der höhenaufgelösten Informationsgehalte benötigen würde (siehe (3.47)), bzw. weil der verwendete L_1 -Regularisierungsoperator singular ist.

Die Höhenauflösung im Fall der Tikhonov-Regularisierung liegt relativ konstant über alle Höhen bei 3 km, dies ergibt sich aus einer Analyse des Averaging Kernels. Das Verhalten folgt somit den bereits bekannten Verläufen. Da eine erneute Wiederholung keine neuen Erkenntnisse bedeuten würde, verzichten wir an dieser Stelle auf die grafische Darstellung der Höhenauflösung.

Bild 47 zeigt den Verlauf der geschätzten Standardabweichung im Fall der Tikhonov-Regularisierung. Auch in diesem Fall kann man (wie bei der *a priori*-Regularisierung, siehe oben) keine Profilformabhängigkeit erkennen,

was sich in einem fast konstanten Verlauf des Graphen niederschlägt.

4.1.7.2 MIPAS-Flugdaten

Die anschließenden Betrachtungen komplettieren die Analyse, indem wir die oben beschriebenen Verfahren (Optimal Estimation, Tikhonov) nun auf reale MIPAS-Flugdaten anwenden. Um konsistent zu bleiben, verwenden wir den selben Orbit wie schon bei HoMa und MEM2. Auch in diesem Fall folgen wir der Argumentation, dass die Temperatur eine zentrale Größe ist und wenden deswegen die Verfahren jeweils zuerst auf ein Temperaturretrieval

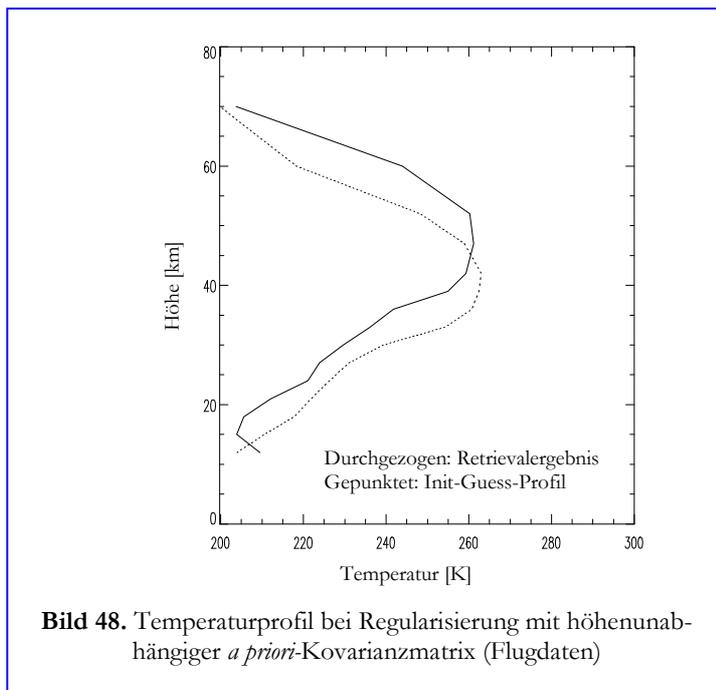
an. Diese Temperatur dient dann als Grundlage für die weitere Rechnung.

Zuerst untersuchen wir das *a priori*-Verfahren. Die Diagonalelemente der *a priori*-Gewichtungsmatrix wurden im Fall von Ozon mit dem Wert 60 besetzt und im Fall der Temperatur mit 10. Wie im Fall der Simulation wurde jeweils ein lineares Abfallverhalten der Nebendiagonalelemente angewendet. Den Rechnungen liegen z. T. ungenaue LOS-Angaben zu Grunde, dieses Problem ist durch eine Korrektur mittlerweile behoben.

4.1.7.3 Anwendung, Optimal Estimation mit *a priori*

Temperatur

Bild 48 zeigt das Ergebnis einer Rechnung für Temperatur. Das berechnete Profil weist einen sehr glatten Verlauf auf und auch die Inversion um unteren Ende des Profils ist sichtbar. Das Profil löst sich vom Init-Guess-Profil und nimmt, wie bei allen anderen Verfahren auch, eine eigenständige Form an. Die Diagonalelemente der Regularisierungsmatrix waren mit dem Wert 100 festgelegt.



Man ermittelt bei 9,4 Freiheitsgraden einen globalen Informationsgehalt von 21,4. Der höhenaufgelöste Informationsgehalt in Bild 49 zeigt einen flachen Verlauf, das heißt die meiste Information, die den globalen Informationsgehalt ausmacht, stammt aus den unteren Bereichen des Profils.

In Bild 50 ist die geschätzte Standardabweichung für das Ergebnis in Kelvin aufgetragen. Die Werte liegen größtenteils alle um den Wert von 0,5 K und wachsen erst ab der dreizehnten Höhenstufe auf Werte über 1K an.

Die Höhenauflösung ist in Bild 51 grafisch aufgetragen. Sie liegt bis zu

einer Höhe von 35 km bei relativ konstanten Werten nahe 3 km und nimmt dann auf bis zu 15 km ab. Die mittlere Auflösung liegt bei 5,75 km.

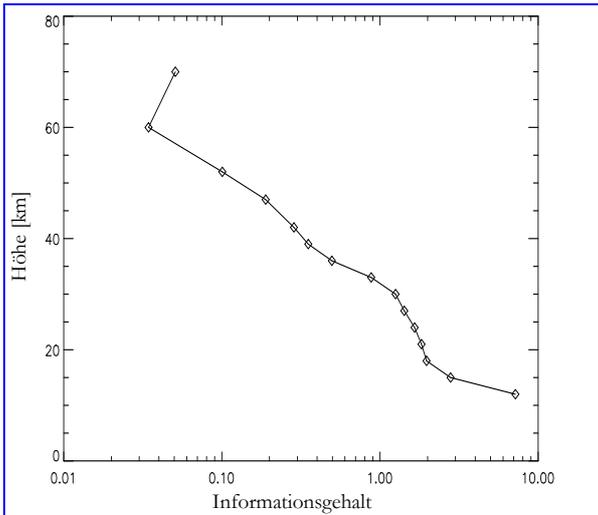


Bild 49. Höhenaufgelöster Informationsgehalt für Temperatur bei Regularisierung mit *a priori*-Kovarianzmatrix (Flugdaten)

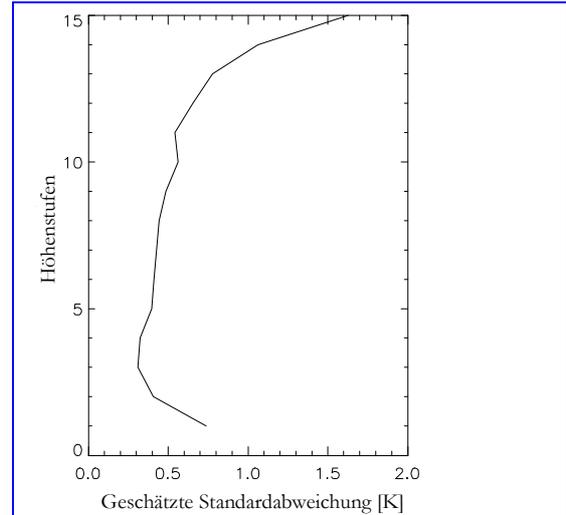


Bild 50. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit *a priori*-Regularisierung (Simulationsdaten)

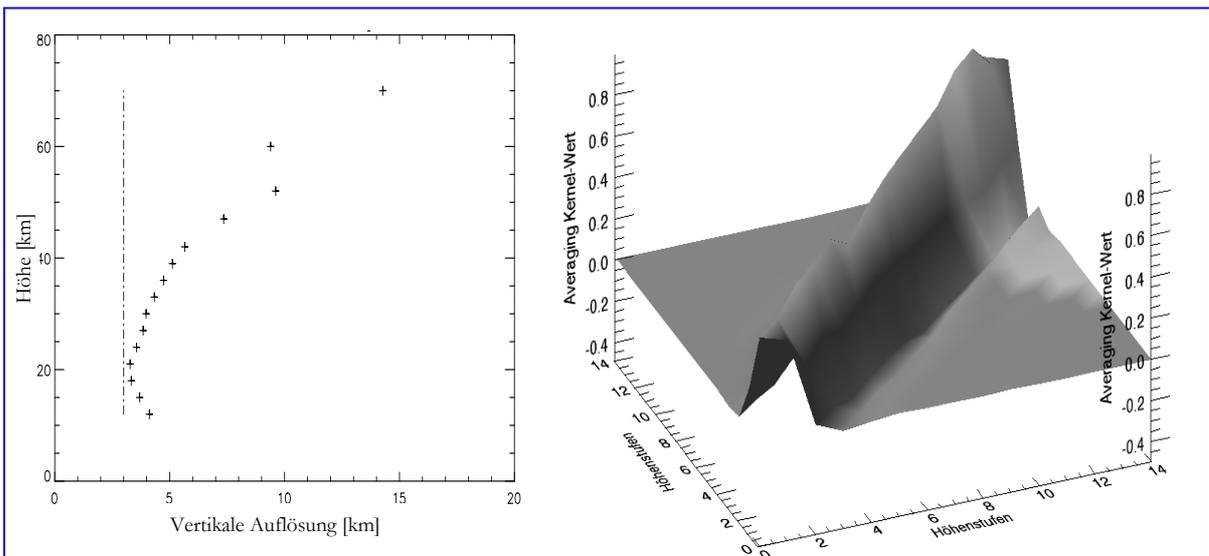


Bild 51. Links: Höhenauflösung für Temperatur bei höhenunabhängiger *a priori*-Kovarianzmatrix. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)

Ozon

Bild 52 zeigt die Ergebnisse einer Rechnung für Ozon. Der sehr glatte Verlauf des Profils fällt unmittelbar ins Auge. Das ermittelte Ergebnis scheint allerdings, verglichen mit den Werten der Ergebnisse aus Abschnitt 4.1.4.5 und 4.1.6.5, zu niedrig im Maximalwert.

Der für dieses Ergebnis ermittelte globale Informationsgehalt liegt bei 19,9. Mit 9,0 Freiheitsgraden ist das Beispiel als nicht stark regularisiert einzuordnen. Dies ist verglichen mit den Ergebnis-

sen von HoMa oder des Maximalen-Entropie-Verfahrens durchaus als gut zu bewerten. Der höhenaufgelöste Informationsgehalt in Bild 53 zeigt einen ähnlichen Verlauf wie im Fall von HoMa

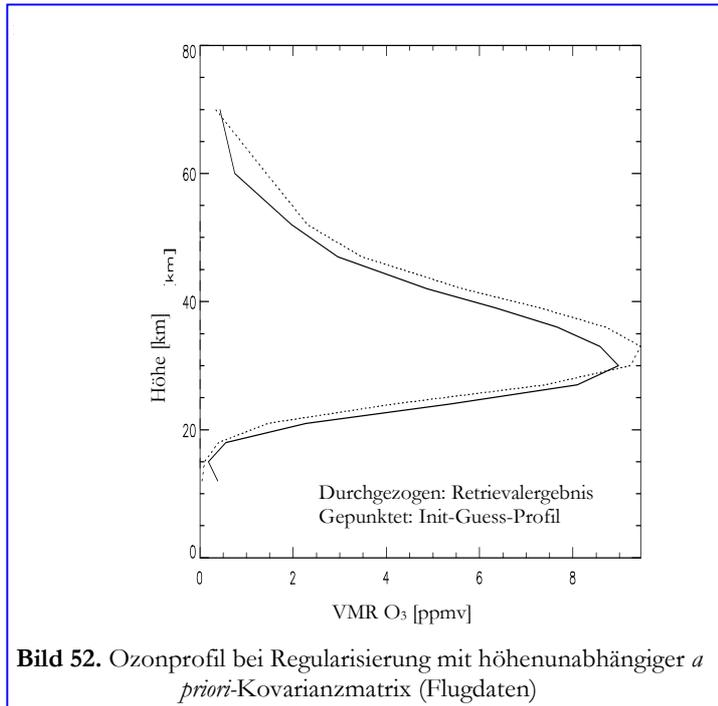


Bild 52. Ozonprofil bei Regularisierung mit höhenunabhängiger *a priori*-Kovarianzmatrix (Flugdaten)

ist aber streng genommen wegen den unterschiedlichen Annahmen für das jeweilige *a priori*-Wissen nicht für einen quantitativen Vergleich geeignet.

Sieht man sich die erzielte Höhenauflösung des Retrievals an, erkennt man schnell, wo der grundlegende Unterschied zwischen dem profilformabhängigen und dem höhenkonstanten Verfahren liegt.

Aus Bild 54 kann man entnehmen, dass die Höhenauflösung beim höhenkonstanten Fall von 3,5 km in den unteren Bereichen auf etwa 12 km in großen Höhen fällt. Im interessanten Bereich zwischen 20 und 40 Kilometern muss man eine Auflösung von vier bis acht Kilometern in

Kauf nehmen, was die Analyse von eventuell vorhandenen Feinstrukturen enorm schwierig macht. Die mittlere Auflösung beträgt 6,3 km.

Der gezeigte Fall ist ein schönes Beispiel für die Notwendigkeit einer genauen Untersuchung der erhaltenen Ergebnisse, denn die Auswertung nur des Informationsgehaltes zusammen mit den Freiheitsgraden hätte ein falsches Bild von der Güte des Ergebnisses (nämlich als vergleichsweise gut) ergeben. Zusammen mit der Betrachtung der erzielten Höhenauflösung erhält man jedoch ein differenziertes Bild und man würde das Verfahren ggf. für das Auffinden von kleinen Strukturen nicht heranziehen.

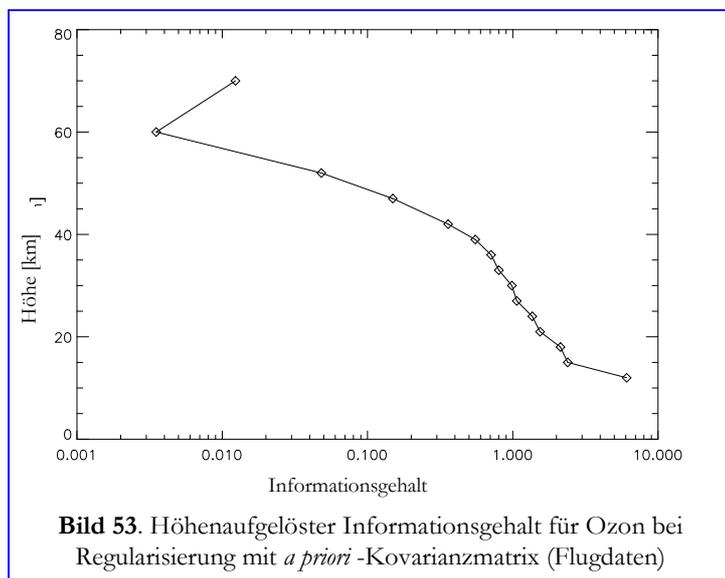
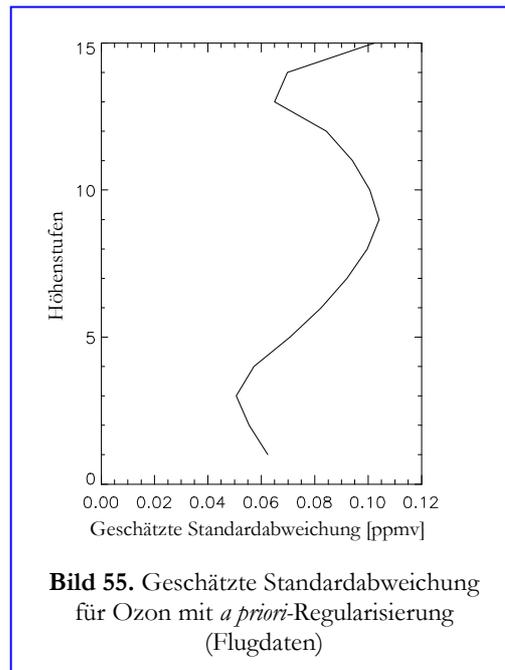
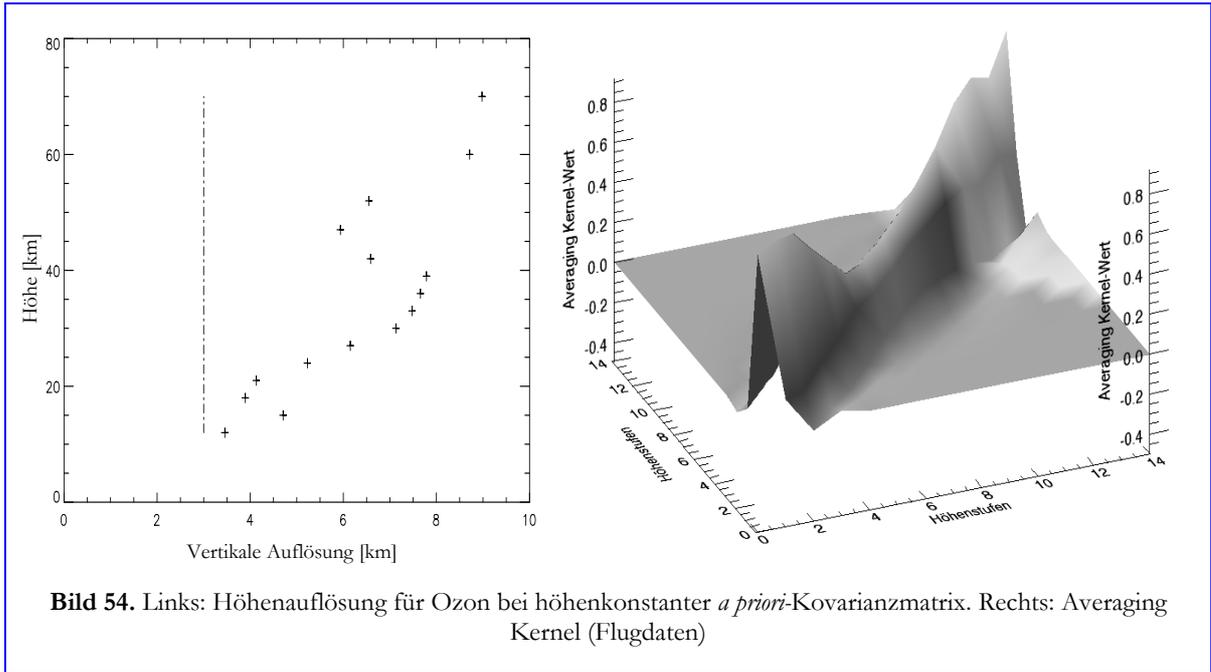


Bild 53. Höhenaufgelöster Informationsgehalt für Ozon bei Regularisierung mit *a priori*-Kovarianzmatrix (Flugdaten)

Bild 55 zeigt den höhenaufgelösten Verlauf der geschätzten Standardabweichung des regularisierten Retrievalergebnisses in ppmv. Man erkennt grob den Verlauf des Ozonprofils wieder. Die Werte für die Abweichung bewegen sich im Bereich von 0,06 bis 0,11 ppmv.



4.1.7.4 Anwendung, Tikhonov

Mit der Betrachtung von mit dem Tikhonov-Verfahren regularisierten Profilen schließen wir die Analyse ab. Es wurden L_1 -Tikhonov-Operatoren verwendet. Der Regularisierungsparameter wurde für die Temperatur mit 0,2 und für Ozon mit 10 empirisch ermittelt. Die restliche Parametrisierung blieb identisch.

Temperatur

Bild 56 zeigt das Temperaturprofil für den Fall der Tikhonov-Regularisierung. Die Struktur auf

der Unterseite tritt nur hier auf und ist vermutlich auf zu schwache Regularisierung zurückzuführen. Da aber, um in den Kennzahlen vergleichbar zu bleiben, bei allen Verfahren darauf geachtet wurde, in etwa die gleiche Anzahl von Freiheitsgraden zu erhalten, war es nicht sinnvoll, die Anzahl durch stärkere Regularisierung weiter einzuschränken, nur um ein glattes Profil zu erhalten. Im Detail sind die etablierten Verfahren sicher noch optimierbar. Ins Auge fallen ebenso die berechneten Werte. Zwar ist die Lage des Maximums korrekt, aber die ermittelten Temperaturwerte scheinen, verglichen mit den Ergebnissen anderer Rechnungen, zu niedrig zu liegen.

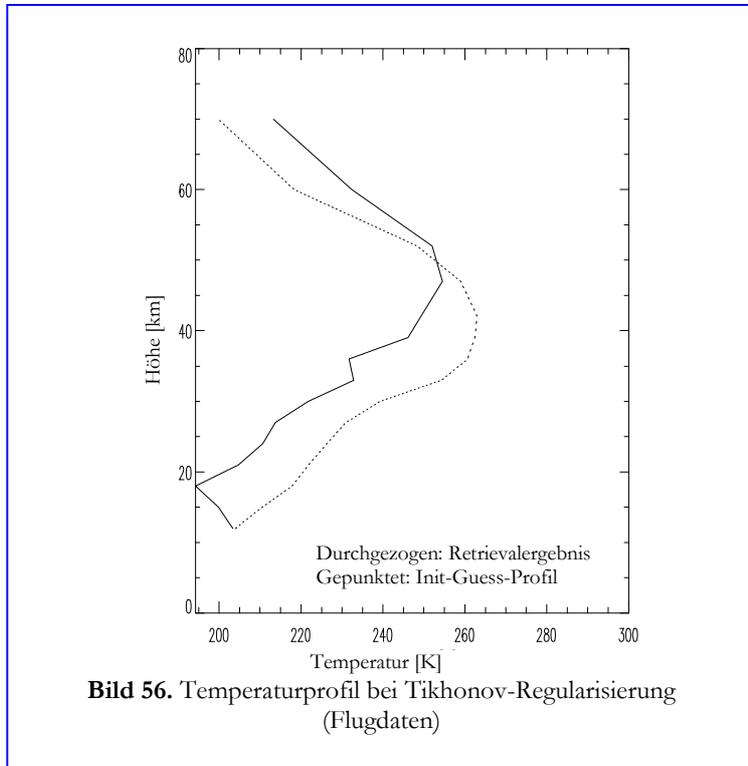


Bild 56. Temperaturprofil bei Tikhonov-Regularisierung (Flugdaten)

Man erhält für das vorliegende Beispiel 10,5 Freiheitsgrade und

einen globalen Informationsgehalt von 18,0.

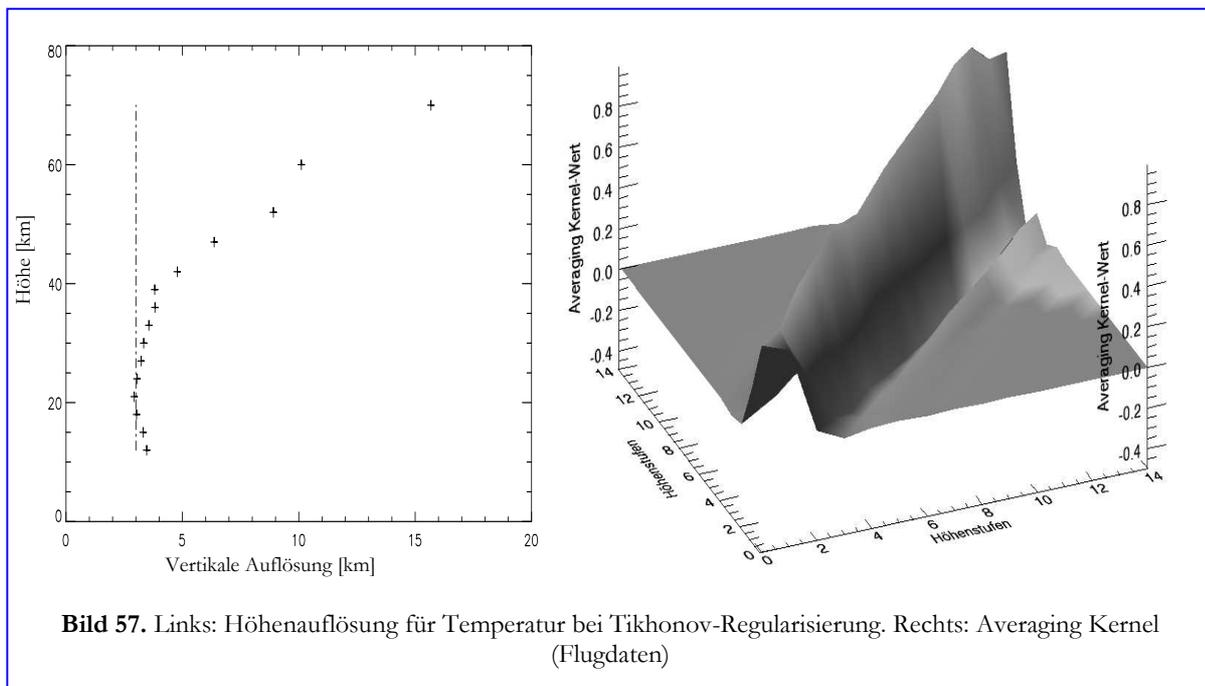


Bild 57. Links: Höhenauflösung für Temperatur bei Tikhonov-Regularisierung. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)

Den höhenaufgelösten Informationsgehalt kann man im Tikhonov-Fall nicht angeben. Die Gründe hierfür sind in Abschnitt 3.5.1.2 beschrieben.

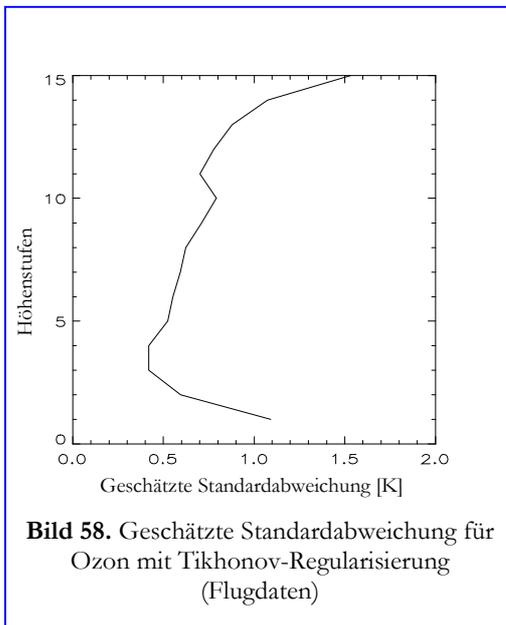


Bild 57 zeigt die erreichte Höhenauflösung bei der Anwendung der Tikhonov-Regularisierung. Das Ergebnis kann zufrieden stellen. Man ermittelt eine relativ konstant verlaufende Auflösung von etwa 3 km in den Bereichen bis 40 km Höhe. Die Auflösung fällt stetig in den oberen Regionen bis auf Werte nahe 15 km. Im Mittel beträgt die Auflösung 6 km.

Bild 58 zeigt den Verlauf der geschätzten Standardabweichung für den mit der Tikhonov-Regularisierung berechneten Fall. Die Abweichung liegt im gleichen Bereich wie in allen anderen Fällen.

Ozon

In Bild 59 ist das unter Verwendung der Tikhonov-Regularisierung errechnete Ozonprofil aufgetragen.

Man erkennt auf den ersten Blick, dass die Werte im

Maximum, trotz der moderaten Regularisierung, die bei 9,95 Freiheitsgraden einen Informationsgehalt von 17,5 zulässt, zu niedrig ausfallen. Hierbei spielt sicher das bereits nicht optimal ermittelte Temperaturprofil eine Rolle.

Bild 60 zeigt die Höhenauflösung des Ergebnisses. Sie reicht von anfänglich unter 3 km bis zu etwa 11 km in großen Höhen. Die mittlere Höhenauflösung beträgt 6 km.

In Bild 61 ist der höhenaufgelöste Verlauf der geschätzten Standardabweichung für den mit Tikhonov regularisierten Ozonfall gezeigt. Bei im Mittel höheren Werten erkennt man deutlich einen wesentlich flacheren Verlauf der Kurve als bei den anderen Verfahren.

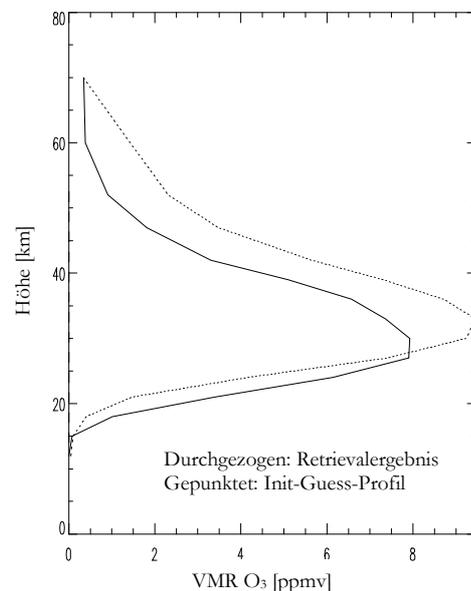
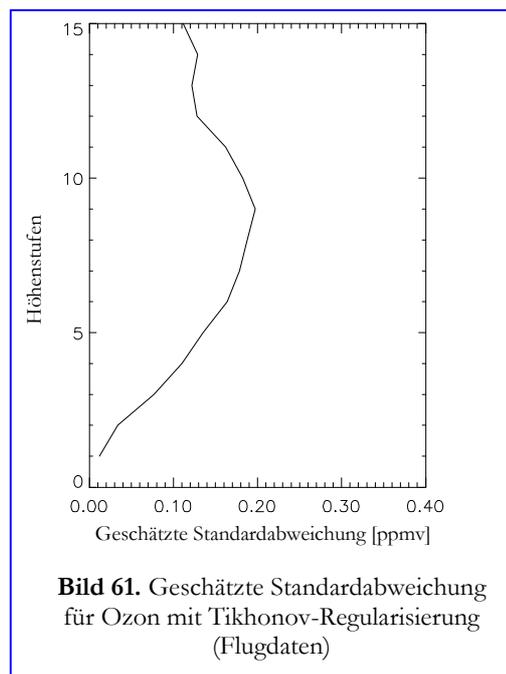
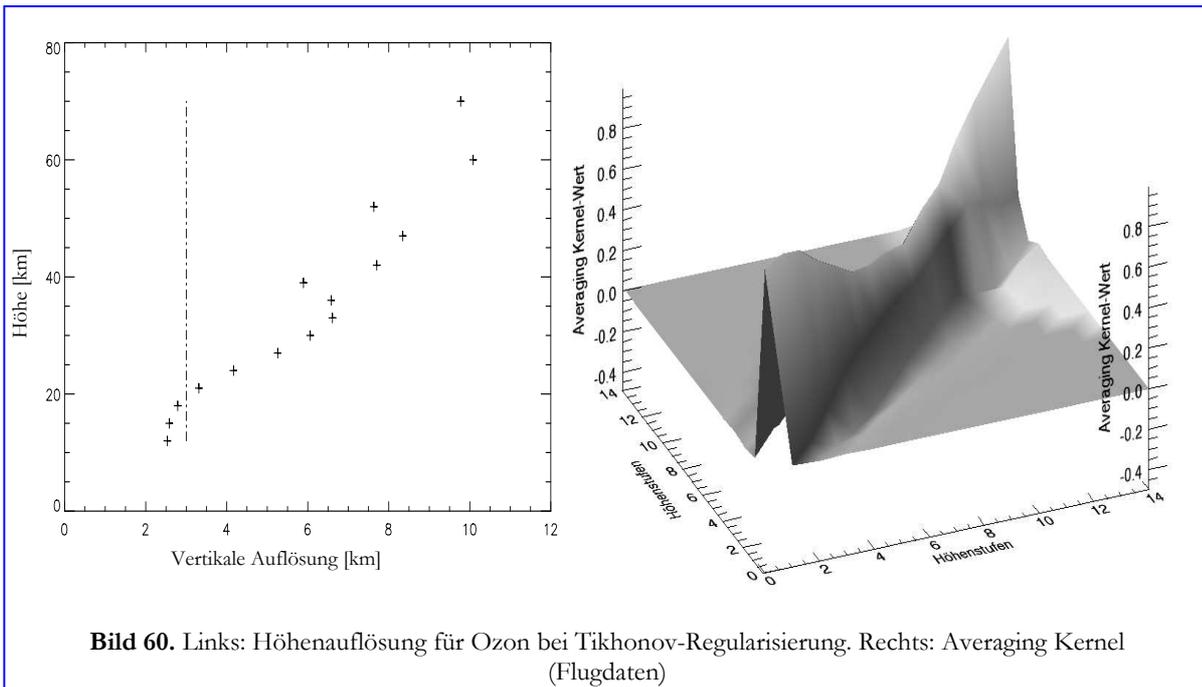


Bild 59. Ozonprofil bei Tikhonov -Regularisierung (Flugdaten)



Die gezeigten Sachverhalte werden nun für alle verwendeten Verfahren noch einmal zusammengefasst und gegenübergestellt. Dabei konzentrieren wir uns zunächst auf die Ergebnisse der Simulationsrechnungen und danach auf die Ergebnisse auf Grund der Flugdaten.

4.1.8 Zusammenfassung und Gegenüberstellung der Ergebnisse

Simulation

Tabelle 6 gibt einen Überblick über die Kennzahlen, die aus den Simulationsbeispielen für Ozon gewonnen werden konnten.

Das Verfahren HoMa zeigt sich den etablierten Methoden in den in Abschnitt 3.5 besprochenen Kennzahlen mindestens ebenbürtig und in entscheidenden Punkten überlegen. Bei etwa identischer Anzahl von Freiheitsgraden erzielt das Verfahren HoMa Ergebnisse mit einem höheren Informationsgehalt und die Profile enthalten auch in größeren Höhen noch signifikante Informationen, was sich an einem späteren Einsetzen der „Stagnationsphasen“ für den höhenaufgelösten Informationsgehalt ablesen lässt. Die Ergebnisse in den wichtigen Kategorien relativer Fehler und absoluter Fehler sind ebenfalls bemerkenswert, haben jedoch nur im Rahmen von Simulationen einen gewissen Wert, um das Verfahren prinzipiell zu testen. Werden echte Daten zugrunde gelegt, hat man naturgemäß keine wirklichen Referenzgrößen mehr.

Ebenso gut präsentiert sich das Maximale-Entropie-Verfahren. Obgleich man bei den oben dargestellten Ergebnissen im Hinterkopf behalten muss, dass bei den Simulationsrechnungen ein ideales Init-Guess-Profil angenommen wurde, sind die Kennzahlen, die MEM2 produziert, im Vergleich zu den etablierten Verfahren beeindruckend. Die Ergebnisse fallen jedoch nicht zuletzt deswegen so gut für das Maximale-Entropie-Verfahren aus, weil nicht alle Fähigkeiten des MIPAS-Prozessors ausgeschöpft wurden. Der Prozessor ist in der Lage, für jede Spezies Hilfsgrößen, wie Line-of-Sight, Kontinuum oder Gradienten, simultan mitzuberechnen. Auf diese Hilfsgrößen wurde verzichtet, weil in den zahlreichen durchgeführten Untersuchungen immer wieder zu Tage trat, dass sich MEM2 einer nachvollziehbaren Parametrisierung entzog.

Das heißt, dass die Ergebnisse für die Hauptspezies, wie Ozon oder Temperatur, in den meisten Kennzahlen wesentlich schlechter ausfielen, wenn man einzelne Hilfsgrößen (Kontinuum, LOS, Offset) hinzunahm. Dieses Verhalten ist für die anderen Verfahren nicht in dieser Art und Weise feststellbar. An der Klärung der Fragen in diesem Zusammenhang wird im Moment in der MIPAS-Arbeitsgruppe des DLR noch gearbeitet.

Die Hilfsgrößen haben in der Regel keinen Einfluss auf die Signifikanz der errechneten Ergebnisse, aber sie bieten im Einzelfall zusätzliche Erkenntnisse. Die Hilfsgrößen wurden in den Fällen, wo sie nicht retrieved werden konnten, als plausibel angenommene externe Parameter zur Verfügung gestellt.

Relevante Größe	MEM2	HoMa	Optimal Estimation mit <i>a priori</i>	Tikhonov
Höhenauflösung [km]	1 – 2,5	2,5 – 3,5	3	3
Stagnationshöhe bei höhenaufgelöstem Informationsgehalt [km]	n.v.	46	41	n.v.
Anzahl der Freiheitsgrade	24,3	20,4	19,5	19,9
Relativer Fehler [%]	55,0	20,1	51,9	50,8
Absoluter Fehler in [ppmv]	0,3	0,2	0,3	0,3

Tabelle 6. Kennzahlen zu den Simulationsbeispielen (Ozon)

Flugdaten

A. Dudhia stellt in [12] die maximal erreichbare Genauigkeit eines an der Universität Oxford durchgeführten MIPAS-Retrievals unter bestimmten Voraussetzungen dar. Er ermittelt für Ozon eine maximal erreichbare Genauigkeit von 5-10 % über den gesamten Profilverlauf und für die Temperatur eine Genauigkeit von 0,2 – 0,4 K. Die in der vorliegenden Arbeit mit den alternativen Methoden berechneten Profile kommen teilweise sehr nahe an diese theoretischen Werte heran, wohingegen die mit den etablierten Verfahren ermittelten Fehler z. T. weit unterhalb dieser Grenzen liegen. Da die Abweichungen derart groß sind, ist es fraglich, ob die von Dudhia ermittelten Werte hier Anwendung finden können. Nichtsdestotrotz geben Sie einen Hinweis darauf, in welcher „Güteklasse“ sich die vorliegenden Ergebnisse bewegen.

Tabelle 7 fasst die Ergebnisse der vorangegangenen Betrachtungen mit realen MIPAS-Flugdaten für Temperatur und Ozon noch einmal übersichtlich unter Berücksichtigung der vorgestellten Kriterien zusammen.

Geht man nach den Kennzahlen in Tabelle 7, so stellen die neu vorgestellten Verfahren gegenüber den etablierten eine ausgezeichnete Alternative dar. Sie bieten durchweg bessere Höhenauflösungen.

Zur Durchführung von Retrievals mit wenigen zu retrievelnden Größen eignet sich das Maximal-Entropie-Verfahren. Es benötigt lediglich die Angabe eines Parameters γ , dessen Größenordnung sich, ebenso wie bei HoMa, aus einer Analyse der Elemente der Informationsmatrix ergibt.

Sollen Hilfsgrößen mitberechnet werden, so hat sich die Verwendung von HoMa oder eines der etablierten Verfahren als die bessere Wahl hinsichtlich der Ergebnisse herausgestellt.

Hat man die Wahl zwischen HoMa und den etablierten Verfahren, dann ist HoMa sicherlich die beste Option, denn es vereint die Vorteile der beiden etablierten Methoden. Zudem liefert HoMa hinsichtlich der erzielbaren Höhenauflösung und des Informationsgehalts bei nur moderater „Stärke“ der Regularisierung die besseren Ergebnisse. Außerdem ist HoMa durch sein Design, und den standardisierten Analysemethoden, von denen in dieser Arbeit reger Gebrauch gemacht wird, vollständig nachvollziehbar.

Relevante Größe	MEM2 (Temp./Ozon)	HoMa (Temp./Ozon)	Optimal Estimation mit <i>a priori</i> (Temp./Ozon)	Tikhonov (Temp./Ozon)
Mittlere Höhenauflösung [km]	4,7/6,0	4,9/5,4	5,8/6,3	5,3/6,0
Stagnationshöhe bei höhenaufgelöstem Informationsgehalt [km]	n.v.	50/45	50/50	n.v.
Anzahl der Freiheitsgrade	11,7/9,6	11,4/10,9	9,4/9,0	10,5/9,9

Tabelle 7. Kennzahlen zu den Beispielen mit Flugdaten

Die folgenden beiden Abschnitte befassen sich mit einer anderen Klasse von Parametern, deren optimale Bestimmung ebenfalls zu Verbesserungen der Ergebnisse des vorliegenden Retrievals führen.

Zunächst beschäftigen wir uns mit der Frage, wie man bestimmte systematische Ungenauigkeiten in Eingabeparametern behandeln kann und wenden die Erkenntnisse in der gleichen Art und Weise wie bei den bereits beschriebenen Regularisierungsmethoden an.

4.2 Systematische Fehler

Eine der zentralen Größen in Gleichung (3.25) ist die Gewichtungsmatrix der Unsicherheit der Messung S_ϵ^{-1} . Die Elemente dieser Matrix werden im Wesentlichen durch das wellenzahlabhängige Rauschen der Signalamplituden der Sensoren im Instrument als NESR-Werte definiert. Die Werte haben jedoch nicht nur Auswirkungen auf Messgrößen, sondern auch auf die Konfidenz von simulierten Spektren, was sich aber, ohne weiteres Zutun, nicht widerspiegelt. Es stellt sich die Frage, wie dieses Manko behoben werden kann.

4.2.1 Fragestellung

Gleichung (3.25) enthält einen Ausdruck, der bereits in (3.26) als Informationsmatrix

$$S_i^{-1} = (K^T S_\epsilon^{-1} K + R^{-1})^{-1}$$

bezeichnet wurde. Dieser Ausdruck stellt die Kovarianzmatrix des Gesamtretrievals dar. Er ist also ein Maß für den Gesamtfehler des Retrievals. Der erste Summand auf der rechten Seite von (3.26) berücksichtigt jedoch nur die Kovarianzen der Messung und geht von einer „perfekten“ Vorwärtsmodellierung aus, d. h. Unsicherheiten in den Modellparametern (wie systematische Fehler) werden ausgeklammert, obwohl die Matrix S_ϵ^{-1} als Gewichtungsterm für den Ausdruck $(\bar{y} - \bar{F}(\bar{x}))$ verwendet wird. Betrachtet man jedoch beispielsweise die Temperaturprofile, die das Vorwärtsmodell als Input für den Start eines nachfolgenden Spurengasretrievals benötigt, als unsicher, so muss diesem Sachverhalt Rechnung getragen werden. Eine Unsicherheit im Temperaturprofil würde wegen der direkten Abhängigkeit der Strahldichte von der Temperatur im Falle des infraroten Strahlungstransfers zu weiteren Unsicherheiten im retrievalten Spurengasprofil führen.

Es ist somit nötig, einen Korrekturterm an den Ausdruck für die Kovarianzmatrix der Messung anzufügen. In der Literatur stehen hierfür verschiedene Ansätze als Lösungsoptionen zur Verfügung. In der vorliegenden Arbeit wenden wir einen Ansatz an, der von v. Clarman *et al.* beschrieben wurde [10]. Wir wählen diesen Ansatz, weil er sich relativ leicht in den bestehenden MIPAS-Prozessor integrieren lässt. Ausdrücklich sei darauf hingewiesen, dass es in der Literatur noch andere Verfahren gibt, die ebenfalls die Berücksichtigung systematischer Fehler zum Ziel haben, aber deren Terme z. B. nur auf die Diagonalelemente von S_ϵ^{-1} wirken [42] oder deren Einsatz zweckmäßigerweise an Stellen in der Retrievalrechnung erfolgen muss, an denen man beim vorliegenden MIPAS-Prozessor nur schwer Zugriff auf die nötigen Datenstrukturen erhält [53].

4.2.1.1 Theorie

Um die bereits bestehenden programmierten Methoden im MIPAS-Prozessor optimal nutzen zu können, wird auf einen Ansatz, der ohne eine Erweiterung des Retrievalvektors auskommt, zurückgegriffen. Hierbei wird die Korrektur an die Kovarianzmatrix der Messung S_ϵ angebracht:

$$\tilde{S}_\epsilon^{-1} = (S_\epsilon + \bar{B}\bar{B}^T)^{-1} \quad (4.32)$$

Man erhält dadurch eine generalisierte Kovarianzmatrix, die nun sowohl Unsicherheiten in der Messung, als auch Unsicherheiten in Modellparametern berücksichtigen kann [10].

Die Korrektur beruht auf der Differenz von Spektren, eines „perfekten“ und eines „gestörten“ Vorwärtsmodelllaufes

$$\vec{B} = \vec{F}(\vec{x}, \vec{\mu} + \Delta\vec{\mu}) - \vec{F}(\vec{x}, \vec{\mu}) \quad (4.33)$$

$\vec{\mu}$ unsicherer Modellparameter

$\Delta\vec{\mu}$ Störung des Modellparameters um ein Sigma

Durch Umformung [49] erhält man einen einfachen Ausdruck, der mit den im vorliegenden Retrieval bereits vorhandenen Größen auskommt und keine neuen Inversionen, sondern lediglich Blockmatrizenmultiplikationen erfordert. Man darf bei den praktischen Anwendungen nie aus den Augen verlieren, dass man es hier mit sehr großen Matrizen zu tun hat. Demzufolge sind Operationen mit diesen Matrizen immer unter dem Gesichtspunkt der möglichst einfachen Handhabbarkeit zu sehen. Die Ausführung von Multiplikationen großer Matrizen oder Inversionen ist hierbei sowohl unter dem Gesichtspunkt der Rechengenauigkeit als auch der Allokation großer Mengen von Speicherplatz zu sehen. Beides sind limitierende Faktoren in einem so komplexen System wie dem hier verwendeten Retrieval.

Aus diesen Gründen ist immer darauf zu achten, möglichst einfache mathematische Operationen und/oder Matrizen mit überschaubaren Dimensionen zu verwenden. Man erhält mit den erwähnten Umformungen [49] den folgenden Ausdruck [10]

$$\tilde{S}_\epsilon^{-1} = S_\epsilon^{-1} - (S_\epsilon^{-1} B (I + B^T S_\epsilon^{-1} B)^{-1} B^T S_\epsilon^{-1}) \quad (4.34)$$

Dieser Ausdruck wird nun anstatt des ursprünglichen Terms für S_ϵ^{-1} benutzt.

Führt man die Vektor- und Matrizenmultiplikationen wie beschrieben aus und betrachtet (4.32), erkennt man, dass die symmetrische, positiv definite Matrix S_ϵ^{-1} um einen ebenfalls symmetrischen Anteil ergänzt wird. An den grundsätzlichen Eigenschaften der Matrizen, die als Kovarianzmatrizen ausgelegt sind, ändert sich somit nichts. Es werden in den Bereichen der Matrix S_ϵ^{-1} , in denen eine angepasste Gewichtung durch die Berücksichtigung der zusätzlichen Unsicherheiten in Modellparametern notwendig ist, Matrixelemente verändert. Das kann dazu führen, dass die i. A. vorhandene Blockstruktur von S_ϵ^{-1} verloren geht. Je nach der Größe der Korrektur kann die Struktur im Einzelfall jedoch prinzipiell erhalten bleiben.

Am stärksten ist die Auswirkung der Korrektur naturgemäß dann, wenn man ursprünglich mit einer diagonalen S_ϵ^{-1} statt mit einer Blockdiagonalmatrix gerechnet hat.

Der Nachteil des Verfahrens besteht in seinem großem Speicherbedarf, da die beteiligten Matrizen mehrere Megabyte groß werden können.

4.2.2 Anwendung auf simulierte Daten

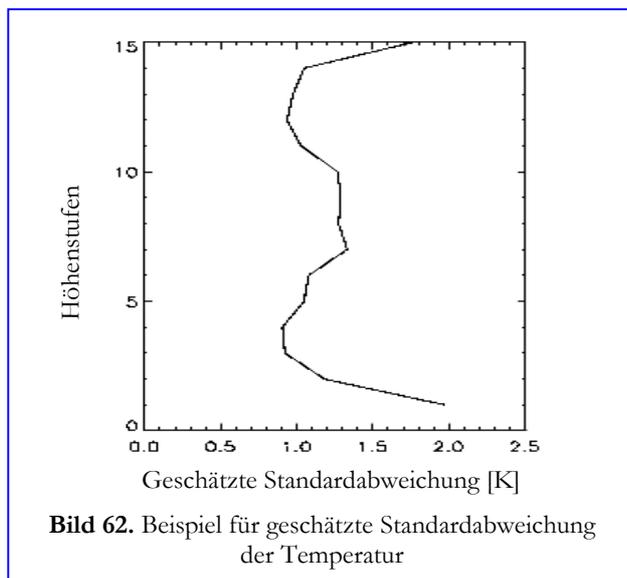
4.2.2.1 Voraussetzungen für die durchgeführten Arbeiten

Mit KOPRA wurden Vorwärtsmodellrechnungen mit einem Temperaturprofil T durchgeführt, bei denen Ozonspektren auf 16 Höhenstufen berechnet wurden. Im Anschluss daran erfolgten Vorwärtsmodellrechnungen mit einem Temperaturprofil $T+dT$. dT stellt eine kleine, im Allgemeinen höhenvariable Variation des Temperaturprofils dar. Mit dem geänderten Temperaturprofil wurden erneut höhenabhängige Ozonspektren berechnet.

Die Variation des Temperaturprofils wurde für die folgenden Darstellungen zu Demonstrationszwecken auf allen Höhenstufen zunächst mit +3 K festgesetzt.

Zur Bestimmung von realistischen Abweichungen kann man den geschätzten Fehler heranziehen, der bei einem typischen Temperaturretrieval auftritt. Die geschätzte Standardabweichung ESDN ergibt sich bei dem in Kapitel 3 diskutierten Ansatz für die Berechnung der Profile aus den quadratischen Diagonalelementen der Informationsmatrix (3.25). Man erhält damit den höhenaufgelösten geschätzten Fehler eines Retrievals. Führt man ein Temperaturretrieval durch, erhält man also durch Auswertung dieser Diagonalelemente den höhenaufgelösten geschätzten Fehler des Temperaturprofils.

Durch Vergleiche dieser geschätzten Fehler aus einer großen Anzahl von Testläufen kann man so typische Fehlerprofile, pro Jahreszeit und auf eine bestimmte Erdregion bezogen, ableiten. Bild



62 zeigt ein typisches ESDN-Profil eines Temperaturretrievals für mittlere Breiten (Sommermonate). Gezeigt ist der geschätzte Fehler aufgetragen über 16 Höhenstufen, nummeriert von 0 bis 15 (nicht in km), von 8 – 53 km. Die Zuordnung der Höhenstufen zu den einzelnen Kilometerangaben ergibt sich aus den Gittern, die in Anhang A.IV zu finden sind. Die Maximalwerte der Abweichungen liegen in diesem Beispiel bei etwa 2 K. Das verwendete Retrieval war regulärisiert, deswegen liegen die Abweichungen in einem relativ engen Korridor.

Die Annahme eines höhenkonstanten Fehlers von +3 K ist für ein unregulärisiertes Temperaturprofil nicht völlig unrealistisch

und man erzielt damit einen für Demonstrationszwecke wesentlich deutlicheren Effekt auf die Profile in der Retrievalrechnung als durch die Anwendung der realistischen, gleichwohl im Mittel niedrigeren, Werte.

Aus den beiden erhaltenen Sätzen von Spektren wurde der Vektor \vec{B} , wie in (4.33) beschrieben, berechnet und nach (4.32) bzw. (4.34) der Korrekturterm gebildet.

Der Effekt der Korrekturmatrix besteht im vorliegenden Fall nun darin, temperaturabhängige Teile der Spektren der Spezies anders zu gewichten, als in der unkorrigierten Form. Dies hat weit reichende Auswirkungen in der Rechnung, weil sich durch die Belegung von Matrizen-elementen mit Werten ungleich null (gegenüber S_ϵ als diagonaldominierter Matrix) nach der Bildung der inversen \tilde{S}_ϵ -Matrix sowohl der Einfluss der Jakobi-Matrizen ändert, als auch der Einfluss der Regularisierung, die dann durch Adaption des Skalierungsfaktors an die neuen Verhältnisse angepasst werden muss. Dies lässt sich leicht nachvollziehen, wenn man die einzelnen Terme in (3.26) betrachtet und sich vor Augen führt, dass eine Matrizenmultiplikation immer mit einer Summenbildung verbunden ist. Mehr Summanden führen zu teilweise dramatischen Änderungen in den Ergebnissen.

Nach diesen vorbereitenden Maßnahmen wurden Ozon-Retrievalrechnungen einmal mit dem Temperatur-Korrekturterm und einmal ohne, jeweils mit und ohne gestörtem Temperaturprofil, gestartet. Die Ergebnisse werden im folgenden Abschnitt präsentiert. Alle Untersuchungen wurden mit simulierten Daten durchgeführt, um „wahre“ Referenzprofile der jeweiligen Retrievalziele zur Verfügung zu haben. Dies ist notwendig, da man bei einer Anwendung auf reale Daten naturgemäß keine absoluten Vergleichsdaten hat.

Die übrige Parametrisierung (Regularisierung, Atmosphärensetup etc) ist für die folgenden Profile identisch. Um die Darstellbarkeit der wesentlichen Erkenntnisse, die herausgearbeitet werden sollen, nicht durch Rauscheinflüsse zu maskieren, wurde stark regularisiert. Zudem wird nur jeweils die erste Iteration gezeigt, weil hier die Unterschiede am dramatischsten sind. Beides zusammen führt bei den dargestellten Profilen zum Teil dazu, dass die berechneten Profile (noch) sehr nahe an den Init-Guess-Profilen liegen.

4.2.2.2 Verwendete Größen zur Fehleranalyse

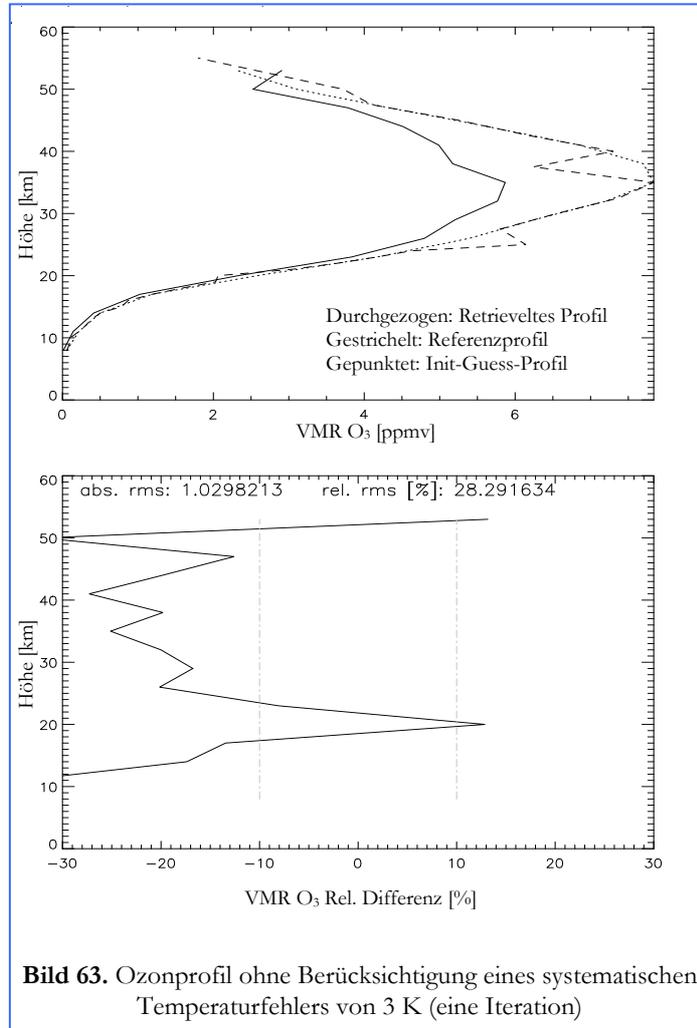
Da bei den nachfolgenden Betrachtungen Referenzdaten in Form von Simulationseingaben zur Verfügung standen, sind Abweichungen jeweils auf diese Referenzdaten bezogen. Wir verwenden wieder die in Abschnitt 3.5.2.3 beschriebenen Größen

- Relative Standardabweichung
- Absolute Standardabweichung
- Relative Differenz

Diese drei Ausdrücke dienen bei Vorhandensein eines Referenzwertes zur Beurteilung, wie stark ein retrievedes Profil von dem als korrekt anzunehmenden Profil abweicht.

4.2.2.3 Die Anwendung der Korrekturen in der vorliegenden Arbeit

Bild 63 zeigt die Ergebnisse einer Retrievalrechnung für ein simuliertes Ozonprofil in mittleren Breiten. Das durchgezogene Profil ist das Ergebnis der ersten Iteration, das gepunktete Profil stellt das Init-Guess-Profil und das gestrichelte Profil das Referenzprofil dar. Init-Guess- und Referenzprofil unterscheiden sich lediglich um künstlich in die Referenzdaten eingefügte Abweichungen in Form von Spitzen.



Das Ergebnisprofil weicht signifikant vom Referenzprofil ab, die entsprechenden Fehlergrößen sind im unteren Teil der Abbildung aufgetragen. Man erkennt eine systematische Abweichung des Ergebnisses, was sich in der einseitigen Konzentration der aufgetragenen Fehlergrößen widerspiegelt.

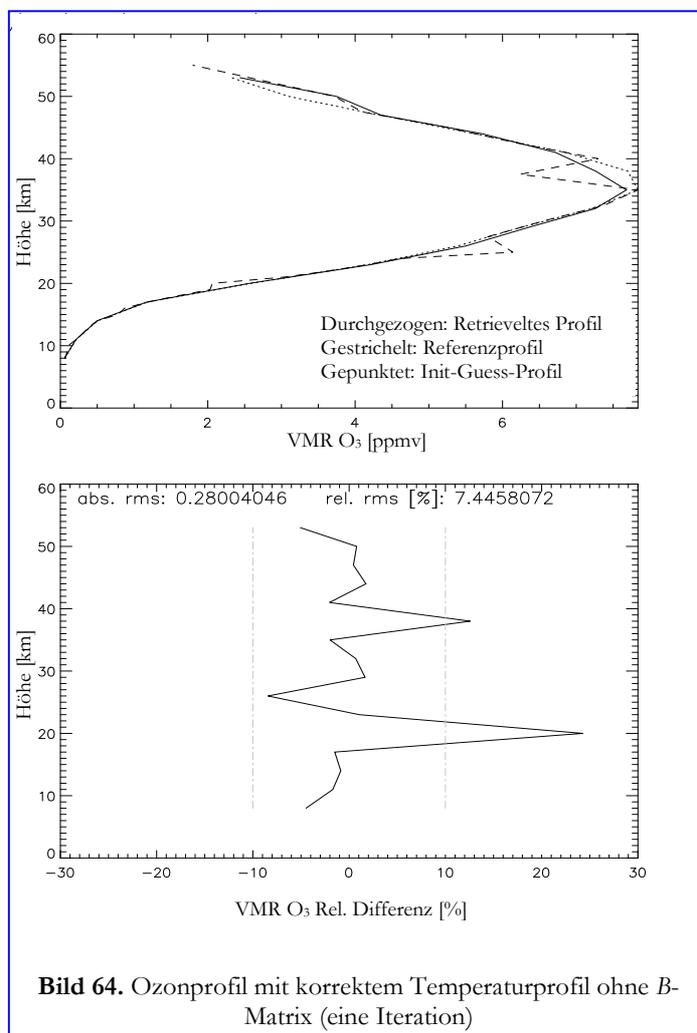
Im Vergleich dazu zeigt Bild 64 ein Ozonprofil, das, bis auf einen Unterschied, mit der exakt gleichen Parametrisierung errechnet wurde, wie das Ozonprofil in Bild 63. Der Unterschied besteht in der Verwendung des korrekten Temperaturprofils für das Retrieval. „Korrekt“ meint in diesem Fall, dass dasselbe Temperaturprofil für das Retrieval verwendet wurde, wie bei der Berechnung des Referenzprofils. Bis auf Unterschiede, die bei der Modellierung durch Rauschen entstehen, sollte das Retrieval also in der Lage

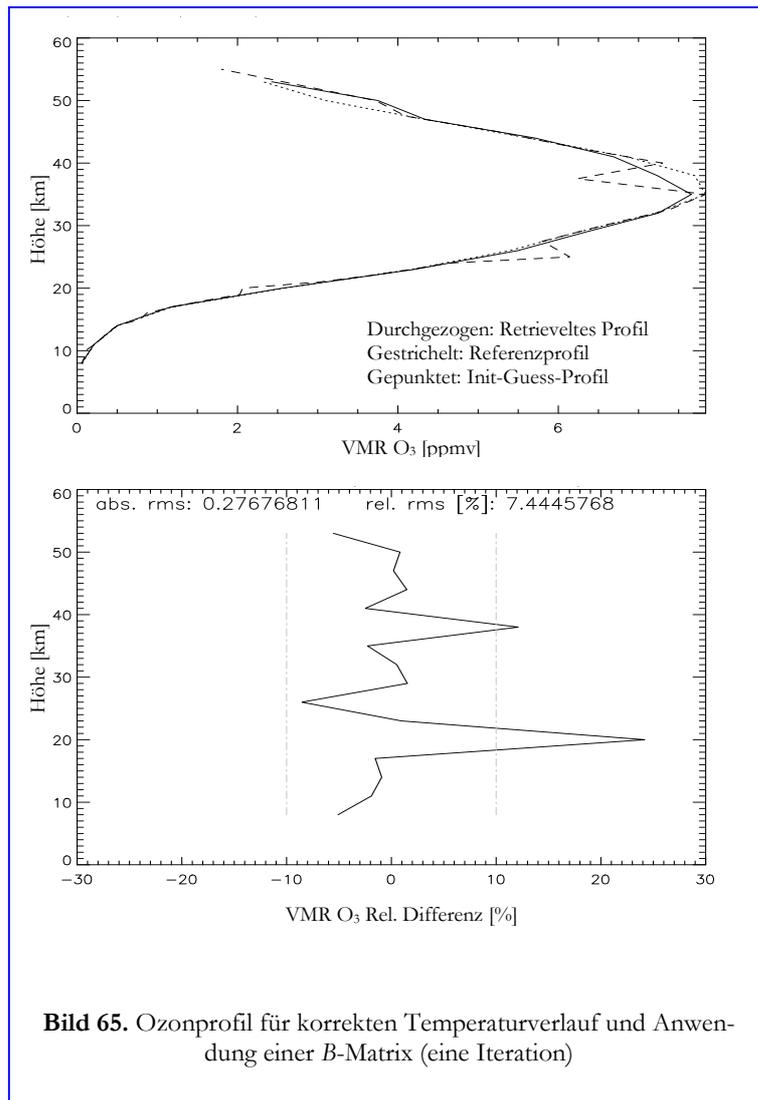
sein, das Referenzprofil unter Berücksichtigung der Regularisierung zu reproduzieren. Man erkennt, dass das Ergebnisprofil, bereits in der gezeigten ersten Iteration nahe am Referenzprofil liegt und auch die aufgetragenen Fehlergrößen (Abweichung des Referenzprofils von Retrievalziel) zeigen deutlich, dass die Verwendung des Referenztemperaturprofils das Ergebnis sowohl hinsichtlich der relativen als auch der absoluten Abweichungen gegenüber dem Referenzprofil verbessert.

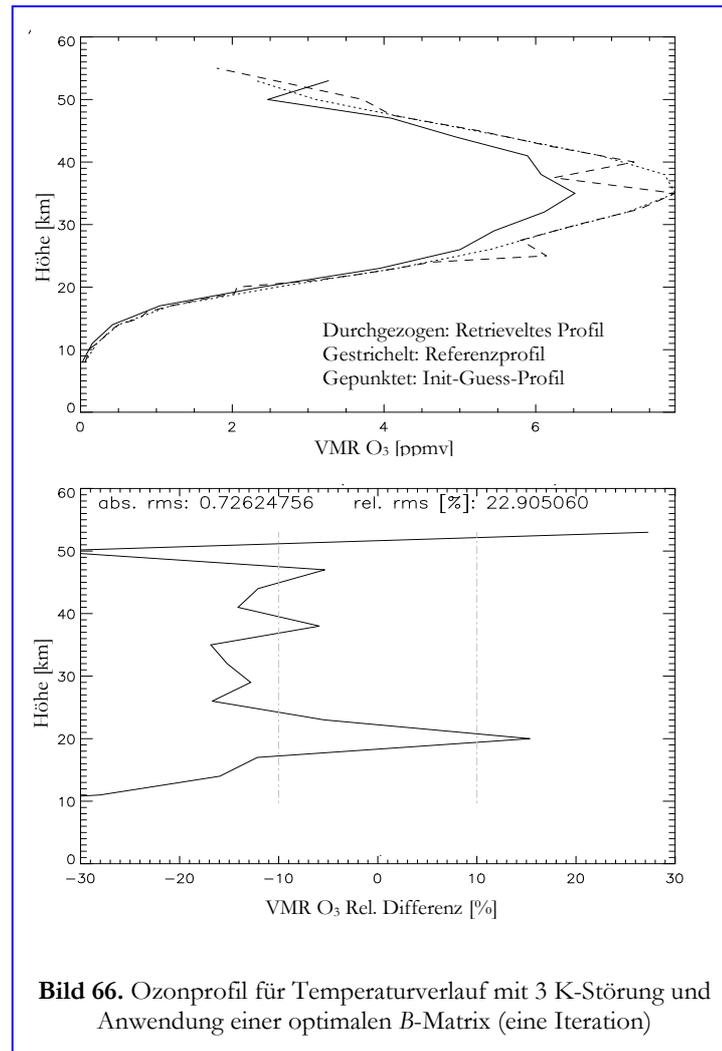
Im Allgemeinen kann man jedoch nicht davon ausgehen, die korrekten Temperaturprofile für eine Atmosphärensituation zu kennen, deswegen muss man mit entsprechenden Annahmen versuchen, vermutlich auftretende Abweichungen abzufangen.

Bildet man nach den in Abschnitt 4.2.1 gezeigten Überlegungen die Korrekturmatrix $\vec{B}\vec{B}^T$, die wir im Weiteren kurz als B -Matrix bezeichnen, und bringt diese Matrix wie beschrieben in die Rechnung ein, so ergibt sich für den Fall mit dem korrekten Temperaturverlauf der in Bild 65 gezeigte Verlauf für das berechnete Ozonprofil. Ein Vergleich des Ozonprofils mit dem in Bild 64 dargestellten sowie ein Vergleich der aufgetragenen Fehlergrößen, zeigt erwartungsgemäß keinen signifikanten Unterschied zwischen den beiden Retrievalergebnissen. Dies war zu erwarten und ist auch gewünscht, denn die B -Matrix sollte ja nur dann eine sichtbare Wirkung entfalten, wenn man von einer fehlerbehafteten Eingangsgröße, in diesem Fall dem Temperaturprofil, auszugehen hat.

Das Ergebnis des entscheidenden Tests entnimmt man aus Bild 66. Es handelt sich, bis auf ein wesentliches Merkmal, um das gleiche Retrieval, das die in Bild 63 gezeigten Profile erzeugte. Der Unterschied besteht in der Anwendung der nach Abschnitt 4.2.1 berechneten B -Matrix. Das verwendete Temperaturprofil ist das bereits bekannte, global um 3 K zu hoch angenommene, Temperaturprofil. Man erkennt, bei Anwendung der optimalen B -Matrix, im Vergleich zu Bild 63 eine entscheidende Verbesserung des Profilverlaufs hinsichtlich der Abweichung vom Referenzprofil. Sowohl der relative Fehler als auch die absoluten Abweichungen fallen bereits nach der ersten Iteration wesentlich geringer aus.







4.2.2.4 Zusammenfassung

Die gezeigten Sachverhalte zeigen deutlich, welche signifikanten Auswirkungen Optimierungen haben können.

Die Ergebnisprofile, die mit den Korrekturtermen berechnet wurden, liegen wesentlich näher an den Referenzwerten.

Da jede geographische Zone der Erde andere Korrekturterme verlangt, liegt es nahe, die Bildung der Korrekturterme zu systematisieren, um so im operationellen Betrieb jeweils die für die aktuellen Verhältnisse gültigen Korrekturen zur Hand zu haben.

Die Fortführung der Arbeiten in dieser Richtung wäre ein wichtiger Schritt, um die gewonnenen Erkenntnisse gewinnbringend einzusetzen. Dabei wäre es zudem möglich, einen Vergleich verschiedener Verfahren zu erstellen, da in 4.2.1 erwähnt wurde, dass es mehrere Verfahrensvarianten bei der Berücksichtigung systematischer Fehler gibt. Aktuelle Arbeiten beschäftigen sich mit diesen Themen.

Im nächsten Abschnitt der Arbeit betrachten wir ein Verfahren, das es ermöglicht, durch Wolkeinflüsse kontaminierte Messungen zu erkennen und ggf. auszusondern.

4.3 Wolkenerkennung

4.3.1 Fragestellung

Wie in Kapitel 2 berichtet wurde, ist MIPAS ein horizontal sondierendes Gerät. Um ein Vertikalprofil der zu retrievelnden Spezies zu erhalten, erfolgen die einzelnen Messungen in auf- oder absteigender Höhe.

Man kann sich leicht veranschaulichen, dass es bei dieser Art der Messung besonders wichtig ist, freies Sichtfeld im verwendeten Spektralbereich zu haben. Liegen optische Hindernisse im Weg des Sichtstrahls, so beeinflussen diese Hindernisse die aktuelle Messung und durch Fehlerpropagation in der Retrievalrechnung letztlich die Ergebnisse des gesamten Scans. Es besteht jedoch die Möglichkeit, solche kontaminierten Messungen zu erkennen und auszusondern. Unter Umständen ist man jedoch sehr daran interessiert, möglichst viele Messungen in den für Troposphärenwissenschaftler besonders interessanten unteren Regionen der Atmosphäre zu erhalten. In diesem Fall wäre es vorteilhaft, wenn man den Bedeckungsgrad einer Szene erkennen könnte, um Messungen, die nur eine geringe Teilbedeckung und somit eine geringe Störung aufweisen, entsprechend kenntlich zu machen und speziell zu verarbeiten oder sich ganz auf Wolken zu konzentrieren.

Das Erkennungsverfahren basiert auf der Annahme, dass Wolken, gleich welcher Art, irgendeine Signatur in den Spektren hinterlassen müssen, da sie offenkundig zumindest das lokale Strahlungsfeld beeinflussen. Findet man Spektralbereiche, in denen sich eine Signatur in der gleichen Art und Weise immer dann abbildet, wenn man von Wolken auszugehen hat, dann hat man damit ein Werkzeug, um eine einfache Ja-Nein-Entscheidung zu treffen. Falls es sogar möglich ist, Unterscheidungen bezüglich der Eigenschaften der Wolken aus der Anwendung dieses Werkzeugs abzuleiten, so erhält man einen Wolkenindex, der dem Retrieval vorgeschaltet werden kann, um unbrauchbare Messungen auszusondern und zusätzlich dazu dient, etwas über die spektralen Charakteristika von Wolken zu lernen.

4.3.1.1 Theorie

Das Prinzip der Wolkenerkennung für MIPAS-Spektren kann man sich anhand einer kurzen, gleichwohl sehr vereinfachten, Rechnung vor Augen führen. Wir betrachten die Umgebung des Tangentenpunktes und fassen sie als einen Quader auf, dessen lange Achse in Richtung der Sichtlinie liegen soll. Die Transmissionseigenschaften des Quaders ändern sich über seine Länge, wenn er eine Wolke enthält. Sei die Transmission am satellitenfernen Ende des Quaders 1 und am satellitennahen Ende τ , dann lässt sich (3.4) mit der Planck-Funktion $B(\nu, T)$ im einfachsten Fall schreiben als

$$F(\tau) = B(\nu, T) \cdot (1 - \tau) \quad (4.35)$$

Nimmt man Analogie zu (3.5) für $\tau = \exp(-(\chi + \chi_c))$ in an, dann wird (4.35) zu

$$F(\tau(\chi, \chi_c)) = B(\nu, T) \cdot (1 - \exp(-(\chi + \chi_c))) \quad (4.36)$$

χ optische Dicke der wolkenlosen Atmosphäre am Tangentenpunkt

χ_c optische Dicke der betrachteten Wolke

Bildet man nun das Verhältnis aus zwei Strahldichten F_1 und F_2 , so erhält man, wenn man $B_1 \approx B_2$ zu Grunde legt und χ_1 und χ_2 als bekannt voraussetzt, einen Wert CI (**C**loud **I**ndex) der proportional nur von den optischen Eigenschaften der Wolke abhängt

$$CI = \frac{F_1}{F_2} \approx \frac{1 - \exp(-\chi_1) \cdot \exp(-\chi_c)}{1 - \exp(-\chi_2) \cdot \exp(-\chi_c)} \quad (4.37).$$

Die Bestimmung der Strahldichten F_i ist hierbei grundsätzlich beliebig, muss aber natürlich Strahldichten beinhalten, die aus Spektralbereichen stammen, die Wirkung auf das Vorhandensein von Wolken zeigen.

Spang verwendete Verhältnisse von Mittelwerten von Strahldichten aus zwei Wellenlängenbereichen [60]. Die Bereiche liegen zwischen 788-796 cm^{-1} und 832-834 cm^{-1} . Im ersten Bereich findet man dominierende Kohlendioxid-Emissionslinien. Der zweite Bereich wird durch von Aerosol verursachte breitbandige Emissionen dominiert.

Spang interpretiert Wolken als Aerosole und argumentiert, dass eine Wolke im Mittel zu verstärkter Emission im betrachteten Aerosolspektralbereich führt, also gewissermaßen das mittlere Niveau der Aerosolemission anhebt. Bezogen auf den hinsichtlich Wolkeneinflüssen relativ unempfindlichen betrachteten Kohlendioxid-Spektralbereich, kann man so einen durch Erreichen eines Schwellwertes höhen aufgelösten Index definieren. Das Verhältnis, das man errechnet, ist der oben beschriebene CI . Erreicht der CI einen gewissen Schwellwert, so indiziert er damit das Vorhandensein einer Wolke.

4.3.1.2 Die Wolkenerkennung in der vorliegenden Arbeit

In umfangreichen Testläufen wurden mit dem Vorwärtsmodell KOPRA durch Variation von Absorptionskoeffizienten bewölkte Atmosphärensituationen simuliert und die Reaktion des Cloud Index untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass man bei Verwendung alternativer Kriterien für die Auswahl der Strahldichten zur Berechnung eines Cloud Index Aussagen über teilbedeckte Szenen machen kann.

Bei den MIPAS-Messungen kann es vorkommen, dass Wolken in der Sichtlinie nur teilweise in das in Kapitel 2 beschriebene Gesichtsfeld ragen. Die zu klärende Frage war nun, ob sich teilbedeckte Szenen von vollbedeckten oder unbedeckten Szenen unterscheiden lassen und man eine zuverlässige Schranke definieren kann, um durch Wolkeneinflüsse kontaminierte Spektren auszuwählen. Nimmt man als Kriterium das Kontrastverhältnis der gemittelten Strahldichten aus den in 4.3.1.1 genannten Spektralbereichen

$$\frac{\overline{F}_{CO_2, b_T} - \overline{F}_{Aerosol, b_T}}{\overline{F}_{CO_2, b_T} + \overline{F}_{Aerosol, b_T}} \quad (4.38)$$

mit b_T = Tangentenhöhe an, so erhält man normierte, höhenaufgelöste und strukturierte Indizes. Aus der Struktur und der Kenntnis der Verhältnisse in der Modellierung lassen sich Korrelationen zwischen Indexwert und Bedeckungsgrad des Field-of-View herstellen und Wolkenoberkanten bestimmen, weil das Erreichen des Indexwerts ein Hinweis auf die Wolkenoberkante einer Wolke ist. Die Normierung ist hilfreich bei der Beurteilung der Fälle, da sich Abweichungen von der Norm klar abgrenzen.

Zur Gegenprobe der Ergebnisse wurde der Wolkenindex nach Spang herangezogen (nicht gezeigt), weil er als Referenzmethode dient [60].

4.3.2 Anwendung der Wolkenerkennung bei KOPRA-Spektren

Die folgenden Untersuchungen wurden mit Hilfe des Vorwärtsmodells KOPRA durchgeführt. Die Atmosphärenkonfiguration von KOPRA wird in der Praxis durch die Angabe von Höhenprofilen von Atmosphärenparametern (Aerosole, Gase, Temperatur, Druck) bewerkstelligt. Im vorliegenden Fall lagen diese Profile auf „US-Standard“-Gittern vor, die zwischen 0 und 25 km einen Gitterpunktstapfenabstand von 1 km, zwischen 25 km und 50 km einen Abstand von 2,5 km und zwischen 50 und 120 km einen Gitterpunktstapfenabstand von 5 km haben.

Um ein optisches Hindernis in Form einer Wolke zu simulieren, wurde dem Vorwärtsmodell ein Aerosolprofil bereitgestellt, das auf dem gegebenen Höhengitter in bestimmten Höhen extreme Absorptionskoeffizienten (10 km^{-1}) aufwies. Eine Temperaturparametrisierung für die Wolken wurde nicht vorgenommen. Insbesondere betrachten wir Szenen mit kalten Wolken hinter einer warmen Atmosphäre. Bei diesen Szenen kann man davon ausgehen Emissionslinien zu erhalten. Im Gegensatz dazu würden warme Wolken hinter einer kalten Atmosphäre Absorptionsspektren erzeugen.

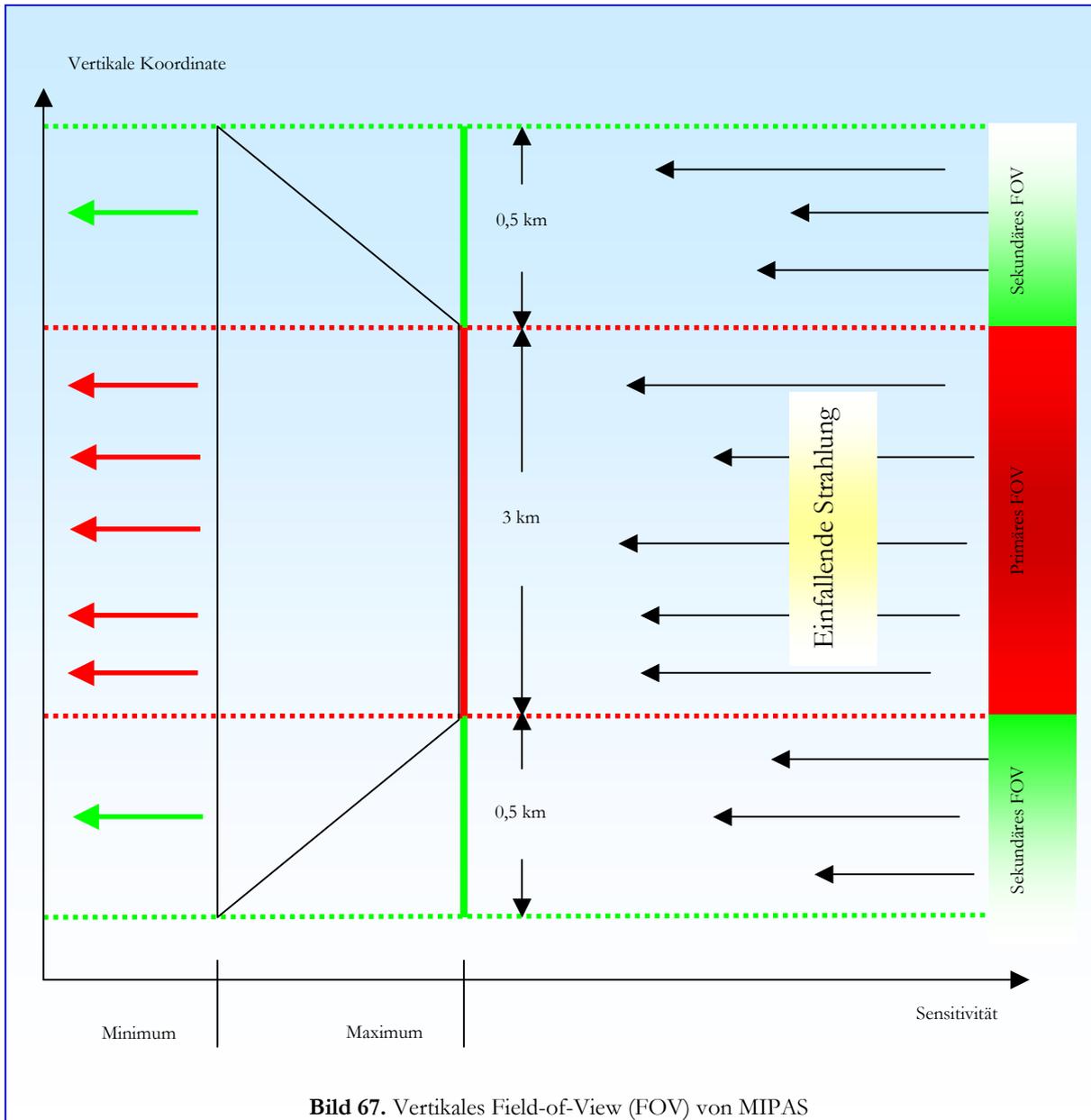
Die in der Praxis verwendeten Profile definieren ihre Werte auf diskreten Höhen, deswegen muss man bei einem Höhengitter mit einer Gitterkonstanten von 1 km die vertikale Ausdehnung eines optischen Hindernisses auf einer bestimmten Höhe immer mit mindestens 1 km annehmen. Dies ist wegen des Fields of View (FOV) von MIPAS von Bedeutung.

4.3.2.1 Besonderheiten durch das Field-of-View von MIPAS

In Kapitel 2 wurde bereits darauf hingewiesen, dass das FOV von MIPAS eine spezielle Empfindlichkeitscharakteristik aufweist. Wir betrachten das vertikale Field-of-View von MIPAS am Tangentenpunkt. Bild 67 illustriert die Zusammenhänge.

Wie wir bereits wissen, ergibt sich durch die Instrumentenauslegung ein Bereich, aus dem MIPAS uneingeschränkt Strahlung empfängt. Dieser ist in Bild 67 rot markiert (primäres FOV). Seitlich des primären Field-of-View gibt es Bereiche, aus denen noch Strahlung auf die MIPAS-Detektoren einfällt. In den Randbereichen des Gesichtsfeldes von MIPAS nimmt die Empfindlichkeit für aufzunehmende Strahlung im Wesentlichen linear ab. Diese Bereiche sind grün dargestellt (sekundäres FOV). Das bedeutet insbesondere, dass man auch Einflüsse in Betracht ziehen muss, deren Ursache außerhalb der idealen Sichtlinie von MIPAS liegen. Ein Beispiel hierfür sind Wolken, die teilweise oder vollständig in das vertikale Field-of-View von MIPAS hineinragen. Dies ist umso wichtiger, da die Größenordnungen dieses FOV am Tangentenpunkt durchaus im Bereich von vertikalen

Wolkenausdehnungen liegen. Das vertikale FOV am Tangentenpunkt betrug in den Simulationen insgesamt 4 km, siehe Bild 67. Es wurde angenommen, dass die Wolken die volle horizontale Breite des FOV bedecken.



4.3.2.2 Verwendete Szenarien

Bild 68 zeigt die ausgewählten Szenarien, die zur Untersuchung herangezogen wurden (mittlere Breiten, Sommeratmosphäre). Die Szenarien wurden so ausgewählt, dass eine möglichst große Auswahl von interessanten Konfigurationen abgedeckt wird und sich gleichzeitig die wesentlichen Ergebnisse aus der relativ kompakten Darstellung ableiten lassen.

Die rötlich eingefärbten Bereiche zeigen jeweils das primäre FOV an. Die grünen Streifen illustrieren die Bereiche des sekundären FOV. Die FOVs sind um die zugehörigen Tangentenhöhen zentriert, an denen die simulierten Spektren, beginnend bei 8 km Höhe, erzeugt wurden. Die einzelnen Tangentenhöhen liegen 3 km auseinander. Ebenfalls in Bild 68 eingezeichnet sind die optischen Hindernisse in Form von Wolken in den entsprechenden Höhen in aufsteigender Nummerierung von links nach rechts. Die Hindernisse 3 und 5 sind gestrichelt gezeichnet, weil sie sich lediglich im modellierten Absorptionskoeffizienten von Nummer 2 bzw. 4 unterscheiden.

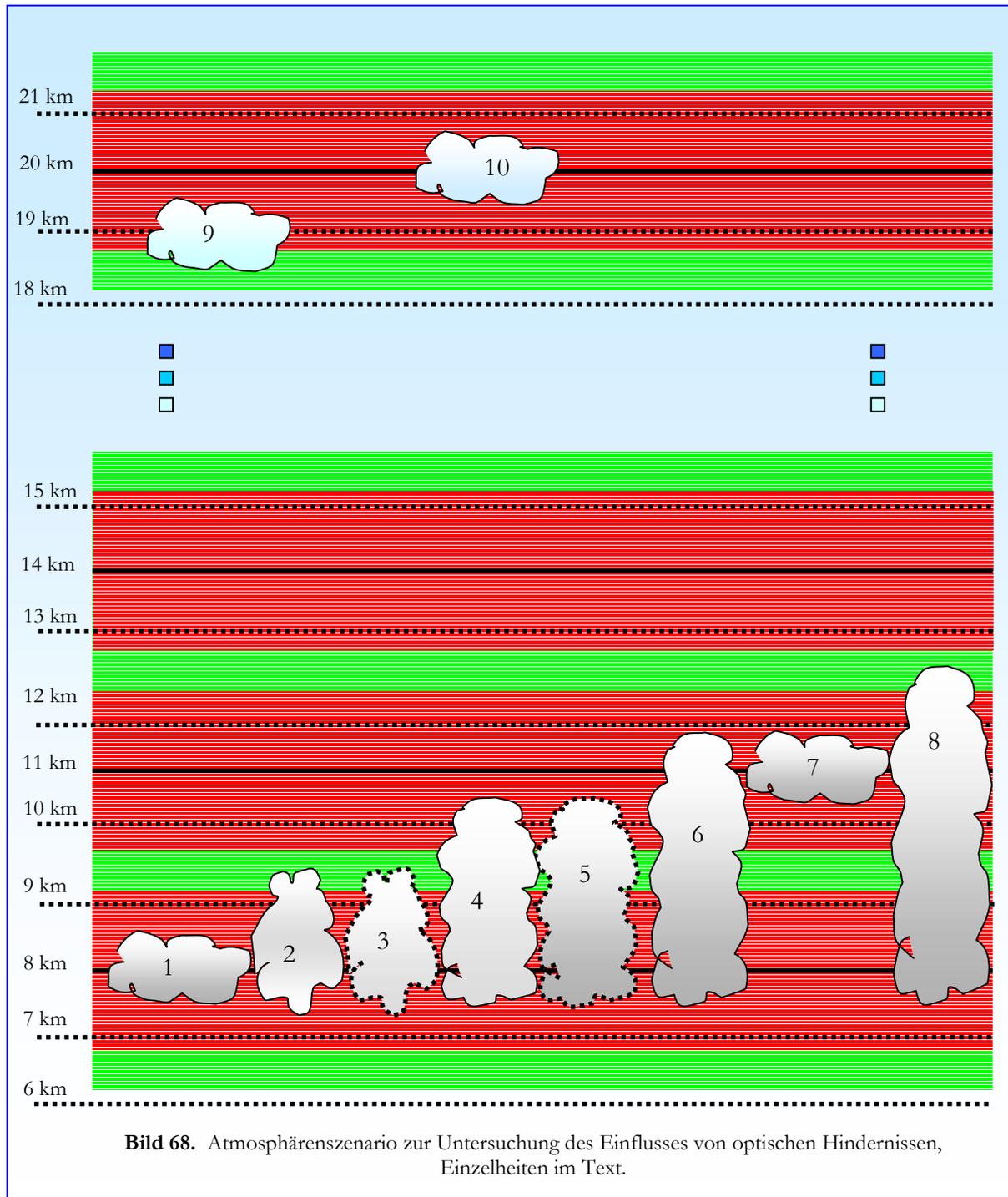


Bild 68. Atmosphärenszenario zur Untersuchung des Einflusses von optischen Hindernissen, Einzelheiten im Text.

4.3.3 Anwendung des Wolkenindex auf simulierte Daten

Die berechneten Wolkenindizes werden nach (4.38) als Kontrastindizes berechnet. Dies hat gegenüber der Darstellung von Spang im Wesentlichen den Vorteil einer Normierung, so dass Abweichungen von dieser Normierung sofort ins Auge fallen. Außerdem ergibt sich eine bessere Auflösung von vorhandenen Feinstrukturen.

In den nachfolgenden Bildern sind Indizes über ihren Wert pro Höhe aufgetragen, wobei die Indexwerte jeweils an den Tangentenhöhen berechnet wurden. Dies ist hinsichtlich der Verwendung in einem operationellen Umfeld sinnvoll, da man dort ebenfalls nur die Messungen an den Tangentenhöhen zur Bewertung heranziehen kann.

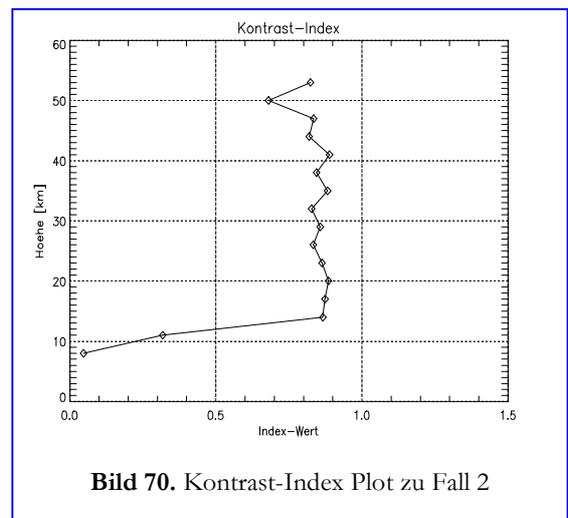
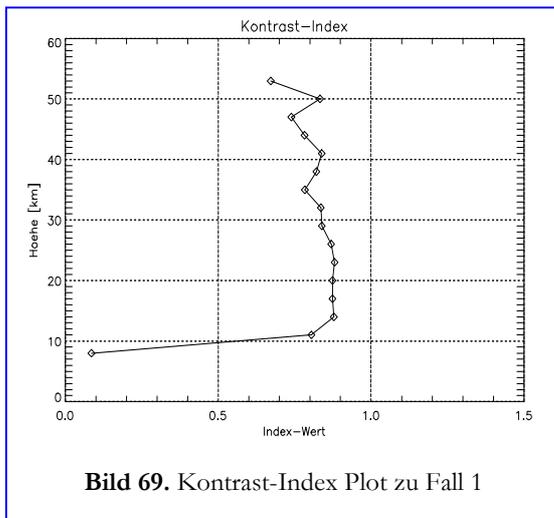
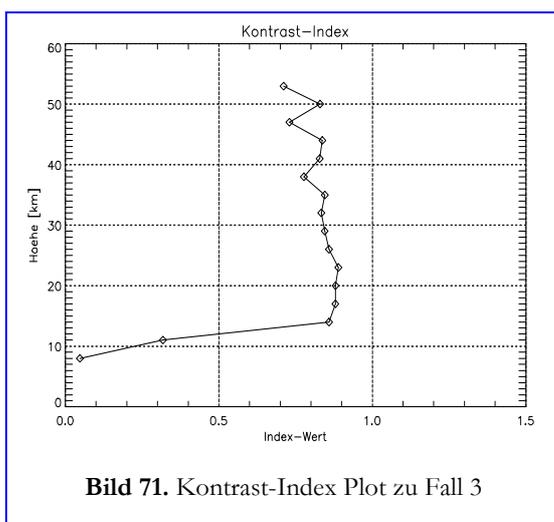


Bild 69 zeigt den Indexverlauf für Fall 1 (siehe Bild 68). Es wurde eine Wolke bei 8 km simuliert. Man erkennt eine deutliche Reaktion des Index bei 8 km, er sinkt von Werten um 0,85 auf einen Wert von ca. 0,08 ab. Diese Wolke im Fall 1 liegt im Zentrum des angenommenen FOV, bedeckt es jedoch nicht vollständig.



Fall 2 illustriert eine Situation mit einer Wolke, die sich über mehrere Höhenstufen erstreckt. Insbesondere ragt diese Wolke in das sekundäre FOV der Tangentenhöhe 11 km hinein. In Bild 70 ist eine deutliche Reaktion des Index bei 11 km zu sehen. Der Index fällt von Werten um 0,85 auf einen Wert von etwa 0,32 ab und unterschreitet bei 8 km sogar den oben angenommenen Wert von 0,08. Die Reaktion bei 11 km zeigt deutlich, dass schon eine „peripher“, also im sekundären FOV wahrgenommene Wolke die gesamte Messung beeinflussen kann. Da die Vergleichsrechnungen „neu“ verrauscht wurden, unterscheiden sich die Werte oberhalb von 50 km.

In Fall 3 wurde untersucht, ob eine Änderung des vorgegebenen Absorptionskoeffizienten von 10 km^{-1} , durch den die Wolken simuliert wurden, eine Auswirkung auf den Index hinsichtlich seiner Eigenschaft als Wolkenwarner hat. Dazu wurde die obere Hälfte der Wolke aus Fall 2 mit dem halben Absorptionskoeffizienten modelliert. Das wesentliche Ergebnis ist aus einem Vergleich von Bild 70 mit 71 abzulesen. Man erkennt keine gravierenden Unterschiede der Indexwerte in den für die Betrachtung interessanten Regionen bei 8 und 11 km. Somit ist eine Reaktion des Index auf derartige Änderungen mikrophysikalischer Wolkenparameter hier nicht nachweisbar.

Der nächste Fall ist von zentralem Interesse für die angestellten Indexuntersuchungen. Er soll zeigen, ob der Index in der Lage ist, zwischen einer peripher wahrgenommenen Wolke, wie in

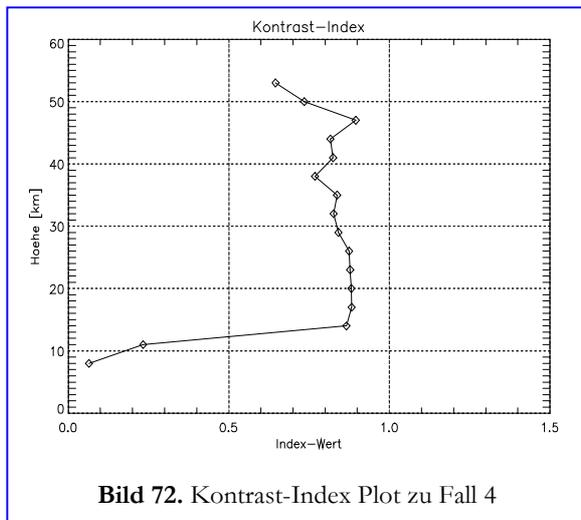


Bild 72. Kontrast-Index Plot zu Fall 4

Fall 2, und einer Wolke, die im primären FOV einer Tangentenhöhe liegt, zu unterscheiden. Wir betrachten hierzu Fall 4 und den zugehörigen Index-Plot in Bild 72. Der Verlauf ähnelt dem von Fall 2 stark, aber der Unterschied liegt im Detail. Ähnlich wie bei Fall 2 ragt die Wolke auch hier noch nicht vollständig in das zentrale FOV, wenngleich sie schon im primären Sichtfeld liegt. Der Indexwert für die Tangentenhöhe 11 km liegt bei Fall 4 mit 0,25 deutlich niedriger als der entsprechende Wert bei Fall 2 mit 0,32. Der Index kann also unterscheiden, ob eine Wolke im sekundären FOV liegt oder ob sie schon in das primäre FOV hineinragt. Damit ist ein weiteres wichtiges Ziel, das für den Index eingangs definiert wurde, erreicht.

In Fall 5 wurde, wie in Fall 3, eine im Absorptionskoeffizienten modifizierte Wolke, verwendet, um eine Abhängigkeit von Wolkenparametern zu untersuchen. Bild 73 zeigt den Indexverlauf. Man erkennt die gleichen wesentlichen Charakteristika in den interessanten Höhen bei 11 und 8 km, wie in Fall 4; die Schlussfolgerung aus Fall 3 bzgl. der Reaktion des Index auf Wolkenparameter bleibt unverändert. Im Weiteren wird aus diesem Grund auf die Präsentation von Ergebnissen mit veränderten Absorptionskoeffizienten verzichtet.

Die folgenden Betrachtungen sollen sicherstellen, dass der Index höhenunabhängig reagiert und sie sollen zeigen, dass man den Index zur groben Bestimmung von Wolkenoberkanten benutzen kann.

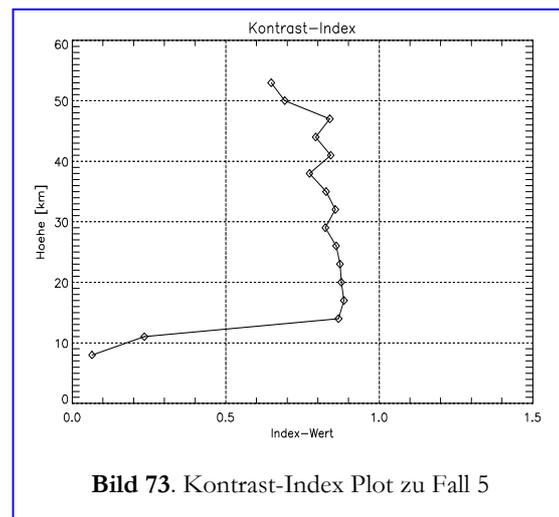
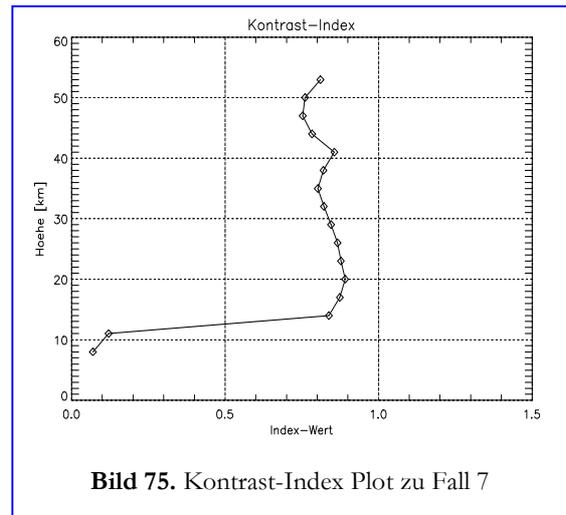
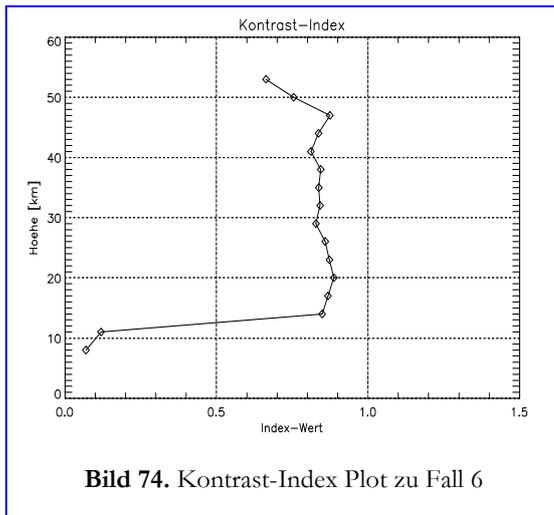


Bild 73. Kontrast-Index Plot zu Fall 5

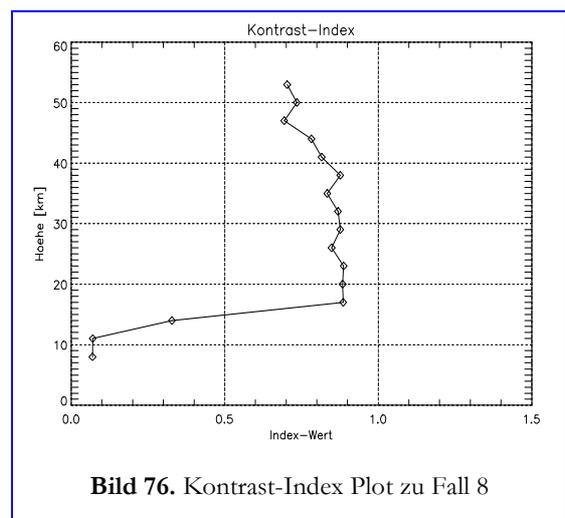


Wir betrachten dazu Fall 6. Es handelt sich um die gleiche Wolke wie in Fall 4 mit dem Unterschied, dass ihre vertikale Ausdehnung nun von 7,5 km bis 11,5 km reicht, also insbesondere in das zentrale FOV der Tangentenhöhe 11 km. Bild 74 zeigt den Indexverlauf und man erkennt eine deutliche Reaktion des Index, der bei 11 km von Werten um 0,85 auf einen Wert von 0,12 fällt und bei 8 km die schon bekannten 0,08 annimmt. Man erkennt wiederum ein weiteres Abfallen des Indexwertes, je weiter das Hindernis in das FOV ragt. In diesem Falle erreicht die Bedeckung des FOV in der Tangentenhöhe 11 km etwa 50%.

Anhand von Fall 7 wurde untersucht, ob es, unter Zugrundelegung von KOPRA als Vorwärtsmodell, einen Unterschied zwischen einer Wolke wie in Fall 6 und einer Wolke auf der Tangentenhöhe 11 km gibt, die unterhalb von 11 km keine Anteile hat. Bild 75 zeigt den Verlauf des Index für diesen Fall. Man erkennt zwischen Bild 74 und Bild 75 keinen signifikanten Unterschied in den Indexverläufen.

Somit werden, wenn man bei 11 km eine Wolke annimmt, alle Höhen unterhalb von 11 km behandelt, als befänden sie sich vollständig in Wolken. Diese Betrachtungen haben keinen Einfluss auf den Wert des Index als Wolkenwarner, denn bedingt durch die Sichtgeometrie von MIPAS ist diese Art der Modellierung für einen Limb sounder akzeptabel und die Erkenntnisse der Untersuchung bzgl. Teilbedeckungen des FOV von MIPAS werden davon nicht berührt. Die eindeutigen Reaktionen des Index auf das Vorhandensein von Wolken, lassen es jedoch zu, den Index zur groben Bestimmung von Wolkenoberkanten heranzuziehen.

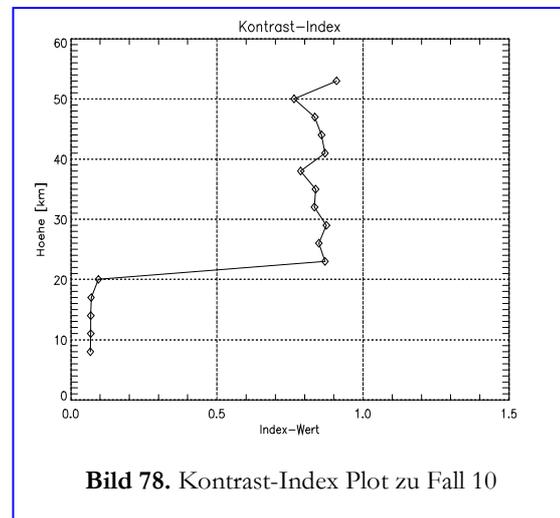
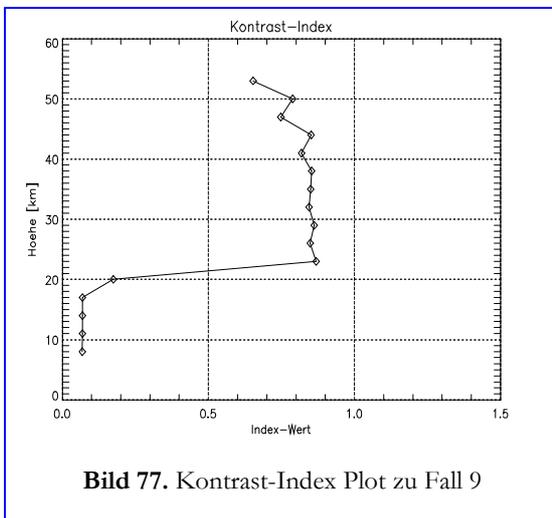
Fall Nummer 8 dient der Vollständigkeit, um die Betrachtungen über teilbedeckte FOVs abzuschließen, weil hier das gesamte FOV der Tangentenhöhe 11 km bedeckt ist und die Wolke gleichzeitig in das sekundäre FOV der Tangentenhöhe



14 km ragt. Bild 76 zeigt den Indexverlauf. Wie schon in den vorhergehenden Fällen lässt sich die deutliche Reaktion des Index beobachten, insbesondere reagiert der Index auf das Eindringen des Hindernisses in das sekundäre FOV der Tangentenhöhe 14 km mit einem Abfall von Werten um die 0,85 in größeren Höhen auf einen Wert nahe 0,3. Bei der vorliegenden Konfiguration überlappen sich die angenommenen FOVs zweier aufeinanderfolgender Messungen jeweils in den sekundären Anteilen, was dazu führt, dass Effekte auf bestimmten Höhen Auswirkungen auf Messungen in darüber liegenden Bereichen haben können. Die nun als völlig bedeckt geltenden Höhen bei 11 und 8 km werden mit einem Indexwert von etwa 0,08 belegt.

Die beiden letzten Graphen zeigen die Indexverläufe für die Fälle 9 und 10 und dienen der Verifikation, dass der Index in allen Höhen das selbe Verhalten zeigt, also grundsätzlich im Rahmen der Simulation als höhenunabhängig gelten darf.

Bild 77 zeigt den typischen Indexwert für einen vertikalen Bedeckungsgrad von weniger als 50% des FOV. Bei der Tangentenhöhe 20 km nimmt der Index einen Wert von etwas mehr als 0,2 an. Bild 78 zeigt den Indexverlauf im Fall 10, wo der Index, wie in Fall 7, für eine vertikale Bedeckung von mehr als 50% des FOV, einen Wert zwischen 0,09 und 0,2 annimmt.



4.3.4 Zusammenfassung

Der Wolkenindex in der beschriebenen Form als Kontrastindex eignet sich sowohl als globaler Wolkenwarner als auch zur Charakterisierung des Bedeckungsgrades des vertikalen FOV von MIPAS. Außerdem lässt er sich einfach zur groben Bestimmung der Wolkenoberkanten heranziehen. Durch die gezeigten diagnostischen Eigenschaften ist man unter Zuhilfenahme des vorgestellten Index in der Lage auch Messungen in eine Auswertung mit einzubeziehen, die man sonst aus Vorsichtsgründen ausschließen würde. Dies kann besonders für Untersuchungen nahe oder in der Troposphäre relevant sein.

Die Funktionalität als Wolkenwarner lässt sich einerseits aus den in der Simulation bekannten Verhältnissen und andererseits durch Vergleich mit der anerkannten Methode von Spang nachweisen.

Die Einteilung nach Bedeckungsgraden des FOV von MIPAS ist in Tabelle 8 übersichtlich zusammengefasst. Es lassen sich grundsätzlich vier Zustände deutlich unterscheiden. Diese Unterscheidungsmerkmale können bei der Auswahl qualitativer Messungen von MIPAS einen entscheidenden Beitrag leisten.

Bedeckungsgrad des FOV	Unbedeckt	Weniger als 47,5 %	62,5 %	Mehr als 62,5 %
Indexwert	$CI > 0,8$	$0,8 > CI > 0,33$	$0,33 > CI > 0,08$	$0,08 > CI$

Tabelle 8. Zusammenhang Bedeckungsgrad - Indexwert

Die Bestimmung von Wolkenoberkanten kann insbesondere bei der Untersuchung von PSCs hilfreiche Dienste leisten und ist im Zusammenwirken mit dynamischen Modellen ein wirksames Werkzeug in der Untersuchung von Atmosphäreneigenschaften.

PSCs als spezielle Wolken sind Gegenstand aktueller Untersuchungen [35][34]. Insbesondere ist dabei die Beeinflussung von MIPAS-Messungen durch an PSCs gestreutem Licht von Interesse. Die grundsätzliche Schwierigkeit in diesem Zusammenhang stellt die Identifizierung der PSCs dar, weil eine Detektion auf dem beschriebenen Weg über einen Wolkenwarner wegen der optischen Eigenschaften von PSCs nicht möglich ist. Die Emissionen der PSCs haben indirekt nachweisbare Einwirkungen auf MIPAS-Spektren, jedoch ist auch ein direkter Nachweis in den Spektren gelungen [34][35].

Neueste Arbeiten zeigen, dass der Wolkenwarner nach Spang auch reagiert, wenn sich ein hoher Wasserdampfgehalt in der Atmosphäre befindet. Wie sich dies auf das hier betrachtete Kontrastverhältnis als Indexgeber auswirkt, konnte zum Stand der Fertigstellung der vorliegenden Arbeit nicht mehr untersucht werden.

Mit diesen Betrachtungen werden die inhaltlichen Erörterungen dieser Arbeit abgeschlossen und wir wenden uns in Kapitel 5 der Zusammenfassung und einem Ausblick zu.

KAPITEL 5 ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

5.1. Zusammenfassung

In der vorliegenden Untersuchung wurden verschiedene Möglichkeiten erarbeitet, das am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt entwickelte und eingesetzte Retrieval von Spurengasen aus MIPAS-Messungen zu optimieren.

Die Optimierungen sollten hierbei ein möglichst breites Anwendungsspektrum abdecken. Wegen der immensen Vielzahl von Parametern, die für ein hochqualitatives Retrieval von Atmosphärenbestandteilen nötig sind, musste eine strenge Vorauswahl der Optimierungen getroffen werden. Zudem war es unabdingbar, dass die Optimierungen mit der bereits vorhandenen komplexen Umgebung kompatibel sein mussten. Um diese Vereinbarkeit sicher zu stellen, mussten umfangreiche Vorarbeiten hinsichtlich einer Analyse der vorhandenen Umgebung und deren Abhängigkeiten geleistet werden. Diese Arbeiten wurden ausführlich in den einleitenden Kapiteln 1 und 2 sowie in Abschnitt 3.1 und Abschnitt 3.2 durchgeführt und präsentiert.

Die Beschreibung der wichtigsten Komponenten des Prozessors und deren eventuelle Auswirkungen auf optimale Ergebnisse wurde in Kapitel 3 durchgeführt, wobei in den Abschnitten 3.3. der Strahlungstransfer und in Abschnitt 3.4 die Theorie der Inversionsrechnung ausführlich dargestellt wurden. Das im vorliegenden Retrieval verwendete Iterationsschema wurde in den Abschnitten 3.4.1 ff. beschrieben und mit zahlreichen Beispielen veranschaulicht. Großes Augenmerk wurde schließlich auf die etablierten Regularisierungsmethoden gelegt, da sie im weiteren Verlauf eine wichtige Rolle spielen.

Ein eigener Abschnitt 3.5 wurde den Gütekriterien und Fehlergrößen gewidmet. Hierbei wurde immer darauf geachtet, dass die verwendeten Größen, neben der theoretischen Darstellung, anschaulich präsentiert wurden.

Im Anschluss an die grundlegenden und theoretischen Betrachtungen erfolgte eine Klarstellung, welche Bereiche in die Optimierung einbezogen werden sollten und welche Ergebnisse man erwarten kann.

Kapitel 4 widmet sich den Optimierungen im Detail. Im ersten Teil (Abschnitt 4.1) betrachten wir zwei Regularisierungsverfahren, die beide für die Atmosphärenforschung neue Ansätze verfolgen. Während HoMa (Abschnitt 4.1.3) darauf ausgelegt ist, möglichst viele Vorteile der etablierten Methoden in sich zu vereinen, ohne die jeweiligen Nachteile zu stark zu betonen, ist das Maximale-Entropie-Verfahren (Abschnitt 4.1.5) ein nahezu, zumindest in der vorliegenden Anwendung, unbeschriebenes Blatt, bei dem es galt, die spezifischen Merkmale zu identifizieren und ggf. im Sinne der Arbeit zu nutzen. Hierbei wurde viel Neuland beschritten und für die Nutzung zugänglich gemacht.

Ohne Übertreibung kann man sagen, dass es mit der Implementierung von HoMa erstmals vollständig gelungen ist, ein Verfahren bereitzustellen, das einerseits die unbestreitbaren Vorteile der

Tikhonov-Regularisierung (Abschnitt 3.4.2.2) bietet und andererseits die vielfältigen Analysemöglichkeiten eines *a priori*-Verfahrens wie Optimal Estimation (Abschnitt 3.4.2.1) bietet. Dies trägt zu einer Erleichterung bei der Konstruktion von optimalen Regularisierungen bei. Zudem überzeugen die Ergebnisse von Retrievalläufen, die mit HoMa regularisiert wurden, hinsichtlich dem erreichten Auflösungsvermögen, den Freiheitsgraden und Informationsgehalten, verglichen mit den Ergebnissen der etablierten Verfahren. Auch die relativ einfache Handhabbarkeit von HoMa und das unkomplizierte Setup dürfen nicht unerwähnt bleiben. Der Nachteil besteht darin, dass das Höhengitter festgelegt ist.

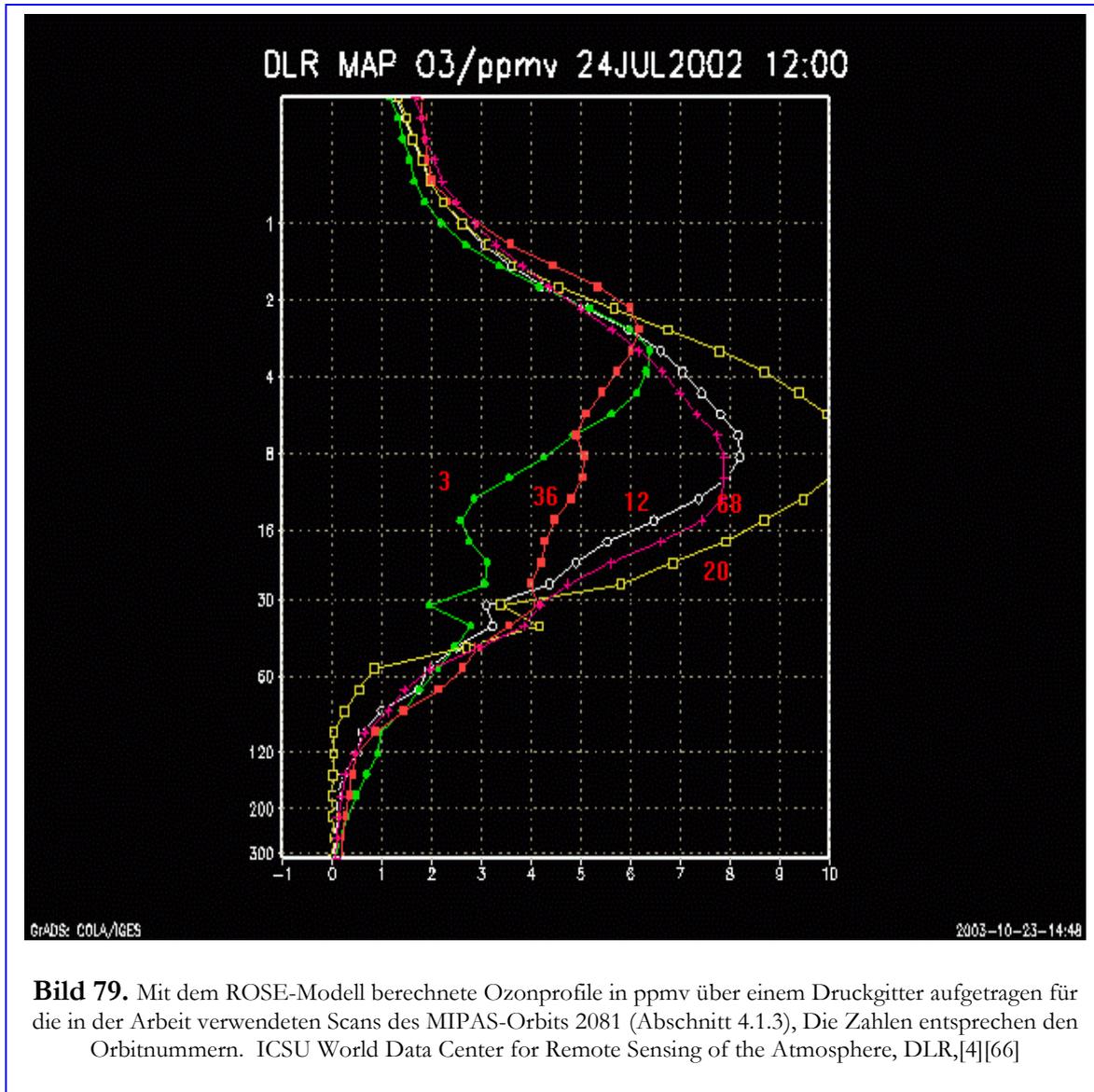
Das Maximale-Entropie-Verfahren steht dem in Nichts nach. Die erzielten Ergebnisse zeigen, dass sich die Methode grundsätzlich durchaus für eine Anwendung in der Atmosphärenforschung eignet. Im Vergleich mit etablierten Methoden schneidet MEM2 hervorragend ab und bietet gegenüber den herkömmlichen Methoden einerseits den Vorteil unabhängig von *a priori*-Wissen zu sein und andererseits ähnlich wie das Tikhonov-Verfahren adaptiv zu sein. Diese Adaption schlägt sich in einer annehmbaren Höhenauflösung und glatten Ergebnisprofilen nieder, die trotz der starken Abhängigkeit des Verfahrens von einem Init-Guess-Profil relativ unabhängig von Startwert sind.

Die Berücksichtigung systematischer Fehler in Spurengasretrievals ist ein weiteres wichtiges Feld (Abschnitt 4.2). Mit der Implementierung der Korrekturen in eine bestehende, operationell arbeitende Softwareumgebung, wie dem MIPAS-Prozessor am DLR, konnte gezeigt werden, dass der verwendete Ansatz einerseits sehr flexibel handhabbar ist und sich somit grundsätzlich auch in andere Systeme integrieren lässt und andererseits effektiv arbeitet, was man an den dramatischen Verbesserungen der Ergebnisse der Retrievalrechnungen in Abschnitt 4.2.2.3 ablesen kann. Der Nachteil der Methode besteht im großen Speicheraufwand auf Grund der Matrizendimensionen.

Um überhaupt mit Messungen arbeiten zu können, die nicht durch Wolken beeinflusst sind, ist die Implementierung eines Wolkenwarners nötig (Abschnitt 4.3). Der von Spang entworfene Index stellt eine ausbaufähige Basis dar. Auf dieser Basis wurde eine Weiterentwicklung betrieben, die es ermöglicht, zwischen vertikal voll- und teilbedeckten Messszenen zu unterscheiden (Abschnitt 4.3.3), um ggf. Messungen aus besonders interessanten Bereichen der Atmosphäre hinzuzunehmen, die ansonsten ausgesondert worden wären.

Die Gesamtheit der beschriebenen Optimierungen führt zu qualitativ besseren Ergebnissen der Spurengasretrievals des DLR-Prozessors. Die qualitative Verbesserung der Ergebnisse war das Ziel der Arbeit, dies ist offenbar erreicht worden. Alles in allem zeigen sich die erhaltenen Ergebnisse in bester Verfassung. Vergleiche mit Ergebnissen aus Studien wie AMIL2DA zeigen, dass die präsentierten Methoden und Ansätze korrekt arbeiten. Man kann jedoch noch einen Schritt weiter gehen: Am DLR in Oberpfaffenhofen wird das ROSE-Modell betrieben, welches in der Lage ist, aus assimilierten Daten globale Ozonprofile zu generieren. Bild 79 zeigt die Ergebnisse einer Rechnung, die unter Zugrundelegung derselben zeitlichen und örtlichen Daten entstanden, die für den in der vorliegenden Arbeit verwendeten realen MIPAS-Messungen des Orbits 2081 gelten (Abschnitt 4.1.3). Die Höhenkoordinate ist der Druck. Vergleicht man den Verlauf des Profils 20 (Umrechnung Druck-Höhe siehe Anhang A.IV) und die Lage des Maximums des Profils

aus Bild 79 mit den entsprechenden Ergebnissen aus Abschnitt 4.1, so sieht man deutliche Übereinstimmungen, besonders im Fall von HoMa und MEM2.



5.2 Ausblick

Weiterführende Untersuchungen zu Themen aus der vorliegenden Arbeit sind zahlreich genannt worden. Teilweise werden diese Arbeiten von anderen europäischen Institutionen bereits in Angriff genommen, wie beispielsweise die Untersuchung der Behandlung systematischer Fehler oder die Gewinnung von Spurengasprofilen von Kohlenwasserstoffen.

Zu einer weiteren qualitativen Verbesserung der Ergebnisse könnte bspw. die Untersuchung der Matrix-Konditionierungen beitragen. Konditionszahlen dienen als Maßzahlen, wie „gut“ eine Matrix sich numerisch verarbeiten (z. B. invertieren) lässt. Matrizen, die Einträge aufweisen, deren Werte über Größenordnungen variieren, sind in der Regel schlecht konditioniert, d.h. dass es bei rechenintensiven Vorgängen wie der Inversion einer Matrix zu großen Rundungsfehlern kommen kann. Derartige Fehler ziehen u. U. signifikante Abweichungen in den Ergebnissen (Profilen) nach sich. Hat man es, wie im vorliegenden Fall, mit Problemen zu tun, bei denen Zwischenergebnisse (Temperaturprofile) relevant für den Ausgang einer Rechnung sind (Spurengasprofile), so ergeben sich durch Propagation Fehler in der nachfolgenden Rechnung, die auch durch optimale Parametrisierung nicht beherrschbar sind.

Ein weiteres Feld, in dem noch Aufgaben ungelöst sind, ist die Operationalisierung der Behandlung systematischer Fehler und die operationelle Ermittlung der Regularisierungsparameter bei HoMa und MEM2.

MEM2 hat sich als konkurrenzfähiges Verfahren erwiesen, aus diesem Grund wäre eine Anwendung von MEM2 bei horizontalen Gradienten-Retrievals eine lohnenswerte Aufgabe. Man spricht in diesem Zusammenhang von horizontalen Gradienten, wenn man keine homogenen Schichten in der Vorwärtsmodellierung (Abschnitt 3.3) annimmt. Anschaulich formuliert: Wenn sich die Volumenmischungsverhältnisse entlang der Sichtlinie in einer Schicht ändern, so erhält man einen horizontalen Gradienten. Der MIPAS-Prozessor am DLR unterstützt ein Gradientenretrieval, jedoch ist die Regularisierung mit *a priori*-Verfahren wegen dem fehlenden *a priori*-Wissen ein schwieriges Problem. Hier würde sich MEM2 anbieten, ebenso wie in allen Fällen, wo man nur spärliche *a priori*-Informationen zur Verfügung hat. Dazu zählen selten untersuchte Spurengase ebenso wie „schlecht zugängliche“ Messorte in der Nähe des polaren Vortex. Vorarbeiten zu diesen Themen mit MEM2, die im Rahmen von Testläufen für diese Arbeit durchgeführt wurden, lassen bspw. auf Grund von Vergleichen mit Daten aus Bild 79 auf exzellente Ergebnisse hoffen.

Anhang A

A.I Erste und zweite Ableitung des Entropie-Ansatzes

Bei der Vorstellung von MEM2 in Abschnitt 4.1.5 wurde darauf hingewiesen, dass die Operatoren, die verwendet werden, sehr komplex sind, weil auf die Annahme von periodischen Randbedingungen verzichtet wurde. Im Folgenden werden die in der operationellen Anwendung verwendeten Ausdrücke detailliert hergeleitet.

A.I.1 Definitionen

Es werden die folgenden Definitionen (D1)-(D6) vorausgesetzt, wie bereits in Abschnitt 4.1.5 gezeigt

$$S(\vec{x}) = - \sum_{i=2}^{N-1} \frac{p_i}{p} \log\left(\frac{p_i}{p}\right) \quad (\text{D1})$$

$$\vec{p} = \Delta^\alpha \vec{x} \quad (\text{D2})$$

$$\alpha = 2 \quad (\text{D3})$$

Der Operator Δ^α ist von ähnlicher Struktur wie die Tikhonov-Operatoren (3.4.2.2). Aus (D2) und (D3) folgt

$$p_i = x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} + 2(x_{\max} - x_{\min}) + \zeta, \quad (\text{D4})$$

$$i = 2, \dots, N-1 \text{ und } \zeta \approx 10^{-15}$$

$$p = \sum_{i=2}^{N-1} p_i = (x_1 - x_2) - (x_{n-1} - x_n) + (n-2)(2(x_{\max} - x_{\min}) + \zeta) \quad (\text{D5})$$

$$\xi_i := \frac{p_i}{p} \Rightarrow S(\vec{x}) = - \sum_{i=1}^N \xi_i \log \xi_i \quad (\text{D6})$$

A.I.2 Ableitungen

A.I.2.1 Herleitung der ersten Ableitung

Wegen (3.25) ist der Gradient des Ausdrucks, der die Nebenbedingung beschreibt, gesucht. Der Gradient lässt sich mit (D6) schreiben als

$$\frac{\partial S}{\partial x_k} = \frac{\partial S}{\partial \xi_1} \frac{\partial \xi_1}{\partial x_k} + \frac{\partial S}{\partial \xi_2} \frac{\partial \xi_2}{\partial x_k} + \dots + \frac{\partial S}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_k} = \sum_{l=1}^N \frac{\partial S}{\partial \xi_l} \frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} \quad (\text{G.I})$$

Folgende Einzelableitungen müssen hierzu offensichtlich berechnet werden

$$\frac{\partial S}{\partial \xi_l} \quad (\text{A.I.1})$$

$$\frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} \quad (\text{A.I.2})$$

Man erhält für (A.I.1)

$$\frac{\partial S}{\partial \xi_l} = -\log \xi_l - \xi_l \frac{1}{\xi_l} = -(1 + \log \xi_l) \quad (\text{A.I.1a})$$

und für (A.I.2)

$$\frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{p_l}{p} \right) = \frac{1}{p} \frac{\partial p_l}{\partial x_k} - \frac{p_l}{p^2} \frac{\partial p}{\partial x_k} \quad (\text{A.I.2a})$$

Zur Berechnung von (A.I.2a) benötigt man

$$\frac{\partial p_l}{\partial x_k} \quad (\text{A.I.3})$$

$$\frac{\partial p}{\partial x_k} \quad (\text{A.I.4})$$

Damit ergibt sich für (A.I.3)

$$\frac{\partial p_l}{\partial x_k} = A_{lk} \quad (\text{A.I.3a})$$

Diesen Zusammenhang kann man folgendermaßen herstellen:

Aus Definition (D3), (D4) und (D5) lässt sich ableiten

$p_l = \sum_{k=1}^N A_{lk} x_k + C$ und somit ist $\frac{\partial p_l}{\partial x_k} = A_{lk}$, mit $C = 2(x_{\max} - x_{\min}) + \zeta$, daraus ergibt sich

$$A_{lk} = \begin{cases} 1, & \text{für } l = k \\ -2, & \text{für } l + 1 = k \\ 1, & \text{für } l + 2 = k \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.I.3b})$$

Für (A.I.4) berechnet man

$$\frac{\partial p}{\partial x_k} = \frac{\partial \sum_{i=2}^{N-1} p_i}{\partial x_k} = \sum_{i=2}^{N-1} \frac{\partial p_i}{\partial x_k} = \sum_{i=2}^{N-1} A_{ik} = p_x \quad (\text{A.I.4a})$$

Es ergeben sich die folgenden Werte für p_x

$$p_x = \begin{cases} 1, & \text{für } k = 1, n \\ -1, & \text{für } k = 2, n-1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.I.4b})$$

Setzt man (A.I.3a) und (A.I.4a) ein, gewinnt man für (A.I.2a)

$$\frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{p_l}{p} \right) = \frac{1}{p} A_{lk} - \frac{p_l}{p^2} \sum_{i=2}^{N-1} A_{ik} = \frac{1}{p} A_{lk} \quad (\text{A.I.2b})$$

A.I.2.2 Ergebnis 1, erste Ableitung

Mit (A.I.1a) und (A.I.2b) ergibt sich für $\frac{\partial S}{\partial x_k}$

$$\frac{\partial S}{\partial x_k} = - \sum_{l=2}^{N-1} \left(\frac{1}{p} (1 + \log(\frac{p_l}{p})) (A_{lk} - \frac{p_l}{p} p_x) \right) \quad (\text{A.I.5})$$

Oder allgemeiner

$$\frac{\partial S}{\partial x_k} = \sum_{l=2}^{N-1} \frac{\partial S}{\partial \xi_l} \cdot \frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} = \sum_{l=1}^N (M_{kl} \cdot v_l) \quad (\text{A.I.5a})$$

allgemeiner
Vektor = Matrix \times Vektor.

A.I.3.1 Herleitung der zweiten Ableitung

Für (3.25) wird auch noch die zweite Ableitung von (D1) benötigt

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right) = \sum_{l=1}^N \left[\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial S}{\partial \xi_l} \right) \frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} + \frac{\partial S}{\partial \xi_l} \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} \right) \right] \quad (\text{G.II})$$

$\frac{\partial \xi_l}{\partial x_k}$ und $\frac{\partial S}{\partial \xi_l}$ sind in (A.I.2b) und (A.I.1a) bereits bei der Herleitung der ersten Ableitung berechnet worden.

Zu bestimmen sind also die Ausdrücke

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial S}{\partial \xi_l} \right) \quad (\text{A.I.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} \right) \quad (\text{A.I.7})$$

Aus (A.I.6) folgt mit (G.I)

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial S}{\partial \xi_l} \right) = \sum_{m=1}^N \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{\partial S}{\partial \xi_l} \right) \frac{\partial \xi_m}{\partial x_n} \quad (\text{A.I.6a})$$

Die Berechnung des dritten Terms auf der rechten Seite ist analog bereits aus (A.I.2b) bekannt. Somit benötigt man noch die beiden ersten Terme der rechten Seite

$$\frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{\partial S}{\partial \xi_l} \right) = \frac{\partial}{\partial \xi_m} [-(1 + \log \xi_l)] = \frac{-1}{\xi_m} \cdot \delta_{lm} \quad (\text{A.I.6b})$$

Es ergibt sich für (A.I.6) mit (A.I.2a) und (A.I.2b)

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial S}{\partial \xi_l} \right) = \sum_{m=1}^N \left(\frac{-1}{\xi_m} \cdot \delta_{lm} \left[\frac{1}{p} A_{mm} - \frac{p_m}{p^2} p_{x_n} \right] \right) \quad (\text{A.I.6c})$$

Aus (A.I.7) leitet man ab

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial \xi_l}{\partial x_k} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_n} \cdot \left[\frac{1}{p} \cdot \frac{\partial p_l}{\partial x_k} - \frac{p_l}{p^2} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_k} \right] = \\ &= \frac{1}{p^2} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_n} \cdot \frac{\partial p_l}{\partial x_k} + \frac{1}{p} \cdot \frac{\partial^2 p_l}{\partial x_n \partial x_k} - \frac{1}{p^2} \cdot \frac{\partial p_l}{\partial x_n} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_k} + \\ &= \frac{2}{p^3} p_l \cdot \frac{\partial p}{\partial x_n} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_k} - \frac{p_l}{p^2} \cdot \frac{\partial^2 p}{\partial x_n \partial x_k} \end{aligned} \quad (\text{A.I.7a})$$

Einige der Mischterme entfallen wegen (A.I.7b) und (A.I.7c)

$$p_l = \sum_{k=1}^N A_{lk} x_k + C \Rightarrow \frac{\partial p_l}{\partial x_k} = A_{lk} \Rightarrow \frac{\partial^2 p_l}{\partial x_n \partial x_k} = 0 \quad (\text{A.I.7b})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial p}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial \sum_{i=2}^{N-1} p_i}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\sum_{i=2}^{N-1} \frac{\partial p_i}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\sum_{i=2}^{N-1} A_{ik} \right) = 0 \quad (\text{A.I.7c})$$

A ist eine Matrix von Konstanten.

A.I.3.2 Ergebnis 2, zweite Ableitung

Es ergibt sich für die zweite Ableitung $\frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right)$ folgender Ausdruck, der sich aus (A.I.6c)(A.I.2b)+(A.I.1a)(A.I.7a) unter Berücksichtigung von (A.I.7b) und (A.I.7c) zusammensetzt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial S}{\partial x_k} \right) &= \sum_{l=2}^{N-1} \left[\sum_{m=2}^{N-1} \left(-\frac{p}{p_m} \cdot \delta_{lm} \cdot \left(\frac{1}{p} A_{mn} - \frac{p_m}{p^2} \sum_{i=2}^{N-1} A_{in} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{1}{p} A_{lk} - \frac{p_l}{p^2} \sum_{i=2}^{N-1} A_{ik} \right) + (1 + \log \frac{p_l}{p}) \cdot \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{1}{p^2} A_{lk} \cdot \sum_{i=2}^{N-1} A_{in} + \frac{1}{p^2} A_{ln} \cdot \sum_{i=2}^{N-1} A_{ik} - \frac{2p_l}{p^3} \cdot \sum_{n=2}^{N-1} A_{in} \cdot \sum_{i=2}^{N-1} A_{ik} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.I.8})$$

Wie im Fall der ersten Ableitung lässt sich der Ausdruck durch Einfügen von $\sum_{i=2}^{N-2} A_{ik} = p_x$ aus (A.I.4a) und Kürzen vereinfachen. Wegen des Kroneckersymbols reduziert sich (A.I.8) auf eine Summe und man erhält

$$\begin{aligned} & - \sum_{l=2}^{N-1} \left[\frac{1}{p_l p} \cdot \left(A_{ln} - \frac{p_l}{p} p_{x_n} \right) \right] \cdot \left(A_{lk} - \frac{p_l}{p} p_{x_k} \right) + \\ & (1 + \log \frac{p_l}{p}) \cdot \frac{1}{p^2} \cdot \left(A_{lk} \cdot p_{x_n} + A_{ln} \cdot p_{x_k} - \frac{2p_l}{p} \cdot p_{x_n} \cdot p_{x_k} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.I.9})$$

Dies ist die bei MEM2 verwendete zweite Ableitung. Zusammen mit der ersten Ableitung bildet sie die notwendige Regularisierungsbedingung in (3.25) bei Anwendung von MEM2.

A.II Besetzungsmatrizen

Von zentraler Bedeutung im Retrieval sind die Microwindows (3.3.2.1). In Kapitel 2 und Abschnitt 3.3 wurde erläutert, dass diese spektralen Ausschnitte für jede Spezies charakteristisch sind und auf den einzelnen Höhenstufen unterschiedlich verwendet werden. Die jeweilige Anwendung der einzelnen Microwindows wird dem Retrieval dabei mittels Besetzungsmatrizen mitgeteilt. Diese Matrizen haben pro Spezies als Dimension einerseits die Anzahl der Höhenstufen des Messgitters andererseits die Zahl der verwendeten Microwindows. In der Höhenstufe, in der ein Microwindow berücksichtigt werden soll, steht eine Zahl, ansonsten eine „0“. Zur weiteren Verfeinerung werden die einzelnen Microwindows zum Teil noch weiter unterteilt in sog. Submicrowindows. Dort, wo eine von eins verschiedene Zahl größer null eingetragen ist, wird damit die Anzahl der verwendeten Submicrowindows (A.III) gekennzeichnet. Durch die Verfeinerung mit Submicrowindows entsteht keine weitere prinzipielle Funktionalität der Besetzungsmatrizen.

Im Folgenden sind die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Microwindows und die Zahl der Submicrowindows (A.III), aufgeschlüsselt nach Rechnungen mit Simulationsdaten und Flugdaten und Spezies (Temperatur und Ozon), aufgelistet.

A.II.1 Besetzungsmatrizen für Rechnungen mit simulierten Daten

Bei den Rechnungen mit Simulationsdaten wurden nur Microwindows für Ozon auf 46 Höhenstufen benötigt. Tabelle 9 zeigt die Besetzungsmatrix für den Simulationsfall. Diese Matrix wurde bei allen Simulationsrechnungen für Ozon verwendet. Die Höhenstufen liegen im Abstand von 1 km und beginnen mit Höhenstufe 1 bei 7 km.

Microwindow von – bis [cm ⁻¹]	722,675- 722,900	763,500- 764,650	768,400- 768,800	777,450- 778,525	1031,600- 1033,150	1052,600- 1053,800	2120,000- 2120,800
Höhenstufen							
1	0	1	0	1	0	1	1
2	0	1	0	1	0	1	1
3	0	1	1	1	0	0	1
4	0	1	1	1	0	0	1
5	0	1	1	1	0	0	1
6	0	1	1	1	0	0	1
7	0	1	1	0	0	0	1
8	0	1	1	0	0	0	1
9	0	1	1	0	0	0	1
10	0	1	1	0	0	0	1
11	1	0	1	0	1	0	1
12	1	0	1	0	1	0	1
13	1	1	1	0	1	0	1
14	1	1	1	0	1	0	1
15	1	1	1	0	1	0	1
16	1	1	1	0	1	0	1
17	1	1	1	0	1	1	1
18	1	1	1	0	1	1	1
19	0	0	0	0	1	1	1
20	0	0	0	0	1	1	1

21	0	0	0	0	1	1	1
22	0	0	0	0	1	1	1
23	0	0	0	0	1	1	1
24	0	0	0	0	1	1	1
25	0	0	0	0	1	0	1
26	0	0	0	0	1	0	1
27	0	0	0	0	1	0	1
28	0	0	0	0	1	0	1
29	0	0	0	0	1	0	1
30	0	0	0	0	1	0	1
31	0	0	0	0	1	0	1
32	0	0	0	0	1	0	1
33	0	0	0	0	1	0	1
34	0	0	0	0	1	0	1
35	0	0	0	0	1	0	1
36	0	0	0	0	1	0	1
37	0	0	0	0	1	0	1
38	0	0	0	0	1	0	1
39	0	0	0	0	1	0	1
40	0	0	0	0	1	0	1
41	0	0	0	0	1	0	1
42	0	0	0	0	1	0	1
43	0	0	0	0	1	0	1
44	0	0	0	0	1	0	1
45	1	0	0	0	1	1	1
46	1	0	0	0	1	1	1

Tabelle 9. Besetzungsmatrix für Rechnungen mit simulierten Daten (Ozon-Microwindows)

A.II.2 Besetzungsmatrizen für Rechnungen mit Flugdaten

Bei den Rechnungen mit Flugdaten auf 15 Höhenstufen wurde einerseits Temperatur retrieved, andererseits Ozon. Die Besetzungsmatrizen liegen auf 17 Höhenstufen vor, weil sie auch für Rechnungen als Grundlage dienen, bei denen die beiden untersten Höhenstufen mit in das Retrieval einbezogen werden. Aus Darstellungsgründen sind die Matrizen um 90° gegenüber der Darstellung in A.II.1 gedreht.

Das Temperaturretrieval wird anhand von Spektralbereichen durchgeführt, die typisch für CO₂ sind. Kohlendioxid weist in der Atmosphäre einen relativ konstanten Verlauf seines Volumenmischungsverhältnisses auf, deswegen eignet es sich als grundlegende Komponente des Temperaturretrievals.

Tabelle 10 zeigt die Besetzungsmatrizen für die Temperatur inkl. der Zahl der Submicrowindows und in Tabelle 11 findet man die entsprechenden Informationen für Ozon.

Höhen [km] \ Microwindow von – bis [cm ⁻¹]	6	9	12	15	18	21	24	27	30	33	36	39	42	47	52	60	68
685,700- 685,800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	2	0	0	0
686,400- 689,400	0	0	0	0	0	0	0	0	5	10	11	16	21	19	20	11	3
694,800- 695,100	0	0	0	0	0	0	0	2	1	3	3	0	0	0	0	0	0
696,200- 698,375	0	0	0	0	0	0	0	6	3	6	5	3	4	4	3	13	7
700,475- 701,000	0	0	0	0	0	3	3	3	4	0	0	0	0	0	0	0	0
728,300- 729,125	0	0	0	4	4	5	6	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0
741,975-742,250	0	0	0	2	1	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
791,375- 792,875	9	7	5	4	3	8	10	8	8	6	0	0	0	0	0	0	0
944,200- 946,500	5	6	7	7	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1349,400-1350,875	0	0	2	4	9	10	9	9	13	8	9	12	11	8	8	0	0
1351,925-1352,350	0	4	2	4	2	4	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1352,375-1352,950	0	6	5	5	4	4	3	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1353,325-1354,825	0	0	8	7	4	5	10	6	4	5	2	6	5	5	0	0	0
1357,200-1358,000	0	1	2	3	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1411,400-1412,150	0	0	6	3	6	4	1	4	5	0	0	0	0	0	0	0	0
1932,850-1934,350	0	0	6	7	12	12	11	9	8	8	12	15	9	6	6	5	0
2075,200-2077,250	0	0	0	0	0	0	0	16	14	12	2	9	8	13	9	4	0

Tabelle 10. Besetzungsmatrix für Rechnungen mit Flugdaten (Temperatur-Microwindows)

Höhen [km] \ Microwindow von-bis [cm ⁻¹]	6	9	12	15	18	21	24	27	30	33	36	39	42	47	52	60	68
727,200-728,075	0	0	0	4	6	6	8	5	7	0	0	0	0	0	0	0	0
731,525-731,950	0	0	0	0	0	3	2	3	3	2	0	0	0	0	0	0	0
735,525-736,150	0	0	0	0	2	4	2	3	6	0	0	0	0	0	0	0	0
748,000-748,575	0	0	4	4	4	2	3	2	5	0	0	0	0	0	0	0	0
757,200-757,675	0	0	0	6	4	2	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
763,375-766,375	5	12	13	12	8	11	14	11	9	9	9	13	19	8	7	5	6
791,425-792,075	0	0	2	2	3	3	3	3	4	0	0	0	0	0	0	0	0
1039,375-1040,325	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7	5	2
1073,800-1076,800	0	10	9	7	10	13	9	10	4	9	15	17	16	14	16	9	4
1086,800-1087,550	0	4	3	3	3	5	5	4	6	6	6	0	0	0	0	0	0
1112,750-1115,750	12	16	19	22	15	16	20	21	22	0	0	0	0	0	0	0	0
1122,800-1125,800	5	7	6	9	9	8	10	9	10	10	10	9	8	6	1	1	1

Tabelle 11. Besetzungsmatrix für Rechnungen mit Flugdaten (Ozon-Microwindows)

A.III Verwendete Microwindows und Submicrowindows

In diesem Abschnitt sind die in der vorliegenden Arbeit verwendeten spektralen Teilbereiche (Microwindows) und Unterteilbereiche (Submicrowindows) verzeichnet. Submicrowindows werden verwendet, um Informationen ohne Aussagekraft in der Retrievalrechnung zu vermeiden und helfen somit die Rechnung effektiver zu gestalten. Es handelt sich um Teilbereiche von Microwindows.

A.III.1 Bei Simulationen verwendete Microwindows

Bei den Simulationsrechnungen wurden nur Ozon-Microwindows benötigt. Wie man A.II entnimmt, wurden keine Submicrowindows verwendet.

Tabelle 12 listet die genutzten Spektralbereiche auf.

Microwindow 1 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 2 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 3 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 4 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 5 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 6 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 7 von-bis [cm ⁻¹]
722,675- 722,900	763,500- 764,650	768,400-768,800	777,450-778,525	1031,600-1033,150	1052,600-1053,800	2120,000-2120,800

Tabelle 12. Ozon-Microwindows für Simulationsrechnungen

A.III.2 Bei Rechnungen mit Flugdaten verwendete Microwindows und Submicrowindows

Bei den Berechnungen mit Flugdaten wurden sowohl Ozon- als auch Temperatur (CO₂)-Microwindows benötigt. Aus A.II.2 entnimmt man, dass dabei auch Submicrowindows zum Einsatz kamen. Die Microwindows sind in den Tabellen 13 (Ozon) und 14 (Temperatur) zusammengefasst. Die umfangreichen Submicrowindow-Definitionen sind im Anschluss tabelliert (sequentiell).

Microwindow 1 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 2 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 3 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 4 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 5 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 6 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 7 von-bis [cm ⁻¹]
727,200-728,075	731,525-731,950	735,525-736,150	748,000-748,575	757,200-757,675	763,375-766,375	791,425-792,075
Microwindow 8 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 9 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 10 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 11 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 12 von-bis [cm ⁻¹]		
1039,375-1040,325	1073,800-1076,800	1086,800-1087,550	1112,750-1115,750	1122,800-1125,800		

Tabelle 13. Ozon-Microwindows bei Verwendung von Flugdaten

Microwindow 1 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 2 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 3 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 4 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 5 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 6 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 7 von-bis [cm ⁻¹]
685,700- 685,800	686,400- 689,400	694,800- 695,100	696,200- 698,375	700,475- 701,000	728,300- 729,125	741,975-742,250
Microwindow 8 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 9 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 10 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 11 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 12 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 13 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 14 von-bis [cm ⁻¹]
791,375- 792,875	944,200- 946,500	1349,400-1350,875	1351,925-1352,350	1352,375-1352,950	1353,325-1354,825	1357,200-1358,000
Microwindow 15 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 16 von-bis [cm ⁻¹]	Microwindow 17 von-bis [cm ⁻¹]				
1411,400-1412,150	1932,850-1934,350	2075,200-2077,250				

Tabelle 14. Microwindows für Temperaturretrieval bei Rechnungen mit Flugdaten

6 km	1353,350 -1353,375	1933,425 -1933,425	728,325 - 728,350	791,375 - 791,375	791,750 - 791,750
	1354,000 -1354,050	1933,575 -1933,575	728,400 - 728,425	791,475 - 791,475	791,900 - 791,950
	1354,100 -1354,100	1933,750 -1933,775	728,625 - 728,850	791,575 - 791,575	792,000 - 792,025
	791,425 - 791,425	1354,375 -1354,375	1933,925 -1933,925	728,900 - 729,075	792,175 - 792,175
	791,525 - 791,925	1354,425 -1354,425	1933,975 -1933,975	729,125 - 729,125	792,325 - 792,375
	792,025 - 792,050	1354,500 -1354,575	1934,050 -1934,050	742,000 - 742,200	792,700 - 792,775
	792,100 - 792,125	1354,650 -1354,675	1934,300 -1934,350	791,375 - 791,375	792,850 - 792,875
	792,200 - 792,225	1354,725 -1354,750		791,475 - 791,475	1349,400 -1349,400
	792,300 - 792,450	1357,575 -1357,600	18 km	791,575 - 791,575	1349,675 -1349,700
	792,500 - 792,575	1357,675 -1357,975		791,675 - 791,675	1349,775 -1349,875
	792,625 - 792,625	1411,400 -1411,450	728,325 - 728,325	791,750 - 791,750	1349,925 -1349,975
	792,700 - 792,700	1411,550 -1411,550	728,400 - 728,425	791,900 - 791,950	1350,125 -1350,150
	944,250 - 944,250	1411,600 -1411,725	728,575 - 729,000	792,325 - 792,325	1350,350 -1350,450
	944,500 - 944,600	1411,775 -1411,875	729,050 - 729,125	792,775 - 792,775	1350,525 -1350,525
	944,650 - 944,675	1411,975 -1412,025	741,975 - 742,250	1349,525 -1349,525	1350,575 -1350,625
945,475 - 945,500	1412,125 -1412,125	791,450 - 791,675	1349,575 -1349,600	1350,700 -1350,750	
946,350 - 946,350	1933,425 -1933,425	791,750 - 791,750	1349,675 -1349,675	1352,375 -1352,375	
9 km	1933,575 -1933,600	791,900 - 791,950	1349,750 -1349,800	1350,400 -1350,450	1352,475 -1352,550
	1933,700 -1933,775	944,250 - 945,100	1349,875 -1350,000	1350,500 -1350,600	1352,600 -1352,725
	791,525 - 791,775	945,150 - 945,800	1350,100 -1350,100	1351,950 -1352,000	1352,800 -1352,900
	791,825 - 791,925	945,925 - 945,925	1350,150 -1350,200	1352,225 -1352,250	1353,550 -1353,975
	792,025 - 792,075	946,050 - 946,050	1350,250 -1350,275	1352,375 -1352,375	1354,075 -1354,125
	792,225 - 792,225	946,125 - 946,475	1350,425 -1350,475	1352,475 -1352,725	1354,175 -1354,200
	792,300 - 792,450	1349,425 -1349,425	1350,575 -1350,600	1352,825 -1352,925	1354,250 -1354,525
	792,500 - 792,575	1349,500 -1349,600	1351,950 -1351,950	1353,575 -1353,725	1354,700 -1354,700
	792,700 - 792,700	1349,675 -1349,800	1352,000 -1352,175	1353,775 -1353,825	1354,825 -1354,825
	944,225 - 944,225	1349,875 -1350,000	1352,275 -1352,275	1354,050 -1354,075	1411,525 -1411,550
	944,400 - 944,400	1350,075 -1350,075	1352,350 -1352,350	1354,125 -1354,125	1411,725 -1411,850
	944,650 - 944,675	1350,175 -1350,275	1352,400 -1352,450	1354,200 -1354,200	1411,900 -1411,925
	945,375 - 945,500	1350,325 -1350,350	1352,550 -1352,550	1354,275 -1354,300	1412,000 -1412,125
	945,575 - 945,725	1350,425 -1350,475	1352,600 -1352,725	1354,475 -1354,475	1932,875 -1932,875
	946,300 - 946,300	1350,550 -1350,575	1352,925 -1352,950	1354,525 -1354,525	1932,975 -1932,975
1351,975 -1351,975	1351,950 -1351,975	1353,450 -1353,550	1354,700 -1354,700	1933,075 -1933,100	
1352,100 -1352,125	1352,025 -1352,050	1354,050 -1354,050	1354,825 -1354,825	1933,275 -1933,325	
1352,200 -1352,225	1352,425 -1352,450	1354,175 -1354,200	1357,525 -1358,000	1933,550 -1933,550	
1352,325 -1352,350	1352,500 -1352,650	1354,575 -1354,600	1411,450 -1412,125	1933,600 -1933,625	
1352,400 -1352,400	1352,700 -1352,800	1354,700 -1354,725	1933,100 -1933,100	1933,700 -1933,700	
1352,450 -1352,450	1352,925 -1352,925	1357,525 -1358,000	1933,275 -1933,325	1933,775 -1933,800	
1352,500 -1352,525	1353,575 -1353,775	1411,400 -1411,450	1933,425 -1933,425	1933,950 -1934,050	
1352,575 -1352,600	1354,125 -1354,225	1411,500 -1411,875	1933,475 -1933,475	2075,450 -2075,525	
1352,650 -1352,675	1354,225 -1354,325	1411,925 -1411,925	1933,550 -1933,550	2075,650 -2075,650	
1352,750 -1352,775	1354,375 -1354,400	1412,000 -1412,150	1933,600 -1933,625	2075,750 -2075,775	
1357,200 -1357,875	1354,825 -1354,925	1932,850 -1932,850	1933,700 -1933,700	2075,850 -2075,850	
12 km	1349,825 -1349,850	1355,775 -1357,800	1933,100 -1933,100	1933,800 -1933,800	2075,925 -2075,925
	1350,000 -1350,250	1357,875 -1358,000	1933,325 -1933,325	1933,950 -1934,050	2076,050 -2076,050
	1350,350 -1350,350	1411,425 -1411,425	1933,425 -1933,425	1934,175 -1934,225	2076,125 -2076,175
	1350,450 -1350,475	1411,500 -1411,525	1933,475 -1933,475	1934,350 -1934,350	2076,250 -2076,250
	1351,925 -1352,075	1411,575 -1411,575	1933,550 -1933,550		2076,500 -2076,500
	1352,150 -1352,225	1411,825 -1412,025	1933,750 -1933,750	27 km	2076,575 -2076,575
	1352,300 -1352,300	1412,075 -1412,075	1933,800 -1933,800	694,825 - 694,975	2076,625 -2076,625
	1352,350 -1352,350	1412,125 -1412,125	1933,875 -1933,875	695,100 - 695,100	2076,675 -2076,675
	1352,400 -1352,400	1932,850 -1932,850	1933,975 -1934,050	696,475 - 696,475	2077,000 -2077,000
	1352,450 -1352,450	1933,325 -1933,325	1934,175 -1934,200	696,550 - 696,550	2077,075 -2077,125
	1352,500 -1352,550	1933,475 -1933,475	1934,350 -1934,350	697,325 - 697,325	2077,175 -2077,175
	1352,625 -1352,625	1933,575 -1933,575		697,375 - 697,400	2077,250 -2077,250
	1352,700 -1352,700	1933,750 -1933,750		697,450 - 697,450	
	1352,750 -1352,800	1933,800 -1933,800	24 km	697,625 - 697,700	30 km
	1352,825 -1353,900	1933,875 -1933,875	700,475 - 700,500	700,500 - 700,525	686,725 - 686,725
1353,825 -1353,900	1933,925 -1933,925	700,600 - 700,675	700,575 - 700,900	687,700 - 687,725	
1354,050 -1354,050	1933,975 -1933,975	700,750 - 700,875	700,950 - 700,950	688,050 - 688,050	
1354,100 -1354,250	1934,025 -1934,050	728,300 - 728,350	728,300 - 728,350	688,225 - 688,300	
1354,550 -1354,550	1934,175 -1934,175	728,425 - 728,475	728,425 - 728,500	688,375 - 688,425	
1354,675 -1354,675	1934,350 -1934,350	728,525 - 728,550	728,650 - 728,850	694,850 - 695,100	
1354,800 -1354,800		728,650 - 728,725	728,900 - 728,950	696,650 - 696,650	
1357,575 -1357,600	21 km	728,800 - 728,850	729,000 - 729,025	697,000 - 697,025	
1357,675 -1357,800	700,475 - 700,475	728,900 - 729,075	729,075 - 729,075	697,100 - 697,100	
1357,875 -1358,000	700,550 - 700,925	741,975 - 742,025	791,650 - 791,675	700,525 - 700,525	
1358,225 -1358,225	701,000 - 701,000	742,075 - 742,225			

Tabelle 15. Submicrowindows für Temperatur (Werte in $[cm^{-1}]$)

700,575 - 700,875	688,350 - 688,400	696,975 - 697,050	1354,175 - 1354,575	1354,175 - 1354,175	2075,450 - 2075,475
700,925 - 700,925	694,800 - 694,800	697,100 - 697,125	1354,675 - 1354,800	1354,625 - 1354,675	2075,600 - 2075,625
700,975 - 700,975	694,875 - 694,900	697,175 - 697,175	1932,850 - 1932,875	1354,800 - 1354,800	2075,750 - 2075,775
791,475 - 791,475	694,950 - 695,000	698,275 - 698,300	1932,925 - 1932,975	1932,850 - 1932,875	2075,825 - 2075,875
791,575 - 791,575	696,600 - 696,600	1349,400 - 1349,400	1933,025 - 1933,325	1932,925 - 1932,975	2075,925 - 2075,925
791,650 - 791,675	696,650 - 696,675	1349,475 - 1349,475	1933,400 - 1933,500	1933,025 - 1933,200	2075,975 - 2076,025
791,750 - 791,750	696,975 - 697,050	1349,550 - 1349,700	1933,600 - 1933,600	1933,250 - 1933,300	2076,100 - 2076,125
791,925 - 792,025	697,100 - 697,125	1349,750 - 1349,925	1933,650 - 1933,675	1933,400 - 1933,600	2076,250 - 2076,325
792,150 - 792,175	697,175 - 697,175	1350,025 - 1350,175	1933,725 - 1933,725	1933,650 - 1933,775	2076,500 - 2076,600
792,375 - 792,375	698,275 - 698,275	1350,350 - 1350,375	1933,775 - 1933,775	1933,825 - 1933,950	2076,700 - 2076,800
792,700 - 792,700	791,425 - 791,425	1350,425 - 1350,625	1933,850 - 1933,850	1934,000 - 1934,150	2076,875 - 2077,150
1349,400 - 1349,400	791,475 - 791,575	1350,700 - 1350,825	1933,950 - 1933,950	1934,200 - 1934,325	2077,200 - 2077,225
1349,475 - 1349,475	791,950 - 792,025	1350,875 - 1350,875	1934,000 - 1934,025	2075,200 - 2075,200	
1349,525 - 1349,600	792,125 - 792,150	1354,150 - 1354,175	1934,075 - 1934,075	2075,250 - 2075,350	52 km
1349,700 - 1349,700	792,250 - 792,275	1354,775 - 1354,775	1934,150 - 1934,150	2075,400 - 2075,425	
1349,775 - 1349,875	792,875 - 792,875	1932,875 - 1932,875	1934,200 - 1934,225	2075,500 - 2075,525	686,400 - 686,425
1349,950 - 1349,950	1349,400 - 1349,400	1932,925 - 1932,975	1934,275 - 1934,275	2075,725 - 2075,725	686,475 - 686,500
1350,025 - 1350,050	1349,475 - 1349,500	1933,050 - 1933,325	2075,250 - 2075,275	2076,775 - 2076,775	686,550 - 686,550
1350,100 - 1350,150	1349,775 - 1349,875	1933,400 - 1933,500	2075,325 - 2075,325	2076,875 - 2077,025	686,600 - 686,600
1350,350 - 1350,475	1349,925 - 1349,950	1933,600 - 1933,650	2075,700 - 2075,725	2077,075 - 2077,250	686,875 - 686,900
1350,525 - 1350,525	1350,125 - 1350,150	1933,775 - 1933,775	2075,800 - 2075,850		686,950 - 687,025
1350,575 - 1350,625	1350,475 - 1350,475	1933,825 - 1933,825	2075,975 - 2076,000	47 km	687,200 - 687,275
1350,700 - 1350,750	1350,575 - 1350,625	1933,950 - 1933,950	2076,275 - 2076,300		687,325 - 687,375
1350,800 - 1350,800	1350,700 - 1350,800	1934,000 - 1350,800	2076,425 - 2076,475	685,700 - 685,700	687,600 - 687,625
1354,150 - 1354,175	1353,525 - 1353,975	1934,150 - 1934,150	2076,750 - 2076,800	685,750 - 685,775	687,700 - 687,725
1354,450 - 1354,450	1354,025 - 1354,200	1934,200 - 1934,200		686,400 - 686,425	687,975 - 688,075
1354,675 - 1354,725	1354,250 - 1354,550	1934,350 - 1934,350		686,475 - 686,475	688,175 - 688,250
1354,825 - 1354,825	1354,675 - 1354,750	2076,900 - 2077,000		686,550 - 686,550	688,375 - 688,475
1411,475 - 1411,475	1354,825 - 1354,825	2077,125 - 2077,125		686,875 - 686,875	688,550 - 688,575
1411,525 - 1411,550	1932,875 - 1932,975			686,950 - 686,975	688,725 - 688,725
1411,675 - 1411,700	1933,050 - 1933,325	39 km	685,700 - 685,825	687,025 - 687,025	688,850 - 688,850
1411,950 - 1411,950	1933,450 - 1933,475		686,400 - 686,475	687,200 - 687,375	688,900 - 689,025
1412,075 - 1412,075	1933,625 - 1933,650	685,700 - 685,825	686,875 - 686,875	687,850 - 687,850	689,075 - 689,150
1932,875 - 1932,975	1933,775 - 1933,825	686,400 - 686,450	686,950 - 686,975	687,925 - 687,925	689,200 - 689,225
1933,050 - 1933,325	1933,975 - 1934,000	686,800 - 686,875	687,025 - 687,025	688,000 - 688,075	689,275 - 689,400
1933,450 - 1933,475	1934,150 - 1934,200	687,325 - 687,325	687,275 - 687,375	688,175 - 688,250	696,750 - 696,775
1933,625 - 1933,650	1934,350 - 1934,350	687,475 - 687,475	687,750 - 687,750	688,375 - 688,475	696,850 - 696,900
1933,775 - 1933,825	2075,350 - 2075,350	687,525 - 687,525	687,825 - 687,850	688,550 - 688,575	697,250 - 697,250
1933,975 - 1934,000	2075,475 - 2075,550	687,625 - 687,625	687,925 - 687,925	688,650 - 688,675	1349,450 - 1349,500
1934,150 - 1934,200	2075,675 - 2075,700	687,750 - 687,750	688,000 - 688,075	688,900 - 688,950	1349,550 - 1349,675
1934,350 - 1934,350	2075,800 - 2075,875	687,825 - 687,825	688,175 - 688,250	689,000 - 689,025	1349,725 - 1349,775
2075,350 - 2075,350	2076,000 - 2076,225	688,000 - 688,050	688,375 - 688,400	689,100 - 689,125	1349,825 - 1349,975
2075,400 - 2075,600	2076,275 - 2076,575	688,100 - 688,100	688,450 - 688,450	689,200 - 689,225	1350,175 - 1350,350
2075,650 - 2075,700	2076,625 - 2076,750	688,375 - 688,400	688,550 - 688,575	689,275 - 689,325	1350,425 - 1350,450
2075,775 - 2075,775	2076,850 - 2076,900	688,900 - 688,900	688,650 - 688,650	696,625 - 696,725	1350,500 - 1350,500
2075,825 - 2075,900	2076,975 - 2077,025	688,950 - 688,950	688,900 - 688,900	696,775 - 696,775	1350,550 - 1350,850
2076,025 - 2076,175	2077,100 - 2077,100	689,000 - 689,000	688,950 - 688,950	696,850 - 696,900	1932,850 - 1932,875
2076,225 - 2076,250	2077,175 - 2077,175	689,125 - 689,125	689,000 - 689,025	696,975 - 697,000	1932,950 - 1932,975
2076,300 - 2076,550	2077,250 - 2077,250	689,275 - 689,275	689,100 - 689,125	1349,425 - 1349,600	1933,025 - 1933,200
2076,625 - 2076,725		696,625 - 696,650	689,225 - 689,225	1349,675 - 1349,700	1933,250 - 1933,300
2076,775 - 2076,800	36 km	696,925 - 697,050	689,275 - 689,325	1349,800 - 1350,100	1933,375 - 1933,625
2076,875 - 2076,875		697,150 - 697,175	696,675 - 696,725	1350,175 - 1350,200	1933,675 - 1934,350
2077,000 - 2077,025	685,725 - 685,775	1349,475 - 1349,475	696,875 - 696,900	1350,300 - 1350,350	2075,225 - 2075,250
2077,150 - 2077,175	686,400 - 686,425	1349,525 - 1349,600	696,975 - 697,050	1350,425 - 1350,450	2075,350 - 2075,375
2077,225 - 2077,250	686,800 - 686,875	1349,675 - 1349,700	697,175 - 697,175	1350,500 - 1350,650	2075,450 - 2075,525
	687,425 - 687,475	1349,750 - 1349,950		1350,700 - 1350,850	2075,575 - 2075,650
33 km	687,525 - 687,525	1350,000 - 1350,100	1349,500 - 1349,600	1353,325 - 1353,325	2075,750 - 2076,125
	687,625 - 687,625	1350,175 - 1350,200	1349,675 - 1349,700	1353,400 - 1353,400	2076,250 - 2076,825
685,725 - 685,775	687,700 - 687,725	1350,300 - 1350,425	1349,750 - 1349,950	1353,475 - 1353,475	2076,900 - 2077,050
686,400 - 686,400	688,000 - 688,050	1350,475 - 1350,550	1350,000 - 1350,100	1354,000 - 1354,675	2077,100 - 2077,125
686,725 - 686,725	688,100 - 688,100	1350,625 - 1350,650	1350,175 - 1350,200	1354,725 - 1354,800	2077,200 - 2077,225
686,825 - 686,875	688,350 - 688,400	1350,750 - 1350,750	1350,300 - 1350,350	1932,850 - 1932,875	
687,475 - 687,475	689,125 - 689,125	1350,825 - 1350,825	1350,425 - 1350,425	1932,925 - 1932,975	60 km
687,625 - 687,625	689,275 - 689,275	1350,875 - 1350,875	1350,475 - 1350,650	1933,025 - 1933,200	
687,700 - 687,725	694,825 - 694,825	1353,350 - 1353,350	1350,700 - 1350,700	1933,250 - 1933,300	686,400 - 687,025
688,000 - 688,050	694,900 - 695,000	1353,450 - 1353,725	1350,750 - 1350,750	1933,375 - 1933,600	687,100 - 687,125
688,225 - 688,225	695,050 - 695,100	1353,800 - 1354,025	1350,800 - 1350,875	1933,650 - 1934,350	687,225 - 687,275
688,300 - 688,300	696,600 - 696,600	1354,100 - 1354,125	1354,125 - 1354,125	2075,225 - 2075,250	687,325 - 687,500

Tabelle 15 (Forts.). Submicrowindows für Temperatur (Werte in [cm⁻¹])

687,550 - 687,775	1934,350 -1934,350
687,825 - 687,850	2075,350 -2075,350
687,900 - 687,900	2075,400 -2075,600
687,975 - 688,075	2075,650 -2075,700
688,125 - 688,300	2075,775 -2075,775
688,350 - 688,500	2075,825 -2075,900
688,550 - 689,400	2076,025 -2076,175
696,225 - 696,225	2076,225 -2076,250
696,375 - 696,375	2076,300 -2076,550
696,425 - 696,425	2076,625 -2076,725
696,500 - 696,600	2076,775 -2076,800
696,650 - 696,700	2076,875 -2076,875
696,825 - 696,975	2077,000 -2077,025
697,025 - 697,050	2077,150 -2077,175
697,200 - 697,300	2077,225 -2077,250
697,375 - 697,725	
697,825 - 697,850	
697,950 - 698,000	
698,125 - 698,200	
698,250 - 698,350	
1932,975 -1933,050	
1933,250 -1933,300	
1933,375 -1933,625	
1933,675 -1934,250	
1934,325 -1934,350	
2075,300 -2075,300	
2075,725 -2075,725	
2076,850 -2076,850	
2076,950 -2076,950	
68 km	
686,400 - 687,025	
687,075 - 687,125	
687,225 - 689,400	
696,200 - 696,600	
696,775 - 696,825	
696,875 - 696,875	
696,925 - 696,950	
697,150 - 697,150	
697,200 - 697,825	
697,875 - 698,375	
1349,775 -1349,875	
1349,950 -1349,950	
1350,025 -1350,050	
1350,100 -1350,150	
1350,350 -1350,475	
1350,525 -1350,525	
1350,575 -1350,625	
1350,700 -1350,750	
1350,800 -1350,800	
1354,150 -1354,175	
1354,450 -1354,450	
1354,675 -1354,725	
1354,825 -1354,825	
1411,475 -1411,475	
1411,525 -1411,550	
1411,675 -1411,700	
1411,950 -1411,950	
1412,075 -1412,075	
1932,875 -1932,975	
1933,050 -1933,325	
1933,450 -1933,475	
1933,625 -1933,650	
1933,775 -1933,825	
1933,975 -1934,000	
1934,150 -1934,200	

Tabelle 15 (Forts.). Submicrowindows für Temperatur (Werte in $[\text{cm}^{-1}]$)

6 km	1115,125 -1115,125	1123,375 -1123,600	1115,475 -1115,475	1114,875 -1115,125	1113,150 -1113,200
	1115,200 -1115,200	1124,550 -1124,700	1115,625 -1115,750	1115,225 -1115,475	1113,300 -1113,525
	1115,425 -1115,425	1124,775 -1125,000	1122,900 -1122,975	1115,650 -1115,700	1113,625 -1113,700
	1115,475 -1115,550	1125,325 -1125,400	1123,200 -1123,250	1122,875 -1122,975	1113,750 -1113,975
	763,675 - 763,725	1115,625 -1115,750	1123,325 -1123,600	1123,175 -1123,250	1114,050 -1114,075
	763,875 - 764,150	1123,025 -1123,150	1124,550 -1124,700	1123,325 -1123,625	1114,125 -1114,475
	764,425 - 764,500	1123,475 -1123,550	1124,775 -1124,800	1124,375 -1124,400	1114,525 -1114,525
	765,475 - 765,475	1124,200 -1124,225	1124,875 -1124,925	1124,550 -1124,800	1114,575 -1114,625
	765,825 - 765,850	1124,600 -1124,675	1125,075 -1125,125	1124,875 -1124,925	1114,675 -1114,825
	1113,000 -1113,000	1124,775 -1125,000	1125,325 -1125,400	1125,075 -1125,125	1114,875 -1115,125
	1113,100 -1113,125	1125,325 -1125,450	1125,625 -1125,800	1125,325 -1125,400	1115,225 -1115,250
	1113,300 -1113,325	1125,675 -1125,800		1125,625 -1125,800	1115,300 -1115,375
	1113,450 -1113,475		15 km		1115,500 -1115,550
	1113,775 -1113,775		727,425 - 727,425	18 km	1115,625 -1115,725
	1113,975 -1113,975	12 km	727,500 - 727,700	727,200 - 727,250	1122,875 -1122,975
1114,275 -1114,275	748,000 - 748,000	727,750 - 727,775	727,400 - 727,425	1123,100 -1123,900	
1114,475 -1114,475	748,100 - 748,250	727,850 - 727,925	727,500 - 727,700	1124,375 -1124,400	
1114,675 -1114,675	748,300 - 748,300	748,000 - 748,000	727,825 - 727,825	1124,475 -1124,800	
1114,850 -1114,850	748,350 - 748,500	748,050 - 748,150	727,875 - 727,925	1124,875 -1124,925	
1115,275 -1115,275	763,375 - 763,400	748,250 - 748,500	728,000 - 728,050	1125,025 -1125,125	
1115,750 -1115,750	763,575 - 763,575	748,550 - 748,575	735,700 - 735,775	1125,300 -1125,425	
1123,025 -1123,150	763,675 - 763,800	748,575 - 748,575	735,975 - 735,975	1125,625 -1125,800	
1123,475 -1123,550	764,075 - 764,075	748,575 - 748,575	748,200 - 748,200		
1124,200 -1124,225	764,175 - 764,175	748,575 - 748,575	748,275 - 748,275	21 km	
1125,325 -1125,450	764,350 - 764,400	748,575 - 748,575	748,325 - 748,450	727,400 - 727,400	
1125,675 -1125,800	764,475 - 764,475	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	727,500 - 727,650	
	764,650 - 764,650	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	727,700 - 727,725	
9 km	765,175 - 765,175	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	727,800 - 727,825	
763,575 - 763,575	765,350 - 765,350	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	727,900 - 727,900	
763,675 - 763,800	765,450 - 765,450	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	728,075 - 728,075	
764,075 - 764,075	765,525 - 765,550	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	731,550 - 731,600	
764,175 - 764,175	765,975 - 766,050	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	731,775 - 731,800	
764,350 - 764,400	791,975 - 792,025	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	731,875 - 731,925	
764,475 - 764,475	792,075 - 792,075	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	735,525 - 735,575	
764,475 - 764,475	1073,850 -1073,850	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	735,625 - 735,900	
765,175 - 765,175	1074,000 -1074,000	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	735,950 - 736,050	
765,350 - 765,350	1074,050 -1074,100	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	736,100 - 736,150	
765,450 - 765,450	1074,175 - 765,175	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	748,200 - 748,200	
765,525 - 765,550	765,350 - 765,350	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	748,325 - 748,575	
765,825 - 765,825	765,450 - 765,450	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	752,225 - 752,275	
765,975 - 766,050	765,525 - 765,550	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	757,325 - 757,650	
1073,850 -1073,850	765,975 - 766,050	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	763,400 - 763,450	
1073,925 -1073,925	791,975 - 792,025	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	763,800 - 763,825	
1074,000 -1074,000	792,075 - 792,075	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	763,875 - 763,900	
1074,225 -1074,225	1073,850 -1073,850	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	764,100 - 764,100	
1074,275 -1074,275	1074,000 -1074,000	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	764,175 - 764,225	
1075,050 -1075,225	1074,050 -1074,100	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	764,400 - 764,400	
1075,350 -1075,350	1074,175 - 765,175	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	764,475 - 764,475	
1075,550 -1075,550	1075,350 -1075,350	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	764,525 - 764,675	
1075,750 -1075,750	1075,450 - 765,450	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	764,675 - 764,675	
1076,275 -1076,275	1075,500 -1075,525	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	764,925 - 765,025	
1086,850 -1086,975	1075,650 -1075,750	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,050 - 766,050	
1087,100 -1087,100	1076,025 -1076,025	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,150 - 766,150	
1087,250 -1087,250	1076,275 -1076,300	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1087,325 -1087,325	1086,850 -1086,950	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1112,800 -1112,800	1087,250 -1087,275	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1112,850 -1112,850	1087,350 -1087,400	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1112,850 -1112,850	1112,800 -1112,900	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1112,950 -1113,100	1112,925 -1075,350	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1113,175 -1113,200	1112,850 -1112,100	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1113,275 -1113,275	1113,150 -1113,225	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1113,600 -1113,600	1113,275 -1113,275	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1113,725 -1113,725	1113,325 -1113,350	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1113,775 -1113,825	1113,450 -1113,450	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1113,925 -1114,000	1113,600 -1113,600	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1114,075 -1114,350	1113,700 -1113,725	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
1114,425 -1115,050	1113,800 -1114,000	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1113,925 -1114,000	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1114,100 -1114,125	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1114,100 -1114,125	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1114,225 -1114,275	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1114,325 -1114,325	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1114,325 -1114,825	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1114,975 -1115,050	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1115,125 -1115,125	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1115,200 -1115,200	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1115,425 -1115,425	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1115,475 -1115,475	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1115,625 -1115,750	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
	1123,200 -1123,250	748,575 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		727,425 - 727,425	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		727,500 - 727,700	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		727,750 - 727,775	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		727,850 - 727,925	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		748,000 - 748,000	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		748,050 - 748,150	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		748,250 - 748,500	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		748,550 - 748,575	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		757,225 - 757,250	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		757,300 - 757,350	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		757,400 - 757,425	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		757,500 - 757,500	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		757,550 - 757,550	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		757,625 - 757,675	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		763,400 - 763,450	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		763,700 - 763,800	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		764,075 - 764,075	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		764,175 - 764,175	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		764,350 - 764,400	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		764,475 - 764,475	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		764,650 - 764,650	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		764,925 - 764,975	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		765,525 - 765,550	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		765,975 - 766,050	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		791,975 - 792,025	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		792,075 - 792,075	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1073,850 -1073,850	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1074,000 -1074,000	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1074,050 -1074,100	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1074,175 - 765,175	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1075,350 -1075,350	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1075,450 - 765,450	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1075,500 -1075,525	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1075,650 -1075,750	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1076,025 -1076,025	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1076,275 -1076,300	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1086,850 -1086,950	748,525 - 748,575	766,250 - 766,250	
		1087,250 -1087,275			

1076,000 -1076,000	766,050 - 766,100	735,700 - 735,700	1125,600 -1125,800	1076,400 -1076,400	
1076,100 -1076,150	766,150 - 766,175	735,750 - 735,775		1076,625 -1076,675	42 km
1076,400 -1076,400	766,250 - 766,250	735,825 - 735,825	33 km	1076,775 -1076,775	
1076,475 -1076,475	791,425 - 791,700	735,925 - 736,025		1086,875 -1086,875	763,400 - 763,500
1076,800 -1076,800	791,800 - 791,825	736,100 - 736,100	731,550 - 731,550	1086,925 -1086,925	763,550 - 763,600
1086,800 -1086,925	791,875 - 792,050	748,025 - 748,025	731,725 - 731,925	1087,025 -1087,150	763,725 - 763,825
1087,000 -1087,150	1074,200 -1074,225	748,175 - 748,175	763,400 - 763,450	1087,300 -1087,325	763,875 - 763,925
1087,200 -1087,225	1074,675 -1074,675	748,250 - 748,325	763,800 - 763,825	1087,375 -1087,375	763,975 - 763,975
1087,300 -1087,425	1074,750 -1074,775	748,400 - 748,400	763,975 - 763,975	1087,450 -1087,475	764,025 - 764,100
1087,500 -1087,525	1075,375 -1075,450	748,450 - 748,550	764,400 - 764,400	1122,875 -1122,900	764,175 - 764,250
1112,750 -1112,775	1075,500 -1075,525	763,400 - 763,450	764,475 - 764,475	1123,150 -1123,350	764,325 - 764,400
1112,875 -1112,925	1075,850 -1075,975	763,800 - 763,825	764,525 - 764,550	1123,475 -1123,625	764,475 - 764,475
1113,000 -1113,100	1076,025 -1076,075	763,875 - 763,900	764,650 - 764,650	1124,400 -1124,550	764,525 - 764,525
1113,150 -1113,200	1076,275 -1076,300	763,975 - 763,975	764,850 - 764,975	1124,700 -1124,800	764,650 - 764,650
1113,300 -1113,300	1076,400 -1076,400	764,400 - 764,400	766,050 - 766,250	1124,925 -1124,925	764,850 - 765,225
1113,375 -1113,425	1076,700 -1076,750	764,550 - 764,550	1073,900 -1073,925	1125,025 -1125,125	765,375 - 765,375
1113,525 -1113,525	1086,825 -1086,900	764,850 - 765,025	1074,200 -1074,225	1125,325 -1125,350	765,425 - 765,425
1113,625 -1113,700	1086,950 -1086,950	765,300 - 765,325	1074,500 -1074,525	1125,425 -1125,475	765,525 - 765,525
1113,750 -1113,775	1087,050 -1087,250	766,050 - 766,250	1074,500 -1075,500	1125,600 -1125,800	766,075 - 766,100
1113,850 -1113,950	1087,300 -1087,550	791,450 - 791,500	1075,975 -1076,000		766,150 - 766,150
1114,050 -1114,075	1112,775 -1112,775	791,575 - 791,725	1076,125 -1076,225	39 km	766,200 - 766,225
1114,175 -1114,175	1112,875 -1113,075	791,775 - 791,825	1076,350 -1076,350		766,300 - 766,325
1114,225 -1114,250	1113,150 -1113,200	791,875 - 791,950	1076,400 -1076,400	763,400 - 763,475	1073,850 -1073,850
1114,350 -1114,375	1113,375 -1113,500	1073,825 -1073,900	1076,625 -1076,800	763,550 - 763,600	1074,100 -1074,125
1114,525 -1114,825	1113,625 -1113,625	1074,150 -1074,200	1086,850 -1086,925	763,725 - 763,825	1074,250 -1074,250
1114,875 -1115,125	1113,675 -1113,700	1076,625 -1076,650	1087,000 -1087,050	763,925 - 763,925	1074,375 -1074,375
1115,225 -1115,250	1113,775 -1113,825	1076,700 -1076,775	1087,100 -1087,150	764,075 - 764,100	1074,450 -1074,450
1115,300 -1115,325	1113,875 -1113,900	1086,825 -1086,900	1087,325 -1087,325	764,400 - 764,400	1074,500 -1074,500
1115,500 -1115,550	1113,950 -1113,950	1086,950 -1086,975	1087,400 -1087,400	764,525 - 764,525	1074,575 -1074,575
1115,625 -1115,750	1114,000 -1114,100	1087,025 -1087,050	1087,450 -1087,525	764,650 - 764,650	1074,875 -1074,875
1115,875 -1115,975	1114,325 -1114,325	1087,150 -1087,200	1122,875 -1122,900	764,850 - 765,225	1075,075 -1075,200
1123,100 -1123,375	1114,375 -1114,375	1087,250 -1087,250	1123,175 -1123,375	765,525 - 765,525	1075,350 -1075,375
1123,475 -1123,900	1114,425 -1114,425	1087,300 -1087,550	1123,475 -1123,625	766,075 - 766,100	1075,425 -1075,475
1124,375 -1124,400	1114,500 -1114,625	1112,775 -1112,775	1124,375 -1124,550	766,150 - 766,150	1075,900 -1075,900
1124,475 -1124,550	1114,675 -1114,675	1112,875 -1112,875	1124,700 -1124,800	766,200 - 766,225	1076,050 -1076,075
1124,700 -1124,800	1114,725 -1114,725	1112,925 -1112,925	1124,925 -1124,925	1073,850 -1073,875	1076,125 -1076,150
1124,875 -1124,925	1114,800 -1114,825	1113,150 -1113,150	1125,025 -1125,125	1074,125 -1074,125	1076,275 -1076,350
1125,025 -1125,125	1114,950 -1115,125	1113,400 -1113,500	1125,325 -1125,350	1074,200 -1074,225	1076,675 -1076,700
1125,300 -1125,425	1115,225 -1115,250	1113,625 -1113,625	1125,425 -1125,425	1074,375 -1074,375	1122,800 -1123,350
1125,650 -1125,800	1115,300 -1115,375	1113,675 -1113,750	1125,600 -1125,800	1074,450 -1074,450	1123,475 -1123,725
	1115,500 -1115,525	1113,800 -1113,825		1074,500 -1074,575	1123,850 -1123,875
27 km	1122,875 -1122,975	1113,950 -1114,125	36 km	1074,825 -1074,825	1124,175 -1124,225
	1123,100 -1123,375	1114,250 -1114,250		1075,075 -1075,125	1124,400 -1124,450
727,200 - 727,200	1123,475 -1123,725	1114,325 -1114,325	763,400 - 763,450	1075,175 -1075,175	1124,525 -1125,125
727,475 - 727,525	1124,375 -1124,550	1114,375 -1114,375	763,725 - 763,825	1075,350 -1075,350	1125,250 -1125,475
727,575 - 727,600	1124,700 -1124,800	1114,425 -1114,425	763,925 - 763,925	1075,750 -1075,825	1125,575 -1125,800
727,675 - 727,700	1124,925 -1124,925	1114,475 -1114,475	764,400 - 764,400	1075,875 -1075,925	
727,950 - 727,975	1125,025 -1125,150	1114,525 -1114,575	764,475 - 764,475	1075,975 -1075,975	47 km
731,525 - 731,525	1125,275 -1125,425	1114,675 -1114,675	764,525 - 764,525	1076,100 -1076,225	
731,625 - 731,775	1125,650 -1125,800	1114,825 -1114,850	764,650 - 764,650	1076,300 -1076,300	763,400 - 763,400
731,875 - 731,950		1114,950 -1115,125	764,850 - 764,975	1076,650 -1076,700	763,450 - 763,775
735,525 - 735,575	30 km	1115,225 -1115,225	766,050 - 766,225	1076,800 -1076,800	763,825 - 763,825
735,675 - 735,700		1115,425 -1115,425	1073,850 -1073,875	1122,800 -1123,350	763,875 - 764,125
735,750 - 736,150	727,225 - 727,275	1115,500 -1115,550	1074,125 -1074,125	1123,475 -1123,625	764,175 - 764,725
748,175 - 748,175	727,400 - 727,400	1115,750 -1115,750	1074,200 -1074,225	1124,400 -1124,450	764,775 - 765,300
748,225 - 748,550	727,450 - 727,500	1122,875 -1122,975	1074,375 -1074,375	1124,525 -1124,600	765,350 - 766,100
763,400 - 763,450	727,600 - 727,600	1123,175 -1123,375	1074,500 -1074,550	1124,700 -1124,800	766,150 - 766,375
763,800 - 763,825	727,675 - 727,700	1123,475 -1123,625	1074,800 -1074,825	1124,875 -1124,925	1073,850 -1073,850
763,875 - 763,900	727,825 - 727,850	1123,700 -1123,725	1075,200 -1075,225	1125,025 -1125,125	1074,225 -1074,275
764,075 - 764,075	727,975 - 727,975	1124,375 -1124,550	1075,475 -1075,525	1125,250 -1125,475	1074,400 -1074,450
764,175 - 764,175	731,550 - 731,550	1124,700 -1124,800	1075,700 -1075,725	1125,600 -1125,800	1074,550 -1074,575
764,550 - 764,550	731,625 - 731,800	1124,925 -1124,925	1075,975 -1076,000		1074,750 -1074,775
764,850 - 765,025	731,850 - 731,925	1125,025 -1125,150	1076,125 -1076,225		
765,275 - 765,325	735,550 - 735,550	1125,275 -1125,425	1076,350 -1076,350		

Tabelle 16 (Forts.). Submicrowindows für Ozon (Werte in $[cm^{-1}]$)

1074,875 -1074,900	1074,225 -1074,400
1074,950 -1074,950	1074,450 -1074,575
1075,000 -1075,150	1074,700 -1075,575
1075,275 -1075,275	1075,625 -1075,950
1075,375 -1075,375	1076,050 -1076,350
1075,575 -1075,575	1076,400 -1076,700
1075,900 -1075,900	1076,775 -1076,800
1075,950 -1075,950	1122,800 -1125,800
1076,650 -1076,650	
1122,850 -1123,750	68 km
1123,850 -1123,875	
1124,000 -1124,225	763,375 - 763,400
1124,350 -1125,150	763,450 - 764,000
1125,250 -1125,475	764,075 - 764,175
1125,575 -1125,800	764,600 - 764,600
	764,775 - 766,000
52 km	766,150 - 766,350
	1039,400 -1040,225
763,400 - 763,400	1040,275 -1040,325
763,450 - 763,775	1073,950 -1073,950
763,825 - 763,825	1074,150 -1074,600
763,875 - 764,725	1074,700 -1075,925
764,775 - 765,300	1076,050 -1076,400
765,350 - 766,100	1122,800 -1125,800
766,150 - 766,375	
1039,375 -1039,375	
1039,425 -1039,425	
1039,500 -1039,500	
1039,575 -1039,600	
1039,725 -1039,750	
1040,050 -1040,050	
1040,250 -1040,250	
1073,850 -1073,850	
1073,925 -1073,925	
1074,025 -1074,050	
1074,100 -1074,125	
1074,225 -1074,400	
1074,525 -1074,550	
1074,700 -1074,750	
1074,825 -1075,575	
1075,625 -1075,800	
1075,875 -1075,950	
1076,050 -1076,100	
1076,150 -1076,350	
1076,550 -1076,550	
1076,600 -1076,600	
1076,650 -1076,675	
1076,775 -1076,800	
1122,850 -1125,800	
60 km	
763,400 - 763,400	
763,450 - 763,775	
763,825 - 764,450	
764,500 - 766,025	
766,075 - 766,375	
1039,425 -1039,800	
1039,900 -1039,925	
1039,975 -1040,100	
1040,175 -1040,225	
1040,325 -1040,325	
1073,800 -1073,950	
1074,000 -1074,175	

Tabelle 16 (Forts.). Submicrowindows für Ozon (Werte in [cm⁻¹])

A.IV Verwendete Gitter

In diesem Abschnitt sind die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Höhengitter gezeigt. An verschiedenen Stellen werden Angaben in Kilometer gemacht, an anderen werden nur Höhenstufen verwendet. Die Zuordnung ist jedoch eindeutig und wird hier durchgeführt.

A.IV.I Bei Simulationen verwendete Gitter

Das Höhengitter in den Simulationen ist ein äquidistantes Gitter mit einer Gitterkonstanten von 1 km. Der Höhenbereich beginnt bei 8 km und endet bei 53 km, damit ergeben sich 46 Höhenstufen.

A.IV.II Bei Rechnungen mit Flugdaten verwendete Gitter

Bei den Retrievalrechnungen mit Flugdaten wurde ein Gitter verwendet, das nach oben hin zunehmend größere Abstände zwischen den Gitterpunkten aufwies. Das Gitter beginnt in 12 km Höhe und reicht bis 68 km.

Bei der Zuordnung zu Höhenstufen wird in einigen Darstellungen von null an gezählt, in anderen von eins an. Die Gitterpunkte und die Zuordnungen zu den Höhenstufen sind in Tabelle 17 aufgelistet. Außerdem ist in Tabelle 17 die Zuordnung der Höhenstufen/Höhen zu atmosphärischen Druckniveaus angegeben. Diese Zuordnung kann lediglich ein Anhaltspunkt sein, da die Berechnung des Drucks von vielen Detailfaktoren abhängt, die pro Rechnung etwas unterschiedlich sind (bspw. Temperatur).

Höhenstufen (beginnend bei 1)	Höhenstufen (beginnend bei 0)	Gitterpunkte [km]	Druck [hPa]
1	0	12	0.175248597E+03
2	1	15	0.107920825E+03
3	2	18	0.660408268E+02
4	3	21	0.407761110E+02
5	4	24	0.255815158E+02
6	5	27	0.162378269E+02
7	6	30	0.103789570E+02
8	7	33	0.667481185E+01
9	8	36	0.433281641E+01
10	9	39	0.286552722E+01
11	10	42	0.192659406E+01
12	11	47	0.100538506E+01
13	12	52	0.525411154E+00
14	13	60	0.179384731E+00
15	14	68	0.548227482E-01

Tabelle 17. Höhenstufen- und Druckniveauzuordnung zu Gitterpunkten für Rechnungen mit Flugdaten

A.V Programme

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit kamen eine Vielzahl von in IDL [38] kodierten Programmen zum Einsatz, die hauptsächlich das Betriebssystem Solaris von Sun als Plattform benutzten. Tabelle 18 gibt einen Überblick über die wichtigsten verwendeten Programme und ihren jeweiligen Verwendungszweck.

Programmname	Programmiersprache	Verwendungszweck
B_korr.pro	IDL	Bildet \vec{B} -zur Berechnung der Korrekturmatrix
ci.pro	IDL	Berechnet Wolkenindizes/Kontraste
Esdn_mod.pro	IDL	Berechnet ESDNs
Horeal.pro	IDL	Berechnet HoMa-Matrix für Flugdaten
Hosimu.pro	IDL	Berechnet HoMa-Matrix für Simulationsdaten
Limat_ent_current.pro	IDL	Liest Matrizenparameter im MEM2-Fall ein
Limat_vgl.pro	IDL	Liest Matrizenparameter für Vergleichsfälle ein
Plot_prof_mod.pro	IDL	Erstellt Profilplots
Regent.pro	IDL	Berechnet Regularisierungsmatrix im MEM2-Fall
Read_se.pro	IDL	Liest diagonale S_{ϵ} -Matrizen und K-Matrizen ein
Read_se_full.pro	IDL	Liest voll besetzte S_{ϵ} -Matrizen und K-Matrizen ein
Resolution.pro	IDL	Berechnet Averaging Kernel und Auflösung

Tabelle 18. Übersicht über die wichtigsten verwendeten Programme

Anhang B

B.I Lineare Algebra

B.I.1 Eigenschaften der Determinante

Für die Determinanten $|\dots|$ quadratischer Matrizen A und B der Dimension n gelten folgende Zusammenhänge, λ_i seien Eigenwerte, I ist die Einheitsmatrix [61]

$$|AB| = |BA| = |A||B| \quad (\text{B.I.1})$$

$$|A^{-1}| = |A|^{-1} \quad (\text{B.I.2})$$

$$|A| = \prod_i \lambda_i \quad (\text{B.I.3})$$

$$|I + A| = \prod_i (1 + \lambda_i) \quad (\text{B.I.4})$$

B.I.2 Eigenschaften spezieller Matrizen

Im Laufe der vorliegenden Arbeit werden wiederholt spezielle Eigenschaften besonderer Matrizen verwendet, um Zusammenhänge zu verdeutlichen. Im Folgenden wird ein Überblick über relevante Eigenschaften gegeben.

Für die symmetrische Matrix A gilt

$$A^T = A \quad (\text{B.I.5})$$

Für das Produkt der Matrizen A, B gilt

$$(BA)^T = A^T B^T \quad (\text{B.I.6})$$

Für die unitäre Matrix A gilt

$$A^T = A^{-1} \quad (\text{B.I.7})$$

B.I.3 Normen

Um weitergehende Eigenschaften von Matrizen diskutieren zu können, ist es nötig den Begriff der Norm zu definieren.

Matrizen können als Elemente eines Vektorraumes aufgefasst werden. Auf Vektorräumen können Normen definiert werden.

Allgemein kann man schreiben: Ist H ein Vektorraum über \mathfrak{K} mit $x, y \in H, \lambda \in \mathfrak{K}$ und ist $\|\cdot\|: H \rightarrow \mathfrak{K}$ eine Abbildung eines Vektors auf die reellen Zahlen, dann heißt $\|\cdot\|$ Norm, wenn gilt

$$\|x\| > 0 \wedge \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0 \quad (\text{B.I.8})$$

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad (\text{B.I.9})$$

$$\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\| \quad (\text{B.I.10})$$

In der vorliegenden Arbeit wird in der Regel die 2-Norm verwendet

$$\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i x_i} \quad (\text{B.I.11})$$

Matrizen lassen sich als Elemente eines Vektorraumes begreifen, aus diesem Grund kann man für sie die Vorschriften (B.I.5)-(B.I.7) anwenden.

In Kapitel 4, Abschnitt 4.1.3 wurde die Singulärwertdarstellung von Matrizen benutzt, um positive Definitheit zu zeigen. Unter positiver Definitheit versteht man allgemein Bedingung (B.I.8). Für die 2-Norm einer Matrix K kann man in der Singulärwertschreibweise angeben [30]

$$\|K\|_2 = \|U\Sigma V^T\|_2 \quad (\text{B.I.12}),$$

wobei U und V unitäre Matrizen sind und Σ eine Matrix, welche die Singulärwerte von K auf der Diagonalen trägt.

Mit den gezeigten Eigenschaften für Matrizen ergibt sich für die Norm von K

$$\|K\|_2 = \|\Sigma\|_2 \quad (\text{B.I.13})$$

Oder mit anderen Worten: Sind alle Singulärwerte von K größer Null, ist K positiv definit. Mit den Folgerungen in Abschnitt B.I.4. lässt sich dieser Schluss auch auf die Eigenwerte übertragen.

B.I.4 Beziehung zwischen Singulärwert- und Eigenwertzerlegung

Die Eigenwertzerlegung einer Matrix A und ihre Singulärwertzerlegung (SVD) hängen zusammen. Um Missverständnissen bei den Begriffen vorzubeugen, wird der Zusammenhang an dieser Stelle verdeutlicht [30].

Sei $A = U\Sigma V^T$ eine SVD von A und A eine $n \times m$ Matrix. Dann gilt

$$A^T A = V\Sigma^T U^T U \Sigma V^T = V\Sigma^T \Sigma V^T \quad (\text{B.I.14})$$

Weil $\Sigma^T \Sigma$ eine Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen σ_i^2 ist, gilt offensichtlich

$$A^T A = W\Lambda W^T = V\Sigma^T \Sigma V^T \quad (\text{B.I.15}),$$

wobei $W\Lambda W^T$ die Eigenwertdarstellung von $A^T A$ ist mit Λ als Diagonalmatrix mit den Eigenwerten von $A^T A$ auf der Diagonalen. Daraus kann man schließen, dass

$$\Sigma^T \Sigma = \Lambda \quad (\text{B.I.16})$$

und

$$W = V \quad (\text{B.I.17})$$

Anders ausgedrückt

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \quad (\text{B.I.18})$$

σ_i Singulärwert von A

λ_i Eigenwert von $A^T A$

und (V, Λ) entspricht der Eigenvektor-/Eigenwertzerlegung von $A^T A$.

Anhang C

C.I Nicht-SI-Einheiten

C.I.1 ppmv

Die Vertikalprofile werden in der vorliegenden Arbeit in der Einheit ppmv angegeben. Es handelt sich hierbei nicht um eine SI-Einheit, aber man kann die Einheit ppmv mit in der Chemie gängigen Größen in Verbindung bringen. Folgende Definition soll gelten [69]

Definition von Volumenmischungsverhältnissen

1 ppmv (parts per million by volume) = 10^{-6} pro 1Molekül Luft = $1\mu\text{Mol}/\text{Mol}$.

Analog lässt sich formulieren

1 ppbv (parts per billion by volume) = $1\text{e-}9$ pro 1Molekül Luft = $1\text{nMol}/\text{Mol}$

1 pptv (parts per trillion by volume) = $1\text{e-}12$ pro 1Molekül Luft = $1\text{pMol}/\text{Mol}$

C.II Formelsammlung

C.II.1 Umrechnung Wellenzahl-Wellenlänge-Frequenz

Zur Charakterisierung von Strahlung zieht man ihre Energie heran. Als äquivalente Energieeinheiten kann man Elektronenvolt [eV], Frequenz [1/s], Wellenlänge [m] und Wellenzahl [1/m] heranziehen. Diese Einheiten lassen sich ineinander umrechnen [1].

Ein Elektronenvolt ist die kinetische Energie, die ein einfach geladenes Teilchen aufnimmt, wenn es mit 1 Volt elektrischer Spannung beschleunigt wird. Die Wegstrecke der Beschleunigung und die Masse des Teilchens sind dabei nicht relevant, da sich diese Größen nicht auf die Energieaufnahme auswirken. Unter Anwendung des Welle-Teilchen-Dualismus kann diese Energieangabe auch auf Teilchen angewendet werden, die keine Ruhemasse besitzen (z. B. Photonen).

Die Frequenz elektromagnetischer Strahlung ist über die Plancksche Formel

$$E = h \cdot f \quad (\text{C.II.1})$$

h Planck-Konstante
 f Frequenz der Strahlung

direkt mit der Energie der Strahlung verknüpft und wird deshalb in der Spektroskopie oft als synonyme Energiebezeichnung genutzt.

Die Wellenlänge l des Lichts ist über die Lichtgeschwindigkeit c mit der Frequenz durch

$$l = c / f \quad (\text{C.II.2})$$

verknüpft. Deshalb ist die Wellenlänge ebenfalls energieäquivalent. Zu beachten ist jedoch die indirekte Proportionalität.

Die Wellenzahl w_{λ} ist per Definition der Kehrwert der Wellenlänge l

$$w_{\lambda} = 1 / l \quad (\text{C.II.3})$$

Die Wellenzahl ist somit direkt proportional zur Energie der Strahlung

$$E = h \cdot c \cdot w_{\lambda} \quad (\text{C.II.4})$$

h Planck-Konstante
 c Lichtgeschwindigkeit
 w_{λ} Wellenzahl

und wird üblicherweise in cm^{-1} angegeben.

Die Entstehung der Bezeichnung oder Einheit Wellenzahl hat historische Ursachen. Bei der interferometrischen Messung der Wellenlänge monochromatischer Strahlung wird ein Interferometerspiegel bewegt und die Anzahl der Interferenzen pro Weglänge gezählt. Diese Angabe der Anzahl der Interferenzen wird auf eine Wegstrecke von einem Zentimeter bezogen und führte zu der Einheit „Interferenzen/cm“ oder cm^{-1} , also zu den Wellenzahlen.

Die jeweiligen Einheiten lassen sich explizit wie folgt ineinander umrechnen

Umrechnung Wellenlänge/Wellenzahl

$$l [\mu\text{m}] = 10000 / w_{\lambda} [\text{cm}^{-1}] \quad (\text{C.II.5})$$

Umrechnung Frequenz/Wellenzahl

$$f [\text{Hz}] = 3 * 10^{10} * w_{\lambda} [\text{cm}^{-1}] \quad (\text{C.II.6})$$

Umrechnung Energie/Wellenzahl

$$E [\text{eV}] = 1 / 8065,5 * w_{\lambda} [\text{cm}^{-1}] \quad (\text{C.II.7})$$

C.III Konstanten und Vorsätze

In der vorliegenden Arbeit werden an verschiedenen Stellen physikalische Konstanten verwendet, deren Zahlenwerte im Folgenden mit Angabe der Einheiten wiedergegeben sind [40].

Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	c	$2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
Planck-Konstante	h	$6,6260755 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
Boltzmann-Konstante	k	$1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$

Folgende SI-Vorsätze wurden verwendet [40]

Vorsatz	Symbol	Zugeordneter Faktor
Dezi	d	10^{-1}
Zenti	c	10^{-2}
Milli	m	10^{-3}
Mikro	μ	10^{-6}
Nano	n	10^{-9}
Hekto	h	10^2
Kilo	k	10^3
Mega	M	10^6
Giga	G	10^9

Tabelle 19. Vorsätze für SI-Einheiten

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

<i>Nummer</i>	<i>Seite</i>
1. Anordnung der Instrumente auf ENVISAT	7
2. MIPAS-Messbereich im elektromagnetischen Spektrum	9
3. Schematischer Temperaturverlauf in der Atmosphäre	11
4. Scan-Geometrie von MIPAS	12
5. Sichtgeometrie bei MIPAS	13
6. Schematische Empfindlichkeitscharakteristik für das FOV von MIPAS	13
7. Vom Interferogramm zum Profil	16
8. Schema des MIPAS-Prozessors am DLR	19
9. Schwächung der Strahlung	22
10. Wegsegmente in der Modellatmosphäre	25
11. Beispielhafte Besetzungsmatrix für Microwindows	27
12. Schematischer Aufbau der Jakobi-Matrizen	28
13. Oben: Fiktive Messung, Simulation und Abweichung; Unten Höhenprofile einer Fiktiven Spezies	32
14. Iterationsschema mit fiktivem allgemeinem Beispiel	41
15. Fiktives Profil	44
16. Fiktives regularisiertes Profil	45
17. Topographische Darstellung einer beispielhaften Averaging Kernel-Matrix	48
18. Spalten eines beispielhaften Averaging Kernels, 15 Höhenstufen	49
19. Spalte eines Averaging Kernels, Illustration zur Berechnung der Höhengauflösung	50
20. Veranschaulichung der Größenordnungen	63

21. Zur Berechnung des Gewichtungsooperators	69
22. Oben: Mit HoMa regularisiertes Ozonprofil, Unten: Relative Abweichung Ergebnis – Referenz (Simulationsdaten)	72
23. Höhenaufgelöster Informationsgehalt für Ozon bei HoMa	73
24. Links: Höhenauflösung für Ozon bei HoMa. Rechts: Averaging Kernel (Simulationsdaten)	75
25. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit HoMa (Simulationsdaten)	75
26. Temperaturprofil bei Regularisierung mit HoMa (Flugdaten)	76
27. Höhenaufgelöster Informationsgehalt für Temperatur bei HoMa (Flugdaten)	77
28. Links: Höhenauflösung für Temperatur bei HoMa. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	77
29. Geschätzte Standardabweichung für Temperatur mit HoMa (Flugdaten)	78
30. Ozonprofil bei Regularisierung mit HoMa (Flugdaten)	78
31. Höhenaufgelöster Informationsgehalt für Ozon bei HoMa (Flugdaten)	79
32. Links: Höhenauflösung für Ozon bei HoMa. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	79
33. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit HoMa (Flugdaten)	80
34. Ozon-Profil bei MEM2 -Regularisierung (Simulationsdaten)	86
35. Links: Höhenauflösung bei Anwendung von MEM2, Rechts: Averaging Kernel (Simulationsdaten)	87
36. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit MEM2 (Simulationsdaten)	87
37. Temperaturprofil bei Regularisierung mit MEM2 (Flugdaten)	88
38. Links: Höhenauflösung des Temperaturretrievals bei Anwendung von MEM2. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	88
39. Geschätzte Standardabweichung für Temperatur mit MEM2 (Flugdaten)	89
40. Ozonprofil bei Regularisierung mit MEM2 (Flugdaten)	89

41. Links: Höhengauflösung bei Anwendung von MEM2. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	90
42. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit MEM2 (Flugdaten)	90
43. Mit höhenkonstanter <i>a priori</i> -Matrix regularisiertes Profil (Simulationsdaten)	91
44. Höhengauflöste Informationsgehalte	92
45. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit <i>a priori</i> -Regularisierung (Simulationsdaten)	92
46. Mit Tikhonov-Verfahren regularisiertes Profil (Simulationsdaten)	93
47. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit Tikhonov (Simulationsdaten)	93
48. Temperaturprofil bei Regularisierung mit höhengunabhängiger <i>a priori</i> -Kovarianzmatrix (Flugdaten)	94
49. Höhengauflöster Informationsgehalt für Temperatur bei Regularisierung mit <i>a priori</i> -Kovarianzmatrix (Flugdaten)	95
50. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit <i>a priori</i> -Regularisierung (Simulationsdaten)	95
51. Links: Höhengauflösung für Temperatur bei höhengunabhängiger <i>a priori</i> -Kovarianzmatrix. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	95
52. Ozonprofil bei Regularisierung mit höhengunabhängiger <i>a priori</i> -Kovarianzmatrix (Flugdaten)	96
53. Höhengauflöster Informationsgehalt für Ozon bei Regularisierung mit <i>a priori</i> -Kovarianzmatrix (Flugdaten)	96
54. Links: Höhengauflösung für Ozon bei höhenkonstanter <i>a priori</i> -Kovarianzmatrix. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	97
55. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit <i>a priori</i> -Regularisierung (Flugdaten)	97
56. Temperaturprofil bei Tikhonov-Regularisierung (Flugdaten)	98
57. Links: Höhengauflösung für Temperatur bei Tikhonov-Regularisierung. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	98

58. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit Tikhonov-Regularisierung (Flugdaten)	99
59. Ozonprofil bei Tikhonov-Regularisierung (Flugdaten)	99
60. Links: Höhenauflösung für Ozon bei Tikhonov-Regularisierung. Rechts: Averaging Kernel (Flugdaten)	100
61. Geschätzte Standardabweichung für Ozon mit Tikhonov-Regularisierung (Flugdaten)	100
62. Beispiel für geschätzte Standardabweichung der Temperatur	106
63. Ozonprofil ohne Berücksichtigung eines systematischen Temperaturfehlers von 3 K	108
64. Ozonprofil mit korrektem Temperaturprofil ohne B -Matrix	109
65. Ozonprofil für korrekten Temperaturverlauf und Anwendung einer B -Matrix	110
66. Ozonprofil für Temperaturverlauf mit 3 K-Störung und Anwendung einer B -Matrix	111
67. Vertikales Field of View (FOV) von MIPAS	115
68. Atmosphärenszenario zur Untersuchung des Einflusses von optischen Hindernissen	116
69. Kontrast-Index Plot zu Fall 1	117
70. Kontrast-Index Plot zu Fall 2	117
71. Kontrast-Index Plot zu Fall 3	117
72. Kontrast-Index Plot zu Fall 4	118
73. Kontrast-Index Plot zu Fall 5	118
74. Kontrast-Index Plot zu Fall 6	119
75. Kontrast-Index Plot zu Fall 7	119
76. Kontrast-Index Plot zu Fall 8	119
77. Kontrast-Index Plot zu Fall 9	120

78. Kontrast-Index Plot zu Fall 10	120
79. Mit ROSE berechnete Ozonprofile für die in der Arbeit verwendeten Scans	124

TABELLENVERZEICHNIS

<i>Nummer</i>	<i>Seite</i>
1. Beiträge der Messinstrumente zu den Missionszielen von ENVISAT	3
2. Instrumente auf ENVISAT und deren Einsatzgebiete	8
3. MIPAS-Spektralbereiche und NESR-Werte	10
4. Abbruchkriterien beim MIPAS-Prozessor des DLR	47
5. Merkmale von in der Arbeit verwendeten Regularisierungsverfahren	64
6. Kennzahlen zu den Simulationsbeispielen	104
7. Kennzahlen zu den Beispielen mit Flugdaten	105
8. Zusammenhang Bedeckungsgrad-Indexwert	123
9. Besetzungsmatrix für Rechnungen mit Simulationsdaten (Ozon-Microwindows)	134
10. Besetzungsmatrix für Rechnungen mit Flugdaten (Temperatur-Microwindows)	135
11. Besetzungsmatrix für Rechnungen mit Flugdaten (Ozon-Microwindows)	135
12. Ozon-Microwindows für Simulationsrechnungen	136
13. Ozon-Microwindows bei Verwendung von Flugdaten	136
14. Microwindows für Temperaturretrieval bei Rechnungen mit Flugdaten	137
15. Submicrowindows für Temperatur (Werte in $[\text{cm}^{-1}]$)	138
16. Submicrowindows für Ozon (Werte in $[\text{cm}^{-1}]$)	141
17. Höhenstufen- und Druckniveauzuordnung zu Gitterpunkten für Rechnungen mit Flugdaten	144

18. Übersicht über die wichtigsten verwendeten Programme	145
19. Vorsätze für SI-Einheiten	151

ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

<i>Abkürzung</i>	<i>Bedeutung</i>
AATSR	A dvanced A long T rack S canning R adiometer
AILS	A podised I nstrumental L ine S hape
ASAR	A dvanced S ynthetic A perture R adar
DFS	D egrees of F reedom for S ignal
DFN	D egrees of F reedom for N oise
DLR	D eutsches Z entrum für L uft- und R aumfahrt
DORIS	D oppler O rbitography and R adio P ositioning I ntegrated by S atellite
DWD	D eutscher W etter d ienst
ECMWF	E uropean C enter for M edium- R ange W eather F orecasts
ENVISAT	E nvironmental S atellite
ESA	E uropean S pace A gency
ERS	E uropean R emote S ensing
ESDN	E stimated S tandard D eviation
FOV	F ield of V iew
FWHM	F ull W idth H alf M aximum
GOMOS	G lobal O zone M onitoring by O ccultation of S tars
HoMa	H öhenabhängige M atrix
ICSU	I nternational C ouncil of S cientific U nions

IDL	I nteractive D ata L anguage
IFAC	Istituto di F isica A pplicata "Nello Carrara"
ILS	I nstrumental L ine S hape
KOPRA	K arlsruhe O ptimized and P recise R adiative Transfer A lgorithm
LISA	L imb S ounder of the A tmosphere
LOS	L ine of S ight
LRR	L aser R etro R eflector
LTE	L ocal T hermodynamic E quilibrium
MEM2	M aximale- E ntropie- M ethode für $\alpha = 2$
MIPAS	M ichelson I nterferometer for P assive A tmospheric S ounding
MERIS	M edium R esolution I maging S pectrometer
MWR	M icrowave R adiometer
NESR	N oise E quivalent S pectral R adiance
NLTE	N on L ocal T hermodynamic E quilibrium
NRT	N ear R eal T ime
PSC	P olar S tratospheric C loud
PPMV	P arts P er M illion by V olume
RA-2	R adar A ltimeter
RMS	R oot M ean S quare
SAR	S ynthetic A perture R adar

SCIAMACHY	Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography
SI	Système International d'Unités
SIBERIA	SAR Imaging for Boreal and Radar Interferometry Applications
SVD	Singular Value Decomposition
VMR	Volume Mixing Ratio

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] **R. Arnold**
Grundlagen der IR-Spektroskopie
<http://www.ir-spektroskopie.de/basics/energieumrechnung.html>, 2004
- [2] **G.E. Backus, J.F. Gilbert**
The resolving power of gross earth data
Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society, Vol. 16, pp. 169-205, 1968
- [3] **R. Beer**
Remote Sensing by Fourier Transform Spectrometry
Chemical Analysis, Vol. 120, John Wiley & Sons, Inc, 1992
- [4] **M. Bittner et al.**
STREAMER, final report, Environmental and Climate Research Programme
Research area: 3.3 Earth Observation, No. ENV4-CT98-0756, 2002
- [5] **G. P. Brasseur et al.**
Atmospheric Chemistry and Global Change
Oxford University Press, ISBN 0-19-510521-4, 1999
- [6] **I. N. Bronstein et al.**
Taschenbuch der Mathematik
Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/Main, 24. Auflage
- [7] **M. Carlotti**
Global fit approach to the analysis of limb-scanning atmospheric measurements
Applied Optics, Vol. 27, pp. 3250-3254, 1998
- [8] **M. Carlotti**
Approach to the design and data analysis of a limb scanning experiment
Applied Optics, Vol. 33, No. 15, pp. 3237-3249, 1994
- [9] **T. v. Clarmann and A. Friedle**
The MIPAS ENVISAT level 2 scientific offline processor:2. Retrieval Concepts
Proc. 8th International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, ASSFTS 98, 16-18 November 1998, Toulouse, France, pp. 73-80, 1999
- [10] **T. v. Clarmann et al.**
On the role of non-random errors in inverse problems in radiative transfer and other applications
Journal of Quantitative Spectroscopic Radiative Transfer, Vol. 71, No. 1, pp. 39-46, 2001
- [11] **A. Dudhia et al.**
Microwindow selection for high-spectral-resolution sounders
Applied Optics, Vol. 41, No. 18, pp. 3665-3673, 2002
- [12] **A. Dudhia**
MIPAS Ultimate Retrieval Accuracy – Final Report
<http://www-atm.physics.ox.ac.uk/group/mipas/documents/PO-TN-OXF-GS-0014.pdf>, 06/2000
- [13] **A. Doicu**
Mündliche Informationen über allgemeine Eigenschaften von Regularisierungsoperatoren
DLR IMF-AP, Oberpfaffenhofen 2000, 2001, 2002, 2003
- [14] **A. Doicu, F. Schreier, M. Hess**
Iterative regularization methods für atmospheric remote sensing
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, akzeptiert 21.10.2002, im Druck

- [15] **A. Doicu, F. Schreier, M. Hess**
Iteratively regularized Gauss-Newton method for bound-constraint problems in atmospheric remote sensing
 Computer Physics Communication, Vol. 153, pp. 59-65, 2003
- [16] **A. Doicu, F. Schreier, M. Hess**
Iteratively regularized Gauss-Newton method for atmospheric remote sensing
 Computer Physics Communications, Vol. 148, pp. 214-226, 2002
- [17] **DLR**
Glossar zu Begriffen der Fernerkundung, Bereitgestellt vom Deutschen Fernerkundungsdatenzentrum (DFD) am DLR
<http://www.dfd.dlr.de/education/glossar/index.htm>, 2004
- [18] **D. Etling**
Theoretische Meteorologie – Eine Einführung
 Vieweg Verlag, ISBN 3-528-06661-X, 1996
- [19] **ESA**
MIPAS-Introduction
<http://envisat.esa.int/instruments/mipas/>, 2004
- [20] **ESA**
ENVISAT-MIPAS, An Instrument for Atmospheric Chemistry and Climate Research
 Informationsbroschüre der ESA, SP-1229, ISBN 92-9092-512-4, 03/2000
- [21] **ESA**
Payload description and position on the platform
<http://envisat.esa.int/dataproducts/mipas/CNTR3-1-2.htm#eph.mipas.instr.desc.pay>, 2004
- [22] **ESA**
Envisat's instruments
http://www.esa.int/export/esaSA/ESADT0MBAMC_earth_0.html, 2004
- [23] **ESA**
MIPAS-Concept
<http://envisat.esa.int/instruments/mipas/descr/concept.html>, 2004
- [24] **ESA**
Preflight characteristics and expected performances
<http://envisat.esa.int/dataproducts/mipas/CNTR3-2-1.htm>, 2004
- [25] **ESA**
Geometry and General Principles
<http://envisat.esa.int/instruments/mipas/descr/charact/geo-princip.html>, 2004
- [26] **ESA**
Objectives
<http://envisat.esa.int/m-s/mission/objectives.html>, 2004
- [27] **ESA**
Image gallery
<http://envisat.esa.int/dataproducts/mipas/CNTR1-4.htm>, 2004
- [28] **ESA**
Spectrometry and radiometry
<http://envisat.esa.int/dataproducts/mipas/CNTR5-3-2.htm#eph.mipas.gloss.tech.spectrad>, 2004
- [29] **ESA**
Level 2 products and algorithms
<http://envisat.esa.int/dataproducts/mipas/CNTR2-4-4.htm>, 2004
- [30] **G. Gonnet**
Scientific Computation
<http://linneus20.ethz.ch:8080/index.html>, 2002
- [31] **P. C. Hansen**
Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve
 SIAM Review, Vol. 34, pp. 561-580, 1992

- [32] **S. Hilgers**
Mündliche Informationen über Eigenschaften des MIPAS-Prozessors, Schnittstellen und Programmabläufe
DLR IMF-AP, Oberpfaffenhofen 2000, 2001, 2002, 2003
- [33] **S. Hilgers, G. Schwarz, H. Kemnitzer**
MIPAS-Prozessor Dokumentation
Dokumentation des MIPAS-Prozessors, 2001
- [34] **M. Höpfner et al.**
Retrieval of PSC properties from MIPAS-ENVISAT measurements
Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds II, Yasuhiro Sasano, Jinxue Wang, Tadahiro Hayasaka, Editors, Proceedings of SPIE Vol. 4150, pp. 52-61, 2001
- [35] **Höpfner et al.**
Observation of PSCs with MIPAS / ENVISAT
Geophysical Research Abstracts, Vol. 5, 09636, 2003
- [36] **Höpfner et al.**
First spaceborne observations of Antarctic stratospheric CLONO₂ recovery: austral spring 2002
Journal of Geophysical Research, akzeptiert zur Veröffentlichung 2004
- [37] **IMK**
Informationen zu AMIL2DA
<http://www.imk.fzk.de:8080/imk2/ame/amil2da/consortium.html>, 2004
- [38] **IDL-Dokumentation**
IDL Reference Guide
Dokumentation zu Interactive Data Language, Research Systems, Inc. , 1995
- [39] **D. Kasprzyk**
Cloud Detection in MIPAS-Spectra
Department of Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics, <http://www-atm.physics.ox.ac.uk/group/mipas/kasprzyk.pdf>, 2004
- [40] **H. Kuchling**
Taschenbuch der Physik
Verlag Harri Deutsch, ISBN 3-8171-1020-0, 13. korrigierte Auflage, 1991
- [41] **J. A. Lerner et al.**
Temperature and humidity retrieval from simulated Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI) measurements
Journal of Geophysical Research, Vol. 107 No. D14, 2002
- [42] **X. Liu et al.**
Comparison of different non-linear inversion methods for the retrieval of atmospheric profiles
Paper presented at the 10th. Conference on Satellite Meteorology, American Meteorological Society, Long Beach, California, 2000
- [43] **H. Malberg**
Meteorologie und Klimatologie – Eine Einführung
Springer Verlag, ISBN 3-540-57178-7, Zweite Auflage, 1994
- [44] **R. A. McClatchey et al.**
Optical Properties of the Atmosphere
AFCRL-71-0279, Air Force Cambridge Research Laboratories, Bedford, Massachusetts, 1971
- [45] **G. Merziger, T. Wirth**
Repetitorium der höheren Mathematik
Verlag Feldmann, ISBN 3-923923-33-3, Erste Auflage, 1991
- [46] **K. Meyberg, P. Vachenaer**
Höhere Mathematik 1 - Differential- und Integralrechnung, Vektor- und Matrizenrechnung
Springer Verlag, ISBN 3-540-51798-7, 1990
- [47] **F. Möller**
Einführung in die Meteorologie I
Bibliographisches Institut/Mannheim/Wien, Zürich, B.I. Wissenschaftsverlag

- [48] **W. Neundorf**
Manipulation von Matrizen I- Teil I Grundlagen, Norm, Kondition und Skalierung
 Preprint No. M*/96, Technische Universität Ilmenau, Fakultät für Mathematik, 11/1996
- [49] **W.H. Press et al.**
Woodbury Formel
 Numerical Recipes, Cambridge University Press, 1989
- [50] **W.H. Press et al.**
Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing
 Cambridge University Press, 1992
- [51] **F. Ramos**
Informationen per E-mail-Korrespondenz zu Fragestellungen im Rahmen von MEM2
 DLR, IMF-AP, Oberpfaffenhofen, 2003
- [52] **F. Ramos**
Novel approaches to entropic regularization
 Inverse Problems, Vol. 15, pp. 1139-1148, 1999
- [53] **P. Raspollini et al.**
Mapping of temperature and line-of-sight errors in constituent retrievals for MIPAS/ENVISAT measurements
 Atmospheric Environment, Vol. 34, pp. 5329-5336, 2000
- [54] **P. Raspollini. M. Höpfner**
Performances of the Near Real Time Code for MIPAS Data Analysis
 Chemistry and Radiation Changes in the Ozone Layer, pp. 335-347, 2000
- [55] **C. D. Rodgers**
Inverse methods for Atmospheric Sounding, Theory and Practice
 World Scientific Publishing, ISBN 981-02-2740-X, 2000
- [56] **C. D. Rodgers et al.**
Intercomparison of Remote Sounding Instruments
 Journal of Geophysical Research, noch im Druck, 2002
- [57] **B. Schimpf**
Analyse von Fern-Infrarot-Spektren zur Bestimmung der OH-Konzentration der mittleren Erdatmosphäre
 Dissertation, Universität Bremen, 10/1999
- [58] **F. Schreier**
Mündliche Informationen über Eigenschaften des Least-Squares-Problems
 DLR IMF-AP, Oberpfaffenhofen 2000, 2001, 2002, 2003
- [59] **G. Schwarz**
Mündliche Informationen über Sensoreigenschaften, Instrumentaufbau, Projektpartner und Reetrieveigenschaften
 DLR IMF-AP, Oberpfaffenhofen 2000, 2001, 2002, 2003
- [60] **R. Spang et al.**
A detection method for cirrus clouds using CRISTA 1 und 2 measurements
 Advances in Space Research, 27/10, pp. 1629-1634, 2001
- [61] **T. Steck**
Bestimmung der Vertikalprofile von Spurengasen aus MIPAS-Messungen unter Hinzunahme von a priori-Wissen
 Dissertation, Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH), 12/1999
- [62] **T. Steck et al.**
Methods for determining regularization for atmospheric retrieval problems
 Applied Optics, Vol. 41, No. 9, pp. 1788-1797, 2002

- [63] **T. Steck**
Intercomparison of AMIL2DA results for MIPAS-ENVISAT data
Institut für Meteorologie und Klimafor-
schung, Universität Karlsruhe, 2003
- [64] **G. P. Stiller**
*The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative
Transfer Algorithm (KOPRA)*
Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaft-
liche Berichte, FZKA 6487, 2000
- [65] **J. Stoer, R. Bulirsch**
Einführung in die Numerische Mathematik II
Springer Verlag, ISBN 3-540-08840-7, Zweite
Auflage, 1978
- [66] **W. Thomas, F. Baier, T. Erbertseder,
M. Kästner**
*Analysis of the Algerian severe weather event in No-
vember 2001 and its impact on ozone and nitrogen
dioxide distributions*
Tellus, 55B, issue 5, pp. 993-1006,
2003
- [67] **A. Tikhonov**
*On the solution of incorrectly stated problems and a
method of regularization*
Dokl. Acad. Nauk SSSR, Vol. 151, pp. 501-
504, 1963
- [68] **Universität Jena**
Siberia II – Project Website
<http://www.siberia2.uni-jena.de>, 2003
- [69] **Universität Mainz**
Übungen zur experimentellen Meteorologie II
[http://klima.physik.uni-mainz.de/~script/
public/ExpMet2/Uebungen/
WS03_04_Blatt1.pdf](http://klima.physik.uni-mainz.de/~script/public/ExpMet2/Uebungen/WS03_04_Blatt1.pdf), 2003, 2004
- [70] **Universität Oxford**
*MWMAKE (Microwindow Selection) - User's
Guide*
[http://www.atm.ox.ac.uk/RFM/
mwmake.html](http://www.atm.ox.ac.uk/RFM/mwmake.html), 2004

Bei den folgenden Personen möchte ich mich besonders bedanken

- **Professor Dr. Heinrich Quenzel** vom Meteorologischen Institut der Universität München danke ich für die Erstbegutachtung.
- **Professor Dr. Robert Sausen** vom Institut für Atmosphärenphysik (IPA) des DLR in Oberpfaffenhofen danke ich für viele Anregungen und die Durchsicht der Arbeit als Zweitgutachter.
- **Gottfried Schwarz**, Projektleiter MIPAS in der Abteilung Atmosphärenprozessoren (AP) am Institut für Methodik der Fernerkundung (IMF), danke ich für die vielen Dinge, die ich von ihm gelernt habe und das große Engagement, das er in zahlreichen fruchtbaren Diskussionen immer wieder gezeigt hat. Außerdem danke ich ihm für unendlich viele Anregungen bei seinen Durchsichten während der Entstehung der Arbeit.
- **Siegfried Hilgers** (DLR, AP-IMF) danke ich für die Konkretisierung, Umsetzung und Einbindung von manchmal sehr vagen Ideen in brauchbaren Programmcode und für etliche gehaltvolle mathematische Diskussionen.
- Dem gesamten **MIPAS-Projektteam** danke ich für die stete Hilfsbereitschaft in allen Fragen (Armin Drescher (DLR, IMF-AP), Holger Kemnitzer (nicht mehr am DLR)) rund um MIPAS.
- **Dr. Franz Schreier** (DLR, IMF-AP) danke ich für die Zeit, die er sich für die Beantwortung von Detailfragen zu physikalischen und mathematischen Problemen genommen hat.
- **Dr. Adrian Doicu** (DLR, IMF-AP) gab mir viele Anregungen zu Fragen der Regularisierung und der Inversion.
- Ich bedanke mich bei den Abteilungsleitern der Abteilung AP im IMF des DLR in Oberpfaffenhofen
 - **Dr. Tom Rother** (bis Feb. 2003) für seine große Hilfsbereitschaft in allen Fragen;
 - **PD Dr. Thomas Trautmann** (seit März 2003) für seine große Hilfsbereitschaft und die vielen Anregungen;
- **Martina Kästner** aus der Abteilung Klima- und Atmosphärenprodukte (KA) am Deutschen Fernerkundungsdatenzentrum (DFD) hat mich während unserer Zusammenarbeit im Projekt EURAINSAT immer wieder angespornt und konstruktive Anregungen gegeben.
- **Allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des IMF und des DFD** danke ich für ihre große Hilfsbereitschaft, die vielen kompetenten Antworten zu allen Aspekten der Fernerkundung, Physik und Mathematik und nicht zuletzt für die Integration in ihr Team ohne die eine fruchtbare Zusammenarbeit nicht möglich gewesen wäre.
- Meiner Frau **Marion Wohlsperger** danke ich für Ihre liebevolle Unterstützung und die Durchsicht der Arbeit auf Tippfehler.

Kurzlebenslauf

Name	Jörg Steinwagner
Geburtsdatum	31.10.1968
Geburtsort	Amberg (Oberpfalz), Deutschland
Familienstand	verheiratet

Werdegang

September 1979 – Juli 1988	Rupprecht Gymnasium München; Facharbeit im Leistungskurs Physik; Allgemeine Hochschulreife;
September 1988 – Juni 1990	Kaufmännische Berufsausbildung in München; IHK-Abschluss;
November 1990 – März 1994	Studium der Physik an der Technischen Universität München; ohne Abschluss;
März 1994 – August 1998	Studium der Meteorologie an der Ludwig-Maximilians-Universität München; Abschluss als Diplom-Meteorologe; <i>Thema der Diplomarbeit: „Fernerkundung der Windgeschwindigkeit über See mit dem TRMM Microwave Imager (TMI)“;</i>
Oktober 1998 – Dezember 1998	Aufenthalt als Gastwissenschaftler am National Institute of Oceanography, Goa, Indien; Abteilung Remote Sensing;
April 1999 – April 2000	Tätigkeit als Systemadministrator in München;
Mai 2000 – Juli 2003	Doktorand am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. in Oberpfaffenhofen, IMF-AP, MIPAS-Arbeitsgruppe; <i>Thema der Dissertation: „Optimierung der Parameterauswahl für ein operationelles off-line-Retrieval von Spurengasvertikalprofilen aus MIPAS-Daten“;</i>
August 2003 – Dezember 2003	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. in Oberpfaffenhofen, DFD-KA, EURAINSAT-Arbeitsgruppe;