

**GOME Ozonprofile:
Weiterentwicklung und Validierung**

Dissertation
zur Erlangung des Grades
Dr. rer. nat.
der Universität Bremen

vorgelegt von

Dipl. Phys. Klaus Bramstedt

Institut für Fernerkundung / Institut für Umweltphysik
Fachbereich 1, Physik und Elektrotechnik
Universität Bremen

Datum des Kolloquiums : 6. Juli 2001

1. Gutachter : Prof. Dr. J. P. Burrows

2. Gutachter : Prof. Dr. J. Bleck-Neuhaus

Weitere Prüfer : Prof. Dr. O. Schrems

: Prof. Dr. K. Pawelzik

Abstract

GOME Ozone Profiles: Improvement and Validation

The stratospheric ozone layer protects the biosphere from harmful ultraviolet radiation. It also has significant impact on the global circulation by determining the temperature structure of the stratosphere. Changes in the ozone layer have been observed during the last decades, most dramatic is the yearly formation of the Antarctic ozone hole since the late seventies, caused by human activities. Height-resolved ozone information on a global scale is required for the detection of changes in the ozone distribution and for research into the underlying chemical and dynamical processes. The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME) makes an important contribution in this field.

GOME aboard ESA's ERS-2 satellite measures the reflected and backscattered radiation from the Earth in the ultraviolet and visible spectral range at moderate spectral resolution in nadir viewing geometry. Global coverage is achieved within three days. Vertical ozone profiles can be derived from top-of-atmosphere nadir observations using the Full Retrieval Method FURM, which is based upon an advanced Optimal Estimation inversion scheme, using the Kozlov-information-matrix method.

In the framework of this thesis this retrieval algorithm was adapted for routine retrieval of GOME ozone profiles. The calibration of the GOME instrument was discussed with respect to its impact on ozone profile retrieval. The need for and the usefulness of an effective calibration error correction scheme are demonstrated. Furthermore, a good choice of an a-priori ozone profile in the optimal estimation scheme improves the retrieval. A-priori profiles are taken from an ozone climatology. It is shown that not only the choice of a mean profile is important, but also their statistical properties reflecting the variability of ozone around the zonal mean. An up-to-date, statistically correct ozone climatology is needed. The choice of appropriate a-priori temperature and pressure profiles are investigated, and it was found that assimilated meteorological fields are the best choice.

The ozone profiles have been validated on a global scale by comparison with measurements of the HALogen Occultation Experiment (HALOE) on board the Upper Atmosphere Research Satellite (UARS) in 1998. A good agreement within 10 % between 15 and 35 km altitude for most seasons and regions is achieved. Total ozone calculated from integrated profiles have been validated with Dobson measurements in the Northern mid-latitudes, they agree to within $\pm 2\%$ with a clear seasonal variation.

With the results of this work, the GOME ozone profile retrieval algorithm FURM can be (and already is) used for routine observation and scientific investigation of the ozone layer.

Inhaltsverzeichnis

Titelblatt	i
Abstract	iii
Inhaltsverzeichnis	v
Abkürzungsverzeichnis	ix
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Ziele der Arbeit	3
1.3 Die Stratosphäre	3
1.4 Ozonchemie der Stratosphäre	5
2 Das Satelliteninstrument GOME	9
2.1 ERS-2	9
2.2 Instrumentenübersicht	11
2.3 Die Kalibrationseinheit	13
2.4 Das Spektrometer	13
2.5 Die <i>PMDs</i>	15
2.6 Der Abtastspiegel	15
2.7 Die <i>GOME</i> -Grundpixel	17
2.8 Ein <i>GOME</i> Spektrum	18
3 Inversionstheorie	21
3.1 Die Strahlungstransportgleichung	21
3.2 Das Strahlungstransportmodell <i>GOMETRAN</i>	23
3.3 Optimal Estimation	24

3.4	Kozlov Informationsmatrix Methode	26
3.5	Nichtlineares Optimal Estimation	28
4	Programmbeschreibung	29
4.1	Die Eingabegrößen	29
4.2	Die Auswerteparameter	34
4.3	Die Gewichtsfunktionen	34
4.4	Die Chebyshev–Polynome	38
5	Kalibration der GOME–Spektren	41
5.1	Kalibrierung der Spektren im <i>GDP</i>	41
5.2	Die radiometrische Kalibration	43
5.3	Polarisations Korrektur Algorithmus (<i>PCA</i>)	44
6	Fehlerquellen in der Kalibration	53
6.1	Integrationszeiten der Diodenzeilen	53
6.2	Die radiometrische Eichung	54
6.3	Degradation der spektralen Kanäle	55
6.4	Etalon	57
6.5	Zeitverzögerung in der Auslesung der Diodenzeilen	57
6.6	Verschiebung der zeitlichen Zuordnung der <i>PMDs</i> im <i>PCA</i>	62
6.7	Degradation <i>PMD 1</i>	63
6.8	Parametrisierung der <i>BSDF</i>	65
6.9	Interferenzmuster am Diffuser	67
6.10	Spektrale Kalibrierung	67
6.11	Folgen für <i>FURM</i>	68
7	Die Vergleichsdatensätze	71
7.1	Statistische Größen	71
7.2	Ozonsonden	72
7.3	Vorbereitung der Sondendaten	74
8	Folgen der Kalibrationsprobleme	77
8.1	Die Chebyshev–Polynome	77
8.2	Degradation von <i>PMD1</i>	78
8.3	<i>BSDF</i> Azimutwinkelabhängigkeit	78

8.4	Neue Grundpixel	82
8.5	Zusammenfassung	84
9	Einfluss der Eingabeparameter	87
9.1	Die a-priori Ozonprofile	87
9.2	Die a-priori-Varianzen	91
9.3	Die meteorologischen Profile	100
10	Validation mit HALOE	105
10.1	Das Instrument HALOE	105
10.2	Auswahl der Datensätze	107
10.3	Vergleich der gemittelten Profile	108
10.4	Vergleich der Teilsäulengehalte	110
10.5	Zusammenfassung	110
11	Vergleich der Ozonsäule	117
11.1	Das Dobson Spektrometer	117
11.2	Die Satellitenmessungen	118
11.3	Die Vergleichsdatsätze	119
11.4	Wochenmittel	120
11.5	Stationsbezogener Vergleich	125
12	Zusammenfassung und Ausblick	129
A	Auflistung der Parameter in FURM	133
	Anhang	133
B	Sondenmessungen in den Testdatensätzen	137
C	Die mittleren Profile	143
D	Liste und Statistik der Dobsonstationen	151
E	Versionen der GOME Level-1 Daten	157
F	Quellennachweis	161

Abbildungsverzeichnis	163
Tabellenverzeichnis	167
Literaturverzeichnis	169
Dank	179

Abkürzungsverzeichnis

Abkürz.	Bedeutung
<i>ATMOS</i>	A tmospheric T race M olecules O bserved by S pectroscopy <i>Fernerkundungsinstrument, eingesetzt im Space Shuttle.</i>
<i>BUV</i>	B ackscattered U ltra- V iolet <i>Satelliteninstrument zur Fernerkundung.</i>
<i>BSDF</i>	B i-directional S cattering D istribution F unction <i>Streuungsfunktion des Diffusers von GOME.</i>
<i>DFD</i>	D eutsches F ernerkundungs- D atenzentrum
<i>DLR</i>	D eutsches Zentrum für L uft- und R aumfahrt
<i>DOAS</i>	D ifferential O ptical A bsorption S pectroscopy <i>Methode zur Spurengasbestimmung.</i>
<i>DU</i>	D obson U nit <i>Einheit für Ozonmengen.</i>
<i>DWD</i>	D eutscher W etter D ienst
<i>ECMWF</i>	E uropean C entre for M edium- R ange W eather F orecasts <i>Internationale Meteorologische Organisation.</i>
<i>ENVISAT</i>	ENV ironmental SAT ellite <i>Satellit der ESA, Start vorraussichtlich Juli 2001.</i>
<i>ERS-1, ERS-2</i>	E uropean R emote- S ensing S atellite 1/2 <i>Fernerkundungssatelliten der ESA.</i>
<i>ESA</i>	E uropean S pace A gency <i>Europäische Raumfahrtagentur.</i>
<i>FCKW</i>	F luor C hlor K ohlen W asserstoff
<i>FTP</i>	F ile T ransfer P rotocol <i>Internetstandard zur Übertragung von Dateien.</i>
<i>FURM</i>	F ull R etrieval M ethod <i>Algorithmus zur Ableitung von Ozonprofilen.</i>
<i>GAW</i>	G lobal A tmosphere W atch <i>Atmosphärenbeobachtungsprogramm der WMO.</i>
<i>Fortsetzung auf der nächsten Seite</i>	

<i>Fortsetzung</i>	
Abkürz.	Bedeutung
<i>GDF</i>	Genaralized Distribution Function <i>Mathematische Funktion, benutzt im PCA.</i>
<i>GDP</i>	Gome Data Processor <i>Programm zur operationellen Kalibrierung und Auswertung der GOME Daten.</i>
<i>GOME</i>	Global Ozone Monitoring Experiment <i>Satelliteninstrument zur Fernerkundung auf ERS-2.</i>
<i>GOME-BBM</i>	GOME-Bread Board Model <i>Kopie von GOME, die nicht geflogen ist.</i>
<i>GOME-FM</i>	GOME-Flight Model <i>GOME im Orbit, im Gegensatz zum GOME-BBM.</i>
<i>GOMETRAN</i>	GOME-StrahlungsTRANsportmodell <i>Strahlungstransportmodell, optimiert für GOME.</i>
<i>GSFC</i>	Goddard Space Flight Center <i>Abteilung der NASA.</i>
<i>HALOE</i>	HALogen Occultation Experiment <i>Statelliteninstrument auf UARS.</i>
<i>ISCCP</i>	International Satellite Cloud Climatology Project <i>Quelle der ISCCP-Wolkenklimatologie.</i>
<i>IR</i>	InfraRot <i>Spektralbereich des Lichts.</i>
<i>IUP</i>	Institut für UmweltPhysik <i>Institut der Universität Bremen.</i>
<i>KNMI</i>	Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut
<i>LIDAR</i>	LIght Detection And Ranging <i>Methode zur Fernerkundung.</i>
<i>MPI</i>	Max-Planck-Institut
<i>MRA</i>	Mittlere Relative Abweichung
<i>MPV</i>	Modified Potential Vorticity <i>Eine dynamische Größe der Atmosphäre.</i>
<i>NCEP</i>	National Center for Environmental Protection <i>US-amerikanische Umweltbehörde.</i>
<i>NASA</i>	National Aeronautics and Space Administration. <i>US-amerikanische Raumfahrtbehörde.</i>
<i>NIST</i>	National Institute for Standards and Technology
<i>Fortsetzung auf der nächsten Seite</i>	

<i>Fortsetzung</i>	
Abkürz.	Bedeutung
PCA	Polarization Correction Algorithm <i>Algorithmus zur Polarisationskorrektur im GDP</i>
PMD	Polarisation Monitoring Device <i>Detektoren im GOME Instrument.</i>
PSC	Polar Stratospheric Clouds <i>Aerosolwolken in der kalten, polaren Stratosphäre.</i>
PV	Potential Vorticity <i>Eine dynamische Größe der Atmosphäre.</i>
RRS	Rotations-Raman-Streuung
SAGE	Stratospheric Aerosol and Gas Experiment <i>Satelliteninstrument zur Fernerkundung.</i>
SBUV	Solar Backscattered Ultra-Violet <i>Satelliteninstrument zur Fernerkundung.</i>
SCIAMACHY	SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY <i>Satelliteninstrument zur Fernerkundung auf ENVISAT.</i>
SMRA	Standardabweichung der Mittleren Relativen Abweichung
STG	STrahlungstransportGleichung
STM	STrahlungstransportModell
SZW	SonnenZenitWinkel <i>Winkel zwischen Zenit und Richtung der Sonne.</i>
TOA	Top Of Atmosphere <i>Oberrand der Atmosphäre.</i>
TOMS	Total Ozone Mapping Spektrometer <i>Serie von Satelliteninstrumenten zur Fernerkundung.</i>
UARS	Upper Atmosphere Research Satellite <i>Satellit der NASA.</i>
UTC	Universal Time Coordinate <i>Internationale Standardzeit.</i>
UKMO	United Kingdom Meteorological Office <i>Britischer Meteorologischer Dienst.</i>
UV	UltraViolett <i>Spektralbereich der Lichts.</i>
WOUDC	World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre <i>Datenzentrum der WMO für Ozon und ultraviolette Strahlung.</i>
<i>Fortsetzung auf der nächsten Seite</i>	

<i>Fortsetzung</i>	
Abkürz.	Bedeutung
WMO	World Meteorological Organization <i>Meteorologische Organisation der Vereinten Nationen.</i>

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Mit dem Beginn des Raumfahrtzeitalters in den fünfziger Jahren war es erstmals möglich, von außerhalb einen Blick auf unseren Lebensraum zu werfen. Die Bilder einer blauweißen Kugel im lebensfeindlichen Weltraum, auf deren Oberfläche sich das gesamte irdische Leben abspielt, zeigten erstmals mit aller Deutlichkeit, wie wichtig die hauchdünne Atmosphäre unseres Planeten für uns ist.

Die Atmosphäre ist Grundvoraussetzung für Leben, wie wir es kennen. Ohne Atmosphäre gäbe es kein flüssiges Wasser und damit keine Meere, in denen das Leben sich entwickelt hat. Der Sauerstoffanteil ist besonders für das tierische und menschliche Leben notwendig, da dieses seinen Energiebedarf aus Verbrennungsprozessen deckt. Die Atmosphäre schützt die Oberfläche vor gefährlicher Strahlung aus dem Weltraum. Sie regelt den Wärmehaushalt der Erdoberfläche, verhindert zu große Temperaturunterschiede zwischen Tag- und Nachtseite und sorgt für ein lebensfreundliches Klima in fast allen Regionen der Erde.

Die Atmosphärenforschung ist daher eine Wissenschaft, die sich auch mit den Bedingungen unseres Lebensraumes befasst. In Form der Meteorologie ist die Atmosphärenforschung bereits eine sehr alte Wissenschaft, denn der Ursprung der Meteorologie ist die Wetterkunde, und das Wetter hat die Menschen schon immer, früher sehr viel mehr als heute, betroffen. Das Wettergeschehen spielt sich in der unteren Atmosphäre, der Troposphäre, ab. Die Atmosphärenforschung insgesamt befasst sich mit der Physik und der Chemie der gesamten Atmosphäre von Himmelskörpern. Erst in den letzten beiden Jahrzehnten ist die Atmosphärenforschung in das Bewusstsein einer breiteren Öffentlichkeit gelangt, weil sich erstmals die Auswirkungen menschlichen Handelns auf globaler Ebene zeigten. Es begann die Diskussion um die Auswirkungen der Zunahme der sogenannten Treibhausgase, im wesentlichen Kohlendioxid und Methan, durch menschliche Aktivitäten. Hauptquelle von zusätzlichem Kohlendioxid ist die Verbrennung fossiler Brenn-

stoffe wie Kohle, Erdöl und Erdgas. Anthropogen verursachtes Methan wird beim Reisanbau und während der Verdauung in der zunehmenden Zahl von Rindermägen frei. Der Methangehalt der Atmosphäre hat sich seit 1800 verdoppelt, der Kohlendioxidanteil ist um ein Drittel gestiegen. Diese Treibhausgase absorbieren die von der Erdoberfläche ausgehenden Wärmestrahlung und verändern so den Wärmehaushalt der Erde. Seit 1860 hat die mittlere Temperatur der Erdoberfläche um 0.3° bis 0.6°C zugenommen [79]. Wegen der Vielzahl möglicher Rückkopplungen in der Atmosphäre ist ein eindeutiger Zusammenhang allerdings nicht beweisbar.

1985 wurde erstmals der seit Ende der siebziger Jahre stattfindende regelmäßige massive Abbau der Ozonschicht im antarktischen Frühjahr entdeckt [36] und als Ozonloch berühmt. Seit Anfang der neunziger Jahre wird auch im Arktischen Frühjahr regelmäßig Ozonabbau beobachtet. Aufgrund der größeren atmosphärischen Dynamik variiert das Ausmaß dieses Abbaus allerdings stark von Jahr zu Jahr. Als Ursache wurden die von Menschen freigesetzten Fluorchlorkohlenwasserstoffe (*FCKWs*) identifiziert, siehe Abschnitt 1.4. Mit der internationalen Übereinkunft von Montreal im Jahre 1987 und deren Folgeabkommen wurde die Freisetzung von *FCKWs* deutlich reduziert, so dass für die Zukunft auf lange Sicht eine Normalisierung erwartet werden kann. Neuere Untersuchungen mit Hilfe eines Klimamodells lassen allerdings eine Verzögerung dieser Normalisierung aufgrund des Treibhauseffektes erwarten. Die Erwärmung der untersten Luftschichten führt zu einer Abkühlung der stratosphärischen Luft, so dass die Bedingungen für die Bildung des Ozonloches verbessert werden [83]. Auch in den mittleren Breiten wurde eine Abnahme des Ozongehaltes beobachtet [87]. Die weitere Beobachtung der stratosphärischen Ozonschicht ist daher geboten. Satelliteninstrumenten kommt hierbei eine entscheidende Bedeutung zu, da sie die Atmosphäre im Allgemeinen global beobachten können. Andere Instrumente sind in der Regel zeitlich und/oder örtlich begrenzt.

Das Institut für Umweltphysik der Universität Bremen arbeitet auf den Forschungsgebieten Ozean und Atmosphäre. Die Arbeitsgruppe, in der diese Arbeit entstanden ist, beschäftigt sich mit Auswertungen der Daten des Satelliteninstrumentes *GOME* (*Global Ozone Monitoring Experiment*), das als Vorläufer des Instrumentes *SCIAMACHY* seit 1995 im Orbit ist. *GOME* dient der Fernerkundung der Atmosphäre, wobei primäres Produkt die Bestimmung von Ozongesamtsäulen ist. Allerdings erlaubt *GOME* auch die Messung weiterer Spurengase sowie die Bestimmung von Ozonvertikalprofilen. Ozonprofile erlauben zusätzliche Einsichten in die Dynamik und Chemie des Ozons, da mit Ihnen nicht nur die Frage „Wieviel Ozon ist da?“, sondern auch die Frage „Wo ist das Ozon?“ beantworten lässt. Dies ist entscheidend für das Verstehen des Ozonabbaus. In den mittleren Breiten beispielsweise wird im langjährigen Trend eine Abnahme des Ozons vor allem in der unteren und oberen Stratosphäre beobachtet, während in der mittleren Stratosphäre nur geringe Minderungen beobachtet werden [104, Kapitel 6].

Die grundlegenden Verfahren zur Profilauswertung wurden bereits in vorangegangenen Arbeiten entwickelt [26, 50, 51]. Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Weiterentwicklung und der umfassenden Validierung dieser Verfahren.

1.2 Ziele der Arbeit

In das am Institut für Umweltphysik entwickelte Verfahren zur Ableitung der Ozonprofile (*Full Retrieval Method FURM*) aus den Messungen von *GOME* gehen Daten aus mehreren Quellen ein. Zuallererst sind dies natürlich die Spektren des Instrumentes selbst, die Informationen über die vertikale Verteilung des Ozons durch die Huggins-Banden im ultravioletten Spektralbereich enthalten. Zum anderen sind es Informationen über die Statistik der Ozonverteilung, das heißt, es wird eine Ozonklimatologie benötigt. Drittens braucht das Verfahren Informationen über die Druck- und Temperaturverteilungen in der Atmosphäre, da diese das Absorptions- und Streuverhalten der Atmosphäre entscheidend mitbestimmen.

Ziel dieser Arbeit ist es, zum einen die Qualität und zum anderen die Wichtigkeit der eingehenden Daten zu untersuchen und zu beurteilen, um mit diesen Informationen die Ergebnisse von *FURM* weiter zu verbessern. Bei den Spektren ist die Kalibration des Gerätes entscheidend. In dieser Arbeit werden daher bekannte und während dieser Arbeit entdeckte Probleme der Kalibration im Hinblick auf ihre Relevanz für die Ozonprofile untersucht. Für die Ozonklimatologie und die verwendeten Druck- und Temperaturverteilungen wird die Auswahl und die Qualität geeigneter Datensätze untersucht.

Zum zweiten wird in dieser Arbeit eine globale Validation der Ozonprofile vorgenommen. Hierzu werden die Messungen des Satelliteninstrumentes *HALOE* aus dem Jahre 1998 herangezogen. Durch Integration der Profile über die Höhe erhält man mit *FURM* auch Gesamtozonwerte, die anhand der Dobson Stationen im Netzwerk des *World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre (WOUDC)* validiert werden. Zusätzlich werden diese Gesamtozonwerte mit weiteren Gesamtozonwerten, die auf Satellitenbeobachtungen beruhen, verglichen. Beide Validierungen werden die bereits erreichte Qualität der Ozonprofile von *GOME* belegen.

1.3 Die Stratosphäre

Die Atmosphäre wird in mehrere Schichten eingeteilt, die durch den Temperaturverlauf definiert werden, siehe Abbildung 1.1. Die Troposphäre ist die unterste Schicht der Atmosphäre, die Temperatur nimmt hier mit der Höhe ab. Diese Schicht wird durch die infrarote Abstrahlung der Erdoberfläche erwärmt. Die Tropopause ist das erste Minimum der Temperaturkurve und liegt in einer Höhe von

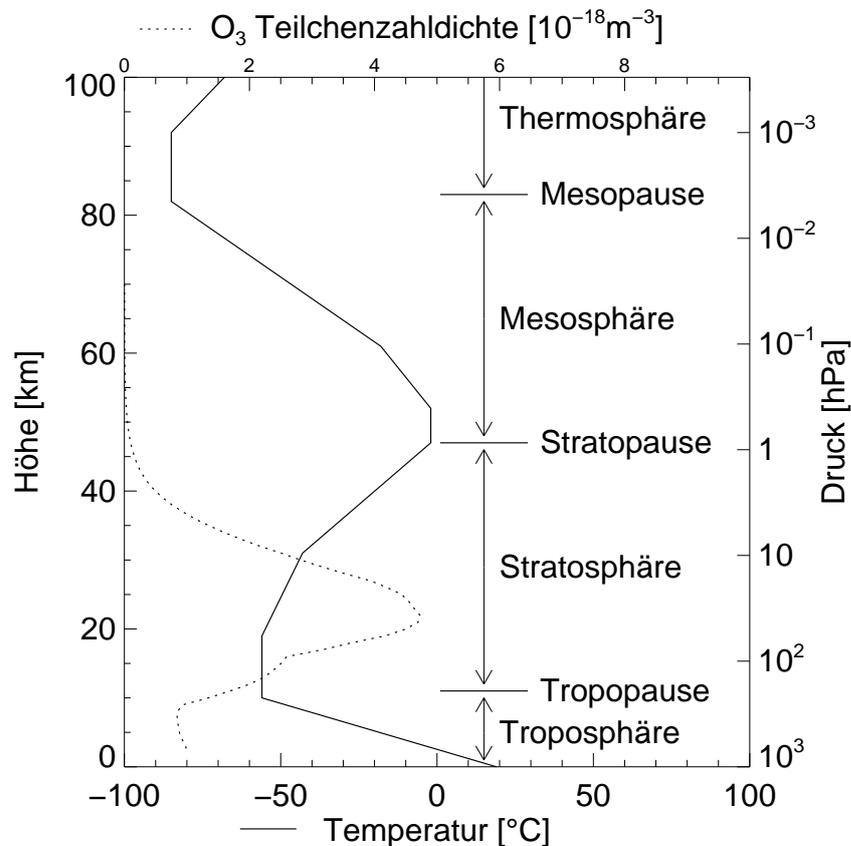


Abbildung 1.1: Aufbau der irdischen Atmosphäre nach [79]. Die gepunktete Linie zeigt den Verlauf der Teilchenzahldichte von Ozon in den mittleren Breiten.

8 km an den Polen bis etwa 18 km in Äquatornähe. Die Stratosphäre wird durch eine mit der Höhe wieder zunehmende Temperatur gekennzeichnet, die durch die Absorption von ultravioletter Strahlung durch Ozon verursacht wird. Die Stratopause liegt in etwa 45 bis 55 km Höhe. In der Mesosphäre nimmt die Temperatur wieder ab, um in der Mesopause bei etwa 80 bis 90 km das absolute Minimum von etwa -90°C zu erreichen. In der Thermosphäre steigt die Temperatur erneut an, hier wird kurzwellige Strahlung durch Stickstoff- und Sauerstoffmoleküle absorbiert.

Die Luft der trockenen Atmosphäre setzt sich zu 78,08 % des Volumens aus Stickstoff (N_2) und zu 20,95% aus Sauerstoff (O_2) zusammen. 0,93 % werden durch das Edelgas Argon (Ar) gestellt, der Rest setzt sich aus den sogenannten Spurengasen zusammen. Kohlendioxid (CO_2) ist das wichtigste, an zweiter Stelle steht Wasser (H_2O). Wasser nimmt eine Sonderstellung in, es kommt vor allem in der unteren Troposphäre vor, wo es 1 bis 4 % des Volumens ausmacht, während in der Stra-

osphäre nur noch ganz geringe Wassermengen vorkommen (1 ppb). Obwohl die Spurengase nur einen sehr geringen Anteil haben, wird die Physik und die Chemie der Atmosphäre doch ganz entscheidend von Ihnen geprägt. Die Treibhausgase, hauptsächlich CO_2 , H_2O und CH_4 (Methan) haben großen Einfluss auf den Wärmehaushalt der Erde. Ozon schützt die Biosphäre vor der ultravioletten Strahlung der Sonne, deren Energie ausreichen würde, um Proteine und Nukleinsäuren, die Bausteine des Lebens, zu zerstören. Von Menschen eingebrachte Spurengase wie die Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKWs) können zu erheblichen Störungen der Ozonchemie führen und damit die Schutzwirkung des Ozons gefährden.

1.4 Ozonchemie der Stratosphäre

Das wichtigste Spurengas der Stratosphäre ist das Ozon. Es entsteht durch die Photodissoziation von Sauerstoff, durch die freie Sauerstoffatome entstehen:



Licht ist bei einer Wellenlänge von weniger als 242 nm in der Lage, Sauerstoffmoleküle zu spalten. Die freien Sauerstoffmoleküle können, unter Beteiligung eines Stoßpartners M, der die frei werdende Reaktionsenergie aufnimmt, mit Sauerstoff zu Ozon reagieren:



Dies ist praktisch die einzige Reaktion in der Atmosphäre, durch die Ozon gebildet wird. Ozon seinerseits absorbiert ultraviolette Strahlung im Bereich von 240 bis 320 nm und wird dabei wieder gespalten:

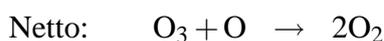
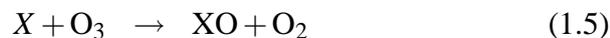


Außerdem kann Ozon durch Reaktion mit einem freien Sauerstoffmolekül abgebaut werden:



Die Gleichungen 1.1 bis 1.4 bilden den *Chapman*-Zyklus, der 1930 erstmals vorgeschlagen wurde [24]. In den sechziger Jahren wurde festgestellt, dass die Reaktionsraten von Gleichung (1.4) deutlich niedriger sind als bis dahin angenommen. Damit ergaben sich für die Ozonkonzentrationen in der Stratosphäre deutlich höhere Werte als tatsächlich beobachtet werden. In den folgenden Jahren wurden mehrere zusätzliche, katalytische Abbauprozesse für Ozon vorgeschlagen, bei denen eine Substanz X durch Ozon oxidiert und anschließend durch die Reaktion mit einem freien Sauerstoffatom wieder reduziert wird, wobei netto Ozon abgebaut und die Substanz X erhalten wird. Die einfachste Form eines

Solchen Abbauzyklus ist:



Bereits in den fünfziger Jahren wurden Abbauzyklen mit wasserstoffhaltigen Radikalen, die HO_x -Zyklen, vorgeschlagen [5]. In diesem Fall können H, OH und HO_2 die Rolle des Katalysators übernehmen. OH wird in der Stratosphäre hauptsächlich durch die Reaktion von Sauerstoffatomen mit Wasser gebildet. 1970 wurden Abbauzyklen mit Stickoxiden (NO_x) entdeckt [25, 53]. Quelle dieser Spurengase ist N_2O , das durch Transport aus der Troposphäre in die Stratosphäre gelangt und dort zu 5 % durch atomaren Sauerstoff zu $2NO$ oxidiert wird. In den Abbauzyklen entstehen als Zwischenprodukte auch NO_2 und NO_3 . Seit 1974 sind die Abbauzyklen, an denen Chlor beteiligt ist, bekannt [66, 74]. Die einzige bekannte natürliche Quelle von stratosphärischen Halogenen sind Methylchlorid (CH_3Cl) sowie in sehr viel geringeren Mengen Methylbromid und Methyljodid (CH_3Br bzw. CH_3I), die von Algen und Plankton in den Ozeanen erzeugt werden. Diese Verbindungen sind nicht wasserlöslich und verbleiben daher sehr lange in der Troposphäre, so dass sie in die Stratosphäre diffundieren können. Seit den fünfziger Jahren werden *FCKWs* produziert, die unter anderem als Kältemittel in Kühlgeräten, als Treibgase in Sprühdosen und in aufgeschäumten Kunststoffen Verwendung fanden. *FCKWs* sind chemisch sehr inaktiv und ebenfalls wasserunlöslich, so dass sie im Laufe der Zeit in die Stratosphäre transportiert werden. Durch Photolyse mit energiereichem Licht wird das Chlor freigesetzt und erhöht so den Chlorgehalt.

Die bisher genannte Gasphasenchemie reicht nicht aus, um den massiven Ozonabbau im antarktischen und arktischen Frühjahr zu verstehen. Ein Großteil des Chlors der Stratosphäre liegt in inaktiver Form, sogenannten Reservoirgasen vor. Das sind Chlornitrat ($ClONO_2$) und Chlorwasserstoff (HCl). Unter sehr kalten Bedingungen können sich die sogenannten polarstratosphärischen Wolken (*Polar Stratospheric Clouds PSCs*) bilden, die aus schwefel- und salpetersäurehaltigen Aerosolen entstehen. Typ IA, ($HNO_3 \cdot 3H_2O$, kristallin) und Typ IB ($HNO_3/H_2SO_4/H_2O$, flüssig) können sich unterhalb von 195 K bilden, Typ II (H_2O , kristallin) bei weniger als 190 K. Die exakten Bildungstemperaturen hängen vom genauen Gemisch und der Höhe der Teilchen ab. Auf der Oberfläche der *PSCs* finden heterogene, chemische Reaktionen statt, die die oben genannten Reservoirgase in Cl_2 , $ClONO_2$ und $HOCl$ überführen. Diese können durch Sonnenlicht leicht photolytisch werden und setzen Chloratome frei, die nach Gleichung (1.5) katalytisch Ozon abbauen können. Solange es kalt genug bleibt, ist NO_x in den *PSCs* gebunden und die Reservoirgase können sich nicht zurückbilden. Man spricht in diesem Zusammenhang von Denitrifizierung, zumal ein Teil der *PSC*-Teilchen absinkt

und damit aus der Stratosphäre entfernt wird. Zwei Bedingungen sind also für die Bildung des „Ozonlochs“ notwendig: tiefe Temperaturen und Sonnenlicht. Im polaren Winter bildet sich eine abgeschlossene Luftmasse, der polare Wirbel, die in der Polarnacht auskühlt. Im polaren Frühjahr erreicht Sonnenlicht den Wirbel und setzt aktives Chlor frei, das dann Ozon katalytisch abbaut. Der nördliche polare Wirbel ist weniger stabil als der südliche. Daher werden hier zum Einen die Temperaturen zur Bildung der PSCs nicht so oft und nicht so lange erreicht wie im Süden, zum Anderen kommt es zu stärkeren Mischungsprozessen zwischen Luftmassen inner- und außerhalb des Wirbel. Das nördliche Ozonloch ist daher im Allgemeinen nicht so groß wie das südliche und weist eine erheblich größere Variabilität von Jahr zu Jahr auf.

Auch in den mittleren Breiten wurden Änderungen in der Ozonschicht beobachtet. Beispielsweise zeigt eine Zeitreihe mit einem dreijährigen laufenden Mittel von Dobsonmessungen in Arosa (Schweiz) eine Abnahme um etwa 20 DU in den letzten zwei Jahrzehnten [87]. Gegenwärtig werden die niedrigsten Ozonsäulen seit Beginn der Messungen in den zwanziger Jahren beobachtet. Weitere Beobachtungen sind nötig, um die Ursache dieser Änderungen zu bestimmen. Wird diese Änderung direkt durch chemischen Ozonabbau aufgrund der anthropogen bedingten Zunahme von Halogenverbindungen in der Stratosphäre verursacht? Führen Mischungsprozesse mit ozonarmer Luft aus dem polaren Wirbel zur Abnahme des mittleren Ozongehalts auch in mittleren Breiten? Hat möglicherweise der Treibhauseffekt aufgrund der Zunahme insbesondere von Kohlendioxid und Methan Rückwirkungen auf den Ozonhaushalt? Sind die Zeitreihen einfach nicht lang genug, um zu sehen, dass die beobachteten Werte der letzten beiden Jahrzehnte innerhalb der natürlichen Variabilität nicht ungewöhnlich sind? Unterliegt auch der Ozongehalt in äquatorialen Breiten, wo es nur sehr kurze Zeitreihen von Ozonmessungen gibt, einem Trend? Der aktuelle Stand der Forschung wird in [85] dargestellt, als ausführliche Lektüre sind die entsprechenden Abschnitte in [79] zu empfehlen.

Satellitenbeobachtungen werden bei der Beantwortung dieser Fragen eine wichtige Rolle spielen, da nur sie kontinuierliche und globale Messungen zur Verfügung stellen können.

Kapitel 2

Das Satelliteninstrument GOME

GOME, das *Globale Ozon Beobachtungsexperiment (Global Ozone Monitoring Experiment)*, wurde am 26. April 1995 mit einer Trägerrakete vom Typ *Ariane 4* vom europäischen Raumfahrtbahnhof Kourou als Teil des zweiten europäischen Fernerkundungssatelliten *ERS-2 (European Remote sensing Satellite 2)* ins All geschossen. *GOME* ist eine verkleinerte Version von *SCIAMACHY*, dem *bildgebenden Absorptionsspektrometer zur Kartografierung der Atmosphäre (SCanning Imaging Absorption spectrometer for Atmospheric CHartography)*, das auf dem europäischen Umweltsatelliten *ENVISAT (ENVIronmental SATellit)* voraussichtlich Anfang 2002 starten wird [9, 17]. Im Folgenden wird das Instrument *GOME* beschrieben, beginnend mit einer Einführung in *ERS-2*. Es folgt eine Gesamtübersicht über *GOME*; anschließend werden die einzelnen Komponenten näher erläutert, mit besonderem Schwerpunkt auf den für diese Arbeit wichtigen Teilen. Eine Einführung in *GOME* und seine wissenschaftlichen Erfolge ist in [19] dargelegt, eine umfassende Beschreibung des Gerätes findet sich im *GOME* Benutzerhandbuch [35].

2.1 ERS–2

Der europäische Fernerkundungssatellit *ERS-2* ist baugleich mit seinem Vorgänger *ERS-1*, der bereits einige Jahre vorher gestartet wurde und nach mehreren Jahren parallelen Betriebes inzwischen abgeschaltet ist. Einzig das Instrument *GOME* ist hinzugekommen. 1988, als die Planungen für *ERS-2* begannen, wurde von Seiten der *ESA* beschlossen, dass, aufgrund der aufkommenden Diskussion zum Ozonabbau und zur Klimaveränderung, ein zusätzliches Instrument zur Beobachtung von Ozon und anderen atmosphärischen Spurengasen notwendig ist. Der Vorschlag von J.P. Burrows und P. Crutzen zum Bau einer verkleinerten Version von *SCIAMACHY* [18] wurde ausgewählt und als *GOME* Instrument verwirklicht. Die bereits auf *ERS-1* vorhandenen Instruments sind:

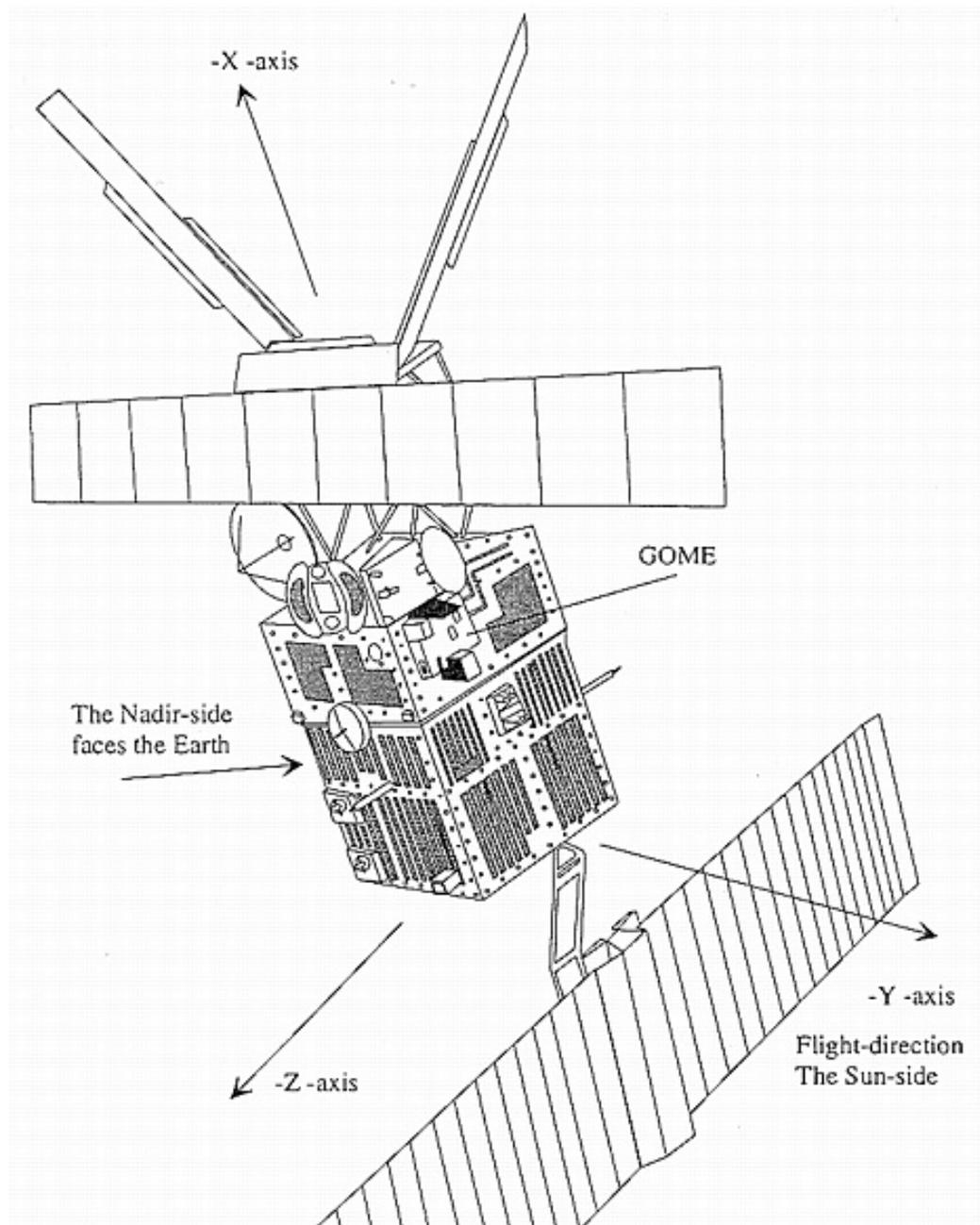


Abbildung 2.1: Der europäische Fernerkundungssatellit ERS-2.

- Das Aktive Mikrowellen Instrument (*Active Microwave Instrument AMI*), bestehend aus
 - einem Radar mit synthetischer Apertur (*Synthetic Aperture Radar SAR*), das hochauflösende Bilder der Erde liefert und der Meereswellenbeobachtung dient,
 - einem Windscatterometer (*Wind Scatterometer*), das Windgeschwindigkeit und -richtung misst.
- Ein Radar Höhenmesser (*Radar Altimeter RA*) zur Messung von Meeres- und Eishöhen.
- Einem Radiometer zur Beobachtung entlang der Flugbahn (*Along-Track Scanning Radiometer ATSR*), bestehend aus
 - einem Infrarot Radiometer (*InfraRed Radiometer IRR*) zur Beobachtung von Meeres- und Wolkenoberflächentemperaturen,
 - einem Mikrowellenempfänger (*MicroWave Sounder MWS*) zur Bestimmung von Wasserdampfsäulen.
- Das *Precise Range and Range-Rate Equipment PRARE* zur exakten Orbitbestimmung und für Anwendungen in der Geodäsie.

ERS-2 fliegt auf einer sonnensynchronen, polaren, annähernd kreisförmigen Bahn mit einem Radius von 7147 km, was einer Höhe über dem Boden von etwa 750 km entspricht. Der Äquator wird auf der Tagseite jeweils um 10.30 Uhr lokaler Zeit überquert. Eine Umkreisung der Erde dauert etwa 100 min, man erhält damit 14 Orbits je Tag. Die Abfolge der Orbits wiederholt sich alle 35 Tage.

2.2 Instrumentenübersicht

GOME ist ein Spektrometer zur Messung des von der Erde reflektierten und zurückgestreuten Sonnenlichtes im ultravioletten und sichtbaren Spektralbereich von 240 bis 790 nm. Das Instrument beobachtet in Nadir-Geometrie, das heißt, es blickt in Richtung Erdoberfläche. GOME ist als Doppelmonochromator konzipiert. Abbildung 2.2 zeigt ein Schema des optischen Aufbaus von GOME. Es besteht aus drei Hauptbaugruppen: Der Kalibrationseinheit, dem eigentlichen Spektrometer und der Optik für die Detektoren zur Polarisationsbestimmung (*Polarisation Measurement Devices PMDs*). Das Licht wird durch den Abtastspiegel (*scan mirror*) in das Instrument geleitet, die Lichtquelle wird durch Drehung dieses Spiegels ausgewählt. Im nominalen Modus ist dies das von der Erde rückgestreute Licht der Sonne, während der Kalibrationszyklen ist die Kalibrationseinheit die Lichtquelle. Unter bestimmten geometrischen Bedingungen kann GOME außerdem den Mond beobachten.

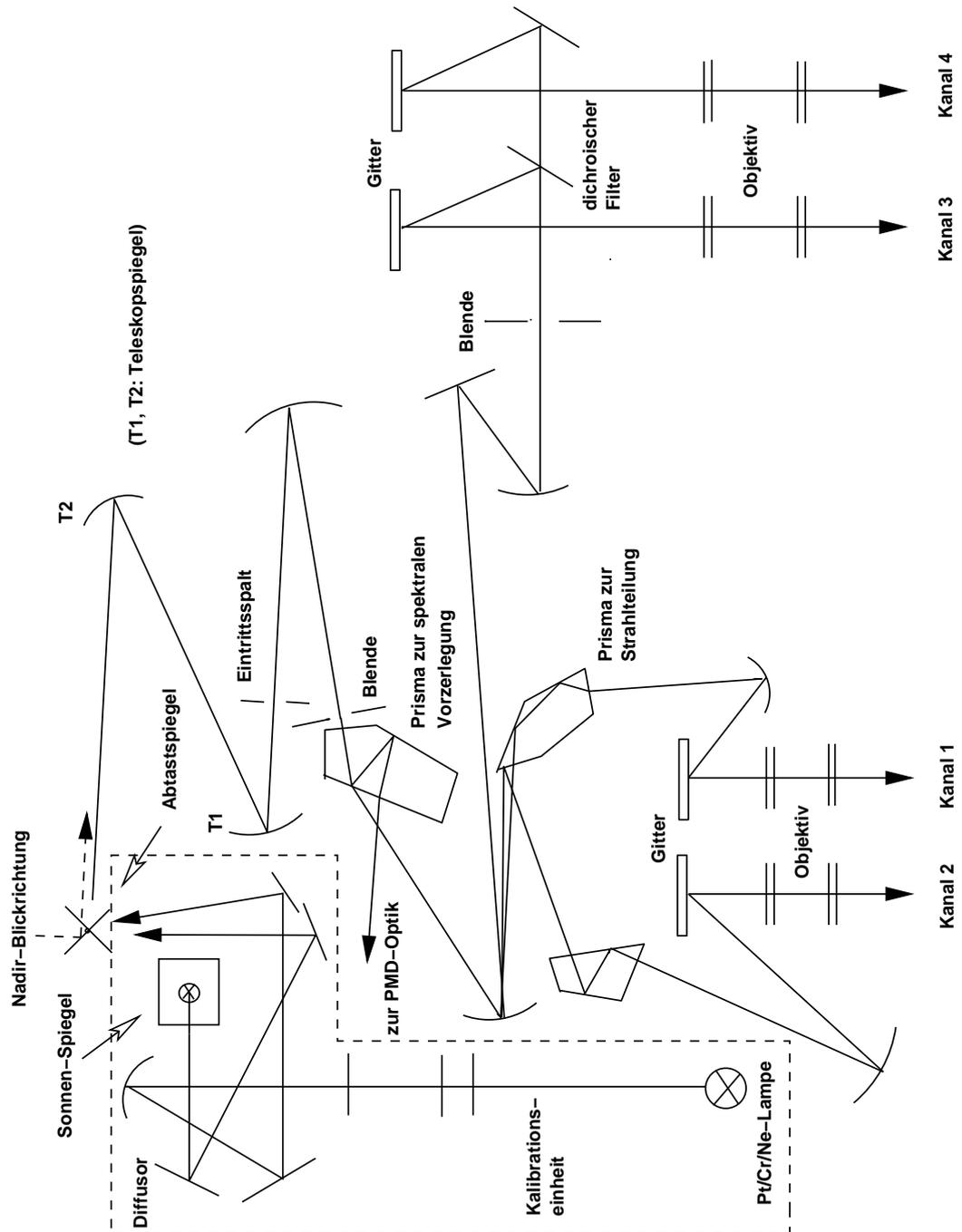


Abbildung 2.2: Schema des optischen Aufbaus von GOME (nach [99].)

2.3 Die Kalibrationseinheit

Die Kalibrationseinheit kennt zwei Lichtquellen: die Sonne und die interne Kalibrationslampe. Letztere ist eine Platin–Chrom–Neon–Gasentladungslampe. Die Spektrallinien dieser Lampe werden für die Wellenlängenkalibration des Gerätes im Orbit benutzt. Insbesondere thermische Effekte wie die wärmebedingte Ausdehnung von Bauteilen führen zu leichten Verschiebungen der spektralen Zuordnung. Durch die sich ändernde Sonneneinstrahlung kommt es während eines Umlaufs zu Temperaturschwankungen von etwa 1 K. Einmal im Monat werden daher diese Zuordnungen neu vermessen, indem für mehrere Umläufe des Satelliten das Licht der Lampe in das Spektrometer geleitet wird.

Die Sonne wird einmal am Tag einige Minuten beobachtet, und zwar zu Beginn eines Orbits, kurz nachdem GOME von der Nachtseite der Erde über dem Nordpol wieder die Tagseite erreicht hat (im Regelfall gegen 11.00 UTC). Dazu wird die Klappe, die den Diffuser und die Kalibrationseinheit während des nominellen Betriebs schützt, geöffnet. Ohne diesen Schutz würde der Diffuser nach einiger Zeit durch den ständigen Beschuss mit ultravioletter Strahlung seine optischen Eigenschaften ändern. Der Sonnenspiegel lenkt dann das Sonnenlicht auf den Diffuser, einer aufgerauten Aluminiumplatte, die die gerichtete Sonnenstrahlung diffus zurückstret. Durch die Verwendung des Diffusers sind keine beweglichen optischen Komponenten zur Beobachtung der Sonne notwendig, obwohl die Position der Sonne relativ zur Bahn des Satelliten im Laufe eines Jahres aufgrund der nicht kreisförmigen Bahn der Erde um die Sonne variiert. Vor den Diffuser ist noch ein Netz mit 20 % Transmission gespannt, um die Intensität zu vermindern und so eine Übersteuerung der Detektoren zu vermeiden.

2.4 Das Spektrometer

Der Abtastspiegel lenkt die ankommende Strahlung auf die Teleskopspiegel 1 und 2, hinter denen der Eintrittsspalt von GOME als Blende montiert ist (siehe Abbildung 2.2).

Zwei Spiegel und ein Prisma zur spektralen Vorzerlegung (*Predisperser Prism*) dienen als erste Monochromatoreinheit. Durch eine Brewsterreflexion an der Innenseite des Prismas wird ein Teil Lichts ausgekoppelt und nach einer Reflexion an der hierfür beschichteten Rückseite des Prismas zur *PMD*-Optik weitergeleitet. Die Reflektion unter dem Brewsterwinkel stellt sicher, dass nur parallel zum Eintrittsspalt des Instruments polarisiertes Licht zu den *PMD*s gelangt.

Der Hauptstrahl wird über den zweiten Spiegel zu den weiteren Monochromatoreinheiten geleitet. Davon gibt es 4 Stück, die den 4 Kanälen von GOME entsprechen. Die spektrale Zerlegung wird in allen Kanälen durch Beugung an holografischen Gittern realisiert, ein Objektiv mit vier Quarz Linsen fokussiert das

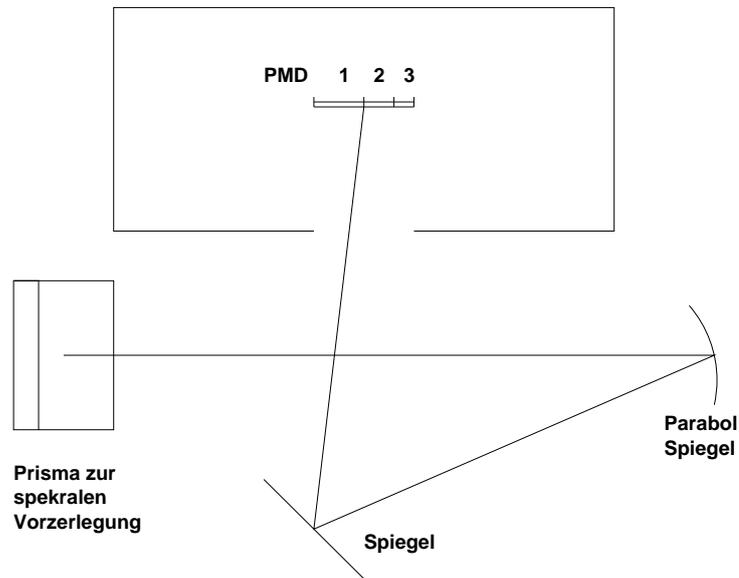


Abbildung 2.3: Schema der PMD-Optik (nach [35])

Licht dann auf die Detektoren. Diese sind Diodenzeilen mit jeweils 1024 Pixeln auf Siliziumdioxidbasis (Reticon RL 1024), die einzelnen Pixel haben eine Breite von $25\ \mu\text{m}$ (in Richtung der spektralen Zerlegung) und eine Höhe von 2.5 mm. Jedes Pixel kann einzeln adressiert und ausgelesen werden; dies wird benutzt, um in Kanal 1 unterschiedliche Integrationszeiten zu realisieren. Es kann immer nur ein Pixel in einer Diodenzeile ausgelesen werden, das „gleichzeitige“ Auslesen einer gesamten Zeile benötigt 93.75 ms, also $91.6\ \mu\text{s}$ je Pixel. Die Diodenzeilen werden durch Peltierelemente auf eine konstante Temperatur von 235 K gekühlt.

Der ultraviolette und kurzwellige sichtbare Anteil des eingehenden Lichtes wird vom Prisma zur Strahlteilung auf die ersten beiden Kanäle geleitet. Der ultraviolette Anteil trifft auf einen antireflektierend beschichteten Teil der Prismenoberfläche und wird daher innerhalb des Prismas zum Gitter von Kanal 1 geleitet. Der kurzwellige sichtbare Anteil (blau) trifft auf einen reflektierend beschichteten Teil der Oberfläche und wird über ein weiteres Prisma zum Gitter von Kanal 2 geleitet. Die Grün- und Rotanteile gehen am Strahlteilerprisma vorbei. Diese werden durch einen dichroischen Filter, der den kurzwelligen Anteil (grün) reflektiert, während der langwellige Anteil (rot) passieren kann, in die Kanäle 3 bzw. 4 geleitet.

	<i>PMD 1</i>	<i>PMD 2</i>	<i>PMD 3</i>
Spektralbereich [nm]	295 – 379 nm	379 – 580 nm	580 – 745 nm
zugehöriger Kanal	2	3	4
Farbe	blau	grün	rot
Breite[mm]	1.550	0.853	0.327

Tabelle 2.1: Eigenschaften der PMDs

2.5 Die PMDs

Die am Prisma zur spektralen Vorzerlegung ausgekoppelte Strahlung wird durch einen Parabolspiegel aus der optischen Achse des Instruments gelenkt und von einem zweiten Spiegel auf Polarisationsmessdetektoren (*Polarisation Measurement Devices PMD*) gelenkt, die in einem eigenen Gehäuse oberhalb der optischen Ebene des Instrumentes sitzen. Ein Schema ist in Abbildung 2.3 zu sehen.

Die *PMDs* sind drei breitbandige Siliziumdioxidfotodioden, deren Spektralbereich die Kanäle 2 bis 4 des Spektrometers abdeckt. Die *PMDs* werden alle 93.5 ms ausgelesen, also 16 mal während der nominellen Integrationszeit einer Diodenzeile. Ihre Eigenschaften sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst. Die *PMDs* werden benötigt, um den Polarisationsgrad der ankommenden Strahlung zu bestimmen und damit die Auswirkungen der Polarisationsempfindlichkeit des Gerätes zu korrigieren (siehe Abschnitt 5.3). Außerdem können sie zur Wolkenerkennung eingesetzt werden, siehe Abbildung 4.2.

2.6 Der Abtastspiegel

Der Abtastspiegel (*scan mirror*) besteht aus Aluminium und ist auf einer Achse montiert, die in Flugrichtung orientiert ist, so dass der Spiegel quer zu dieser geschwenkt werden kann. Die Position des Spiegels bestimmt, welches Licht in den Detektor gelangt. Der Abtastspiegel ist das exponierteste optische Bauteil des Instruments. Er ist während der gesamten Messzeit der ungefilterten Strahlung des Weltraumes ausgesetzt.

Abbildung 2.4 zeigt schematisch die wichtigen Blickrichtungen für den Abtastspiegel. Das Einfallslot des Spiegels ist die Winkelhalbierende zwischen der jeweiligen Blickrichtung und der Richtung des Eingangspaltes. Die Nadirrichtung blickt senkrecht nach unten auf die Erdoberfläche, sie wird mit 0° festgelegt. Der Sonnendiffuser in der Kalibrationseinheit wird in der entgegengesetzten Richtung bei 180° beobachtet. Das Licht der Spektrallampe wird bei etwa 180° eingefangen. Der Eingangsspalt, in den das zu messende Licht reflektiert werden muss,

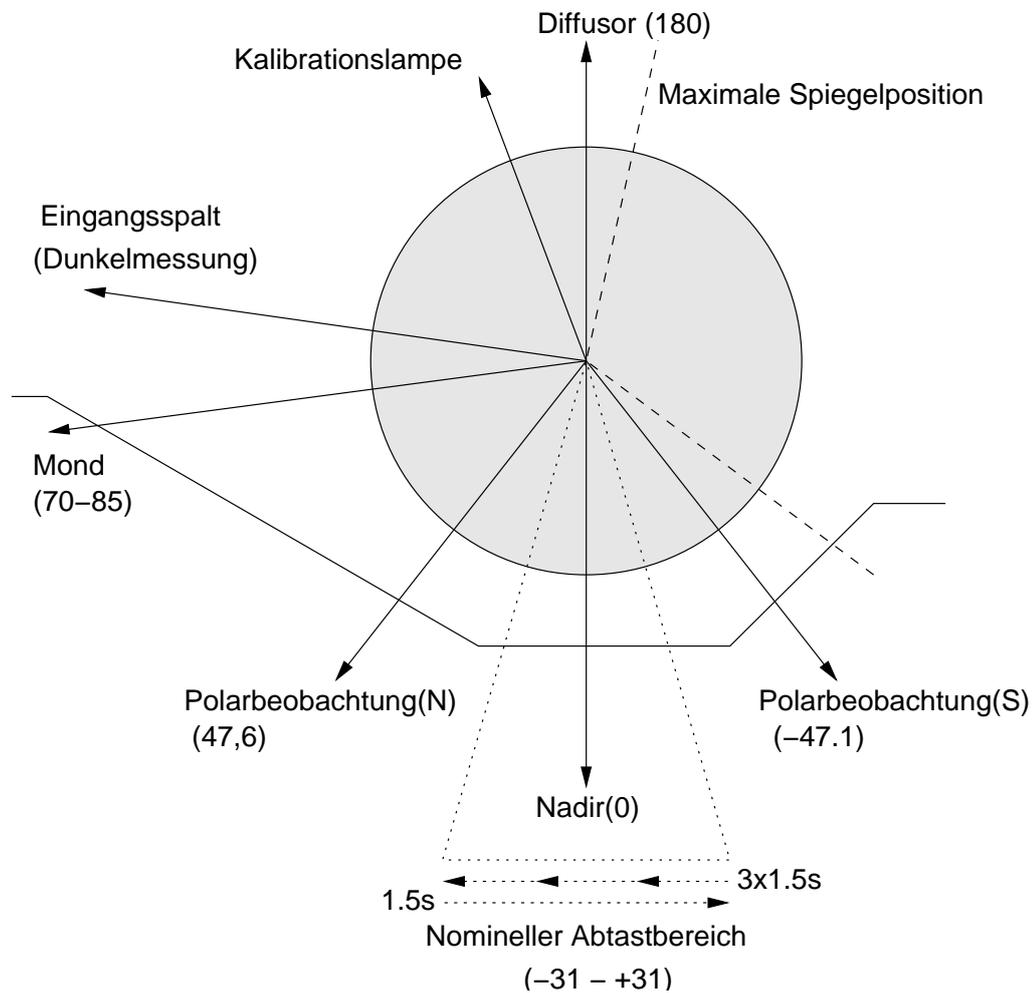


Abbildung 2.4: Schema der Blickrichtungen des Abtastspiegels. Die Zahlen geben den Winkel der Blickrichtung in Grad an, ausgehend von der Nadirrichtung. Das Einfallslot des Spiegels ist die Winkelhalbierende zwischen der Blickrichtung und der Richtung des Eingangspaltes.

liegt bei etwa 100° . Für Dunkelmessungen des Gerätes wird der Abtastspiegel während der Kalibrationszyklen zeitweise auf diese Blickrichtung eingestellt. Unter bestimmten geometrischen Bedingungen kann *GOME* einige Male im Jahr, vor allem in der zweiten Jahreshälfte, den Mond beobachten. Die Blickrichtung liegt dann zwischen 70° und 80° . Während des Überfluges der Polregionen kann ein spezieller Polarbeobachtungsmodus gewählt werden, die Blickrichtungen hierfür sind $47,6^\circ$ im Norden und $-47,1^\circ$ im Süden. Wegen der Inklination des Orbits von etwa 12° überquert *GOME* nie die Pole; um diese zu beobachten, sind die größeren Winkel des Polarbeobachtungsmodus notwendig.

Der Abtastspiegel führt für die nominelle Beobachtung der Erde einen vorge-

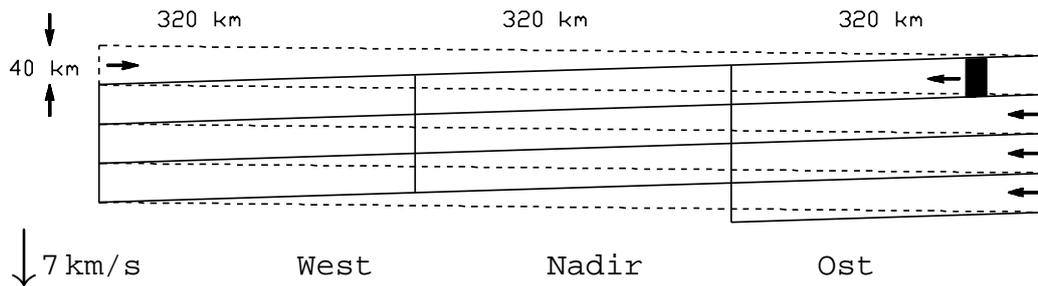


Abbildung 2.5: GOME Grundpixel im nominellen $\pm 30^\circ$ Abtastmodus. Die Pfeile innerhalb der Grundpixel geben die Schwenkrichtung während der Abtastung an. **Durchgezogene Linien:** Ost-, Nadir- und Westpixel. **Unterbrochene Linien:** Rückschwenkpixel (Backscan)

benen Abtastzyklus um die Nadirrichtung aus, der Spiegel bewegt sich dabei 4.5 s ($= 3 \times 1.5$ s) in positiver Winkelrichtung und 1.5 s in negativer Winkelrichtung zurück. Die sich daraus ergebenden Grundpixel werden entsprechend der geografischen Anordnung während des Großteils eines Orbits als Ost-, Nadir-, West- beziehungsweise Rückschwenk-(Backscan-)Pixel bezeichnet. Die einstellbaren Winkel sind $\pm 30,976^\circ$, $\pm 16,99^\circ$, $\pm 12,94^\circ$, $\pm 8,724^\circ$, und $\pm 4,392^\circ$. Der erste Schwenkbereich wird standardmäßig verwendet und führt zu einem beobachteten Bereich auf der Erdoberfläche von 960 km Breite, wie in Abbildung 2.5 skizziert. In diesem Abtastmodus wird jeder Punkt der Erdoberfläche innerhalb von 3 Tagen mindestens einmal abgetastet, natürlich mit Ausnahme der Gebiete, die in der Polarnacht liegen. Seit Juli 1997 wird an 3 Tagen im Monat zusätzlich der $\pm 8,724^\circ$ Schwenkbereich eingesetzt. Außerdem gibt es in größeren Abständen zu Testzwecken Abtastungen ohne Schwenk (*static nadir*). Die Nulllinie des Schwenkbereichs ist im Prinzip beliebig einstellbar, damit lässt sich die Nadirblickrichtung nachjustieren, außerdem werden so Abtastungen im Polarbeobachtungsmodus möglich.

2.7 Die GOME–Grundpixel

Die vier Kanäle von GOME, die den vier Diodenzeilen von GOME entsprechen, decken den Spektralbereich von 240 bis 790 nm ab. Tabelle 2.2 zeigt die spektrale Abdeckung der einzelnen Kanäle. Kanal 1 ist noch einmal in die Bänder 1A und 1B aufgeteilt, die sich durch unterschiedlich Integrationszeiten, das heißt durch unterschiedliche Länge der Zeiträume zwischen dem Auslesen der Diodenzeilen, auszeichnen. Band 1B sowie die Kanäle 2 bis 4 werden 1.5 s integriert. Kanal 1A wird 6 Sekunden integriert, um genügend Signal im ultravioletten Spektralbereich zu erhalten. Bei mehr als 75° Sonnenzenithwinkel wird 6 und 60 s integriert. Die

Band	Spektralbereich [nm]	Integrationszeit [s]	Auflösung		
			spektral [nm]	räumlich [km]x[km]	
1A	238–307 (238–283)	12 (60)	0.2	960x100	
1B	307–314 (283–314)	1.5 (6)		320x40	
2A	<i>nicht benutzt</i>				
2B	311–404				
3	394–611				0.29
4	578–794				0.33

Tabelle 2.2: Übersicht der spektralen Bänder von GOME. **Kursiv:** Spektralbereiche seit Juli 1998. **Fett:** Integrationszeiten bei mehr als 75° Sonnenzenithwinkel.

Grenze zwischen Kanal 1A und 1B lag bis Juni 1998 bei 307 nm, diese wurde danach auf 283 nm verlegt.

In dieser Arbeit wird ausschließlich der ultraviolette Teil des Spektrums von 290 bis 345 nm, der durch Kanal 1 und 2 abgedeckt wird, benutzt. Vor Juli 1998 lag daher ein Teil der benutzten Bereiche in Band 1A; um dieselben Luftmassen auch in den Bändern 1B und 2 zu beobachten, müssen diese über den Integrationszeitraum von Band 1A gemittelt werden. Nach diesem Termin gibt es diese Einschränkung nicht mehr, das ermöglicht die Untersuchungen in Abschnitt 8.4. Allerdings verschlechtert diese Änderung das Signal-zu-Rauschverhältnis zwischen 283 und 290 nm, weil jeder Auslesevorgang selbst einen Teil des Rauschens verursacht.

2.8 Ein GOME Spektrum

Abbildung 2.6 zeigt am Beispiel einer Messung vom 19. Januar 1998 über dem Himalayagebiet die von GOME aufgenommenen Spektren. Dargestellt ist die spektrale Dichte der Strahlungsflußdichte der solaren Strahlung und der von der Erde rückgestreuten Strahlung. Die Strahlungsflußdichte ist der Strahlungsfluß durch eine Fläche (Energie / Zeit / Fläche), als Referenzfläche wird der obere Rand der Atmosphäre (*Top Of Atmosphere TOA*) verwendet. Da die solare Strahlung im allgemeinen nicht senkrecht auf diese Fläche fällt, muß der solare Strahlungsfluß F mit dem Kosinus des Sonnenzenitwinkel $\mu = \cos(\text{SZW})$ multipliziert werden. Die rückgestreute Strahlung wird als Strahldichte I (Energie / Zeit / Fläche / Raumwinkel *radiance*) im GOME-Produkt angegeben, für die spektrale Dichte der Strahlungsflußdichte muß diese Größe mit dem Faktor π normiert werden.

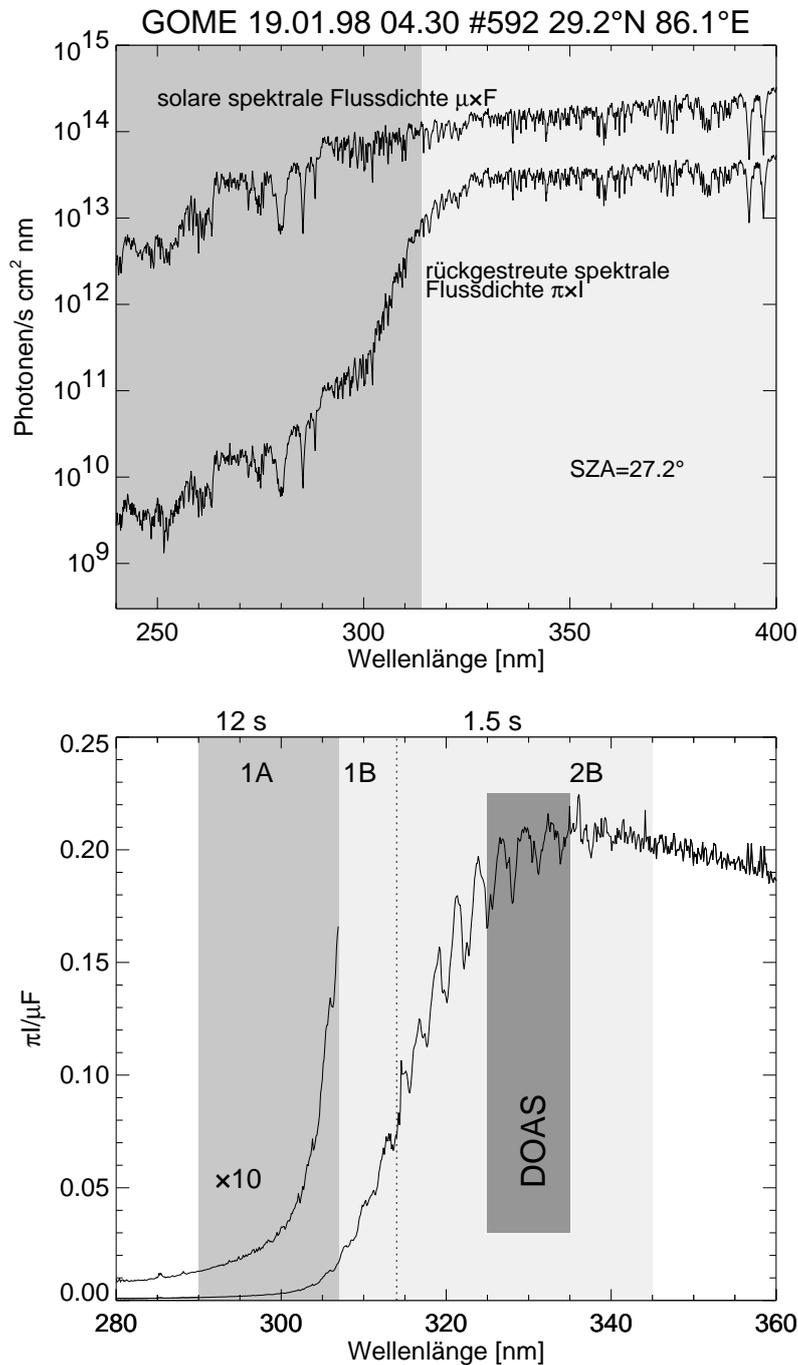


Abbildung 2.6: GOME Spektren vom 19. Januar 1998. μ, π, F und I werden im Text erläutert. **Hellgrau:** Band 1b und 2B (1.5 s Integrationszeit). **Mittelgrau:** Band 1A (12 s Integrationszeit). **Oben:** Spektrale Dichte der Flußdichte der Sonnenstrahlung und der von der Erde zurückgestreuten Strahlung. **Unten:** Sonnennormierte Strahlung. Der grau unterlegte Bereich wird in der Ozonprofilauswertung verwendet. **Dunkelgrau:** Im operationellen DOAS verwendeter Spektralbereich zur Bestimmung der Ozonsäule.

Der Quotient aus den beiden genannten spektralen Dichten der Strahlungsflußdichte gibt die sonnennormierte Strahlung, wie sie in der Ozonprofilauswertung verwendet wird. Diese ist in der unteren Hälfte von Abbildung 2.6 dargestellt. Im Bereich von 315 bis 335 nm ist deutlich die spektrale Signatur der Huggins-Banden von Ozon zu erkennen. Das spektrale Fenster von 325 bis 335 nm wird im operationellen Betrieb zur Bestimmung des Gesamt Ozons von GOME nach der DOAS-Methode verwendet.

Kapitel 3

Inversionstheorie

Im Folgenden wird eine Einführung in die dem Inversionsalgorithmus *FURM* (*Full Retrieval Method*) zugrundeliegende Theorie gegeben. An dieser Stelle werden nur die grundlegenden Fakten wiedergegeben, ausführlichere Darstellungen sind zu finden in [51, 26, 50]. Grundlage ist die Strahlungstransportgleichung, die von dem Strahlungstransportmodell *GOMETRAN* gelöst wird [76, 77]. Dieses dient als Vorwärtsmodell in einem verbesserten Optimal–Estimation Inversionsverfahren, das die Kozlov–Informationsmatrixmethode benutzt.

3.1 Die Strahlungstransportgleichung

Das von der Sonne auf die Erde treffende Licht wird in der Atmosphäre an Gasmolekülen, Aerosol– und Wolkenteilchen sowie der Erdoberfläche gestreut oder absorbiert. Diese Prozesse sind Gegenstand der Strahlungstransporttheorie. Die vektorielle Form der Strahlungstransportgleichung *STG* (*Radiative Transfer Function RTF*) beschreibt alle Eigenschaften des Strahlungsfeldes, das heißt neben der Intensität des Lichts I wird auch der Polarisationszustand betrachtet. Im folgenden wird von einer vereinfachten *STG* ausgegangen, die nur die Intensität berücksichtigt. Weiter wird eine planparallele, das heißt horizontal homogene und die Erdkrümmung vernachlässigende Atmosphäre angenommen. Mit diesen Voraussetzungen lässt sich die *skalare Strahlungstransportgleichung* ableiten:

$$\mu \frac{dI(z, \mu, \phi)}{dz} = -\sigma_e I(z, \mu, \phi) + \frac{\sigma_s(z)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_{-1}^1 d\mu' p(z, \mu, \mu', \phi, \phi') I(z, \mu', \phi') \quad (3.1)$$

Hierbei ist

- I die spektrale Strahldichte (*radiance*) in $\text{W m}^{-2} \text{ nm}^{-1} \text{ sr}^{-1}$,

- μ die in der Strahlungstransporttheorie übliche Variable des Zenitwinkels Θ , wobei gilt $\mu = \cos \Theta$,
- z die Höhe in m,
- ϕ der Azimutwinkel,
- σ_s der Streukoeffizienten in der Einheit m^{-1} ,
- σ_e der Extinktionskoeffizient, der die Summe von σ_s und dem Absorptionskoeffizienten σ_a ist,
- p die auf 4π normierte Streuphasenfunktion.

Für eine unter dem Zenitwinkel Θ einfallende Strahlung ist die infinitesimale Weglänge $ds = dz/\mu$. Die Änderung der Strahlung I aus der Richtung $(\mu(\Theta), \phi)$ in der Höhe z (linke Seite von Gleichung (3.1)) setzt sich aus zwei Teilen zusammen: Der erste Term der rechten Seite beschreibt die Abschwächung der Strahlung durch Streuung und Absorption in der Höhe z , die durch den Extinktionskoeffizienten σ_e beschrieben wird und proportional zum Strahlungsfeld ist. Der zweite Term beschreibt die Streuung aus allen Richtungen (μ', ϕ') in (μ, ϕ) entsprechend der Streueigenschaften der Teilchen, wie sie durch die Streuphasenfunktion p , die die Richtungsverteilung des gestreuten Lichts beschreibt, und dem Streukoeffizienten σ_s angegeben ist. Hier ist die Integration über alle Richtungen notwendig, was zum Doppelintegral über die Winkelvariablen mit dem Normierungsfaktor 4π führt. Gleichung (3.1) ist damit eine skalare Integro-Differentialgleichung.

Am oberen Rand der Atmosphäre, entsprechend der Höhe z_0 , trifft aus der Richtung (μ_0, ϕ_0) die solare Strahlung mit der spektralen Flussdichte (*irradiance*, in $\text{W m}^{-2} \text{nm}^{-1}$) πF auf, so dass hier gilt:

$$I^-(z_0, \mu, \phi) = \pi F \delta(\mu - \mu_0) \delta(\phi - \phi_0) \quad (3.2)$$

Am unteren Rand der Atmosphäre wird das Strahlungsfeld durch die Beschaffenheit der Erdoberfläche bestimmt, für eine Lambertsche Oberfläche mit der Albedo A erhält man

$$I^+(0, \mu, \phi) = \frac{\mu A}{\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^1 d\mu' \mu' I^-(0, \mu', \phi') \quad (3.3)$$

Die Markierungen $^-/^+$ bedeuten, dass jeweils nur der nach unten/oben gerichtete Teil des Strahlungsfeldes gemeint ist. Gleichung (3.1) mit den Randbedingungen Gleichung (3.2) und Gleichung (3.3) sind die zu lösenden Gleichungen der Strahlungstransporttheorie. Diese Lösung ist im Allgemeinen nicht analytisch möglich, stattdessen müssen numerische Methoden eingesetzt werden. Eine Übersicht findet man in [62] und [16].

3.2 Das Strahlungstransportmodell *GOMETRAN*

Für die Auswertung der Spektren von *GOME* wurde am Institut für Umweltphysik ein eigenes Strahlungstransportmodell mit Namen *GOMETRAN* entwickelt [76]. Insbesondere folgende Eigenschaften sind hervorzuheben:

- Der ultraviolette und sichtbare Wellenlängenbereich von 240 nm bis 790 nm wird berücksichtigt.
- Alle relevanten Spurengase sind eingebaut: O₃, NO₂, BrO, ClO, HCHO, O₄, OCIO, SO₂, NO₃, O₂, H₂O.
- Pseudosphärische Näherung.
- Direkte Berechnung der Gewichtsfunktionen.

Die pseudosphärische Näherung bedeutet, dass die direkte Strahlung in voller sphärischer Geometrie inklusive Brechung gerechnet wird, während die Mehrfachstreuung in planparalleler Näherung bestimmt wird. Für die numerische Lösung der Strahlungstransportgleichung 3.1 ist eine Diskretisierung notwendig. In *GOMETRAN* sind folgende Schritte implementiert:

Direkte und Diffuse Strahlung: Das Strahlungsfeld wird in die direkte und die diffuse Strahlung aufgeteilt. Die direkte Strahlung ist die bisher nicht gestreute Strahlung aus Richtung der Sonne. Dieser Anteil wird von *GOMETRAN* in sphärischer Geometrie gerechnet. Die diffuse Strahlung hat einen oder mehrere Streuprozesse hinter sich und kommt daher aus allen Richtungen. Die Aufteilung vermeidet die Unstetigkeitsstelle in Richtung der direkten Strahlung. Der diffuse (mehrfachgestreute) Anteil wird planparallel gerechnet, daher spricht man nur von pseudosphärischer Näherung. Die direkte Strahlung kann sofort berechnet werden, sie wird in der *STG* (3.1) durch den ersten Term der rechten Seite berücksichtigt.

Separation der Azimutabhängigkeit: Die diffuse Strahlung und die Phasenfunktion werden in eine Fourierreihe nach dem relativen Azimutwinkel $\Delta\Phi = \Phi - \Phi_0$ entwickelt, wobei Φ_0 der Azimutwinkel der Sonne ist. Vorausgesetzt wird hier, dass die Phasenfunktion nur vom Streuwinkel abhängt, was für fast alle in der Atmosphäre vorkommenden Teilchen erfüllt ist. Durch Einsetzen der Fourierreihe in die *STG* zerfällt diese in M (die Anzahl der zu berücksichtigenden Komponenten) nicht mehr vom Azimutwinkel abhängige Gleichungssysteme. Für Nadir-Blickrichtung (Zenitwinkel $\Theta = 0$) ist nur die erste Fourierkomponente ungleich Null, man erhält also nur ein Gleichungssystem. Für andere Blickrichtungen werden in der Regel vier Komponenten benötigt.

Methode der finiten Differenzen: Die auf- bzw. abwärtsgerichteten Strahlungsterme werden in eine symmetrische und eine antisymmetrische Summe zusammengefasst, so dass man ein System zweier gekoppelter Differentialgleichungen erhält. Nun wird die Zenitwinkelkoordinate μ diskretisiert und das Integral über μ durch eine Gauß-Quadratur approximiert. Man erhält dann für jede Stützstelle ein System zweier gekoppelter Differentialgleichungen. Schließlich wird die Höhe in eine ungerade Anzahl von Stützstellen diskretisiert und die Ableitung nach der Höhe durch finite Differenzen ersetzt, wobei die symmetrischen Terme auf den geraden und die antisymmetrischen Terme auf den ungeraden Stützstellen auftauchen.

Das so diskretisierte Gleichungssystem lässt sich als Matrixgleichung schreiben:

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{R} \quad (3.4)$$

C und R setzen sich aus bekannten Größen zusammen, L ist der gesuchte Lösungsvektor. Für die Bestimmung von L ist also eine Matrixinversion notwendig, die in *GOMETRAN* mit Hilfe einer LU-Zerlegung [69] durchgeführt wird. Bei N Höhen- und L Winkelstützstellen hat C eine Dimension von $[(N+2)L] \times [(N+2)L]$. Typische Werte sind $N=71$ und $L=10$, also 730×730 . An diese Stelle wird die meiste Rechenzeit benötigt.

Die Gewichtsfunktionen, das heißt die partiellen Ableitungen der Strahlung nach den atmosphärischen Parametern, werden nicht, wie sonst üblich, durch aufwendige Störungsrechnungen bestimmt, sondern direkt und daher schnell durch einen quasi-analytischen Ansatz bestimmt [77]. Die Berechnung von Gewichtsfunktionen ist Voraussetzung für jedes Inversionsverfahren. Typische Gewichtsfunktionen der in dieser Arbeit zu berücksichtigenden Parameter sind in Abschnitt 4.3 dargestellt.

3.3 Optimal Estimation

In der Fernerkundung der Atmosphäre werden die interessierenden Messgrößen nicht direkt bestimmt. Ozonprofile oder andere atmosphärische Zustandsparameter zum Beispiel werden aus den Spektren des ultravioletten und sichtbaren Lichts bestimmt, die von *GOME* gemessen wurden. Ist der Zustand der Atmosphäre bekannt, erlaubt ein Strahlungstransportmodell wie *GOMETRAN*, ein sogenanntes Vorwärtsmodell, eindeutig das am Satelliten zu erwartende Spektrum zu berechnen. Die umgekehrte Aufgabenstellung, also in diesem Fall die Bestimmung des Atmosphärenzustands aus dem gemessenen Spektrum, ist Gegenstand der Inversionstheorie.

Das in dieser Arbeit verwendete Verfahren ist ein weiterentwickelter *Optimal Estimation* Ansatz, die *K-Informationmatrixmethode*. In diesem Verfahren wird

neben den eigentlichen Messwerten, hier das gemessene Spektrum, bereits vor der Messung bekanntes Wissen verwendet, die sogenannte *a-priori* Information. Die *a-priori* Information gibt Auskunft über die zu erwartenden Messwerte und den Bereich, in dem diese variieren können. Im hier verwendeten Verfahren wird eine Ozonklimatologie verwendet, die aus langjährigen Messreihen zusammengestellt wurde und Information über die mittleren Ozonprofile, abhängig von Jahreszeit und Breitengrad, enthält. Optimal Estimation kombiniert die Information aus beiden Quellen in statistisch optimaler Weise. Enthält die Messung viel Information über einen Parameter, wird dieser überwiegend aus der Messung bestimmt, ist nur wenig oder gar keine Information vorhanden, wird das Resultat vor allem durch die Klimatologie bestimmt.

Das von *GOME* aufgenommene Spektrum kann als Messvektor \mathbf{y} mit n Elementen entsprechend n Spektralpunkten betrachtet werden. Der Zustandsvektor \mathbf{x} enthält alle m Parameter, die bestimmt werden sollen:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Diese beiden Größen sind über das Vorwärtsmodell $F(x, b)$ miteinander verknüpft:

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) + \varepsilon \quad (3.6)$$

b umfasst zusätzliche Modellparameter, die als exakt bekannt vorausgesetzt und nicht aus der Messung gefolgert werden, in unserem Fall zum Beispiel die Absorptionsquerschnitte von Spurengasen. Im Folgenden wird dieser Parameter der Einfachheit halber nicht mehr notiert. ε beschreibt den unvermeidlichen Messfehler. Das Vorwärtsmodell selbst beschreibt die Vorgänge im Allgemeinen nicht exakt, dieser Vorwärtsmodellfehler wird aber bei der folgenden Betrachtung vernachlässigt. Eine vollständige Fehleranalyse findet sich in [72].

Nehmen wir an, das Vorwärtsmodell sei linear in x . Dann kann man \mathbf{F} durch eine Matrix \mathbf{K} beschreiben, die sogenannte *Gewichtsfunktionenmatrix*, die die partiellen Ableitungen nach den Elementen des Zustandsvektors enthält. Unter Vernachlässigung des Messfehlers ε wird aus Gleichung (3.6):

$$\mathbf{y} = \mathbf{K}\mathbf{x} \quad \text{mit} \quad K_{ij} = \frac{\partial F_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \quad (3.7)$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem mit m Unbekannten und n Gleichungen. Die Anzahl r linear unabhängiger Gleichungen heißt der *Rang* der Matrix \mathbf{K} . Im einfachsten Fall ist $r = n = m$, das Inversionsproblem ist wohlbestimmt und kann einfach durch Invertierung der in diesem Fall regulären Matrix K gelöst werden:

$$\mathbf{x} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{y} \quad (3.8)$$

Dies ist in physikalischen Problemstellungen in der Regel nicht der Fall. Ist $r < n$, ist das Gleichungssystem unterbestimmt. Die Matrix K ist dann singulär, das heißt, die Inverse K^{-1} existiert nicht. Für die Problemstellung bedeutet dies, dass es mehr als einen Zustand \mathbf{y} gibt, der mit der Messung \mathbf{x} in Einklang zu bringen ist. Ist $m < n = r$, ist das Gleichungssystem überbestimmt, es kann also gar keine Lösung geben, die mit allen Messungen exakt übereinstimmt. Ist $m > n > r$, sollte man von einem gemischtbestimmten Problem sprechen, da Teile des Lösungsvektors überbestimmt, andere jedoch unterbestimmt sind. Dies ist bei der Bestimmung von GOME-Ozonprofilen der Fall, da mehrere hundert Wellenlängen (m) aus der Messung eingehen, etwa 80 Parameter (n) bestimmt werden, jedoch nur etwa 10 (r) davon unabhängig sind.

Außer acht gelassen wurde bisher der Messfehler ε . Dieser kann durch die Messfehlerkovarianzmatrix \mathbf{S}_ε beschrieben werden. Sind, wie es die Regel ist, die Messfehler voneinander unabhängig, ist \mathbf{S}_ε eine Diagonalmatrix, deren Elemente die Varianz der einzelnen Messwerte enthalten.

A-priori Wissen über das zu erwartende Resultat der Messung kann in die Bestimmung einer Lösung einfließen. Vor der Messung ist das wahrscheinlichste Resultat der a-priori Zustand x_a . In welchem Ausmaß der tatsächliche Zustand der Atmosphäre von diesem abweichen kann, wird durch die a-priori Kovarianzmatrix \mathbf{S}_a beschrieben. Diese ist im Allgemeinen keine Diagonalmatrix, da die einzelnen Elemente des Zustandsvektor nicht unabhängig sind. Im hier betrachteten Fall ist eine gewisse Glattheit der Ozonprofile zu erwarten, dies wird durch Kovarianzen auf den Nebendiagonalen ausgedrückt.

Die Lösung des Inversionsproblems soll im Rahmen der Fehlerbreite möglichst gut mit der Messung und dem a-priori Wissen übereinstimmen. Dazu muss folgender Ausdruck minimiert werden [50, 71]:

$$(\mathbf{K}\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} (\mathbf{K}\mathbf{x} - \mathbf{y}) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \stackrel{!}{=} \min \quad . \quad (3.9)$$

Die Lösung dieser Aufgabe ist

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_a + (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x}_a) \quad . \quad (3.10)$$

Diese Gleichung wird als *n-Form* der *Optimal Estimation* Lösung bezeichnet, weil die $(n \times n)$ Matrix $\mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1}$ invertiert werden muss. Die Kovarianzmatrix \mathbf{S}_x der Lösung ist dann

$$\mathbf{S}_x = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \quad (3.11)$$

3.4 Kozlov Informationsmatrix Methode

Wie bereits weiter oben erwähnt, ist im Falle der Ozonprofilauswertung die Zahl der unabhängigen Zustandsgrößen und damit der Rang der Matrix \mathbf{K} sehr viel

geringer als die Zahl der Elemente des Zustandsvektors. Aus numerischer Sicht ist es daher wünschenswert, die Größe des Zustandsvektors zu reduzieren. Hierzu wurde die *Kozlov Informationsmatrix Methode* [57] eingeführt [51]. Die Differenz zwischen dem a-priori und dem gesuchten Zustand wird in eine Linearkombination von Eigenvektoren Ψ_i der Informationsmatrix \mathbf{P} entwickelt:

$$\mathbf{x} - \mathbf{x}_a = \sum_i \beta_i \Psi_i \quad . \quad (3.12)$$

Die Informationsmatrix \mathbf{P} ist durch

$$\mathbf{P} = \mathbf{S}_a \mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \mathbf{K} \quad (3.13)$$

definiert. Die Informationsmatrix \mathbf{P} ist eng verknüpft mit dem Informationsgehalt der Messung. Dieser kann definiert werden als die Abnahme der Entropie in der möglichen Gesamtheit der atmosphärischen Zustände nach der Messung gegenüber derjenigen Gesamtheit der Zustände, die nach dem a-priori Wissen möglich sind [81]. Die Eigenvektorgleichung mit den Eigenwerten Λ_i ist

$$\mathbf{P} \Psi_i = \Lambda_i \Psi_i \quad . \quad (3.14)$$

In [71] wird gezeigt, dass nur Eigenvektoren mit einem Eigenwert größer als eins signifikante Informationen über den Zustandsvektor enthalten. Daher müssen nur diese Vektoren in der Entwicklung (3.12) berücksichtigt werden. Die Entwicklungskoeffizienten lassen sich durch Einsetzen von Gleichung (3.14) und Gleichung (3.12) in Gleichung (3.11) bestimmen [51]:

$$\beta_i = \frac{\Lambda_i}{N_i} \Psi_i^T \mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{K} \mathbf{x}_a) \quad . \quad (3.15)$$

Die Eigenvektoren Ψ_i , wie in Gleichung (3.12) definiert, bilden eine Basis des Zustandsraumes. Durch die Beschränkung auf die Eigenvektoren mit Informationsgehalt wird eine Basis des tatsächlich durch die Messung erreichbaren effektiven Zustandsraumes definiert. Dessen Dimension ist in der Regel deutlich kleiner, daher müssen nur wenige Eigenvektoren berechnet werden. Das Verfahren ist daher numerisch recht effizient und zugleich stabil.

Die Gewichtsfunktionen, wie sie in Gleichung (3.7) definiert sind, geben die Änderungen in der Messung bei der Variation eines Parameters des Zustandsraumes wieder, also die Empfindlichkeit der Messung gegenüber dem jeweiligen Parameter. Es stellt sich dann die Frage, wie sich die Änderung eines Parameters des „wahren“ Zustandes auf das Ergebnis der Inversion auswirkt. Auskunft darüber gibt die Matrix der Glättungsfunktionen (*averaging kernel matrix*) \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \mathbf{K} \quad . \quad (3.16)$$

Mit dieser Definition lässt sich Gleichung (3.10) unter Verwendung von Gleichung (3.8) schreiben als

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_a + \mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a). \quad (3.17)$$

Das Ergebnis der Inversion für einen Parameter ist also die Summe des entsprechenden a-priori Parameters und der Abweichung des tatsächlichen Profils vom a-priori Profil geglättet mit der zugehörigen Zeile der Matrix der Glättungsfunktionen. In einem idealen Beobachtungssystem ist \mathbf{A} eine Einheitsmatrix, Gleichung (3.17) vereinfacht sich dann zu $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_a + \mathbf{1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) = \mathbf{x}$. In der Realität der Ozonprofilauswertung sind die Glättungsfunktionen allerdings von endlicher Breite, mehrere Höhenschichten des wahren Profils tragen zum Ergebnis der Auswertung in einer Höhenschicht bei. Die Glättungsfunktionen sind daher geeignet, Aussagen über die vertikale Auflösung des Auswerteverfahrens zu machen.

3.5 Nichtlineares Optimal Estimation

Die bisherige Ableitung ging von einem linearen Problem aus. In der Realität ist dies in der Regel nicht der Fall. Man spricht von einem *moderat nichtlinearen* Problem, wenn das Inversionsproblem innerhalb der Fehlergrenzen linearisiert werden kann. Insgesamt ist allerdings ein iteratives Verfahren notwendig. Bei Verwendung des Newton Iterationsverfahrens erhält man als Lösung des i -ten Iterationsschrittes:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_a + (\mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_\epsilon^{-1} \mathbf{K}_i)^{-1} \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_\epsilon^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_1 + \mathbf{K}_i(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)) \quad . \quad (3.18)$$

Da die Lösung innerhalb der Fehlergrenzen linear ist, hat die Lösungskovarianzmatrix dieselbe Form wie Gleichung (3.11):

$$\mathbf{S}_x = (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_\epsilon^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \quad . \quad (3.19)$$

Zur Ableitung der K-Informationsmatrix-Methode muss die Informationsmatrix die i -ten Iteration berechnet werden:

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{S}_a \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_\epsilon^{-1} \mathbf{K}_i \quad . \quad (3.20)$$

Die Eigenvektoren dieser Matrix sind dann $\Lambda_{i,k}$ mit den Eigenwerten $\lambda_{i,k}$. Für die Entwicklungskoeffizienten findet man dann

$$\beta_{i,k} = \frac{\Lambda_i}{N_i} \Psi_i^T \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_\epsilon^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{K}_i \mathbf{x}_a) \quad . \quad (3.21)$$

Diese Gleichungen sind die Basis des Inversionsalgorithmus *FURM* (*FULL Retrieval Method*) [50, 51]. Im folgenden Kapitel wird das konkrete Programm *FURM* erläutert, wie es in dieser Arbeit verwendet wird.

Kapitel 4

Programmbeschreibung

Im Folgenden wird das Programm *FURM* beschrieben, insbesondere im Hinblick auf die notwendigen Eingabegrößen und die zu bestimmenden Auswerteparameter. Eine detaillierte Beschreibung des Programms ist in [50] zu finden.

4.1 Die Eingabegrößen

Grundlage der Ozonprofilauswertung sind spektral und radiometrisch kalibrierte *GOME*-Spektren der Erdradianz I^{rad} und der Sonnenirradianz I^{irrad} mit den zugehörigen Messfehlern. Als Messgröße für die Auswertung wird der natürliche Logarithmus der sonnennormierten Strahlung verwendet:

$$\mathbf{y} = \ln \frac{\pi I^{rad}}{I^{irrad}} \quad (4.1)$$

Die Diagonalelemente der zugehörigen Messkovarianzmatrix \mathbf{S}_e berechnen sich aus den Quadraten der relativen Fehler der sonnennormierten Strahlung, die sich nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz aus den Fehlern der Spektren berechnen lassen. Da die Messungen der einzelnen Spektralpunkte als unabhängig gelten können, sind die Nichtdiagonalelemente von \mathbf{S}_e Null.

Die a-priori Informationen über die Ozonprofile werden einer Klimatologie entnommen, zur Verfügung stehen die Ozonklimatologien des Max-Planck-Instituts für Chemie in Mainz (*MPI*) und des königlichen meteorologischen Instituts der Niederlande (*Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut KNMI*). Ersteres beruht auf den Berechnungen eines zweidimensionalen chemischen und dynamischen Modells *MPI Mainz* [14]. Die *KNMI*-Ozonklimatologie von Fortuin und Kelder [37, 38] beruht auf Messungen von Ozonsonden und von den Satelliteninstrumenten *SBUV/SBUV 2* (*Solar Backscattered Ultra Violet (2)*), die im Zeitraum von 1980 bis 1991 gemacht wurden. Sie enthält Ozonvolumenmischungsverhältnisse für 19 Druckniveaus von 1000 bis 0.3 hPa, jeweils für 17

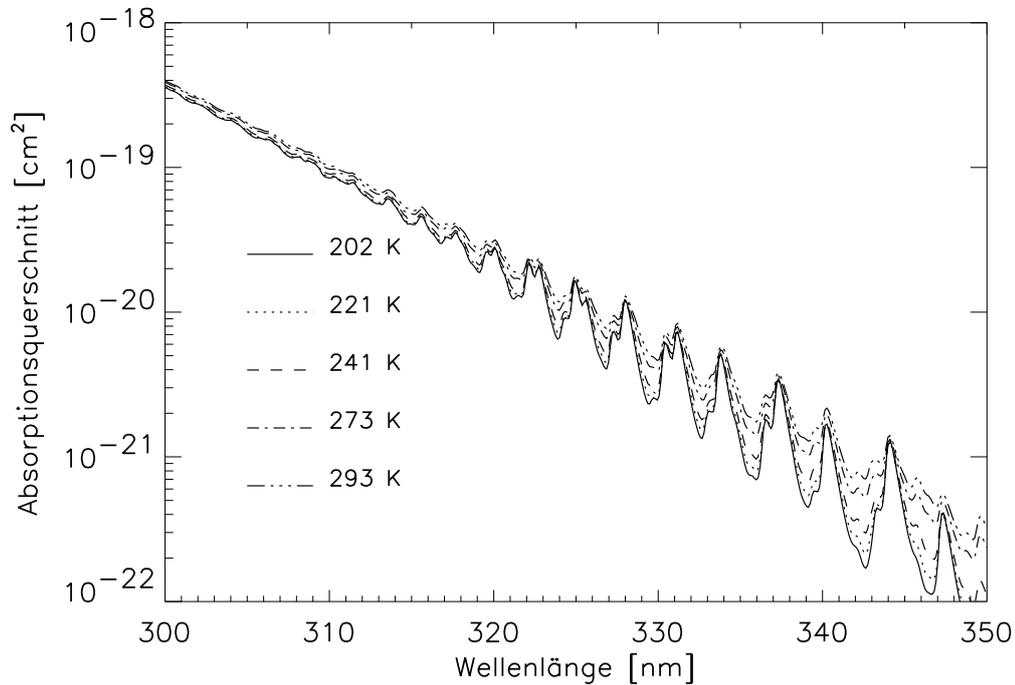


Abbildung 4.1: Die Absorptionsquerschnitte von Ozon in den Huggins-Banden als Funktion der Temperatur [21].

zonale Bänder von 80°S bis 80°N und für jeden Monat. Da diese Klimatologie auf tatsächlichen Messungen beruht, wird diese standardmäßig in *FURM* verwendet.

Die a-priori Kovarianzen werden ebenfalls benötigt. In der *MPI*-Klimatologie sind solche Zahlen nicht vorhanden. In diesem Fall wird eine Standardabweichung des Profils von 30% angenommen, die sich bisher als zufriedenstellend erwiesen hat [50]. Zur *KNMI*-Ozonklimatologie gibt es auch die Varianzen, die sich aus den Messungen ergeben haben. Zuverlässige Werte enthält sie nur für mittlere Breiten, da in den Tropen und Subtropen sowie in den polaren Breiten nur relativ wenig Ozonsondenmessungen in die Klimatologie eingegangen sind. Die Varianzen sind die Diagonalelemente der Kovarianzmatrix. Die Kovarianzen, das heißt die Nichtdiagonalelemente von \mathbf{S}_a werden durch

$$\mathbf{S}_{a,kl} = \sigma_{a,k}\sigma_{a,l}e^{(-|z_k-z_l|/r_c)} \quad (4.2)$$

festgelegt. Hier ist z_k das k -te Höhenniveau, $\sigma_{a,k}^2$ die Varianz auf diesem Niveau und r_c die sogenannte Korrelationslänge. Hierfür wird in dieser Arbeit 5 km angenommen. Der Einfluss der Varianzen und Kovarianzen auf die Profilauswertung wird in Abschnitt 9.2 näher untersucht.

Wichtigste Eingangsgröße des Strahlungstransportmodells sind die Absorptionsquerschnitte. In dieser Arbeit verwendet *GOMETRAN* mit dem Instrument selbst gemessene Querschnitte für NO_2 und O_3 [20, 21]. Insbesondere wird auch die Temperaturabhängigkeit der Absorption von O_3 berücksichtigt, die über die Kenntnis des Temperaturprofils wichtige Höheninformationen für *FURM* liefert. Die Absorptionsquerschnitte von Ozon in den Huggins-Banden sind in Abbildung 4.1 dargestellt.

Druck- und Temperaturprofile der Atmosphäre können ebenfalls der *MPI*-Klimatologie entnommen werden. Besser ist es jedoch, auf aktuellen Messungen basierende Werte zu verwenden. Assimilierte meteorologische Daten, die auf den Messungen von Radiosonden und Satelliten beruhen, stehen aus mehreren Quellen zur Verfügung. Verwendet werden können Daten vom *NCEP* (*National Center for Environmental Protection*) in den USA, vom *UKMO* (*United Kingdom Meteorological Office*), und vom *ECMWF* (*European Centre for Medium-Range Weather Forecasts*). In dieser Arbeit werden ausschließlich die Daten von *UKMO* verwendet. Diese haben globale Abdeckung und reichen bis etwa 55 km Höhe. Zudem sind sie einfach zu handhaben, da es einen Zugang mittels *FTP* gibt [102]. Die *UKMO*-Daten stehen seit 1991 zur Verfügung. Die horizontale Auflösung beträgt $2.5^\circ \times 3.75^\circ$ (Breite \times Länge), vertikal werden 23 Niveaus von 1000 bis 0.316 hPa angegeben [88]. Zur Verfügung steht ein meteorologisches Feld pro Tag, das jeweils für 12 Uhr *UTC* repräsentativ ist.

Aerosole sind feste oder flüssige Schwebeteilchen in der Luft mit Durchmessern von 0.01 bis $10\mu\text{m}$. Im betrachteten Spektralbereich haben sie vor allem durch Streuung einen Einfluss, während Absorption nur eine untergeordnete Rolle spielt. *GOMETRAN* verwendet das Aerosolmodell *LOWTRAN-7*, um die Aerosolstreu- und Absorptionskoeffizienten zu berechnen [54].

Als Rayleigh-Streuung bezeichnet man die Streuung von elektromagnetischer Strahlung an Teilchen, die sehr viel kleiner sind als die Wellenlänge des Lichtes. Im hier betrachteten Spektralbereich ist dies die Streuung an den Stickstoff- und Sauerstoffmolekülen der Luft. Der *Rayleigh-Streuquerschnitt* C_R wird berechnet mit [41]:

$$C_R = \frac{32\pi^3(m(\lambda) - 1)^2}{3N^2\lambda^4} F_K. \quad (4.3)$$

wobei

$$\begin{aligned} \lambda & : \text{Wellenlänge} \\ N & : \text{Teilchenzahldichte} \\ m(\lambda) & : \text{Brechungsindex von Luft} \\ F_K = \frac{6 + 3\delta}{6 - 7\delta} & : \text{King-Korrekturfaktor} \\ \delta & : \text{Depolarisationsfaktor} \end{aligned}$$

Der Depolarisationsfaktor ist ein Maß für die Anisotropie des Streuers, für Luft werden Werte von 0.0279 und 0.0350 angegeben [105]. Hier werden die wellenlängenabhängigen Werte von Bates verwendet [4]. Der *Rayleigh–Streukoeffizient* ist dann C_R multipliziert mit der Luftdichte. Die auf 4π normierte *Rayleigh–Phasenfunktion*, die die Abhängigkeit der Streuung vom Streuwinkel Θ beschreibt, lautet:

$$p_R(\Theta) = \frac{3}{2} \cdot \frac{(1 + \delta) + (1 - \delta) \cos^2 \Theta}{2 + \delta}. \quad (4.4)$$

Der *Ring–Effekt* wird durch inelastische Streuung an Luftmolekülen, im wesentlichen die *Raman–Streuung*, verursacht. „Inelastisch“ bedeutet, dass das Lichtquant nach der Streuung eine andere Energie hat als vorher. Im Mittel werden die *Fraunhoferlinien* des solaren Spektrums durch diese Prozess „aufgefüllt“, weil mehr Quanten durch Streuung das der Fraunhoferlinie entsprechende Energieniveau erhalten als verlieren. Dieser Effekt wurde erstmals in [42] und [82] beschrieben. Am Institut für Umweltphysik wurde eine Version von *GOMETRAN* entwickelt, die den Ring–Effekt berücksichtigt (*GOMETRAN–RRS*) [97]. Die dafür nötigen Berechnungen sind jedoch extrem rechenaufwendig und können daher für Anwendungen wie die in dieser Arbeit nicht direkt verwendet werden. Stattdessen wurde eine Datenbank erstellt, die für verschiedene Sonnenzenitwinkel und Atmosphärenszenarien sogenannte *Ring–Spektren* enthält, die dann bei der Auswertung als effektiver Absorber berücksichtigt werden können.

Die Albedo der Erdoberfläche wird aus einer Datenbank entnommen [44], wobei eine Lambertsche Streuung angesetzt wird. Die Wellenlängenabhängigkeit der Albedo wird dabei berücksichtigt.

Troposphärische Wasserwolken können in *GOMETRAN* durch zwei Parametrisierungen beschrieben werden [58, 60]: *Wolken als Lagen* werden als feine planparallele Schichten in die Atmosphäre eingefügt, wobei über den Wolkentyp die Größenverteilung der Tröpfchen festgelegt wird. Wegen der hohen optischen Dicke von Wolken sind sehr viele Schichten notwendig, was zu einem hohen Rechenaufwand führt. *Wolken als reflektierende Oberfläche* ignorieren das Strahlungsfeld inner- und unterhalb der Wolken. Stattdessen werden die Wolken als bidirektional reflektierende Oberfläche behandelt, wobei verschiedene Wolkentypen unterschiedliche Reflektionsmuster haben. Untersuchungen mit modellierten Spektren haben gezeigt, dass die Ozonprofilauswertung von einer direkten Behandlung der Wolken nur profitiert, wenn Höhe, Dicke und Typ der Wolke bekannt sind [50]. Da aus den *GOME–Spektren* diese Informationen bisher nicht vollständig gewonnen werden können, ist bei realen Daten die direkte Simulation von Wolken nicht sinnvoll. Insbesondere ist auch das Problem von gemischt oder teilweise bewölkten Grundszenerien in *GOMETRAN* nicht berücksichtigt.

Der Wolkenbedeckungsgrad, also der Anteil des Grundpixels, der von Wolken bedeckt ist, kann jedoch aus den *GOME–Messungen* bestimmt werden. In dieser Arbeit werden dazu die Messungen der *PMDs* verwendet. Werden deren Daten

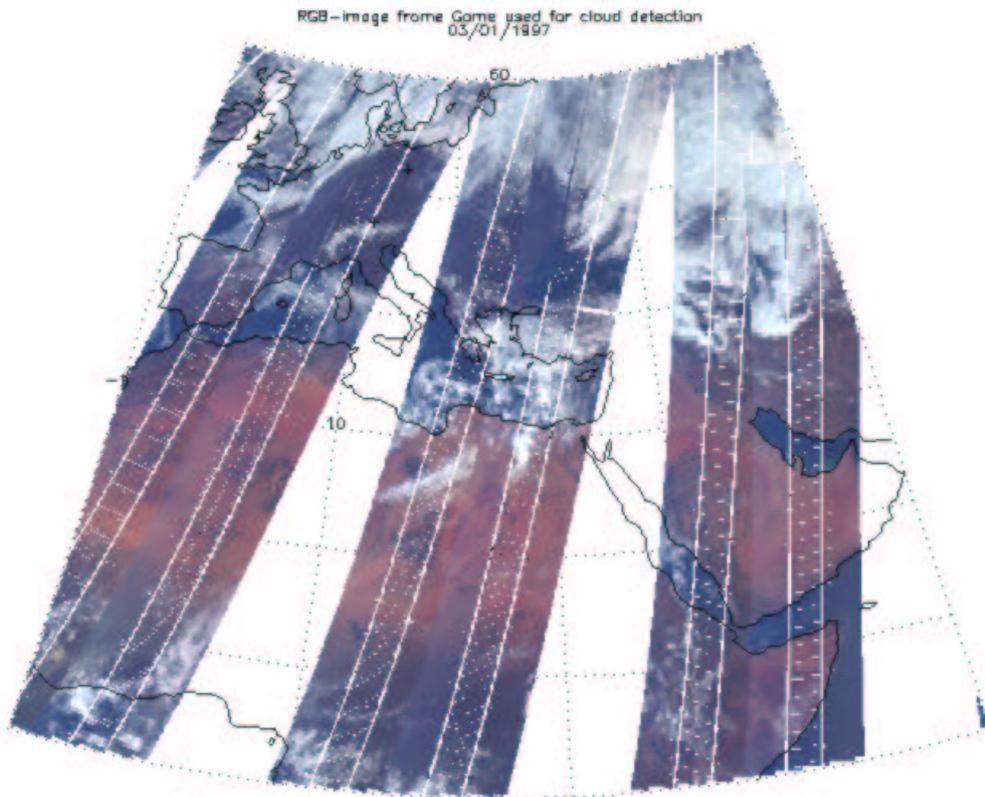


Abbildung 4.2: PMD Daten als Farbbild dargestellt. Der Ausschnitt zeigt Nordafrika und das Mittelmeer. Es wurden die Daten von zwei Tagen nebeneinander geplottet. Die Wolken im oberen Teil des Bildes sind gut zu erkennen.

als Farbbild interpretiert (vergleiche Tabelle 2.1), erkennt man visuell auf den ersten Blick, wo Wolken sind. Ein Beispiel ist in Abbildung 4.2 zu sehen. Am IUP wurde ein Programm entwickelt, das diese optische Erkennung umsetzt [59]. Dazu wird eine dynamische Datenbank mit Schwellwerten generiert. Über einen größeren Zeitraum wird das Minimum der Helligkeit (wolkenfrei) und das Maximum der Helligkeit (vollständig mit Wolken bedeckt) für jeden Ort bestimmt, anschließend kann dann durch lineare Interpolation zwischen diesen Werten die Wolkenbedeckung bestimmt werden. Zusätzlich wird die Information in der Farbverteilung genutzt, über Land ist beispielsweise der Rotanteil immer höher. Der so bestimmte Wolkenbedeckungsgrad f wird dann benutzt, um die effektive Albedo A_{eff} aus der Albedo der Erdoberfläche A_{erde} und der Albedo von Wolken A_{wolke} zu bestimmen:

$$A_{eff} = (f - 1)A_{erde} + fA_{wolke} . \quad (4.5)$$

Die Albeden A_{erde} der Erdoberfläche an der aktuellen Position sowie die Albedo der Wolken werden der bereits erwähnten Datenbank [44] entnommen.

4.2 Die Auswerteparameter

Primäres Ziel der Auswertung ist die Bestimmung der Ozonvertikalverteilung. Dies ist prinzipiell eine kontinuierliche Funktion der Höhe, die für ein numerisches Verfahren geeignet diskretisiert werden muss. Es bietet sich an, die Diskretisierung des Vorwärtsmodells zu verwenden. *GOMETRAN* berechnet die Strahlung auf einem 1 km Gitter von 0 bis 70 km. Bei erhöhtem Niveau der Erdoberfläche (entnommen aus einer Datenbank [44]) werden die untersten Schichten geeignet gestaucht. Allerdings wird nicht das Ozonprofil selbst als Auswerteparameter verwendet, da diese Werte mehrere Größenordnungen umfassen, was aus numerischer Sicht ungünstig ist. Stattdessen wurde die relative Abweichung des Ozonprofils vom a-priori-Profil gewählt. In den Gleichungen 3.18 und 3.21 ist daher jeweils

$$\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a =: (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a) / \mathbf{x}_a \quad (4.6)$$

zu ersetzen. Selbstverständlich ist dann auch die a-priori Kovarianzmatrix \mathbf{S}_a in relativen Einheiten auszudrücken.

Im ultravioletten und sichtbaren Spektralbereich sind neben dem Ozonprofil noch weitere Parameter der Atmosphäre und der Erdoberfläche wichtig, die die Strahlung beeinflussen. Im einzelnen sind das

- die Oberflächenalbedo,
- das Aerosol-Teilchendichteprofil,
- das NO₂-Teilchendichteprofil,
- das Druckprofil,
- das Temperaturprofil.

Für diese Größen wird jeweils ein Parameter mitgefittet. Bei den ersten vier Größen sind dies Faktoren, die den Wert der Oberflächenalbedo oder das jeweilige Profil als Ganzes skalieren. Das Temperaturprofil wird durch die Verschiebung des Profils variiert. In der hier verwendeten Version werden zusätzlich sechs Parameter gefittet, die eine effektive Verminderung der Kalibrationsfehler des Instrumentes ermöglichen, siehe Abschnitt 4.4.

4.3 Die Gewichtsfunktionen

Die Gewichtsfunktionen drücken die Änderung der Messgröße bei einer Änderung der jeweiligen Parameter aus. Wenn wie hier relative Parameter ausgewertet

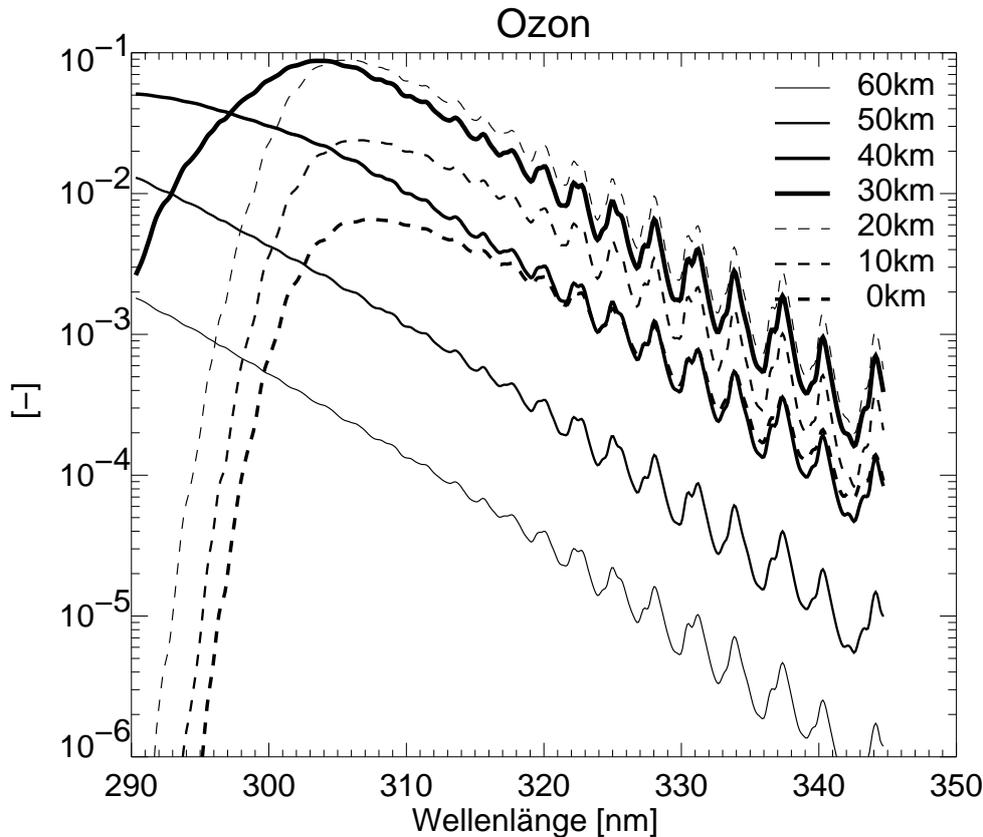


Abbildung 4.3: Negative Ozongewichtsfunktionen für 7 ausgewählte Höhen.

werden, beschreiben sie die Änderung der Messgröße bei einer relativen Änderung der Auswerteparameter um 100 %. Abbildung 4.3 zeigt die Gewichtsfunktionen für ausgewählte Höhen, also die Änderung des Logarithmus der sonnennormierten Strahlung bei der Änderung des Ozongehalts in dieser Höhenschicht um 100 % des a-priori Wertes. Selbstverständlich sind die Ozongewichtsfunktionen negativ, da mehr Ozon mehr Absorption und damit weniger Strahlung bedeutet, sie sind in Abbildung 4.3 jedoch positiv dargestellt, um eine logarithmische Darstellung zu ermöglichen. Die Gewichtsfunktionen mit den größten Werten sind die für Höhen von 20 bis 30 km, ihr Extremum liegt bei 300 bis 310 nm. Das Extremum der Gewichtsfunktionen für 50 und 60 km liegt außerhalb des verwendeten Wellenlängenbereichs im Ultravioletten. Bei 290 nm liegt die Empfindlichkeit eine bis zwei Größenordnung unter der für 30 km bei 305 nm. Da zum Ultravioletten hin auch das Signal zu Rauschverhältnis schlechter wird, ist kaum Information für Höhen oberhalb von 40 km in den Spektren vorhanden. Gewichtsfunktionen für die troposphärischen Höhen (0 bis 10 km) haben ihr Extremum bei etwa 308 nm, sind aber eine bis eineinhalb Größenordnungen schwächer. Entspre-

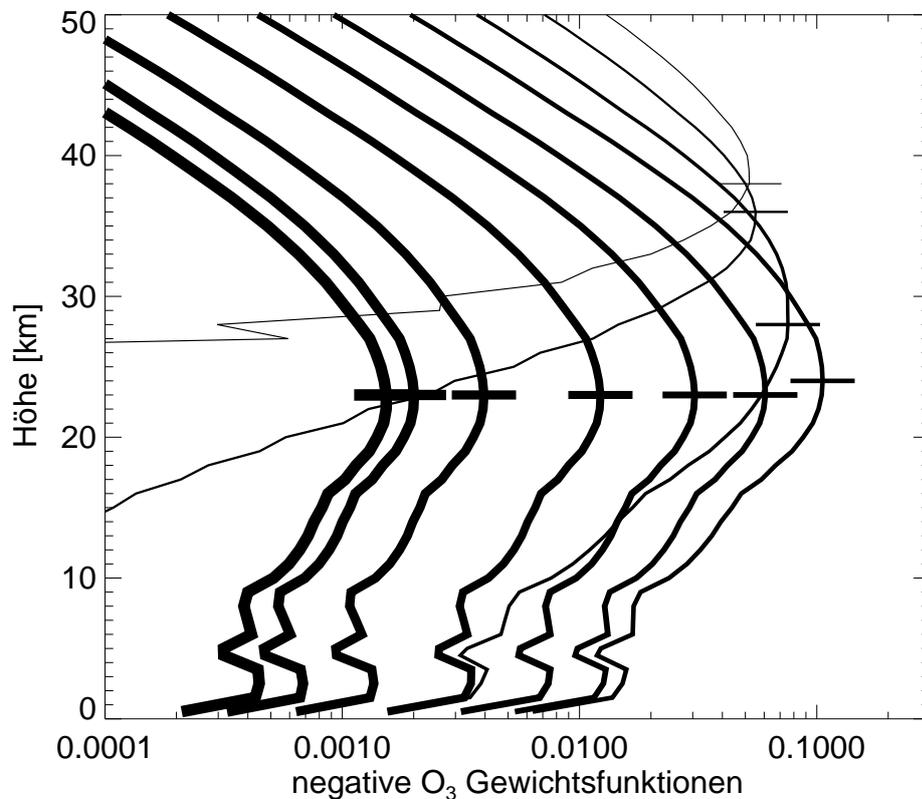


Abbildung 4.4: Negative Ozongewichtsfunktionen über die Höhe für ausgewählte Höhenschichten. Von dünnen zu dicken Linien: 290 nm, 295 nm, 301 nm, 306 nm, 312 nm, 317 nm, 323 nm, 329 nm, 335 nm, 340 nm. Waagerechte Markierung: Minimum der Gewichtsfunktionen.

chend schwierig ist es, Informationen aus diesem Höhenbereich zu gewinnen. Ab 310 nm erkennt man deutlich in allen Gewichtsfunktionen die Hugginsbanden der Ozonabsorptionsquerschnitte.

Für die Ozongewichtsfunktionen hat sich eine andere als die eben vorgestellte Darstellungsweise eingebürgert: die Gewichtsfunktionen werden über die Höhe aufgetragen. Abbildung 4.4 zeigt eine solche Darstellung, wieder sind negative Gewichtsfunktionen dargestellt, um eine logarithmische Darstellung zu ermöglichen. Das Extremum der Gewichtsfunktion liegt für 290 nm bei knapp unter 40 km. Für Wellenlängen oberhalb von 306 nm liegt das Extremum der Gewichtsfunktionen bei 23 km, in der Höhe des Ozonmaximums.

Die Gewichtsfunktionen der skalaren Parameter sind in Abbildung 4.5 dargestellt. Die Gewichtsfunktionen von Albedo und Luftdruck haben positives Vorzeichen, da bei zunehmenden Luftdruck die Rayleighstreuung zunimmt und höhere Albedo der Erdoberfläche natürlich zu mehr rückgestreuter Strahlung führt. Die

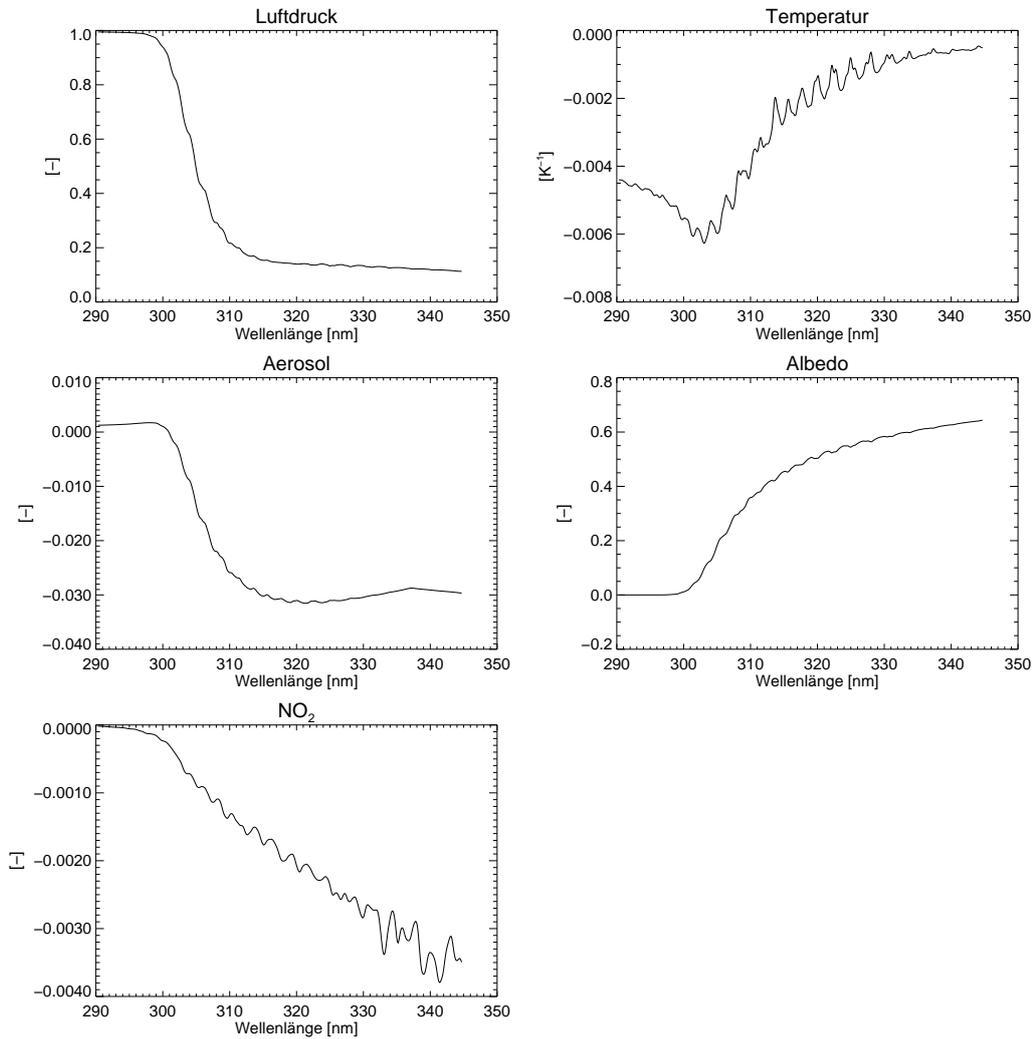


Abbildung 4.5: Gewichtsfunktionen der skalaren Parameter.

Temperaturgewichtsfunktion hat negatives Vorzeichen, weil der Ozonabsorptionsquerschnitt mit zunehmender Temperatur größer wird, vergleiche Abbildung 4.1. Da die Temperatur als einziger Parameter durch einen absoluten Wert statt der relativen Änderung beschrieben wird, ist die Temperaturgewichtsfunktion nicht dimensionslos. Im betrachteten Wellenlängenbereich ist die Rayleighstreuung sehr wichtig, die Strahlung wird daher stark durch Luftdruckänderungen beeinflusst. Aerosol und Albedo spielen unterhalb von 300 nm keine Rolle, da die Strahlung dann den Erdboden bzw. die untere Troposphäre wegen der Ozonabsorptionen nicht mehr erreicht.

4.4 Die Chebyshev–Polynome

Die radiometrische Kalibration des Instrumentes weist noch Probleme auf, siehe Kapitel 6. Für *FURM* wurde daher eine effektive Korrektur dieser Probleme entwickelt [50]. Zu den gemessenen Spektren, genauer dem Logarithmus der sonnennormierten Strahlung gemäß Gleichung (4.1), wird eine Korrekturfunktion addiert. Für Kanal 1 und 2 wird jeweils eine Linearkombination von Chebyshev-Polynomen nullten bis zweiten Grades verwendet. Die Koeffizienten der Polynome werden als zusätzliche Parameter in die Auswertung miteinbezogen, es werden also $2 \cdot 3 = 6$ neue Parameter mit angefügt.

Zur Berechnung der Chebyshev-Polynome werden die diskreten Wellenlängen λ_i linear auf den Wertebereich $[-1,1]$ transformiert:

$$t_i = \frac{2\lambda_i - \lambda_{max} - \lambda_{min}}{\lambda_{max} - \lambda_{min}}. \quad (4.7)$$

Die Wahl von λ_{min} und λ_{max} ist mehr oder weniger willkürlich. Für Kanal 1 haben sich die Werte $\lambda_{min} = 250\text{nm}$ und $\lambda_{max} = 314\text{nm}$, und für Kanal 2 die Werte $\lambda_{min} = 314\text{nm}$ und $\lambda_{max} = 405\text{nm}$ als geeignet erwiesen. Das Chebyshev-Polynom j -ten Grades ist gegeben durch

$$P_j(t_i) = \cos[j \arccos(t_i)]. \quad (4.8)$$

In Abbildung 4.6 sind die Chebyshev–Polynome, jeweils mit dem Koeffizienten 1, zu sehen. Mit einem Chebyshev-Polynom nullten Grades kann ein konstanter Aufschlag der Kalibrationsfunktion berücksichtigt werden, während die Polynome ersten und zweiten Grades Änderungen der mittleren Steigung und teilweise auch der Krümmung auffangen können. Mit den Chebyshev-Koeffizienten werden zusätzliche Freiheitsgrade in das Inversionsproblem eingeführt, die keine physikalische Bedeutung haben. Damit besteht die Gefahr, dass physikalische Parameter von diesen neuen Parametern mit absorbiert werden. Ein Vergleich von Abbildung 4.6 mit Abbildung 4.5 zeigt relativ wenig Ähnlichkeit mit den Gewichtsfunktionen der skalaren Parameter. Das gilt auch für die Ozongewichtsfunktionen in Abbildung 4.3, insbesondere sind natürlich die Feinstrukturen der Hugginsbanden nicht vorhanden.

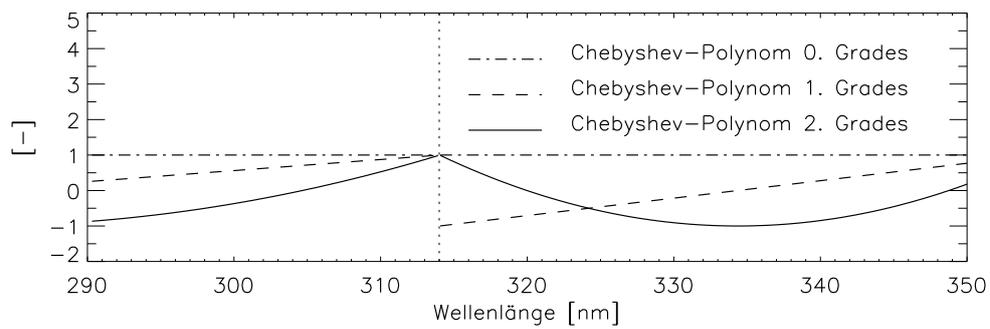


Abbildung 4.6: Die Chebyshev-Polynome nullten bis zweiten Grades zwischen 290 und 350 nm. Die gepunktete Linie bei 314 nm kennzeichnet die Grenze zwischen Kanal 1 und 2.

Kapitel 5

Kalibration der *GOME*-Spektren

GOME nimmt etwa 2500 Spektren je Orbit auf. Die binären Werte, die aus den Detektorpixeln und den *PMDs* ausgelesen werden, werden im Instrument zusammen mit weiteren Werten wie Temperaturen im Instrument, Abtastspiegelpositionen usw., auf einem Magnetband zwischengespeichert. Sobald *ERS-2* Kontakt zu einer seiner Bodenstationen hat (die wichtigste ist Kiruna in Nordschweden), werden die Daten aller Instrumente an Bord an diese gesendet. Die *GOME* Daten werden als sogenanntes Level-0 Produkt auf Magnetbändern gespeichert und auf dem Postwege an die *DLR* in Oberpfaffenhofen geschickt.

Der *GOME Data Processor (GDP)* berechnet daraus mit Hilfe der Kalibrierungsfunktionen, die auf Messungen vor dem Start in Form der sogenannten „Keydaten“ und auf regelmäßigen Messzyklen während des Fluges beruhen, die kalibrierten Spektren. Im folgenden Abschnitt wird der Ablauf der Kalibration skizziert, danach wird im Detail auf die radiometrische Kalibrierung und die Polarisationskorrektur eingegangen. Die im folgenden Kapitel 6 diskutierten Probleme in der Kalibration beziehen sich im wesentlichen auf diese beiden zentralen Schritte in der Kalibration. In Kapitel 8 wird der Einfluss dieser Probleme auf die Ozonprofilauswertung untersucht, sofern Lösungen vorgeschlagen werden konnten, die eine vergleichende Untersuchung erlauben.

5.1 Kalibrierung der Spektren im *GDP*

Im Folgenden wird ein kurzer Überblick der einzelnen Kalibrationsschritte im *GDP* gegeben, eine detaillierte Beschreibung findet sich in [2]. Die Schritte im einzelnen sind:

Konvertierung der Hilfsmessungen: Neben den eigentlichen Messdaten der Detektoren und *PMDs* werden noch weitere Größen festgehalten, die den Status des Instrumentes beschreiben und für die weitere Kalibration benötigt

werden, insbesondere die Temperatur der optischen Bank und die Position des Abtastspiegels. Die binären Messwerte werden mit Hilfe von Polynomen dritter Ordnung, deren Koeffizienten in der Kalibrationsphase bestimmt wurden, in physikalische Einheiten umgerechnet. Außerdem wird der interne Zeitähler auf UTC-Zeit umgesetzt.

Dunkelstromkorrektur: Die Diodenzeilen der Detektoren haben die Eigenschaft, ständig einen von den Umgebungsbedingungen, insbesondere der Temperatur, abhängigen Dunkelstrom zu liefern. Um diesen zu bestimmen, werden in regelmäßigen Abständen Dunkelmessungen vorgenommen, die die Größe des Dunkelstroms für eine Korrektur bestimmen.

Detektorrauschen: Ebenfalls aus den Dunkelmessungen wird die Größe des Detektorrauschen bestimmt. Hierbei wird die Standardabweichung des Dunkelstroms um den Mittelwert aus einer Reihe von Dunkelmessungen berechnet.

Pixel zu Pixel Abweichungen: Die einzelnen Pixel der Diodenzeile haben eine leicht variierende Empfindlichkeit. Die Korrekturfunktion wurde bei der Kalibration des Instrumentes ermittelt: Ein gemittelttes Spektrum (ohne schmalbandige Strukturen) wurde mit einer Dreiecksfunktion geglättet. Der Quotient aus der geglätteten und der Ausgangsfunktion korrigiert die Pixel zu Pixel Abweichung.

Streulichtkorrektur: Innerhalb des Instrument kommt es zu Streulicht, so dass Licht anderer Wellenlängen als durch die Position der Gitter vorgegeben am Detektor ankommt. Die Streulichtkorrekturfaktoren wurden am Boden bestimmt und werden mit der Gesamtstrahlung der jeweiligen Messung multipliziert (je mehr Licht, desto mehr Streulicht). Dieses wird dann von der gemessenen Intensität abgezogen. Das Streulicht in den PMDs wird aus den Sonnenmessungen bestimmt, wobei ausgenutzt wird, dass die Sonne eine unpolarisierte Lichtquelle ist, siehe Abschnitt 5.3.

Wellenlängenkalibration: Für die spektrale Kalibration werden die Spektrallinien der internen PtCrNe-Lampe verwendet. In regelmäßigen Abständen wird ein Spektrum der Kalibrationslampe aufgenommen. Aus den ausreichend starken Spektrallinien kann dann den entsprechenden Pixel die exakte Wellenlänge zugeordnet werden. Zwischen diesen Punkten wird für jeden Kanal ein Polynom angefitet, was allerdings an den Enden jedes Kanals zu einer Extrapolation und damit zu größeren Fehlern führt.

Radiometrische Kalibration: Die radiometrische Kalibration bestimmt aus den binären Werten des Instrumentes physikalische Größen. Für die Sonnenmessung sind die Eigenschaften des Diffusers zu berücksichtigen, die Er-

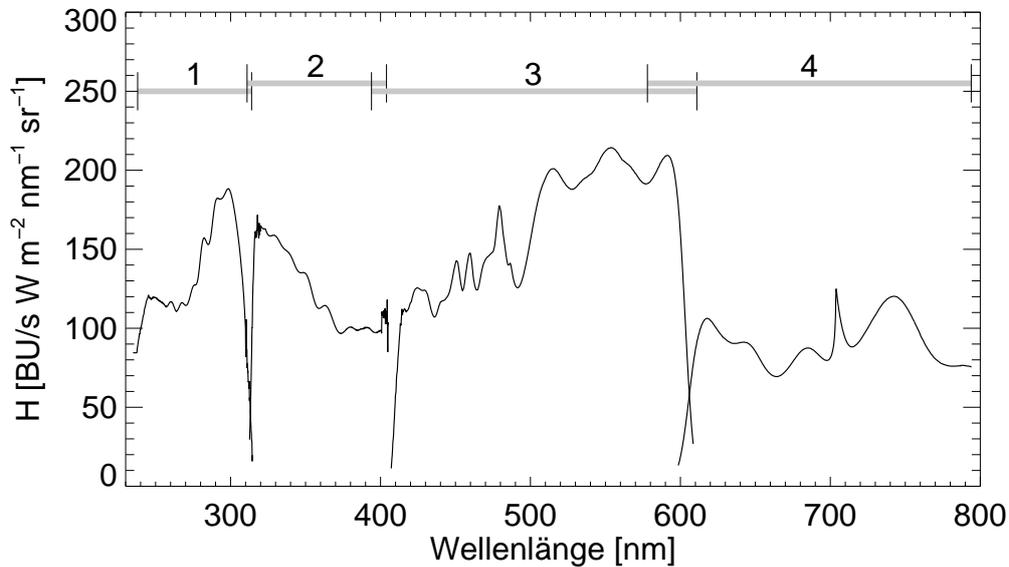


Abbildung 5.1: Antwortfunktion H von *GOME*. Die waagerechten Striche oben geben die Wellenlängenbereiche der Kanäle von *GOME* an.

dradianzen müssen hinsichtlich der Polarisationsseigenschaften des Gerätes korrigiert werden.

Diese Einzelheiten der radiometrischen Kalibration werden in den nächsten beiden Abschnitten detaillierter dargelegt.

5.2 Die radiometrische Kalibration

Die Spektren werden von *GOME* als binäre 16 Bit Werte gespeichert. Um daraus physikalische Größen zu erhalten, wurde vor dem Start die radiometrische Empfindlichkeit anhand von Referenzlichtquellen vermessen. Verwendet wurden hier zum einen eine 1000 W *FEL* Lampe, die durch *NIST* vermessen wurde. In Zusammenarbeit mit der *NASA* wurden zusätzlich die Referenzlichtquellen, die für die Kalibration der *SBUV 2* und *SSBUV* Instrumente verwendet wurden, auch für die Kalibration von *GOME* verwendet. Die beiden Standards stimmten innerhalb von $\pm 1\%$ überein [35].

Diese Antwortfunktionen $H(\lambda_i, \sigma)$ des Instrumentes (*Radiance Response Function*) ist neben der Wellenlänge λ_i abhängig vom Winkel des Abtastspiegels σ . Aus den gemessenen binären Werte der Erdspektren $S_{Erde,unpol,i}$ erhält man daher die Erdradianzen $I_{Erde,i}$ durch

$$I_{Erde,i} = \frac{S_{Erde,unpol,i}}{H(\lambda_i, \sigma)}. \quad (5.1)$$

Abbildung 5.1 zeigt H für die Nadirstellung des Abtastspiegels.

Durch die Streuprozesse in der Erdatmosphäre ist das gemessene Signal allerdings nicht das einer unpolarisierten Lichtquelle, sondern das einer teilweise polarisierten Quelle $S_{Erde,pol,i}$. Der Polarisations Korrektur Algorithmus (*PCA*), der im folgenden Abschnitt 5.3 beschrieben wird, berechnet eine Korrekturfunktion c_i , die das Signal einer unpolarisierten Lichtquelle nach

$$S_{Erde,unpol,i} = c_i \cdot S_{Erde,pol,i} \quad (5.2)$$

bestimmt.

Die Messung der Sonnenirradianz geht zusätzlich über den Diffuser der Kalibrationseinheit, dessen Streueigenschaften neben der Wellenlänge von dem Azimutwinkel α und dem Elevationswinkel ϵ , unter dem die Sonnenstrahlung auf den Diffuser trifft, abhängt. Diese werden beschrieben durch eine bidirektionale Streuverteilungsfunktion (*Bi-directional Scattering Distribution Function BSDF*) $BSDF(\lambda_i, \alpha, \epsilon)$. Die Parametrisierung der *BSDF* wird in Abschnitt 6.8 näher erläutert. Die Sonnenirradianz wird aus mehreren Einzelmessungen während eines Kalibrationszyklus gemittelt, so dass für den Mittelwert $M_{Sonne,i}$ des binären Sonnensignals $S_{Sonne,i}$ gilt

$$M_{Sonne,i} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{S_{Sonne,i,n}}{BSDF(\lambda_i, \alpha_n, \epsilon_n)}, \quad (5.3)$$

wobei N die Anzahl der zu mittelnden Messungen ist. Die Irradianz I_{Sonne} erhält man dann durch

$$I_{Sonne,i} = \frac{M_{Sonne,i}}{H(\lambda_i, \sigma)}. \quad (5.4)$$

Die Antwortfunktionen $H(\lambda_i, \sigma)$ liegt auf dem Wellenlängengitter des Instrumentes während der Kalibration vor. Vor Anwendung auf die aktuellen Signale ist daher eine Interpolation auf das aktuelle Gitter notwendig. In der Messung wurde Abhängigkeit der Antwortfunktion von σ separiert, es gilt

$$H(\lambda_i, \sigma) = H(\lambda_i, \sigma_{nadir}) \cdot W(\lambda_i, \sigma), \quad (5.5)$$

wobei $W(\lambda_i, \sigma)$ die Winkelabhängigkeit beschreibt.

5.3 Polarisations Korrektur Algorithmus (*PCA*)

Das *GOME* Datenprodukt sind Spektren der Gesamtintensität der am Instrument ankommenden Strahlung. Allerdings ist die Strahlung nach den Streuprozessen an der Erdatmosphäre und –oberfläche im Allgemeinen nicht mehr vollständig unpolarisiert. Da das Instrument für parallel und senkrecht zum Eingangsspalt polarisiertes Licht unterschiedlich empfindlich ist, muss eine Polarisationskorrektur

durchgeführt werden, um von der gemessenen zur tatsächlichen Gesamtintensität zu gelangen. Dies ist ein sehr kritischer Teil der Kalibration der Spektren und wird daher an dieser Stelle ausführlicher besprochen. Ganz allgemein setzt sich die Gesamtintensität I aus den beiden senkrecht und parallel polarisierten Komponenten I_p und I_s zusammen. Zirkular polarisiertes Licht wird hier vernachlässigt.

$$I = I_p + I_s . \quad (5.6)$$

Die wesentliche Größe im PCA ist der fraktionale Polarisationsgrad p ,

$$p = \frac{I_p}{I} , \quad (5.7)$$

mit dem sich Gleichung (5.6) schreiben lässt als:

$$I = I_p + I_s = pI + (1 - p)I . \quad (5.8)$$

Für das Instrument müssen folgende Empfindlichkeiten definiert werden:

- a_p : Empfindlichkeit der Detektoren für parallel polarisiertes Licht.
- a_s : Empfindlichkeit der Detektoren für senkrecht polarisiertes Licht.
- d_p : Empfindlichkeit der PMDs für parallel polarisiertes Licht.

Eine entsprechende Größe d_s ist nicht notwendig, da die PMDs konstruktionsbedingt nur den parallel polarisierten Anteil empfangen. Mit den obigen Größen kann das Verhältnis η der Empfindlichkeit für die beiden Polarisationsrichtungen der Diodenzeilen und das Verhältnis ξ der Empfindlichkeit für parallel polarisiertes Licht von Diodenzeile und PMD definiert werden:

$$\eta = \frac{a_s}{a_p} , \quad (5.9)$$

$$\xi = \frac{d_p}{a_p} . \quad (5.10)$$

Diese Größen wurden während der Kalibrationsphase des Instrumentes bestimmt. Für η wurde dazu eine Weißlichtquelle (unpolarisiertes Licht) mittels eines Polarisationsfilters in senkrecht und parallel polarisiertes Licht aufgeteilt und jeweils mit dem Instrument vermessen, um dann das Verhältnis der beiden Messungen zu bestimmen. Entsprechend wurde ξ bestimmt, wobei noch ein schmalbandiger Filter eingesetzt wurde, um die wellenlängenabhängige Empfindlichkeit der breitbandigen PMDs bestimmen zu können. Durch dieses Vorgehen ist es nicht notwendig, für die Polarisationsempfindlichkeit eine absolut radiometrisch geeichte Lichtquelle zu verwenden. Dies wäre bei einer direkten Bestimmung von a_s , a_p und d_p notwendig gewesen.

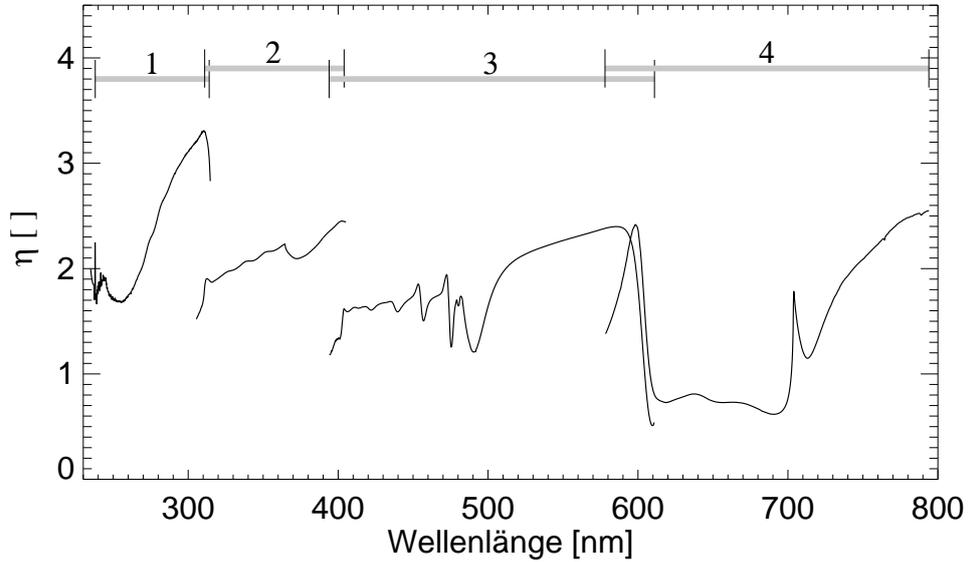


Abbildung 5.2: Verhältnis η der Empfindlichkeit für die beiden Polarisationsrichtungen der Diodenzeilen von GOME.

η ist abhängig von der Stellung des Abtastspiegels. Diese Abhängigkeit wurde als zusätzlicher, vom Winkel α des Spiegels abhängiger Faktor χ gemessen, der die Änderung von η gegenüber der Nadir-Blickrichtung des Instrumentes beschreibt:

$$\eta = \eta_{nadir} \chi(\alpha) . \quad (5.11)$$

Im Folgenden ist mit η immer der für die aktuelle Stellung des Spiegels gültige Wert gemeint. In Abbildung 5.2 ist η für die Nadirstellung des Abtastspiegels dargestellt. ξ ist eine winkelnunabhängige Größe, da nur Licht mit derselben Polarisationsrichtung betrachtet wird. Diese Funktion ist in Abbildung 5.3 auf Seite 49 wiedergegeben.

Mit den so definierten Größen kann das gemessene Signal eines Detektorpixels S_i und eines PMDs S_{PMD} geschrieben werden als:

$$S_i = a_{p,i} I_{p,i} + a_{s,i} I_{s,i} = a_{p,i} p_i I_i + a_{s,i} (1 - p_i) I_i , \quad (5.12)$$

$$S_{PMD} = d_{p,PMD} I_{p,PMD} = d_{p,PMD} p I_{PMD} = \sum_i d_{p,i} p_i I_i . \quad (5.13)$$

Aus Gleichung (5.12) folgt durch einfaches Umstellen:

$$I_i = \frac{S_i}{a_{p,i} p_i + a_{s,i} (1 - p_i)} . \quad (5.14)$$

Nun wird angenommen, der fraktionale Polarisationsgrad ist für den Wellenlängenbereich eines PMDs konstant. Dann lässt sich in Gleichung (5.13) p_i durch

einen Wert p ersetzen. Einsetzen von Gleichung (5.14) sowie den Definitionen von η und ξ in 5.9 und 5.11 ergibt dann:

$$\begin{aligned}
S_{PMD} &= \sum_i d_{p,i} p I_i \\
&= \sum_i d_{p,i} p \frac{S_i}{a_{p,i} p_i + a_{s,i} (1 - p_i)} \\
&= \sum_i \frac{d_{p,i}}{a_{p,i}} p \frac{S_i}{p + \frac{a_{s,i}}{a_{p,i}} (1 - p)} \\
&= \sum_i \xi_i p \frac{S_i}{p + \eta_i (1 - p)} \\
&= \sum_i \xi_i p \frac{S_i}{\eta_i - p(\eta_i - 1)}. \tag{5.15}
\end{aligned}$$

Entsprechendes kann für die Sonnenmessungen von *GOME* mit den Signalen eines Detektorpixels T_i und eines *PMDs* T_{PMD} abgeleitet werden. Da extraterrestrische Solarstrahlung unpolarisiert ist, also $p = 0.5$ gilt, folgt aus Gleichung (5.15):

$$T_{PMD} = \sum_i \xi_i \frac{T_i}{\eta_i + 1}. \tag{5.16}$$

Diese Gleichung enthält keine Unbekannten und sollte immer erfüllt sein. Im Falle von Streulicht an den *PMDs* kann Gleichung (5.16) benutzt werden, um nach Einführung eines Streulichtfaktors Q_{Sonne} diesen zu bestimmen:

$$T_{PMD}(1 - Q_{\text{Sonne}}) = \sum_i \xi_i \frac{T_i}{\eta_i + 1} \tag{5.17}$$

$$Q_{\text{Sonne}} = \frac{T_{PMD} - \sum_i \xi_i \frac{T_i}{\eta_i + 1}}{T_{PMD}}. \tag{5.18}$$

Ein Streulichtfaktor Q_{Erde} muss auch in Gleichung (5.15) eingeführt werden:

$$S_{PMD}(1 - Q_{\text{Erde}}) = \sum_i \xi_i p \frac{S_i}{\eta_i - p(\eta_i - 1)}. \tag{5.19}$$

Im operationellen Betrieb wird als Zusammenhang zwischen den beiden Streulichtfaktoren angenommen:

$$Q_{\text{Erde}} = 2p Q_{\text{Sonne}}. \tag{5.20}$$

Während der Validationsphase von *GOME* zeigte sich, dass Streulicht nur für *PMD 3* (13%) und *PMD 2* (2%) eine Rolle spielt, während *PMD 1* kein Streulicht aufweist. Im operationellen Betrieb (vor *GDP* Version 2.00, siehe Abschnitt 6.7) werden daher nur die Q -Werte für *PMD 2* und *PMD 3* verwendet.

Der Faktor $2p$ in Gleichung (5.20) ist umstritten [96]. Hierbei geht es um die Frage, ob das Streulicht, das hier zusätzlich gemessen wird, erst nach dem Prisma zur spektralen Vorzerlegung entsteht und daher selbst vollständig parallel polarisiert ist, oder ob das Streulicht aus anderer Quelle kommt und damit das gesamte, in das Instrument einfallende Licht zum Streulicht beiträgt. Entsteht das Streulicht erst nach dem Prisma, ist der Faktor $2p$ nicht richtig, da unabhängig vom Polarisationszustand des einfallenden Lichtes die Messung der *PMDs* immer um den gleichen Anteil zu groß ist. Hat das Streulicht seine Quelle an anderer Stelle im Gerät, hängt der Streulichtanteil der *PMD*-Messung vom Polarisationsgrad der einfallenden Strahlung ab, weil beide Polarisationsrichtungen zum Streulicht, aber nur das parallel polarisierte Licht zur *PMD* Messung beitragen. Dies wird dann durch den Faktor $2p$ berücksichtigt. Der instrumentelle Aufbau und die Tatsache, dass nur *PMD 2* und *PMD 3* von Streulicht betroffen sind, spricht eher gegen externes Streulicht, aber eine endgültige Beurteilung ist nach wie vor offen. Wichtig ist diese Frage im Zusammenhang mit der Degradation vom *PMD 1*, siehe Abschnitt 6.7.

Gleichung (5.19) ist die zentrale Gleichung zur Bestimmung des fraktionalen Polarisationsgrades p aus den Messungen der *PMDs*. Die Gleichung muss numerisch gelöst werden.

Die Messbereiche der Diodenzeilen überlappen sich an den Kanalgrenzen, das heißt, ein schmaler Wellenlängenbereich wird von beiden Diodenzeilen gesehen. Da in diesem Bereich die beiden Kanäle unterschiedlich empfindlich sind, η also jeweils verschieden, lässt sich ähnlich der obigen Ableitung für die *PMDs*, ein fraktionaler Polarisationsgrad für die Überlappbereiche ausrechnen. Es hat sich allerdings gezeigt, dass diese Werte eine hohe Unsicherheit aufweisen. Der wesentliche Grund liegt in der nicht zeitgleichen Auslesung der Detektorpixel, wie in Abschnitt 6.5 erläutert. Hinzu kommt, dass sich in diesem Bereich zwei Kanäle das Licht teilen müssen und die Optik zur Trennung der Kanäle ebenfalls die Lichtmenge verringert. Daher ist auch das Signalzurauschverhältnis sehr viel schlechter als im Zentrum der Kanäle. Die p -Werte aus den Überlappbereichen werden daher bei der Kalibrierung der GOME-Spektren nicht verwendet.

Bei Wellenlängen kleiner als 300 nm wird der Polarisationszustand der in der Atmosphäre gestreuten Strahlung durch die Rayleighstreuung an den Luftmolekülen bestimmt. Dabei hängt die Polarisation ausschließlich von der Beobachtungsgeometrie ab, und man erhält einen konstanten Wert für alle Wellenlängen. Daher wird dieser Wellenlängenbereich (Kanal 1 von GOME) nicht von einem *PMD* erfaßt.

Der Grad der Polarisation P_{SS} durch Einfachstreuung an den Luftmolekülen ist [2]

$$P_{SS} = \frac{1 - \cos^2 \Theta}{1 + \Delta + \cos^2 \Theta} . \quad (5.21)$$

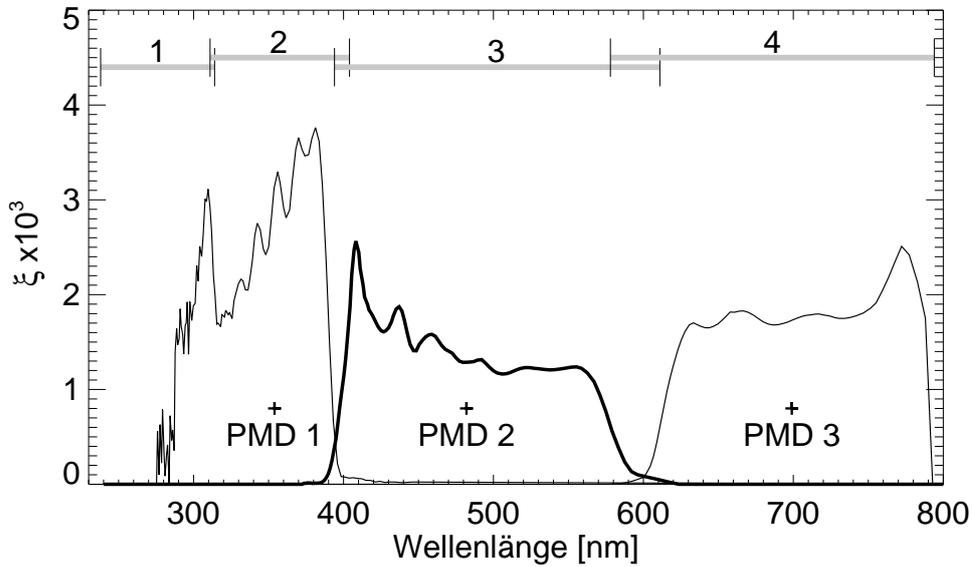


Abbildung 5.3: Empfindlichkeit der PMDs anhand ihrer jeweiligen Kalibrationsfunktion ξ . Die Kreuze markieren die ungefähre Lage des Schwerpunktes der Empfindlichkeit (siehe Text). Die waagerechten Striche oben geben die Wellenlängenbereiche der Kanäle von GOME an.

Δ ist die Rayleigh Anisotropie Konstante, Θ ist der Streuwinkel in der repräsentativen Streuhöhe (30 km) und ergibt sich aus der Blickrichtung von GOME und dem Sonnenstand.

Die fraktionale Polarisation p_0 ist dann

$$p_0 = \frac{1 - P_{SS} \cos 2\chi_{SS}}{2}. \quad (5.22)$$

χ_{SS} ist der Winkel der Polarisationsebene, der ebenfalls durch die Geometrie bestimmt wird.

p_0 wird auch als der siebte Punkt bezeichnet, da ursprünglich 6 Punkte aus den Messungen (je drei Überlapp- und PMD-Werte) mit fraktionalen p -Werten und der theoretisch berechneten Wert p_0 mit der zugeordneten Wellenlänge von 300 nm Verwendung finden sollten.

Es wird eine durchgehende Kurve der fraktionalen Polarisation für alle Wellenlängen benötigt. Dazu muss den aus den PMDs gewonnenen p -Werten eine Wellenlänge zugeordnet werden. Dies geschieht durch die Ermittlung des Schwerpunktes der gemessenen Strahlung unter Berücksichtigung der Empfindlichkeit des jewei-

ligen PMDs:

$$n_p = \frac{1}{4096} \sum_{j=0}^{4095} j \frac{S_j \xi_j}{\overline{S\xi}} \quad ; \text{ mit } \quad \overline{S\xi} = \frac{1}{4096} \sum_{i=0}^{4095} S_i \xi_i . \quad (5.23)$$

Die Summe läuft über die Pixel aller Kanäle von GOME (4×1024), weil die Empfindlichkeit insbesondere von PMD 1 nicht genau den Kanalgrenzen entspricht, siehe Abbildung 5.3. ξ_j hat daher über weite Bereiche den Wert 0. n_p ist dann das Pixel, dem entsprechend der Wellenlängeneichung eine Wellenlänge λ_p zugeordnet wird.

Für die Interpolation stehen damit 4 Werte zur Verfügung: der siebte Punkt und drei Werte aus den PMDs : p_2 , p_4 und p_6 . In Simulationen wurden für verschiedene Szenarien der Polarisationszustand des rückgestreuten Lichtes berechnet. Für Wellenlängen kleiner als 300 nm ist dieser konstant, entsprechend der Beschreibung zur Berechnung des siebten Punktes. Nach 300 nm ist ein schneller parabolischer Abfall des p-Wertes zu beobachten, der dann in einen exponentiellen Verlauf übergeht. Dieses Verhalten ist gut durch die Allgemeine Verteilungsfunktion F (Generalized Distribution Function GDF) zu beschreiben:

$$F(\lambda) = \bar{p} + \frac{w_0 e^{-(\lambda-\lambda_0)\beta}}{(1 + e^{-(\lambda-\lambda_0)\beta})^2} . \quad (5.24)$$

\bar{p} , w_0 und β sind die Parameter dieser Funktion, die angefitet werden müssen. p_2, p_4 und p_6 werden durch eine Akimainterpolation verbunden, für größere Wellenlängen wird konstant der Wert von p_6 verwendet. Abbildung 5.4 skizziert diese Interpolation. Die Parameter der GDF werden durch drei Bedingungen festgelegt (m_2 ist die 1. Ableitung der Interpolationslinie bei p_2):

$$F(\lambda_0) = p_0 \quad 7. \text{ Punkt ist erster Wert in GDF,} \quad (5.25)$$

$$F(\lambda_2) = p_2 \quad p_2 \text{ ist letzter Wert in GDF,} \quad (5.26)$$

$$\left. \frac{dF(\lambda_2)}{d\lambda} \right|_{\lambda=\lambda_2} = m_2 \quad 1. \text{ Ableitung bei } \lambda_2 \text{ ist stetig.} \quad (5.27)$$

Es gibt nicht immer eine Lösung dieser Gleichungen. Dann wird die Interpolation im Bereich der GDF mit einem Parabelstück durchgeführt, das einen Maximalwert bei 325 nm hat. Die Bedingungen (5.25) bis (5.27) müssen auch in diesem Fall erfüllt werden. Entgegen der Beschreibung in [2] führt auch dieses Vorgehen nicht in jedem Fall zu einer Lösung. Die Fehlerbehandlung des GDP initiiert dann eine Akimainterpolation bis zum 7. Punkt, so dass auf jeden Fall eine Parametrisierung gesichert ist [86].

Nach der Interpolation kann allen Wellenlängen ein eindeutiger fraktionaler p -Wert zugeordnet werden. Damit kann der Polarisationskorrekturfaktor c berechnet werden. Wäre das empfangene Licht unpolarisiert, würde für das gemessene

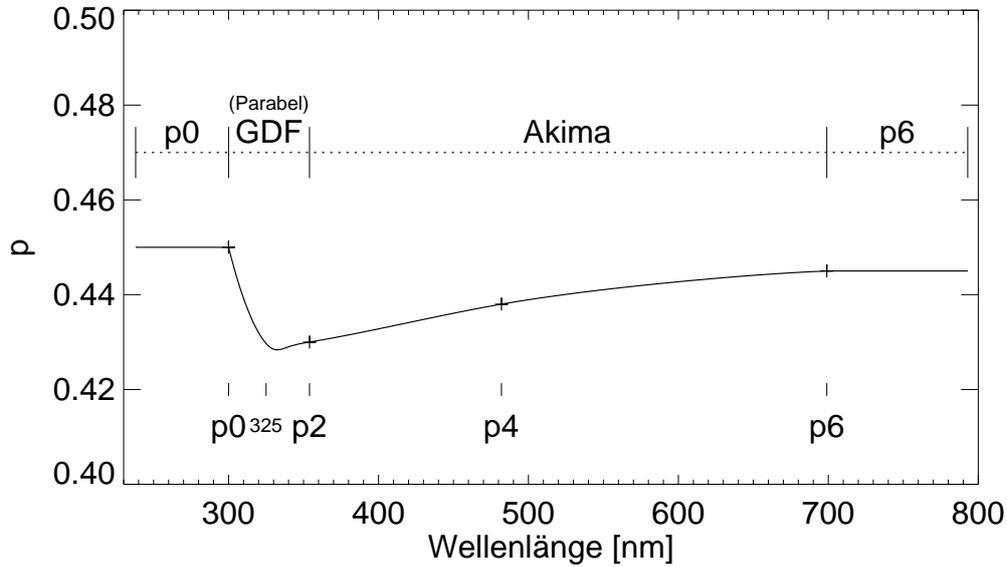


Abbildung 5.4: Schema der Interpolation der fraktionellen p -Werte p_0, p_2, p_4 und p_6 . Erläuterungen siehe Text.

Signal S^{unpol} gelten:

$$S^{unpol} = \frac{1}{2}I(a_p + a_s). \quad (5.28)$$

Tatsächlich gilt für das gemessene Signal S^{pol} einer polarisierten Strahlung:

$$S^{pol} = I(a_p p + a_s(1 - p)). \quad (5.29)$$

Damit erhält man für c unter Verwendung der Definition von η in Gleichung (5.9)

$$\begin{aligned} c &= \frac{S^{unpol}}{S^{pol}} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\frac{1}{2}(a_p + a_s)}{(a_p p + a_s(1 - p))} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1 + \frac{a_s}{a_p}}{p + \frac{a_s}{a_p} - \frac{a_s}{a_p} p} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1 + \eta}{p + \eta - p\eta} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1 + \eta}{p(1 - \eta) + \eta}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Die Größen c, a_p, a_s, p und η sind alle eine Funktion der Wellenlänge, was der Einfachheit halber in der Notation dieses Abschnittes vernachlässigt wurde. Gleichung (5.30) kann nun in Gleichung (5.2) verwendet werden, um die radiometrische Kalibration der Erdradianzen vorzubereiten.

Kapitel 6

Fehlerquellen in der Kalibration

Ozonprofilauswertung mit *FURM* ist auf spektral und radiometrisch gut kalibrierte Spektren angewiesen. Im Folgenden werden Aspekte der Kalibration der *GOME*-Spektren und ihre Relevanz für die Auswertung diskutiert, die als problematisch bekannt sind. Für einige Probleme wurden Korrekturen entwickelt; in Kapitel 8 wird unter anderem untersucht, inwieweit diese die Qualität der Profile verbessern können.

6.1 Integrationszeiten der Diodenzeilen

Nach dem Start von *GOME* wurde festgestellt, dass es bei der Beobachtung von Gebieten mit hoher Albedo zu einer Sättigung der Diodenzeilen im sichtbaren Spektralbereich kommen kann [22]. Daher musste die Integrationszeit der Bänder 1B und 2 bis 4 von 1.5 s auf 0.375 s reduziert werden. Da die Datenrate, die *GOME* bei der Übermittlung der Messwerte zur Verfügung steht, nicht erhöht werden konnte, hatte dies zur Folge, dass nur für ein Viertel des abgetasteten Gebietes tatsächlich Daten zur Verfügung standen, während drei Viertel der Messung verworfen werden mussten. Abbildung 6.1 zeigt das Muster dieser Abtastung. Band 1A wurde weiterhin mit 12 s integriert. Daher werden von den Bändern mit 0.375 s Integrationszeit und denen mit 12 s unterschiedliche Gebiete beobachtet. Für die Ozonprofilauswertung werden aber (mit den zu dieser Zeit gültigen Bandgrenzen, siehe Abschnitt 2.7) Informationen aus Band 1A sowie Band 1B und 2 benötigt. Daher können für diese Daten keine sinnvollen Ozonprofile abgeleitet werden.

Ab dem 27. März 1996 wurde die Addierung der Messwerte auf dem Satelliten eingeführt (*co-adding patch*). Über vier Integrationszeiten von 0.375 s wird direkt an Bord des Satelliten gemittelt, und erst die so erhaltenen Daten mit nun 1.5 s Integrationszeit werden weiter verwendet. Ozonprofilauswertung mit *GOME*-Daten ist daher erst ab diesem Datum möglich.

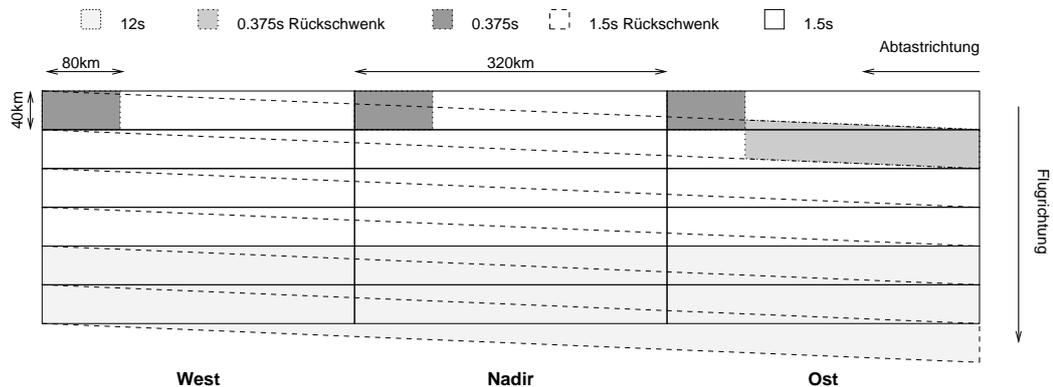


Abbildung 6.1: GOME-Grundpixelgrößen in den verschiedenen Abtastmoden. **0.375 s:** Grundpixel vor Beginn der Addierung der Spektren an Bord des Satelliten am 27. März 1996. **1.5 s:** Nominelle Grundpixel seit diesem Datum. **12 s:** Grundpixel für 12 s Integrationszeit im Band 1A.

6.2 Die radiometrische Eichung

Drei wesentliche Datensätze beschreiben, wie in Kapitel 5 erläutert, die radiometrische Eichung: Die Antwortfunktion $H(\lambda_i, \sigma)$, das Verhältnis der Empfindlichkeiten für parallel und senkrecht polarisiertes Licht $\eta(\lambda_i, \sigma)$ der Diodenzeilen und die Empfindlichkeit der PMDs $\xi(\lambda_i)$. Diese Funktionen wurden in der Kalibrationsphase unter irdischen Umgebungsbedingungen, insbesondere bei Normaldruck, bestimmt [94]. Unter Vakuumbedingungen ändern sich H und η (*air-to-vacuum effect*). Der Grund liegt zum einen im leicht geänderten Brechungsindex, die wesentliche Ursache sind aber Ausgasungseffekte an den optischen Beschichtungen der Spiegel und Prismen.

Für die Korrektur von H wurden die Messungen der spektralen Kalibrationslampe verwendet, eine Messung vor dem Start unter Umgebungsdruck und eine zweite am 2. Juli 1995 mit Beginn des nominellen Betriebs. Diese Lampe ist keine radiometrische Eichquelle. Da aber das Verhältnis zwischen den Messungen der Linien unabhängig von einer absoluten Eichung ist, kann dieses Verhältnis als Änderung der absoluten Empfindlichkeit genutzt werden. Die so gefundene Korrektur der radiometrischen Eichung aufgrund des Luft-Vakuum Effektes für Kanal 1 und 2 hat die Form einer Parabel, man spricht daher von der UV-Parabel (*UV-parabola*) [95, 48]. In der Ableitung wurde die Änderung des Etalon (siehe Abschnitt 6.4) zwischen den beiden Messungen nicht berücksichtigt. Zudem ist die Verwendung der sehr schmalen Emissionslinien in einem Verhältnis zweier Spektren kritisch, dies zeigt sich in einer recht großen Streuung der einzelnen Punkte um die gefittete Parabel. Mit dem GOME Bread Board Model (BBM), einer Kopie von GOME im Orbit (GOME Flight Model (FM)), wurden mit Hilfe einer Weißlichtlampe ebenfalls Messungen unter Umgebungsbedingun-

gen und Vakuum (in einem Vakuumtank) durchgeführt [39]. Die so beobachtete Luft–Vakuum–Korrektur hat eine etwas andere Form, die durch ein Polynom vierter Ordnung angefitet werden muss. Die Amplitude der Änderung fällt geringer aus, statt maximal 12 % in der ursprünglichen Korrektur wurden beim *BBM* nur 8 % beobachtet. Allerdings lassen sich die Messungen am *BBM* nicht direkt auf *GOME* übertragen. Es sind nicht dieselben Instrumente, so dass unklar bleibt, welcher Teil der Unterschiede auf Unsicherheiten der *GOME*–Kalibration und welcher auf Unterschiede zwischen *BBM* und *FM* zurückzuführen sind. Besonders deutliche Effekte traten bei den *BBM*–Messungen in der Überlappregion zwischen den beiden Kanälen auf, da hier die Antwortfunktion besonders steil ist und es zu Wellenlängenverschiebungen kommt [1].

Die η –Funktion ist nicht für einen Luft–Vakuum Effekt korrigiert. Die *BBM*–Messungen zeigen für Kanal 1 und 2 auch keinen Effekt, während es in Kanal 3 und 4 zu deutlichen Effekten aufgrund des dichroischen Filters kommt. Bei den *BBM*–Messungen wurde allerdings eine Temperaturabhängigkeit von η festgestellt, und die Messung von η am Boden fand bei einer anderen Temperatur statt als sie später im Orbit herrscht. Im Überlappbereich zwischen Kanal 1 und 2 ist die Bestimmung von η mit einer Unsicherheit von bis zu 50 % behaftet [39].

Zusammenfassend zeigt sich, dass die Kalibrationsdaten mit schwer quantifizierbaren Unsicherheiten behaftet sind, da bei der Erstellung der Kalibrationsdaten für diesen neuen Instrumententyp nicht alle Effekte vorhergesehen wurden.

6.3 Degradation der spektralen Kanäle

Die Sonne ist eine über die *GOME*–Lebenszeit sehr stabile Lichtquelle im Spektralbereich des Instruments. Nur einzelne Absorptionslinien geben Auskunft über die Sonnenfleckaktivitäten; aus *GOME*–Spektren wurde bereits der MgII–Index der solaren Aktivität (280 nm) und der CaII K Emissionsindex (393 nm) bestimmt [99]. Die täglichen Irradianzmessungen von *GOME* sollten daher nur eine jährliche Variation aufgrund des sich ändernden Abstandes zwischen Erde und Sonne zeigen. Abbildung 6.2 zeigt das Verhältnis des Sonnenspektrums vom 3. Juli 1998 zum 3. Juli 1995, also nach 3 Jahren im Orbit. Es zeigt sich, dass hin zu kürzeren Wellenlängen das Instrument immer weniger Licht wahrnimmt. Bei 240 nm sind es 60 % weniger, bei 290 nm immer noch fast 10 %. Kanal 2 sieht am kurzwelligen Ende etwa 6 % weniger Licht, während am langwelligen Ende fast keine Degradation mehr auftritt. Die hochfrequenten Strukturen sind Folgen des sich ändernden Etaloneffekts, der im nächsten Abschnitt 6.4 diskutiert wird.

In der Ozonprofilauswertung wird die sonnennormierte Strahlung betrachtet. Sofern die Degradation in den Radianz– und Irradianzmessungen gleichermaßen auftritt, hat diese keinen Einfluß. Die Mondmessungen von *GOME* bieten die Möglichkeit, diesen Ansatz zu prüfen, da der Lichtweg ins Gerät zwar dersel-

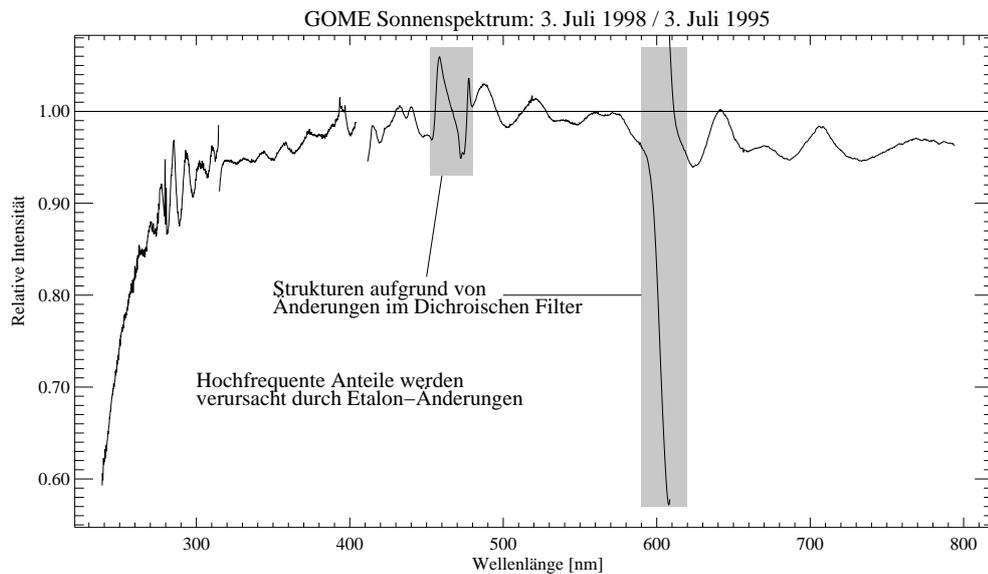


Abbildung 6.2: Verhältnis zweier Sonnenspektren vom 3. Juli 1995 und 3. Juli 1998. Die Degradation im ultravioletten Spektralbereich beträgt bis zu 60 %.

be ist wie bei den Radianzmessungen, jedoch in erster Näherung eine konstante Lichtquelle ohne Atmosphäre beobachtet wird. Leider leuchtet der Mond den Eingangspalt in Längsrichtung immer nur teilweise aus, so dass eine Auswertung schwierig ist. Untersuchungen von Ralph Snel benutzen einen neuen Ansatz: Die Messungen werden mit einem Mittelwert im 550 bis 560 nm Fenster normiert, in der Annahme, dass in diesem Bereich keine Degradation oder sonstige Effekte auftreten (vergleiche Abbildung 6.2). Dieses Vorgehen erfordert noch weitere Annahmen, insbesondere darf die ungleichmäßige Ausleuchtung des Eingangspaltes nicht zu unterschiedlichen Empfindlichkeitsänderungen bei verschiedenen Wellenlängen führen. Dennoch ist eindeutig eine stärkere Degradation in den Mondmessungen als in den Irradianzmessungen zu sehen, bei den kürzesten Wellenlängen bis zu 70 % in 3 Jahren [1].

Die Degradation tritt daher im wesentlichen in einem Teil des Lichtweges auf, der Sonnen- und Mond Messungen gemeinsam ist. Das den Bedingungen des Weltraumes am stärksten ausgesetzte Bauteil ist der Abtastspiegel, er ist daher die wahrscheinlichste Ursache des Degradationseffektes. Der wesentliche Unterschied zwischen Mond- und Sonnenmessung ist die Stellung des Scanspiegels, das Licht wird unter verschiedenen Winkeln reflektiert, siehe Abbildung 2.4. Anzumerken ist, dass sich auch während des Abtastvorgangs bei den Messungen der Erdradianzen der Winkel des Spiegels ändert. Es ist eine noch offene Frage, inwieweit auch hier unterschiedliche Degradation auftreten. Untersuchungen hierzu erfordern eine statistische Auswertung einer großen Anzahl von Messun-

gen, entsprechende Arbeiten sind in Vorbereitung [92]. In Abschnitt 8.4 wird ein möglicher Effekt auf die Ozonprofilauswertung untersucht.

6.4 Etalon

Die Diodenzeilen sind mit einer etwa $3\ \mu\text{m}$ dicken SiO_2 -Schicht bedeckt. An den Grenzen der Schicht kommt es zu Mehrfachreflektionen eines kleinen Teils des Lichtes, der dann je nach Wellenlänge konstruktiv oder destruktiv mit dem nicht reflektierten Licht interferiert. Dies führt zu einer wellenförmigen Änderung der Antwortfunktion mit einer Amplitude von bis zu 4 %. Dieses Phänomen wird als Etalonneffekt bezeichnet.

Die *GOME* Detektoren werden aktiv gekühlt. Dies führte vermutlich zur Kondensation der Restfeuchtigkeit, die in den Objektiven offensichtlich noch vorhanden ist, auf den Detektoren, so dass sich eine zweite Schicht aus Eis auf den Detektoren bildet. Die Objektive in *GOME* sind geschlossen, so daß diese Restfeuchtigkeit nicht im Laufe der Zeit in den Weltraum entweichen kann. Damit ändert sich das Muster des Etalonneffektes, weil die Schichtdicke und die Reflektivitäten der Oberfläche sich verändert haben. Gelegentlich kommt es durch Störungen oder beabsichtigte Abschaltungen zu einer Unterbrechung der Kühlung (*cooler switch-off*). In diesem Fall verdampft die Eisschicht und kondensiert nach dem Wiedereinschalten der Kühlung erneut. Allerdings bilden sich nicht jedesmal wieder dieselben Eisschichten, sondern die Dicke variiert. Nach einigen Tagen hat sich ein neues Etalonmuster stabilisiert, das dann bis zum nächsten Ausfall der Kühlung stabil bleibt [48]. Eine Korrektur hierfür wird derzeit nicht vorgenommen.

Ein Effekt auf die Ozonprofilauswertung ist nicht zu erwarten, da sich die Etalonmuster in der sonnennormierten Strahlung herauskürzen. Nur kurz nach einem Ausfall der Kühlung kann sich die Änderung des Etalons auswirken, da die Radianz- und die Irradianzmessung im Allgemeinen einige Stunden auseinanderliegen und sich das Muster in dieser Zeit möglicherweise noch ändert beziehungsweise die letzte Irradianzmessung vor dem Kühlungsausfall aufgenommen wurde.

6.5 Zeitverzögerung in der Auslesung der Diodenzeilen

Die *GOME* Diodenzeilen benötigen jeweils 93.75 ms, um, beginnend mit dem letzten Pixel (größere Wellenlänge), die Diodenpixel sequentiell auszulesen. In den Überlappbereichen, in denen jeweils Pixel aus verschiedenen Kanälen denselben Wellenlängenbereich abdecken, findet daher die Auslesung mit einem zeit-

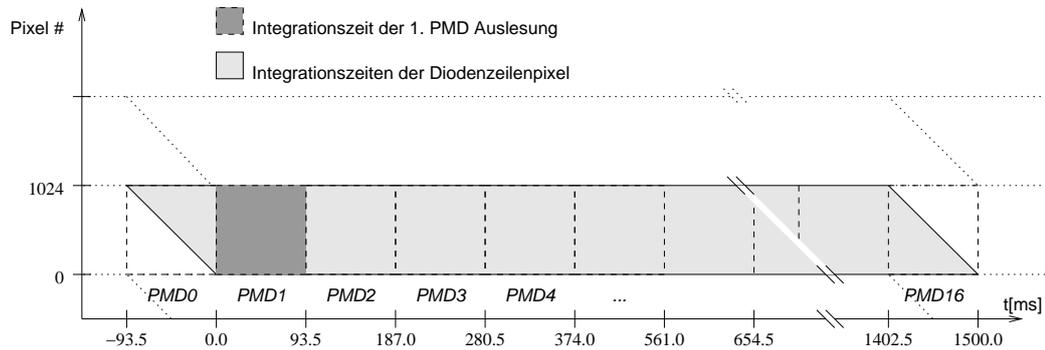


Abbildung 6.3: Veranschaulichung der Synchronisation der Auslesung der Diodenzeilen mit denen der PMDs. PMD 1 bis PMD 16 ist die 1. bis 16. Integration durch die PMDs. PMD 0 entspricht PMD 16 der vorhergehenden Integration der Diodenzeile.

lichen Versatz von bis zu 93,75 ms statt. Im Standardmodus entspricht dies einer Änderung der Blickrichtung von *GOME* um 20 km auf dem Boden. Die Beginn der Integration der *PMDs* ist mit der des *ersten* Detektorpixels synchronisiert. Im nominellen Modus des Instrumentes werden die *PMDs* 16 mal ausgelesen, bis die Integration der Intensitäten in der Diodenzeile abgeschlossen ist ($16 \cdot 93,75 \text{ ms} = 1,5 \text{ s}$). Ein Schema der zeitlichen Zuordnungen ist in Abbildung 6.3 zu sehen.

Wenn sich während der Auslesezeit der Diodenzeile die Albedo der Erde, etwa durch Wolken, ändert, kommt es zu den sogenannten Strahlungssprüngen (*radiance jumps*) an den Kanalgrenzen. Diese fallen umso größer aus, je kürzer die Integrationszeiten sind, da die Zeitverzögerung in der Auslesung der Diodenzeilen gleich bleibt. Abb. 6.4 zeigt ein Beispiel vom Juli 1995, das heißt mit 0,375 s Integrationszeit. Die *PMDs* haben eine sehr viel bessere räumliche Auflösung als Diodenzeilen. Im Folgenden wird ein Algorithmus vorgestellt, der dies ausnutzt, um die Sprünge in den Spektren zu reduzieren. Dabei werden die Messungen der *PMDs* verwendet, um die breitbandige, durch Albedoveränderungen verursachte Differenz in der Strahlungsintensität anzupassen. Für Strahlungssprünge zwischen Kanal 1 und 2 ist dieses Verfahren nicht anwendbar, da es keinen zu Kanal 1 korrespondierenden *PMD* gibt.

Den Messungen der *PMDs* wird die mittlere Wellenlänge des Schwerpunktes (nach Gleichung (5.23)) zugeordnet. Zwischen diesen Wellenlängen werden die *PMD*-Werte interpoliert, für Wellenlängen kleiner als von *PMD 1* und größer als von *PMD 3* werden deren Werte konstant extrapoliert. Tabelle 6.1 listet die Stützpunkte der verwendeten Spline-Interpolation auf. Die dritte, vierte und fünfte Wellenlänge gibt die Lage der mittleren Schwerpunkte der Empfindlichkeit der *PMDs* an. Die ersten und letzten beiden Stützpunkte erzwingen eine konstante Extrapolation der Werte von *PMD 1* beziehungsweise *PMD 3*.

Im Folgenden ist $r(n)$ das *GOME* Spektrum eines Kanals, n die Nummer eines

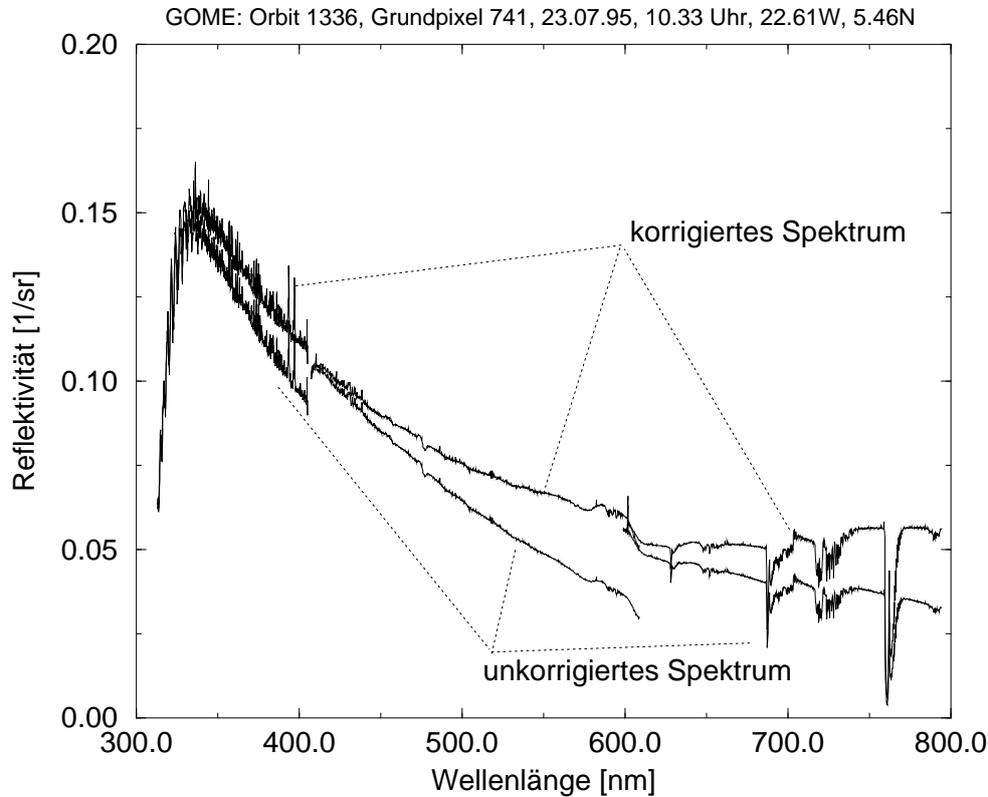


Abbildung 6.4: **Unkorrigiertes Spektrum:** Strahlungssprung in einem Spektrum vom 23. Juli 1995. **Korrigiertes Spektrum:** Dasselbe Spektrum nach Anwendung der Strahlungssprungkorrektur. Das Spektrum wurde vor Einführung der Addierung der Signale auf dem Satelliten aufgenommen, das heißt mit 0.375 s Integrationszeit.

Detektorpixels in diesem Kanal ($n \in [0, \dots, 1023]$, beginnend mit kürzeren Wellenlängen), $\tilde{r}(n)$ das angepasste Spektrum und $PMD_{\lambda(n)}(i)$ die auf die Wellenlänge λ des Detektorpixels n inter- beziehungsweise extrapolierte i -te Auslesung der PMDs:

$$\tilde{r}(n) = r(n) \frac{S_{\lambda(n)}^0}{S_{\lambda(n)}(n)} \quad (6.1)$$

Wellenlänge [nm]	310	332	354.12	481.54	699.5	750.0	800
Wert von	<i>PMD1</i>	<i>PMD1</i>	<i>PMD1</i>	<i>PMD2</i>	<i>PMD3</i>	<i>PMD3</i>	<i>PMD3</i>

Tabelle 6.1: Stützpunkte der PMD Spline-Interpolation, wie sie zur Anpassung der Spektren in der Strahlungssprungkorrektur verwendet werden. Die mittleren, drei Wellenlängen entsprechen dem mittleren Schwerpunkt der Empfindlichkeit der PMDs, die ersten und letzten beiden Punkte erzwingen eine konstante Extrapolation der PMD-Messungen.

mit

$$S_{\lambda(n)}^0 = \sum_{i=1}^{16} PMD_{\lambda(n)}(i),$$

$$S_{\lambda(n)}(n) = S_{\lambda(n)}^0 + \frac{n}{1024} (PMD_{\lambda(n)}(0) - PMD_{\lambda(n)}(16)),$$

$$PMD_{\lambda(n)}(0) = PMD_{\lambda(n)}(16) \text{ des vorherigen Grundpixels.}$$

Abbildung 6.5 zeigt das Resultat der Anpassung. Dazu wurde jeweils eine relative Sprunggröße definiert:

Sprung zwischen Kanal 2 und 3: Von 372 nm bis 405 nm (Kanal 2) bzw. 407 nm bis 470 nm wurde jeweils mittels linearer Regression eine Gerade angefitet. Der relative Abstand beider Geraden bei 406 nm definiert die Größe des Sprungs.

Sprung zwischen Kanal 3 und 4: Das Integral über den Überlappbereich der beiden Kanäle legt die relative Sprunggröße fest.

Die Anpassung reduziert die Sprünge drastisch, von vorher bis zu 40 % auf unter 5 %. Es muss allerdings betont werden, dass diese Methode die Spektren nicht verbessert, da die Sprünge auf die Messmethode zurückzuführen sind. Es wird nur die Gesamtintensität korrigiert, spektrale Änderung beispielsweise in der Tiefe von Absorptionslinien können nicht korrigiert werden. Das Verfahren bedeutet im Kern, dass die Messung der letzten Detektorpixel zeitlich mit Hilfe der Messungen der breitbandigen *PMDs* *extrapoliert* werden. Es ist nur eine Hilfe für Verfahren, die mit Strahlungssprüngen in den Spektren nicht umgehen können.

Die Abbildungen 6.5 und 6.4 dargestellten Messungen wurden vor dem Beginn der Addierung der Messwerte im Satelliten gemacht (siehe Abschnitt 6.1), so

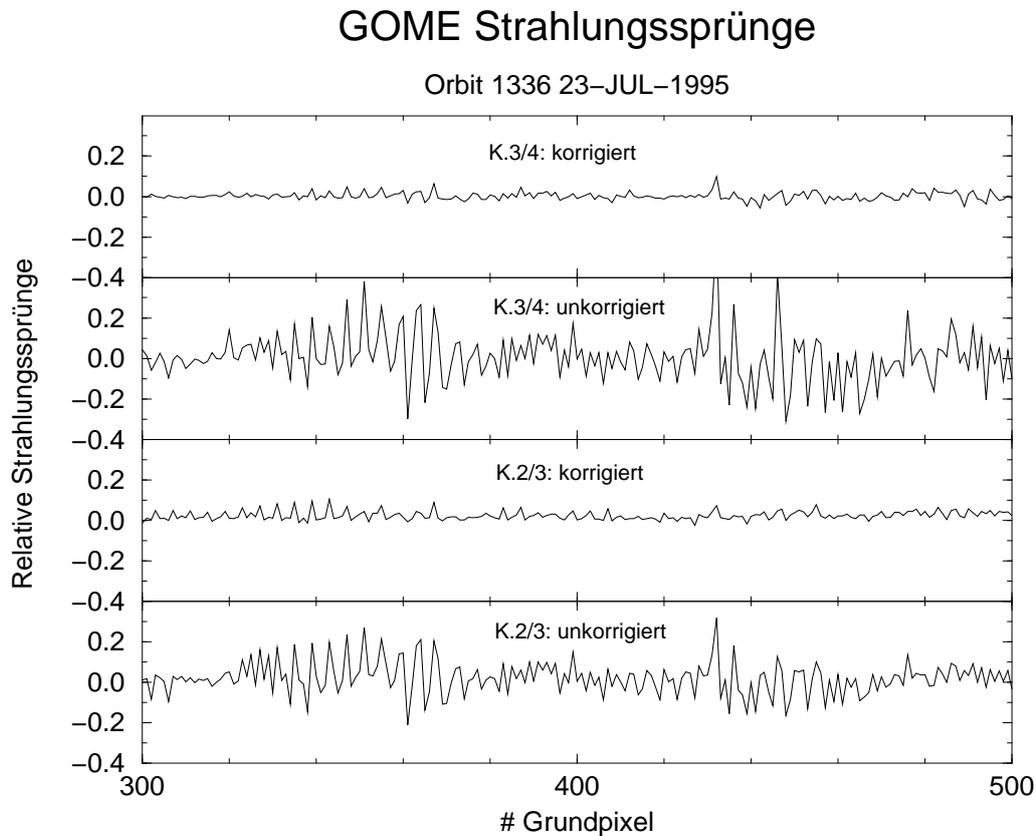


Abbildung 6.5: Reduzierung der Strahlungssprünge durch die Anpassung der Spektren eines GOME–Orbits vom 23. Juli 1995, das heißt vor Einführung der Addierung der Signale auf dem Satelliten.

dass die Detektorpixel nur 0.375 s integriert wurden. Damit verstrich $\frac{1}{4}$ der Integrationszeit während des Auslesens des Detektorarrays. Seither beträgt die Integrationszeit 1.5 s, so dass dieser Faktor auf $\frac{1}{16}$ schrumpft. Für die Ozonprofilauswertung wird auch der UV–Anteil des Spektrums benötigt, der 12 s integriert wird, dann wird nur noch $\frac{1}{128}$ der Messzeit zum Auslesen benötigt. Das Problem der Strahlungssprünge kann daher für diese Daten vernachlässigt werden. Bei der Verwendung einzelner Pixel mit 1.5 s Integrationszeit, wie es seit Juli 1998 möglich ist, ist in theoretischen Untersuchungen ein Effekt durch Strahlungssprünge auf die Profile nachweisbar [75]. Da die oben vorgestellte Korrektur wegen des fehlenden PMDs für Kanal 1 nicht anwendbar ist auf mögliche Strahlungssprünge zwischen Kanal 1 und 2, kann die Korrektur für die Ozonprofilauswertung dieser Arbeit im ultravioletten Spektralbereich nicht verwendet werden. Möglicherweise kann die Korrektur hilfreich sein, wenn auch die Chappuis–Bande des Ozons im sichtbaren Spektralbereich verwendet wird. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Chappuis–Bande nicht verwendet.

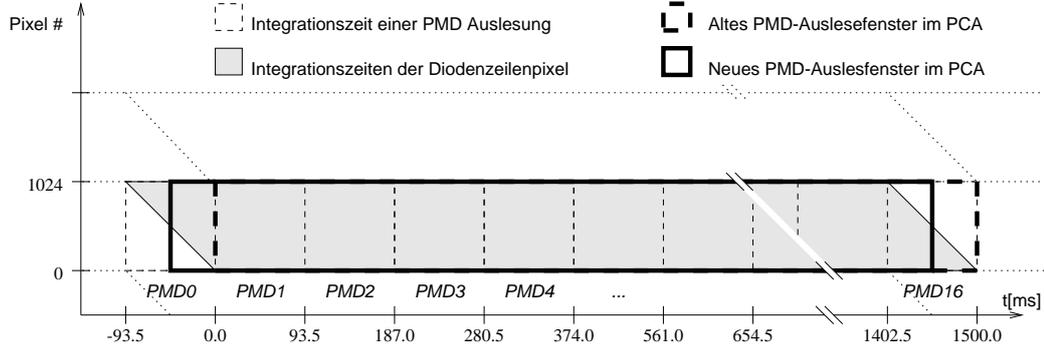


Abbildung 6.6: Veranschaulichung der zeitlichen Zuordnung im ursprünglichen und aktuellen PCA.

Der oben beschriebene Algorithmus wurde als zusätzliche Option in die Extraktionssoftware für die operationellen Level 1 Daten aufgenommen [84].

6.6 Verschiebung der zeitlichen Zuordnung der PMDs im PCA

Im PCA wird durch den Vergleich der Messungen der PMDs mit den korrespondierenden Detektorpixeln der Polarisationsgrad der ankommenden Strahlung bestimmt. Im ursprünglichen PCA wurde dabei die Zeitverzögerung in der Auslesung der Diodenzeile nicht berücksichtigt. Für die Polarisationskorrektur wird als Messwert der PMDs S_{PMD} der Mittelwert über die auf eine Zeiteinheit normierten 16 Einzelmessungen $S_{PMD,i}^{norm}$ verwendet (siehe Abschnitt 5.3):

$$S_{PMD} = \frac{1}{16} \sum_{i=1}^{16} S_{PMD,i}^{norm} \quad (6.2)$$

Hierbei korrespondiert das erste PMD mit der Auslesung des ersten Detektorpixels. Da aber das letzte Detektorpixel bereits 96.375 ms, also genau eine PMD-Integrationszeit, vorher ausgelesen wird, ist es sinnvoll, obige Summe durch folgende Summe \tilde{S}_{PMD} zur ersetzen:

$$\tilde{S}_{PMD} = \frac{1}{16} \left(\frac{1}{2} (S_{PMD,0}^{norm} - S_{PMD,16}^{norm}) + \sum_{i=1}^{16} S_{PMD,i}^{norm} \right) \quad (6.3)$$

mit

$$S_{PMD,0}^{norm} = S_{PMD,16}^{norm} \text{ des vorherigen Grundpixels.}$$

Abbildung 6.6 illustriert die Änderung: Das PMD-Auslesefenster wird um eine halbe Integrationszeit verschoben und erreicht so maximalen Überlapp mit

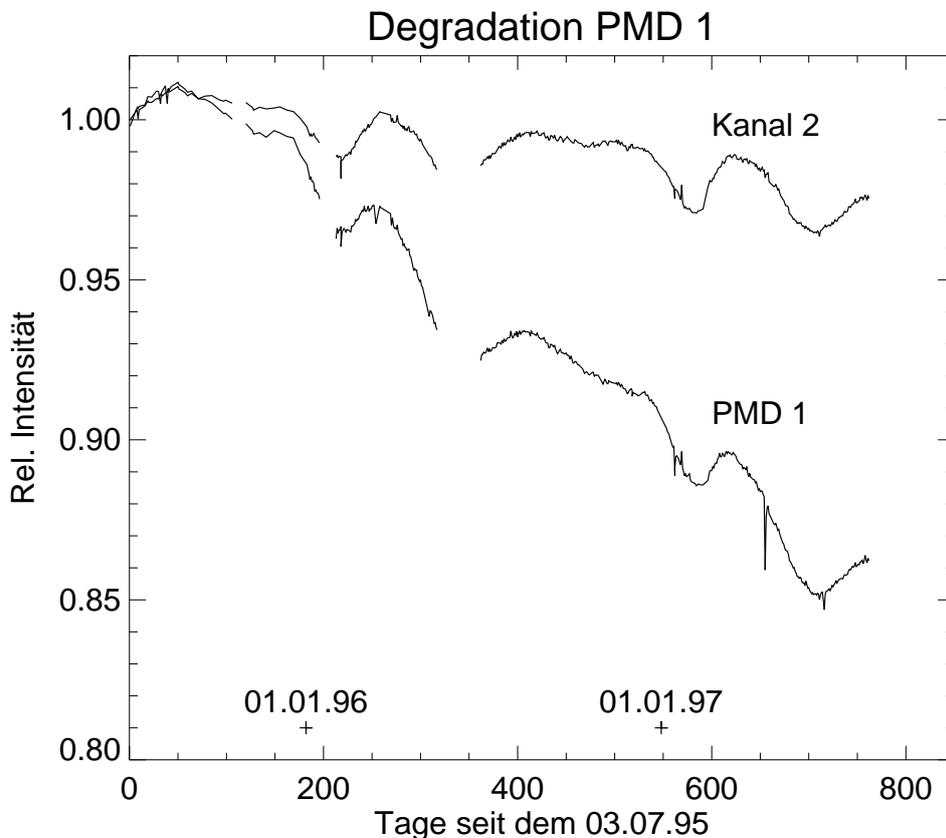


Abbildung 6.7: Degradation von PMD 1 vom Beginn der Messung bis Juli 1997. Dargestellt ist die Intensität in binären Einheiten (BU) relativ zur ersten Messung am 3. Juli 1995, normiert auf eine Entfernung der Erde zur Sonne von einer astronomischen Einheit. Zum Vergleich ist die korrespondierende Summe der Diodenzeile geplottet. Die W-förmige Struktur in den ersten Jahreshälften ist auf eine fehlerhafte Beschreibung der Streueigenschaften des Diffusers zurückzuführen, siehe Abschnitt 6.8. Zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Abbildung gab es einige Lücken in den zur Verfügung stehenden Daten.

dem Integrationszeitraum der Diodenzeile. Diese Änderung wurde in den GDP-Prozessor übernommen [63].

6.7 Degradation PMD 1

Wie in Abschnitt 5.3 erläutert, sollte die Gleichung (5.16) während der Sonnenmessungen für PMD 1 immer erfüllt sein. Abbildung 6.7 zeigt die Messungen

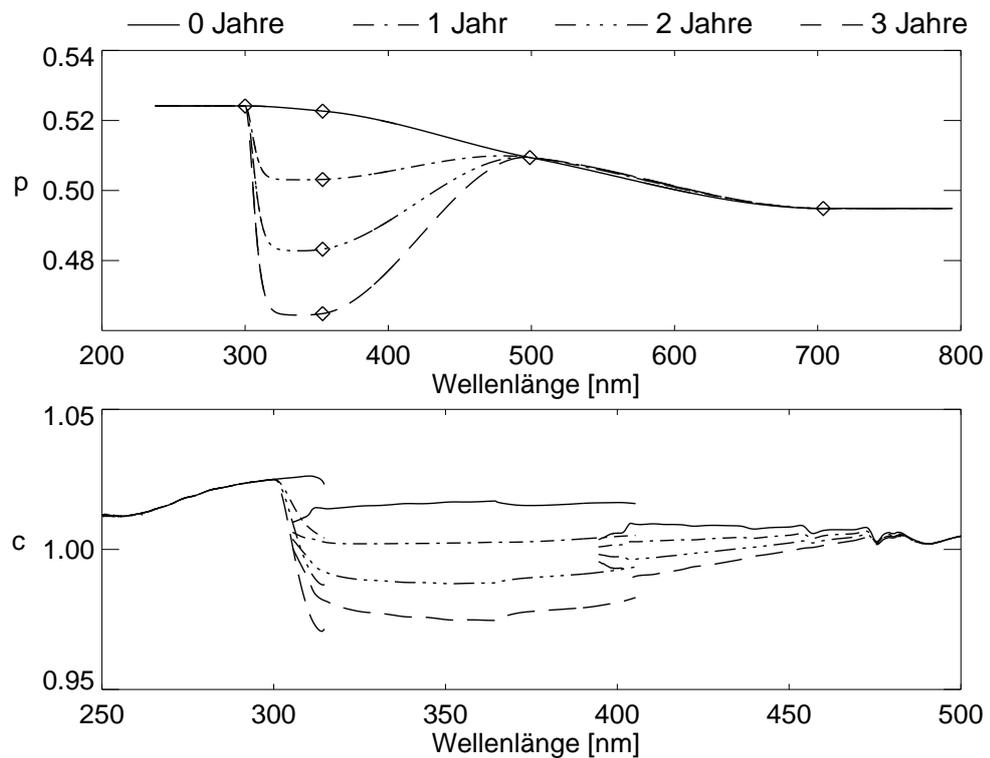


Abbildung 6.8: Degradation der Polarisationskorrekturfunktionen als Folge der $PMD\ 1$ Degradation in den ersten 3 Jahren. **Oben:** Funktion des Bruchanteils p , siehe Abbildung 5.4. **Unten:** Polarisationskorrekturfunktion c , siehe Gleichung (5.30) (Abbildung nach [90]).

von $PMD\ 1$ und die korrespondierende Summe über die Messungen der Diodenzeilen (linke und rechte Seite von Gleichung (5.16)) der ersten 3 Jahre der $GO-ME$ -Sonnenmessungen. Es zeigt sich, dass die $PMD\ 1$ -Werte sehr viel stärker abnehmen als von der allgemeinen Degradation des Gerätes in diesem Wellenlängenbereich zu erwarten ist. Die Degradationsrate beträgt etwa 6 % pro Jahr. Dieser Effekt ist nur in den PMD -Werten in binären Einheiten (BU) zu beobachten, da die radiometrisch kalibrierten PMD -Werte mit der zugehörigen Sonnenmessung der Diodenzeilen normiert werden. Diese Normierung wird auch auf die PMD -Messungen der Erdradianzen angewandt.

Die Werte in BU werden allerdings für die Bestimmung der Polarisationskorrektur benutzt. Die Degradation von $PMD\ 1$ um 6 % pro Jahr führt aufgrund von Gleichung (5.15) zu einer Unterschätzung des Bruchanteils p um etwa 5 % pro Jahr. Dies führt wegen Gleichung (5.30) zu einer Degradation der Spektren um 350 nm von etwa 1.5 % pro Jahr [89, 91]. Diese Degradation ist wegen der Interpolation der p -Werte breitbandig. Abschnitt 6.8 zeigt die Aus-

wirkungen der Degradation auf die interpolierten p -Werte und als Folge auf die Polarisationskorrekturfunktion c .

Formal ist für eine Korrektur der *PMD 1* Degradation eine Anpassung der Empfindlichkeitsfunktion ξ notwendig. Für den operationellen Betrieb lässt sich allerdings eine elegantere Lösung finden: Die Degradation von *PMD 1* wird als „negatives Streulicht“ betrachtet. In diesem Fall wird Gleichung (5.18) benutzt, um auch für *PMD 1* einen Q -Faktor zu bestimmen. Hierfür muss allerdings angenommen werden, dass die Degradation nicht oder nur schwach wellenlängenabhängig ist.

Der Faktor $2p$ in Gleichung (5.20) ist auf jeden Fall nicht anwendbar, da die zusätzliche Degradation nur an den *PMDs*, das heißt nur in der Messung des parallel polarisierten Lichtes auftritt.

In der nächsten Version 2.00 der *GOME*-Spektren wird die Degradation von *PMD 1* als negatives Streulicht behandelt, jedoch unter Beibehaltung des Faktors $2p$ [96]. Dies führt zu entsprechenden Fehlern in den Erdradianzen, wie eine einfache Abschätzung zeigt. Nach 3 Jahren ist *PMD 1* um etwa 18 % degradiert, man erhält dann $Q_{sun} = -0.22$. Bei einer fraktionalen Polarisation von $p = 0.4$ ergibt das aufgrund $2p = 0.8$ $Q_{earth} = -0.18$. Nur 80 % der Degradation wird ausgeglichen. Entsprechend werden auch nur etwa 80 % der in 3 Jahren aufgetretenen Degradation in den Spektren korrigiert. Von den etwa 4.5 % Degradation verbleiben in diesem Fall also etwa 0.9 % in den Spektren.

Für unpolarisiertes Licht tritt dieser Fehler nicht auf, er wird um so größer, je mehr das Licht polarisiert ist. Der Einfluss der *PMD 1*-Degradation auf die Ozonprofilauswertung wird in Abschnitt 8.2 untersucht, dort wird der Faktor $2p$ in der Korrektur nicht verwendet.

6.8 Parametrisierung der *BSDF*

Die *BSDF*-Funktion zur Beschreibung der Diffuserplatte (siehe Abschnitt 5.2) wird im *GDP* folgendermaßen parametrisiert:

$$\begin{aligned} BSDF(\lambda, Az, El) &= BSDF_0 \cdot Az(\alpha) \cdot El(\varepsilon) \cdot w(\lambda) & (6.4) \\ Az(\alpha) &= 1 - a\alpha^2 \\ El(\varepsilon) &= 1 + e\varepsilon \\ w(\lambda) &= 1 + \sum_{i=1}^7 c_i \cdot \lambda_*^i \quad \text{with : } \lambda_* = \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} \end{aligned}$$

Die Parameter $BSDF_0$, α , ε sowie die Wellenlängenabhängigkeit $w(\lambda)$ sind Teil der Kalibrationsparameter. $Az(\alpha)$ und $El(\varepsilon)$ beschreiben die Abhängigkeit vom Azimut- bzw. Elevationswinkel der Einfallrichtung des Sonnenlichtes. Beide variieren mit einem jährlichen Zyklus aufgrund der elliptischen Bahn der Erde um

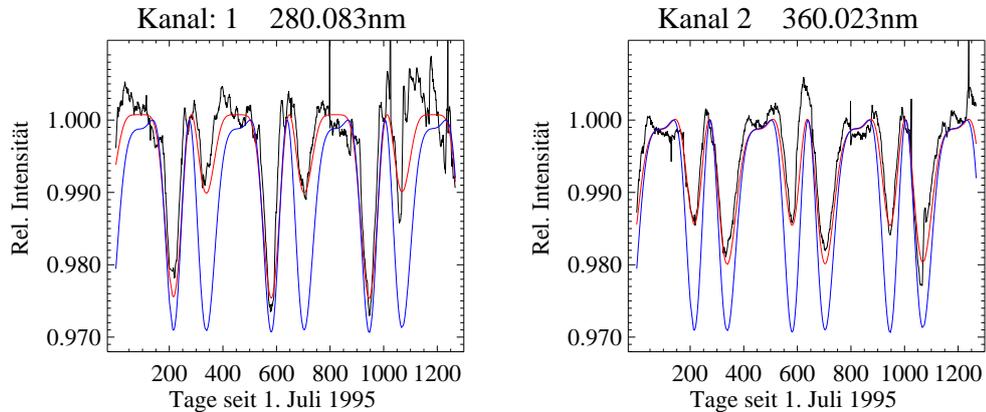


Abbildung 6.9: Änderungen des Azimutwinkels der Sonne gegenüber dem Diffruser verursachen jährliche Variationen in der Intensität der Sonnenspektren. **Schwarz:** Variation der Intensität aufgrund der Azimutwinkeländerung. **Blau:** Bisher verwendete symmetrische Parametrisierung. **Rot:** Neue asymmetrische Parametrisierung. (Abbildung aus [1])

die Sonne. Bei Untersuchungen der *PMD*-Werte der Sonnenmessung wurde neben der Degradation ein jährlich wiederkehrendes *W*-förmiges Muster beobachtet (siehe Abbildung 6.7).

Arbeiten von Ernst Hegels haben gezeigt, dass die Ursache eine unzureichende Beschreibung der Azimutabhängigkeit der *BSDF*-Funktion ist [1]. Die Beschränkung auf einen Parameter *a* gemäß Gleichung (6.5) setzt eine symmetrische Abhängigkeit vom Azimutwinkel voraus. Es wurde gezeigt, dass auch eine asymmetrische Komponente vorhanden ist, so dass als neue Parametrisierung vorgeschlagen wird [46]:

$$Az(\alpha) = 1 + a_1\alpha - a_0\alpha^2 \quad (6.5)$$

Die Parameter a_0 und a_1 wurden für jede Wellenlänge durch einen Fit in einer Zeitreihe von *GOME*-Sonnenspektren bestimmt, dividiert durch ein Referenzspektrum, jeweils ohne Korrektur der Azimutabhängigkeit. Der quadratische Term ist dabei Wellenlängenunabhängig, während der Asymmetrieterm in Kanal 2 und besonders in Kanal 1 eine starke Wellenlängenabhängigkeit zeigt.

Abbildung 6.9 zeigt die Parametrisierung der Azimutabhängigkeit nach der bisherigen und nach der neuen Form im Vergleich zur tatsächlichen Winkelabhängigkeit für zwei ausgewählte Wellenlängen in Kanal 1 und 2. Die neue Parametrisierung gibt die beobachtete Azimutabhängigkeit sehr viel besser wieder.

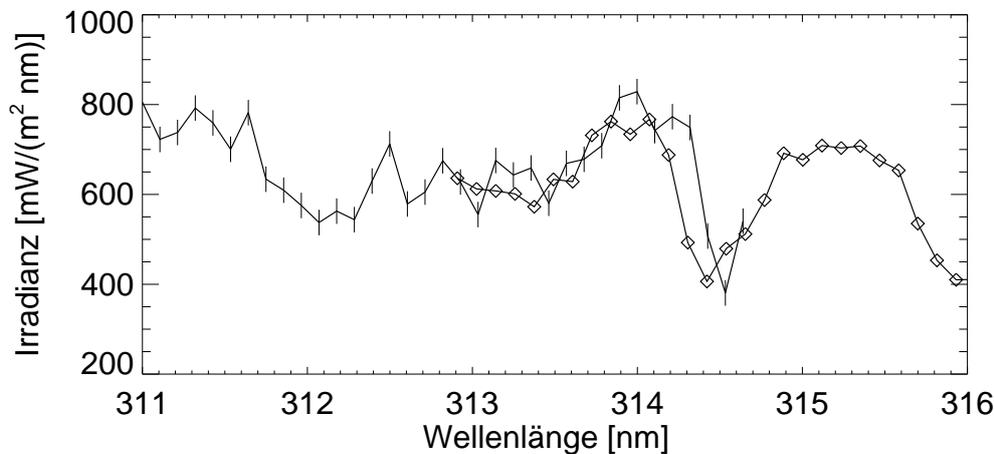


Abbildung 6.10: Ausschnitt eines Sonnenspektrums im Überlappbereich von Kanal 1 und 2. Die Spektralpunkte von Kanal 1 sind durch senkrechte Striche, die von Kanal 2 durch Rauten markiert.

6.9 Interferenzmuster am Diffuser

Der Diffuser zur Abschwächung der Sonnenstrahlung ist eine aufgeraute Aluminiumplatte, die das Licht diffus zurückstreuen soll. Im Nachfolgegerät *SCIAMACHY* wird dasselbe Prinzip verwendet. Bei der Kalibration dieses Gerätes ist ein unerwarteter Effekt aufgetreten: Es gibt winkelabhängige spektrale Strukturen in der Streufunktion des Diffusers. Dies wird durch eine nicht perfekte Aufrauung der Oberfläche des Diffusers erklärt, die Interferenzmuster im rückgestreuten Licht verursachen. Ein Effekt, der durch ein solches Phänomen erklärt werden kann, wurde auch bei *GOME* beobachtet. Die Bestimmung von NO_2 mittels des *DOAS*-Verfahrens lässt sich durch die Wahl unterschiedlicher Sonnenspektren beeinflussen [70]. Statt des jeweils aktuellen Sonnenspektrums wurde ein Spektrum mit festem Datum verwendet, so dass statt der zyklisch im Laufe eines Jahres variierenden Winkel, unter dem der Diffuser beleuchtet wird, immer derselbe Winkel verwendet wird. Es wurden deutliche Abweichungen in den NO_2 Gesamtsäulen beobachtet.

6.10 Spektrale Kalibrierung

Die spektrale Kalibrierung von *GOME* benutzt die Messungen der PtCrNe-Gasentladungslampe. Die Position der Spektrallinien auf dem Detektor wird bestimmt, anschließend werden diese Punkte mit Hilfe eines angepassten Polynoms dritter oder vierter Ordnung interpoliert und so allen Diodenpixel eine Wellenlänge zuge-

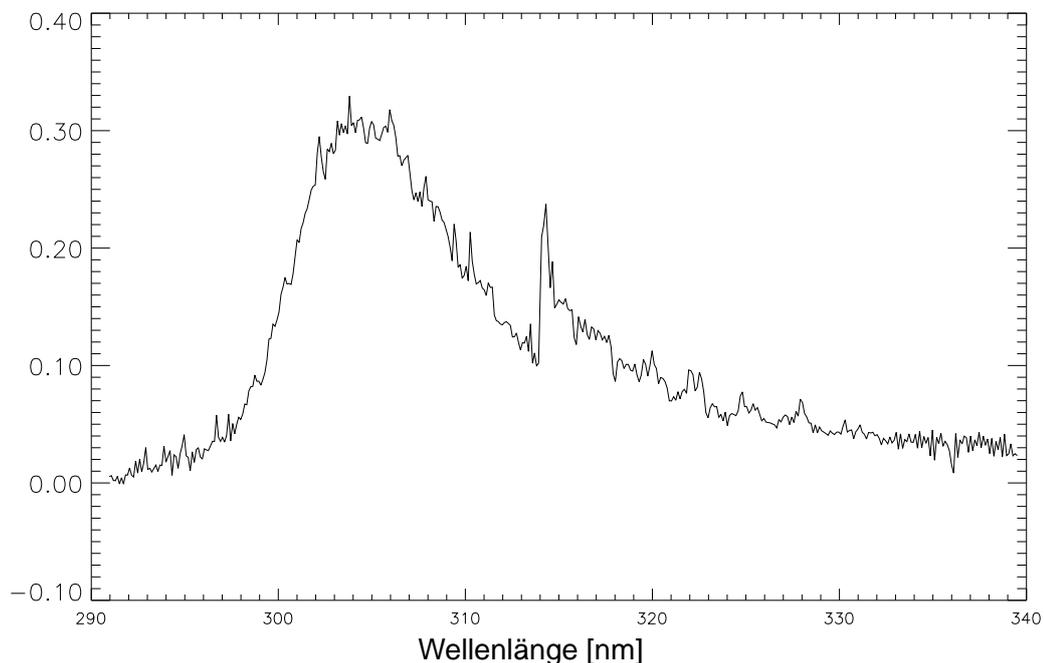


Abbildung 6.11: Differenz zwischen dem Logarithmus der sonnennormierten Strahlung und dem mit den a-priori-Profil von GOMETRAN bestimmten Spektrum. Die globale Form mit einer Differenz bis 0.3 wird durch die Differenz zwischen wahren und a-priori Profil bestimmt. Bei 314 nm liegt die Grenze zwischen Kanal 1 und Kanal 2, der Sprung ist deutlich zu erkennen.

ordnet. Dies führt zu einer Extrapolation jeweils an den Enden der Diodenzeilen. Die letzte nutzbare Spektrallinie in Kanal 1 liegt bei 306.56045 nm, die erste in Kanal 2 bei 321.91221 nm. Dazwischen wird extrapoliert. Abbildung 6.10 zeigt die Folgen am Beispiel eines Sonnenspektrums. Dargestellt sind die beiden von Kanal 1 und 2 im Überlappbereich gemessenen Spektren. Man erkennt deutlich, dass sie um etwa 1 nm gegeneinander verschoben sind.

6.11 Folgen für FURM

In Abbildung 6.11 ist die Differenz zwischen dem Logarithmus der sonnennormierten Strahlung und dem mit den a-priori-Profil von GOMETRAN bestimmten Spektrum dargestellt. Die globale Abweichung über den Spektralbereich wird durch die Differenz des a-priori Zustandes zum wahren Zustand der Atmosphäre verursacht. Bei 314 nm ist die Grenze zwischen den Kanälen 1 und 2. Dort ist ein Sprung zu sehen, die Spektren aus beiden Kanälen passen nicht zusammen. Ein

solcher Sprung ist immer in vergleichbarer Größenordnung zu beobachten. Die Kalibration des Überlappbereiches und seiner Umgebung ist offensichtlich fehlerhaft. Möglichen Ursachen wurden in den vorangegangenen Abschnitten genannt, insbesondere Ungenauigkeiten in der ursprünglichen Kalibration (Abschnitt 6.2) und in der spektralen Kalibrierung (Abschnitt 6.10) kommen hier in Frage. Insbesondere können Wechselwirkungen zwischen diesen beiden Problemen eine Rolle spielen, da alle Kalibrationsfunktionen vor ihrer Anwendung auf das aktuelle Wellenlängengitter interpoliert werden. Dies ist in den Überlappbereichen ein problematisches Vorgehen, da hier in den Kalibrationsfunktionen starke Gradienten auftreten. Bisher ist aber die Ursache der beobachteten Inkonsistenz zwischen Kanal 1 und 2 ungeklärt.

In *FURM* wird dieser Sprung durch die Einführung der Chebyshev–Polynome berücksichtigt, diese können durch die Möglichkeit eines Offsets die Spektren im Überlappbereich angleichen, siehe hierzu Abschnitt 4.4. Die Nützlichkeit dieser effektive Korrektur wird in Abschnitt 8.1 anhand der im folgende Kapitel vorgestellten Testdatensätze untersucht.

Der Einfluss der vorgeschlagenen Verbesserungen bezüglich der Degradation von *PMD 1* (Abschnitt 6.7) und der Parametrisierung der *BSDF* (Abschnitt 6.8) auf die Ozonprofilauswertung wird in den Abschnitten 8.2 und 8.1 untersucht werden. Der sich aus den Mondbeobachtungen ergebenden Vermutung, dass die Degradation der spektralen Kanäle (Abschnitt 6.3) von der Stellung des Abtastspiegels abhängt, wird in Abschnitt 8.4 nachgegangen.

Kapitel 7

Die Vergleichsdatensätze

Im Folgenden werden die Ozonsondenmessungen vorgestellt, die in den nächsten beiden Kapiteln zur Bewertung von Änderungen in der Kalibration und in den klimatologischen Daten verwendet werden. Zuvor werden die statistischen Größen, die zum Vergleich der Messungen verwendet werden, vorgestellt.

7.1 Statistische Größen

Die relative Abweichung A zweier Größen a, b wird üblicherweise durch

$$A = \frac{b - a}{a} \quad (7.1)$$

definiert. Wenn allerdings a gegen Null geht, erhält man beliebig große Werte für die relative Abweichung, auch wenn die absolute Abweichung im jeweiligen Kontext gering ist. Statistische Aussagen aufgrund von Gleichung (7.1) sind dann wenig aussagekräftig. Für den Vergleich von *GOME*-O₃-Profilen mit den Profilen anderer Instrumente ist eine geänderte Definition der relativen Abweichung sinnvoller. Anstatt im Nenner eines der beiden Profile zu verwenden, die in einzelnen Fällen sehr klein werden können, wird ein klimatologisches Profil benutzt. In dieser Arbeit ist dies immer das in der *GOME*-Auswertung verwendete a-priori Profil, also entnommen aus der *KNMI*-Klimatologie [37, 38]. Die relative Abweichung A ist dann die absolute Abweichung des Profils von *GOME* P_{GOME} zum Profil des anderen Instrumentes P_{Instr} , skaliert mit dem klimatologischen Profil $P_{Klimatologie}$:

$$A = \frac{P_{GOME} - P_{Instr}}{P_{Klimatologie}} \quad (7.2)$$

Diese Definition ermöglicht statistische Aussagen über die relativen Unterschiede zweier Profile auch in den Höhen, in denen sehr niedrige Ozongehalte möglich sind, insbesondere in der Nähe der Tropopause.

Im Folgenden ist mit *relativer Abweichung* zwischen *GOME* und anderen Profilen immer die mit dem klimatologischen Profil gewichtete absolute Abweichung gemäß Gleichung (7.2) gemeint. In den weiteren Abschnitten werden folgende statistische Größen zur Bewertung der Abweichungen A in einem Ensemble von N paarweisen Messungen P_{GOME} und P_{Instr} herangezogen:

1. Die mittlere relative Abweichung *MRA*:

$$MRA = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{P_{GOME,i} - P_{Instr,i}}{P_{Klimatologie}} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} A_i. \quad (7.3)$$

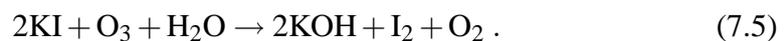
2. Die Standardabweichung der mittleren relativen Abweichung *SMRA*:

$$SMRA = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=0}^{M-1} (A_i - MRA)^2}. \quad (7.4)$$

Die mittlere relative Abweichung gibt die systematischen Abweichungen zwischen den beiden Datensätzen an. Die Standardabweichung der relativen Abweichung liefert eine Aussage über die Signifikanz der gefundenen relativen Abweichung.

7.2 Ozonsonden

Ozonsonden messen den Ozongehalt der Atmosphäre *in-situ* während des Aufstiegs an einem Ballon. Die Messung beruht auf einer elektrochemischen Reaktion, bei der gelöstes Kaliumiodid mit Ozon reagiert



Die *ECC*-Sonden (*Elektrochemical Concentration Cell*) verwenden zwei Reaktionszellen mit unterschiedlicher Konzentration der Reaktionslösung. Ozonhaltige Luft wird durch die Kathodenzelle gepumpt und oxidiert nach Gleichung (7.5) Jodid zu Jod. Die Reduktion des Jodid an der Kathode erzeugt dann einen Stromfluss proportional zum Ozonpartialdruck [56]. Die *Brewer-Mast*-Sonden verwenden statt zweier Halbzellen ein Zelle mit zwei unterschiedlichen Elektroden, einer Platin- und einer Silberelektrode [13]. Die meisten Sondenstationen verwenden *ECC*-Sonden.

Prinzipiell ist die Höhe, bis zu der Ozonsonden messen können, durch den Tripelpunkt der Kaliumiodid-Lösung begrenzt, dieser wird bei etwa 6 hPa (35 km) erreicht. Im Regelfall platzen die Ballons allerdings schon vorher. Die beste Genauigkeit erreichen Ozonsonden in der unteren Stratosphäre (11 bis 26 km), darüber nimmt der Fehlerwert auf bis zu 16 % zu, und oberhalb von 10 hPa (31 km)



Abbildung 7.1: Lage der verwendeten Ozonsondenstationen: Hohenpeißenberg und Lauder sowie die Stationen des SHADOZ Netzwerkes.

sind die Werte nicht mehr zuverlässig. In der Troposphäre werden Genauigkeiten um 10 % erreicht.

Ozonsonden werden zusammen mit Standardradiosonden gestartet, die Druck- und Temperaturmessungen durchführen. Diese erlauben nicht nur die konsistente Umrechnung der Volumenmischungsverhältnisse in Teilchenzahldichte, sondern werden auch für die Berechnung der Pumpeffizienzkorrektur benötigt. Wegen der Streuung in der Fertigung der Zellen wird zusätzlich ein Korrekturfaktor C bestimmt, der das Profil konsistent mit Gesamt Ozonmessungen anderer Instrumente macht. Verwendet werden dazu gleichzeitig durchgeführte Messungen mit einem Dobsonspektrometer oder Satellitenmessungen, normalerweise *TOMS*. Ein Korrekturfaktor nahe 1 deutet auf eine gute Vorbereitung der Sonde hin, die *WMO* (*World Meteorological Organization*) verlangt Werte im Bereich von $0.8 < C < 1.3$.

Für diese Arbeit wurden drei Datensätze ausgewählt, die jeweils repräsentativ sind für drei Zonen:

Nördliche mittlere Breiten: In Hohenpeißenberg werden seit 1967 regelmäßig Ozonsonden vom Typ *Brewer–Mast* gestartet.

Südliche mittlere Breiten: Lauder in Neuseeland ist eine der wenigen Stationen auf der südlichen Hemisphäre, die regelmäßig Ozonsondenaufstiege haben.

Tropen: Das SHADOZ–Netzwerk (*Southern Hemisphere ADditional OZonesondes*) umfasst 10 Stationen im Tropischen Bereich, die im Zeitraum von 1998 und 1999 koordiniert Ozonsondenstarts durchführen.

In Hohenpeißenberg werden seit 1967 regelmäßig Ozonsonden vom Typ *Brewer–Mast* gestartet. Die Sonden haben einen vergleichsweise kleinen C –Faktor von 1.095 ± 0.063 [15, 47] und gelten daher als sehr zuverlässig. Die Station wird vom *DWD (Deutscher Wetter Dienst)* betrieben. In Lauder werden Ozonsonden vom Typ *ECC* verwendet. Ein Vergleich mit mehreren anderen bodengestützten Messungen und mit Satelliteninstrumenten zeigte eine Übereinstimmung von 5–10 % zwischen 15 und 32 km. Die Station wird vom *NIWA National Institute of Water and Atmospheric Research* betrieben.

In den Tropen und Subtropen stehen nur sehr wenige Daten von Ozonsonden zur Verfügung. Das SHADOZ–Projekt dient dazu, den Start von Ozonsonden und die Bereitstellung der Daten für die wissenschaftliche Nutzung zu koordinieren sowie zusätzlich Sondenstarts zu ermöglichen. Insbesondere ist das Ziel, neuen Algorithmen zur Bestimmung von troposphärischem Ozon aus *TOMS*–Daten die Validierung mit Ozonsondendaten in äquatorialen Breiten zu ermöglichen [93, 103]. Zum Zeitpunkt dieser Arbeit ist das Projekt noch nicht abgeschlossen, die Daten werden noch als vorläufig bezeichnet. Es gibt noch keine Veröffentlichung zur Qualität der gewonnenen Daten. Die Verwendung dieser Datensätze zeigt daher die Notwendigkeit des SHADOZ–Projektes.

Die teilnehmenden Stationen sind im einzelnen Ascension Island, Amerikanisch–Samoa, Fiji, Irene (Südafrika), Java (Indonesien), Nairobi (Kenia), Natal (Brasilien), La Réunion (Frankreich, Indischer Ozean), San Cristóbal (Galapagos–Inseln) und Tahiti, siehe Abbildung 7.1. Messungen mit unzureichender Höhe (weniger als 30 km) sowie mit Teilstücken ohne Messung wurden nicht verwendet.

7.3 Vorbereitung der Sondendaten

Das Volumenmischungsverhältnis c der Ozonsondendaten wird unter der Verwendung der Druck– und Temperaturprofile p und T in Teilchenzahldichte N umgerechnet:

$$N = c \frac{p}{kT} \quad \text{mit } k = 1.380658 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} : \text{ Boltzmannkonstante .} \quad (7.6)$$

Ozonsonden messen mit einer Höhenauflösung von 50 (*ECC*) bis 200 m (*Brewer–Mast*). Dieses Höhengitter muss in das 1 km–Gitter von *FURM* übertragen werden, um Vergleiche durchführen zu können. Die einfachste Möglichkeit der direkten Interpolation ist ungeeignet, da unter Umständen feine Strukturen ausgelassen werden. Hier wurde daher ein anderer Weg gewählt. Die Profile werden auf ein

äquidistantes 1 m Gitter interpoliert und dann mit einer normierten Dreiecksfunktion mit 1000 m Halbwertsbreite gefaltet. Das so geglättete Profil kann dann im 1 km Abstand abgetastet werden, ohne das die Ozonsäule sich ändert.

Kapitel 8

Folgen der Kalibrationsprobleme

Die im vorigen Kapitel vorgestellten Testdatensätze werden hier verwendet, um die Auswirkungen auf die Ozonprofilauswertung der in Kapitel 6 vorgestellten Kalibrationsprobleme zu untersuchen, sofern bereits Lösungen für diese Probleme entwickelt wurden. Dies sind die *PMD 1*-Degradation (Abschnitt 8.2) und die fehlerhafte Parametrisierung der *BSDF*-Funktion (Abschnitt 8.3). Zuvor wird die Notwendigkeit der effektiven Kalibrationskorrektur durch die Chebyshev-Polynome in *FURM* (siehe Abschnitt 4.4) gezeigt. Abschnitt 8.4 beschäftigt sich mit der Möglichkeit, dass die Kalibrationsprobleme von der Stellung des Abtastspiegels abhängen. Hierfür wird die sich seit Juli 1998 bietende Möglichkeit, Grundpixel beliebig zu mitteln, genutzt. Im letzten Abschnitt werden die sich aus den Kalibrationsproblemen für *FURM* ergebenden Folgen zusammengefasst. In diesem Kapitel sind nur die mittleren relativen Abweichungen dargestellt, die zugehörigen mittleren Profile finden sich im Anhang C.

8.1 Die Chebyshev-Polynome

Die Einführung der Chebyshev-Polynome, wie sie in Abschnitt 4.4 beschrieben werden, diente der effektiven Korrektur der Kalibrationsprobleme in den *GOME*-Spektren. In diesem Abschnitt werden die Auswertung der Testdatensätze mit und ohne Chebyshev-Polynome einander gegenübergestellt. Abbildung 8.1 zeigt die mittleren relativen Abweichungen für diese beiden Fälle. In Hohenpeißenberg wird ohne Chebyshev-Polynome das Ozonmaximum um 20 % überschätzt, während mit dieser Korrektur das gesamte stratosphärische Profil gut wiedergegeben wird. Im Lauder-Datensatz werden die Ergebnisse durch die Polynome ebenfalls deutlich verbessert, die Abweichungen liegen nur noch in Tropopausenähe bei über 10 %. Im tropischen Datensatz haben die Chebyshev-Polynome nur wenig Wirkung. Die Probleme in der Auswertung müssen hier andere Ursachen haben als in den mittleren Breiten. Dies ist möglicherweise eine Folge des in größte-

rer Höhe liegenden Ozonmaximums, dadurch stammt die Information hierüber von kürzeren Wellenlängen, bei denen durch stärkere Degradationseffekte größere Probleme zu erwarten sind.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass die Chebyshev–Polynome für die Bestimmung von Ozonprofilen in den mittleren Breiten derzeit unverzichtbar sind. Die Auswertung in den Tropen kann davon leider nicht profitieren.

8.2 Degradation von *PMD 1*

Entsprechend der im Abschnitt 6.7 vorgeschlagenen Korrektur der Degradation von *PMD 1* als „negatives Streulicht“ wurden für alle *GOME*–Spektren in den Testdaten die Streulichtkorrekturterme nach Gleichung (5.18) bestimmt. Mit diesen wurde dann ein neuer Wert für den fraktionalen Polarisationsgrad p nach Gleichung (5.19) für *PMD 1* berechnet und für eine korrigierte Polarisationskorrektur verwendet. Technisch wurde hierfür einfach der entsprechende p –Wert im Level–1 Datenprodukt ausgetauscht. Die Interpolation der p –Werte und Bestimmung der Polarisationskorrekturfunktion wird erst vom Extraktionsprogramm durchgeführt.

Diese Spektren wurden dann erneut für die Testdatensätze ausgewertet, die relativen Abweichungen sind in Abbildung 8.2 abgebildet. Es ist praktisch kein Einfluss auf die erhaltenen Profile zu beobachten. Der eher breitbandige Effekt der *PMD 1*–Degradation auf die Spektren wird offensichtlich fast vollständig von den Chebyshev–Polynomen sowie von den breitbandigen skalaren Parametern kompensiert.

8.3 *BSDF* Azimutwinkelabhängigkeit

Die bisher verwendete Beschreibung der Azimutwinkelabhängigkeit der Streueigenschaften des Diffusers der Kalibrationseinheit war für einige Monate im Jahr ungeeignet. Dies betrifft die Zeiträume 5. Januar bis 5. März und 8. Mai bis 7. Juli, siehe Abbildung 6.9. Für diese Zeiträume wurden die Spektren gemäß den Vorschlägen in Abschnitt 6.8 korrigiert und dann erneut ausgewertet. Auch diese Auswertung ist der Auswertung ohne Korrektur gegenübergestellt. In Abbildung 8.3 sind die mittleren, relativen Abweichungen zu den Sondenmessungen dargestellt. Auch hier ist praktisch kein Einfluss der Korrektur auf das Ergebnis der Auswertung zu sehen. Der Grund ist vermutlich derselbe wie bereits bei der Korrektur der *PMD 1* Degradation erläutert: Der breitbandige Effekt dieses Fehlers wird fast vollständig von den Chebyshev–Polynomen sowie von den breitbandigen skalaren Parametern kompensiert.

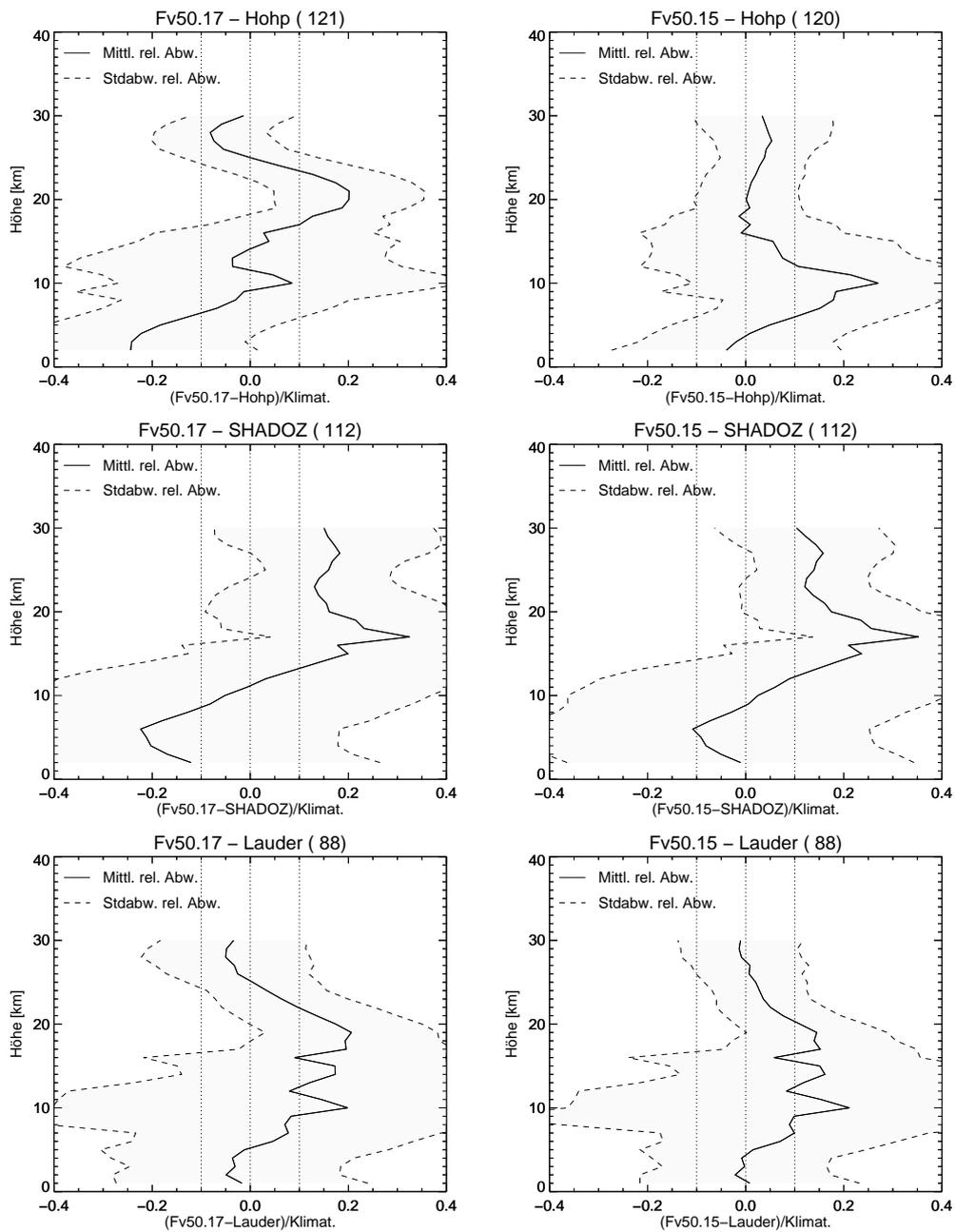


Abbildung 8.1: Vergleich der Auswertungen mit und ohne Verwendung der Chebyshev–Polynome. **Linke Spalte:** Auswertung ohne Chebyshev–Polynome. **Rechte Spalte:** Auswertung mit Chebyshev–Polynomen. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder.

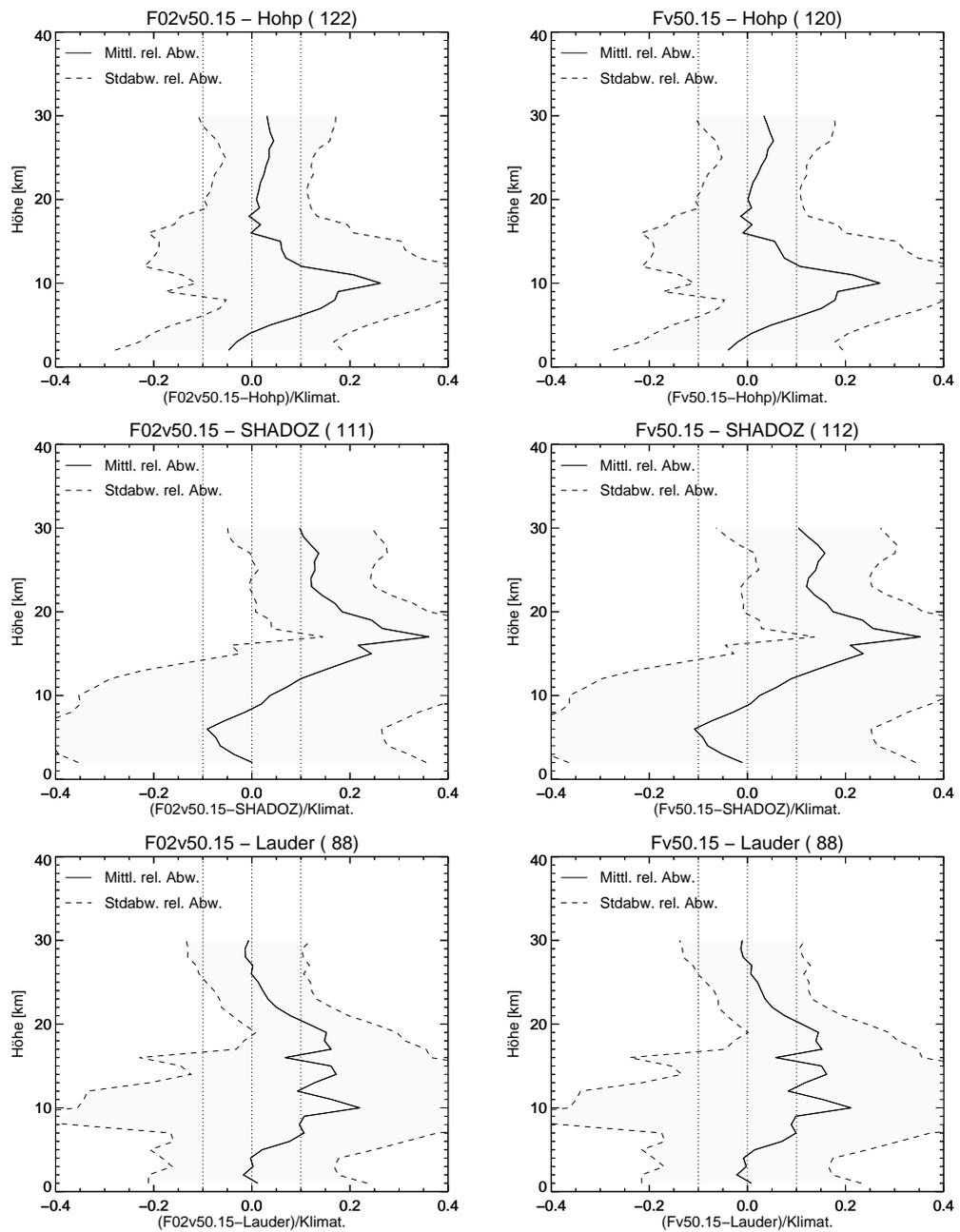


Abbildung 8.2: Einfluss der Degradation von PMD 1 auf die relative Abweichungen von den Sondendatensätzen. **Linke Spalte:** PMD 1 Degradation korrigiert. **Rechte Spalte:** PMD 1 Degradation nicht korrigiert. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder.

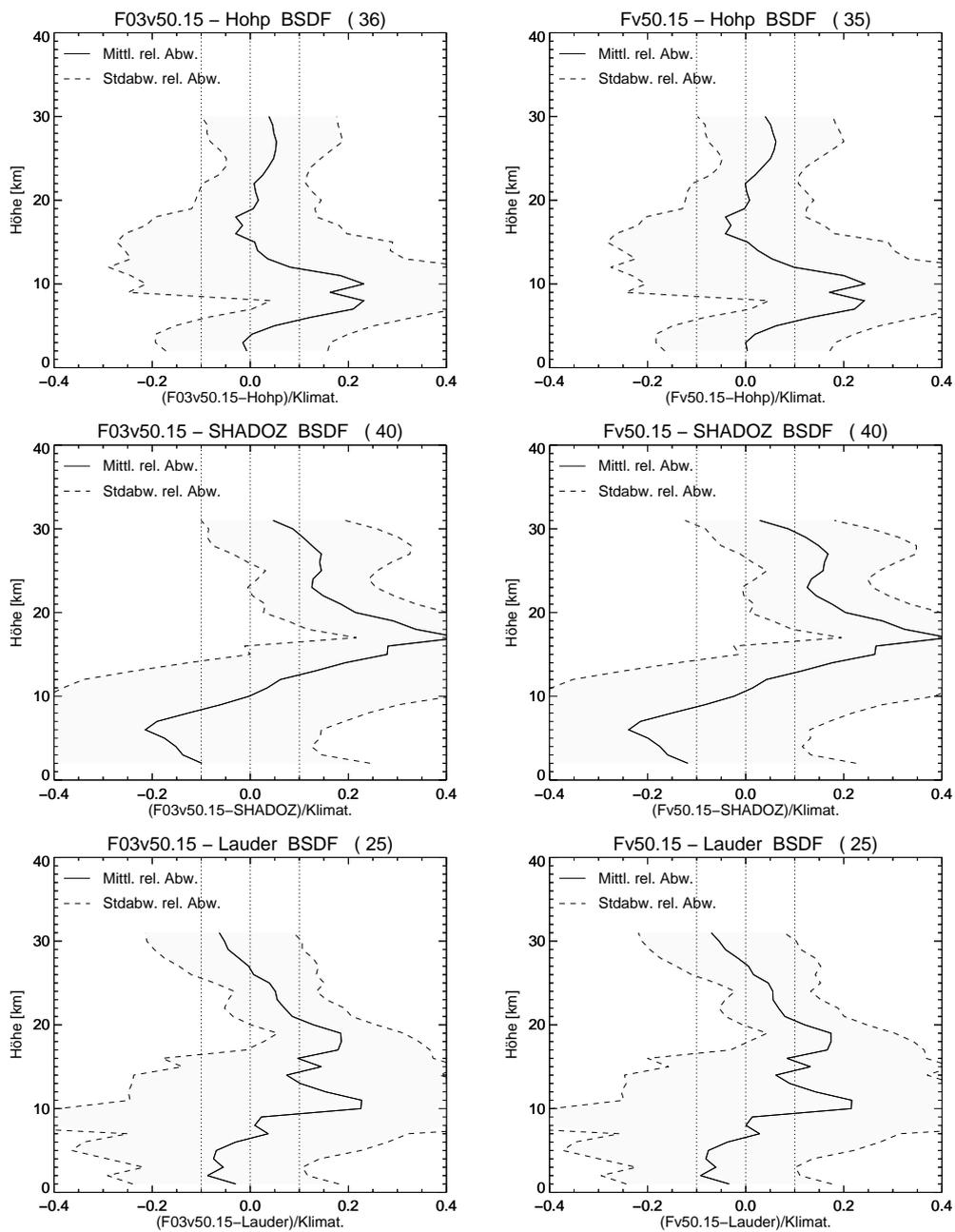


Abbildung 8.3: Einfluss der falschen Parametrisierung der Azimutwinkelabhängigkeit der BSDF-Funktion auf die relative Abweichungen von den Sondendatensätzen. **Linke Spalte:** Azimutwinkel korrekt parametrisiert. **Rechte Spalte:** Azimutwinkel falsch parametrisiert. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder.

8.4 Neue Grundpixel

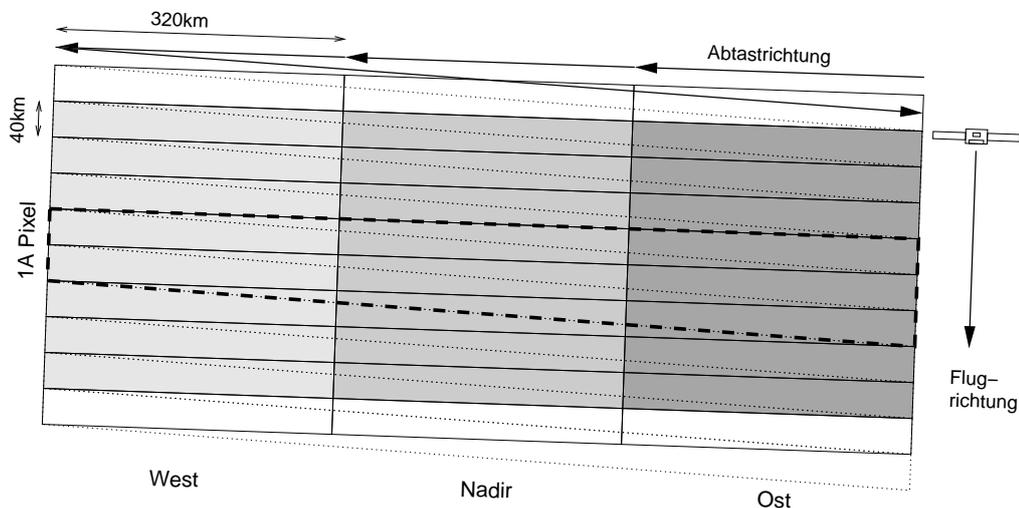


Abbildung 8.4: Illustration der Grundpixeltypen in FURM, siehe Text. **Ge-**
strichelt: Standard 1A-Pixel. **Grau unterlegt:** Gemittelte Ost-,
Nadir-, West-Pixel mit 12 s Integrationszeit.

Seit Juli 1998 ist die Grenze zwischen Band 1A und Band 1B von 307 nach 283 nm verschoben worden. Damit ist Band 1A nicht mehr Teil des von FURM verwendeten Spektralbereichs, der ja bei 290 nm beginnt, und die Mittelung der Spektren ist nicht mehr an die Integrationszeit von Band 1A gebunden. In diesem Abschnitt wird dies genutzt, um mögliche Abhängigkeiten der Auswertung von der Stellung des Abtastspiegels zu untersuchen. Bisher wurden die zu einem 1A-Pixel gehörenden 8 Grundpixel zusammengefasst: Ost, Nadir, West, Rückschwenk, Ost, Nadir, West und Rückschwenk. Hier wurden nun stattdessen jeweils 8 Ost-, 8 Nadir- und 8 West-Pixel gemittelt. Die Verwendung einzelner Ost-, Nadir-, oder West Grundpixel kommt nicht in Frage, da in diesem Fall das Signal zu Rausch Verhältnis deutlich schlechter wäre und die Vergleichbarkeit der Ergebnisse mit der sonst verwendeten Konfiguration nicht mehr gegeben ist.

In Abbildung 8.4 sind die verschiedenen Grundpixeltypen illustriert. Diese Pixel sind quadratisch mit einer Kantenlänge von 320 km.

Aus dem Testdatensatz Hohenpeißenberg wurden für alle Koinzidenzen, die nach dem Wechsel der Kanalgrenze zu finden waren, die neuen Pixel nach Abbildung 8.4 zusammengestellt und ausgewertet. Insgesamt konnten 34 Sondenprofile verwendet werden. Die mittleren relativen Abweichungen zu den Sondenmessungen sind in Abbildung 8.5 wiedergegeben. Es zeigen sich systematische Abweichungen zwischen den 3 Pixeltypen von GOME. Ost- und Nadir-Pixel zeigen ein ähnliches Verhalten: In der unteren Stratosphäre werden etwa 10 % zuwenig Ozon, in der Troposphäre etwa 10 % zuviel Ozon gesehen. Die West-Pixel geben

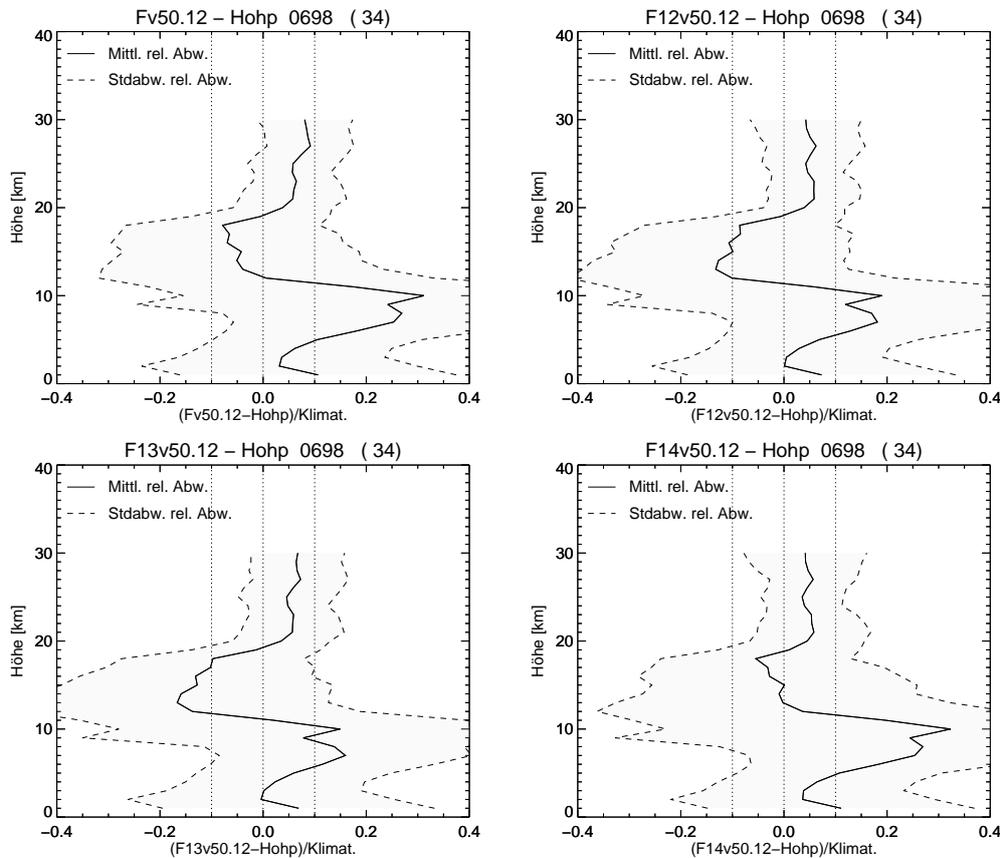


Abbildung 8.5: Die relative Abweichungen zu den Sondenmessungen in Hohenpeißenberg seit Juli 1998 für 4 verschiedene Pixelzusammenstellungen. **Oben links:** Bisherige 1A-Pixel. **Oben rechts:** Ostpixel. **Unten links:** Nadirpixel. **Unten rechts:** Westpixel.

in der unteren Stratosphäre in etwa die Messungen der Sonden wieder, während nun in der Troposphäre etwa 25 % zuviel Ozon gesehen wird. Die bisherige Zusammenstellung der Pixel, die durch die Integrationszeit von Band 1A vorgegeben war, liegt zwischen den mittleren Profilen von Ost/Nadir und West. Oberhalb von 20 km unterscheiden sich die Auswertungen praktisch nicht.

Die drei Pixel haben systematisch andere Geometrien, insbesondere andere Sonnenzenit- und Azimutwinkel. Da aber das Strahlungstransportmodell diese Geometrien vollständig berücksichtigt, sollte dies keinen Einfluss auf die erhaltenen Profile haben.

Wie in Abschnitt 6.3 erläutert, legen Untersuchungen an den Mondspektren nahe, dass die Degradation des Reflektionsvermögens des Abtastspiegels abhängig vom Reflektionswinkel ist. Da auch die Ost, West und Nadir-Messungen unter jeweils anderen Winkeln vom Abtastspiegel reflektiert werden, sind auch hier abweichende Degradationen möglich. Man beachte, dass der Reflektionswinkel

nicht symmetrisch zur Nadir-Stellung des Spiegels ist, vergleiche Abbildung 2.4. Insbesondere sind die Reflektionswinkel des Westpixels annähernd symmetrisch zu dem, unter dem der Diffuser beleuchtet wird. Nur in diesem Fall kürzt sich auch eine vom Reflektionswinkel abhängige Degradation weitgehend heraus. Wenn in den anderen beiden Fällen die Degradation von Sonnenmessung und Erdmessung voneinander abweichen, hat dies Einfluss auf die sonnennormierte Strahlung und damit auf die Ozonprofile.

Auffällig ist, dass die Westpixel im Mittel das Ozon in der unteren Stratosphäre am besten wiedergeben; dies ist gerade der Bereich, in dem die meiste Information über Ozon aus der Messung kommt, vergleiche Abschnitt 4.4 mit den Ozongewichtsfunktionen. Diese Beobachtung passt zu der Annahme einer winkelabhängigen Degradation des Abtastspiegels.

Anzumerken ist an dieser Stelle noch, dass allein die Verschiebung der Grenze zwischen Band 1A und 1B bereits Einfluss auf die gemessenen Spektren hat, selbst wenn nachträglich über den Zeitraum gemittelt wird, der sonst bereits im Detektor integriert wurde. Im Falle der längeren Integrationszeit im Instrument muss die Diodenzeile nur einmal ausgelesen werden, im Falle der kurzen Integrationszeit hingegen achtmal. Da auch das Auslesen selbst zum Detektorrauschen beiträgt, führt häufigeres Auslesen zu einem schlechteren Signal zu Rauschverhältnis. Zweitens werden bei der Integration im Gerät die durch den Messvorgang bewegten Ladungen gemittelt, während bei der Mittelung im Nachhinein kalibrierte Spektren gemittelt werden. Im Idealfall sollten beide Mittelungen natürlich dasselbe ergeben, in der Realität werden allerdings die Ungenauigkeiten der Kalibration zu unterschiedlichen Ergebnissen führen. Hier ist insbesondere das Problem der Stellung des Abtastspiegels zu nennen. Bei der Integration im Gerät werden für die radiometrische Kalibrierung die Kalibrationswerte für die Nadirstellung des Spiegels verwendet, da dies die mittlere Position der Spiegels ist. Bei der nachträglichen Mittelung werden hingegen für die Ost- und Westpixel die jeweils eigenen Werte verwendet. Der direkte Einfluss dieser Unterschiede auf die Profilauswertung lässt sich leider nicht untersuchen, da immer nur entweder die eine oder die andere Messmethode zur Verfügung steht. Für den oben vorgestellten Vergleich spielt das natürlich keine Rolle, weil nur Spektren mit nachträglicher Mittelung verwendet wurden.

8.5 Zusammenfassung

In Tabelle 8.1 werden die Kalibrationsprobleme, die bereits gefundene Lösung und die Behandlung in der Ozonprofilauswertung mit *FURM* zusammengefasst. Die mögliche Sättigung in den Kanälen 2 – 4 machte eine auf 0.375 s verkürzte Integrationszeit notwendig, so dass Band 1A eine größere Grundszene beobachtete als die anderen Bänder. *FURM* Auswertung ist daher erst nach dem 27. März

Ab-schn.	Problem der Kalibrierung	Lösung	Behandlung <i>FURM</i>
6.1	0.375s Integrationszeit (Sättigung in K. 2 – 4)	Addierung an Bord ab 27. März 96	Auswertung nur nach 27. März 96
6.2	Radiometrische Eichung	—	—
6.3	UV-Degradation	—	Sonnennormierung (zum Teil?)
6.4	Etalon	—	Sonnennormierung
6.5	Zeitverzögerung in der Detektorauslesung	—	Fehler vernachlässigbar (bei 12 s Int.)
6.6	PMD – Diodenzeilen Zuordnung	Verschiebung der Zuordnung	—
6.7	Degradation <i>PMD 1</i>	Einschalten <i>Q</i> -Faktor	Anwendung Lösung
6.8	fehlerhafte <i>BSDF</i> Beschreibung	asymmetr. <i>BSDF</i> Parametrisierung	Anwendung Lösung
6.9	Interferenzmuster am Diffuser	—	—
6.10	spektrale Kalibrierung	—	—

Tabelle 8.1: Zusammenfassung Einfluss der Kalibrationsprobleme

1996 möglich, als die Addierung der 0.375 s Daten zu 1.5 s Daten auf dem Satelliten eingeführt wurde. Die Probleme der radiometrischen Eichung, das heißt der Unsicherheiten in der Beschreibung des *air-to-vacuum* Effektes und in der Bestimmung der η -Funktion, sind derzeit noch ungelöst, eine Behandlung in *FURM* ist daher nicht möglich. Die UV-Degradation des Instrumentes spielt für *FURM* keine Rolle, da nur sonnennormierte Spektren verwendet werden, in denen sich die Degradation herauskürzt. Unsicherheiten bleiben allerdings aufgrund der beobachteten Abhängigkeit von der Stellung des Abtastspiegels, sich hieraus ergebende Differenzen würden in *FURM* zu sehen sein. Die in Abschnitt 8.4 gezeigten Ergebnisse legen eine solche Abhängigkeit nahe. Die Verwendung der sonnennormierten Strahlung kürzt ebenfalls den Etalonneffekt heraus, eine Berücksichtigung in *FURM* ist nicht notwendig. Die Zeitverzögerung in der Detektorauslesung und die dadurch verursachte Änderung des Blickfeldes mit der Wellenlänge innerhalb eines Kanales sind durch die Konstruktion der Detektoren gegeben, eine wirkliche Lösung des Problems ist daher unmöglich. In *FURM* wurden bisher immer 12 s Integrationszeit verwendet, in diesem Fall kann dieses Problem in fast allen Fällen vernachlässigt werden. Die Zuordnung der *PMD* Messungen zu der Auslesung der Diodenzeile wird seit *GDP*-Version 1.40 standardmäßig verwendet. Die

Degradation von *PMD 1* und die daraus folgenden zunehmenden Fehler in der Polarisationskorrektur können durch Benutzung des ursprünglich für die Streulichtkorrektur gedachten Algorithmus kompensiert werden. Dies wird, mit der Einschränkung der unzulässigen Verwendung der Faktors $2p$ in Gleichung (5.20), in *GDP*-Version 2.00 angewandt werden. Der Vergleich der Testdatensätze mit der *FURM*-Auswertung ohne und mit (korrekter) Korrektur zeigte praktische keine Änderung in den mittleren Abweichungen. Die fehlerhafte Beschreibung der Streueigenschaften des Diffusers durch die *BSDF* Funktion kann durch eine neue, asymmetrische Parametrisierung korrigiert werden. Auch in diesem Fall zeigt sich praktisch kein Einfluss auf die mittlere Abweichung zu den Testdatensätzen. Sowohl die *PMD 1* Degradation als auch die unzureichende *BSDF* Parametrisierung haben einen breitbandigen Effekt auf die Spektren, der bereits durch die Chebyshev-Polynome sowie die breitbandigen skalaren Parameter, insbesondere Aerosole und Albedo, kompensiert wird. Die am *SCIAMACHY* Instrument beobachteten, winkelabhängigen Interferenzmuster des Diffusers, die vermutlich auch am ähnlichen Diffuser von *GOME* auftreten, können derzeit nicht korrigiert werden. Dies ist eine wahrscheinliche Ursache der in Kapitel 11 beobachteten jährlichen Variationen in den *GOME* Gesamt ozonmessungen. Die spektrale Kalibrierung im Überlappbereich, das heißt am Ende von Kanal 1 und am Anfang von Kanal 2, ist aufgrund der in diesem Bereich notwendigen Extrapolation problematisch. Eine Lösung ist derzeit nicht bekannt. Ein möglicher Ansatz wird in [23] genannt: Statt der Linien der Spektrallampe werden Fraunhoferlinien im solaren Spektrum oder Absorptionslinien atmosphärischer Spurengase ausgewertet, um zu einer Wellenlängenzuordnung zu gelangen. Die unzureichende spektrale Kalibrierung im Überlappbereich ist besonders kritisch, da auch die Antwortfunktion H und die Polarisationsempfindlichkeitsfunktion η auf das jeweilige Wellenlängengitter interpoliert werden müssen und diese Funktionen an den Kanalenden starke Gradienten haben.

Die bisher gelösten Problemen der Kalibration (*PMD 1* Degradation und unzureichende *BSDF* Parametrisierung) werden bereits durch die effektive Korrektur mittels der Chebyshev Polynome aufgefangen. Die spektrale Kalibration im Überlappbereich und die Unsicherheiten in den Kalibrationsfunktionen sind die wichtigsten verbleibenden Probleme, die zu den Problemen vornehmlich in den tropischen Bereichen führen. Fortführende Arbeiten sind hier notwendig. Aus der Sicht der Ozonprofil auswertung muss es als sehr unglücklich bezeichnet werden, dass im *UV*-Fenster, wo die meiste Information über Ozon zu finden ist (vergleiche Abbildung 4.3), die Grenze zwischen zwei Kanälen des Instrumentes liegt.

Im folgenden Kapitel wird der Einfluss der klimatologische Daten auf die Auswertung untersucht.

Kapitel 9

Einfluss der Eingabeparameter

Im Folgenden wird die Bedeutung der a-priori-Informationen über Ozon, Druck und Temperatur untersucht. In beiden Fällen stehen für *FURM* jeweils Profile aus der *MPI*-Klimatologie zu Verfügung. Für Ozon steht als Alternative die *KNMI*-Klimatologie, die aus Messungen zusammengestellt wurde, zur Verfügung. Insbesondere wird in dieser Arbeit erstmals systematisch der Einfluss der Varianzen der Ozonklimatologie auf die Auswertung der Profile untersucht. Die meteorologischen a-priori-Profile können zusätzlich aus assimilierten meteorologischen Feldern entnommen werden. Zur Untersuchung hier, wie in der gesamten Arbeit, werden *UKMO*-Daten [88] verwendet. In diesem Kapitel sind nur die mittleren relativen Abweichungen dargestellt, die zugehörigen mittleren Profile finden sich im Anhang C.

9.1 Die a-priori Ozonprofile

Die a-priori-Ozonprofile müssen einer Klimatologie entnommen werden. Für *FURM* stehen derzeit die *MPI*-Klimatologie [14], die auf einem 2D-Modell beruht, sowie die *KNMI*-Klimatologie [37, 38], die aus Ozonsonden- und Satellitenmessungen zusammengestellt wurde (siehe Abschnitt 4.1). Die *MPI*-Klimatologie ist daher keine Klimatologie im eigentlichen Sinne, sie wurde in der ersten Entwicklungsphase von *FURM* verwendet, weil zu der Zeit noch keine andere Klimatologie zur Verfügung stand.

Abbildung 9.1 zeigt die relativen Abweichungen für die drei Testdatensätze, die sich aus der Verwendung der beiden Klimatologien ergeben. Für alle drei Fälle ist die Qualität der *GOME*-Profile erheblich schlechter, wenn die *MPI*-Klimatologie verwendet wird. In Hohenpeißenberg sieht *GOME* in diesem Fall bis zu 30 % zu wenig Ozon, während in der Troposphäre bis zu 40 % zuviel gesehen wird. In den tropischen Regionen wird mit beiden Klimatologien oberhalb von 20 km 10 bis 15 % zuviel Ozon von *GOME* beobachtet. Unterhalb diese Höhe ist mit der

MPI-Klimatologie eine relative Abweichung von +40 bis -35 % zu sehen. Für Lauder variieren die Abweichungen, die bei Verwendung der Modellklimatologie auftreten, in der mittleren und unteren Stratosphäre zwischen +15 und -15 %. In der Troposphäre werden bis zu 60 % zuviel Ozon gesehen.

Die Sondendaten sind nur nach dem Kriterium eines Überfluges von *GOME* ausgewählt worden, das völlig unabhängig vom Zustand der Atmosphäre ist. Die Ozonprofile in diesen Datensätze sind daher zufällig aus dem Bereich aller möglichen Ozonprofile ausgewählt und sollten daher deren Statistik gehorchen. Diese wird aber gerade durch die Klimatologie wiedergegeben, sofern diese eine gute Klimatologie ist. Insbesondere ist zu erwarten, dass die mittleren Sondenprofile den mittleren klimatologischen Profilen entsprechen. In Abbildung 9.2 werden daher die mittleren Sondenprofile der drei Testdatensätze mit den mittleren Profilen der beiden Klimatologien verglichen.

Die *MPI*-Klimatologie weicht bei allen drei Testdatensätzen sehr viel stärker vom Sondenmittel ab als die *KNMI*-Klimatologie. In der Tropopausenregion und unteren Stratosphäre liegen die Abweichungen bei bis zu 100 %. Für die nördlichen mittleren Breiten ist das mittlere *MPI*-Profil um etwa 2 km gegenüber dem mittleren Profil nach oben verschoben. Das Ozonmaximum ist in allen drei Fällen um etwa 20 % zu groß.

Die *KNMI*-Klimatologie entspricht besser den mittleren Profilen der Sondenstationen, es gibt jedoch auch hier deutliche Unterschiede. In Hohenpeißenberg wird nach dieser Klimatologie 10 (im Ozonmaximum) bis 20 % (in der Tropopause) mehr Ozon erwartet als tatsächlich beobachtet wird. Im tropischen Datensatz entspricht zwar das Ozonmaximum der Klimatologie dem tatsächlich beobachteten, unterhalb jedoch nimmt die relative Abweichung bis zur Tropopause auf über 30 % zu. Das klimatologische Profil ist um etwa 1 km nach unten verschoben, der Gradient in der Teilchenzahldichte verursacht dann diese Zunahme in der relativen Abweichung. In der südlichen Hemisphäre stimmt diese Klimatologie recht gut mit dem mittleren Ozonprofil der Sonde überein, es ist nur ein über die gesamte Höhe geringfügig um 5 % erhöhtes Ozon zu sehen.

Überraschend ist die relativ große Abweichung der *KNMI*-Klimatologie im Vergleich mit Hohenpeißenberg, da die Klimatologie hier auf einer großen Anzahl von Messungen aufgrund der zahlreichen Ozonsondenstationen in den nördlichen mittleren Breiten beruht. Möglicherweise ist der Datensatz, der auf Messungen in den achtziger Jahren beruht, nicht mehr repräsentativ, da auch in den mittleren Breiten Abnahmen in der Ozonsäule beobachtet werden [85]. Die großen Abweichungen, die in den Tropen aufgrund des höhenverschobenen Profils zu beobachten sind, sind sicher ein Teil des Problems in der Bestimmung tropischer Ozonprofile. Das klimatologische Profil beruht hier nur auf einer sehr kleinen Anzahl von Ozonsonden.

Die Wichtigkeit einer guten Klimatologie für ein *optimal estimation*-Verfahren wie *FURM* wird durch die drastische Verschlechterung der Ergebnisse bei Ver-

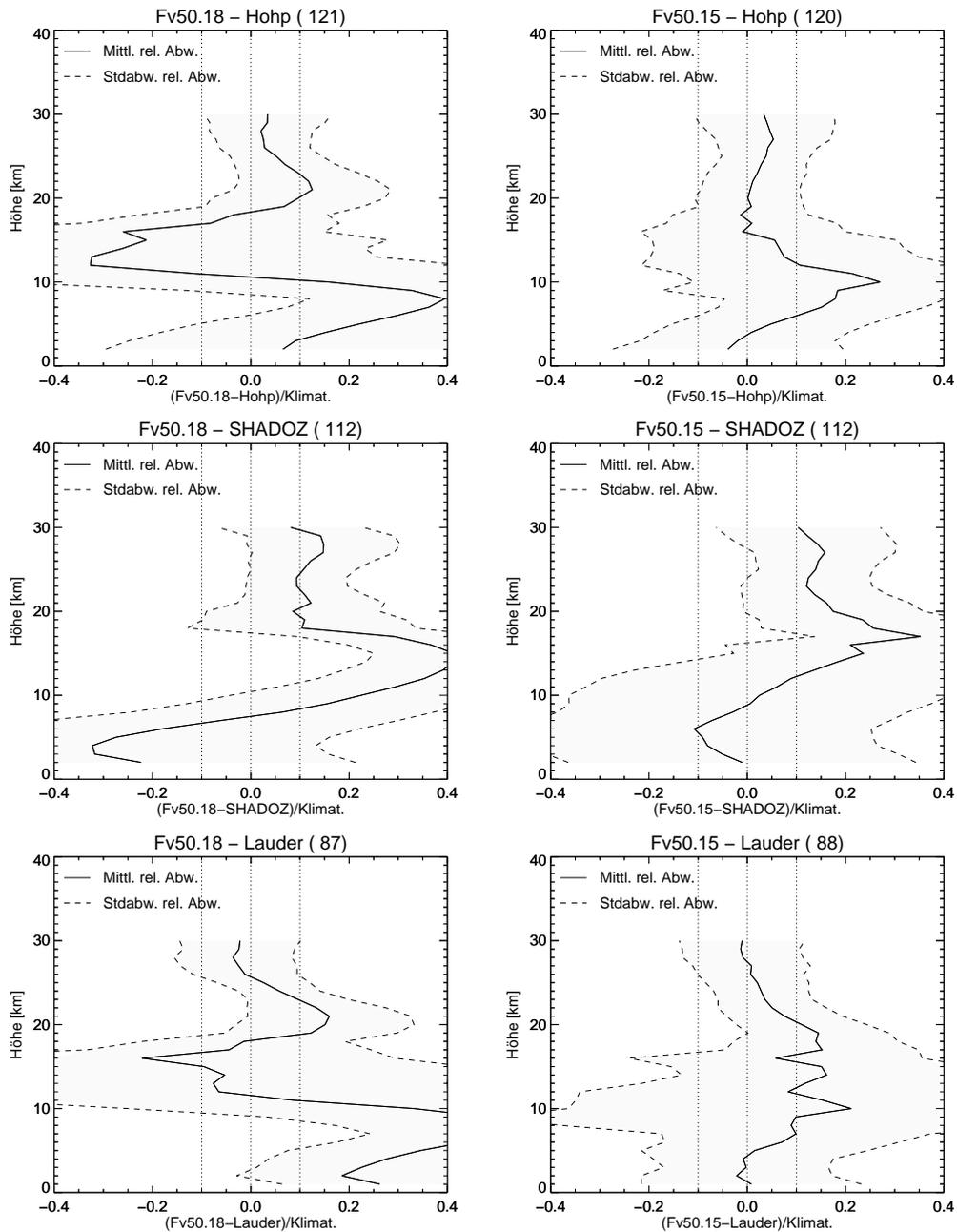


Abbildung 9.1: Einfluss der Wahl der a-priori-Ozonklimatologie auf die relative Abweichungen von den Sondendatensätzen. **Linke Spalte:** MPI-Klimatologie. **Rechte Spalte:** KNMI-Klimatologie. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder.

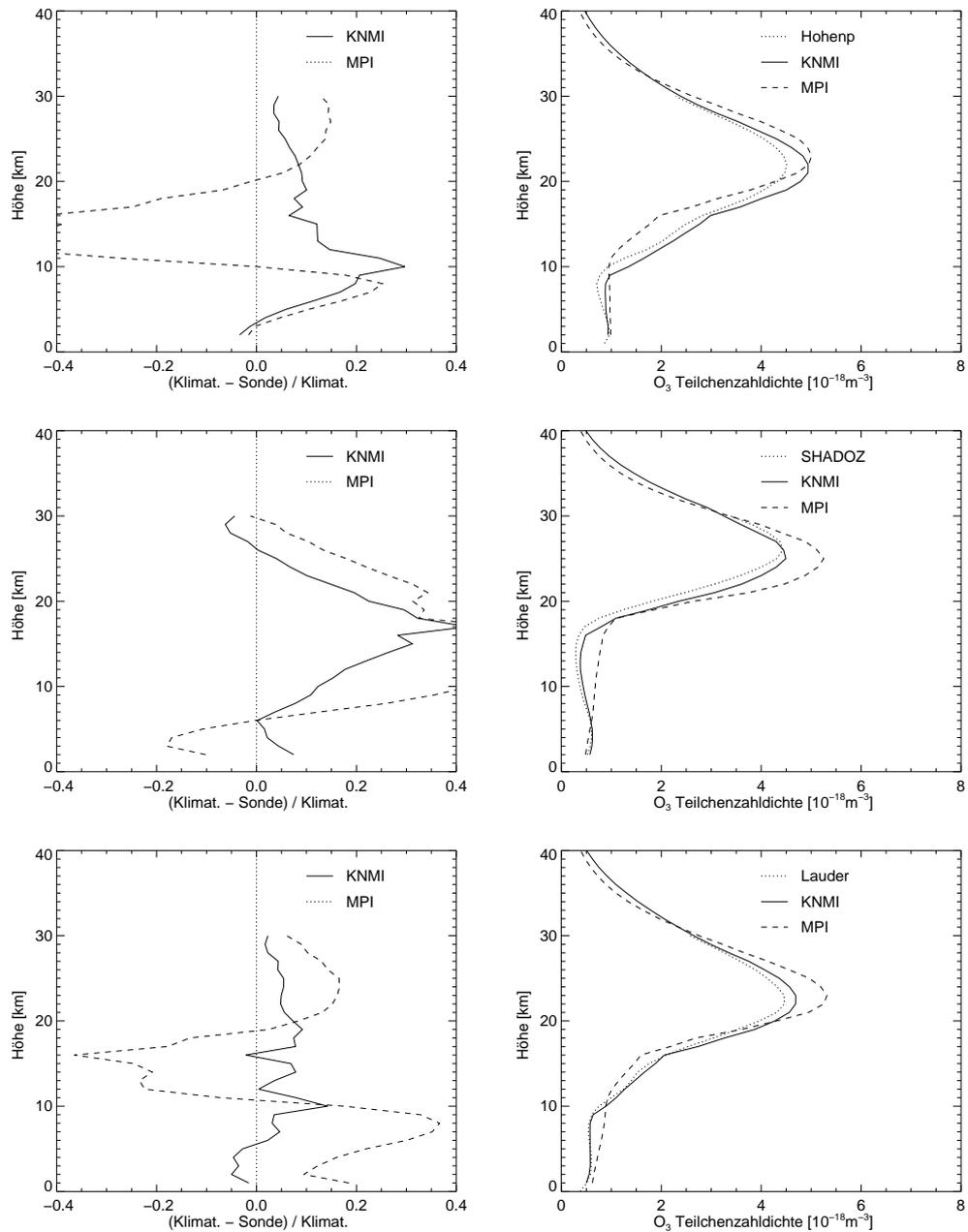


Abbildung 9.2: Vergleich der mittleren klimatologischen Profile der KNMI und der MPI-Klimatologie mit den mittleren Sondenprofilen für die drei Testdatensätze. **Linke Spalte:** Mittlere relative Abweichung der klimatologischen Profile von den Sondenprofilen. **Rechte Spalte:** Mittlere Profile der Klimatologie und den Sondenmessungen der Testdatensätze. **Von oben nach unten:** Hohenpeißenberg, SHADOZ Lauder.

wendung der *MPI*-Klimatologie deutlich vor Augen geführt. Insbesondere fällt auf, dass die Differenzen zwischen den mittleren Sondenmessungen und den klimatologischen Profilen den Differenzen zwischen dem mittleren *FURM*-Profilen und den Sondenmessungen ähneln. Das *optimal estimation* Verfahren bringt ja gerade die Informationen aus der Klimatologie in das Ergebnis der Auswertung ein.

Die Abweichungen der *KNMI*-Klimatologie von den mittleren Profilen der drei Testdatensätze lassen sicher keine endgültigen Schlüsse über die Qualität der Klimatologie zu, dafür ist die Größe der Datensätze in dieser Arbeit immer noch viel zu klein, aber grundsätzlich ist eine auf aktuelleren Messungen basierende Klimatologie sehr wünschenswert.

9.2 Die a-priori-Varianzen

Die a-priori-Varianzen des Ozonprofils geben die Variabilität des Ozongehalts in der jeweiligen Höhe wieder. Je kleiner die Varianz, desto stärker wird das durch die Inversion erhaltene Profil an das a-priori-Profil gebunden. Damit wird jedoch auch der Einfluss von Messfehlern reduziert. In *FURM* stehen derzeit zwei Möglichkeiten zur Festlegung der Varianzen fest: Ein fester Wert von 30 % über die gesamte Höhe des Profils und die aus den Messungen zur *KNMI* Klimatologie bestimmten Varianzen, siehe Abschnitt 4.1.

Die *KNMI* Klimatologie enthält die Varianzen (wie auch die mittleren Ozonkonzentrationen) für 17 meridionale Zonen auf 19 Drucklevel bis 0.3 hPa, was einer Höhe von etwa 65 km entspricht. Oberhalb von 38 km ist allerdings jeweils ein fester Wert vorgegeben, da die Varianzen nur auf den Daten der Ozonsonden beruhen. Abbildung 9.3 zeigt die Varianzen für 4 ausgewählte Monate in den mittleren Breiten bei 50° N und 50° S sowie für die Tropen. Unterhalb von 20 km sind die Varianzen in den mittleren Breiten größer als der Standardwert von *FURM*, dies spiegelt die große Variabilität der Atmosphäre in der unteren Stratosphäre und besonders auf Höhe der Tropopause wieder. Im Norden sind die Werte größer als im Süden, bei 10 km werden Werte von fast 70 % erreicht. Im Süden sind es etwa 10 bis 20 Prozentpunkte weniger. Eine Ausnahme ist der September, hier ist die Varianz auch im Norden bei nur etwa 45 %. In der unteren Stratosphäre werden Werte um die 40 % erreicht, wobei im Sommer der jeweiligen Hemisphäre höhere Werte zu sehen sind, während sie im Winter niedriger sind.

In den Tropen ist das Bild etwas uneinheitlicher, bis 20 km liegen die Werte meist um 30 %, nur im März und Dezember werden in der Tropopausenregion zwischen 15 und 20 km Werte bis 50 % erreicht. Insgesamt ist die Dynamik in den Tropen geringer.

Oberhalb von etwa 25 km zeigt sich in allen Monaten und Regionen eine Varianz von 10 bis 20 %. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass in der unteren und mitt-

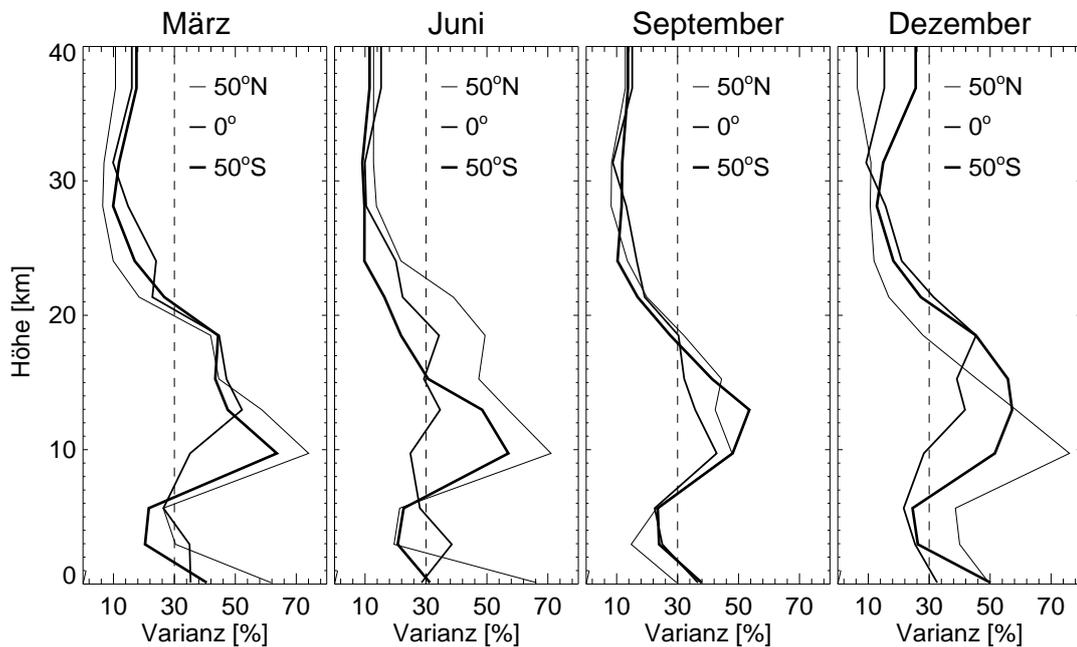


Abbildung 9.3: Varianz der Ozonprofile der KNMI-Klimatologie in % für die Monate März, Juni, September und Dezember für 3 Breitengradzonen: 50° N , 0° und 50° S . gestrichelte Linie: FURM Standardvarianz von 30 %

leren Stratosphäre die beobachteten Varianzen zum Teil deutlich größer als der FURM-Standardwert sind, während in der oberen Stratosphäre die Varianz nur etwa halb so groß ist.

Abbildung 9.4 zeigt den Einfluss der jeweiligen a-priori-Varianz auf die Testdatensätze. Der Testdatensatz Hohenpeißenberg wird von der Wahl der Varianz wenig beeinflusst. Auf Höhe des Ozonmaximums bei etwa 22 km sieht GOME etwa 5 % zu viel Ozon, wenn die KNMI-Klimatologie benutzt wird, während mit der MPI-Klimatologie im Maximum nur 1 bis 2 % zu viel gesehen wird. Auf Höhe der Tropopause bei 10 km ist die KNMI-Klimatologie „besser“, statt 25 % zu viel Ozon wird nur maximal 20 % zuviel gesehen. Hier erlaubt die größere Varianz der KNMI-Klimatologie ein geringfügig größeres Abweichen von der Klimatologie, deren Einfluss auf dieser Höhe dominiert. Der Testdatensatz Lauder zeigt ein ähnliches Bild, die Wahl der Varianz hat nur wenig Einfluss auf die mittlere Abweichung von den Ozonsondenmessungen. Um 18 km bringen die KNMI-Varianzen etwas bessere Resultate, GOME sieht statt 15 % nur etwa 11 % zuviel Ozon.

Der tropische Testdatensatz SHADOZ wird stärker beeinflusst. Der Ozongehalt im Maximum des Profils wird mit der KNMI Klimatologie deutlich besser ge-

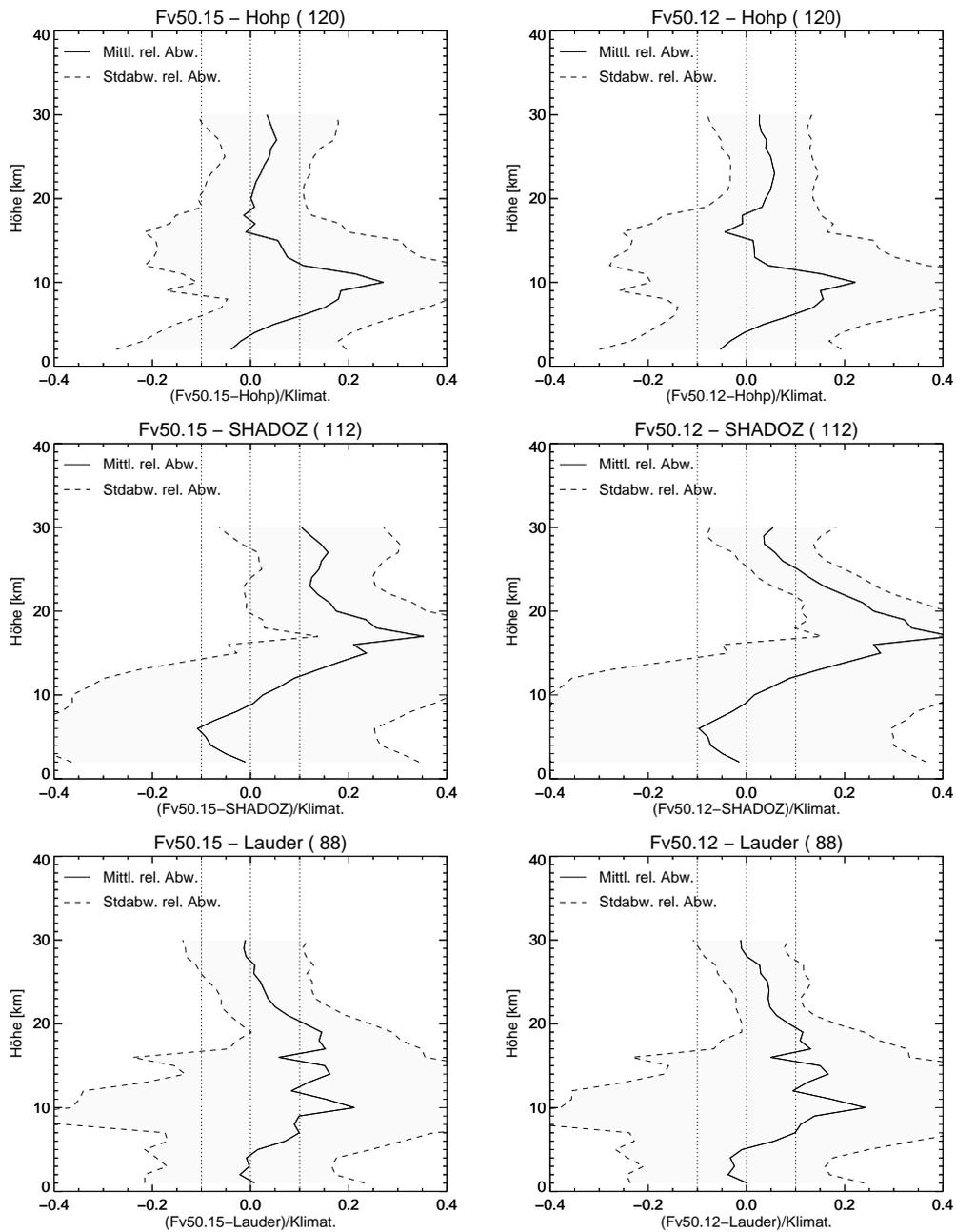


Abbildung 9.4: Einfluss der Varianzen des a-priori-Ozonprofils auf die relative Abweichungen von den Sondendatensätzen. **Linke Spalte:** a-priori-Varianz von 30% über alle Höhen. **Rechte Spalte:** a-priori-Varianz gemäß KNMI-Klimatologie. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder.

messen, statt 15 % zuviel im Falle der Standardvarianz von 30 % wird nur noch etwa 6 % zuviel Ozon gesehen. Dies liegt an der nur halb so großen a-priori-Varianz der Klimatologie, dadurch wird das Profil mehr in Richtung des klimatologischen Ozonmittels gezwungen, das recht nahe am mittleren Profil des Testdatensatzes liegt. Auf Höhe der tropischen Tropopause bei etwa 18 km ist die KNMI-Klimatologie schlechter, hier werden bis zu 35 % statt 25 % zuviel Ozon gesehen. Da diese Höhe aber zur Gesamtozonsäule wenig beiträgt, bringen die klimatologischen Varianzen in den Tropen deutlich bessere Resultate.

Bei den Testdatensätzen handelt es sich um zufällig ausgewählte Messungen, das heißt, ein gemittelttes Profil wird dem klimatologischen Mittel ähnlich sein. Im Folgenden wird untersucht, inwieweit die Varianzen bei der Untersuchung ungewöhnlicher meteorologischer Situationen, die das Ozonprofil beeinflussen und stark vom klimatologischen Mittel abweichen lassen, eine Rolle spielen. Als Fallbeispiel wurde ein Ozonminilochereignis über dem Nordatlantik und Westeuropa vom März 1998 gewählt.

Ozon-Minilöcher sind ein dynamisches Phänomen, welches in der nördlichen Hemisphäre in höheren Breiten bevorzugt im Winter bzw. Frühjahr auftritt. Sie stehen in engem Zusammenhang mit Hochdrucksystemen (Antizyklonen) in der freien Troposphäre. Subtropische Luftmassen werden in nordöstliche Richtung entlang eines ausgedehnten Hochdruckkeils in höhere Breiten transportiert. Der Einzug troposphärischer Luft mit hoher Tropopause und niedrigem troposphärischen Ozongehalts in die gedachte Säule führt zum Anheben der stratosphärischen Luftmassen und damit zu einer Divergenz der ozonreichen stratosphärischen Luft aus der Säule. Da das Volumenmischungsverhältnis von Ozon invariant gegenüber adiabatischen Bewegungen ist, führt der Aufstieg stratosphärischer Luft über dem Hochdruckkeil zur Reduktion des Gesamtozons [49, 73, 64].

Die eingeführten subtropischen Luftmassen weisen eine geringere potentielle Wirbelstärke als die Luftmassen in mittleren und hohen Breiten auf. Daher kann die Entwicklung eines Minilochs sehr gut anhand der Veränderungen der potentiellen Wirbelstärke (*potential vorticity PV*) der unteren Luftschichten beobachtet werden. Die potentielle Wirbelstärke kann aus den Windfeldern meteorologischer Datensätze berechnet werden. Abbildung 9.5 zeigt Tageskarten der modifizierten potentiellen Wirbelstärke (*modified potential vorticity MPV*) auf 350 K potentieller Temperatur (~ 14 km) für den Zeitraum vom 10. bis 13. März, die aus assimilierten meteorologischen Daten des ECMWF (*European Centre for Medium-Range Weather Forecasts*) berechnet wurden. Am 10. März bewegt sich eine Luftmasse mit niedriger MPV auf dem westlich Nordatlantik Richtung Norden. Am 11. schwenkt diese Luftmasse Richtung Osten ab, und die ersten Ausläufer der Luftmassen erreichen Europa. Am 12. und 13. schließlich liegt das Zentrum dieser ursprünglich subtropischen Luftmasse über der europäischen Atlantikküste.

Minilöcher wurden bereits ausführlich mit FURM-Daten untersucht [29, 100]. Abbildung 9.6 zeigt zwei Querschnitte entlang desselben GOME Orbits durch

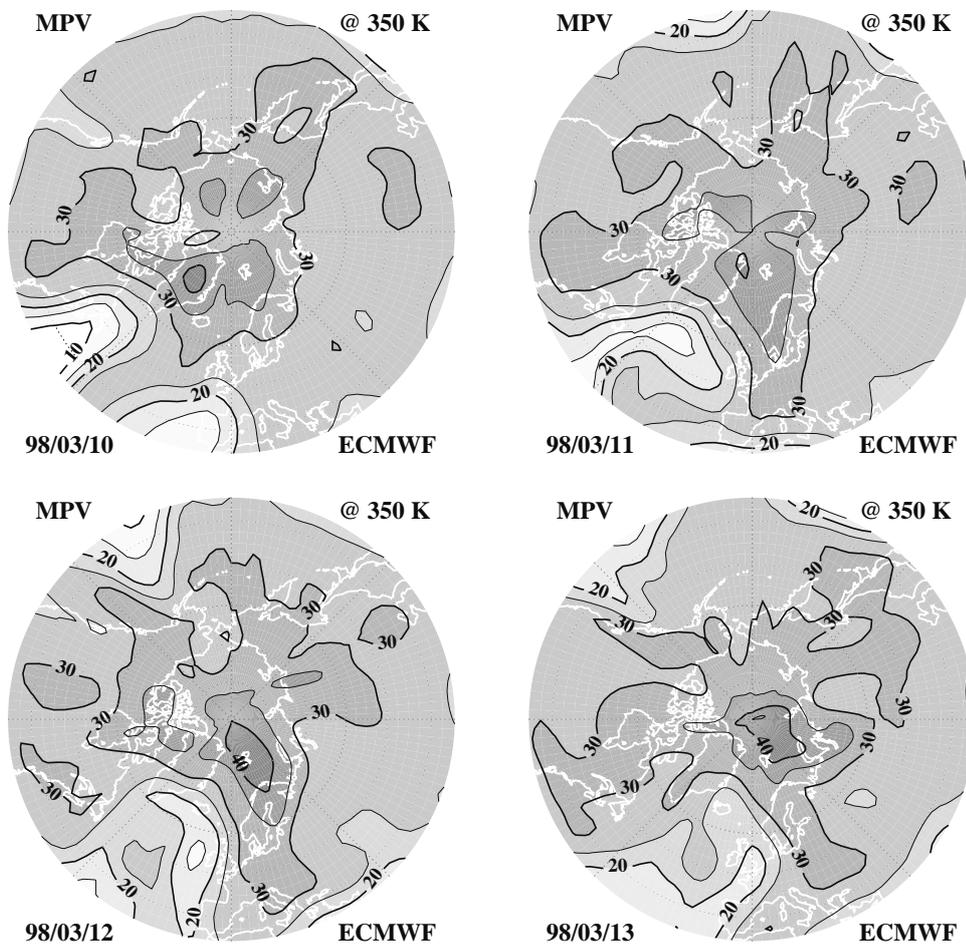


Abbildung 9.5: Tageskarten der modifizierten potentiellen Wirbelstärke MPV auf 350 K potentieller Temperatur (~ 14 km), berechnet aus assimilierten meteorologischen Daten des ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) für die Periode 10. bis 13. März 1998. Über dem Nordatlantik bewegt sich eine subtropische Luftmasse erniedrigter potentieller Wirbelstärke und verursacht ein Ozonminilochereignis.

das Minilochereignis am 11. März. Der Verlauf des Orbits ist quer über das Gebiet des MPV-Minimums, beginnend im Atlantik östlich von Neufundland bis zur Südspitze Grönlands. Dargestellt ist der Ozongehalts als Teilchenzahldichte [10^{18}m^{-3}].

Im oberen Teil der Abbildung wurde die Varianzen der KNMI-Klimatologie verwendet, im unteren Teil die feste a-priori Varianz von 30 %. Die beiden Auswertungen führen zu einer deutlich anderen Beobachtung über die Vorgänge im Miniloch. Bei Verwendung der 30 % Varianz zeigt sich eine relative homogene

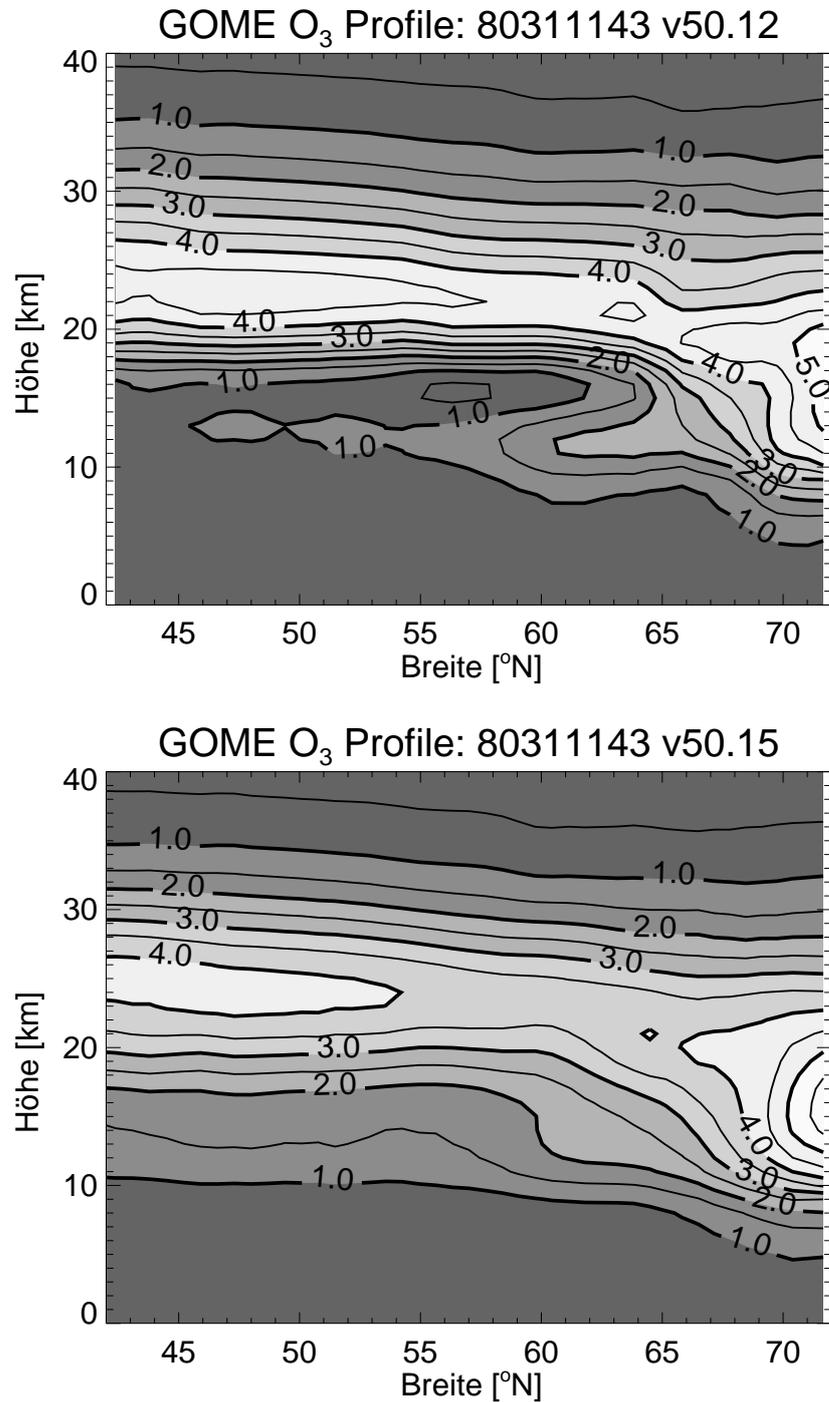


Abbildung 9.6: Querschnitt des Ozongehalts als Teilchenzahldichte [$10^{18}m^{-3}$] über dem westlichen Nordatlantik am 11. März 1998, wie sie mit FURM ausgewertet wurden, zur Untersuchung des Einflusses der *a-priori* Varianz des Ozongehalts. **Oben:** Varianzen der KNMI-Klimatologie. **Unten:** 30% Varianz über die gesamte Höhe.

Ozonverteilung innerhalb des Minilochs. Bis etwa 60° N sind niedrige Ozonwerte unter $2 \cdot 10^{18} \text{m}^{-3}$ bis in eine Höhe von etwa 18 km zu beobachten, dann folgt eine Übergangszone, in der zwischen 12 und 18 km nur moderat niedrige Ozonwerte zu beobachten sind. Ab etwa 70° N wird der Bereich des Minilochs verlassen, die Profile haben hier ihr Ozonmaximum bei etwa 16 km. Insbesondere zwischen 55 und 65° N kann eine Abnahme des Ozons über die gesamte Höhe beobachtet werden. Die Varianzen der *KNMI*-Klimatologie führen zu einem deutlich anderen Bild. Unterhalb von 18 km ist in weiten Bereichen bis etwa 62° N ein Ozongehalt von unter $1 \cdot 10^{18} \text{m}^{-3}$ zu sehen. In etwa 12 km Höhe ist jedoch eine von Norden in dieses Gebiet hineinragende Zunge mit höheren Ozonwerten zu beobachten, so dass ein Nebenmaximum auf dieser Höhe entstanden ist. Die subtropische, von Süden kommende Luft mit niedrigem Ozon scheint sich teilweise über die Luftmassen der mittleren Breiten mit höherem Ozongehalt zu schieben. Darüber ist ein steiler Gradient zu einem stärker ausgeprägten Ozonmaximum zu sehen. Nördlich von 70° N sind die Ozonprofile der beiden Auswertungen ähnlich. Insgesamt sieht die Dynamik der Luftmassen, die durch unterschiedlichen Ozongehalt geprägt sind, in der Auswertung, die die *KNMI*-Varianzen benutzt, deutlich komplexer aus.

Ist diese Komplexität auch real? Dies kann nur durch Vergleich mit unabhängigen Messungen geklärt werden. Da der soeben vorgestellte Orbit über dem Nordatlantik verläuft, gibt es hier keine geeignete Vergleichsmessung, insbesondere keine Ozonsonden. Wie in Abbildung 9.5 ersichtlich, erreichen die hier beobachteten Luftmassen in der Folgezeit Europa. Am 11. März wurde in Hohenpeißenberg eine Ozonsonde gestartet, am 13. eine in Payerne. Für beide Tage gab es jeweils einen Überflug von *GOME* am selben Tag. Das entsprechenden Grundpixel von *GOME* wurden mit den beiden Varianzen ausgewertet. Abbildung 9.7 zeigt die berechneten Profile zusammen mit dem von der jeweiligen Sonde gemessenen Profil. Die Sonden zeigen ein komplexe Struktur des Profils, insbesondere ist ein Nebenmaximum in etwa 14 km Höhe zu erkennen. Das Profil vom 11. März weist zudem noch zwei laminare Strukturen zwischen den beiden Maxima auf. Darüber sind die beiden *FURM*-Auswertung mit der unterschiedlichen Wahl der a-priori-Varianzen sowie das klimatologische a-priori Profil geplottet.

Mit der 30 % Standardvarianz kann *FURM* das Profil der Sonde nicht reproduzieren. Das Hohenpeißenberg-Profil wird sehr schlecht wiedergegeben, bei 22 km wird statt eines Maximums im Ozongehalt ein lokales Minimum gesehen, dafür wird darüber und darunter zuviel Ozon angezeigt. Im Payerne-Profil wird von 12 bis 27 km ein annähernd konstanter Ozongehalt angezeigt. Die Auswertung unter Verwendung der klimatologischen Varianzen passt besser zu den Sondenprofilen. Die *FURM*-Profile zeigen in diesem Fall eine Doppelmaximum im Profil, was besonders beim Payerne-Profil sehr gut zur Messung der Sonde passt. Den starken Ozongradienten um 12 km können beide Auswertungen nicht reproduzieren.

Die Standardvarianz von 30 % ist in der Tropopausenregion und der unteren Stra-

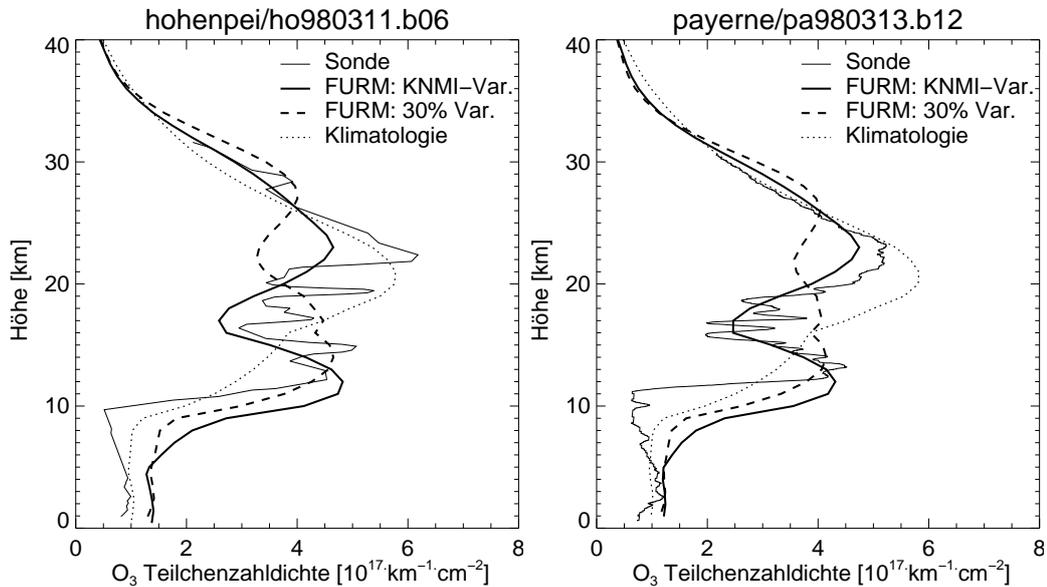


Abbildung 9.7: Vergleich der FURM-Auswertungen mit unterschiedlichen a-priori Varianzen (siehe Text) unter Ozonminilochbedingungen mit zwei Ozonsondenmessungen. **Links:** Ozonsondenmessung vom 11. März 1998 in Hohenpeißenberg. **Rechts:** Ozonsondenmessung vom 13. März 1998 in Payerne.

tosphäre zu niedrig, wenn außergewöhnliche meteorologische Bedingungen wie bei einem Ozonminilochereignis herrschen. Die klimatologischen Varianzen erlauben hier Werte von 50 bis 70 %. Insbesondere gehen die Varianzen über Gleichung (4.2) auch in die Kovarianzen ein. Kleinere Kovarianzen sorgen dafür, dass die vertikalen Gradienten im Profil sich weniger ändern können, teilweise entgegengesetzte Gradienten, wie sie in den hier gezeigten Beispielen zwischen 11 und 17 km zu sehen sind, werden dann stärker unterdrückt.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die klimatologischen Varianzen verwendet werden sollten, um der Variabilität der Atmosphäre in der Tropopausenregion und der unteren Stratosphäre in den mittleren Breiten gerecht zu werden. In den Tropen ist die geringere Varianz des a-priori Profils in Höhe des Ozonmaximums vorteilhaft. Die größere Höhe des Ozonmaximums in den Tropen führt dazu, dass die Information über das Ozonmaximum von kürzeren Wellenlängen stammt, vergleiche die Ozongewichtsfunktionen in Abbildung 4.3. Mit kürzeren Wellenlängen wird das Signal-zu-Rauschverhältnis schlechter, und die Degradation des Instrumentes nimmt zu (siehe Abschnitt 6.3). Eine stärkere Anbindung des Ozonmaximums an das klimatologisch Profil ist daher vorteilhaft, sofern die kleinere Varianz und das mittlere Profil der Wirklichkeit entsprechen.

FURM wurde bereits erfolgreich für die Untersuchung des Ozonabbaus im arktischen Frühjahr eingesetzt. Hierfür wurden für den Zeitraum, in dem GOME

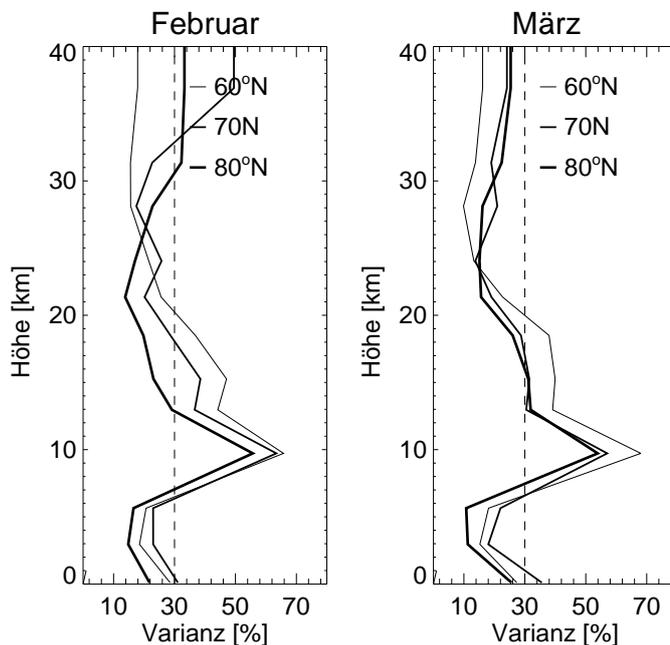


Abbildung 9.8: Varianz der Ozonprofile in % der KNMI-Klimatologie für die Monate Februar und März für 3 Breitengrad zwischen 60° N und 80° N. **Gestrichelte Linie:** FURM Standardvarianz von 30 %.

zumindest Teilbereiche des polaren Vortex beobachten konnte, alle Profile für die arktische Region berechnet. Dann wurden für jeden Tag über das Vortexgebiet der gemessene Ozongehalt einer Höhenschicht gemittelt. Aus der erhaltenen Zeitreihe können dann Ozonverlustraten bestimmt werden [11, 10, 12, 32, 33, 34, 100, 101]. Am Beispiel des arktischen Frühjahrs 2000 wurde festgestellt, dass die gefundenen Abbauraten mit denen anderer Messverfahren sehr viel besser übereinstimmen, wenn die Standardvarianz von 30 % und nicht die Varianzen gemäß der KNMI-Klimatologie verwendet werden [30, 31]. Abbildung 9.8 zeigt die klimatologischen Varianzen für Februar und März für die drei nördlichsten Breitengradzonen. Im Februar liegen die Varianzen oberhalb von 13 km, im März oberhalb von 17 km für die nördlichste, die polare Zone unterhalb von 30 %. Die Winter 1995/96, 1996/97 und 1999/2000 mit sehr hohen Ozonverlusten im arktischen Vortex liegen nicht mehr im Messzeitraum, der der KNMI-Klimatologie zugrunde liegt. Daher sind die Varianzen hier zu klein, sie berücksichtigen nicht die Möglichkeit massiven Ozonabbaus im arktischen Frühjahr. Für die polaren Breiten sollten die klimatologischen Varianzen daher nicht verwendet werden. Dies wird, wie bereits in Abschnitt 4.1 erwähnt, auch von den Autoren der Klimatologie empfohlen [37, 38], da die klimatologischen Varianzen für die polaren Breiten nur auf sehr wenigen Messungen beruhen und entsprechend unzuverlässig sind.

9.3 Die meteorologischen Profile

Aufgrund der Rayleighstreuung und der Temperaturabhängigkeit der Ozonabsorption sind Druck- und Temperaturprofile wichtig für die Ozonprofilauswertung. In *FURM* können die Druck- und Temperaturprofile entweder der *MPI*-Klimatologie entnommen werden, oder es werden aktuell gemessene meteorologische Daten verwendet. In dieser Arbeit werden hierfür die assimilierten, meteorologischen Daten von *UKMO* [88] verwendet, siehe auch Abschnitt 4.1.

Abbildung 9.9 zeigt die mittleren relativen Abweichungen in den drei Testdatensätzen, die sich jeweils bei der Verwendung der beiden Quellen der meteorologischen Daten ergeben. In allen drei Fällen sind die relativen Abweichungen etwas größer, wenn die klimatologischen statt der gemessenen meteorologischen Profile verwendet werden. In Hohenpeißenberg gibt es nur geringfügige Verschlechterung in der unteren Stratosphäre, in den Tropen werden die großen Abweichungen zwischen 12 und 20 km noch größer. In Lauder wird die Überschätzung von *GOME* in der unteren Stratosphäre ebenfalls verstärkt. Die Verwendung der assimilierten meteorologischen Daten verbessert die Auswertung der Ozonprofile, wenn auch im Mittel über mehrere Messungen nicht besonders drastisch.

Wie bereits in Abschnitt 9.2 geschehen, kann auch die Frage gestellt werden, inwieweit unter ungewöhnlichen Bedingungen die meteorologischen Parameter eine Rolle spielen. Dazu wurden die Messungen des bereits vorgestellte Überfluges von *GOME* über das Minilochereignis vom März 98 mit den klimatologischen Druck- und Temperaturprofilen durchgeführt. Der Querschnitt des so ermittelten Ozongehaltes ist in Abbildung 9.10 dargestellt. Ein Vergleich mit Abbildung 9.6, oben zeigt, dass es zu deutlichen Änderungen kommt, insbesondere im nördlich von 52°N . Das Ozonmaximum ist deutlich schwächer ausgeprägt, außerdem ist die Abnahme der Ozonmenge mit zunehmendem Breitengrad oberhalb von etwa 28 km kaum noch zu beobachten. Man betrachte beispielsweise den Verlauf der $1.0 \cdot 10^{18} \text{m}^{-3}$ Linie im Vergleich zu Abbildung 9.6, oben. Die Verwendung guter, gemessener meteorologischen Daten ist daher wichtiger, als die Betrachtung der mittleren Profile der Testdatensätze vermuten lässt.

Jede Ozonsonde führt auch eine Radiosonde zur Bestimmung von Druck und Temperatur mit sich. Es liegt daher nahe, diese Messungen mit den assimilierten Datensätzen von *UKMO* zu vergleichen. In Abbildung 9.11 sind die mittlere absolute Differenz und die mittleren Profile der Temperaturen dargestellt. Die kleinskaligen Strukturen werden durch die begrenzte Höhenauflösung der *UKMO*-Daten verursacht, beispielsweise kann in den Tropen das Minimum der Temperatur bei 17 km nicht vollständig aufgelöst werden. Während für Hohenpeißenberg und die Tropen eher kleine Abweichungen bis $\pm 2 \text{K}$ zu sehen sind, sind die mittleren *UKMO*-Temperaturen in der mittleren Stratosphäre der südlichen mittleren Breiten um etwa 4 K zu niedrig. Dieser Wert ist auch statistisch signifikant. Ursache ist sicherlich die zu geringe Zahl von Radiosondenstationen in der

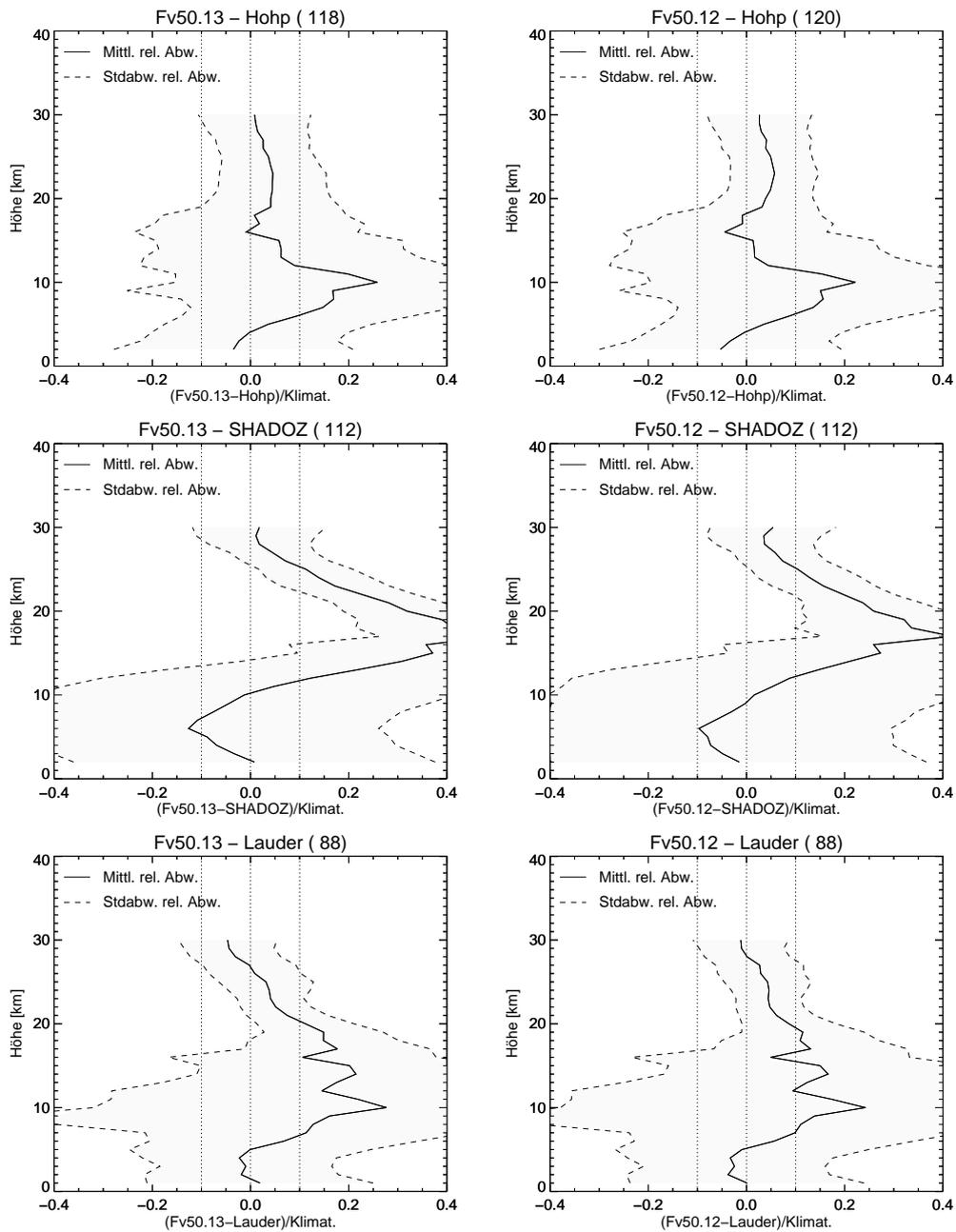


Abbildung 9.9: Bedeutung der *a-priori*-Druck- und Temperaturprofile auf die mittleren relativen Abweichungen der GOME-Messungen zu den Sondendatensätzen. **Linke Spalte:** MPI-Klimatologie. **Rechte Spalte:** Assimilierte meteorologische Daten von UKMO. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder.

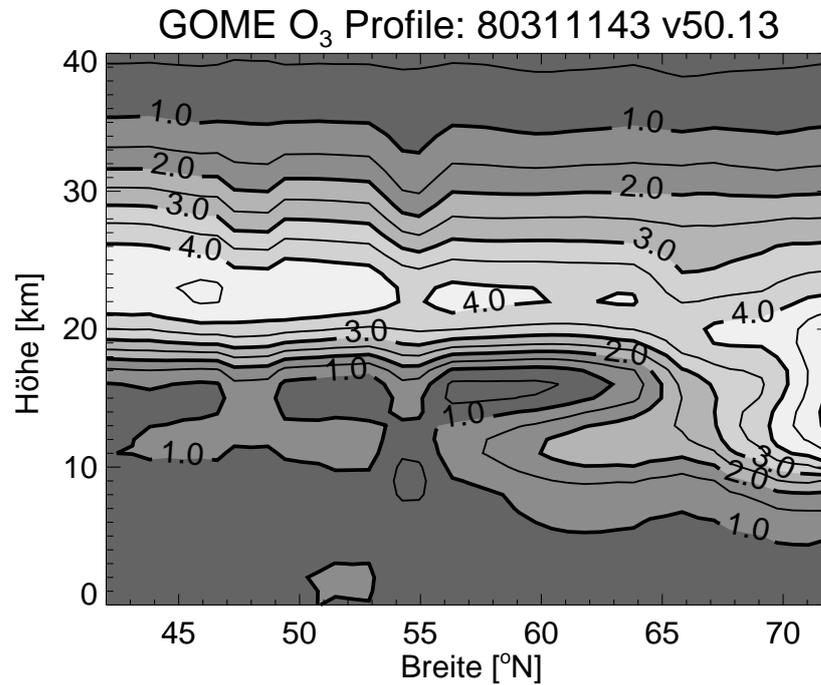


Abbildung 9.10: Querschnitt des Ozongehalts als Teilchenzahldichte [10^{18}m^{-3}] über dem westlichen Nordatlantik am 11. März 1998, wie sie mit FURM ausgewertet wurden, bei Verwendung der Druck- und Temperaturprofile der MPI-Klimatologie.

südlichen Hemisphäre. Die systematische Abweichung in den südlichen, mittleren Breiten ist möglicherweise eine der Ursachen dafür, dass die Auswertung hier schlechtere Ergebnisse bringt als in den nördlichen, mittleren Breiten.

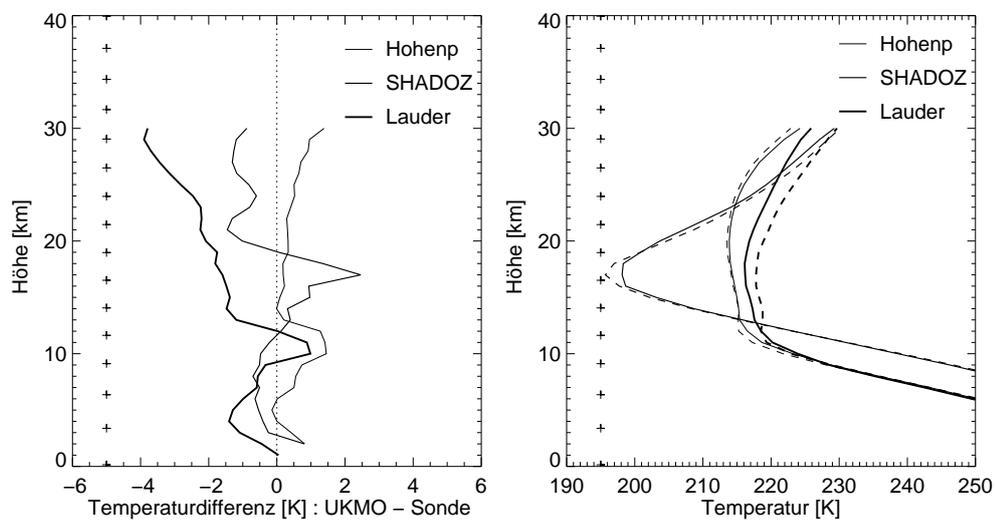


Abbildung 9.11: Vergleich der Temperaturprofile der UKMO-Daten mit den Messungen der Radiosonden, die mit den Ozonsonden gestartet wurden. **Links:** Mittel der absoluten Differenz. **Rechts:** Mittlere Profile, gestrichelt sind die der Sonden, durchgezogen die von UKMO. Die Kreuze markieren die ungefähre Lage der Höhenlevel, auf denen die UKMO-Daten vorliegen.

Kapitel 10

Validation mit *HALOE*

Das Satelliteninstrument *HALOE* ist seit 1991 im All und liefert, neben Profilen von weiteren Spurengasen, Druck und Temperatur auch Ozonprofile. Die Ozonprofile der Version 17 und 18 der *HALOE* Daten wurden bereits erfolgreich validiert [52, 15]. Mittlerweile liegt die Version 19 der *HALOE* Datenauswertung vor, diese wird hier zur globalen Validierung der *FURM* Ozonprofile verwendet. Zum einen werden gemittelte Profile direkt verglichen, zum anderen werden Teilsäulengehalte von Schichten mit Dicken in der Größenordnung der vertikalen Auflösung der *GOME* Ozonprofile verwendet. Hierbei werden saisonale und meridionale Teilmengen aller Koinzidenzen von *HALOE* und *GOME* im Jahre 1998 benutzt.

10.1 Das Instrument *HALOE*

Das Halogen Occultations Experiment (*HALogen Occultation Experiment HALOE*) ist Teil des *Upper Atmosphere Research Satellite (UARS)*, der am 12. September 1991 im Rahmen des *Earth Science Enterprise*-Programmes der *NASA* gestartet wurde. Seit dem 11. Oktober 1991 liefert es kontinuierlich wissenschaftliche Daten über die Zusammensetzung der Erdatmosphäre. Die wissenschaftlichen Ziele sind die Beobachtung wichtiger Spurengase, die in der Ozonphotochemie der Stratosphäre und unteren Mesosphäre eine wichtige Rolle spielen. Die Beobachtungsgeometrie ist solare Okkultation, das heißt, während des Sonnenaufgangs und des Sonnenuntergangs wird die Sonne durch die Atmosphäre beobachtet. Pro Tag können daher etwa 30 Messungen vorgenommen werden. Das Blickfeld hat über dem Nadirpunkt eine vertikale Ausdehnung von 1,6 km. Gemessen werden kann ab etwa 15 km aufwärts, da durch die erhöhte optische Dichte die Sonne nicht mehr verfolgt werden kann. *HALOE* misst vertikale Profile von Ozon (O_3), Wasserstoffchlorid (HCl), Wasserstoffchlorid (HF), Methan (CH_4), Wasser (H_2O), Stickstoffmonoxid (NO), Stickstoffdioxid (NO_2), Kohlen-

Druck [hPa]	0.01	0.04	0.1	0.4	1	4	10	40	100
ungefähre Höhe [km]	90	78	67	57	47	37	28	21	16
Fehlerbreite [%]	95	51	11	6	8	9	12	18	30

Tabelle 10.1: HALOE Fehler Abschätzung für Ozonprofile (nach [15]).

dioxid (CO₂), der Aerosol Extinktion sowie von Druck und Temperatur. Hierfür stehen acht Kanäle zur Verfügung, vier Gasfilter-Kanäle (HCl, HF, CH₄, NO) und vier Radiometer-Kanäle (O₃, H₂O, NO₂, CO₂). Eine detaillierte Instrumentenbeschreibung ist in [78] zu finden.

Ozon wird von HALOE im thermischen Infrarot (IR) gemessen. Die größte Absorptionsbande ist das ν₃ Band, dessen Zentrum bei etwa 9.6 μm liegt und von den meisten IR-Instrumenten zur O₃-Beobachtung genutzt wird. Das Beobachtungsfenster des HALOE-Ozonkanals reicht von 9.22 μm bis 10.42 μm und überdeckt damit den Spektralbereich mit der stärksten Absorption sowie einige der schwächeren Absorptionsbänder, da die untere Stratosphäre für den Spektralbereich der stärksten Bänder undurchlässig ist.

Die HALOE Ozonprofile der Version 17 der Datenprodukte wurden mit einem umfangreichen Datensatz von über 400 Profilen von Ozonsonden, LIDAR- und Mikrowellengeräten, sowie auf Ballons, Raketen und Satelliten stationierten Instrumenten verglichen [15]. Die erwartete Fehlerbreite der Ozonprofile ist am geringsten mit etwa 8 % bei 1 hPa (47 km), erreicht in der Mesosphäre fast 100 % und in der unteren Stratosphäre bei 100 hPa (16 km) etwa 30 %, siehe Tabelle 10.1. Während in den oberen Höhen Instrumentenrauschen der dominierende Faktor ist, ist es in den unteren Höhen die Ungenauigkeit der Höhenbestimmung und die Zunahme von Aerosolen.

Die Validation zeigt sehr gute Ergebnisse durch die gesamte Stratosphäre bis in die untere Mesosphäre. Der Vergleich mit Ozonsonden zeigt relative Fehler unter 10 % von 90 bis 10 hPa (17–28 km) in den mittleren Breiten und 35 bis 9 mbar (23–30 km) in den Tropen. Oberhalb der genannten Höhen werden die Messungen der Ozonsonden zu ungenau. Der Vergleich mit anderen Satelliteninstrumenten (SAGE, SBUV, SSBUV, ATMOS) zeigt Differenzen meist unter 5 % zwischen 30 und 45 km, in noch größeren Höhen sind die HALOE-Werte etwa 10 % zu niedrig. Der Vergleich mit den LIDAR-Messungen zeigt eine systematische Unterschätzung um 5 bis 10 % zwischen 20 und 10 hPa (27–32 km) von 5 bis 10 %. Version 18 der HALOE-Daten zeigen gegenüber der Version 17 systematisch größere Werte, besonders in der unteren Stratosphäre. Zwischen 40 und 55 km wurden etwa 2 %, zwischen 25 und 40 km etwa 5–8 % und zwischen 15 und 25 km etwa 10–20 % Zunahme gefunden. Der Vergleich mit SAGE II Daten hat sich mit der Version 18 verbessert [52].

GOME -- HALOE Matches in 1998 (2151)

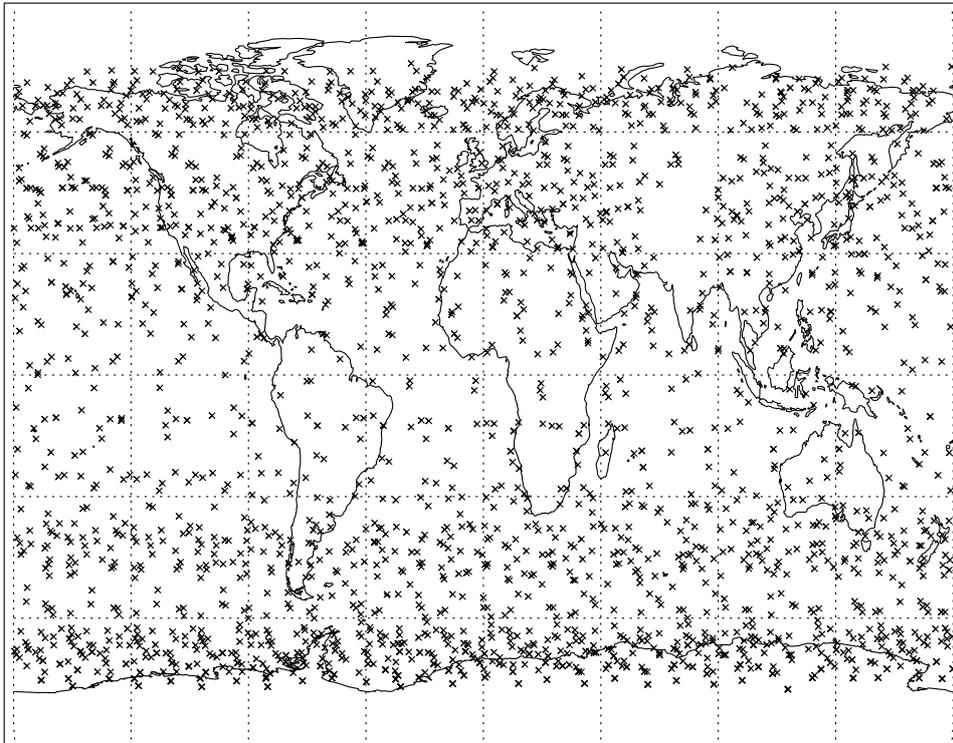


Abbildung 10.1: Messungen von GOME und HALOE am selben Tag mit einem Abstand von weniger als 160 km zwischen Mittelpunkt der GOME Messung und Tangentialpunkt der HALOE Messung im Jahr 1998.

In dieser Arbeit wird die Version 19 der HALOE-Daten verwendet. Bisher fehlt hierfür eine ähnlich umfangreiche Validation wie für Version 17 und 18. Da aber bereits die vergehenden Versionen Ozonprofilaten hoher Qualität enthalten, kann dieser Datensatz für die Validation der GOME-Ozonprofile verwendet werden.

10.2 Auswahl der Datensätze

HALOE misst etwa 30 Profile pro Tag, die auf 2 schmalen Breitengradbändern (Sonnenauf- und Sonnenuntergang) liegen. Diese überdecken im Verlauf eines Jahres den Bereich von 80° N bis 80° S. Im Gegensatz dazu erreicht GOME eine globale Überdeckung innerhalb von 3 Tagen, wobei etwa 3500 Profile (bei der Verwendung von $100 \times 960 \text{ km}^2$ UV-Pixeln, siehe Abschnitt 2.7) ermittelt wer-

den können. Für das Jahr 1998 wurden alle Koinzidenzen gesucht, die folgende Bedingungen erfüllen:

- Messung am selben Tag.
- Kürzester Abstand des Tangentenpunktes der HALOE-Messung zum Mittelpunkt des nächstgelegenen GOME Grundpixel ($40 \times 320 \text{ km}^2$), maximal 160 km.

Da GOME gegen 10.30 Uhr lokaler Zeit den Äquator überquert, ist der zeitliche Abstand im Mittel etwa $4\frac{1}{2}$ beziehungsweise $6\frac{1}{2}$ Stunden zur Sonnenaufgangs- und Sonnenuntergangsmessung von HALOE. Die zweite Bedingung garantiert im Regelfall, dass die Tangentenpunkte innerhalb des GOME-Grundpixels liegen. Nur am Anfang bzw. Ende eines Orbits oder im Fall von Datenlücken sind Ausnahmen bis maximal 140 km möglich. Insgesamt wurden 2151 Koinzidenzen gefunden, die annähernd gleichmäßig mit Betonung der mittleren und hohen Breiten über die Erde verteilt sind, siehe Abbildung 10.1.

Für alle Koinzidenzen wurden die GOME Ozonprofile mit FURM bestimmt. Hierbei wurden die meteorologischen Daten von UKMO, die KNMI Ozonklimatologie sowie die feste Varianz der a-priori Ozonprofile von 30 % benutzt, siehe auch Zusammenstellung in Anhang E.

10.3 Vergleich der gemittelten Profile

Die aufgrund der Koinzidenzen gefundenen Vergleichspaare wurden meridional und saisonal sortiert. Die meridionalen Zonen umfassen einmal die Tropen (30° S bis 30° N), die Subtropen und die mittleren Breiten (30° N bis 60° N bzw. 30° S bis 60° S) sowie die hohen Breiten (60° N bis 80° N bzw. 60° S bis 80° S). Die saisonale Unterteilung orientiert sich an den Jahreszeiten, allerdings wurden zur Vereinfachung jeweils drei Kalendermonate zu einer Jahreszeit zusammengefasst. Das Frühjahr umfasst die Monate April bis Juni, der Sommer die Monate Juli bis September, der Herbst die Monate Oktober bis Dezember und der Winter die Monate Januar bis März. Eine noch feinere Unterteilung sowohl saisonal als auch meridional ist nicht sinnvoll, da dann die Anzahl der Profile für statistische Aussagen im allgemeinen zu klein wird. Zudem sind die Koinzidenzen der Profile bei kürzeren Zeiträumen wegen der eingeschränkten räumlichen Abtastung von HALOE nur noch sehr ungleichmäßig über den Globus verteilt.

Die relativen Abweichungen sind in Abbildung 10.2 und 10.3 abgebildet. Von links nach rechts sind die Abbildungen saisonal, beginnend mit dem Frühjahr, angeordnet, die Zonen sind, beginnend im Norden, von oben nach unten angeordnet. In entsprechender Anordnung findet man die gemittelten Profile von GOME und HALOE sowie zum Vergleich das der Klimatologie in Abbildung 10.4 und

10.5. Als Höhenbereich wurde in beiden Abbildungen 15 bis 40 km gewählt. 15 km ist die untere Grenze für *HALOE*, oberhalb von 40 km enthalten die *GOME*-Spektren im nutzbaren Spektralbereich keine Informationen mehr über das Ozonprofil.

In weiten Bereichen des Vergleiches liegt der relative Unterschied im Bereich von etwa 17 bis 30 km unter 10 %. Ausnahmen sind die hohen Breiten im Norden im Sommer und im Herbst, *GOME* zeigt signifikant oberhalb des Ozonmaximum etwa 15 % zuviel Ozon. In den Tropen ist in allen Datensätzen eine charakteristische Wellenform der relativen Abweichung zu sehen. Bei etwa 20 km ist die Abweichung fast Null mit einer Tendenz zur Unterschätzung durch *GOME*, bei etwa 28 bis 30 km zeigt *GOME* dann 10 bis 20 % mehr Ozon an. Die entsprechenden mittleren Profile zeigen, dass die Ursache eine etwa 2 km zu hohe Lage des Ozonmaximums ist. Da *FURM* das Gesamtozon immer sehr präzise wiedergibt, siehe Abschnitt 11, führt ein zu hohes Ozonmaximum zur beobachteten Wellenform. Besonders ausgeprägt ist diese Phänomen in der tropischen Wintersaison, allerdings ist dieser Datensatz mit nur 41 Profilen auch nur 1/3 so groß wie die anderen. Die hohen Abweichung unterhalb von 17 km sind auf Probleme des *HALOE* Messverfahrens zurückzuführen. In den Tropen reichen konvektive Wolken bis in Höhen von 17 km, und in Okkultation wie bei *HALOE* ist keine Beobachtung unterhalb der Wolkenobergrenze möglich, auch wenn der Himmel nur teilweise bewölkt ist.

In den südlichen mittleren Breiten fällt der Herbst besonders auf, oberhalb von 28 km zeigt *GOME* fast 20 % zu viel Ozon. Ein Blick auf die mittleren Profile zeigt, dass hier die Profile der Klimatologie im Ozonmaximum fast 25 % mehr Ozon zeigt wie tatsächlich von beiden Instrumenten beobachtet wurden. Die Auswertung wird hier vom schlechten klimatologischen Profil gestört.

In den südlichen hohen Breiten wurden im Frühjahr keine räumlichen Koinzidenzen gefunden. Im Sommer und Herbst zeigen sich sehr deutliche Abweichung von -20% bei etwa 21 km bis zu fast 40% ab etwa 30 km. Gleichzeitig ist die Variabilität der Abweichungen außergewöhnlich hoch. Die mittleren Profile zeigen, dass die Klimatologie besonders in der Sommersaison deutlich höhere Ozonwerte um 20 km zeigt als tatsächlich beobachtet worden sind. Der Grund ist das antarktische Ozonloch im September und Oktober, das in der Klimatologie nicht oder nicht ausreichend berücksichtigt ist. Insbesondere in der Wintersaison der Südhemisphäre zeigt das *HALOE* Profil ausgeprägtes Ozonlochverhalten mit einem lokale Minimum bei 21 km. *FURM* ist nicht in der Lage, die insbesondere auch in der Form stark von der Klimatologie abweichenden Profile zu reproduzieren, obwohl die Abnahme des Ozons insgesamt durchaus wiedergegeben wird. Die hohe Variabilität der Abweichungen wird durch die großen *GOME* Grundpixel mitverursacht, die dafür verantwortlich sind, das oft nur ein Teil des Grundpixels in den Vortex hineinragt. Ein entsprechendes Phänomen in der arktischen Region ist nicht zu beobachten, da wegen des schwach ausgeprägten Vortex im

Winter/Frühjahr 1998 kaum Ozon abgebaut wurde [12, 33, 34]. Im Sommer der Südhemisphäre zeigt sich in den südlichen hohen Breiten eine durchgehend sehr gute Übereinstimmung mit hoher Signifikanz.

10.4 Vergleich der Teilsäulengehalte

Eine weitere Möglichkeit, der begrenzten vertikalen Auflösung von *GOME* Ozonprofilen Rechnung zu tragen, ist die Integration des Profils in einer definierten Höhengschicht zu Teilsäulengehalten. Nachteilig hier ist insbesondere die doch recht willkürliche Festlegung der Schichtgrenzen. Für diesen Vergleich wurden die Höhengschichten von 20 – 30 km und von 30 – 40 km gewählt. Die saisonale und meridionale Unterteilung der Datensätze wurde analog zum vorigen Abschnitt 10.3 vorgenommen. In Tabelle 10.2 sind die mittleren relativen Abweichungen der Teilsäulengehalte und deren Standardabweichungen für diese Schichten zusammengefasst.

Für die untere Schicht von 20 bis 30 km sieht *GOME* durchgehend zuviel Ozon, von 1 bis 12 % mit einem Gesamtmittelwert von etwa 5 %. Die Standardabweichung der relativen Abweichung liegt zwischen 3 und 10 %, so dass die relative Abweichung als signifikant angesehen werden muss. In der oberen Schicht von 30 bis 40 km variieren die Abweichungen von –20 bis +20 %, hier macht sich bereits deutlich der abnehmende Informationsgehalt in den *GOME* Spektren bemerkbar. Die zugehörigen Standardabweichungen sind jeweils immer in der gleichen Größenordnung. Die Sommer- und Herbstsaison in den hohen südlichen Breiten zeigen in beiden Höhengschichten deutlich schlechtere Werte. Die untere zeigt eine hohe Variabilität der Abweichungen, die obere um 30 % zu hohes Ozon in den *GOME* Profile. Ursache ist, wie im vorigen Abschnitt erläutert, auch hier die „Verschmutzung“ mit Profilen unter Ozonlochbedingungen.

10.5 Zusammenfassung

Insgesamt zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen *GOME* und *HALOE* bis etwa 35 km Höhe mit Abweichungen meist unter 10 %. In diesem Höhenbereich tendiert *GOME* zu einer Überschätzung des Ozongehaltes, im Mittel um 5 %. Für Ozonprofile unter Ozonlochbedingungen im winterlichen Polarwirbel ist eine detailliertere Untersuchung notwendig, die insbesondere sicherstellen muss, dass beide Instrumente die gleichen Luftmassen sehen. Die hier benutzte einfache räumliche Koinzidenz reicht nicht aus, stattdessen müssen die meteorologischen Bedingungen, insbesondere auch die Vorgeschichte der Luftmassen im gesamten vom jeweiligen Instrument beobachteten Bereich berücksichtigt werden.

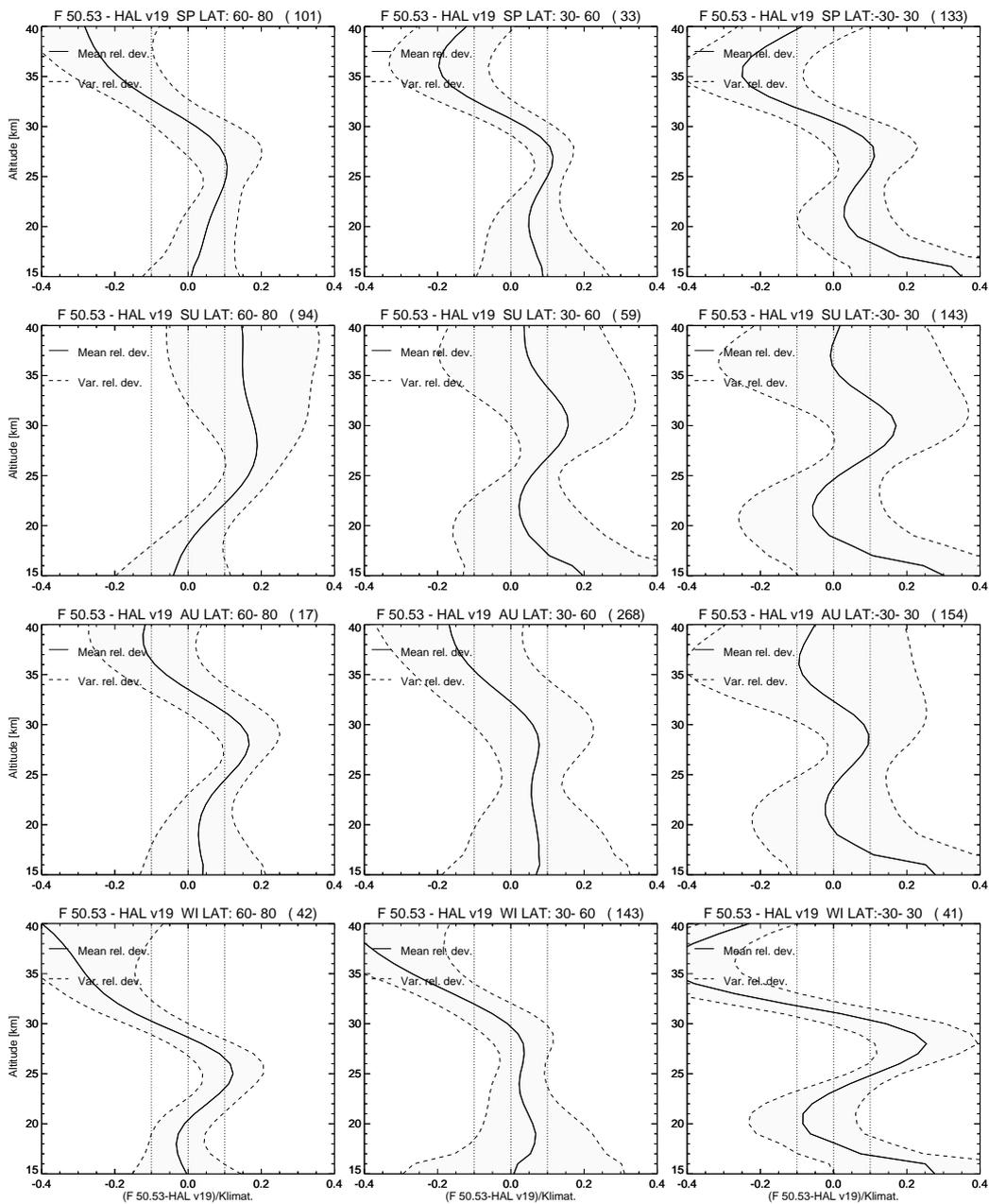


Abbildung 10.2: Statistik des saisonalen und meridionalen Vergleiches zwischen GOME- und HALOE-Ozonprofilen. Die durchgezogene Linie ist jeweils die mittlere relative Abweichung, die grau hinterlegte Fläche gibt den Bereich der Standardabweichung der relativen Abweichung an. **Von Oben nach Unten:** April – Juni, Juli – September, Oktober – Dezember, Januar – März. **Von Links nach Rechts:** 80° N – 60° N, 60° N – 30° N, 30° N – 30° S.

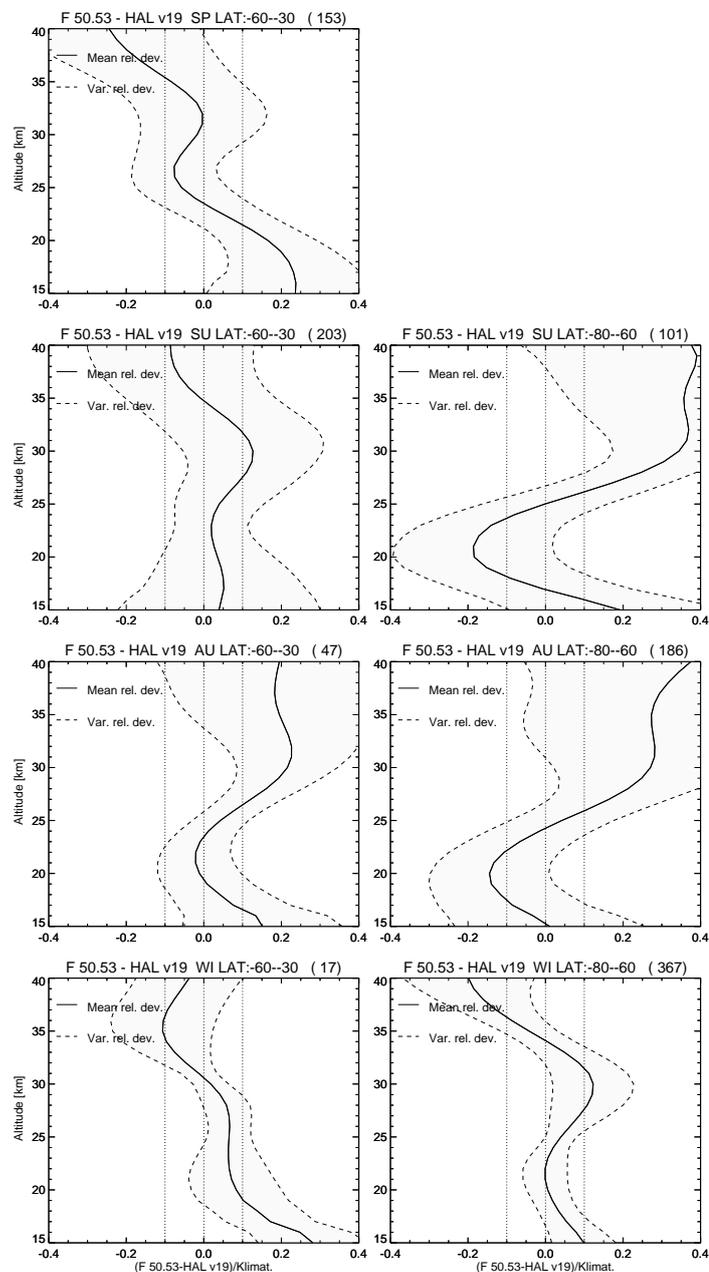


Abbildung 10.3: Statistik des saisonalen und meridionalen Vergleiches zwischen GOME- und HALOE-Ozonprofilen. Die durchgezogene Linie ist jeweils die mittlere relative Abweichung, die grau hinterlegte Fläche gibt den Bereich der Standardabweichung der relativen Abweichung an. **Von Oben nach Unten:** April – Juni, Juli – September, Oktober – Dezember, Januar – März. **Von Links nach Rechts:** 30° S – 60° S, 60° S – 80° S.

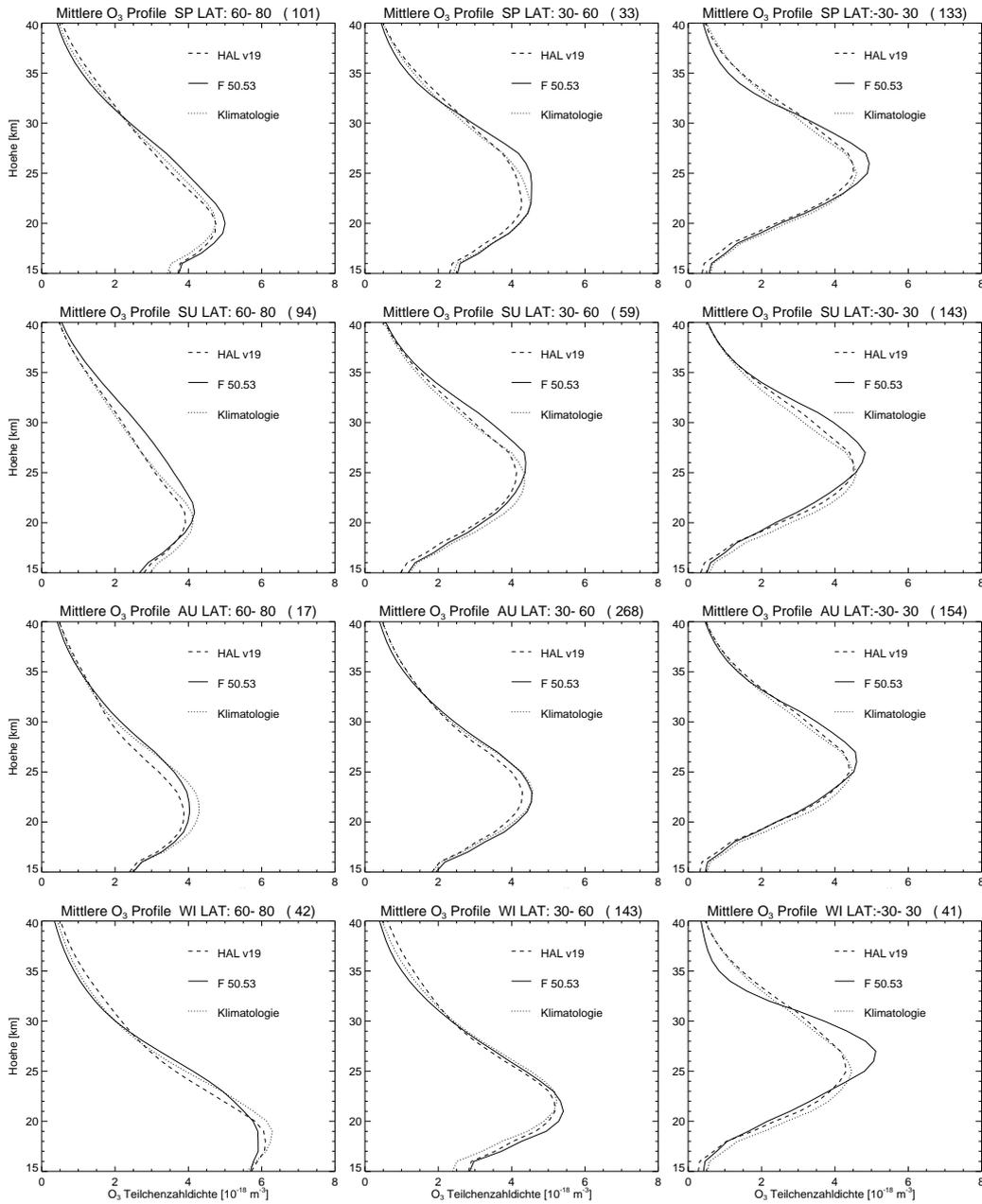


Abbildung 10.4: Mittlere Profile des saisonalen und meridionalen Vergleiches zwischen GOME- und HALOE-Ozonprofilen. **Von Oben nach Unten:** April – Juni, Juli – September, Oktober – Dezember, Januar – März. **Von Links nach Rechts:** $80^{\circ} N - 60^{\circ} N$, $60^{\circ} N - 30^{\circ} N$, $30^{\circ} N - 30^{\circ} S$.

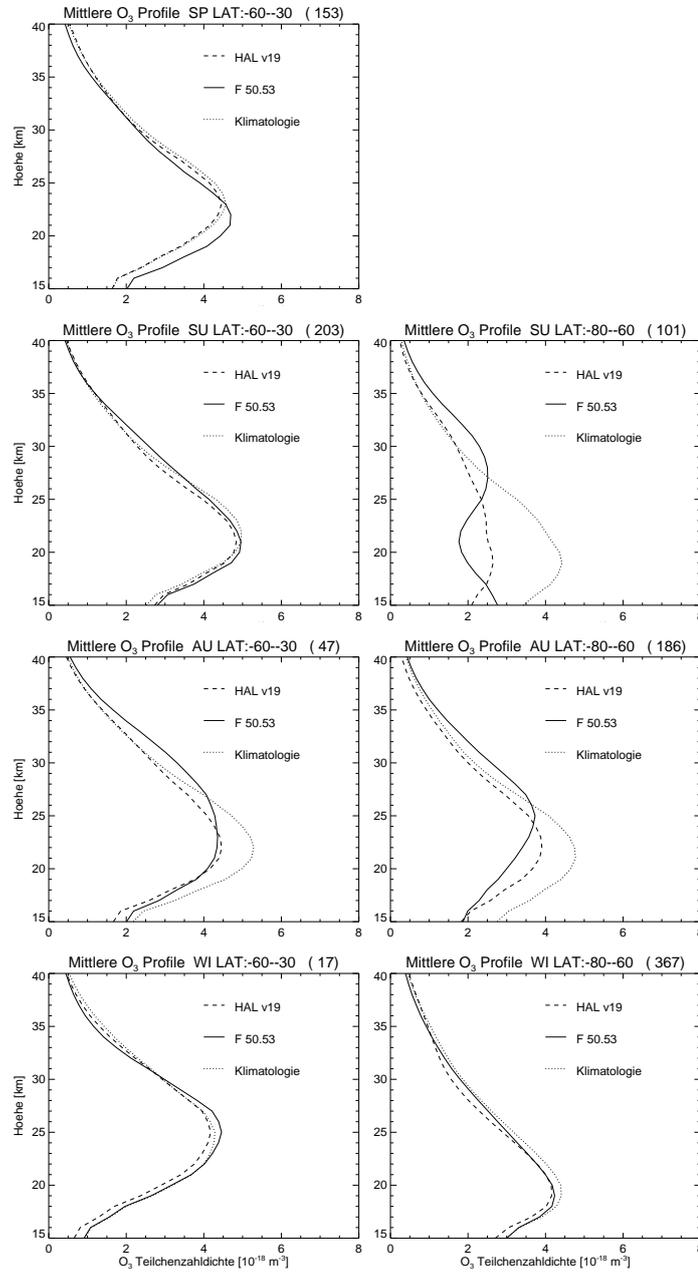


Abbildung 10.5: Mittlere Profile des saisonalen und meridionalen Vergleiches zwischen GOME- und HALOE-Ozonprofilen. **Von Oben nach Unten:** April – Juni, Juli – September, Oktober – Dezember, Januar – März. **Von Links nach Rechts:** 30° S – 60° S, 60° S – 80° S.

Zone	Monate	Anz.	20 – 30 km		30 – 40 km		SZW [°]
			MRA [%]	SMRA [%]	MRA [%]	SMRA [%]	
80° N – 60° N	04–06	101	8.22	4.23	-11.06	9.53	44.25
	07–09	94	12.82	4.95	16.17	16.59	48.28
	10–12	17	9.15	4.84	1.77	11.01	65.87
	01–03	42	5.87	4.85	-21.58	11.48	66.05
60° N – 30° N	04–06	33	8.04	3.71	-9.13	9.41	32.75
	07–09	59	6.49	6.29	11.18	19.60	38.62
	10–12	268	6.52	6.17	-3.11	16.54	61.59
	01–03	143	3.44	5.28	-17.03	10.73	55.60
30° N – 30° S	04–06	133	7.16	5.62	-12.34	11.17	32.54
	07–09	143	2.61	10.33	8.98	21.88	31.53
	10–12	154	3.08	9.96	-0.80	22.78	35.13
	01–03	41	9.06	6.08	-17.93	13.46	36.33
30° S – 60° S	04–06	153	0.93	7.01	-5.81	13.10	66.16
	07–09	203	4.66	6.63	4.94	17.47	65.64
	10–12	47	4.27	5.25	21.00	17.52	39.30
	01–03	17	6.46	5.41	-5.20	7.56	46.51
60° S – 80° S	04–06	—	—	—	—	—	—
	07–09	101	-3.77	13.76	36.28	21.66	70.87
	10–12	186	0.35	11.67	28.29	28.36	54.25
	01–03	367	3.46	3.01	1.67	6.98	66.30

*Tabelle 10.2: Statistik des saisonalen und meridionalen Vergleichs zwischen GOME- und HALOE-Ozonmengen in den beiden Höhengschichten von 20–30 km und von 30–km. **MRA:** Mittlere relative Abweichung in Prozent ((GOME - HALOE) / Klimatologie). **Anzahl:** Anzahl der Profile. **SMRA:** Standardabweichung der mittleren relativen Abweichung in Prozent. **SZW:** Mittlerer Sonnenzenitwinkel in Grad.*

Kapitel 11

Vergleich der Ozonsäule

Mit der Berechnung von Profilen liefert *FURM* selbstverständlich auch Gesamtozonwerte, indem die Profile über die Höhe integriert werden. Das *World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre (WOUDC)* ist Teil des *Global Atmosphere Watch (GAW)* Programmes der *World Meteorological Organization (WMO)* und sammelt die Daten von Messstationen in der ganzen Welt, die Ozon oder ultraviolette Strahlung messen. Ein wichtiges Netzwerk für Gesamtozon besteht aus weit über hundert *Dobson Spektrometern*, von denen einige seit den zwanziger Jahren messen. Die Messwerte dieser Stationen werden im Folgenden mit den aus *GOME* Ozonprofilen abgeleiteten Gesamtozonwerten verglichen. Zusätzlich stehen noch weitere Datensätze zur Verfügung, die in Abschnitt 11.2 näher erläutert werden: Dies sind das operationelle Gesamtozon von *GOME* in der Version 2.70, die Messwerte von Earthprobe *TOMS* sowie Messwerte, die unter Verwendung des *TOMS*-Auswertalgorithmus aus den *GOME*-Daten gewonnen wurden.

11.1 Das Dobson Spektrometer

Die ersten Dobson Spektrometer wurden 1927 von G.M.B. Dobson entwickelt [28, 27]. Seither ist dieser Instrumententyp ein wichtiges Gerät in der routinemäßigen Bestimmung von Ozonsäulen. Das Ozonloch in der Antarktis wurde erstmals durch ein Dobsonspektrometer beobachtet [36]. Dobson-Geräte nutzen die Ozonabsorption in den Huggins-Banden in direktem oder gestreutem Licht. Mit der differentiellen Messung eines Wellenlängenpaares kann die differentielle Absorption von Sonnenlicht durch Ozon zusammen mit der differentiellen Streuung durch Moleküle und Aerosole bestimmt werden. Bei der Verwendung eines zweiten Wellenlängenpaares kann die Streuung effektiv herausgerechnet werden, da sich deren Absorptionsverhalten nur sehr langsam mit der Wellenlänge ändert. Dobsonspektrometer nutzen ein Doppelspektrometer, das das Streulicht besser unterdrückt, wobei jeweils zwei Wellenlängen durch zwei separate Spalten isoliert

werden. Es sind mehrere Wellenlängenpaare für diese Geräte üblich, die durch Buchstaben gekennzeichnet werden. Die wichtigsten sind das A–Paar (305.5 nm und 325.4 nm), das B–Paar (308.8 nm und 329.1 nm), das C–Paar (311.45 nm und 332.4 nm), das D–Paar (317.6 nm und 339.8 nm) sowie das C'–Paar (332.4 nm und 453.6 nm). Gesamt ozonmessungen im direkten Sonnenlicht werden üblicherweise mit den AD– oder CD–Doppelpaaren vorgenommen. Für Zenitmessungen steht außerdem das CC'–Doppelpaar zur Verfügung, wobei C' Informationen über Aerosole liefert [43]. Durch die *Umkehrmethode* können Dobsongeräte auch zur Gewinnung von Ozonprofilen verwendet werden [40].

Die Kalibration von Dobsongeräten ist recht aufwendig, historische Datensätze erreichen daher nur eine Genauigkeit von 5–10 %. Seit Mitte der siebziger Jahre werden die Geräte im Dobsonmessnetz gegen ein Referenzdobsongerät geeicht. Das Referenzgerät steht am Mauna Loa Observatorium auf Hawaii und trägt die Bezeichnung N 83 [55]. Die relative Unsicherheit der Dobsongeräte wird nun mit 2 % angegeben [3]. Seit 1960 werden die Daten der Dobsonstation durch die WOUDC (*World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre*, damals noch *World Ozone Data Centre (WODC)*) gesammelt und der Wissenschaft zur Verfügung gestellt [98]. Die hier verwendeten Daten wurden über die Internetseiten des WOUDC bezogen [45].

11.2 Die Satellitenmessungen

Folgende Datensätze für Gesamt ozon, die aus Satellitenmessungen von *GOME* und dem *Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS)* gewonnen wurden, standen zur Verfügung:

GOMEFURM: Über die Höhe integrierte *GOME* Ozonprofile.

GOMEDOAS: Operationelle *DOAS* Auswertung der *GOME* Daten.

EPTOMS: *TOMS* auf dem Satelliten Earthprobe.

GOMETOMS: Anwendung der *TOMS* Datenauswertung auf *GOME* Spektren.

Die primäre Satellitenmessung ist das aus den *GOME* Ozonprofilen integrierte Gesamt ozon, diese Daten werden im Folgenden mit GOMEFURM bezeichnet. Es wurden die meteorologischen Daten von *UKMO*, die *KNMI* Ozonklimatologie sowie die feste Varianz der a–priori Ozonprofile von 30 % benutzt, siehe auch Zusammenstellung in Anhang E.

Die *Differentielle Optische Absorptions Spektroskopie (DOAS)* wird für die operationelle Bestimmung von Gesamt ozon aus *GOME*–Messungen verwendet. Gesamt ozon ist, zusammen mit NO_2 –Säulen, ein offizielles Datenprodukt der *ESA* und wird routinemäßig vom *DFD* der *DLR* erstellt. Der hierfür verwendete *GDP*

ist Teil der *ESA Data Processing and Archiving Facility (D-PAF)* von *GOME* ist.

Das *DOAS* Verfahren bestimmt die schräge Säule eines Spurengases durch eine Minimierung der Differenz im Sinne der kleinsten Quadrate (*Least Square Fit*) einer Linearkombination von Referenzabsorptionsspektren und einem Ring-Referenzspektrum zur gemessenen optischen Dichte [67, 68]. Anschließend werden mit Hilfe eines Strahlungstransportmodells (*GOMETRAN*) unter der Annahme einer vorgegebenen Profilform die sogenannten Luftmassenfaktoren (*Air Mass Factor AMF*) berechnet, die die Umrechnung der schrägen Säulen in Gesamtsäulen erlauben. *GOME* Gesamt ozon wird im spektralen Fenster von 325–335 nm gefittet [19].

Die *TOMS*-Geräte sind eine Instrumentenserie der *NASA*, die seit 1978 auf vier Plattformen geflogen sind: *Nimbus-7*, *Meteor-3*, *ADEOS* und *Earth Probe*. Seit 1978 liefert die *TOMS*-Serie globale Gesamt ozonverteilungen, nur von Dezember 1994 bis August 1996 gab es kein funktionstüchtiges Gerät im Orbit. Die hier verwendeten Daten stammen von *Earth Probe TOMS*, das seit dem 1. Juli 1996 in der Umlaufbahn ist.

TOMS benutzt 6 diskrete Wellenlängen von 312.5 bis 380 nm, die mit einem Einfachmonochromator selektiert werden, um Gesamt ozon zu bestimmen. Die von der Erde rückgestreute Strahlung wird in Nadirgeometrie beobachtet, *TOMS* tastet dabei, ähnlich wie *GOME*, quer zur Flugrichtung ab, allerdings mit einem Winkelbereich von 105° [43]. Die Auswertung erfolgt mit einem Verfahren ähnlich dem der Dobsongeräte, aus der Messung mehrerer Wellenlängenpaare kann die differentielle Absorption von Sonnenlicht durch Ozon bestimmt werden. Zusätzlich besitzt *TOMS* ein *IR*-Photometer, das der Bestimmung der Wolkenbedeckung dient. Im Fall von Wolken sieht *TOMS* das troposphärische Ozon unterhalb der Wolken nicht; um dennoch Gesamt ozonwerte zu erhalten, wird in diesem Fall ein klimatologischer Ozongehalt unterhalb der Wolke angenommen [6]. Die Fehlerbreite von *TOMS* wird mit 2 % angegeben [7, 65].

Die *GOME* Spektren umfassen auch die von *TOMS* beobachteten Wellenlängen. Daher kann das *TOMS* Auswerteverfahren auch mit Daten aus den *GO-ME*-Spektren durchgeführt werden. Dieses Vorgehen ermöglicht zum einen den Vergleich der radiometrischen Kalibration beider Geräte, zum anderen eine Überprüfung des Algorithmus von *TOMS* im Hinblick auf eine saubere Trennung der Bestimmung der Spektraldaten von der eigentlichen Ozonbestimmung.

11.3 Die Vergleichsdatensätze

Es wurden alle Koinzidenzen von *GOME* bzw. *TOMS* Messungen mit den Dobsonstationen der nördlichen Hemisphäre seit März 1996 (Beginn der Auswer-

Messung	GOMEFURM	GOMEDOAS	EPTOMS	GOMETOMS
Kollokationen	26053	42488	58321	51363

Tabelle 11.1: Anzahl der Kollokationen der Satellitenmessungen mit den Dobsonstationen

temöglichkeit von *GOME* Ozonprofilen) bis Ende 1998 gesucht. Kriterien waren dabei:

- Messung am selben Tag
- Kürzester Abstand vom Ort der Dobsonstation zum Mittelpunkt des nächstgelegenen *GOME/TOMS* Grundpixel, maximal 300 km.

Tabelle 11.1 gibt die Anzahl der gefundenen Kollokationen, die je nach Auswerteverfahren auch für die *GOME*-Messungen unterschiedlich ist, da jeweils andere Voraussetzungen für die Verwendbarkeit eines Pixels gegeben sind. Insbesondere für GOMEFURM macht sich die Einschränkung auf maximal 76° Sonnenzenitwinkel durch eine deutlich verminderte Anzahl von verwertbaren Kollokationen bemerkbar.

Insgesamt wurden Kollokationen für 79 Stationen gefunden, die meisten davon in Europa und Nordamerika. Abbildung 11.1 zeigt die Lage der Stationen und die jeweilige Anzahl der Kollokationen im Falle von GOMEFURM. Die größte Anzahl mit 611 findet sich für Poprad-Ganovce in der Slowakei. Die vollständige Liste der Stationen ist in Tabelle D.1 verzeichnet.

11.4 Wochenmittel

Für alle Gesamtozonwerte der Satellitenmessungen und –auswertungen wurden die Abweichungen zu den korrespondierenden Messungen der Dobsonstationen berechnet. Hier ist die relative Abweichung in der üblichen Form gemäß Gleichung (7.1) definiert, also $(\text{Satellit} - \text{Dobson})/\text{Dobson}$. Tabelle 11.2 fasst die mittleren relativen und absoluten Abweichungen zusammen. Die geringsten Abweichungen zeigen sich für die mit *FURM* berechneten Gesamtozonwerte, allerdings auch mit der größten Fehlerbreite. Angesichts der für die Dobsongeräte angegebenen Genauigkeit von 2 % stimmen alle Datensätze sehr gut mit den Bodenmessungen überein.

Zur genaueren Analyse wurden die Abweichungen jeweils wochenweise zusammengefasst und gegen die Zeit aufgetragen. In Abbildung 11.4 ist die Anzahl der Datenpunkte für die Wochenmittel wiedergegeben. Die Datenpunkte sind im Allgemeinen gleichmäßig über die Wochen verteilt, für den GOMEFURM Datensatz

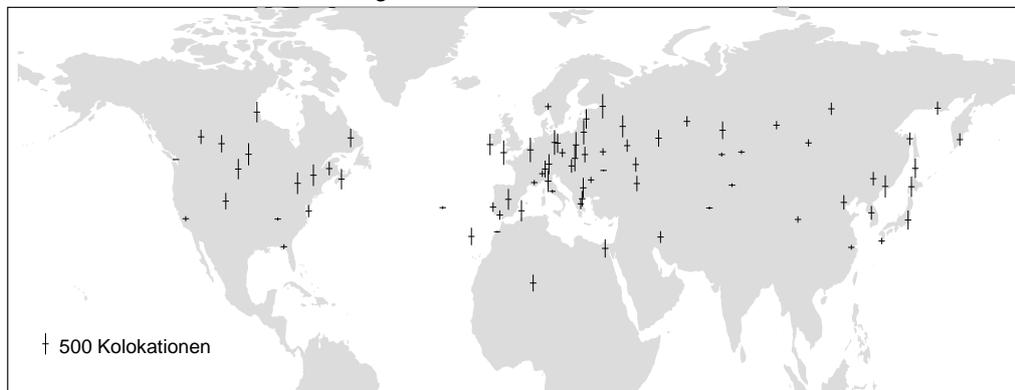
Tot. O₃ : DOBSON Stationen

Abbildung 11.1: Verwendete Dobsonstationen der nördlichen Hemisphäre. Die Länge der senkrechten Striche gibt die Anzahl der gefundenen Kollokationen mit den GOMEFURM Messungen der jeweiligen Station wieder. Die waagerechten Striche markieren die Position der Station.

	MAA [DU]	SMAA [DU]	MRA [%]	SMRA [%]	#
GOMEFURM	-0.16	21.66	0.16	6.45	26053
GOMETOMS	-3.12	17.42	-0.78	5.62	51363
EPTOMS	3.69	15.18	1.44	5.28	58321
GOMEDOAS	-4.33	17.83	-1.26	5.85	42656

Tabelle 11.2: Mittlere Abweichungen der Gesamtozonwerte der Satelliten- von den Dobsonmessungen. **MAA**: Mittlere absolute Abweichung in DU (Satellit - Dobson). **SMAA**: Standardabweichung der mittleren absoluten Abweichung in DU. **MRA**: Mittlere relative Abweichung in Prozent ((Satellit - Dobson) / Dobson). **SMRA**: Standardabweichung der mittleren relative Abweichung in Prozent.

findet man etwa 400 Vergleiche je Woche. Abbildung 11.3 zeigt die Ergebnisse des Vergleichs, Abbildung 11.2 gibt für den Vergleich der FURM-Daten mit den Dobsonwerten die jeweiligen Standardabweichung an, die bei etwa 5 % liegt. Die anderen Auswertungen zeigen ähnliche Standardabweichungen.

Die mit FURM berechneten Gesamtozonwerte liegen zwar im Mittel fast bei Null, allerdings zeigt sich ein deutlicher saisonaler Trend. Im Winter berechnet FURM etwa 2 % höhere Ozonsäulen als Dobson, während zur Jahresmitte etwa 2 % niedrigere Werte ermittelt wurden. Während Ende der Jahre 96 und 97 jeweils ungefähre Übereinstimmung zwischen den beiden Messmethoden zu beobachten

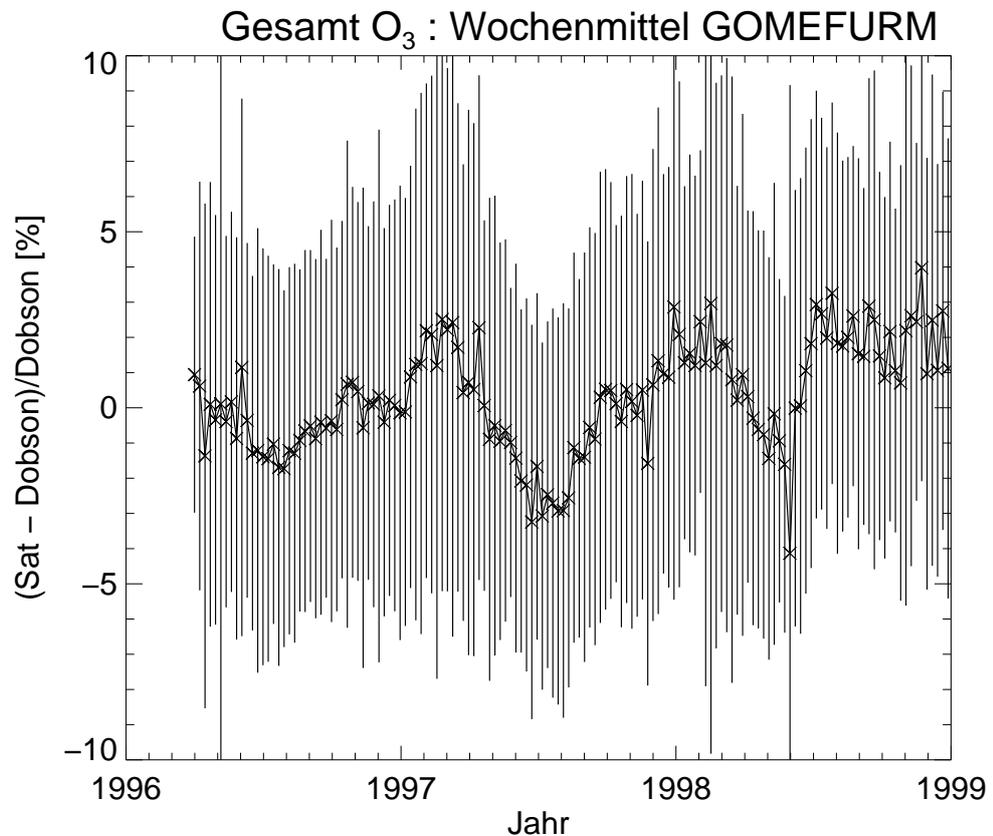


Abbildung 11.2: Wochengemittelte relative Abweichungen von FURM Gesamtozon zu Dobson. Die senkrechten Striche geben die Standardabweichung des jeweiligen Mittelwertes an.

ist, ist für das zweite Halbjahr 98 durchgehend eine Überschätzung von FURM um 2 % zu beobachten. Mitte 1998 wurde die Grenze zwischen den Bändern 1A und 1B verschoben (siehe Abschnitt 2.7). Wie in Abschnitt 8.4 bereits erläutert, hat dies Konsequenzen für die erhaltenen Spektren, da im Wellenlängenbereich von 283 – 307 nm die Integration des Signals nicht mehr im Instrument stattfindet, sondern die kalibrierten Spektren nachträglich gemittelt werden. Dies ist möglicherweise ein Grund für den Musterwechsel Mitte 98, allerdings zeigt auch der GOMETOMS Kurve im zweiten Halbjahr 98 nicht mehr den Anstieg der Vorjahre, obwohl nur Wellenlängen oberhalb von 312.5 nm benutzt werden. Es muss also noch andere Ursachen für den Musterwechsel Mitte 98 geben, die derzeit noch nicht bekannt sind.

Die mit dem operationellen DOAS Verfahren ermittelten Gesamtozonwerte liegen im Mittel 1.3 % unter den Dobsonmessungen. Auch sie zeigen einen saisonalen Jahresgang, der gegenüber der FURM-Auswertung um etwa 2 bis 3 Monate phasenverschoben ist, so dass im März und April die Abweichungen bis +1.5

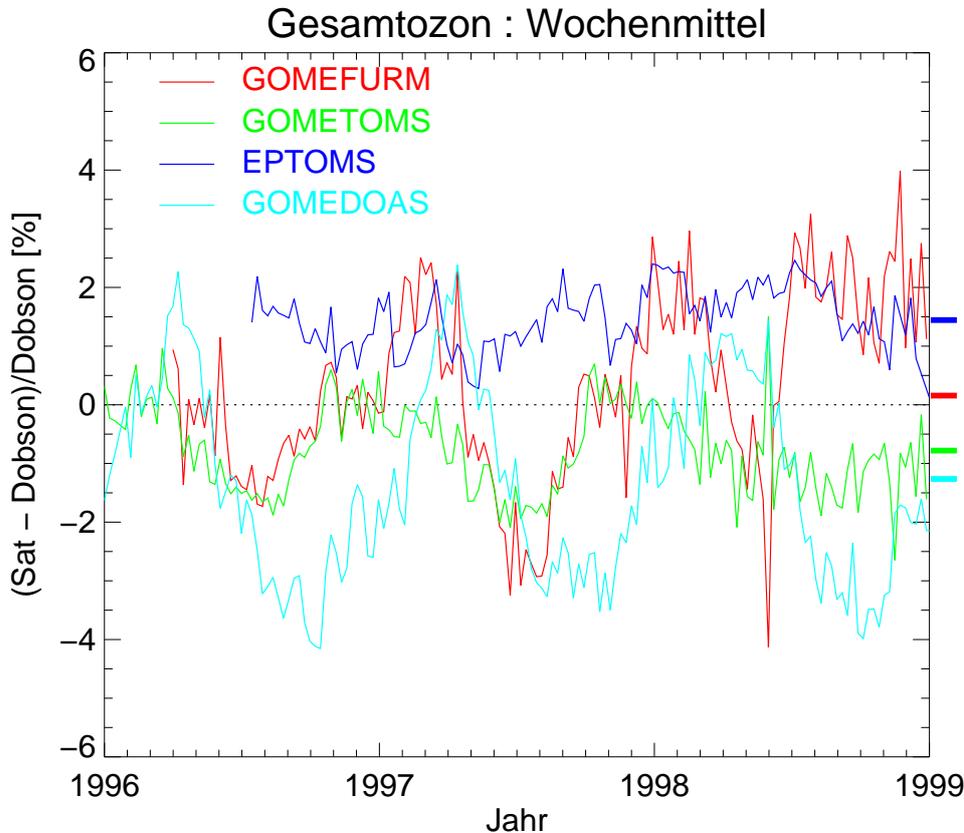


Abbildung 11.3: Wochengemittelte relative Abweichungen der Satelliten- zu den Dobsonmessungen. Die waagerechten Linien Markierungen an der rechten Seite geben den Mittelwert über den gesamten Zeitraum an.

bis +2 % erreichen, während im September und Oktober bis –4 % Abweichung üblich sind.

Auch die mit der *TOMS* Datenauswertung aus *GOME* Daten ermittelten Werte zeigen einen Jahresgang, der ähnlich der *FURM* Auswertung ist, jedoch die hohen positiven Abweichungen zu Beginn der Jahre 97 und 98 auslöst und stattdessen nur geringfügig niedrigere Werte als die Dobsongeräte zeigt. Auch hier ändert sich das Muster Mitte 98, bis Ende dieses Jahres liegt die Abweichung dann bei –1 %.

Die *TOMS* Messung zeigt im Mittel 1.5 % höhere Werte als die Dobsonmessungen an, die Variationen um diesen Wert sind gering und ein saisonaler Effekt ist nicht zu erkennen.

Die Ergebnisse für *TOMS* und *GOME* (*DOAS*) Gesamtozon entsprechen den Beobachtungen anderer Autoren. In [8] werden diese beiden Gesamtozonwerte verglichen, das Muster für die nördlichen mittleren Breiten entspricht dem hier

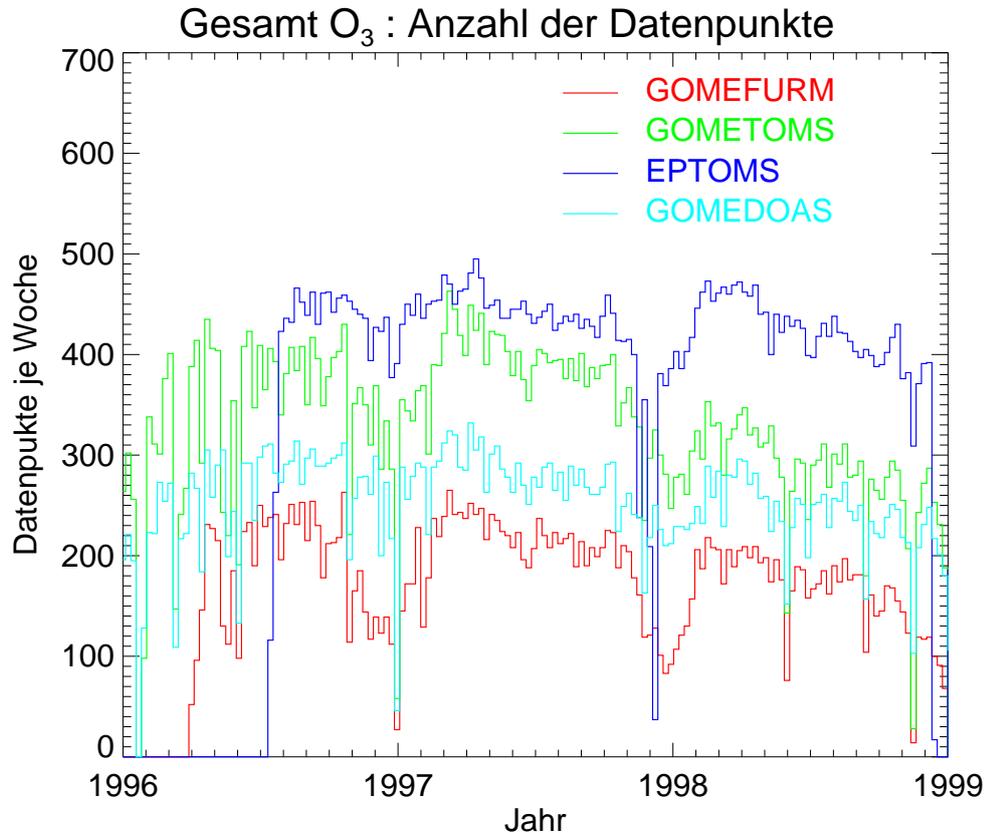


Abbildung 11.4: Anzahl der Datenpunkte je Wochenmittel

beobachten: Die größten Differenzen zwischen den Instrumenten ist im Sommer zu beobachten, während im Frühjahr ähnliche Werte zu beobachten sind. *GOME* Gesamtozon wurde auch anhand von Messungen des *NDSC* (*Network for the Detection of Stratospheric Change*) validiert [61]. Hier werden Abweichungen im Bereich von $\pm 2\text{--}4\%$ angegeben. Saisonale Variationen waren besonders ausgeprägt für hohe Sonnenzenitwinkel und für hohe Breiten.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass alle drei auf *GOME* Daten beruhenden Gesamtozonmessungen einen deutlichen Jahresgang zeigen, wenn auch wegen der unterschiedlichen Methoden nicht denselben. Es liegt der Schluss nahe, dass der Grund hierfür jahreszeitliche Variationen in den *GOME* Spektren selbst sind. Bekannte Probleme dieser Art sind die fehlerhafte *BSDF*-Korrektur (siehe Abschnitt 6.8 und die winkelabhängigen Interferenzmuster (siehe Abschnitt 6.9) des Sonnendiffusers.

Das in der *FURM* Auswertung verwendete Sonnenspektrum ist eine Mittelung aus 15 bis 20 Einzelsonnenmessungen, die aufgenommen werden, während die Sonne durch das Beobachtungsfeld der Kalibrationseinheit wandert. Es werden noch mehr Spektren aufgenommen (etwa 150), aber nur bei den verwendeten

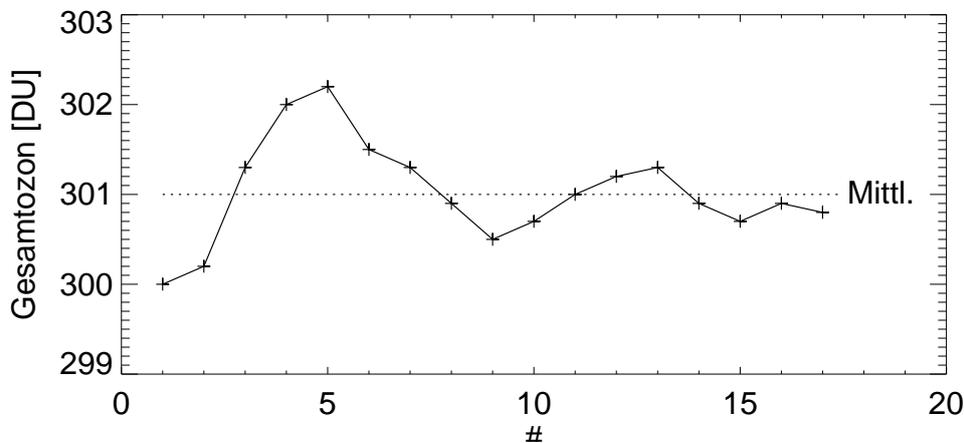


Abbildung 11.5: FURM Gesamtozon in Abhängigkeit vom verwendeten Sonnenspektrum. Die Kreuze markieren das Gesamtozon bei Verwendung der Einzelspektren, die in das mittlere Sonnenspektrum eingehen. Die gepunktete Linie markiert den Gesamtozonwert, der bei Verwendung des mittleren Spektrums ermittelt wurde. Die erhaltene Profile sind annähernd identisch.

Spektren wird der Eingangspalt vollständig ausgeleuchtet. Diese Einzelmessungen unterscheiden sich im wesentlichen durch die Winkel, unter denen der Diffuser beleuchtet wird, vergleichbar der Variation der Winkel im Laufe eines Jahres. Abschnitt 11.5 zeigt die Variation des Gesamtozons in Abhängigkeit vom verwendeten Sonnenspektrum. Die Abweichung beträgt bis zu ± 1 DU oder $\pm 0,33\%$ bei der Verwendung eines Einzelsonnenspektrums. Insbesondere fällt auf, dass die Abweichungen nicht zufällig variieren, sondern eine wellenförmige Abhängigkeit von der Nummer der Messung und damit vom Beleuchtungswinkel haben. Diese Beobachtung passt zur Annahme eines winkelabhängigen Interferenzmuster. Die Profile selbst sind annähernd identisch. Zumindest ein Teil des Jahresganges in den GOME Gesamtozonwerten lässt sich so erklären.

Auffallend in Abbildung 11.3 ist, dass einige Feinstrukturen sich in allen 4 Datensätzen wiederfinden. Beispielsweise taucht das positive Maximum der Abweichung der DOAS Messungen Anfang April 97 in den anderen 3 Datensätzen als lokales Maximum auf. Der Grund hierfür liegt in den Dobsonmessungen und wird im folgenden Abschnitt untersucht.

11.5 Stationsbezogener Vergleich

Anstatt wie im vorigen Abschnitt die Datensätze zeitlich zusammenzufassen und zu mitteln, wird in diesem Abschnitt eine räumlich Mittelung vorgenommen. Da-

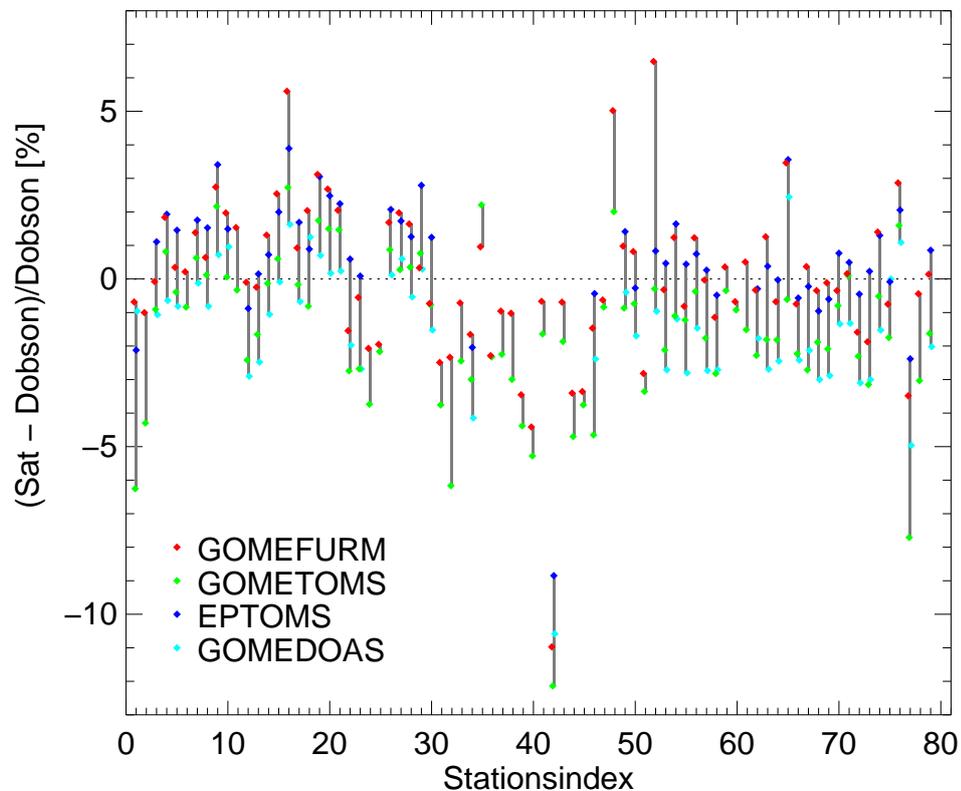


Abbildung 11.6: Mittlere relative Abweichung der Satellitenmessungen zu den Messungen der Dobsonstationen. Die senkrechten grauen Linien dienen der Zuordnung der Punkte untereinander.

für bietet es sich an, die Messungen an den einzelnen Stationen zu mitteln. Abbildung 11.6 zeigt die Ergebnisse als Plot der relativen Abweichung gegenüber dem Stationsindex. Anhand von Tabelle D.1 kann aus dem Stationsindex Lage und Name der jeweiligen Station ermittelt werden. In Tabelle D.2 ist für jede Station die Einzelauswertung aufgelistet, das heißt zu jeder Auswertung der Satellitenmessung ist die Anzahl der Kollokationen, die mittlere relative Abweichung und deren Standardabweichung angegeben.

Auffällig ist, dass alle 4 Datensätze ein ähnliches Muster in den Abweichungen über den Stationsindex zeigen. Insbesondere einige Extrema treten in allen 4 Datensätzen auf. Am auffälligsten ist sicher die Station Sofia (Bulgarien, Index 42), die zwischen 8 und 11 % höhere mittlere Ozonsäulen als die Satellitendaten zeigt. Um 3 bis 7 % höhere Werte liefert Esfahan (Iran, Index 77). Niedrigere Ozonwerte liefern beispielsweise Vigna Di Valle (Italien, Index 16) und Poprad-Ganovce (Slowakei, Index 76) mit 1 bis 5 % Abweichung. Die meisten Stationen bewegen sich allerdings innerhalb der für Dobsonstationen angegebenen Genau-

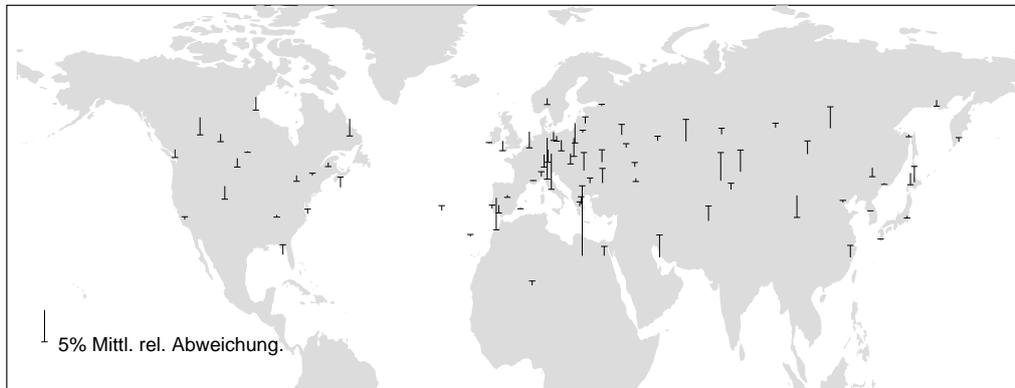
Tot. O₃ : Mittl. rel. Abw. FURM – Dobson

Abbildung 11.7: Geografische Verteilung der Mittleren Relativen Abweichungen der FURM Gesamtozonwerte gegenüber den Dobsonstationen. Die Größe und das Vorzeichen der Abweichung wird durch Richtung und Länge der senkrechten Striche dargestellt ((Satellit - Dobson) / Dobson). Die maximale Abweichung mit -11% tritt in Sofia, Bulgarien auf. Die waagerechten Striche markieren die Position der Station.

igkeit von 2%, wenn die in Tabelle 11.2 angegebenen Offsets der jeweiligen Satellitenmessungen berücksichtigt werden.

Da in den Wochenmitteln im vorigen Abschnitt die Stationen ungleichmäßig verteilt sind, ist ein Teil der Variationen auf die Offsets der Messungen an den einzelnen Stationen zurückzuführen und finden sich daher in allen vier Datensätzen unabhängig vom Instrument wieder.

Um eine geografische Abhängigkeit der systematischen Abhängigkeiten von den Stationen auszuschließen, sind in Abbildung 11.7 die relativen Abweichungen der Stationen auf eine Karte geplottet. Es sind keine besonderen Auffälligkeiten wie etwa eine Breitengradabhängigkeit zu erkennen.

Kapitel 12

Zusammenfassung und Ausblick

Seit mehreren Jahren wird am Institut für Umweltphysik ein Algorithmus zur Inversion von Ozonprofilen aus dem Spektren des *GOME*-Instrumentes entwickelt. Die grundlegenden Verfahren sind getestet und implementiert. Die vorliegende Arbeit konzentriert sich auf die Weiterentwicklung des Verfahrens zur routinemäßigen Auswertung realer Messdaten.

Untersucht wurde die Qualität der Spektren; verschiedene Fehlerquellen, die ihren Grund in der unzureichenden Kalibration des Gerätes haben, konnten im verwendeten Spektralbereich identifiziert werden. Nur für wenige dieser Probleme ist derzeit ein Lösungsansatz bekannt und verfügbar. Dies sind die Degradation vom *PMD 1* und die damit verbundenen Folgen für die Polarisationskorrektur sowie die ungenügende Charakterisierung der Streueigenschaften des Diffusers in der Kalibrationseinheit. Es wurde gezeigt, dass beide Effekte kaum Einfluss auf die Bestimmung der Profile haben, insbesondere zeigte sich keine Verbesserung durch Anwendung der Korrekturen. Die verwendete effektive Korrektur der Spektren durch den Inversionsalgorithmus selbst mit der Verwendung der Chebyshev-Polynome ist sehr effektiv für die mittleren Breiten. Für tropische Profile ist dieses Verfahren nicht ausreichend. Allerdings muss betont werden, dass in allen Fällen bereits ausreichend gute Ozonprofile abgeleitet werden können.

Die verbleibenden Probleme in der Kalibration sind wesentlich auf die Existenz der Grenze zwischen den Kanälen 1 und 2 bei etwa 314 nm zurückzuführen. In diesem Bereich sind Extrapolationen in der Wellenlängeneichung notwendig, die besonders kritisch sind, da die Kalibrierungsfunktionen in diesem Bereich starke Gradienten haben. Zudem sind auch Probleme in den Kalibrierungsfunktion selbst bekannt, zu nennen sind hier der Luft-zu-Vakuum Effekt der Antwortfunktion und die Temperaturabhängigkeit in der η Funktion. Hier sind fortführende Arbeiten zur Verbesserung der Qualität der Spektren notwendig. Langfristiges Ziel sollte sein, auch ohne effektive Korrektur der Spektren hochwertige Ozonprofile zu erhalten.

Erstmals wurde in dieser Arbeit systematisch die Bedeutung der Ozonklimatolo-

gie, insbesondere auch deren statistischen Eigenschaften, für die Ozonprofilauswertung mit *FURM* untersucht. Es wurde gezeigt, dass realistische Werte in der Klimatologie von großer Wichtigkeit für das hier eingesetzte Optimal-Estimation Verfahren sind. Eine ungenügende Klimatologie hat großen Einfluss auf die Qualität der Auswertung, wie hier am Beispiel der auf einem einfachen 2D-Modell basierenden *MPI*-Klimatologie gezeigt wurde. Die hier standardmäßig verwendete *KNMI*-Klimatologie weicht in den Tropen ebenfalls recht deutlich vom mittleren Profil der hier verwendeten Ozonsondenmessungen ab, was einen Teil der Probleme der Ozonprofilauswertung in den Tropen macht. Die statistischen Eigenschaften der Klimatologie, das heißt die Varianz der mittleren Profile muss für eine gute Auswertung ebenfalls bekannt sein. Insbesondere unter ungewöhnlichen Bedingungen mit abweichenden Ozonprofilen ist eine korrekte Statistik der Auswertung notwendig, wie am Beispiel eines Ozonminilochereignisses gezeigt wurde. Die *KNMI*-Klimatologie stützt sich leider nur in mittleren Breiten auf eine ausreichende Anzahl von Messungen, um auch über die Statistik der Ozonklimatologie verlässliche Angaben zu machen.

Ebenfalls untersucht wurde die Relevanz geeigneter meteorologischer Daten. Ihre Bedeutung für die Ozonprofilauswertung wurde bisher unterschätzt. Ungenaue Druck- und Temperaturprofile können die Ergebnisse deutlich beeinflussen. Die Verwendung meteorologischer Felder, die aus gemessenen Daten assimiliert werden, ist daher geboten.

Die globale Validation der *GOME* Profile mit den Messungen von *HALOE* zeigt in den meisten Fällen eine Abweichung der Profile zwischen 15 und 35 km von unter 10 %, was für zwei grundverschiedene Instrumente ein sehr guter Wert ist. Information über die Ozonverteilung oberhalb von 35 km ist in dem hier verwendeten Spektralbereich der *GOME* Auswertung kaum vorhanden, unterhalb von 15 km liegen die Grenzen des *HALOE* Instrumentes.

Das Gesamt Ozon von *FURM* stimmt mit den Messungen des Dobson Netzwerks bis auf $\pm 2\%$ überein und liegt damit innerhalb der angegebenen Genauigkeit von Dobson Messungen. *FURM* ist damit auch ein guter, wenn auch sehr rechenaufwendiger Algorithmus zur Bestimmung von Gesamt Ozon. Auffällig bei diesem Vergleich sind die jahreszeitlichen Schwankungen bei allen Verfahren, die die *GOME* Spektren auswerten. Als eine Ursache wurde der im Laufe eines Jahres variierende Winkel, unter dem der Diffuser der Kalibrationseinheit von *GOME* beleuchtet wird, identifiziert. Durch eine nicht perfekte Aufrauung der Oberfläche des Diffusers kommt es zu Interferenzmustern, die vom Beleuchtungswinkel abhängen.

Zusammenfassend wurde gezeigt, dass *GOME* Ozonprofile bereits jetzt ein gute Qualität haben und für wissenschaftliche Studien der Atmosphärenphysik und -chemie genutzt werden können. Genutzt wurde dies bereits mit Untersuchungen zum arktischen Ozonabbau und Ozonminilochereignissen, hier sei besonders auf [31] verwiesen.

Ausblick

Die Arbeiten zur Verbesserung der Kalibration beziehungsweise der Umgehung der sich daraus ergebende Probleme werden fortgesetzt werden. Weiterführende Ansätze nutzen zusätzliche Information aus den O_4 Linien, um die effektive Kalibrationskorrektur zu stabilisieren. Ungewöhnlich große Koeffizienten für die Ringspektren bei Fitfenstern unterhalb von 300 nm deuten auf eine ungenügende Korrektur der Spektren mittels der Chebyshev-Polynome in diesem Bereich hin, erste Versuche mit anderen Funktionen in diesem Bereich liefern vielversprechende Ergebnisse insbesondere bei tropischen Profilen. Möglicherweise ergibt sich dadurch die Möglichkeit, auch Wellenlängen unterhalb von 290 nm zu nutzen, was sich bisher als nicht sinnvoll erwiesen hat. Dies würde zu besseren Resultaten oberhalb von 35 km führen.

In Zusammenarbeit mit dem Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin ist ein neues Projekt in Planung, in dem eine bessere Ozonklimatologie erstellt werden soll. Insbesondere sollen auch die zahlreichen aktuellen Messungen des letzten Jahrzehnts berücksichtigt werden, die die Veränderung in der Ozonschicht, insbesondere das arktische Ozonloch, wiedergeben. Hierbei sollen auch Varianzen und möglichst die Kovarianzen der klimatologischen Profile ermittelt werden. Weitere Überlegungen gehen dahin, neben saisonaler und zonaler Größen auch dynamische Größen wie beispielsweise die potentielle Wirbelstärke oder die Tropopausenhöhe als Unterteilungsmerkmal in der Klimatologie zu nutzen.

In der Anwendung der Ozonprofile wurden bereits umfangreiche Untersuchungen zu den Themen arktische Ozonverlusten und Ozonminilöcher durchgeführt. Diese Arbeiten werden fortgesetzt, weitere Themen werden hinzukommen, insbesondere werden Ozonprofile in Zukunft auch außerhalb des Instituts genutzt werden. Für viele Untersuchungen ist eine weitere Beschleunigung der Auswertung nötig, um in absehbarer Zeit auch globaler Datensätze erzeugen zu können.

Die Validation wird mit weiteren Instrumenten fortgesetzt werden, konkret in Vorbereitung ist ein Vergleich mit Messungen des Satelliteninstrumentes *SAGE II*. Der Gesamtzonvergleich wird noch mit aktuellen Messungen fortgeschrieben werden.

Voraussichtlich Anfang 2002 wird die erweiterte Version von *GOME*, *SCIAMACHY*, auf *ENVISAT* gestartet werden. Ebenfalls in Planung ist *GOME-II* für das Jahr 2003. Beide Instrumente werden mit derselben spektralen Auflösung, aber mit höherer räumlicher Auflösung, in Nadirgeometrie beobachten. *FURM* kann daher ohne wesentliche Modifikationen auch die Spektren dieser Instrumente auswerten. Die Vorbereitung der Auswertung von *SCIAMACHY* Daten wird hier am Institut erfolgen, es kann daher erwartet werden, dass bereits kurz nach dem Start von *SCIAMACHY* Ozonprofile aus den Nadirmessungen ermittelt werden können. *SCIAMACHY* wird die Atmosphäre auch in Limb- und Okkultationsgeometrie beobachten können, hier können vertikal hochaufgelöste Ozonprofile

erwartet werden. Der direkte Vergleich von Nadir- und Limbprofilen wird für beide Auswerteverfahren neue Impulse zur Verbesserung der Algorithmen geben; davon wird auch die Auswertung der *GOME* Spektren profitieren.

Anhang A

Auflistung der Parameter in *FURM*

In Tabelle A.1 werden noch einmal alle Parametereinstellungen in der *FURM* Auswertung zusammengestellt, wie sie in dieser Arbeit benutzt wurden. *Abschnitt* bezieht sich auf den jeweiligen Teil der Arbeit, in dem die genannten Einstellungen benutzt wurden, bezeichnet durch Abschnitts- beziehungsweise Kapitelnum-

Abschnitt		Ver- sion	Cheb. Poly.	Korrektur		A-priori O ₃		T,p Daten
				<i>PMD 1</i>	<i>BSDF</i>	Prof.	Var.	
8.1 Chebych.	Vgl.	15	X	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
	Test	17	–	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
8.2 <i>PMD 1</i>	Vgl.	15	X	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
	Test	15	X	X	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
8.3 <i>BSDF</i>	Vgl.	15	X	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
	Test	15	X	–	X	F&K	30%	<i>UKMO</i>
8.4 Neue Pixel		12	X	–	–	F&K	F&K	<i>UKMO</i>
9.1 O ₃ -Klimat.	Vgl.	15	X	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
	Test	18	X	–	–	<i>MPI</i>	30%	<i>UKMO</i>
9.2 O ₃ -Varianz	Vgl.	15	X	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
	Test	12	X	–	–	F&K	F&K	<i>UKMO</i>
9.3 Meteorol.	Vgl.	12	X	–	–	F&K	F&K	<i>UKMO</i>
	Test	13	X	–	–	F&K	F&K	<i>MPI</i>
10 <i>HALOE</i>		53	X	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>
11 O ₃ -Säule		53	X	–	–	F&K	30%	<i>UKMO</i>

Tabelle A.1: Liste der Einstellungen der *FURM* Auswertungen in den Abschnitten dieser Arbeit. Erläuterungen siehe Text.

mer und ein Stichwort. *Vgl.* ist der Datensatz mit den Standardeinstellungen, in *Test* wurde die zu untersuchende Einstellung oder Korrektur geändert beziehungsweise angewendet. *Version* bezieht sich auf die interne Nummer des verwendeten Satzes an Parameterdateien, die *FURM* steuern. Diese Nummer ist auch in vielen Abbildungen wiederzufinden. *Cheb. Poly.* bezeichnet die effektive Kalibrationskorrektur mit Hilfe der Chebyshev–Polynome; *X* bedeutet Anwendung der Korrektur. Die Korrektur für die *PMD 1* Degradation sowie die asymmetrische *BSDF* Parametrisierung sind nicht Teil der Parameterdateien, da dies die Spektren betrifft, daher ist die Parameterdateinummer hier immer gleich. *X* bedeutet ebenfalls Anwendung der Korrektur. Die *a-priori Ozonprofile* können der Ozonklimatologie von Fortuin und Kelder (*F&K*, [37, 38]) oder der Modellklimatologie des *MPI Mainz (MPI)*, [14]) entnommen werden. Die *a-priori Varianzen des O₃* werden entweder auf einen für alle Höhen festen Wert von 30% gesetzt, oder sie werden ebenfalls der Ozonklimatologie von Fortuin und Kelder (*F&K*) entnommen. Die meteorologischen Daten, das heißt die aktuellen Profile von Druck und Temperatur (*p, T*) stammen aus den assimilierten meteorologischen Feldern, die von *UKMO* zur Verfügung gestellt werden [88]. Außerdem enthält auch die Modellklimatologie des *MPI Mainz (MPI)* Druck- und Temperaturprofile.

Im folgenden werden die Einstellungen in *FURM* aufgelistet, die für alle Auswertungen in dieser Arbeit gelten.

Spektralbereich: 290 – 345 nm .

Höhenschichten im Vorwärtsmodell: 71 (0 - 70 km).

Fitparameter: O₃ auf 71 Schichten.

Skalierungsfaktoren für

- die Oberflächenalbedo,
- das Aerosol-Teilchendichteprofil,
- das NO₂-Teilchendichteprofil,
- das Druckprofil.

Additiver Wert für

- das Temperaturprofil.

O₃ Absorptionsquerschnitte: *GOME-FM* Spektren [21].

NO₂ Absorptionsquerschnitte: *GOME-FM* Spektren [20].

Albedodatenbank: Guzzi [44].

Aerosol Datenbank: *LOWTRAN-7*[54].

Wolkenbehandlung: Erhöhung der Bodenalbedo gemäß Wolkenbedeckungsgrad aus *PMD*-Messung.

Anhang B

Sondenmessungen in den Testdatensätzen

In den folgenden drei Tabellen sind alle Sondenmessungen zusammengestellt, die für die drei Testdatensätze (siehe Kapitel 7) verwendet wurden. Dazu angegeben sind das nächstliegende *GOME* Grundpixel und der Orbit, in dem dieses Pixel liegt, sowie die Entfernung vom Mittelpunkt des *GOME* Pixels zum Startort der Sonde.

Tabelle B.1: Hohenpeißenberg Sonden

<i>GOME</i> Datei	Grundpixel	Entfernung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grundpixel	Entfernung	Sonde
60422094	0774	118.22	ho960422.b06	80420101	0476	49.02	ho980420.b05
60424103	0478	42.02	ho960424.b08	80427094	0790	116.75	ho980427.b05
60624096	0894	48.80	ho960624.b06	80429102	0774	40.69	ho980429.b05
60719101	0857	93.46	ho960719.b10	80506096	0817	99.35	ho980506.b05
60722103	0564	15.41	ho960722.b05	80518102	0840	21.96	ho980518.b05
60726095	0851	145.03	ho960726.b10	80525100	0862	35.56	ho980525.b05
60805094	0834	118.21	ho960805.b05	80603102	0588	43.22	ho980603.b09
60807102	0812	46.00	ho960807.b05	80610096	0892	101.50	ho980610.b05
60814096	0797	100.89	ho960814.b05	80622103	0602	11.29	ho980622.b05
60826102	0736	9.84	ho960826.b05	80706094	0898	117.21	ho980706.b05
60909094	0694	120.06	ho960909.b05	80708102	0880	42.36	ho980708.b05
60911103	0375	44.93	ho960911.b05	80715096	0878	24.86	ho980715.b05
60927102	0592	94.49	ho960927.b05	80724102	0565	92.72	ho980724.b05
61004100	0570	144.11	ho961004.b05	80727102	0840	19.37	ho980727.b05
61016103	0503	43.08	ho961016.b05	80803100	0833	49.29	ho980803.b05
61023101	0481	100.38	ho961023.b05	80810094	0817	117.14	ho980810.b05
61206103	0345	93.93	ho961206.b06	80819096	0777	100.59	ho980819.b05
61209104	0047	21.24	ho961209.b06	80907101	0412	51.77	ho980907.b05

Tabelle B.1: Fortsetzung

<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde
61213101	0347	145.01	ho961213.b06	80914095	0666	118.47	ho980914.b05
61216102	0052	50.20	ho961216.b06	80923100	0618	99.75	ho980923.b05
61223095	0347	118.96	ho961223.b06	81012101	0529	49.45	ho981012.b05
61225103	0315	42.70	ho961225.b08	81019095	0506	117.89	ho981019.b05
70110103	0063	95.28	ho970110.b06	81021103	0480	40.71	ho981021.b07
70113103	0353	9.06	ho970113.b06	81028101	0458	92.93	ho981028.b06
70117101	0378	145.21	ho970117.b06	81106103	0399	90.73	ho981106.b06
70120101	0382	50.24	ho970120.b06	81109104	0123	12.47	ho981109.b06
70127095	0411	118.35	ho970127.b06	81113101	0403	146.81	ho981113.b06
70129104	0115	44.28	ho970129.b06	81123095	0387	117.21	ho981123.b06
70602102	0743	13.34	ho970602.b05	81202101	0358	100.95	ho981202.b06
70609096	0757	50.97	ho970609.b05	81211103	0055	93.92	ho981211.b06
70707103	0590	13.08	ho970707.b07	81214103	0329	15.41	ho981214.b08
70714101	0591	49.11	ho970714.b05	81218101	0343	145.55	ho981218.b06
70723102	0851	42.94	ho970723.b05	81230104	0047	42.75	ho981230.b06
70730096	0845	100.55	ho970730.b05	90106101	0350	100.72	ho990106.b07
70811102	0796	16.22	ho970811.b07	90115103	0357	134.44	ho990115.b06
70818100	0780	50.09	ho970818.b05	90118104	0083	17.42	ho990118.b06
70827103	0447	41.31	ho970827.b05	90125102	0112	48.34	ho990125.b06
70903100	0713	100.76	ho970903.b05	90201095	0423	116.89	ho990201.b06
70915103	0355	20.29	ho970915.b05	90203103	0411	40.85	ho990203.b06
70919100	0639	143.86	ho970919.b05	90210101	0450	100.80	ho990210.b09
70922101	0336	49.76	ho970922.b05	90219103	0199	91.89	ho990219.b06
70929095	0595	119.75	ho970929.b05	90222103	0492	12.78	ho990222.b08
71008101	0549	101.70	ho971008.b05	90223096	0514	43.51	ho990223.b06
71017103	0211	93.58	ho971017.b08	90225104	0219	112.94	ho990225.b06
71020103	0480	15.17	ho971020.b05	90301101	0533	50.60	ho990301.b06
71027101	0461	50.24	ho971027.b06	90304101	0543	44.40	ho990304.b16
71103095	0447	120.46	ho971103.b06	90310103	0287	40.97	ho990310.b06
71105104	0131	45.73	ho971105.b06	90317100	0609	99.60	ho990317.b06
71112101	0410	101.16	ho971112.b06	90326102	0640	135.71	ho990326.b06
71121103	0369	94.10	ho971121.b06	90329103	0656	18.80	ho990329.b05
71124104	0075	15.55	ho971124.b06	90402096	0682	146.48	ho990402.b06
71128101	0360	145.53	ho971128.b06	90414102	0724	41.74	ho990414.b05
71201102	0072	48.60	ho971201.b06	90421096	0761	100.47	ho990421.b07
71208095	0355	119.43	ho971208.b06	90430102	0502	93.19	ho990430.b05
71210103	0333	44.95	ho971210.b06	90503102	0792	13.49	ho990503.b05
71217101	0338	101.08	ho971217.b06	90510100	0826	48.70	ho990510.b05
71229103	0328	8.71	ho971229.b06	90517094	0850	116.72	ho990517.b05
80105101	0343	36.18	ho980105.b06	90519102	0558	40.69	ho990519.b05

Tabelle B.1: Fortsetzung

<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde
80112095	0370	117.03	ho980112.b07	90526096	0869	98.93	ho990526.b07
80114104	0071	42.35	ho980114.b06	90607103	0589	19.66	ho990607.b05
80130103	0401	92.81	ho980130.b06	90719096	0868	51.95	ho990719.b05
80202104	0123	17.42	ho980202.b06	90726094	0865	117.16	ho990726.b05
80206100	0438	146.29	ho980206.b06	90728102	0558	41.96	ho990728.b07
80209102	0163	49.57	ho980209.b06	90901102	0712	42.33	ho990901.b05
80216095	0486	116.46	ho980216.b06	90908100	0693	101.02	ho990908.b05
80218103	0476	41.14	ho980218.b06	90920103	0628	22.71	ho990920.b05
80225101	0518	23.73	ho980225.b06	90927101	0605	49.82	ho990927.b05
80306103	0267	92.53	ho980306.b06	91006103	0267	44.30	ho991006.b05
80316101	0605	47.92	ho980316.b06	91013101	0525	100.08	ho991013.b05
80323095	0646	117.78	ho980323.b06	91108095	0427	117.78	ho991108.B06
80325103	0350	42.01	ho980325.b06	91110103	0405	42.70	ho991110.b06
80401100	0678	100.82	ho980401.b05	91117101	0394	99.34	ho991117.b06
80410102	0701	93.84	ho980410.b06	91206101	0350	49.44	ho991206.b06

Tabelle B.2: Lauder Sonden

<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde
60523215	1910	12.23	NZ50B	71020221	1529	24.24	NZ543
60617220	1932	21.38	NZ51B	71023222	1517	90.71	NZ544
60729214	1885	98.54	NZ52B	71105221	1469	77.97	NZ547
60820216	1815	59.29	NZ53B	71127222	1404	91.65	NZ553
60917222	1681	147.15	NZ54B	71207221	1392	111.38	NZ555
60514214	1739	12.86	NZ464	71211214	1399	67.85	NZ556
60529220	1915	75.69	NZ465	71223221	1384	58.09	NZ67B
60605214	1935	149.52	NZ466	71229222	1359	19.72	NZ559
60703220	1929	75.62	NZ469	80105216	1386	95.41	NZ560
60716215	1915	57.26	NZ471	80115214	1426	66.38	NZ561
60725221	1893	92.24	NZ472	80121215	1434	151.32	NZ68B
60811214	1859	44.77	NZ474	80205222	1457	93.04	NZ563
60829221	1771	91.86	NZ475	80212220	1294	7.84	NZ564
60911221	1711	75.72	NZ477	80306221	1557	129.12	NZ566
60924216	1656	56.92	NZ478	80310214	1639	22.78	NZ567
61007215	1601	97.47	NZ480	80319216	1666	12.28	NZ568
61010216	1584	1.92	NZ481	80325221	1693	73.51	NZ70B
61017214	1563	66.61	NZ482	80331222	1698	147.92	NZ569
61022222	1521	146.89	NZ483	80429220	1837	74.14	NZ572
61114220	1446	12.02	NZ490	80506214	1856	151.41	NZ573

Tabelle B.2: Fortsetzung

<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde
61126223	1404	146.89	NZ493	80522214	1915	98.37	NZ575
61203216	1502	60.60	NZ495	80715214	1926	151.66	NZ583
61212222	1385	92.44	NZ498	80728213	1906	19.52	NZ585
70218214	1547	12.35	NZ58B	80819214	1820	151.27	NZ588
70318216	1667	57.12	NZ59B	80903221	1749	93.16	NZ590
70107221	1400	57.67	NZ502	80913220	1708	111.50	NZ591
70204222	1473	147.38	NZ505	80917214	1702	68.51	NZ592
70224215	1567	96.70	NZ507	80920214	1687	43.26	NZ593
70305221	1605	75.63	NZ508	81128222	1404	39.51	NZ601
70311222	1628	146.68	NZ509	81202215	1398	151.19	NZ602
70311222	1628	146.68	NZ510	81224220	1386	18.29	NZ605
70324221	1693	25.99	NZ511	81230221	1381	73.62	NZ606
70409221	1698	75.38	NZ513	90105223	1385	147.11	NZ607
70416214	1764	150.81	NZ514	90125216	1446	97.93	NZ610
70501221	1841	91.65	NZ60B	90207215	1495	43.54	NZ612
70521214	1911	150.13	NZ518	90216220	1524	59.61	NZ613
70527215	1920	59.93	NZ61B	90220214	1559	119.31	NZ75B
70612215	1894	2.36	NZ520	90411216	1768	113.62	NZ621
70618220	1935	75.04	NZ521	90427215	1832	56.85	NZ624
70708213	1941	16.87	NZ62B	90507214	1871	97.90	NZ625
70714214	1926	19.35	NZ525	90510215	1878	96.06	NZ626
70805215	1868	56.92	NZ63B	90525221	1901	148.62	NZ628
70824216	1797	49.60	NZ530	90611214	1943	97.26	NZ630
70906215	1746	43.65	NZ64B	90719214	1918	97.59	NZ636
70909216	1728	59.10	NZ533	90728220	1889	74.40	NZ637
71002214	1627	67.79	NZ539	90804214	1879	67.49	NZ638
71005214	1615	42.66	NZ65B	90902213	1774	65.47	NZ642
71017221	1549	130.06	NZ542	90908215	1738	151.19	NZ643

Tabelle B.3: SHADOZ Sonden. Die Abkürzungen für die Stationen sind:

ASC: Ascension Island, **FIJ:** Fiji, **IRE** Irene (Südafrika), **JAV:** Java (Indonesien), **NAI:** Nairobi (Kenia), **NAT:** Natal (Brasilien), **REU:** La Réunion (Frankreich, Indischer Ozean), **ASA:** Amerikanisch-Samoa, **CRI:** San Cristóbal (Galapagos-Inseln), **TAH:** Tahiti.

<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde
80119112	0711	93.79	ASC 980119	90407072	1233	16.54	NAI990407
80126106	0740	147.68	ASC 980126	90512072	1296	17.98	NAI990512
80129106	1032	3.49	ASC 980129	90609074	1354	45.06	NAI990609

Tabelle B.3: Fortsetzung

<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde
80227105	0877	17.84	ASC 980227	80325120	1241	80.98	NAT 980325
80302105	1169	148.58	ASC 980302	80429121	1116	83.10	NAT 980429
80305110	0893	7.08	ASC 980305	90105122	0944	70.98	NAT 990105
80501110	1134	64.17	ASC 980501	90127124	0715	135.26	NAT 990127
80511104	1453	145.99	ASC 980511	90219120	1099	157.92	NAT 990219
80514105	1181	3.99	ASC 980514	90407123	1019	133.87	NAT 990407
80608106	1503	94.90	ASC 980608	90414121	1057	81.25	NAT 990414
80713106	1500	94.11	ASC 980713	80611060	1603	46.82	REU 980611
80818104	1132	159.13	ASC 980818	80704054	1258	23.28	REU 980704
80824105	1104	147.90	ASC 980824	80924061	1304	43.77	REU 980924
80827105	1370	6.77	ASC 980827	81029061	1145	45.57	REU 981029
81027105	0821	159.37	ASC 981027	81210056	0785	50.98	REU 981210
81102106	0792	146.79	ASC 981102	90120061	1063	33.65	REU 990120
81127111	0989	61.39	ASC 981127	90331060	1296	34.32	REU 990331
81130111	0977	94.96	ASC 981130	90603054	1261	50.32	REU 990603
81207105	0982	147.21	ASC 981207	90609056	1569	32.21	REU 990609
81210111	0692	6.98	ASC 981210	80129210	1104	99.35	ASA 980129
90120111	0997	24.38	ASC 990120	80213213	1150	59.60	ASA 980213
90127105	1035	73.88	ASC 990127	80320212	1321	61.75	ASA 980320
90224111	0847	24.38	ASC 990224	80327210	1291	129.24	ASA 980327
90331110	1292	24.84	ASC 990331	80501206	1433	128.57	ASA 980501
90407104	1338	73.10	ASC 990407	80529212	1565	58.65	ASA 980529
90609106	1508	16.53	ASC 990609	80611211	1584	123.06	ASA 980611
80206215	1170	145.58	FIJ 980206	80618205	1602	97.48	ASA 980618
80213213	1212	64.95	FIJ 980213	80716211	1568	122.95	ASA 980716
80320212	1379	63.59	FIJ 980320	80723205	1566	98.47	ASA 980723
80423215	1500	153.47	FIJ 980423	80924212	1305	58.97	ASA 980924
80427213	1526	84.45	FIJ 980427	81001206	1281	98.33	ASA 981001
80715214	1613	71.57	FIJ 980715	81016213	1201	60.51	ASA 981016
80806215	1557	153.94	FIJ 980806	81023211	1112	129.12	ASA 981023
80904214	1445	83.59	FIJ 980904	81105210	1135	97.83	ASA 981105
80911213	1221	64.57	FIJ 980911	81203212	1048	123.54	ASA 981203
81123214	1122	84.22	FIJ 981123	90321212	1325	22.02	ASA 990321
81206213	1103	137.39	FIJ 981206	90328210	1311	53.96	ASA 990328
81218215	1076	145.16	FIJ 981218	90331211	1300	93.97	ASA 990331
81225213	1087	63.04	FIJ 981225	90413206	1438	22.95	ASA 990413
90226215	1261	145.46	FIJ 990226	90425212	1473	20.15	ASA 990425
90301215	1272	6.99	FIJ 990301	90502206	1453	53.45	ASA 990502
90402214	1425	145.42	FIJ 990402	80327160	1202	91.92	CRI 980327
90405215	1437	18.27	FIJ 990405	80402161	1220	113.26	CRI 980402

Tabelle B.3: Fortsetzung

<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde	<i>GOME</i> Datei	Grund- pixel	Entfer- nung	Sonde
90409212	1463	64.63	FIJ 990409	80912155	1223	87.05	CRI 980912
90507214	1557	144.59	FIJ 990507	81111161	0953	121.33	CRI 981111
81111075	1233	66.49	IRE 981111	90208161	0988	46.96	CRI 990208
81209081	1159	127.87	IRE 981209	90218156	1034	132.71	CRI 990218
90113081	1176	127.45	IRE 990113	90318161	1157	113.78	CRI 990318
90429073	1526	48.35	IRE 990429	90325155	1199	50.21	CRI 990325
90609074	1631	66.04	IRE 990609	90422161	1304	113.35	CRI 990422
80211022	1078	101.28	JAV 980211	90429155	1341	132.26	CRI 990429
80312021	1215	112.89	JAV 980312	80327192	1406	146.91	TAH 980327
80425022	1392	25.14	JAV 980425	80507193	1563	148.96	TAH 980507
80204075	0972	41.70	NAI 980204	80519195	1585	143.20	TAH 980519
80311074	1128	41.57	NAI 980311	80526193	1614	77.44	TAH 980526
80318072	1136	15.93	NAI 980318	80617194	1632	137.35	TAH 980617
80422072	1211	17.31	NAI 980422	80623195	1628	143.81	TAH 980623
80514073	1298	54.52	NAI 980514	80930195	1320	138.50	TAH 980930
80520074	1314	42.37	NAI 980520	81007193	1299	72.67	TAH 981007
80527072	1341	18.95	NAI 980527	81022196	1217	70.81	TAH 981022
80928073	1154	88.07	NAI 980928	81110200	1141	143.81	TAH 981110
81001073	1132	54.62	NAI 981001	90126194	1138	76.42	TAH 990126
81007074	1100	41.54	NAI 981007	90223200	1241	143.55	TAH 990223
81014072	1082	18.11	NAI 981014	90318194	1359	149.85	TAH 990318
81216075	0889	42.98	NAI 981216	90409194	1452	66.09	TAH 990409
81223073	0893	17.60	NAI 981223	90415195	1473	69.41	TAH 990415
90127073	0954	17.60	NAI 990127	90419193	1499	17.00	TAH 990419
90224075	1056	41.30	NAI 990224	90511193	1570	76.35	TAH 990511
90331074	1220	42.41	NAI 990331	90517194	1580	80.39	TAH 990517

Anhang C

Die mittleren Profile

Auf den folgenden Seiten sind die mittleren Profile abgebildet, die zu den in den Kapiteln 8 und 9 vorgestellten mittleren Abweichungen der Profile der Testdatensätze zu den Profilen der *FURM* Auswertungen gehören. Die Anordnung der Abbildungen entspricht der der Abbildungen in den genannten Kapiteln.

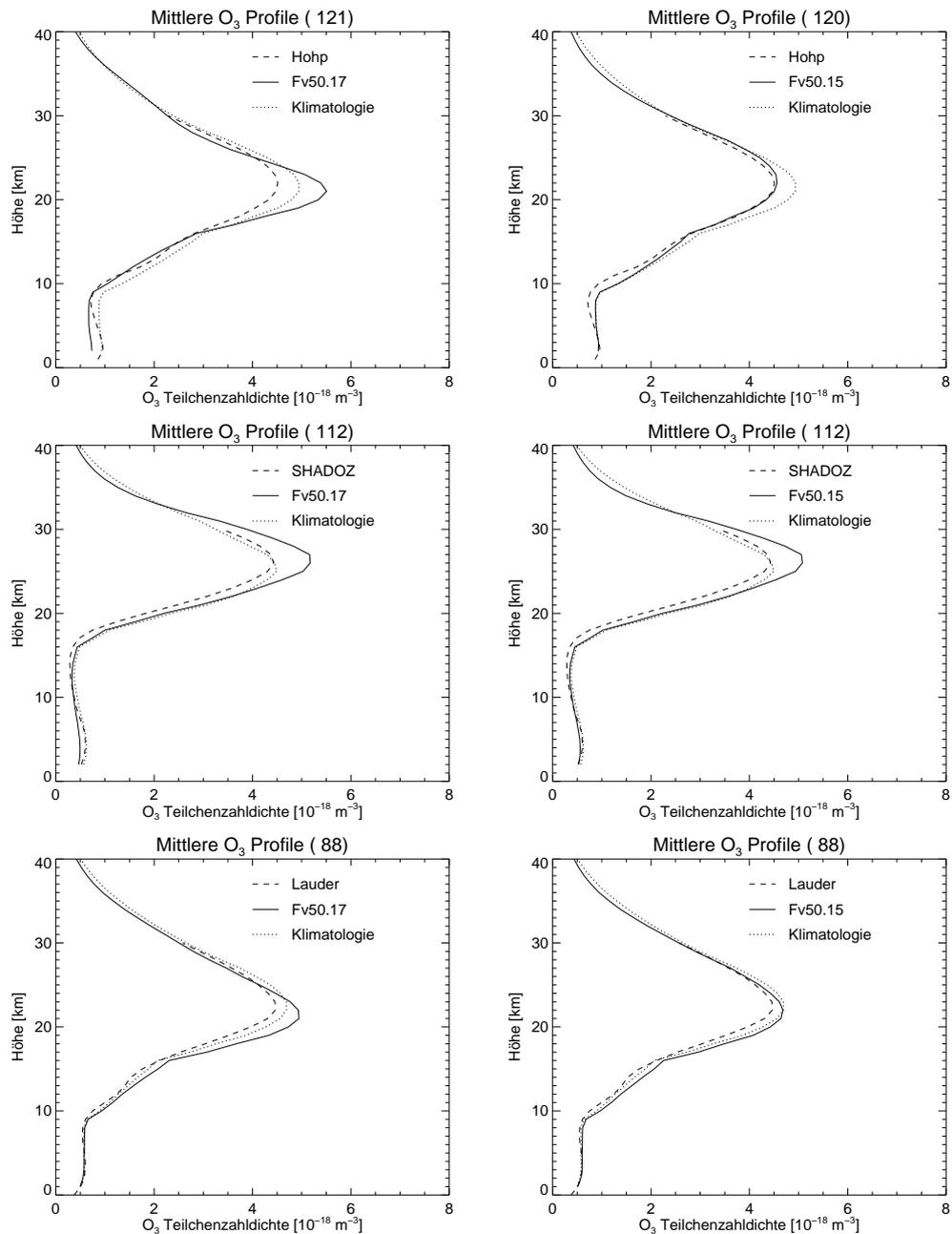


Abbildung C.1: Mittlere Profile der Auswertungen mit und ohne Verwendung der Chebyshev–Polynome in der FURM Auswertung. **Linke Spalte:** Auswertung ohne Chebyshev–Polynome. **Rechte Spalte:** Auswertung mit Chebyshev–Polynomen. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder. Die relativen Abweichungen sind in Abbildung 8.1 auf Seite Seite 79 zu finden.

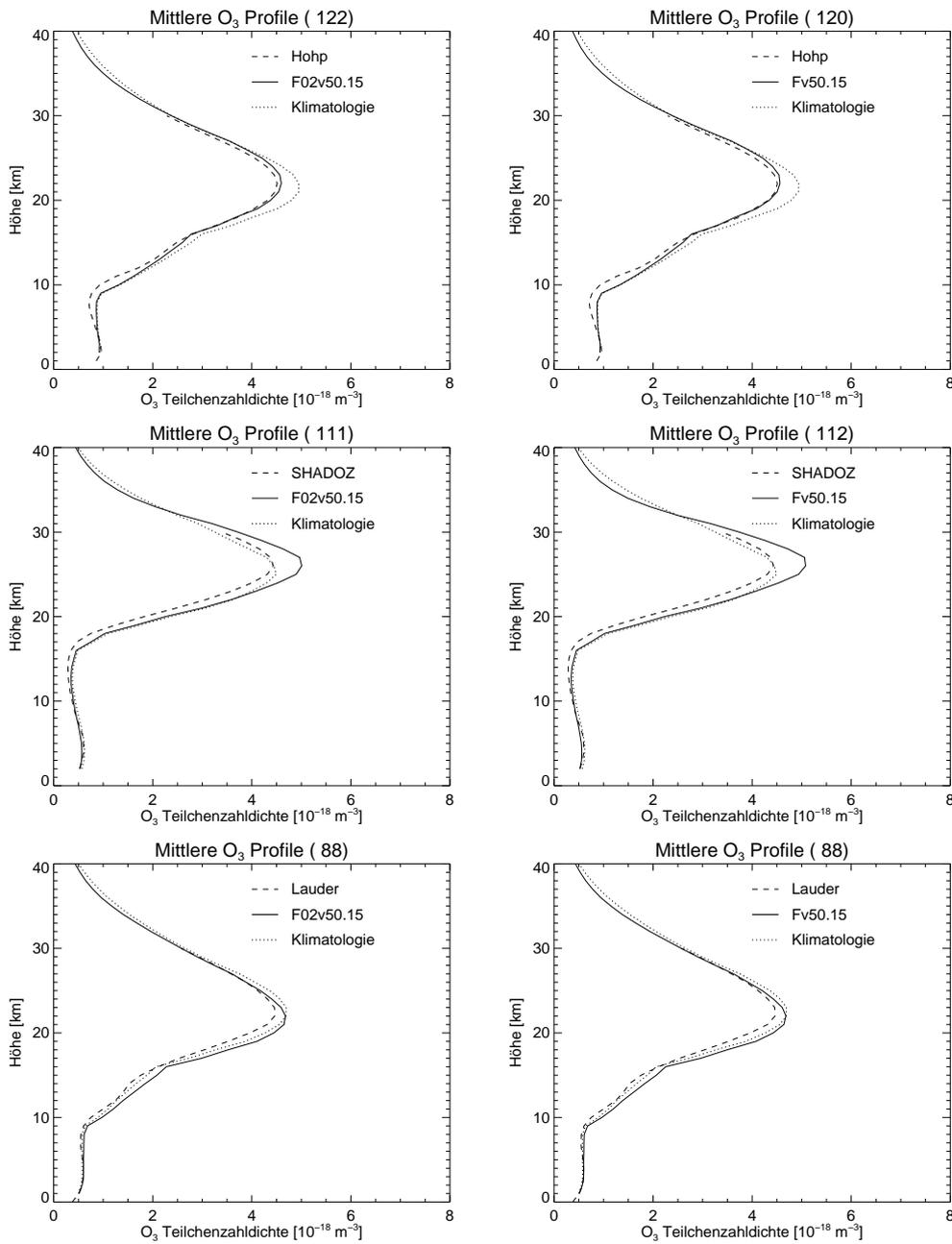


Abbildung C.2: Mittlere Profile mit und ohne Korrektur der Degradation von PMD 1 in den GOME Daten. **Linke Spalte:** PMD 1 Degradation korrigiert. **Rechte Spalte:** PMD 1 Degradation nicht korrigiert. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder. Die relativen Abweichungen sind in Abbildung 8.2 auf Seite 80 zu finden.

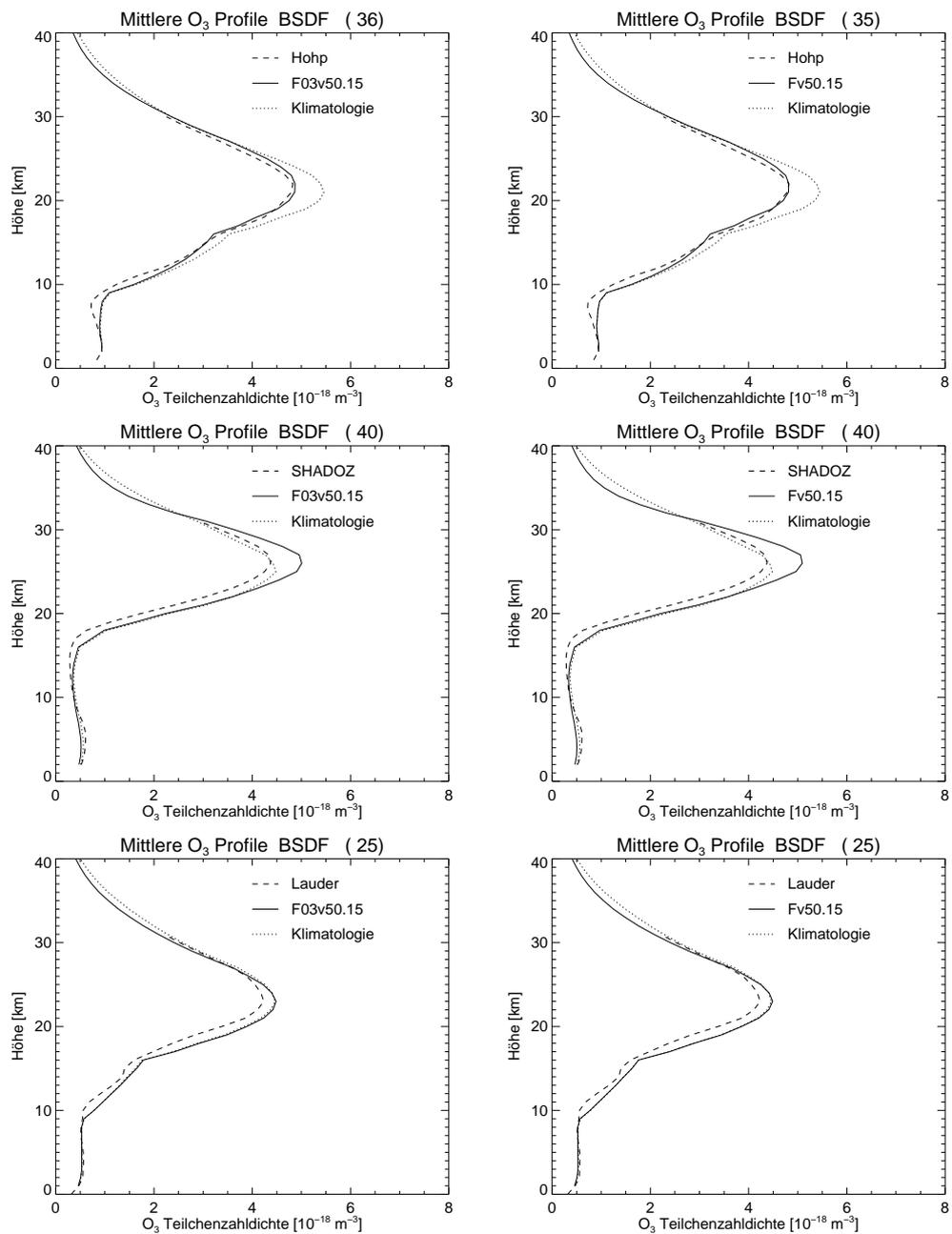


Abbildung C.3: Mittlere Profile mit und ohne asymmetrischer BSDF Parametrisierung in der FURM Auswertung. **Linke Spalte:** Azimutwinkel korrekt parametrisiert. **Rechte Spalte:** Azimutwinkel falsch parametrisiert. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder. Die relativen Abweichung sind in Abbildung 8.3 auf Seite 81 zu finden.

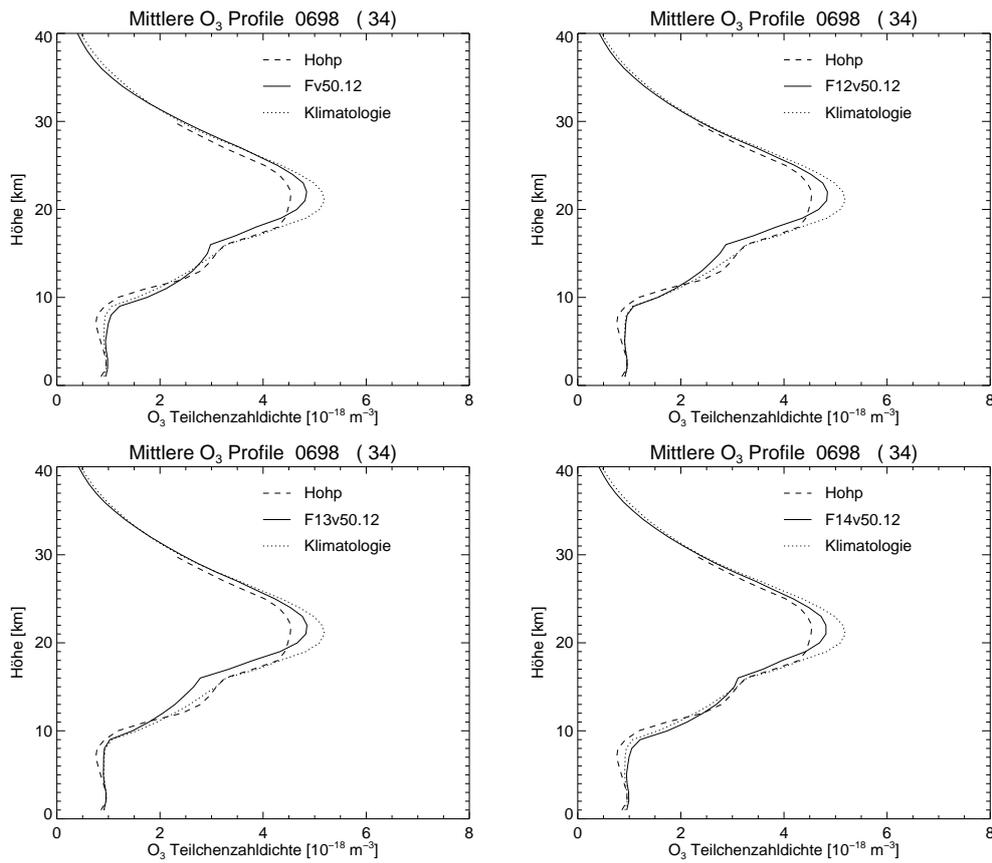


Abbildung C.4: Die mittleren Profile für 4 verschiedene Zusammenstellungen der GOME Grundpixel in der FURM Auswertung im Vergleich zu den Sondenmessungen in Hohenpeißenberg seit Juli 1998. **Von oben links nach unten rechts:** Bisherige 1A-Pixel, Ost, Nadir, West. Die relativen Abweichungen sind in Abbildung 8.5 auf Seite 83 zu finden.

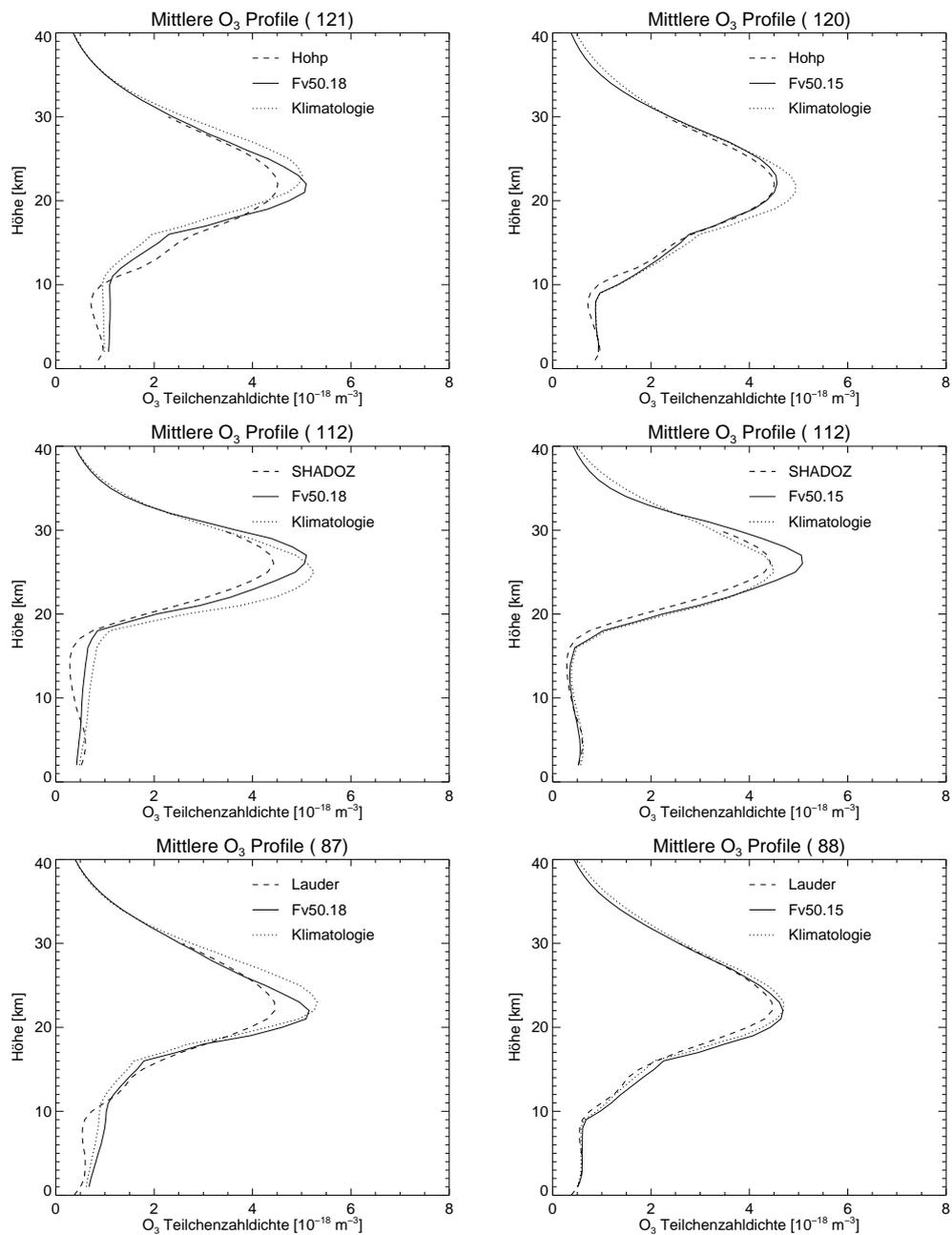


Abbildung C.5: Mittlere Profile in Abhängigkeit von der Wahl der a-priori-Ozonklimatologie in der FURM Auswertung. **Linke Spalte:** MPI-Klimatologie. **Rechte Spalte:** KNMI-Klimatologie. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder. Die relativen Abweichungen sind in Abbildung 9.1 auf Seite Seite 89 zu finden.

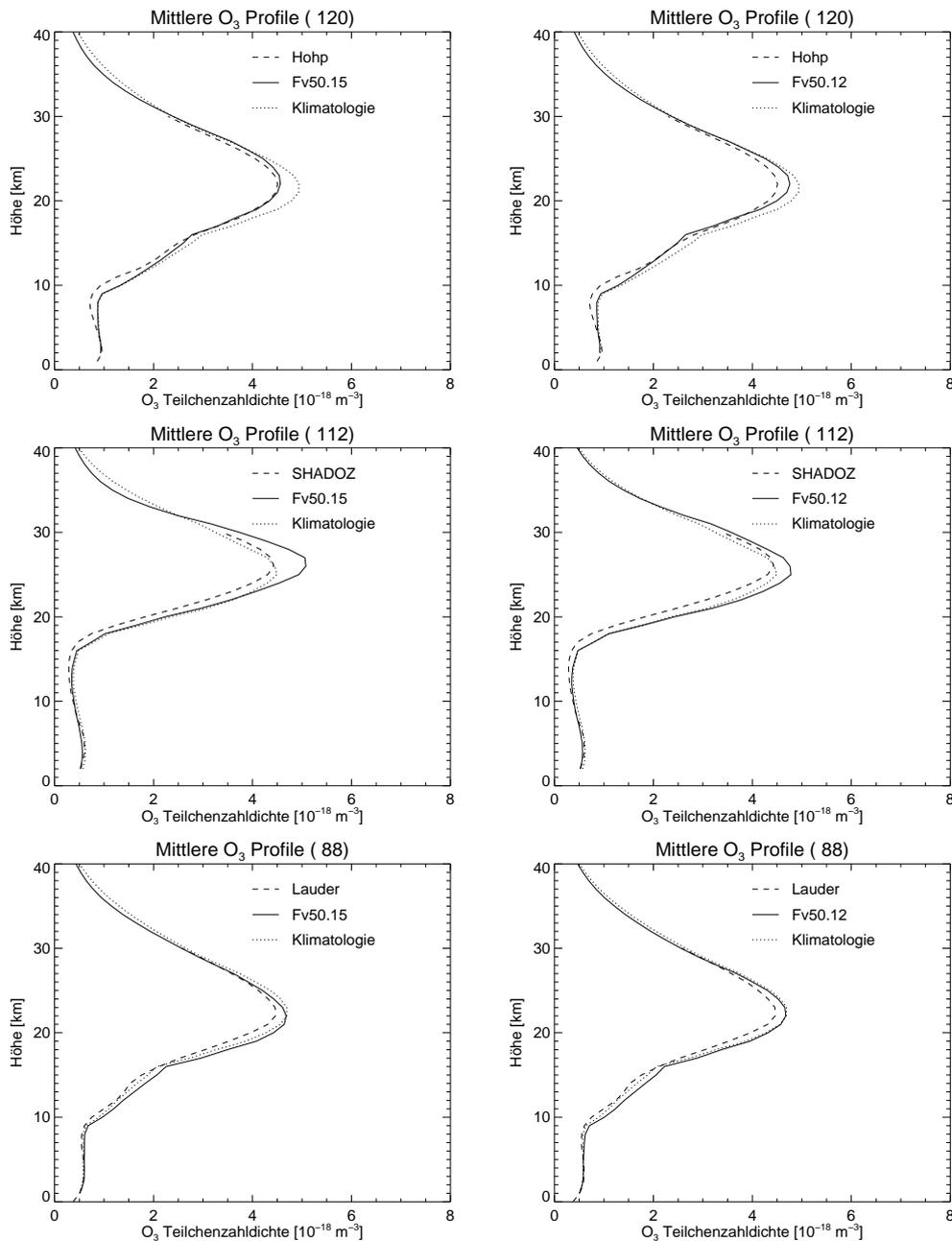


Abbildung C.6: Mittlere Profile in Abhängigkeit von der Wahl der a-priori-Varianzen in der FURM Auswertung. **Linke Spalte:** A-priori-Varianz von 30% über alle Höhen. **Rechte Spalte:** A-priori-Varianz gemäß KNMI-Klimatologie. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder. Die relativen Abweichungen sind in Abbildung 9.4 auf Seite Seite 93 zu finden.

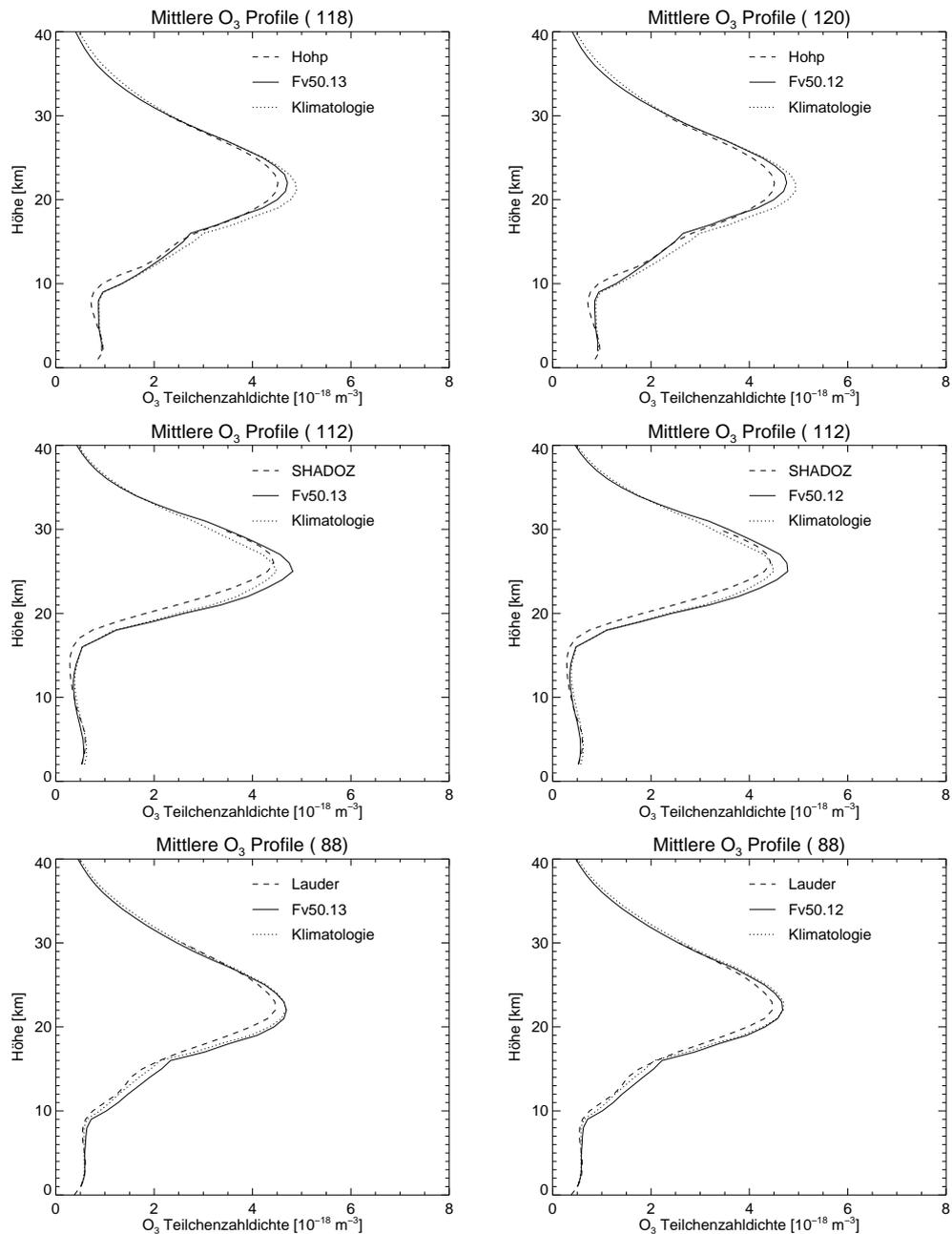


Abbildung C.7: Mittlere Profile in Abhängigkeit von der Wahl der A-priori-Druck- und Temperaturprofile in der FURM Auswertung. **Linke Spalte:** MPI-Klimatologie. **Rechte Spalte:** Assimilierte meteorologische Daten von UKMO. Von oben nach unten jeweils für die Testdatensätze Hohenpeißenberg, SHADOZ und Lauder. Die relativen Abweichungen sind in Abbildung 9.9 auf Seite Seite 101 zu finden.

Anhang D

Liste und Statistik der Dobsonstationen

Tabelle D.1 enthält die Liste der in Kapitel 11 verwendeten Dobsonstationen. Die *laufende Nummer* ist die in dieser Arbeit verwendete Nummer der jeweiligen Station, die *Station* gibt die offizielle Dobsonstationsnummer der *WOUDC* wieder. Außerdem ist die geografische Breite und Länge sowie die Höhe über dem Meeresspiegel in Metern angegeben.

Tabelle D.2 listet die Ergebnisse des Vergleichs der Gesamtozonwerte der Satellitenauswertungen mit denen der Dobsonmessungen auf. Angegeben sind die Anzahl der Koinzidenzen, die mittlere relative Abweichung und die Standardabweichung der mittleren relativen Abweichung.

Tabelle D.1: Verwendete Dobson Stationen.

Ifd. Nr.	Station	Breite	Länge	Höhe [m]	Ort
1	002	22.80°N	5.31°O	1377	Tamanrasset, Algeria
2	003	43.38°N	76.83°O	847	Alma-Ata, Kazakhstan
3	007	31.63°N	130.60°O	31	Kagoshima, Japan
4	012	43.05°N	141.33°O	19	Sapporo, Japan
5	014	36.05°N	140.13°O	31	Tateno, Japan
6	016	43.12°N	131.90°O	80	Vladivostok, Russia
7	019	46.77°N	100.75°W	511	Bismarck, ND, USA
8	020	46.87°N	68.02°W	192	Caribou, ME, USA
9	021	53.55°N	114.10°W	766	Edmonton/Stony Plain, Canada
10	035	46.77°N	9.67°O	1840	Arosa, Switzerland
11	036	50.22°N	5.32°W	88	Camborne, UK
12	040	43.94°N	5.71°O	684	Haute Provence, France

Tabelle D.1: Fortsetzung.

lfd. Nr.	Station	Breite	Länge	Höhe [m]	Ort
13	042	59.97°N	30.30°O	74	St. Petersburg/Voeidovo, R
14	050	52.37°N	13.08°O	89	Potsdam, Germany
15	053	50.80°N	4.35°O	100	Uccle/Brussels, Belgium
16	055	42.08°N	12.22°O	262	Vigna Di Valle, Italy
17	065	43.78°N	79.47°W	198	Toronto, Canada
18	067	40.02°N	105.25°W	1390	Boulder, CO, USA
19	068	51.84°N	20.79°O	180	Belsk, Poland
20	076	53.32°N	60.38°W	44	Goose Bay, Canada
21	077	58.75°N	94.07°W	35	Churchill, Canada
22	079	30.43°N	84.33°W	21	Tallahassee, FL, USA
23	082	38.77°N	9.13°W	105	Lisbon, Portugal
24	085	52.27°N	104.35°O	467	Irkutsk, Russia
25	087	50.40°N	30.45°O	121	Kiev, Ukraine
26	096	50.18°N	15.83°O	285	Hradec Kralove, Czech Rep.
27	099	47.80°N	11.02°O	975	Hohenpeissenberg, Germany
28	100	47.43°N	19.18°O	139	Budapest/K-Pusztza, Hungary
29	106	36.25°N	86.57°W	182	Nashville, TN, USA
30	107	37.93°N	75.48°W	13	Wallops Island, VA, USA
31	112	46.92°N	142.73°O	22	Bolshaya Elan, Russia
32	113	38.58°N	68.78°O	825	Dushanbe, Tajikistan
33	115	53.25°N	50.45°O	137	Kuibyshev, Russia
34	116	55.75°N	37.57°O	187	Moscow, Russia
35	118	59.58°N	150.78°O	118	Nagaev, Russia
36	119	46.48°N	30.63°O	42	Odessa, Ukraine
37	120	54.93°N	73.40°O	119	Omsk, Russia
38	121	57.32°N	24.42°O	7	Riga, Latvia
39	122	56.80°N	60.63°O	290	Sverdlovsk, Russia
40	128	49.82°N	73.13°O	553	Karaganda, Kazakhstan
41	130	52.97°N	158.75°O	78	Petropavlosk-Kamchatskii,
42	132	42.82°N	23.38°O	588	Sofia, Bulgaria
43	143	56.00°N	92.88°O	137	Krasnoyarsk, Russia
44	147	50.35°N	80.25°O	206	Semipalatinsk, Kazakhstan
45	148	59.45°N	112.58°O	186	Vitim, Russia
46	152	30.08°N	31.28°O	37	Cairo, Egypt

Tabelle D.1: Fortsetzung.

lfd. Nr.	Station	Breite	Länge	Höhe [m]	Ort
47	153	51.70°N	39.17°O	147	Voronez, Russia
48	158	33.57°N	7.67°W	55	Casablanca, Morocco
49	165	59.92°N	10.72°O	90	Oslo, Norway
50	174	52.22°N	14.12°O	112	Lindenberg, Germany
51	184	49.82°N	23.95°O	325	Lwow, Ukraine
52	201	44.22°N	10.77°O	1030	Sestola, Italy
53	208	39.77°N	117.00°O	80	Shiangher, China
54	213	37.10°N	6.73°W	41	El Arenosillo, Spain
55	226	44.48°N	26.13°O	100	Bucharest, Romania
56	241	52.11°N	106.71°W	550	Saskatoon, Canada
57	252	37.57°N	126.95°O	84	Seoul, S Korea
58	261	40.52°N	22.97°O	50	Thessaloniki, Greece
59	274	53.15°N	140.70°O	46	Nikolaevsk-na-Amure, Russia
60	277	47.73°N	42.25°O	64	Cimljansk, Russia
61	282	43.73°N	42.66°O	2070	Kislovodsk, Russia
62	287	32.60°N	16.90°W	49	Funchal, Madeira (Portugal)
63	290	48.78°N	123.13°W	178	Saturna Island, Canada
64	293	39.45°N	22.48°O	110	Athens, Greece
65	295	36.17°N	100.53°O	3816	Mt. Waliguan, China
66	301	45.80°N	8.63°O	240	Ispra, Italy
67	308	40.40°N	3.68°W	548	Madrid, Spain
68	312	54.52°N	23.55°O	95	Kaunas, Lithuania
69	318	51.93°N	10.25°W	14	Valencia I., Ireland
70	319	45.48°N	73.75°W	31	Montreal, Canada
71	320	49.88°N	97.00°W	239	Winnipeg, Canada
72	321	44.65°N	63.60°W	31	Halifax, Canada
73	325	30.30°N	119.73°O	193	Lin-an, China
74	326	44.75°N	127.60°O	423	Longfenshan, China
75	327	38.65°N	27.22°W	74	Terceica Island (Portugal)
76	331	49.03°N	20.32°O	706	Poprad-Ganovce, Slovakia
77	336	32.47°N	51.12°O	1550	Esfahan, Iran
78	341	36.32°N	119.63°W	73	Hanford
79	346	38.00°N	1.17°O	0	Murcia, Spain

Tabelle D.2: Statistiken der Dobson Stationen im Dobson-Satellitenvergleich für Gesamt ozon. #: Anzahl der Koinzidenzen. M: Mittlere relative Abweichung. S: Standardabweichung der mittleren relativen Abweichung.

lfd. Nr.	Station	GOMEFURM			GOMETOMS			EPTOMS			GOMEDOAS		
		#	M	S	#	M	S	#	M	S	#	M	S
1	002	396	-0.7	2.3	434	-6.3	2.3	878	-2.1	1.4	350	-1.0	2.6
2	003	86	-1.0	4.9	99	-4.3	4.1	—	—	—	—	—	—
3	007	148	-0.1	5.9	480	-0.9	4.0	914	1.1	3.9	584	-1.1	4.4
4	012	476	1.8	5.7	541	0.8	4.0	914	1.9	3.9	656	-0.6	4.5
5	014	452	0.3	5.8	523	-0.4	4.2	986	1.5	4.3	634	-0.8	4.7
6	016	520	0.2	5.5	583	-0.8	4.6	—	—	—	—	—	—
7	019	480	1.4	4.6	531	0.6	4.0	727	1.8	3.1	540	-0.1	4.4
8	020	316	0.6	5.6	350	0.1	4.1	448	1.5	4.4	359	-0.8	4.9
9	021	339	2.7	4.9	392	2.2	4.1	416	3.4	3.6	399	0.7	5.2
10	035	397	2.0	4.5	450	0.1	3.1	572	1.5	2.3	460	1.0	3.7
11	036	576	1.5	5.3	662	-0.3	4.1	—	—	—	—	—	—
12	040	117	-0.1	5.4	444	-2.4	3.5	621	-0.9	2.8	453	-2.9	4.0
13	042	574	-0.2	5.3	817	-1.7	4.5	780	0.1	4.8	845	-2.5	5.9
14	050	581	1.3	5.8	713	-0.1	3.9	976	0.7	3.4	824	-1.1	4.5
15	053	576	2.5	5.3	728	0.6	3.5	1001	2.0	3.5	858	-0.1	4.6
16	055	79	5.6	7.1	107	2.7	6.4	85	3.9	6.1	115	1.6	6.8
17	065	508	0.9	6.2	591	-0.2	5.2	803	1.7	5.4	604	-0.7	5.8
18	067	389	2.0	5.1	422	-0.8	4.4	647	0.9	3.0	430	1.2	4.5
19	068	608	3.1	6.3	711	1.7	4.7	855	3.1	4.1	735	0.7	5.1
20	076	435	2.7	5.5	524	1.5	4.3	616	2.5	3.9	535	0.2	5.4
21	077	485	2.0	4.6	570	1.5	5.2	554	2.2	4.3	576	0.2	5.8
22	079	119	-1.5	5.0	168	-2.7	4.2	205	0.6	3.0	172	-2.0	4.3
23	082	226	-0.6	4.4	246	-2.7	3.4	414	0.1	3.3	282	-2.7	4.0
24	085	172	-2.1	5.0	666	-3.7	4.1	—	—	—	—	—	—
25	087	169	-1.9	5.1	223	-2.2	4.5	—	—	—	—	—	—
26	096	201	1.7	5.4	694	0.9	3.3	1037	2.1	3.0	832	0.1	4.3
27	099	472	2.0	4.7	549	0.3	3.4	851	1.7	2.7	656	0.6	4.2
28	100	317	1.6	4.9	343	0.4	3.2	599	1.3	2.9	447	-0.5	3.8
29	106	77	0.3	4.6	425	0.8	4.0	676	2.8	3.5	436	0.3	4.6
30	107	290	-0.7	5.2	341	-0.8	3.5	486	1.2	3.1	345	-1.5	3.9
31	112	455	-2.5	6.7	500	-3.8	5.4	—	—	—	—	—	—
32	113	68	-2.3	3.7	106	-6.2	4.1	—	—	—	—	—	—

Tabelle D.2: Fortsetzung.

lfd. Nr.	Sta- tion	GOMEFURM			GOMETOMS			EPTOMS			GOMEDOAS		
		#	M	S	#	M	S	#	M	S	#	M	S
33	115	398	-0.7	6.6	451	-2.4	5.8	—	—	—	—	—	—
34	116	517	-1.7	5.9	652	-3.0	4.4	747	-2.0	4.6	667	-4.1	5.4
35	118	310	1.0	7.5	473	2.2	6.7	—	—	—	—	—	—
36	119	37	-2.3	4.3	38	-2.3	3.4	—	—	—	—	—	—
37	120	414	-1.0	5.5	566	-2.2	4.1	—	—	—	—	—	—
38	121	455	-1.0	6.7	644	-3.0	6.5	—	—	—	—	—	—
39	122	247	-3.5	5.2	398	-4.4	3.8	—	—	—	—	—	—
40	128	97	-4.4	3.7	130	-5.3	4.7	—	—	—	—	—	—
41	130	293	-0.7	4.8	384	-1.6	3.7	—	—	—	—	—	—
42	132	470	-11.0	8.6	528	-12.1	7.3	900	-8.8	8.3	640	-10.6	8.4
43	143	194	-0.7	5.5	259	-1.9	4.2	—	—	—	—	—	—
44	147	92	-3.4	7.0	139	-4.7	5.7	—	—	—	—	—	—
45	148	291	-3.4	6.4	350	-3.8	6.4	—	—	—	—	—	—
46	152	429	-1.5	3.9	471	-4.7	3.4	878	-0.4	2.2	550	-2.4	3.7
47	153	294	-0.6	5.6	380	-0.8	5.0	—	—	—	—	—	—
48	158	46	5.0	4.4	47	2.0	3.7	—	—	—	—	—	—
49	165	156	1.0	6.9	258	-0.9	4.7	208	1.4	4.6	274	-0.4	5.7
50	174	454	0.8	5.8	597	-0.7	4.1	828	-0.3	3.5	728	-1.7	4.9
51	184	368	-2.8	5.6	429	-3.4	4.2	—	—	—	—	—	—
52	201	507	6.5	17.3	508	-0.3	7.8	788	0.8	6.1	575	-1.0	7.8
53	208	338	-0.3	4.5	379	-2.1	3.1	667	0.5	2.8	452	-2.7	3.7
54	213	220	1.2	4.1	234	-1.1	2.8	364	1.6	2.3	244	-1.2	3.9
55	226	147	-0.8	3.7	184	-1.2	3.2	166	0.4	3.2	198	-2.8	3.7
56	241	411	1.2	4.9	490	-0.4	4.0	586	0.7	3.6	498	-1.5	4.8
57	252	322	-0.0	5.4	354	-1.8	3.3	644	0.3	3.0	393	-2.7	4.0
58	261	369	-1.1	4.0	425	-2.8	2.8	602	-0.5	2.7	439	-2.7	3.5
59	274	294	0.4	4.9	362	-0.3	4.0	—	—	—	—	—	—
60	277	341	-0.7	5.3	400	-0.9	4.7	—	—	—	—	—	—
61	282	363	0.5	5.5	420	-1.5	5.0	—	—	—	—	—	—
62	287	412	-0.3	4.0	444	-2.3	2.9	832	-0.3	2.6	523	-1.8	3.4
63	290	8	1.3	4.1	491	-1.8	3.2	673	0.4	3.3	496	-2.7	4.2
64	293	255	-0.7	4.4	278	-1.8	4.7	362	-0.0	4.3	288	-2.5	4.6
65	295	156	3.5	4.3	163	-0.6	4.2	353	3.6	3.6	206	2.4	5.0
66	301	154	-0.7	4.4	533	-2.2	3.3	712	-0.6	2.7	543	-2.4	3.7

Tabelle D.2: Fortsetzung.

lfd. Nr.	Sta- tion	GOMEFURM			GOMETOMS			EPTOMS			GOMEDOAS		
		#	M	S	#	M	S	#	M	S	#	M	S
67	308	490	0.4	4.2	545	-2.7	2.9	806	-0.2	2.7	568	-2.1	3.6
68	312	578	-0.3	5.4	736	-1.9	4.3	881	-1.0	4.0	805	-3.0	4.8
69	318	501	-0.1	5.6	622	-2.1	4.0	878	-0.6	4.1	743	-2.9	4.7
70	319	506	-0.3	6.5	562	-0.8	5.0	755	0.8	5.1	578	-1.3	5.5
71	320	522	0.2	5.4	580	0.1	5.0	758	0.5	4.2	590	-1.3	5.7
72	321	482	-1.6	5.8	537	-2.3	4.1	750	-0.5	4.0	553	-3.1	4.5
73	325	112	-1.9	8.8	114	-3.1	8.3	249	0.2	8.5	126	-3.0	8.7
74	326	319	1.4	7.8	372	-0.5	6.8	503	1.3	7.2	425	-1.5	6.2
75	327	71	-0.8	4.9	71	-1.7	3.0	130	-0.1	3.2	71	-0.0	3.5
76	331	611	2.9	5.4	683	1.6	3.9	1008	2.1	3.3	806	1.1	4.5
77	336	279	-3.5	10.1	294	-7.7	10.3	461	-2.4	10.0	301	-5.0	10.9
78	341	122	-0.4	3.2	423	-3.0	4.0	—	—	—	—	—	—
79	346	497	0.1	4.3	550	-1.6	3.2	776	0.9	3.3	561	-2.0	3.9

Anhang E

Versionen der *GOME* Level-1 Daten

Zu Zeitpunkt der Auswertungen in dieser Arbeit lag kein kompletter Datensatz einer Version der *GOME* Spektren, also der Level-1 Produkte, vor, da die operativen Rechenkapazitäten des *GDP* nicht ausreichten, um schnell den kompletten Datensatz zu reprozessieren. Erst mit der Version 2.00 des *GDP* 0-1 Prozessors wird in Zukunft ein kompletter, einheitlicher Datensatz vorliegen. Tabelle E.1 zeigt eine Liste der Versionen des *GDP* 0-1 Prozessors, dessen Daten für die genannten Zeiträume verwendet wurden. Am Ende dieses Abschnittes sind die *Release Notes* ([63]) der Level-1 Produkte wiedergegeben.

Zeitraum	<i>GDP</i> 0-1 Vers.	Keydata Vers.
03.96-30.06.96	1.30	8.0
01.07.96-12.08.96	1.00	8.0
13.08.96-16.10.96	1.10	8.0
17.10.96-14.06.97	1.20	8.0
15.06.97-25.10.97	1.30	8.0
26.10.97-31.12.97	1.35	8.0
01.01.98-30.06.99	1.50	8.0
01.07.99- ...	2.00	8.0

Tabelle E.1: Versionen der GOME Level-1 Produkte, wie sie in dieser Arbeit verwendet wurden.

GDP Level 0 to 1 – Release Notes

```

/*-----*\
**
**                      GDP Level 0 to 1 - Release Notes
**
** Author: Diego Loyola, DLR/DFD-SE
**-----*/
/*-----*\
** Release 2.00    Wed Jul 21 15:56:04 MET DST 1999
**-----*\
    o New options in the Extraction software:
      - '-e' degradation correction
      - '-f' BSDF asymmetric azimuth dependency correction
    o Include scan mirror correction for albedo computation ('-a' option)
    o Reorganising of the Extraction software to improve performance
/*-----*\
** Release 1.50    Fri Jan 23 14:15:44 MET 1998
**-----*\
    o Put radiance jumps correction as extra option '-j'
/*-----*\
** Release 1.40 Mon Oct 13 10:22:20 MET DST 1997
**-----*\
    o Spatial aliasing correction using previous PMD in polarisation correction
    o Close geolocation gaps interpolating the scan mirror positions
    o New options in the Extraction software:
      - '-r' extract ground pixels between corners upper left and lower right
      - '-n' creating one file without sun spectrum for each ground pixel
    o Extraction software runs also under Linux operating system
/*-----*\
** Release 1.35    Mon Nov 13 15:33:32 MET DST 1997
**-----*\
    o Relax the peak selection criteria for channel 3
/*-----*\
** Release 1.30    Mon Jun 23 14:59:26 MET DST 1997
**-----*\
    o Check of scan mirror position compatible with the new GOME narrow swath
    o Changes in the Extraction software:
      - Not apply FPA correction when less than 61 ground pixels are available
      - New calibration option "J", for radiance jump correction
      - Extraction software runs also under ALFA computers
/*-----*\
** Release 1.20    Tue Oct 15 16:47:00 MET DST 1996
**-----*\
    o Averaging mode recognition compatible with the new GOME calibration
      timelines active since 28.7.96
/*-----*\
** Release 1.10    Fri Aug 23 11:52:03 MET DST 1996
**-----*\
    o Changes in the Extraction software:
      - Saturation check done only when the co-adding mode is not active
      - New option '-a', compute albedos instead of radiances
/*-----*\
** Release 1.00    Thu Jul 18 13:49:06 MET DST 1996
**-----*\
    ~~~~~
    FIRST OPERATIONAL VERSION
    ~~~~~
/*-----*\
** Release 0.90    Mon Jul 15 17:12:10 MET DST 1996
**-----*\
    o Change the definition of Integration Pattern
    o Change the Calibration DB, add a co-adding flag for Dark correction
    o New option '-x', extract specific ground pixels

```

```
/*-----*\
** Release 0.80   Thu Jun 20 10:42:58 MET DST 1996
\*-----*/
  o Support new GOME co-adding mode
/*-----*\
** Release 0.7   Fri Apr 11 10:11:49 MET 1996
\*-----*/
  o Level 1 Data product format changed
  o Generation of Sun and Moon products
  o Use the ESA orbit propagator
  o ERS propagator variables added to the initialization file
  o FPA cross-talk correction
  o Polarization correction for pixel with IT > 1.5 seconds
  o Reflectivity jumps flagged
  o Changes on the KeyData error factors
/*-----*\
** Version 0.6   Tue Nov 28 14:07:13 MET 1995
\*-----*/
  o Performance-tuning improvement of ~15%
  o Simplification and better log messages handling
/*-----*\
** Version 0.5   Wed Oct 25 13:35:26 MET 1995
\*-----*/
  o KeyData version 7.0
  o Uses only the 6.5 "f2" function
  o Uses +17.15 degrees for the sun scan mirror dependence function
  o Polarization correction of band 1a using an averaged p7
  o Error values calculated using one average KeyData factor per channel
  o Adds the flag '-w' (write the calibration data) to the extracting program
  o Geolocation of ground pixels disagree with the ESA propagator
/*-----*\
** Alfa Release  Mon Jul 31 14:00:00 MET 1995
\*-----*/
  o KeyData version 5.0 & 6.0
  o Uses an interpolated "f2" function
  o Uses -17.48 degrees in the sun scan mirror dependence function
  o Wrong polarization correction for band 1a
  o Error values calculated for signal to noise
  o Geolocation of ground pixels calculated without the yaw steering mode
```


Anhang F

Quellennachweis

- Die Ozonsondenmessung von Hohenpeißenberg wurden über das *NADIR DATA CENTRE* des Norwegian Institute for Air Research (*NILU*) bezogen. Verantwortlich für die Messungen ist Hans Claude (*DWD*).
- Die Ozonsondenmessungen der tropischen Stationen wurden im Rahmen des *SHADOZ* Projektes zusammengestellt. Verantwortlich für die Zusammenstellung ist Jacquelin Witte. Bezogen wurden die Daten über die Internetseite des Projektes [103]. Die hier verwendeten Daten sind eine vorläufige Version.
- Die Ozonsondenmessung von Lauder, Neuseeland wurden von Greg Bodecker (*NIWA*) zur Verfügung gestellt, der auch für die Messungen verantwortlich ist.
- Die Ozonprofile des Satelliteninstrumentes *HALOE* wurden über die *HALOE* Internetseite bezogen [80]. *Principal Investigator* des Instrumentes ist Dr. James M. Russell III (*NASA Langley Research Center*).
- Die Gesamtzonenmessungen des Satelliteninstrumentes *TOMS* wurden von James Gleason (*NASA-GSFC*) zusammengestellt. Verantwortlich für die Anwendung der *TOMS* Auswertung auf die *GOME* Daten ist ebenfalls James Gleason. *Principal Investigator* von Earthprobe *TOMS* ist Dr. Richard D. McPeters.
- Die Gesamtzonenbewertung von *GOME* werden von *DLR-DFD* durchgeführt und in Verantwortung der *ESA* zur Verfügung gestellt. Leitender Wissenschaftler von *GOME* ist Prof. Dr. John P. Burrows (*Universität Bremen*).

Abbildungsverzeichnis

1.1	Aufbau der irdischen Atmosphäre	4
2.1	<i>ERS-2</i>	10
2.2	<i>GOME</i> : Optischer Aufbau	12
2.3	<i>PMD</i> -Optik	14
2.4	Winkel des Abtastspiegels	16
2.5	<i>GOME</i> Grundpixel	17
2.6	<i>GOME</i> Spektren	19
4.1	Temperaturabhängigkeit der Ozonabsorptionsquerschnitte	30
4.2	<i>PMD</i> Bild	33
4.3	Ozongewichtsfunktionen	35
4.4	Ozongewichtsfunktionen über die Höhe	36
4.5	Skalare Parameter	37
4.6	Chebyshev-Polynome	39
5.1	Antwortfunktion H	43
5.2	Polarisationsempfindlichkeitsfunktion η	46
5.3	Wellenlängenbereiche der <i>PMDs</i>	49
5.4	Interpolation der p -Werte	51
6.1	<i>GOME</i> Abtastmoden	54
6.2	Degradation im Sonnenspektrum	56
6.3	Detektorauslesung	58
6.4	Strahlungssprung	59
6.5	Reduzierung der Strahlungssprünge	61
6.6	<i>PMD</i> -Auslesefenster im <i>PCA</i>	62
6.7	<i>PMD 1</i> -Degradation	63

6.8	Degradation von p und c	64
6.9	<i>BSDF</i> -Azimutabhängigkeit	66
6.10	Wellenlängenkalibration im Überlappbereich	67
6.11	Sprung zwischen Kanal 1 und 2	68
7.1	Ozonsondenstationen	73
8.1	Bedeutung der Chebyshev-Polynome	79
8.2	Einfluss der <i>PMD 1</i> -Degradation	80
8.3	Einfluss des <i>BSDF</i> -Azimutwinkels	81
8.4	Neue Grundpixel	82
8.5	Vergleich der Grundpixeltypen	83
9.1	Einfluss der a-priori- O_3 -Klimatologie	89
9.2	Vergleich Klimatologie und Sonde	90
9.3	<i>KNMI</i> O_3 -Varianzen	92
9.4	Einfluss der a-priori-Varianzen	93
9.5	<i>MPV</i> im Ozonminiloch März 98	95
9.6	Querschnitt eines Ozonminilochs	96
9.7	O_3 -Profile im Miniloch	98
9.8	Varianz in der <i>KNMI</i> O_3 -Klimatologie in polaren Breiten	99
9.9	Einfluss von Druck und Temperatur	101
9.10	Querschnitt eines Ozonminilochs	102
9.11	Abweichung der <i>UKMO</i> -Temperaturprofile	103
10.1	Koinzidenzen <i>GOME</i> - <i>HALOE</i>	107
10.2	Validation mit <i>HALOE</i> : Relative Abweichung I	111
10.3	Validation mit <i>HALOE</i> : Relative Abweichung II	112
10.4	Validation mit <i>HALOE</i> : Mittlere Profile I	113
10.5	Validation mit <i>HALOE</i> : Mittlere Profile II	114
11.1	Dobsonstationen	121
11.2	Wochengemittelte relative Abweichungen <i>FURM</i> – Dobson	122
11.3	Gesamtozonvergleich: Wochengemittelte relative Abweichungen	123
11.4	Gesamtozonvergleich: Datenpunkte	124
11.5	Gesamtozon in Abhängigkeit vom Sonnenspektrum	125
11.6	Stationsbezogener Vergleich Satellit – Dobson	126

11.7	<i>FURM</i> –Dobson: Geografische Verteilung MRA	127
C.1	Mittl. Profile mit und ohne Chebyshev–Polynome	144
C.2	Mittl. Profile mit und ohne <i>PMD 1</i> –Degradation	145
C.3	Mittl. Profile mit und ohne asymm. <i>BSDF</i> Parametrisierung	146
C.4	Mittl. Profile bei verschiedenen Grundpixelzusammenstellungen	147
C.5	Mittl. Profile in Abhängigkeit von der a–priori– O_3 –Klimatologie	148
C.6	Mittl. Profile in Abhängigkeit von der a–priori– O_3 –Varianzen	149
C.7	Mittl. Profile in Abhängigkeit von den a–priori Druck- und Temperaturprofilen	150

Tabellenverzeichnis

2.1	<i>PMD</i> Eigenschaften	15
2.2	<i>GOME</i> Bänder	18
6.1	Strahlungssprungkorrektur: <i>PMD</i> –Stützpunkte	60
8.1	Zusammenfassung: Einfluss der Kalibrationsprobleme	85
10.1	<i>HALOE</i> Fehlerabschätzung	106
10.2	Validation mit <i>HALOE</i> : Höhengschichten	115
11.1	Anzahl der Kollokationen mit Dobsonstationen	120
11.2	Mittlere Abweichungen Dobson – Satellitenmessung	121
A.1	<i>FURM</i> Parameter	133
B.1	Hohenpeißenberg Sonden	137
B.2	Lauder Sonden	139
B.3	<i>SHADOZ</i> Sonden	140
D.1	Dobson Stationen	151
D.2	Statistik der Dobsonstationen	154
E.1	Versionen der <i>GOME</i> Level–1 Produkte, wie sie in dieser Arbeit verwendet wurden.	157

Literaturverzeichnis

- [1] ABEN, I., TANZI, C., SNEL, R., HEGELS, E., AND EISINGER, M. GDAQI final report. Tech. rep., Space Research Organization Netherlands, 2000. DRAFT 14 April 2000. 55, 56, 66
- [2] BALZER, W., B. ABERLE, LOYOLA, D., AND SPURR, R. GOME level 0 to 1 algorithms description. Tech. Rep. ER-TN-DLR-GO-0022, DLR-DFD, Aug. 1996. Iss./Rev. 4/A. 41, 48, 50
- [3] BASHER, R. Review of the dobson spectrophotometer and its accuracy. In *Atmospheric Ozone*, C. Zerefos and A. Ghazi, Eds. Reidel and Dordrecht, 1985, p. 387. 118
- [4] BATES, D. R. Rayleigh scattering by air. *Planet. Space Sci.* 32 (1984), 785–790. 32
- [5] BATES, D. R., AND NICOLET, M. The photochemistry of water vapour. *Journal of Geophysical Research* 55 (1950), 301. 6
- [6] BHARTHIA, P., KLENK, K., GORDON, D., AND FEIG, A. Nimbus–7 total ozone algorithm. In *Proc. of the Fifth Conference on Atmospheric Radiation* (Boston, 1983), American Meteorologic Society. 119
- [7] BHARTHIA, P., KLENK, K., WONG, C., GORDON, D., AND FEIG, A. Intercomparison of the Nimbus–7 SBUV/TOMS total ozone data sets with Dobson and M83 results. *Journal of Geophysical Research* 89 (1984), 5239. 119
- [8] BODEKER, G., SCOTT, J., AND KREHER, K. Global ozone trends in potential vorticity coordinates using TOMS and GOME intercompared against the dobson network: 1978-1998. *Journal of Geophysical Research* (2000). submitted. 123
- [9] BOVENSMANN, H., BURROWS, J. P., BUCHWITZ, M., FRERICK, J., NOEL, S., ROZANOV, V., CHANCE, K. V., AND GOEDE, A. H. P. SCI-AMACHY - mission objectives and measurement modes. *Journal of the Atmospheric Sciences* (1999). in press. 9

- [10] BRAMSTEDT, K., EICHMANN, K.-U., WEBER, M., HOOGEN, R., ROZANOV, V., AND BURROWS, J. Ozone depletion in the arctic spring calculated from GOME ozone profiles. In *Proceedings ESAMS'99 - European Symposium on Atmospheric Measurements from Space* (Noordwijk, The Netherlands, 1999), vol. 1 of *WPP-161*, ESA Earth Science Division, ESTEC, pp. 225–229. 18-22 Jan. 1999. 99
- [11] BRAMSTEDT, K., EICHMANN, K.-U., WEBER, M., HOOGEN, R., ROZANOV, V., AND BURROWS, J. Chemical ozone depletion during arctic spring seasons 1996/97-1998/99 derived from northern hemispheric ozone profile distribution. In *Stratospheric Ozone 1999 - Proc. Fifth European Symposium on Stratospheric Ozone Research* (Saint Jean de Luz, France, 2000), N. Harris, M. Guirlet, and G. Amanatidis, Eds., no. 73 in *Air Pollution Research Report*, European Community, pp. 417–420. 99
- [12] BRAMSTEDT, K., EICHMANN, K.-U., WEBER, M., ROZANOV, V., HOOGEN, R., DE BEEK, R., BUCHWITZ, M., KUROSU, T., AND BURROWS, J. Ozone profiles from GOME satellite data - part II: First results from the Arctic winter campaign. In *Polar Stratospheric Ozone 1997 - Proc. Fourth European Symposium on Stratospheric Ozone Research* (Luxembourg, 1998), N. Harris, I. Kilbane-Dawe, and G. Amanatidis, Eds., vol. 66 of *Air Pollution Research Report*, BMBF, European Commission, pp. 189–192. 22.–26. September 1997, Schliersee, Germany. 99, 110
- [13] BREWER, A., AND MILFORD, J. The Oxford key ozone sonde. *Proc. Roy. Soc.* 256 (1960), 470. 72
- [14] BRÜHL, C. The MPI two-dimensional atmospheric model – trace gas profiles, 1991. private communications. 29, 87, 134
- [15] BRÜHL, C., DRAYSON, S., III, J. R., CRUTZEN, P., MCINERNEY, J., PURCELL, P., CLAUDE, H., GERNANDT, H., MCGEE, T., MCDERMID, I., AND GUNSON, M. Halo occultation experiment ozone channel validation. *Journal of Geophysical Research* 101, D6 (Apr. 1996), 10217–10240. 74, 105, 106
- [16] BUCHWITZ, M. *Strahlungstransport- und Inversions-Algorithmen zur Ableitung atmosphärischer Spurengasinformationen aus Erdfernerkundungsmessungen in Nadirgeometrie im ultravioletten bis nahinfraroten Spektralbereich am Beispiel SCIAMACHY*. PhD thesis, Universität Bremen, 2000. 22
- [17] BURROWS, J., CHANCE, K., CRUTZEN, P., VAN DOP, H., GEARY, J., JOHNSON, T., HARRIS, G., ISAKSEN, I., MOORTGAT, G., MULLER, C., PERNER, D., PLATT, U., POMMEREAU, J.-P., AND ROHDE, H. SCIAMACHY – a european proposal for atmospheric remote sensing from the

- ESA polar platform. published by the Max-Planck-Institute for Chemistry, 55122 Mainz, Germany, 1988. 9
- [18] BURROWS, J., CRUTZEN, P., CHANCE, K., GEARY, J., T.S., GOUTAIL, F., HARRIS, G., MOORTGAT, G., MULLER, C., PERNER, D., PLATT, U., POMMERAU, J.-P., SCHNEIDER, W., AND SIMON, P. SCIAMini. published by the Max-Planck-Institute for Chemistry, 55122 Mainz, Germany, 1988. 9
- [19] BURROWS, J., WEBER, M., BUCHWITZ, M., ROZANOV, V., LADSTÄDTER-WEISSENMAYER, A., RICHTER, A., DE BEEK, R., HOOGEN, R., BRAMSTEDT, K., EICHMANN, K.-U., EISINGER, M., AND PERNER, D. The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME): Mission concept and first scientific results. *Journal of the Atmospheric Sciences* 56 (1999), 151–175. 9, 119
- [20] BURROWS, J. P., DEHN, A., DETERS, B., HIMMELMANN, S., RICHTER, A., VOIGT, S., AND ORPHAL, J. Atmospheric remote-sensing reference data from GOME: Part 1. temperature-dependent absorption cross sections of NO₂ in the 231–794 nm range. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 60 (1998), 1025–1031. 31, 134
- [21] BURROWS, J. P., RICHTER, A., DEHN, A., DETERS, B., HIMMELMANN, S., VOIGT, S., AND ORPHAL, J. Atmospheric remote-sensing reference data from GOME: Part 2. temperature-dependent absorption cross sections of O₃ in the 231–794 nm range. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* (1998). in press. 30, 31, 134
- [22] CALLIES, J., CASPAR, C., LEFEBVRE, A., AND HAHNE, A. GOME operations during validation campaign. In *GOME Geophysical Validation Campaign Proceedings- Final Results (24–26 January, Frascati, 1996)* (1996), ESA-WPP 108, European Space Agency, pp. 5–19. 53
- [23] CASPAR, C., AND CHANCE, K. GOME wavelength calibration using solar and atmospheric spectra. In *Space at the service of our Environment* (ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, May 1997), T.-D. Guyenne and D. Danesy, Eds., vol. II of *ESA SP-414*, European Space Agency, ESA Publications Division, pp. 609–614. 3rd ERS Scientific Symposium, 17–21 March 1997, Florence, Italy. 86
- [24] CHAPMAN, S. A theory of upper atmosphere ozone. *Mem. Roy. Meteorol. Soc.* 3 (1930), 103–125. 5
- [25] CRUTZEN, P. J. The influence of nitrogen oxides in the lower stratosphere. *Quart. J. Roy. Met. Soc.* 96 (1970), 320–325. 6

- [26] DE BEEK, R. *Bestimmung von Ozonvertikalprofilen aus Messungen des Satelliteninstruments GOME im ultravioletten und sichtbaren Spektralbereich*. PhD thesis, Universität Bremen, 1998. 3, 21
- [27] DOBSON, G. A photoelectric spectrophotometer for measuring the amount of atmospheric ozone. *Proc. Royal Society London* 43 (1931), 324. 117
- [28] DOBSON, G., HARRISON, D., AND LAWRENCE, J. Measurements of the amount of ozone in the earth's atmosphere and its relation to other geophysical conditions. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 122 (1929), 456–486. 117
- [29] EICHMANN, K., WEBER, M., BRAMSTEDT, K., ROZANOV, V., AND BURROWS, J. The structure of ozone mini-holes from GOME satellite observations. In *Proc. Fifth European Workshop on Stratospheric Ozone* (1999). 94
- [30] EICHMANN, K.-U. Verwendung der a-priori Varianzen in FURM in polaren Breiten, 2000. persönliche Mitteilung. 99
- [31] EICHMANN, K.-U. *Ozonverteilungen der Nordhemisphäre gemessen mit GOME: Einfluss stratosphärischer Dynamik und Chemie*. PhD thesis, Universität Bremen, 2001. 99, 130
- [32] EICHMANN, K.-U., BRAMSTEDT, K., WEBER, M., ROZANOV, V., DE-BEEK, R., HOOGEN, R., AND BURROWS, J. Ozone profile retrieval from GOME satellite data ii: Validation and applications. In *Space at the service of our Environment* (ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, May 1997), T.-D. Guyenne and D. Danesy, Eds., vol. II of *ESA SP-414*, European Space Agency, ESA Publications Division, pp. 755–758. 3rd ERS Scientific Symposium, 17-21 March 1997, Florence, Italy. 99
- [33] EICHMANN, K.-U., BRAMSTEDT, K., WEBER, M., ROZANOV, V., HOOGEN, R., AND BURROWS, J. O₃ profiles from GOME satellite data - ii: Observations in the arctic spring 1997 and 1998. *Physics and Chemistry of the Earth* 24, 5 (1999), 453–457. 99, 110
- [34] EICHMANN, K.-U., WEBER, M., BRAMSTEDT, K., HOOGEN, R., ROZANOV, V., AND BURROWS, J. Ozone profile distributions in the Arctic from GOME satellite observations during spring 1997 and 1998. In *Proc. SPIE* (1998), vol. 3495. 99, 110
- [35] EUROPEAN SPACE AGENCY. *GOME Users Manual*, ESA publications sp-1182 ed., Sep 1995. 9, 14, 43

- [36] FARMAN, J., PETERS, D., AND GREISINGER, K. Large losses of total ozone in Antarctica reveal seasonal ClO_x / NO interaction. *Nature* 315 (1985), 207–210. 2, 117
- [37] FORTUIN, J. P. F. An ozone climatology based on ozonesonde measurements. Sci. Rep. WR 96-07, KNMI, de Bilt, The Netherlands, 1996. 29, 71, 87, 99, 134
- [38] FORTUIN, P., AND KELDER, H. An ozone climatology based on ozonesonde and satellite measurements. *Journal of Geophysical Research* 103, D24 (1998), 31709–31734. 29, 71, 87, 99, 134
- [39] GOBELIN. GOBELIN - GOME BBM instrument characterization - final report. Tech. rep., SRON, 10 1999. 55
- [40] GOETZ, F., MEETHAM, A., AND DOBSON, G. The vertical distribution of ozone in the atmosphere. *Proc. Royal Society London* 145 (1934), 416. 118
- [41] GOODY, R., AND YUNG, Y. *Atmospheric Radiation*, second ed. Oxford University Press, 1989. 31
- [42] GRAINGER, J., AND RING, J. Anomalous Fraunhofer line profiles. *Nature* 193 (1962), 762. 32
- [43] GRANT, W. B., Ed. *Ozone Measuring Instruments for the Stratosphere*, vol. 1 of *Collected Works in Optics*. Optical Society of America, Washington D.C., 1989. 118, 119
- [44] GUZZI, R. Surface type and height database, 1993. private communication. 32, 33, 34, 134
- [45] HARE, E. World ozone and ultraviolet radiation data centre (WOUDC). URL: <http://www.msc-smc.ec.gc.ca/woudc>, 2001. 118
- [46] HEGELS, E., AND SLIJKHUIS, S. GOME: Correction of degradation and update of key data. In *Proceedings ESAMS'99 - European Symposium on Atmospheric Measurements from Space* (Noordwijk, The Netherlands, 1999), vol. 2 of *WPP-161*, ESA Earth Science Division, ESTEC, pp. 18–2. 18-22 Jan. 1999. 66
- [47] HILSEN RATH, E. Results from the balloon ozone intercomparison campaign (BOIC). *Journal of Geophysical Research* 91, D12 (Nov. 1986), 13137–13152. 74
- [48] HOEKSTRA, R., OLIJ, C., ZOUTMAN, E., AND KLUSE, M. L. Validation of in-orbit calibration of GOME. In *Final results Workshop proceedings, ESA WPP-108* (1996), ESA, Ed., pp. 21–32. 54, 57

- [49] HOOD, L., AND MCCORMACK, J. An investigation of dynamical contributions to midlatitude ozone trends in winter. *Journal of Geophysical Research* 102, D11 (1997), 13079–13093. 94
- [50] HOOGEN, R. *Inversion globaler Ozonvertikalverteilungen aus Messungen des Satelliteninstruments GOME*. PhD thesis, Universität Bremen, 1998. 3, 21, 26, 28, 29, 30, 32, 38
- [51] HOOGEN, R., ROZANOV, V. V., AND BURROWS, J. P. Ozone profiles from GOME satellite data: Algorithm description and first validation. *Journal of Geophysical Research* 104 (1999), 8263–8280. 3, 21, 27, 28
- [52] JIANJUN, L., MOHNEN, V., YUE, G., ATKINSON, R., AND MATTHEWS, W. Intercomparison of stratospheric ozone profiles obtained by stratospheric aerosol and gas experiment II, halogen occultation experiment, and ozonesondes in 1994–1995. *Journal of Geophysical Research* 102, D13 (July 1997), 16137–16144. 105, 106
- [53] JOHNSTON, H. Reduction of stratospheric ozone by nitrogen oxide catalysts from supersonic transport exhaust. *Science* 173 (1971), 517–522. 6
- [54] KNEIZYS, F., SHETTLE, E., ABREU, L., CHETWYND, J., ET AL. Users guide to LOWTRAN7. Tech. Rep. AFGL-TR-88-0177, Air Force Geophysics Laboratory, Hanscom AFB, MA 01736, 1988. 31, 134
- [55] KOMHYR, W., GRASS, R., AND LEONHARD, R. Dobson spectrophotometer 83: A standard for total ozone measurements, 1962 – 1987. *jgr* 94 (1989), 9847–9861. 118
- [56] KOMHYR, W. D. Electrochemical concentration cells for gas analysis. *Annales Geophysicae* 25 (1969), 203–210. 72
- [57] KOZLOV, V. Design of experiments related to the inverse problem of mathematical physics. In *Mathematical Theory of Experiment Design*, C. M. Ermakov, Ed. Nauka Press, Moscow, 1983, pp. 216–246. 27
- [58] KUROSU, T. *Die Modellierung des Strahlungstransports in Wolken für atmosphärische Fernerkundung im ultravioletten und sichtbaren Spektralbereich*. PhD thesis, University of Bremen, 1997. Verlag Mainz/Wissenschaftsverlag Aachen, Aachen, ISBN 3-89653-185-7. 32
- [59] KUROSU, T. PMD cloud detection algorithm for the GOME instrument. Tech. Rep. Annex to the ESA CADAPA Study Contract No. 11572/95/NL/CN, European Space Agency, 1998. 33

- [60] KUROSU, T., ROZANOV, V., AND BURROWS, J. Parameterization schemes for terrestrial water clouds in the radiative transfer model GOME-TRAN. *Journal of Geophysical Research* 102, D18 (1997), 21809–21823. 32
- [61] LAMBERT, J., ROOZENDAEL, M. V., GRANVILLE, J., GERARD, P., AND SIMON, P. Geophysical validation of ERS-2 GOME ozone products by means of correlative observations from the NDSC. In *Proceedings ESAMS'99 - European Symposium on Atmospheric Measurements from Space* (Noordwijk, The Netherlands, 1999), vol. 2 of WPP-161, ESA Earth Science Division, ESTEC, pp. 595–601. 18-22 Jan. 1999. 124
- [62] LENOBLE, E. J. *Radiative Transfer in Scattering and Absorbing Atmospheres: Standard Computational Procedures*. Deepak Publishing, Hampton, VA, USA, 1985. 22
- [63] LOYOLA, D. Gdp level 0 to 1 - release notes. GOME Daten CD, LV1 Produkte 24.10. – 27.10.2000, Datei docs/release.101. 63, 157
- [64] MCCORMACK, J., AND HOOD, L. The frequency and size of ozone mini-hole events at northern midlatitudes in february. *Geophysical Research Letters* 24, 21 (1997), 2647–2650. 94
- [65] MCPETERS, R., AND LABOW, G. An assessment of the accuracy of 14.5 years of nimbus 7 TOMS version 7 ozone data by comparison with the Dobson network. *Geophysical Research Letters* 23, 25 (Dec. 1996), 3695–3698. 119
- [66] MOLINA, M. J., AND ROWLAND, F. Stratospheric sink for chlorofluoromethanes: chlorine atom-catalysed destruction of ozone. *Nature* 249 (1974), 810–812. 6
- [67] PLATT, U. Differential optical absorption spectroscopy (DOAS). In *Air Monitoring by Spectroscopic Techniques*, M. Siegrist, Ed., vol. 127 of *Chemical Analysis Series*. John Wiley and Sons, 1994, pp. 27–84. 119
- [68] PLATT, U., AND PERNER, D. Direct measurements of atmospheric CH₂O, HNO₂, O₃, NO₂, and SO₂ by differential optical absorption in the near UV. *Journal of Geophysical Research* 85 (1980), 7453–7458. 119
- [69] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., AND FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes in FORTRAN - The Art of Scientific Computing*, 2nd edition ed. Cambridge University Press, 1992. 24
- [70] RICHTER, A. NO₂ Fit mit verschiedenen Sonnenspektren, 2000. persönliche Mitteilung. 67

- [71] RODGERS, C. D. Information content and optimization of high-spectral-resolution measurements. In *Proc. SPIE* (1996), vol. 2830, pp. 136–147. 26, 27
- [72] RODGERS, C. D. Inverse methods for atmospheric sounding: Theory and practise. unveröffentlichtes Manuskript, 1997. 25
- [73] ROOD, R., NIELSEN, J., STOLARSKI, R., DOUGLASS, A., ET AL. Episodic total ozone minima and associated effects on heterogeneous chemistry and lower stratospheric transport. *Journal of Geophysical Research* 97, D8 (1992), 7979–7996. 94
- [74] ROWLAND, F., AND MOLINA, M. J. Chlorofluoromethanes in the environment. *Reviews of Geophysics and Space Physics* 13 (1975), 1–35. 6
- [75] ROZANOV, V., 2000. private communications. 61
- [76] ROZANOV, V., D.DIEBEL, SPURR, R., AND BURROWS, J. GOMETRAN: A radiative transfer model for the satellite project GOME, the plane-parallel version. *Journal of Geophysical Research* 102, D14 (1997), 16683–16695. 21, 23
- [77] ROZANOV, V., KUROSU, T., AND BURROWS, J. Retrieval of atmospheric constituents in the UV-visible: A new quasi-analytical approach for the calculation of weighting functions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 60 (1998), 277–299. 21, 24
- [78] RUSSELL III, J., GORDLEY, L., PARK, J., DRAYSON, S., HESKETH, W., CICERONE, R., TUCK, A., FREDERICK, J., HARRIES, J., AND P.J.CRUTZEN. The halogen occultation experiment. *Journal of Geophysical Research* 98 (1993), 10777–10798. 106
- [79] SEINFELD, J., AND PANDIS, S. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. A Wiley–Interscience publication. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1997. 2, 4, 7
- [80] SHAH, A. HALOE homepage. URL: <http://haloedata.larc.nasa.gov/>, 2000. 161
- [81] SHANNON, C., AND WEAVER, W. *The Mathematical Theory of Communication*. University of Illinois Press, Urbana, 1962. 27
- [82] SHEFOV, N. N. Spectroscopic, photoelectric, and radar investigations of aurorae and the nightglow. *Izd. Akad. Nauk I* (1959). in Russisch. 32

- [83] SHINDELL, D., MILLER, R., SCHMIDT, G., AND PANDOLFO, L. Simulation of recent northern winter climate trends by greenhouse-gas forcing. *Nature* 399 (1999), 452 – 455. 2
- [84] SLIJKHUIS, S., AND LOYOLA, D. GOME data processor extraction software user's manual. Tech. Rep. ER-SUM-DLR-GO-0045, DLR-DFD, Aug. 1999. 04. August 1999. 62
- [85] SOLOMON, S. Stratospheric ozone depletion: A review of concepts and history. *Reviews of Geophysics* (1999). 7, 88
- [86] SPURR, R., 1997. private communications (e-mail 17 June 1997). 50
- [87] STAEHELIN, J., KEGEL, R., AND HARRIS, N. Trend analysis of the homogenized total ozone series of aroso (switzerland), 1926 – 1996. *Journal of Geophysical Research* 103 (1998), 8389–8399. 2, 7
- [88] SWINBANK, R., AND O'NEILL, A. A stratosphere-troposphere data assimilation system. *Monthly Weather Review* 122 (1994), 686–702. 31, 87, 100, 134
- [89] TANZI, C., HEGELS, E., ABEN, I., BRAMSTEDT, K., AND GOEDE, A. Preliminary results on the performance degradation of earth radiation spectra measured by gome. *Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds, Proceedings of SPIE 3501* (1998), 429–438. 64
- [90] TANZI, C., HEGELS, E., ABEN, I., BRAMSTEDT, K., AND GOEDE, A. Performance degradation of GOME polarization monitoring. *Advances in Space Research* 23, 8 (1999), 1393–1396. 64
- [91] TANZI, C., HEGELS, E., ABEN, I., BRAMSTEDT, K., AND GOEDE, A. Performance degradation of gome polarization monitoring. *Adv. Space Res.* 23, 8 (1999), 1393–1396. 64
- [92] TANZI, C., AND SNEL, R., 1999. private communications. 57
- [93] THOMPSON, A. M., AND WITTE, J. C. A new data set for the earth science community. *Earth Observer* 11(4) (1999). 74
- [94] TPD. TPD-ERS-GO-MIR-30, Radiance/Irradiance calibration of GOME FM. Tech. rep., TPD, 11 1994. 54
- [95] TPD. TPD-ERS-GO-RPT-30, GOME key data update for the so called "air/vacuum" effect. Tech. rep., TPD, 1 1996. 54
- [96] VON BARGEN, A., THOMAS, W., AND LOYOLA, D. Update report for GDP 0-to-1 version 2.0 and GDP 1-to-2 version 2.7. Tech. Rep. ER-TN-DLR-GO-0043, DLR-DFD, July 1999. Draft July 30, 1999. 48, 65

- [97] VOUNTAS, M. private communications, 1997. 32
- [98] WARDLE, D., HARE, E., BARTON, D., AND MCELROY, C. The world ozone and ultraviolet radiation data centre - content and submission. In *Atmospheric Ozone - Proc. 18th Quadrennial Ozone Symposium L'Aquila, Italy* (1996), R. Bojkov and G. Visconti, Eds., PSTd'A, pp. 12–21. 118
- [99] WEBER, M., BURROWS, J., AND CEBULA, R. GOME solar UV/VIS irradiance measurements between 1995 and 1997 – first results on proxy solar activity studies. *Solar Physics* 177 (1998), 63–77. 12, 55
- [100] WEBER, M., EICHMANN, K.-U., BRAMSTEDT, K., AND BURROWS, J. GOME observations of the NH and SH ozone holes in 1996 and 1997. *Earth Observation Quarterly* 58 (1998), 3–5. 94, 99
- [101] WEBER, M., EICHMANN, K.-U., BRAMSTEDT, K., RICHTER, A., HOOGEN, R., ROZANOV, V., AND BURROWS, J. GOME/ERS-2 observations during arctic spring 1996 and 1997. Proc. NASDA/EORC Arctic Ozone Data Workshop, (3.–5. Dezember 1997), Tokyo, 1997. 99
- [102] WILLIAMS, S. BADC datasets: Met office assimilated data welcome page. URL: <http://www.badc.rl.ac.uk/data/assim/>, 2000. 31
- [103] WITTE, J. C. URL: http://hyperion.gsfc.nasa.gov/Data_services/shadoz. 74, 161
- [104] WORLD METEOROLOGICAL ORGANIZATION (WMO). Scientific assessment of ozone depletion. Tech. Rep. Report No. 44, World Meteorological Organization, Global Ozone Research and Monitoring Project, Geneva, 1999. 2
- [105] YOUNG, A. On the rayleigh-scattering optical depth of the atmosphere. *Journal of applied meteorology* 20, 3 (1981), 328–330. 32

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, die diese Arbeit ermöglicht und ihre Durchführung erleichtert haben.

Herrn *Prof. Dr. John P. Burrows* danke ich für die Überlassung des interessanten Themas, und dafür, mir die Mitarbeit in der von ihm aufgebauten Arbeitsgruppe zu ermöglichen. Die Vielfalt der bearbeiteten Themen innerhalb der Arbeitsgruppe und die zahllosen, insbesondere auch internationalen Kontakte des Institutes gaben unerlässliche Anregungen bei der Erstellung der Arbeit.

Besonderer Dank geht an Herrn Dr. Mark Weber, der immer wieder neue Impulse zur Ausgestaltung der Arbeit gab und eine sehr sorgfältige Korrekturlesung der Arbeit durchgeführt hat. Kai-Uwe Eichmann gab durch die Anwendung der Ozonprofile in Studien der Atmosphäre immer wieder neue Motivation für den Sinn unserer Arbeit. Unerwähnt bleiben dürfen auf keinen Fall die zahlreichen Diskussionen innerhalb unseres Büros mit den beiden vorgenannten, deren Ergebnisse in diese Arbeit mit eingeflossen sind.

Von entscheidender Bedeutung waren die Beiträge von Dr. Vladimir Rozanov, Dr. Michael Buchwitz, Dr. Rüdiger de Beek und Dr. Ricarda Hoogen. Vladimir Rozanov ist „Vater“ des Strahlungstransportmodells *GOMETRAN* und des Auswerteverfahrens *FURM*, sein Erfahrungsschatz auf den Gebieten Strahlungstransport und Inversionstheorie ist nach wie vor unverzichtbar. Michael Buchwitz hat großen Anteil am heutigen Stand von *GOMETRAN*, Rüdiger de Beek und Ricarda Hoogen haben zentral an der Entwicklung von *FURM* gearbeitet. Die *FURM* Version von Ricarda Hoogen war Ausgangspunkt dieser Arbeit.

Danken möchte ich auch Günther Lehnert, der aus dem Grossrechner des Instituts ein extrem zuverlässiges Arbeitspferd gemacht hat, das die Auswertungen in dieser Arbeit erst möglich gemacht hat. Ebenfalls Dank geht an die Systemadministratoren des Instituts, Heiko Schellhorn und Lothar Guthmann, die den überbordenden Rechnerpark bändigen.

Wichtige Anregungen in Kalibrationsfragen lieferten, neben bereits genannten Personen, Ernst Hegels, Christina Tanzi, Michal Eisinger, Bernd Aberle und Diego Loyola.

Mein Dank geht auch an die Betreiber (und Mitarbeiter) der anderen hier verwendeten Instrumente (siehe Anhang F): Hans Claude, Jacquelin Witte, Greg Bodecker, James M. Russell III und James Gleason.

Last but not least möchte ich mich bei meiner Familie für ihre Unterstützung und Geduld während der letzten Jahre bedanken.

Bremen, im Februar 2001