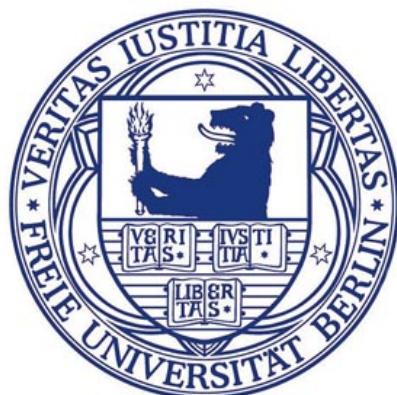


„Temperaturtrends in der mittleren Atmosphäre“

Masterarbeit

im Rahmen einer Kooperation  
des Instituts für Meteorologie der Freien Universität Berlin mit  
dem Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik in Kühlungsborn

Francie Schmidt



FREIE UNIVERSITÄT BERLIN  
FACHBEREICH GEOWISSENSCHAFTEN  
INSTITUT FÜR METEOROLOGIE

25. März 2014

Gutachter:  
Prof. Dr. Ulrike Langematz  
Prof. Dr. Franz-Josef Lübken



---

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Trendstudien mit den Modellen EMAC (ECHAM5/MESSy) und LIMA (Leibniz-Institute Middle Atmosphere) durchgeführt und mit Beobachtungen (Reanalyse-, Satelliten-, Raketen- und Lidar-Daten) verglichen und validiert. Die Analyse bezieht sich auf die Untersuchung räumlicher und saisonaler Temperaturtrends in der mittleren Atmosphäre. Dabei stellt sich heraus, dass Ozon ( $O_3$ ), Kohlenstoffdioxid ( $CO_2$ ) und die dekadische Sonnenvariabilität potentielle Einflussfaktoren hinsichtlich der Temperaturentwicklung sind und langfristige Änderungen in den mesosphärischen Temperaturverläufen gut erklären können. Mittels der multiplen linearen Regression kann die Gewichtung dieser Einflussgrößen präzisiert und bewertet werden. In LIMA tragen die Spurengase  $CO_2$  und  $O_3$  jeweils zu 2/3 bzw. 1/3 zum Trend bei. In EMAC beträgt der Regressionsanteil am Gesamtrend durch  $CO_2$  in etwa 3/4 und durch  $O_3$  in etwa 1/4 in der unteren Mesosphäre. Für die mittlere Mesosphäre (0,2 hPa bzw. 60 km Höhe) zeigt EMAC, dass  $CO_2$  fast der alleinige erklärende Faktor des negativen Temperaturtrends ist. Der 11-jährige Sonnenzyklus bildet hinsichtlich der Trendbestimmung der Temperatur einen Störfaktor, der in EMAC größer ausgeprägt ist als in LIMA.

Bei der Trendbestimmung ist es wichtig, zwischen Trends auf Druckniveaus und auf geometrischen Höhen zu differenzieren. Die simulationsgestützen Analysen zeigen unter Sommerkonditionen (Juli) in dem Zeitraum 1979 bis 2005 einen maximalen Trend von  $-2,29\text{ K/Dekade}$  (LIMA) bzw.  $-1,94\text{ K/Dekade}$  (EMAC) im Bereich der Mesosphäre auf der geometrischen Höhenskala. Aufgrund von Abkühlung in der Strato- und Mesosphäre kommt es zu einer Kontraktion der Luftsäule. Dieser Effekt betrifft das geometrische Höhensystem, so dass die Trendstärke in der mittleren und oberen Mesosphäre auf der geometrischen Höhenskala fast doppelt so groß ist wie auf der Druckskala.

## Abstract

In this Master's thesis trend studies are carried out with the EMAC (ECHAM5/MESSy) model and LIMA (Leibniz-Institute Middle Atmosphere) model and compared and validated with observations (data from reanalysis, satellite, rocket and lidar). The analysis refers to the investigation of spatial and temporal temperature trends in the middle atmosphere. As a result ozone ( $O_3$ ), carbon dioxide ( $CO_2$ ), and the 11- solar variability are potential factors to influence middle atmosphere temperatures and can explain the long-term changes in mesospheric temperatures. Using the methode of multiple linear regression the weighting of the factors of influence can be defined and evaluated. In LIMA the trace gases  $CO_2$  and  $O_3$  force 2/3 and 1/3 of the trend, respectively. In EMAC, the regression fractions of the total trend by  $CO_2$  are ca. 3/4 and by  $O_3$  ca. 1/4 in the lower mesosphere. For the middle mesosphere (0,2 hPa respectively 60 km height)  $CO_2$  is almost the one and only

---

trace gas which causes negative temperature trends. Variable solar radiation, e.g. 11-year solar cycle, is superimposed on temperature trends, that is more pronounced in EMAC than in LIMA.

For the identification of trends it is important to distinguish between trends on pressure levels and geometric altitudes. The simulation-based analysis shows under summer conditions (July) between 1979 and 2005 a maximum trend of  $-2.29\text{ K/decade}$  (LIMA) and  $-1.94\text{ K/decade}$  (EMAC) in the area of the mesosphere on geometric altitudes. Because of cooling in the stratosphere and mesosphere a thermal contraction of the air column will occur. This effect is especially evident at geometric altitudes. As a result the trend strength in the middle and upper mesosphere on the geometric altitude scale is almost twice as large as on pressure altitudes.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>5</b>
1.1 Motivation . . . . .	5
1.2 Thematik . . . . .	6
<b>2 Stand der Forschung</b>	<b>6</b>
<b>3 Daten und Methoden</b>	<b>11</b>
3.1 Datengrundlage . . . . .	11
3.1.1 Temperatur . . . . .	11
3.1.2 Ozon . . . . .	17
3.1.3 Kohlenstoffdioxid . . . . .	19
3.1.4 11-Jahreszyklus der Sonnenvariabilität . . . . .	20
3.2 Statistische Methoden . . . . .	22
3.2.1 Lineare Interpolation und Umrechnung von Druckniveaus in geometrische Höhen . . . . .	22
3.2.2 Saisonale Bereinigung . . . . .	23
3.2.3 Regressionsverfahren . . . . .	24
3.2.4 Signifikanztests . . . . .	32
<b>4 Beobachtungen und Modellierung der thermischen Struktur</b>	<b>36</b>
4.1 Höhenprofile . . . . .	36
4.2 Höhen- und Breitenschnitt . . . . .	38
4.3 Jahresgang . . . . .	40
<b>5 Ergebnisse der Trendanalysen</b>	<b>44</b>
5.1 Langzeitvariationen im Temperaturverlauf . . . . .	44
5.2 Breitenabhängigkeit der Temperaturtrends . . . . .	46
5.3 Saisonale Temperaturtrends . . . . .	47
5.4 Trendanalyse für den Sommermonat Juli . . . . .	52
5.5 Einfluss von O <sub>3</sub> und CO <sub>2</sub> auf die mesosphärische Temperatur . . . . .	56
<b>6 Zusammenfassung und Diskussion</b>	<b>66</b>
<b>7 Ausblick</b>	<b>68</b>
<b>8 Anhang</b>	<b>69</b>
<b>9 Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>75</b>



# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

Im Zuge der aktuellen wissenschaftlichen Klimadiskussionen stehen Ursachen und Folgen von langfristigen Änderungen in den bodennahen Luftsichten im Vordergrund. Diese erstrecken sich innerhalb der untersten Kilometer der Atmosphäre, der sogenannten Troposphäre. Allerdings wird das troposphärische Klimasignal von vielen teilweise unverstandenen Hintergrundeffekten überlagert und unterliegt einer starken natürlichen Variabilität. Außerdem ist die mittlere globale Temperaturerhöhung in dem Zeitraum 1880 bis 2012 mit 0,06 K/Dekade relativ klein. Das Verhältnis von Trendsignal zu Hintergrundrauschen verringert sich in den oberen Atmosphärenschichten. Die Mesosphäre kann in diesem Zusammenhang als Indikator für klimatische Veränderungen in der gesamten Atmosphäre angesehen werden. Ein wichtiges Merkmal der Mesosphäre ist ein hohes Klimasignal von bis zu  $-5\text{ K/Dekade}$  (*Berger, 2005*), wobei sich Rückschlüsse auf Klimaänderungen in der Troposphäre ziehen lassen.

Bisher lag der Fokus eher auf der Wettervorhersage oder auf der Erforschung von zeitlich kürzeren Veränderungen als auf der Untersuchung von Langzeittrends. Im Zuge der aktuellen Diskussionen über den Klimawandel hat sich diese Sichtweise jedoch in den letzten Jahren verändert und auch die Unsicherheiten in den Langzeitbeobachtungen haben sich durch das gesteigerte Interesse an einer guten Datenbasis verringert. In diesem Zusammenhang wird auch nunmehr die Sichtweise auf die mittlere und obere Atmosphäre ausgeweitet. Der Einsatz von bodengestützten Lidarsystemen ("Light detection and ranging" Systemen) und Satelliten für Messungen im mesosphärischen Bereich konnte wesentlich zum besseren Verständnis der Mesosphäre beitragen. Aufgrund der zunehmenden Bedeutung des Klimawandels wurden auch numerische Modelle entwickelt, welche die Untersuchungen in der mittleren Atmosphäre unterstützen.

Das Klima und seine zeitliche Entwicklung werden von einer Reihe natürlicher und anthropogener Einflussfaktoren gesteuert, wie z.B. die Zunahme der Konzentrationen von Treibhausgasen und ozonzerstörenden Substanzen, die natürliche Variabilität der Sonneneinstrahlung oder Vulkaneruptionen. Die Ergebnisse einzelner Prozessstudien mit Beobachtungs- und Modelldaten bis zu einer Höhe von 120 km weisen darauf hin, dass die Mesosphäre als Frühwarnsystem für Klimaänderungen fungieren kann, diskutiert in *Thomas (1996)* und *Berger (2005)*. Diese und weitere Fragestellungen werden auch in internationalen wissenschaftlichen Programmen wie PSMOS (Planetary Scale Mesopause Observing System), CAWSES (Climate And Weather of the Sun-Earth System) und NDMC (Network for the Detection of Mesopause Change) diskutiert.

## 1.2 Thematik

Modellsimulationen zeigen einen negativen Temperaturtrend in der mittleren Atmosphäre, wobei durch Sensitivitätsstudien ein Zusammenhang des Kohlenstoffdioxid-Anstiegs ( $\text{CO}_2$ ) bzw. der Abnahme des Ozons ( $\text{O}_3$ ) und der Temperatur herausgefunden wurde (*Roble und Dickinson, 1989; von Zahn und Berger, 2010*). Die einzelnen atmosphärischen Schichten sind miteinander gekoppelt, wodurch beispielsweise auch das Ozonmischungsverhältnis einer Interaktion zwischen der Stratosphäre und Troposphäre unterliegt. Die katalytische Ozonzerstörung in der Stratosphäre nimmt aufgrund steigender Fluorchlorkohlenwasserstoff-Konzentrationen (FCKW) in der Stratosphäre einen wichtigen Stellenwert im Wärmehaushalt der Atmosphäre ein. Der  $\text{CO}_2$ -Effekt ist in Bezug auf die thermische Struktur der mittleren Atmosphäre noch relevanter als das Ozon. Andere Spurengase wie Methan ( $\text{CH}_4$ ) und Distickstoffmonoxid ( $\text{N}_2\text{O}$ ) (Lachgas) werden durch Photodissoziation bereits größtenteils in der Stratosphäre zerstört und haben keinen direkten Strahlungseinfluss oberhalb von 50 km Höhe (*Thomas, 1996*). In der sich an die Mesosphäre anschließende Thermosphäre ( $>100$  km) nimmt der Einfluss der solaren Variabilität (z.B. 11-jähriger Sonnenzyklus) zu und führt wieder zu einem Störfaktor für die klimatische Trendanalyse.

Ziel der Arbeit sind die quantitative Untersuchung breitenabhängiger und saisonaler Trends in der Temperatur der mittleren Atmosphäre und die Detektion räumlicher und zeitlicher Variationen temperaturrelevanter chemischer Stoffe wie Ozon und Kohlenstoffdioxid in der Mesosphäre beziehungsweise auch deren Einfluss auf die Langzeitänderungen im Temperaturverlauf. Für die Beschreibung der potentiellen Rolle von mesosphärischen Ozon- und Kohlenstoffdioxidtrends wird eine Sensitivitätsstudie durchgeführt. Die Analysen der Modelle EMAC (ECHAM5/MESSy) und LIMA (Leibniz-Institute Middle Atmosphere) werden mit Beobachtungsdaten und Reanalysedaten verglichen.

## 2 Stand der Forschung

Die beobachteten Abkühlungstrends in der unteren Atmosphäre sind im Allgemeinen mit Klimamodellen konsistent, wohingegen sich in der oberen Stratosphäre und Mesosphäre größere Abweichungen gegenüber Beobachtungen ergeben. In der oberen Stratosphäre wurde in dem Zeitraum von 1985 bis 2008 mit Lidarsystemen und Mikrowellenradiometern der fünf Stationen des Network for the Detection of Atmospheric Composition Change (NDACC) von  $45^\circ\text{S}$  bis  $48^\circ\text{N}$  meist ein konstanter Temperaturverlauf registriert (*Steinbrecht et al., 2009*). Diese weichen von Modellergebnissen ab (*Berger und Lübken, 2011*). Wie auch in der untereren Stratosphäre, in der eine Abkühlung beobachtet wird, zeigt sich ebenfalls in der oberen Stratosphäre und Mesosphäre eine Abkühlung in den Klimamodellen. Diese Temperaturabnahme ist wiederum in guter Übereinstimmung mit den Mes-

sungen der Reflexion von Radiowellen bei etwa 82 km Höhe, die eine Verringerung der Reflexionshöhe in den letzten 50 Jahren von etwa 1,5 km aufweisen. Diese multi-dekadischen Messungen der Kontraktion der Atmosphäre sind mit den Temperaturtrends der Modellergebnisse kompatibel (*Berger und Lübken*, 2011). Durch die Abkühlung kommt es zu einem Schrumpfen der Atmosphäre. Die Verringerung der Atmosphärenschicht weist aber keinen stetigen Abfall auf (*Lübken et al.*, 2012) und variiert mit der Temperaturentwicklung.

Der Vergleich mit Beobachtungsdaten ist erschwert durch die kurzen Messzeiträume und durch einzelne Stationsmessungen, aus denen sich nur lokale Trendaussagen ableiten lassen. Die ersten Informationen über die Temperatur in der mittleren Atmosphäre erhielt man durch Satellitenmessungen (1979) oder auch durch Laserradar-Messgeräten aus Winkfield, England 1967 (*Kent und Wright*, 1970). Andere Quellen für Temperaturtrends im stratosphärischen und mesosphärischen Bereich sind Messungen von Raketensonden (*Keckhut et al.*, 1999) und bodengestützten Lidarmessungen (*Randel et al.*, 2009).

Der Anstieg anthropogener Treibhausgase begünstigt eine erhöhte Konzentration von infrarot-aktiven Gasen, welche wiederum die Netto-Emission von Strahlung in den Weltraum verstärken. Dies hat eine Abkühlung der mittleren Atmosphäre zur Folge. In *Lübken et al.* (2013) wird eine maximale Abkühlungsrate von  $-3,5\text{ K/Dekade}$  in dem Zeitraum 1979–1997 in der unteren Mesosphäre genannt, basierend auf Modellsimulationen. In der gesamten mittleren Atmosphäre beläuft sich der negative Temperaturtrend auf  $0,5\text{--}1\text{ K/Dekade}$ . Gegenüber dem Trend der globalen mittleren Oberflächentemperatur von  $0,2\text{ K/Dekade}$  (*IPCC-Report*, 2007), ist der Trend in der mittleren Atmosphäre bis zu einem Faktor 5 höher. Hierbei ist es wichtig anzumerken, dass der Trend der globalen mittleren Oberflächentemperatur allerdings für den Zeitraum 1980–2000 herausgefunden wurde und somit keinen direkten Vergleich darstellt. Für den gleichen Zeitraum 1980–2000 zeigen global gemittelte Beobachtungsdaten für die obere Stratosphäre und unteren Mesosphäre eine Abkühlungsrate von mehr als  $2\text{ K/Dekade}$  (*Randel et al.*, 2009), wobei die untere Stratosphäre einen Trend von  $-0,5\text{ K}$  bis  $-1\text{ K/Dekade}$  aufweist. Auch hier ist das Klimasignal in der mittleren Atmosphäre somit um ein Vielfaches höher als in der Troposphäre. In allen Fällen wurden die Temperaturtrends auf Druckniveaus ermittelt. Vorherige Studien haben bereits gezeigt, dass es im Bereich der Mesosphäre essentiell wichtig ist, zwischen Trends auf geometrischen Höhen und Druckniveaus zu unterscheiden (*Lübken et al.*, 2013). Hierbei entstehen erhebliche Differenzen aufgrund von Schrumpfungseffekten durch Abkühlung in den unteren Atmosphärenschichten. Bei der Ermittlung von Trends auf der geometrischen Höhe werden diese Schrumpfungseffekte mit eingeschlossen.

Spurengase haben in der Atmosphäre unterschiedliche höhenbedingte und wellenlängenabhängige Wirkungen auf den Strahlungshaushalt der Erde. Die wichtigsten atmosphärischen Spurengase, welche die Temperatur der Umgebungsluft und deren vertikales Profil kontrollieren, sind der Wasserdampf ( $\text{H}_2\text{O}$ ), das Ozon ( $\text{O}_3$ ) und das Kohlenstoffdioxid ( $\text{CO}_2$ ). Die Mischungsverhältnisse variieren stark mit der Höhe. In der Troposphäre ist das für

die Lufttemperatur wichtigste Spurengas das H<sub>2</sub>O. Durch eine starke Abhängigkeit des H<sub>2</sub>O-Sättigungsdampfdrucks von der Temperatur und großräumigen Transportprozessen, erfolgt eine starke Abnahme des H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnisses zwischen dem Erdboden und 15 km Höhe. Oberhalb von etwa 18 km spielt der Wasserdampf keine bedeutende Rolle mehr für die Strahlungsbilanz. Stickstoff und Argon gehören zu den Hauptbestandteilen der Erdatmosphäre, lassen aber die von der Sonne emittierte solare Strahlung und die von der Erde abgestrahlte terrestrische Strahlung fast ungehindert passieren. Ebenfalls sind H<sub>2</sub>O und CO<sub>2</sub> schwache Absorber im solaren Bereich, wohingegen der Sauerstoff (O<sub>2</sub>), der ebenfalls Hauptbestandteil der Erdatmosphäre ist und das Ozon (O<sub>3</sub>) einem starken Einfluss solarer Strahlung unterliegen. Infolge einer erhöhten solaren Einstrahlung erwärmt sich der Erdboden und strahlt zunehmend mehr Infrarot-Photonen pro Zeiteinheit ab. Diese werden vom H<sub>2</sub>O und CO<sub>2</sub> absorbiert und zu 50 % wieder in die unteren Atmosphärenschichten emittiert (*von Zahn und Berger*, 2010). Der Treibhauseffekt beginnt sich aufzubauen. Oberhalb von etwa 8 km hat der Anstieg der Konzentrationen von infrarot-aktiven Gasen einen negativen Treibhausgaseffekt und führt zu einer Abkühlung der lokalen Atmosphäre. Die Abkühlung wird durch gesteigerte Emission von Strahlung in den Weltraum und die erhöhte mittlere freie Weglänge der Infrarot-Photonen hervorgerufen.

In der Stratosphäre haben der Ozonabbau, die Änderung in den Treibhausgasen und der stratosphärische Wasserdampf einen dominierenden Einfluss auf globale mittlere Temperaturtrends (*WMO*, 2002). Modellstudien zeigen, dass die Abkühlung in der mittleren Atmosphäre durch den CO<sub>2</sub>-Anstieg und die O<sub>3</sub>-Abnahme verursacht wird (*Berger und Lübben*, 2011; *IPCC-Report*, 2007). In der Mesosphäre nimmt das Ozon gegenüber der Stratosphäre einen geringeren Stellenwert bezüglich der Trendentwicklung der Temperatur ein. 90 % des Gesamtozons befinden sich in der Stratosphäre, das im Wesentlichen durch Photolyse von Sauerstoff bei einer Wellenlänge von  $\lambda < 242$  nm gebildet wird. Nur 10 % sind in der Troposphäre vorhanden. Die globale Ozonverteilung in der Stratosphäre wird durch chemische, physikalische und dynamische Prozesse beeinflusst. Chapman beschreibt bereits 1929 im Wesentlichen vier Reaktionen, welche ein photochemisches Gleichgewicht zwischen Sauerstoff und Ozon ergeben. Dabei wird UV-Strahlung thermisch dissipiert. Verschiedene photochemisch angetriebene, katalytische Reaktionszyklen sind mit dem Chapman-Zyklus gekoppelt und bilden Ozonquellen und -senken, welche zum Auf- bzw. Abbau von Ozon führen. Die Hauptquelle für das stratosphärische Ozon befindet sich im Bereich des Äquators. Das photolytische Gleichgewicht liegt hier aufgrund der hohen Sonneneinstrahlung stark auf der Seite der Ozonproduktion. Die Verteilung des stratosphärischen Ozons wird durch dynamische Prozesse beeinflusst. Ausgleichsbewegungen der Atmosphäre, infolge eines ungleichen Energiebudgets auf der Erde, führen unter dem Einfluss der Corioliskraft zu dynamischen Windfeldern. Im Zusammenspiel mit planetaren Wellen resultieren diese in einen mittleren meridionalen Luftmassentransport in der Stratosphäre. Diese residuale

Stratosphärenzirkulation wird auch Brewer-Dobson Zirkulation genannt und beschreibt ein Aufsteigen von Luftmassen über dem Äquator und den anschließenden Transport in der Stratosphäre zu den Polen. In der Mesosphäre ist die durch Schwerewellen angetriebene residuale Zirkulation durch ein Luftmassentransport vom Sommer- zum Winterpol charakterisiert. Im Bereich des Sommerpols wird ein Aufwärtstransport von Luftmassen und im Bereich des Winterpols ein Abwärtstransport bewirkt. Dadurch wird eine adiabatische Abkühlung und ein steilerer vertikaler Temperaturgradient im Sommer erreicht. Zu den natürlichen externen Antrieben des Ozons zählen die vulkanischen Aerosole, welche Auswirkungen auf die chemische Zusammensetzung in der Stratosphäre haben. Infolge von stark explosiven Vulkaneruptionen können Silikate sowie gasförmige Komponenten, wie Wasser, Stickstoff und Kohlenstoffdioxid bis in die Stratosphäre gestoßen werden. Ebenfalls wird Schwefeldioxid dabei emittiert, welches unter Einfluss von Wasser und OH-Radikalen in Schwefelsäure umgewandelt wird (*Mäder*, 2004). Diese bilden wiederum Aerosole, welche die Strahlungsbilanz der Erdatmosphäre beeinflussen. Durch die verstärkte Strahlungsabsorption langwelliger Strahlung wird die Stratosphäre zunächst lokal erwärmt. Schwefelsäure ist neben Salpetersäure und Wasserdampf für Kondensationsprozesse in den hohen Breiten bedeutend. Bei sehr tiefen Temperaturen entstehen polare Stratosphärenwolken, auf deren Oberfläche heterogene Reaktionen ablaufen (*Hofmann und Solomon*, 1989). Aus Vorläufersubstanzen werden dabei Reservoirgase gebildet. Bei intensiver Sonneneinstrahlung im Frühjahr wird in kurzer Zeit ozonzerstörende Radikale durch die Spaltung der Reservoirgase freigesetzt. Langfristig wird somit durch die verstärkte Ozonzerstörung eine lokale Temperaturabnahme bewirkt.

In der Stratosphäre wird das Temperatursignal durch Störgrößen wie die Quasi-Zweijährige-Oszillation (quasi-biennial oscillation - QBO) in den Tropen, die solare Variabilität und Vulkanausbrüche wie Mt. Agung (März 1963), El Chichon (April 1982) und Mt. Pinatubo (1991) überlagert und erschweren die Abschätzung von Temperaturtrends (*Randel et al.*, 2009). Laut der *WMO* (2002) können Vulkaneruptionen bis etwa 30 km Höhe reichen, die dann in der unteren Stratosphäre einen Einfluss auf die Temperaturen zeigen. Dabei ergibt sich eine Erwärmung innerhalb der ersten beiden Jahren nach dem Ausbruch.

Die Temperaturtrends in der Mesosphäre sind noch relativ wenig erforscht. Die Untersuchung wird von vielen sehr komplexen Vorgängen, welche sich zum Teil sogar gegenseitig beeinflussen, begleitet. Neben dynamischen Effekten, wie planetare und kleinskalige Wellen, können unter anderem chemische Vorgänge und Zirkulationsänderungen eine nicht unbedeutende Rolle bei der genauen Trendbestimmung in der Mesosphäre spielen. Das Augenmerk dieser Arbeit liegt in der Untersuchung der Einflussparameter CO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> und der solaren Strahlungsaktivität (Lyman- $\alpha$ -Linie) auf den zeitlichen Temperaturverlauf. Für die quantitative Analyse der Langzeitänderungen im Temperaturverlauf und die relativen Anteile der Variation in der Temperatur durch Ozon, Kohlenstoffdioxid und der dekadischen Sonnenvariabilität wurde eine Sensitivitätsstudie durchgeführt.

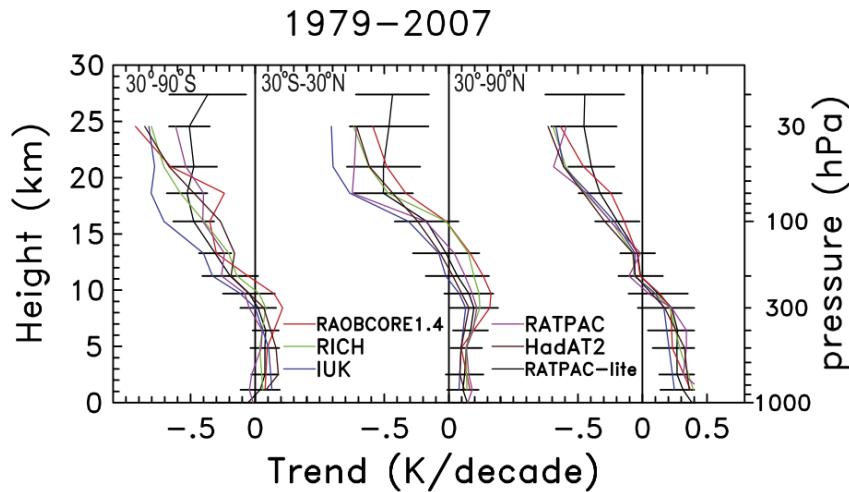


Abbildung 1: Vertikalprofile der Temperaturtrends für den Zeitraum 1979–2007 abgeleitet aus den einzelnen Radiosonden-Datensätzen für die Breitenbänder 30°–90°S, 30°N–30°S und 30°–90°N. Die Fehlerbalken zeigen die 2-Sigma-Messunsicherheit (Randel et al., 2009).

In Abbildung 1 sieht man die vertikalen Profile der jährlich gemittelten Temperaturtrends für den Zeitraum 1979–2007, die auf der Grundlage von Radiosondenmessungen entstanden (Randel et al., 2009). Man sieht einen positiven Trend in den unteren Luftsichten zwischen dem Erdboden und 12 km Höhe in den mittleren und hohen Breiten auf der Nordhalbkugel. Dieser Trend ist in den Tropen und auf der Südhalbkugel in den mittleren und hohen Breiten schwächer ausgeprägt. Zwischen 30°S und 90°S ist der Trend nicht signifikant. Aufgrund dessen wird der Fokus in der Analyse dieser Arbeit, bezogen auf Temperaturtrends, auf den mittleren Breiten liegen. Hier sind die signifikanten Trends am größten. Das Hauptaugenmerk dieser Studie liegt auf dem mesosphärischen Bereich, wobei auch Trenduntersuchungen in der Stratosphäre und Troposphäre aufgrund von vertikaler Kopplung nicht außer Acht gelassen werden. Wie bereits angedeutet, unterliegt die Mesosphäre einer geringeren natürlichen Variabilität, was Vorteile für Trendanalysen mit sich bringt.

Neben den räumlichen gibt es auch saisonale Unterschiede. Die natürliche Variabilität ist aufgrund einer vermehrten Schwerewellenaktivität in den Wintermonaten am größten (Labitzke und Kunze, 2005; Angot et al., 2012). Die Sommersaison weist eine gewisse Beständigkeit auf, welche bei der Bestimmung von Klimaänderungen von Vorteil ist. Saisonale Trendbetrachtungen sind ebenfalls Bestandteil dieser Arbeit.

## 3 Daten und Methoden

### 3.1 Datengrundlage

Neben den bodengestützen Beobachtungsdaten und Satellitendaten bieten Simulationen mit globalen Klimamodellen die Möglichkeit, Klimaveränderungen zu projizieren und das Verständnis für die Mechanismen in der mittleren Atmosphäre zu verbessern. Die folgenden Abschnitte sollen ein Überblick über die dieser Arbeit zugrunde liegenden Beobachtungs- und Modelldatensätze für die Größen Temperatur, Ozon, Kohlenstoffdioxid und dekadische Sonnenvariabilität geben. Eine Übersicht über die Daten ist in Tabelle 2 zu finden. Für detailliertere Beschreibungen wird in diesem Fall auf die angegebene Literatur verwiesen.

#### 3.1.1 Temperatur

In der Studie werden jeweils ein Modellauf des LIMA-Modells und des EMAC-Modells mit der Strahlungsparametrisierung der Freien Universität Berlin, ein Reanalysedatensatz (MERRA) und ein Beobachtungsdatensatz (SSU) für die Untersuchung von Temperaturtrends verwendet. Des Weiteren wurden zur Validierung der Modelle zwei weitere Beobachtungsdatensätze herangezogen, zum einen Daten des LIDAR-Messgerätes in Kühlungsborn und zum anderen Raktendaten bei 69°N. Beides sind lokal gebundene Messreihen.

**LIMA** (Leibniz-Institute Middle Atmosphere model) ist ein globales Zirkulationsmodell, basierend auf dem Vorgängermodell COMMA/IAP (Cologne Model of the Middle Atmosphere/Institute of Atmospheric Physics, Kühlungsborn). Das nicht-lineare, 3-dimensionale, eulersche Gitterpunktmodell LIMA wurde am Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik (IAP) in Kühlungsborn für die Exploration klimarelevanter Prozesse, wie Dynamik, Strahlung und Chemie, in der mittleren Atmosphäre entwickelt (*Berger, 2008*). Das Modell impliziert ein reduziertes Gauss'sches Gitternetz mit einer Maschenweite von  $\sim 110$  km. Die Auflösung in der Vertikalen beträgt 1,1 km und reicht vom Erdboden bis in die untere Thermosphäre (0–150 km). Der in dieser Arbeit verwendete Datensatz hat seine Obergrenze bei etwa 105 km Höhe (0,0003 hPa).

Mittels des Nudging-Verfahrens werden die ECMWF-Reanalysedaten (European Center for Medium-Range Weather Forecasts) des Datensatzes ERA40 von 1960 bis 2002 und operationelle ECMWF-Analysen ab 2002 in das Modell bis zu einer Höhe von etwa 45 km mit eingebunden. Dadurch werden Temperatur, Horizontalwinde und Bodengeopotential in den unteren Atmosphärenschichten realistisch repräsentiert. Bis zu einer Höhe von etwa 35 km wird der Nudging-Koeffizient konstant gehalten. Mit zunehmender Höhe (bis  $\sim 45$  km) verringert sich dieser bis auf Null. Die transiente Übergangszone von ECMWF zu LIMA befindet sich zwischen 38,5 km und 46,5 km Höhe. Die in dieser Studie verwendete Modellsimulation umfasst die Jahre 1961 bis 2009.

Im Folgenden wird eine Zusammenfassung der Strahlungsparametrisierung, welche in das LIMA-Model implementiert wurde, vorgestellt. Als Proxy für die solare Aktivität wurden tägliche Lyman- $\alpha$ -Flüsse von August 1960 bis 2011 verwendet (<ftp://laspftp.colorado.edu/pub/SEE-DATA/composite-lya>). Die Absorption der solaren Lyman- $\alpha$ -Strahlung bei einer Wellenlänge von 121,6 nm durch die Photolyse von O<sub>2</sub> wurde mit Hilfe der Methode ermittelt, die durch *Chabriat und Kockarts* (1998) beschrieben wird. Die solare Heizrate wurde durch eine Parametrisierung der solaren Absorption durch O<sub>2</sub> und O<sub>3</sub> berechnet (*Strobel*, 1978). Außerdem wurde für die Energie, die durch die direkte solare Einstrahlung zur Verfügung gestellt wird, das gespeicherte Potential an chemischer Energie und der Energieverlust aufgrund der atmosphärischen Strahlungsemision berücksichtigt (*Mlynczak und Solomon*, 1993). Die Erwärmung durch die Absorption der nahen Infrarotstrahlung von CO<sub>2</sub> erfolgte nach einer Parametrisierung, welche in *Ogibalov und Fomichev* (2003) diskutiert wird. Des Weiteren ändert die variable solare Aktivität die Stärke der solaren Absorption vom nahen Infrarot bis zur UV-Strahlung und wurde nach *Lean et al.* (1997) parametrisiert. Ebenfalls wurden Erwärmungen, welche durch exothermisch-chemische Reaktionen freigesetzt werden, mit einbezogen (*Berger*, 2008; *Sonnemann*, 2007).

Die Abkühlungsraten durch terrestrische Strahlungsflüsse ergeben sich durch die Parametrisierung des Ozons in dem Höhenbereich von 30 km bis 80 km Höhe (*Fomichev und Shved*, 1988), dem Wasserdampf von 30 km bis 100 km Höhe (*Zhu*, 1994) und dem atomaren Sauerstoff und Stickstoffmonoxid in der unteren Thermosphäre (*Kockharts*, 1980). Die infrarote Abkühlung durch CO<sub>2</sub> (0–150 km Höhe) schließt Effekte nicht-lokalthermodynamischer Gleichgewichtsbedingungen (non-LTE) oberhalb von 75 km Höhe mit ein. Die Parametrisierung erfolgte nach *Fomichev et al.* (1998) und wurde durch *Kutepov et al.* (2007) aktualisiert.

**EMAC** (ECHAM/MESSy Atmospheric Chemistry) ist ein gekoppeltes Klima-Chemie-Modell, das auf dem Kernmodell ECHAM5 (5. Generation des European Centre/HAMburg climate model) basiert (*Roeckner et al.*, 2006). Das ECHAM5-Klimamodell wurde zu dem speziellen Ziel entwickelt, Prozessstudien in der mittleren Atmosphäre durchzuführen und wurde am Max-Planck-Institut für Chemie für das Modellsystem EMAC mit MESSy (Modular Earth Submodel System) gekoppelt. MESSy bietet eine Schnittstelle zur prozessorientierten Erweiterung von Untermodulen mit Berücksichtigung von Rückkopplungsmechanismen. Dabei werden die verschiedenen Prozessmodule, wie zum Beispiel ein interaktives Chiemodul (MECCA – Module Efficiently Calculating the Chemistry of the Atmosphere) (*Sander et al.*, 2005), schrittweise in das Hauptprogramm (ECHAM5) mit eingebunden (Abb. 2), was den Vorteil hat, eine gewisse Transparenz in den komplexen globalen Klimamodellen zu schaffen (*Jöckel et al.*, 2005). Am meteorologischen Institut der Freien Universität Berlin wird eine Konfiguration des EMAC-Modells mit einer hochauflösenden Strahlungsparametrisierung der Freien Universität Berlin verwendet.

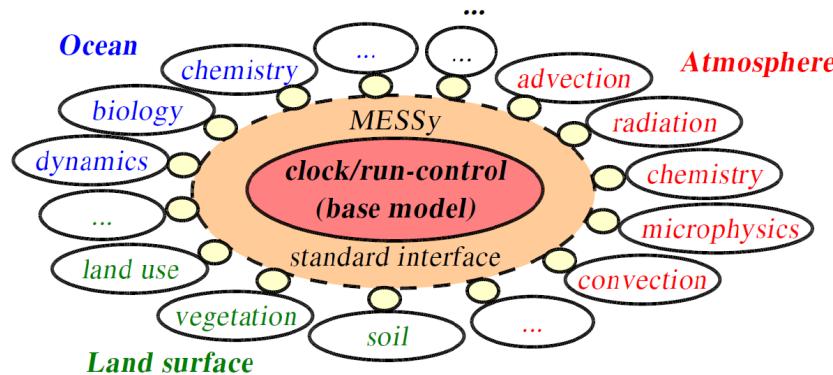


Abbildung 2: Prozessorientierter Kopplungsmechanismus zur Implementierung einzelner Untermodule in ein Hauptprogramm (*Jöckel et al.*, 2005).

Diese wurde durch ein Untermodul (RAD4ALL-FUBRAD) in das Hauptprogramm implementiert. Die Strahlungsparametrisierung umfasst 49 Intervalle des solaren Spektrums im UV- und visuellen Bereich (121,56 nm – 683 nm) und findet in der Stratosphäre und Mesosphäre zwischen 70 hPa und 0,01 hPa (etwa 18 km bis 80 km Höhe) Anwendung (*Nissen et al.*, 2007). Die Absorption durch Ozon zwischen 206 nm und 362 nm wurde mit Hilfe der von *WMO* (1986) und *Sander et al.* (2003) vorgeschlagenen spektralen Bestrahlung berechnet. Die temperatur-unabhängigen Absorptionsquerschnitte wurden von *Molina und Molina* (1986), verfügbar für 206 nm bis 347 nm und von der *WMO* (1986) zwischen 347 nm und 362 nm, verwendet. Die Absorption in den Chappuis-Banden wurden an die WMO-Heizraten, *Shine und Rickaby* (1989) folgend, gefittet. Die Herangehensweise nach *Strobel* (1978) wurde für die Heizraten durch den molekularen Sauerstoff in den Schumann-Runge-Banden und im Kontinuum genutzt. Außerdem wurde die Verteilung der Lyman- $\alpha$ -Linie durch die Verwendung des effektiven Querschnitts, abhängig von der Sauerstoffsäule wie in *Chabriat und Kockarts* (1997) angedeutet, parametrisiert. Die Energie der absorbierten Photonen wird nicht komplett in thermische Energie umgewandelt, sondern kann auch als chemische Energie gespeichert oder als Strahlung emittiert werden. Energieverluste durch Leuchten wurden durch die Verwendung effektiver Faktoren von *Mlynczak und Solomon* (1993) für die Lyman- $\alpha$ -Linie, die Hartley Banden und dem Schumann-Runge-Kontinuum, berücksichtigt. Weil das Strahlungsschema der Freien Universität Berlin in der mittleren Atmosphäre agiert, berücksichtigt die Rückstreuung der solaren Strahlung nur das Ozon in den Chappuis- und Huggins-Banden (*Strobel*, 1978). Zur Optimierung der UV/VIS-Heizraten für die gesamte vertikale Ausdehnung des Modells wurde das Strahlungsschema bei 70 hPa an die kurzwellige Strahlungsparametrisierung von *Fouquart und Bonnel* (1980), welches das Standardschema für kurzwellige Strahlung in ECHAM5 bildet, gekoppelt (*Roeckner et al.*, 2003). Für die Verbesserung der solaren Heizraten für das gesamte solare Spektrum wurden nahe-infrarote Heizraten verwendet, welche von der Strahlungsparametrisierung nach Fouquart und Bonnel in drei spektralen Intervallen zwischen 680 nm

und 4000 nm in allen Höhen abgeleitet wurden. Das nahe Infrarot umfasst O<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O, CO und O<sub>2</sub>. Aerosole und Wolkenpartikel wurden in allen Höhen berücksichtigt. Das umfassende und hochauflösende implementierte Strahlungsschema berechnet die kurzwelligen Heizraten für sehr kleine Zeitschritte, wodurch 7 % der Gesamtberechnungszeit genutzt werden. Die solare Aktivität wird durch die Verwendung spektral aufgelöster kurzwelliger Flüsse nach *Lean et al.* (2005) im Modell berücksichtigt.

Der verwendete Datensatz erstreckt sich mit einer Auflösung von 38 Schichten in der Vertikalen vom Erdboden bis zu 0,01 hPa (~80 km). Eine hohe vertikale Auflösung soll zu einer guten Repräsentation des kritischen Kopplungsbereichs zwischen der unteren und mittleren Atmosphäre beitragen. Um Randeffekte auszuschließen, wird nur bis zu einer Höhe von 0,02 hPa (~75 km) ausgewertet. Das Modell nutzt des Weiteren ein quadratisches Gauß-Gitter mit einem Gitterpunktabstand von 2,8° x 2,8° in der Länge und der Breite, welches einer spektralen Auflösung von T42 entspricht (*Jöckel et al.*, 2006).

In der Studie wird der sogenannte Referenzlauf-B1 (Ref-B1) verwendet. Dies ist eine Modellsimulation nach CCMVal (Chemistry-Climate Model Validation Activity), wobei eine Reproduktion der Vergangenheit für die Jahre 1960 bis 2005 stattfindet (*Eyring et al.*, 2008). Der Ref-B1 Lauf umfasst alle veränderlichen anthropogenen Einflüsse und natürlichen Antriebe (Forcings), wie Treibhausgase, solare Variabilität, vulkanische Eruptionen, die Quasi-Zweijährige-Oszillation (QBO) und die Meeresoberflächen-Temperaturen sowie die Meereiskonzentrationen. Die Modellsimulation Ref-B1 mit der Strahlungsparametrisierung der Freien Universität Berlin wird im Folgenden nur mit EMAC bezeichnet. Die Analyse des EMAC-Modells bezieht sich auf die Daten in dem Zeitraum von 1970 bis 2005. Bei der Untersuchung der Einflussparameter hinsichtlich der Langzeitvariationen im Temperaturlauf wurden stark veränderte Kohlenstoffdioxidanomalien im ersten Jahrzehnt der zur Verfügung stehenden Daten (1960 – 2005) mit zunehmender Höhe bemerkt. Diese sind darauf zurückzuführen, dass bei der Initialisierung von Kohlenstoffdioxid des Ref-B1-Laufs des EMAC-Modells der Wert von 1998 verwendet wurde. Bis sich die Mischungsverhältnisse in der oberen Stratosphäre an die Emissionen am Boden angepasst haben, dauert es etwa 10 – 15 Jahre, was wiederum auch Auswirkungen auf den Temperaturverlauf hat. Bei Angabe eines Wertes von 1960 innerhalb der Initialisierung würde sich auch ein kürzerer Einschwingvorgang ergeben. Um einen sich fortpflanzenden Fehler zu vermeiden, werden erst die Werte ab 1970 für die Höhenprofile, Klimatologien und Trendanalysen verwendet.

**MERRA** (Modern ERA-Retrospective analysis for Research and Applications) ist ein Reanalyse-Projekt, in dem verschiedene Datenquellen (Beobachtungsdaten und Modelldaten) miteinander kombiniert werden (*Rienicker*, 2011). MERRA hat eine horizontale Auflösung von  $\frac{1}{2}^{\circ}$  geografischer Breite und  $\frac{3}{4}^{\circ}$  geografischer Länge und in der Vertikalen 72 Höhenlevel, die vom Erdboden bis 0,01 hPa reichen. Die am globalen Modellierungs- und Assimiliationsbüro des NASA GSFC (Goddard Space Flight Center) produzierten Daten

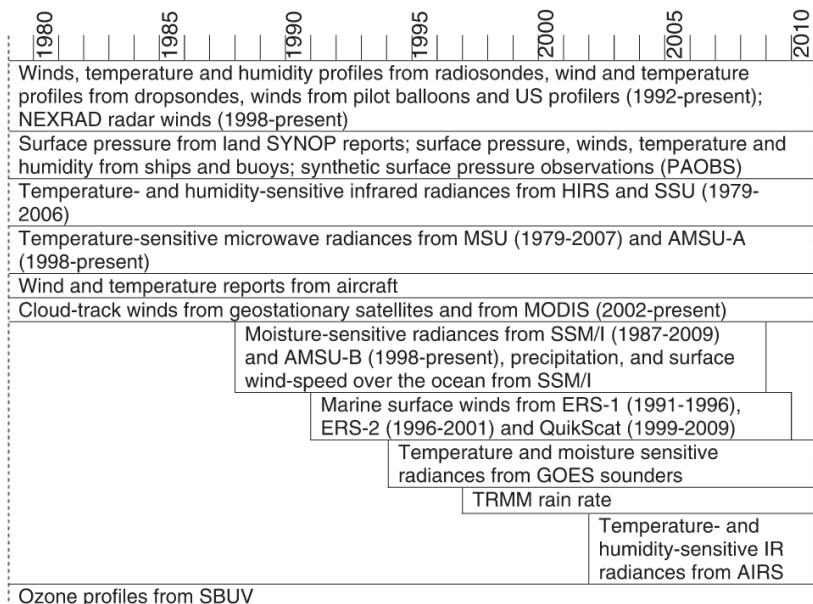


Abbildung 3: Zusammenfassung des Beobachtungssystems, welches von MERRA für den Reanalysedatensatz genutzt wird (Rienicker, 2011).

fokussieren sich auf die historische Analyse des hydrologischen Kreislaufes und integrieren die neue Version des Goddard Earth Observing System Data Assimilation System Version 5 (GEOS-5) und Assimilation Office (GMAO). Die verschiedenen Beobachtungssysteme sind in Abbildung 3 zusammengefasst. Der MERRA-Datensatz beinhaltet unter anderem die Satellitendaten von 1979 bis in die Gegenwart.

Die **SSU-Satellitendaten** (Stratospheric Sounding Unit) sind eines der Beobachtungsdatensätze, welche zur Validierung der Modelle beziehungsweise zum Vergleich dienen sollen. SSU ist seit 1979 ein Infrarot-Radiometer an Bord der polar-umlaufenden NOAA-Satelliten (National Oceanic and Atmospheric Administration) und Bestandteil von TOVS (TIROS Operational Vertical Sounder). TOVS ist das Instrumentenpaket auf den Satelliten. SSU wurde insbesondere zur Bestimmung von vertikalen Temperaturprofilen in der Stratosphäre entwickelt und ist eine der Hauptquellen zur Bestimmung globaler Temperaturtrends in der oberen Stratosphäre und Mesosphäre über einen langen Zeitraum. Eine detaillierte Beschreibung erfolgt in Wang *et al.* (2012) und Shine *et al.* (2008). Gemessen wird in drei Nadir-Kanälen. Der SSU-Datensatz umfasst drei Kanäle nahe dem Zenit mit einem Winkel von 5° (Kanal 25, 26 und 27, welche etwa 29, 38 und 44 km Höhe entsprechen) und vier sogenannte synthetische Kanäle, welche aus Kombination und Differenzbildung der Beobachtungen nahe dem Zenit und einem größeren Zenitwinkel von 35° abgeleitet werden (Tabelle 1). Hierzu zählen die mit einem x bezeichneten Kanäle 15x, 26x, 36x und 47x, welche etwa 23, 35, 45 und 50 km Höhe entsprechen. Die verwendeten Daten liegen als zonal gemittelte Temperaturanomalien für den Zeitraum von 1979 bis 2005 mit einer 10°-Auflösung von 75°S bis 75°N vor.

Kanal	Kanaltyp	Druckniveau [hPa]	geomtrische Höhe [km]
15x	synthetisch	50	23
25	nahe Nadir	15	29
26x	synthetisch	8	35
26	nahe Nadir	6	38
27	nahe Nadir	2	44
36x	synthetisch	1,9	45
47x	synthetisch	0,6	50

Tabelle 1: SSU-Kanäle nahe Nadir und synthetische Kanäle (x), welche aus Kombination der drei Kanäle, die nahe Nadir gemessen werden, hervorgehen mit entsprechenden Höhenangaben der Gewichtsfunktionen auf Druckniveaus und den zugehörigen ungefähren geometrischen Höhen.

Aus den **Lidar-Messungen** (Light detection and ranging) in Kühlungsborn ( $54^{\circ}\text{N}$ ,  $12^{\circ}\text{O}$ ) im Zeitraum Juni 2002 bis Juli 2007 konnten die ersten Temperaturprofile als Kombination aus Raman-, Rayleigh- und Resonanzrückstreu-Lidar der selben Lokalität produziert werden (*Gerding et al.*, 2008). Die Daten der verschiedenen Messtechniken weisen alle eine vergleichbare räumliche und zeitliche Auflösung auf. Die Beobachtungen fanden in den mittleren Breiten am Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik in Kühlungsborn statt und decken 266 Nächte mit 3–15 Messstunden ab. Die Profile erstrecken sich von der unteren Troposphäre ( $\sim 1 \text{ km}$ ) bis in die untere Thermosphäre ( $\sim 105 \text{ km}$ ). Der Datensatz weist eine relativ starke Variabilität von Tag zu Tag auf, welche durch ein harmonisches Fitting für alle diskreten Höhen reduziert wurde. In der Vertikalen wurden verschiedene 'Bausteine', die mit den einzelnen Messtechniken verbunden sind, zu einem Profil zusammengefügt. Die verschiedenen Höhenabschnitte sind  $0\text{--}30 \text{ km}$ ,  $30\text{--}80 \text{ km}$  und  $80\text{--}110 \text{ km}$ . Die typische Auflösung in der Vertikalen beträgt dabei etwa 1 km. Für eine detaillierte Beschreibung der Lidar-Messtechniken und die Kombination der Methoden sei auf *Alpers et al.* (2004) verwiesen. Der typische statistische Fehler von ungefähr  $\pm 2\text{--}3 \text{ K}$  ist verglichen mit der natürlichen Variabilität (4 K–10 K höhenabhängig und saisonbedingt) als klein zu bewerten. Lidar-Messungen sind wetterabhängig, wodurch im Winter weniger Daten, die mit größerer Variabilität behaftet sind, gesammelt werden konnten.

Die **Raketenmessungen** in  $69^{\circ}\text{N}$  und  $16^{\circ}\text{O}$  bilden einen weiteren Beobachtungsdatensatz. In dem Zeitraum von 1987 bis 1997 wurden insgesamt 89 Raketen in den polaren Breiten während des Sommerhalbjahres zwischen Ende April und Ende September gestartet (*Lübben*, 1999). Aus den Experimenten mittels fallenden Kugeln können Temperaturprofile in der Mesosphäre und oberen Stratosphäre zwischen  $\sim 95 \text{ km}$  und  $35 \text{ km}$  abgeleitet werden. Das ist ein Bereich, bei dem die Ergebnisse optischer Methoden oft aufgrund von solarer Hintergrundstreuung mit größeren Unsicherheiten belastet sind.

Für die obere Grenze der fallenden Kugeln wurde eine Starttemperatur  $T_0$  von unabhängigen Messungen oder von Modelloutputs gewählt, wobei deren Einfluss auf die unteren Atmosphärenschichten im besten Fall ganz verschwinden sollte. Während die Anfangstemperatur noch mit einem Fehler von  $\pm 20\text{ K}$  in einer Höhe von 95 km behaftet ist, reduzieren sich die Unsicherheiten auf  $\pm 5\text{ K}$  in 90 km,  $\pm 2\text{ K}$  in 87 km und betragen unterhalb von 84 km Höhe weniger als  $\pm 1\text{ K}$ . Zur Optimierung der saisonalen Variationen der Temperaturen wurden die Messungen einer diskreten Höhe über einen bestimmten Zeitraum gemittelt. Hierfür wurde ein Monat geviertelt, so dass vier Zeitreihen pro Monat für die Auswertung zur Verfügung stehen. Diese insgesamt 21 Höhenprofile von Ende April bis Ende September werden einer Spline-Glättung unterzogen. Die Berechnung des Fits aus den Originaldaten würde zu einer zu großen Gewichtung der Sommermonate führen.

### 3.1.2 Ozon

Für die Trendstudien stehen fünf verschiedene Datensätze zur Verfügung: das LIMA- und EMAC-Modell, sowie die Modelle SOCOL (Solar Climate Ozone Links) und WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model), die mit dem Reanalysedaten MERRA und dem Beobachtungsdatensatz SBUV (Solar Backscatter Ultraviolet Radiometer) verglichen werden.

Die Ozonreihe, die in **LIMA** eingebunden wird, setzt sich aus zwei Datensätzen zusammen. Zum einen werden Daten vom WMO-Report (World Meteorological Organization) für den Zeitraum 1961–1978 (*Douglass und Fioletov*, 2011) verwendet und zum anderen Satelliten-Messdaten des SBUV-Radiometers für den Zeitraum 1979–2009, gemessen auf diskreten Druckniveaus zwischen 0,5 hPa und 0,7 hPa. Der SBUV detektiert dabei den solaren Rückstreuoeffizienten der ultravioletten Strahlung. Die zeitliche Variation in der oberen Stratosphäre dieses Datensatzes wurde bis zu einer Höhe von etwa 72 km extrapoliert (*Lübken et al.*, 2013). Generell gilt, dass für Höhen ab 55 km Höhe keine  $\text{O}_3$ -Langzeitmessungen zur Verfügung stehen. Aufgrund dessen wurde am IAP eine Sensitivitätsstudie für Langzeitvariationen des Ozons im Höhenbereich von 50 km bis 80 km durchgeführt. Die Analyse bezieht sich auf die mittleren Breiten im Sommer und führt zu dem Ergebnis, dass die Extrapolation der Ozonanomalien für verschiedene Gewichtsfunktionen, welche mit der Höhe variieren, eine untergeordnete Rolle hinsichtlich deren Effekts auf Temperaturtrends in der Mesosphäre spielen. Ozontrends in der Stratopausenregion dagegen üben einen nicht zu vernachlässigen Effekt auf die Temperaturtrends in der Mesosphäre aus. Der Einfluss auf Langzeitänderungen im Ozon und in der Temperatur durch die solare Variabilität nimmt erst in der Thermosphäre zu, so dass ein störender Einfluss auf klimatische Trendanalysen ausgeübt wird.

In **EMAC** wird das Ozonfeld und andere wichtige atmosphärische Spurengase interaktiv im Modell berechnet (*Jöckel et al.*, 2006). Die Konzentrationen an GHGs (greenhouse gases) und ODS (ozone-depleting substances), die als Randbedingungen in die transiente Ref-B1 Simulation des EMAC-Modells eingehen, werden von der Modellvalidierungsinitiative für Klima-Chemie-Modelle CCMVal vorgegeben (*Eyring et al.*, 2008). Das bedeutet, dass neben den Treibhausgasen auch die FCKWs und weitere Substanzen, welche stratosphärisches Ozon zerstören berücksichtigt werden.

In der Studie wurden des Weiteren die Jahre 1960–2000 des gekoppelten Klima-Chemie-Modells **SOCOL** verwendet. SOCOL setzt sich aus dem Chemiemodell MEZON (Model of the Evaluation of Ozone Trends) und dem globalen Zirkulationsmodell ECHAM zusammen.

Der vierte Ozon-Datensatz ist eine Modellsimulation des **WACCM**-Modells. Dieses basiert auf CAM (National Center for Atmospheric Research's Community Atmospheric Model) und erstreckt sich in der Vertikalen mit 66 Level bis zu einer Höhe von  $4,5 \times 10^{-6}$  hPa (~145 km) (*Garcia et al.*, 2007). Das Chemiemodul wird von einem 3-dimensionalen Chemie-Transportmodell für Ozon und entsprechenden chemischen Indikatoren abgeleitet. Es wurden alle  $O_x^-$ ,  $NO_x^-$ ,  $HO_x^-$ ,  $ClO_x^-$  und  $BrO_x^-$ -Zyklen mit eingebunden, sowie die Verbindungen  $NO_2$ ,  $H_2O$ ,  $CH_4$ , FCKWs und Halogenverbindungen, die in der Troposphäre als Quellen dienen könnten. Außerdem wurden verschiedene Ionen ( $N_2^+$ ,  $O_2^+$ ,  $N^+$ ,  $NO^+$  und  $O^+$ ), die eine wichtige Rolle in der mittleren Atmosphäre spielen, berücksichtigt. Heterogene Prozesse auf Sulfataerosolen und polaren mesosphärischen Wolken wie auch Aerosolsedimentation folgen der Vorgehensweise nach Considine et al. (2000). Eine zusammenfassende Auflistung der gesamten Verfahren und Reaktionen wird durch Kinnison et al. (2006) gegeben. Für die Analyse liegen die Daten für den Zeitraum von 1983 bis 2003 vor.

Für den Vergleich mit Beobachtungsdaten stehen **SBUV**-Daten der NIMBUS-Satelliten zur Verfügung. Mit einem Spektrometer werden die Dichte und die Verteilung des Ozons in der gesamten Atmosphäre aufgenommen. Die eigentliche Zielsetzung des SBUV-Instrumentes ist es, die Bestrahlungsdichte und die Strahlung der Erde im nahen UV-Spektrum zwischen 160 nm und 400 nm zu messen. Aus diesen Daten kann dann anschließend die globale und vertikale Verteilung und die Struktur des stratosphärischen Ozons, sowie die photochemischen Prozesse und Einflüsse von den Hauptkomponenten auf die Ozonschicht abgeleitet werden. Die Beobachtungen werden von einem Sensor, der sich auf den NOAA-Wettersatelliten befindet, durch Ferndetektion gemessen.

### 3.1.3 Kohlenstoffdioxid

Die CO<sub>2</sub>-Messreihe von **Mauna Loa** ist die erste und längste CO<sub>2</sub>-Dokumentation. Seit 1958 werden die CO<sub>2</sub>-Variationen am observatorischen Institut für Ozeanografie bei etwa 19°N auf Hawaii aufgezeichnet (*Keeling et al.*, 1976). Die kontinuierlichen In-situ-Messungen werden mit Hilfe eines hoch präzisen nicht-dispersiven Infrarotphotometers detektiert (*IPCC-Report*, 2007). Die Zeitreihe unterliegt einem positiven Trend, der auf anthropogene Einflüsse, wie die Verbrennung von fossilen Brennstoffen und Abholzung von Wäldern, zurückzuführen ist. Die CO<sub>2</sub>-Kurve wird auch als Keeling-Kurve bezeichnet, benannt nach dem Atmosphären- und Klimaforscher Charles David Keeling. Dieser fand eine jahreszeitliche Variation in der Zeitreihe (rote Kurve in Abb. 4). Die schwarze Kurve ist die saisonbereinigte Zeitreihe. Der Anstieg des CO<sub>2</sub> ist nicht linear. Für 1858–1980 beträgt der Anstieg etwa 10 ppmv/Dekade und steigt für den Zeitraum 2000–2012 auf 20 ppmv/Dekade. Die saisonalen Schwankungen (kleine Grafik in Abb. 4) sind vegetationsbedingte Variationen und richten sich nach der Abgabe und Aufnahme von Kohlenstoffdioxid durch die Pflanzen. Im Allgemeinen sind die Schwankungen in den nördlichen Breiten aufgrund einer flächenmäßig höheren Vegetationsrate größer. Die saisonbereinigten Zeitreihen der Südhalbkugel und der Nordhalbkugel ähneln sich jedoch stark. Die Atmosphäre ist sehr gut mit Kohlenstoffdioxid durchmischt.

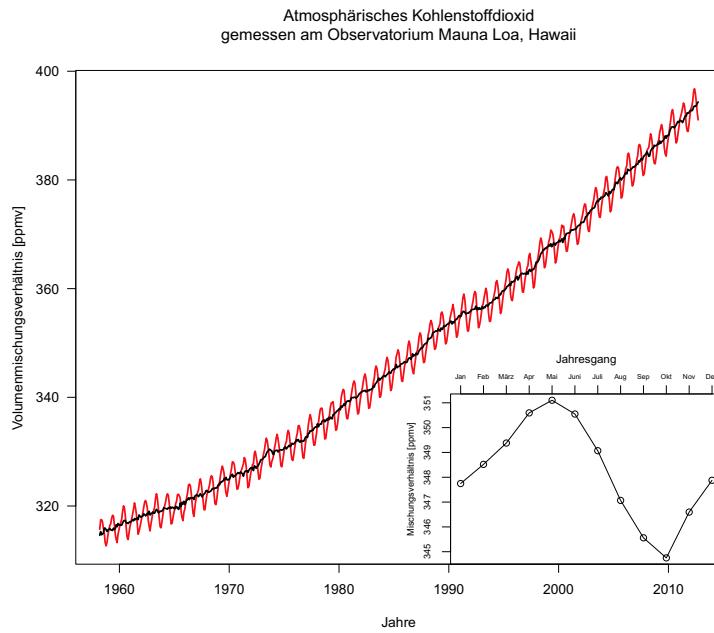


Abbildung 4: Monatsmittel des atmosphärischen Kohlenstoffdioxids gemessen am Mauna Loa Observatorium auf Hawaii mit den jahreszeitlichen Schwankungen für die Jahre 1958–2012. Die schwarze Kurve beschreibt die saisonbereinigten Daten.

### 3.1.4 11-Jahreszyklus der Sonnenvariabilität

Die solare Aktivität wird mit stetigen Veränderungen des Magnetfeldes der Sonne in Verbindung gebracht. Im zeitlichen Verlauf treten zyklische Veränderungen auf. Unterschieden wird dabei meist in langen und kurzen solaren Zyklen. Neben den sehr langen Zyklen, zu denen auch der 80-jährige Gleißberg-Zyklus zählt, gibt es ebenfalls Kurzzeitschwankungen mit einer 27-tägigen Periode, welche auf die Rotation der Sonne zurückzuführen ist (Zönnchen, 2006). Die bedeutendste solare Variabilität ist der 11-jährige Schwabe-Zyklus. Gemessen an der Häufigkeit der Sonnenflecken wird dieser Vorgang bereits seit 1749 beobachtet. Nach 11 Jahren kehrt sich die Polarität des Sonnenmagnetfeldes um, so dass der gesamte Zyklus (Hale-Zyklus), bei dem der Ausgangszustand wieder eingenommen wird, erst nach 22 Jahren wieder erreicht wird. Aber auch andere Parameter, wie die UV- und Infrarotstrahlung, korrelieren mit den Sonnenflecken. Die Änderung der Sonnenaktivität kann somit auch durch die solare Emission von ultravioletter Strahlung bei 121,6 nm (Lyman- $\alpha$ -Linie) gemessen werden. Die dekadische Sonnenvariabilität mit dem durchnummerierten 11-Jahreszyklus seit 1749 ist in Abbildung 5 dargestellt. Die Daten entstammen Tagesmitteln von Satellitenbeobachtungen im Zeitraum 1947 bis 2010 (<ftp://laspftp.colorado.edu/pub/SEE-DATA/composite-lya>).

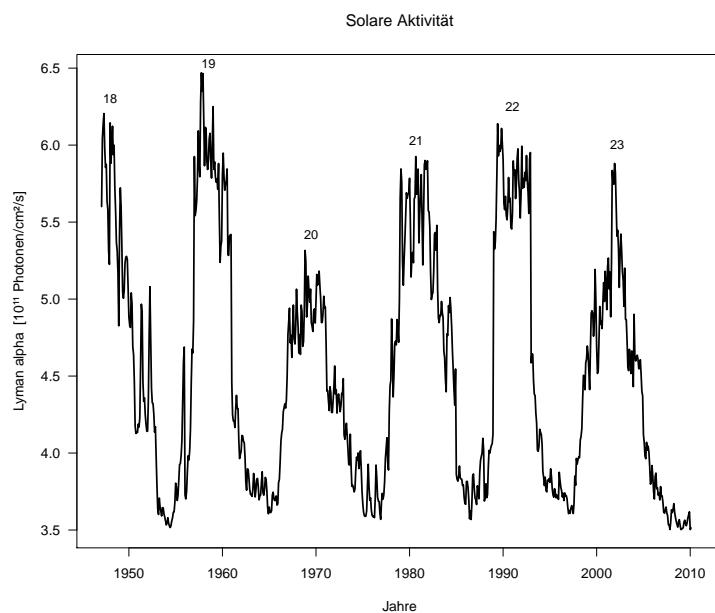


Abbildung 5: Sonnenvariabilität der letzten 60 Jahre mit dem 11-jährigen Sonnenzyklus (Die Zyklen werden seit 1749 nummeriert).

Die folgende Tabelle 2 bietet eine Übersicht über alle verwendeten Daten.

Größe	Datensatz	Datentyp	Zeitraum	Höhenlevel	geograf. Breite und Länge
Temperatur	LIMA EMAC	Modell	1961 – 2009	1 – 105 km (geometr. Höhe) 933 – 0,03 <sup>-2</sup> hPa (Druckniveau)	zonal gemittelte Breitenbänder mit 10° Auflösung von 85°S – 85°N
	SSU-Satellit	Modell Beob.	1970 – 2005	38 Level von 1000 hPa bis 0,02 hPa ( $\sim$ 0 – 75 km)	64 Gitterpunkte von 87,86°S bis 87,86°N (zonale Mittel)
	LIDAR Kborn Raketen	Beob.	1979 – 2005	7 Kanäle: 25, 26, 27, 15x, 26x, 36x und 47x ( $\sim$ 23 – 50 km)	zonal gemittelte Breitenbänder von 70°S bis 70°N
	MERRA	Reanalyse	2002 – 2007 1987 – 1997 1979 – 2011	1 – 105 km 35 – 95 km 72 Level von 1 – 77 km (geometr. Höhe) bzw. 933 – 0,01 hPa (Druckniveau)	54°N, 12°O 69°N, 16°O zonal gemittelte Breitenbänder mit 10° Auflösung von 85°S bis 85°N
Ozon	WACCM SOCOL-MPIOM EMAC	Modell Modell Modell	1983 – 2003 1960 – 2000 1970 – 2005	66 Level von 992 bis 4,5x10 <sup>-6</sup> hPa 30 Level von 1000 bis 0,01 <sup>-1</sup> hPa 38 Level von 1000 hPa bis 0,02 hPa ( $\sim$ 0 – 75 km)	96 Gitterpunkte von 90°S bis 90°N 48 Gitterpunkte von 87°S bis 87°N 64 Gitterpunkte von 87°S bis 87°N (zonale Mittel)
	SBUV-Satellit	Beob.	1970 – 2011	10 verschiedene Schichten defi- niert aus 21 Schichten von 1013 hPa bis TOA	Breitenbänder mit 10° Auflösung von 90°S bis 90°N
	MERRA	Reanalyse	1979 – 2011	72 Level von 1 – 77 km (geometr. Höhe) bzw. 933 – 0,01 hPa (Druckniveau)	zonal gemittelte Breitenbänder mit 10° Auflösung von 5°S bis 85°N
Kohlenstoffdioxid	WACCM EMAC	Modell Modell	1983 – 2003 1960 – 2005	66 Level von 992 bis 0,05 <sup>-4</sup> hPa 38 Level von 1000 hPa bis 0,01 hPa ( $\sim$ 0 – 80 km)	96 Gitterpunkte von 90°S bis 90°N 64 Gitterpunkte von 87,86°S bis 87,86°N (zonale Mittel)
Solare Aktivität	Mauna Loa Lyman- $\alpha$ -Linie	Beob. Beob.	1960 – 2012 1947 – 2010	in 3400 m Höhe 21°N, 157°W	

Tabelle 2: Übersicht der verwendeten Datensätze, sortiert nach den untersuchten Parametern.

## 3.2 Statistische Methoden

Es gibt verschiedene statistische Methoden, einen Trend einer Zeitreihe zu detektieren und diesen hinsichtlich der Stärke und Richtung zu analysieren. Im Folgenden werden die verwendeten Methoden und die Vorgehensweise der Datenanalyse erläutert. Die statistische Auswertung der klimatologischen Daten bezieht sich dabei im Wesentlichen auf die Regressionsanalyse und deren Überprüfung auf Signifikanz. Aus den analysierten signifikanten Trends können dann Rückschlüsse auf potentielle Veränderungen in der Mesosphäre bzw. aufgrund der Kopplung mit den unteren Atmosphärenschichten auch Veränderungen in der Stratosphäre und Troposphäre gezogen werden.

### 3.2.1 Lineare Interpolation und Umrechnung von Druckniveaus in geometrische Höhen

Bei der Analyse von Trends in den höheren Atmosphärenschichten ist es wichtig anzumerken, auf welcher Höhenskala diese Auswertungen stattfinden. Ein Vergleich von Trends auf geometrischer Höhe und Druckniveaus weist eine deutliche Abweichung voneinander auf, welche auf sogenannte Schrumpfungseffekte zurückzuführen sind. Bei Erwärmung dehnt sich die Luft infolge der erhöhten Molekularbewegung aus, wobei diese thermische Expansion mit einer Dichte- und Druckänderung einhergeht. Somit kann sich auch die Höhe eines Druckniveaus, auf dem gemessen wird, im Gegensatz zu einer Messung auf einer konstanten geometrischen Höhe, mit der Zeit ändern. Durch die Umrechnung der Druckniveaus auf logarithmische Druckhöhen  $z_{\text{press}}$  erhält man eine gewisse Vorstellung, auf welchen Höhenkilometern sich die Druckniveaus befinden. Diese Umrechnung wird mit folgender Formel berechnet:

$$z_{\text{press}} = H * \ln(p_0/p), \quad (1)$$

wobei  $H$  die konstante Skalenhöhe mit  $H = 7$  ist,  $p_0$  den Bodenluftdruck und  $p$  den Luftdruck in der Höhe  $z_{\text{press}}$  bezeichnet. Die einzelnen Datensätze, welche in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden, liegen zum einen für geometrische Höhen und zum anderen für verschiedene diskrete Druckniveaus vor. Um die Datensätze untereinander besser vergleichbar zu machen, erfolgt unter anderem die Umrechnung der ermittelten logarithmischen Druckhöhen in geometrische Höhen, welche anschließend linear interpoliert werden. Für die Umrechnung in die geometrische Höhe muss zunächst das Geopotential  $\Phi$  ermittelt werden:

$$\Phi(z) = \sum_0^z R / (\Gamma * H) * T_{\text{mean}} * \Delta z. \quad (2)$$

Hierbei gehen die universelle Gaskonstante  $R$ , die Abweichung des mittleren Molekulargewichts der mittleren Höhe  $\Gamma$ , die Skalenhöhe  $H$ , sowie die mittlere Temperatur zweier

aufeinanderfolgender Höhenschichten  $T_{\text{mean}}$  und die Höhendifferenz  $\Delta z$  dieser Schichten mit in die Formel ein. Anschließend erfolgt mit Hilfe des Geopotentials  $\Phi$ , der Gravitationsbeschleunigung auf Meeresniveau  $g_0 = 9,80665 \text{ m/s}$  und dem effektiven Erdradius  $r_0 = 6\,356\,766 \text{ m}$  die Berechnung der gesuchten geometrischen Höhe  $z_{\text{geo}}$ :

$$z_{\text{geo}} = a * r_0 / (r_0 - a) \quad \text{mit} \quad a = 1 / (g_0 * 1000) * \Phi. \quad (3)$$

Die Werte wurden dem Buch U.S. Standard Atmosphere 1976 (*USSA 76*, 1976) entnommen. Da die Temperaturen sich nun auf bestimmten diskreten Höhen befinden, bietet sich zum Vergleich mit anderen Datensätzen, welche eine abweichende vertikale Auflösung bezogen auf diskrete Höhenkilometer aufweisen, eine lineare Interpolation der Höhe an. Realisiert wird dies mit folgender Formel:

$$T_{\text{interpol}} = T_i + \frac{(z_{\text{interpol}} - z_{\text{geo}})}{(z_{\text{geo}+1} - z_{\text{geo}})} \cdot (T_{i+1} - T_i), \quad (4)$$

wobei  $T_i$  und  $T_{i+1}$  die Temperaturen auf der aktuellen Höhenskala in der Schicht unterhalb der gewählten zu interpolierten Höhenschicht und der darüber liegenden Schicht repräsentieren. Die jeweiligen geometrischen Höhen dazu sind  $z_{\text{geo}}$  und  $z_{\text{geo}+1}$  und  $z_{\text{interpol}}$  definiert die gewünschte geometrische Höhe, in der die interpolierte Temperatur ausgerechnet wird. Neben der Interpolation der Temperaturen in der Höhe wurde zur besseren Gegenüberstellung ebenfalls eine lineare Interpolation in den Breitengraden durchgeführt, da auch hier verschiedene diskrete Breitengrade der einzelnen Datensätze vorliegen.

### 3.2.2 Saisonale Bereinigung

Um die zyklische Komponente einer Zeitreihe besser analysieren zu können, ist es meist hilfreich, die Zeitreihe saisonal zu bereinigen. Dabei werden die Schwankungen innerhalb eines Jahres eliminiert. Eine Vorgehensweise ist dabei das Phasendurchschnittsverfahren, welches von *Moosmüller* (2004) beschrieben wird. Die Methode kann man in fünf Schritte untergliedern. Im ersten Schritt werden die sogenannten Phasendurchschnitte berechnet. Diese entsprechen den arithmetischen Mitteln aller Daten des gleichen Monats. Anschließend wird im zweiten Schritt der Gesamtdurchschnitt dieser arithmetischen Mittel gebildet. Schritt drei bezieht sich auf die Bereinigung der einzelnen Saisonmittelwerte, die dann die Saisonfaktoren ergeben. Zum Beispiel wird das Verhältnis von Dezemberdurchschnitt und Gesamtdurchschnitt ermittelt. Bei einem Verhältnis größer 1 sind die Werte überdurchschnittlich groß und bei einem Verhältnis unter 1 gelten die Werte als überdurchschnittlich klein. Bevor sich die Zeitreihe additiv saisonbereinigen lässt, muss noch zunächst im vierten Schritt die Berechnung der saisonbereinigten Monatswerte erfolgen. Hierzu bildet man wiederum das Verhältnis von den Ausgangsdaten und den Saisonfaktoren.

### 3.2.3 Regressionsverfahren

Ziel einer Regression ist es, Zusammenhänge zwischen unabhängigen und abhängigen Variablen zu approximieren. Es gibt verschiedene Schätzverfahren, die Regressionskoeffizienten einer linearen Beziehung zu bestimmen. Eine Gemeinsamkeit der Schätzverfahren ist die Zusammenhangsanalyse von zwei oder mehreren Variablen. Als standardmäßiges Schätzverfahren für die Ermittlung der Koeffizienten hat sich die parametrische Methode der Kleinsten-Quadrat-Schätzer herausgestellt. Zu den nicht-parametrischen Regressionschätzern gehört unter anderem das im folgenden dritten Abschnitt vorgestellte Theil-Sen-Verfahren.

**Die Methode der kleinsten Quadrate** (OLS – Ordinary least squares) ist ein oft verwendetes Verfahren zur Analyse des Einflusses von einer oder mehreren unabhängigen Variablen  $x$  auf eine metrische abhängige Variable  $y$ . Sie schätzt die gesuchten Kurvenparameter bzw. Regressionskoeffizienten  $\beta$  so, dass die Summe der quadratischen Abweichungen der Kurve von den Datenpunkten minimiert wird (Abb. 6). Das einfachstes Modell wird durch die lineare Beziehung einer unabhängigen und einer abhängigen Variablen beschrieben, auch bivariate lineare Regression genannt:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \hat{u}. \quad (5)$$

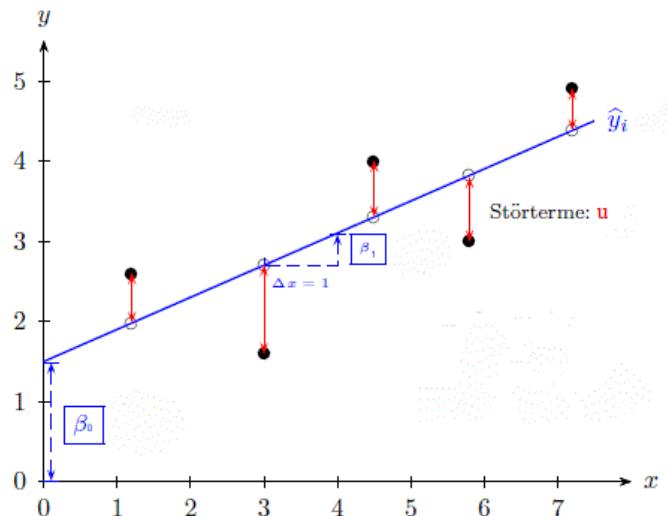


Abbildung 6: OLS - Methode mit den Regressionskoeffizienten  $\beta_0$  und  $\beta_1$ , welche so gewählt werden, dass die Summe der quadrierten Abweichungen möglichst klein ist. Diese entspricht der Fläche ( $u^2$ ), die sich aus den Quadraten der einzelnen roten Linien (Residuen = Störterme) ergeben würde.

Die Regressionsgerade verläuft dabei durch den Schwerpunkt  $(\bar{x}, \bar{y})$  der sogenannten Punktewolke.  $\hat{y}$  beschreibt den Anteil von  $y$ , welcher durch die unabhängigen Variablen  $x$  erklärt

wird, aufgrund dessen ist dieser Wert nur ein Schätzwert. Ziel ist es allerdings,  $\hat{y}$  an den wahren Wert  $y$  anzunähern und die Störterme möglichst gering zu halten. Die lineare Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate fordert eine Normalverteilung der Stichprobe, welche nach dem zentralen Grenzwerttheorem schon bei einer Datenreihe von 30 Werten (Mittelwerte) gegeben ist. Das zentrale Grenzwerttheorem besagt, dass sich die Varianz mit zunehmender Stichprobengröße verringert und dass sich ab einer bestimmten Stichprobengröße eine relativ genaue Schätzung des wahren Mittelwertes ergibt. Dabei konvergiert die Summe einer großen Zahl von zentrierten und normierten Zufallsvariablen gegen die Standardnormalverteilung, unabhängig von der Verteilungsform des Merkmals in der Population (Stocker, 2013). Des Weiteren fordert das Modell der OLS die Unabhängigkeit der Daten, wie auch eine identische Verteilung. Die Abweichungen bzw. Residuen entsprechen den Werten, welche sich bei der Subtraktion der beobachteten bzw. modellierten  $y$ -Werten von den prognostizierten  $\hat{y}$ -Werte ergeben:

$$\hat{u} = y - \hat{y}. \quad (6)$$

Diese Differenz beschreibt einen Vektor, der immer senkrecht zu den Vektoren der erklärenden Variablen steht (siehe Abb. 6). Die Residuen können nicht mit den Störtermen gleichgesetzt werden, welche unbeobachtet sind, sie gelten aber als Approximation für die Störterme (Schild, 2013). Die Methode der kleinsten Quadrate bezieht sich gerade auf die Minimierung der Quadratsumme der Residuen.

**Die multiple lineare Regression** betrachtet nicht nur den Zusammenhang zwischen einer abhängigen Variablen und einer unabhängigen Variablen, sondern bezieht sich auf mehrere unabhängige Einflussgrößen. In diesem Fall müssen auch dementsprechend mehrere Regressionskoeffizienten  $\beta_i$  ermittelt werden. Ziel ist es unter anderem, besondere Effekte zu bestimmten Zeitpunkten, wie Ausreißer oder andere unbekannte Effekte bei Vernachlässigung von Abhängigkeiten und Konzentration auf einzelne Einflussgrößen, zu erkennen. Die Vorhersage zukünftiger Werte könnte durch die Übertragung vergangener Bedingungen auf die zukünftige Entwicklung verbessert werden. Mit Hilfe der multivariaten Regressionsanalyse können außerdem einzelne Beziehungsmuster zwischen den verschiedenen Einflussgrößen beschrieben werden. Bei der multiplen Regression ist der Ausprägungsgrad mehrerer Variablen  $x_k$  (Prädiktatoren) bekannt. Die mathematische Funktion zur Vorhersage ist eine Linearkombination, die den multiplen Zusammenhang zwischen den Prädiktoren  $x_k$  und dem sogenannten Kriterium  $\hat{y}$  beschreibt:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k + \hat{u}. \quad (7)$$

Die unbeobachtete Zufallsgröße wird durch den Parameter  $\hat{u}$  geschätzt,  $\beta_0$  steht für ein Interzept, also für den Fall, dass einer der Variablen  $x_k$  konstant 1 ist. Die Regressions-

koeffizienten  $\beta_k$  geben eine Änderungsrate an. Möchte man demzufolge den Einfluss der Variablen  $x_i$  beispielsweise auf  $\hat{y}$  beschreiben, sind alle anderen Faktoren  $x_k$ , die nicht  $x_i$  entsprechen, konstant anzusehen. In diesem Fall ändert sich  $\hat{y}$  um  $\beta_i$ - Einheiten, wenn  $x_i$  um eine Einheit geändert wird (*Schild*, 2013).

Die Modellfunktion lässt sich auch in Matrizenbeschreibweise darstellen, welche eine bessere Übersicht bietet:

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{nk} \end{pmatrix}, \quad x_i = \begin{pmatrix} x_{1,i} \\ x_{2,i} \\ \vdots \\ x_{ni} \end{pmatrix} \quad (\text{für } i = 1, \dots, k), \quad X = \begin{pmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,k} \\ x_{2,1} & \cdots & x_{2,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,k} \end{pmatrix} \quad (8)$$

und zusammengefasst:

$$\hat{y} = X \beta + \hat{u}. \quad (9)$$

Eine einfache Lösung des Gleichungssystems würde sich ergeben, wenn alle Fehlerterme gleich Null wären. Das ist in der Realität aber so gut wie nie der Fall. Meistens hat man mehrere Beobachtungen, welche die Modellfunktion beschreiben, als bekannte Prädiktoren ( $k < n$ ). Aus diesem Grund versucht man mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate eine Annäherung für die Regressionskoeffizienten  $\beta_i$  zu finden. Dabei wird das kleinste Quadrat des Abstandes von  $X \beta$  zu  $y$  gesucht und man erhält folgende vereinfachte Gleichung:

$$\beta = (X'X)^{-1}X'y \quad (\text{wobei } (X'X)^{-1} = \sum_{i=1}^N x_i x_i' \text{ ist}). \quad (10)$$

Der Standardfehler der Regressionskoeffizienten  $\beta_i$  berechnet sich nach:

$$\text{Var}(\beta) = \sigma^2 (X'X)^{-1}. \quad (11)$$

$X'$  steht für das Inverse der Matrix  $X$ , welche alle Regressoren umfasst. Für die Ermittlung der Varianz des Störterms  $\text{Var}(u) = \sigma^2$  wird die unbeobachtete Varianz der Residuen geschätzt. Im Falle einer exakten linearen Abhängigkeit der  $x$ -Variablen untereinander, d.h. wenn diese einer Korrelation von  $\pm 1$  unterliegen, können keine Koeffizienten und Varianzen der Koeffizienten ermittelt werden (*Stocker*, 2013). Hierbei liegt eine sogenannte Multikollinearität vor. Auch wenn die Variablen untereinander eine hohe Korrelation ( $r^2$ ) aufweisen, spricht man von einer Multikollinearität. Liegt diese vor, ist es schwierig, den

Einfluss der einzelnen Variablen ausfindig zu machen, da die korrelierten Variablen gemeinsam einen hohen Anteil der Streuung von  $y$  erklären. Der individuelle Einfluss ist somit schwer einer einzelnen Variablen zuzuordnen. Dies resultiert in großen Standardfehlern der Koeffizienten. Unter anderem liefern ein großes  $r^2$  und wenige signifikante Koeffizienten einen Hinweis auf eine Multikollinearität. Bei dem entgegengesetzten Szenario, dass die  $x$ -Variablen gar keine Korrelation aufweisen, erhält man bei der Berechnung der Koeffizienten und deren Varianzen die gleichen Koeffizienten, die man auch bei der bivariaten Regression von  $y$  auf die einzelnen Prädiktoren  $x_k$  erhalten würde. Die Korrelation zwischen  $x_1$  und  $x_2$  ist definiert als:

$$r = \frac{\sum_i^N (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2)}{\sqrt{\sum_i^N (x_{i1} - \bar{x}_1)^2} \sqrt{\sum_i^N (x_{i2} - \bar{x}_2)^2}}. \quad (12)$$

Dabei werden unter anderem die Mittelwerte der jeweiligen Datenreihe von jeder Variable abgezogen. Die Variable  $r$  entspricht gerade dem Kosinus des eingeschlossenen Winkels, der durch die zwei korrelierten Vektoren aufgespannt wird, d.h. je höher die Korrelation ist, desto geringer ist der eingeschlossene Winkel. Diese beiden Vektoren beschreiben grafisch betrachtet eine Regressionsebene, auf der die gefitteten  $y$ -Werte ( $\hat{y}$ ) liegen (siehe Abb. 7). Die prozentuale Abhängigkeit der Variablen  $x_1$  und  $x_2$  kann durch die Multiplikation mit  $r^2$  angegeben werden.

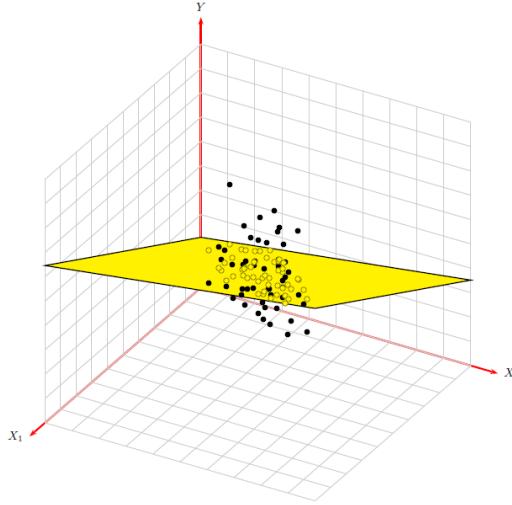


Abbildung 7: Grafische Darstellung der gefitteten  $y$ -Werte im euklidischen Raum mit einer hohen Multikollinearität zwischen  $x_1$  und  $x_2$  von  $r^2 = 0,9$  (Stocker, 2013).

Im Zusammenhang mit der Multikollinearität findet man in der Literatur häufig den Begriff Variance Inflation Factor (VIF), welcher als Indikator für die Multikollinearität dient (Formel 13). Die meisten Referenzen verweisen auf ein Multikollinearitätsproblem bei einem VIF-Wert von größer als 10 (Stocker, 2013; Hair et al., 1995).

$$VIF = \frac{1}{1 - r^2} \quad (13)$$

Bei mehr als zwei Variablen wird die Korrelation durch  $R^2$  ersetzt. Die Abhängigkeit zweier Datensätze, beispielsweise eines Beobachtungsdatensatzes und einer modellierten Datenreihe, kann wie beschrieben mittels Korrelation analysiert werden. Um die Güte eines Modells zu quantifizieren, bietet sich neben der Korrelation auch das sogenannte Bestimmtheitsmaß  $R^2$  an. Hierbei wird die Gesamtvariation (TSS – Total Sum Squared) der abhängigen Variablen in die Variation der Residuen (SSR – Sum of Squared Residuals) und die Variation der Regressionswerte (ESS – Explained Sum Squared) aufgeteilt:

$$\underbrace{\sum_i^N (y_i - \bar{y})^2}_{TSS} = \underbrace{\sum_i^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2}_{ESS} + \underbrace{\sum_i^N u^2}_{SSR}. \quad (14)$$

Ersterer der beiden Terme auf der rechten Seite der Gleichung beschreibt den zufälligen Anteil, dessen Varianz nicht durch das Modell erklärt werden kann. Der zweite ist der systematische Anteil, welcher durch das Regressionsmodell wiederum erklärt wird. Zur Bestimmung des  $R^2$  wird schließlich der systematische Anteil und die Gesamtstreuung der abhängigen Variablen ins Verhältnis gesetzt, wodurch das Bestimmtheitsmaß nur Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann. Je näher der Wert an 1 liegt, desto besser wird das Modell eingestuft. Das gleiche Ergebnis erhält man bei der Berechnung von 1 minus dem Quotienten aus zufälligem Anteil und der Gesamtstreuung der abhängigen Variablen:

$$R^2 = 1 - \frac{SSR}{TSS} = 1 - \frac{\sum_i^N u^2}{\sum_i^N (y_i - \bar{y})^2}. \quad (15)$$

Das *Adjusted R-squared* berücksichtigt die Anzahl der Regressoren  $k$  in der Formel. Dies führt dazu, dass das *Adjusted R-squared* nicht zwingend steigt, wenn neue Regressoren hinzugenommen werden. Das *Adjusted R-squared* eignet sich für den Vergleich von Regressionen mit unterschiedlicher Anzahl an erklärenden Variablen. Gegenüber dem *Multiple R-squared* wird ein Korrekturfaktor  $(N - 1)/(N - k)$  eingebaut (Schild, 2013). Erhöht sich somit die Anzahl an erklärenden Variablen  $k$ , erhöht sich das *Adjusted R-squared*.

$$R_{adjusted}^2 = 1 - \frac{N - 1}{N - k} \frac{\sum_i^N u^2}{\sum_i^N (y_i - \bar{y})^2}. \quad (16)$$

Neben einem VIF größer als 10, ergibt sich auch ein Multikollinearitätsproblem bei einer größeren Korrelation ( $r^2$ ) einer Hilfsregression gegenüber dem Bestimmtheitsmaß ( $R^2$ ) des gesamten Modells (Klien's Faustregel). Auch wenn es in diesem Fall schwer ist, den individuellen Einfluss einer einzelnen Variablen zuzuordnen, ist die gemeinsame Abhängigkeit der Prädiktoren zu dem Kriterium mit dem  $R^2$  leicht zu ermitteln (Stocker, 2013).

Anhand des folgenden Beispiels werden die beschriebenen statistischen Auswertemethoden verdeutlicht. Dabei wird die multiple lineare Regression auf den SSU-Temperaturdatensatz angewandt (Abb. 8).

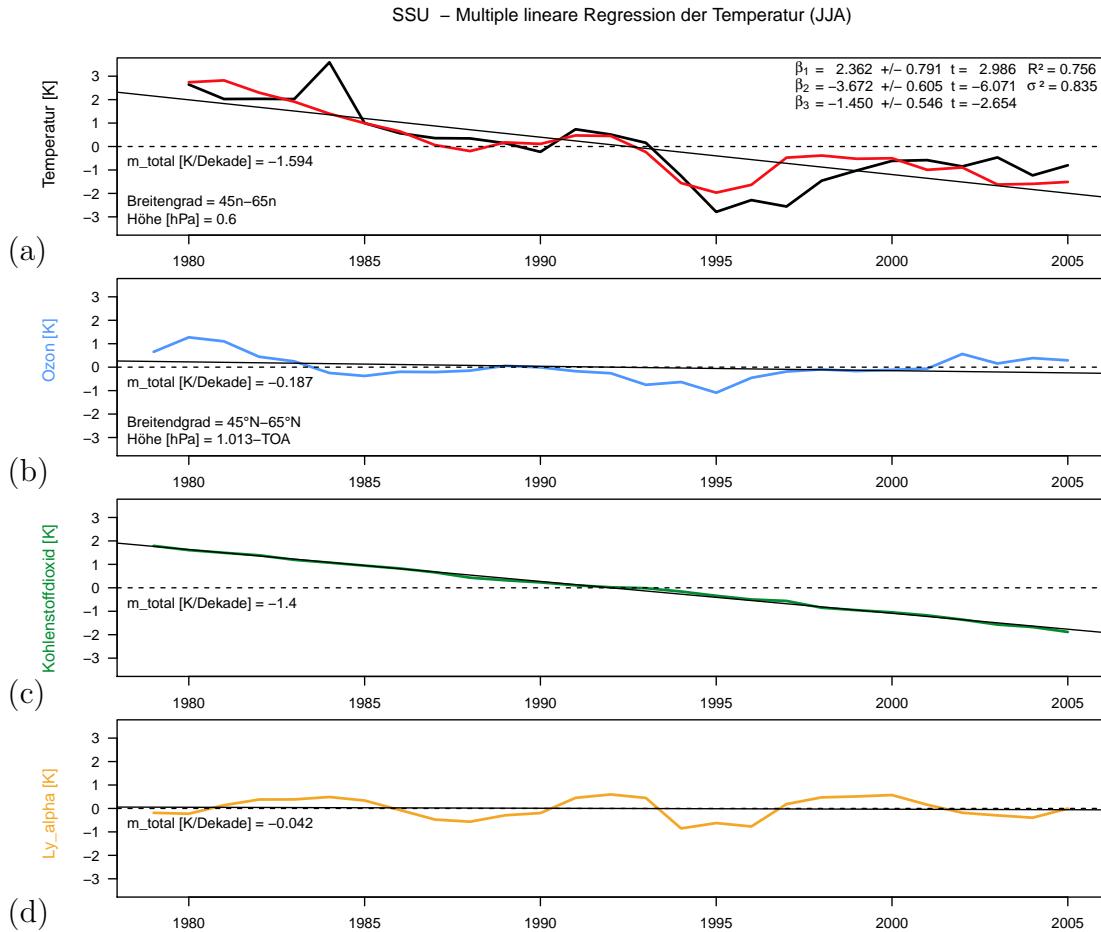


Abbildung 8: Beispiel einer multiplen linearen Regression der SSU-Satellitendaten für den Sommer (JJA). Die Originalzeitreihe ist schwarz dargestellt und der entsprechende Fit rot (a). Die statistischen Ergebnisse (oben rechts in der Grafik in a) sind im Text genauer erläutert. Die Koeffizienten  $m_{\text{total}}$  (a bis d) beziehen sich auf den linearen Trend einer einfachen bivariaten Regressionsanalyse, in den einzelnen Teilgrafiken als schwarze Geraden dargestellt. Des Weiteren sind die Regressionsanteile der multiplen linearen Regressionsanalyse am Temperatursignal zu sehen -  $O_3$  (b),  $CO_2$  (c) und  $Ly-\alpha$  (d).

Für die lineare Beziehung zwischen dem Temperaturverlauf und den Regressoren kann folgende Gleichung aufgestellt werden:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 O_3 + \beta_2 CO_2 + \beta_3 Ly_\alpha + \hat{u}. \quad (17)$$

Der Temperaturverlauf des SSU-Datensatzes soll durch die Regressoren  $O_3$ ,  $KO_2$  und dekadische Sonnenvariabilität (approximiert durch die  $Ly-\alpha$ -Linie) geschätzt werden. Es besteht eine zeitliche Abhängigkeit der Werte. Eine Zusammenfassung der Analyse mit dem Statistikprogramm R liefert die in Abbildung 9 dargestellten Ergebnisse.

```

> summary(lmMultiple)

Call:
lm(formula = SSU_temp ~ O3 + CO2 + Ly_alpha, na.action = na.exclude)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-2.08445 -0.32118  0.02277  0.34719  2.19153 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)  0.08678   0.16437   0.528  0.60280    
O3           2.36212   0.79099   2.986  0.00681 **  
CO2          -3.67200   0.60487  -6.071 4.13e-06 *** 
Ly_alpha     -1.45008   0.54645  -2.654  0.01451 *   
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 0.8353 on 22 degrees of freedom
(1 observation deleted due to missingness)
Multiple R-squared: 0.7555,    Adjusted R-squared: 0.7222 
F-statistic: 22.66 on 3 and 22 DF,  p-value: 6.359e-07

```

Abbildung 9: Ergebnisse der multiplen linearen Regressionsanalyse anhand eines gewählten Beispiels mit Beobachtungsdaten zur Rekonstruktion des SSU-Temperaturverlaufs (Ausgabe der Statistiksoftware R).

Die Regressionskoeffizienten  $\beta$  sind unter *Estimate* und deren Standardfehler  $\text{Var}(\beta)$  unter *Std. Error* zusammengefasst. Die SSU - Temperaturen werden in Anomalien angegeben (K). Die Regressoren  $O_3$ ,  $CO_2$  und Lyman- $\alpha$  gehen als normierte Funktionen in den multiplen linearen Fit ein. Die Normierung der Ozonreihe wird folgendermaßen berechnet:

$$\hat{O}_3(t) = \frac{O_3(t) - \bar{O}_3(t)}{\max\{O_3(t)\} - \min\{O_3(t)\}}. \quad (18)$$

In dem Beispiel ist  $\bar{O}_3(t)$  das Mittel über die Zeitreihe und  $\max\{\dots\}$  und  $\min\{\dots\}$  der Maximal- und der Minimalwert. Eine ähnliche Normierung erfolgte für den Kohlenstoffdioxid und der Lyman- $\alpha$ -Linie. Die Koeffizienten lassen sich dann so interpretieren, dass beispielsweise eine Änderung von einer Einheit in der normierten  $O_3$ -Reihe eine Änderung im Temperaturverlauf von etwa  $2,36 \pm 0,79$  K bewirkt. Des Weiteren ist der Standardfehler der Residuen mit 0,84 angegeben, d.h. die Residuen  $\hat{u}$  liegen bei etwa 2/3 der Beobachtungen im Intervall von  $[-0,84 \text{ K}; +0,84 \text{ K}]$ . Den  $R^2$  - Wert findet man in der statistischen R - Ausgabe unter dem Begriff *Multiple R-squared*, der im Beispiel 0,76 beträgt. Dieser Wert ist relativ hoch: die angegebenen Regressoren beschreiben die Langzeitvariationen im SSU-Temperaturverlauf zu 76 %.

Die einzelnen Regressoren des Beispiels können auf Kollinearität nach Gleichung (12) geprüft werden. Die Ergebnisse aller Korrelationen werden schließlich in einer Korelationsmatrix zusammengefasst:

```
> cor_matrix
      O3          CO2          Ly
O3  1.0000000000  0.069400396  0.0001430993
CO2  0.0694003959  1.000000000  0.0041223869
Ly   0.0001430993  0.004122387  1.0000000000
```

Abbildung 10: Korrelationsmatrix der einzelnen Regressoren für den Zeitraum 1979 – 2005. Die Ausgabe erfolgt mit dem Statistikprogramm R.

Für die Diagonaleinträge ergibt sich wie erwartet  $r^2 = 1$ . Die stärkste Korrelation ist zwischen Kohlenstoffdioxid und Ozon, welche allerdings sehr schwach ausgeprägt ist. Somit entsteht kein Kollinearitätsproblem.

**Das Theil-Sen-Verfahren** ist eine Trendstärkeschätzung nach (Sen, 1968). Gegenüber der bivariaten Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate-Schätzer hat sie den Vorteil robust gegenüber Ausreißern zu sein. Bei diesem Verfahren werden alle Datenpunkte miteinander verbunden und deren Steigungen (slope) bestimmt.

$$\text{slope} = \frac{y_j - y_i}{x_j - x_i} \quad (19)$$

Der Median aller Steigungen stellt einen Schätzer für den Anstieg der gesuchten Regressionsgeraden dar. Für eine Stichprobe  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  mit n Messwerten wird der Median folgendermaßen berechnet:

$$\text{med}(x) = \begin{cases} \frac{x^{n+1}}{2} & n \text{ ungerade} \\ \frac{1}{2}(x_{\frac{n}{2}} + x_{\frac{n}{2}+1}) & n \text{ gerade} \end{cases}. \quad (20)$$

Den y-Achsenabschnitt der gesuchten Regressionsgerade (*intercept*) erhält man durch die Formel:

$$\text{intercept} = \text{med}(y) - \text{slope} * \text{med}(x), \quad (21)$$

Der Median der Response-Variablen  $\text{med}(y)$  (abhängige Merkmal bzw. Zielgröße) wird durch  $\text{med}(y)$  in der Formel 21 beschrieben und *slope* ist der geschätzte Anstieg, der mit dem Median der erklären Variablen  $\text{med}(x)$  (unabhängige Merkmal bzw. Einflussgröße) multipliziert wird.

Die Voraussetzungen für die Berechnung der Regressionsgeraden auf Basis des Medians liegen in geordneten, also ansteigenden Datenpaaren  $y_i$  und  $x_i$  und in unabhängigen und identisch verteilten Fehlertermen.

### 3.2.4 Signifikanztests

Eines der Standardwerkzeuge zur Überprüfung der Signifikanz des Einflusses einer Variablen ist der **T-Test**. Die Nullhypothese des T-Tests der linearen Regression besagt, dass es keinen Zusammenhang zwischen der erklärenden Variablen und der abhängigen Variablen gibt. Somit wird überprüft, ob der *slope* gleich Null ist. Nach Formulierung der Nullhypothese wird ein bestimmter Vertrauensbereich festgelegt. Dieser beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass die Nullhypothese verworfen wird, obwohl sie richtig ist. Die maximale Irrtumswahrscheinlichkeit wird in Prozent angegeben und entspricht dem Signifikanzniveau  $\alpha$ . Dabei wird für den sogenannten Fehler 1. Art meist ein Signifikanzniveau von 5 % angenommen. Das bedeutet, dass der Fehler, die Nullhypothese fälschlicherweise abzulehnen, geringer als 5 % sein muss. Mittels einer t-Tabelle erhält man die zu dem Signifikanzniveau gehörenden kritischen Werte. Mit deren Hilfe kann man eine Aussage darüber treffen, ob die Nullhypothese abgelehnt wird und somit der Variablen  $x$  einen signifikanten Einfluss auf  $y$  zugesprochen werden kann. Die t-Statistik, also die Konstruktion des kritischen Bereiches, folgt der t-Verteilung (Abb. 11), welche sich bei großen Stichproben der Standardnormalverteilung annähert (Schild, 2013).

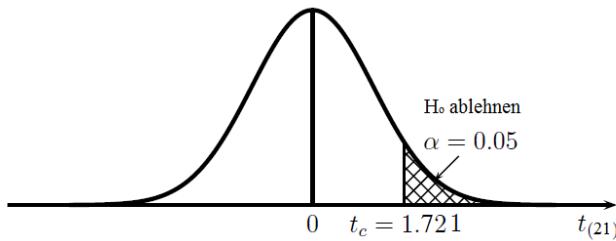


Abbildung 11: Beispielhafte t-Verteilung mit kritischem t-Wert für ein Signifikanzniveau von 5 % und 21 Freiheitsgraden.

Der empirische t-Wert, der im Anschluss mit dem kritischen t-Wert verglichen wird, ergibt sich aus dem Quotienten des geschätzten Regressionskoeffizienten und dessen Standardabweichung. Ist der Betrag größer als der kritische t-Wert, wird die Nullhypothese abgelehnt. Für große Stichproben liegt der kritische Wert zu einem 5 %-igen Signifikanzniveau bei etwa 2. Mit Hilfe des kritischen t-Wertes können auch Konvidenzintervalle angegeben werden, die einen Bereich abdecken, in dem der wahre Regressionskoeffizient mit einer Wahrscheinlichkeit von  $1 - \alpha$  enthalten ist. Das 95 %-ige Konvidenzintervall lässt sich bei einem großen Stichprobenumfang für einen geschätzten Regressionskoeffizienten  $\beta$  näherungsweise wie folgt berechnen:

$$[\beta_i - 2 * \text{Var}(\beta); \beta_i + 2 * \text{Var}(\beta)]. \quad (22)$$

In dem gewählten Beispiel stehen die ermittelten t-Werte unter *t value* (Abb. 9). Sie ergeben sich aus dem Regressionskoeffizienten und dessen Standardfehler ( $0,236212/0,79099 = 2,986$ ). Die Anzahl der Freiheitsgrade beträgt  $22 (n - k)$ , ein nicht-beobachteter Wert in den SSU-Daten ist dabei nicht in die Berechnungen mit eingeflossen (*1 observation deleted due to missingness*), d.h. man hat in diesem Fall 3 erklärende Variablen ( $k$ ) und 25 Werte ( $n$ ) (hier 25 Jahre). Der kritische t-Wert von 1,717 bei einem Signifikanzniveau von 5% lässt sich aus t-Tabellen ablesen. Die Beträge der t-Werte in dem Beispiel liegen alle über 1,717. Demzufolge haben alle gewählten Prädiktoren einen signifikanten Einfluss auf die Temperatur.

Mit dem **F-Test** ist es möglich, den gemeinsamen Einfluss der erklärenden Variablen zu überprüfen. Die Nullhypothese wird so formuliert, dass alle erklärenden Variablen gleich Null sind. Mit dem F-Test wird das Maß für die Güte des Modells ( $R^2$ ) getestet. Wie beim T-Test wird ein Signifikanzniveau  $\alpha$  gewählt und die kritischen Werte aus einer F-Tabelle abgelesen. Der Wert der F-Statistik wird mit den kritischen Werten der F-Verteilung verglichen. Die F-Statistik wird durch den Quotienten zweier Verhältnisse gebildet: Zum einen wird der systematische Anteil, der durch das Regressionsmodell erklärt werden kann, zum Faktor ( $k - 1$ ) ins Verhältnis gesetzt und zum anderen der zufällige Anteil, deren Varianz nicht durch das Modell erklärt werden kann, zum Faktor ( $n - k$ ). Aufgrund dessen, dass auch das  $R^2$  mit dem zufälligen und dem erklärenden Anteil beschrieben wird, kann man die F-Statistik auch als Funktion von  $R^2$  formulieren:

$$\text{F-Statistik} = \frac{R^2/(k-1)}{(1-R^2)/(n-k)}. \quad (23)$$

Durch Hinzunahme von zusätzlichen Regressoren kann die Fehlerquadratsumme nur sinken, weil genau die Fehlerquadratsumme bei der Methode der Kleinsten-Quadrate-Schätzung minimiert wird. Durch zusätzliche Regressoren kann das Modell also nie schlechter werden. Es geht vielmehr darum, ob das Modell signifikant besser wird.

Das Statistikprogramm R liefert auch den Test dafür, dass  $R^2$  gleich Null entsprechen würde (Nullhypothese). Im Beispiel (Abb. 9) wird ein F-Wert von 22,66 angegeben, welcher den gemeinsamen Einfluss des zeitlichen Verlaufs von  $O_3$ ,  $CO_2$  und Lyman- $\alpha$  auf die Temperatur beschreibt. Der kritische Wert, welcher aus der Tabelle der F-Verteilung für eine Irrtumswahrscheinlichkeit von 5% für den spezifischen Fall von 22 Freiheitsgraden und 3 Koeffizienten entnommen wird, entspricht 3,05. Damit liegt der empirische F-Wert deutlich über dem kritischen F-Wert und die Nullhypothese kann abgelehnt werden.

Unterliegen die Daten einer Autokorrelation, sind OLS-Schätzer zwar unverzerrt und konsistent, d.h. die Autokorrelation der Störterme beeinflussen nicht die Erwartungstreue der OLS-Schätzer für die Koeffizienten  $\beta$ , dennoch sind sie nicht mehr effizient (*Schild*,

2013). Autokorrelation bedeutet, dass eine Korrelation  $\rho$  innerhalb einer Datenreihe besteht. Dabei kann, wie bei einer Autokorrelation 1. Ordnung, eine Korrelation zwischen aufeinanderfolgenden Werten bestehen oder aber auch zeitlich versetzt auftreten, wie bei einer saisonalen Autokorrelation. Sie kann beispielsweise mit der Durbin-Watson-Statistik getestet werden, ist aber auch häufig schon im Residuenplot erkennbar. Folgt auf eine positive/negative Abweichung gegenüber der Residuengeraden ebenfalls eine positive/negative Abweichung, ist dies ein Hinweis auf Autokorrelation. Nach einer statistischen Störung (Abweichung von der Residuengeraden), wirkt sich die Störung auch auf die folgenden Werte aus. Durch eine sogenannte Stationaritätsannahme ( $-1 < \rho < 1$ ) klingt diese Störung mit der Zeit ab. Infolge einer Autokorrelation sind die Standardfehler der Koeffizienten verzerrt und die t- und F-Statistiken ungültig. Meist werden in diesem Fall die Standardfehler der Koeffizienten unterschätzt und man erhält außerdem ein sehr großes Bestimmtheitsmaß. Autokorrelation besteht häufig innerhalb einer Zeitreihe. Die Bereinigung der Zeitreihe von der Autokorrelation verringert die Unsicherheiten, die durch die Autokorrelation hervorgehen.

Der verteilungsfreie **Mann-Kendall-Test** ist ein Test zur Überprüfung der Trends klimatologischer Zeitreihen auf Signifikanz (Hamed und Rao, 1998). Nach Schönwiese und Janoschitz (2008) ist ein Trend umso signifikanter, je geringer die überlagerten Variationen im Vergleich zum Trend sind. Dieser klassische Trendtest ist rang-basiert und bringt den Vorteil, auch nicht-lineare Trends detektieren zu können. Eine Voraussetzung für den Mann-Kendall-Test sind unkorrelierte Daten. Damit ist die Korrelation einer Zeitreihe mit sich selbst gemeint (Autokorrelation). Unter anderem führt neben Trägheit in der Anpassung, fehlende Variablen, Datentransformationen und Messfehler, Persistenz häufig zu autokorrelierten Residuen. Die Persistenz beschreibt eine Erhaltungsneigung der Werte. Die Pre-Whitening-Methode ist eine Möglichkeit, die Autokorrelation erster Ordnung in dem Datensatz zu berücksichtigen und von der Zeitreihe zu eliminieren. In von Storch (1995) wird darauf hingewiesen, dass diese Methode nur auf Korrelationen erster Ordnung angewendet werden sollte und bei Korrelationen höherer Ordnung ineffizient ist. In diesem Fall wird die Null-Hypothese des Mann-Kendall-Tests vielmehr abgelehnt, da dann eine Überschätzung der Trendsignifikanz stattfindet. Die Nullhypothese des Trendtests bezieht sich darauf, dass kein Trend in der Zeitreihe vorliegt und die Daten unabhängig und gleichverteilt sind. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Nullhypothese angenommen wird, steigt mit zunehmenden p-Wert. Ist der p-Wert des Signifikanztest kleiner als 0,05, kann die Nullhypothese zurückgewiesen werden und es liegt ein starker signifikanter Trend vor. Bei Werten kleiner als 0,2 wird häufig auch von einer Tendenz gesprochen (Huxol, 2007). Die Trend-Free-Pre-Whitening-Methode ist ein erweitertes Verfahren der Trendanalyse von Yue et al. (2002) aufbauend auf die Pre-Whitening-Methode. Das Verfahren umfasst im Wesentlichen 7 Schritte (Danneberg, 2012): Zunächst wird der Anstieg nach der Metho-

de der kleinsten Quadrate oder nach dem Theil-Sen-Verfahren abgeschätzt (1). Nach Yue *et al.* (2002) ist ein Fortsetzen der Trendanalyse bei einer Steigung nahe Null nicht erforderlich (2). Nach Abschätzung des Anstiegs der Trendgeraden, wird im folgenden Schritt, wenn der Trend von Null verschieden ist, dieser von der originalen Zeitreihe subtrahiert. Die Zeitreihe wird somit vom Trend bereinigt (3). Der nächste Schritt beschreibt das Pre-Whitening-Verfahren, bei dem der zuvor ermittelte Autokorrelationskoeffizient ersten Grades (4) in der trend-freien Zeitreihe durch Subtraktion eliminiert wird (5). Diese Trendanalyse wird nur durchgeführt, wenn der Autokorrelationskoeffizient Werte  $> 0,1$  oder  $< -0,5$  annimmt (*von Storch*, 1995), im anderen Fall geht man von einer unkorrelierten Datenreihe aus. Im letzten Schritt wird schließlich der Trend aus dem ersten Schritt der autokorriert-freien Reihe wieder additiv hinzugefügt (6) und es kann nochmals ein Signifikanztest nach Mann-Kendall durchgeführt werden (7). Das Trend-Free-Pre-Whitening-Verfahren ist eine allgemeine Methode zur Überprüfung der Trends auf Signifikanz unter Berücksichtigung der Autokorrelation ersten Grades. Im Falle einer nur schwachen Autokorrelation ( $\rho_1 < 0,5$ ) kann auf das Pre-Whitening verzichtet werden. Dies gilt für die Trendbestimmung der Temperatur, die in den folgenden Kapiteln vorgestellt werden. Die folgende Auflistung bietet eine Zusammenfassung der einzelnen Schritte der Trend-Pre-Whitening-Methode:

1. Berechnung des Anstiegs
2. Ergebnisüberprüfung: Anstieg  $\neq 0$ ?
3. Wenn ja, Eliminierung des Trends  

$$X_{t_{neu}} = X_t - \text{slope} * t \quad (t = \text{Zeitindex})$$
4. Berechnung des Autokorrelationskoeffizienten  $\rho_1$  1. Grades
5. Prewhitening, wenn  $\rho_1 < -0,5$  oder  $\rho_1 > 0,5$   

$$Y_t = X_t - r_1 X_{t_1}$$
6. Trend aus Schritt 1 wieder addieren
7. Berechnung nach Mann-Kendall und des Anstiegs

## 4 Beobachtungen und Modellierung der thermischen Struktur

Für die Trendanalyse ist es wichtig, Kenntnisse über die thermische Struktur in der zu untersuchenden Region und dem Zeitraum zu gewinnen. Das folgende Kapitel bietet einen Vergleich der thermischen Strukturen der Modelle EMAC und LIMA mit sogenannten Referenzdatensätzen, wie der Reanalyse MERRA, den SSU-Satellitendaten, Lidarbeobachtungen von Kühlungsborn und Messdaten fallender Kugeln in 69°N. Somit dienen die folgenden Abschnitte ebenfalls zur Einordnung der Modelle hinsichtlich deren Fähigkeit, die thermischen Höhenprofile zu reproduzieren.

### 4.1 Höhenprofile

In Abbildung 12 sind die mittleren Höhenprofile der beiden Modelle für die Winter- (DJF) und Sommersaison (JJA) gemittelt über die Breitenbänder 45°N–65°N und 65°N–85°N abgebildet. Sie zeigen die typische thermische Struktur der Erdatmosphäre bis in die mittlere Mesosphäre (EMAC) bzw. bis in die untere Thermosphäre (LIMA).

In den Höhenprofilen (Abb. 12) sieht man in der Troposphäre, der untersten Atmosphärenschicht, einen negativen Temperaturgradienten, welcher sich im Bereich der Tropopause bei etwa 11 km umkehrt und bis etwa 50 km Höhe positiv ist. Grund für den positiven Temperaturgradienten ist die Absorption der Solarstrahlung durch das stratosphärische Ozon, wodurch eine Erwärmung in der Stratosphäre stattfindet. Zwischen etwa 50 km und 80 km Höhe befindet sich die Mesosphäre, die unterhalb durch die Stratopause und oberhalb durch die Mesopause begrenzt wird. Die Abbildungen 12 a und 12 b weisen Unterschiede in den Stratopausenhöhen der beiden Modelle auf. Für die Darstellung wurde nur ein Bezug zum Sommerprofil des LIMA-Modells (rot gestricheltes Profil) hergestellt. Gleches gilt für die Mesopause, welche im Winter etwa 10 km bis 20 km höher gelegen ist (nicht beschriftet). Die Mesopause ist im Nordsommer der kälteste Punkt in der Atmosphäre, wobei Temperaturen von 150 K und kälter erreicht werden. In dem Bereich vom Erdboden bis zur Stratopause ist eine relativ gute Übereinstimmung der beiden Modelle für das Sommer- und das Winterprofil erkennbar. Erst in den mesosphärischen Atmosphärenschichten, wo sich unter anderem auch ein stärkerer Temperaturgradient in den Sommermonaten gegenüber dem Nordwinter ergibt, laufen die Temperaturprofile (Sommer und Winter) der jeweiligen Modellläufe auseinander. Ebenfalls erhöhen sich auch dort die Standardfehler in beiden Modellen. Während die Differenz für das Breitenband 45°N bis 65°N in der Wintersaison noch vergleichsweise klein ist, ergeben sich für die Sommersaison größere Abweichungen. In beiden Fällen werden vom Modell EMAC geringere Temperaturen reproduziert. Der stärkere Temperaturgradient kann durch die Meridionalzirkulation in der Stratosphäre und Mesosphäre erklärt werden. Die mesosphärische residuale Zirkulation

beschreibt eine Zirkulation vom Sommer- zum Winterpol, wobei ein Aufwärtstransport von Luftmassen im Bereich des Sommerpols und ein Abwärtstransport im Bereich des Winterpols bewirkt wird. Aufgrund dessen erfolgt eine stärkere adiabatische Abkühlung und ein steilerer Temperaturgradient im Sommer. Die Stratosphäre und die Mesosphäre bilden zusammen die mittlere Atmosphäre. Darüber befinden sich nur noch die sehr dichte-arme Thermosphäre und die Exosphäre.

Eine ähnliche Struktur zeigt sich für die polaren Breiten ( $65^{\circ}\text{N} - 85^{\circ}\text{N}$ ) in EMAC und LIMA. In EMAC sieht man für das Winterprofil in der Stratosphäre und Mesosphäre größere Standardfehler, die im Bereich der Stratopause maximal sind. Des Weiteren zeigt sich in der Stratosphäre für diese Saison ein flacherer Temperaturgradient gegenüber den mittleren Breiten. In LIMA ist auffällig, dass sich im Mittel für die Sommer-Mesopause verglichen mit den mittleren Breiten kältere Temperaturen ergeben.

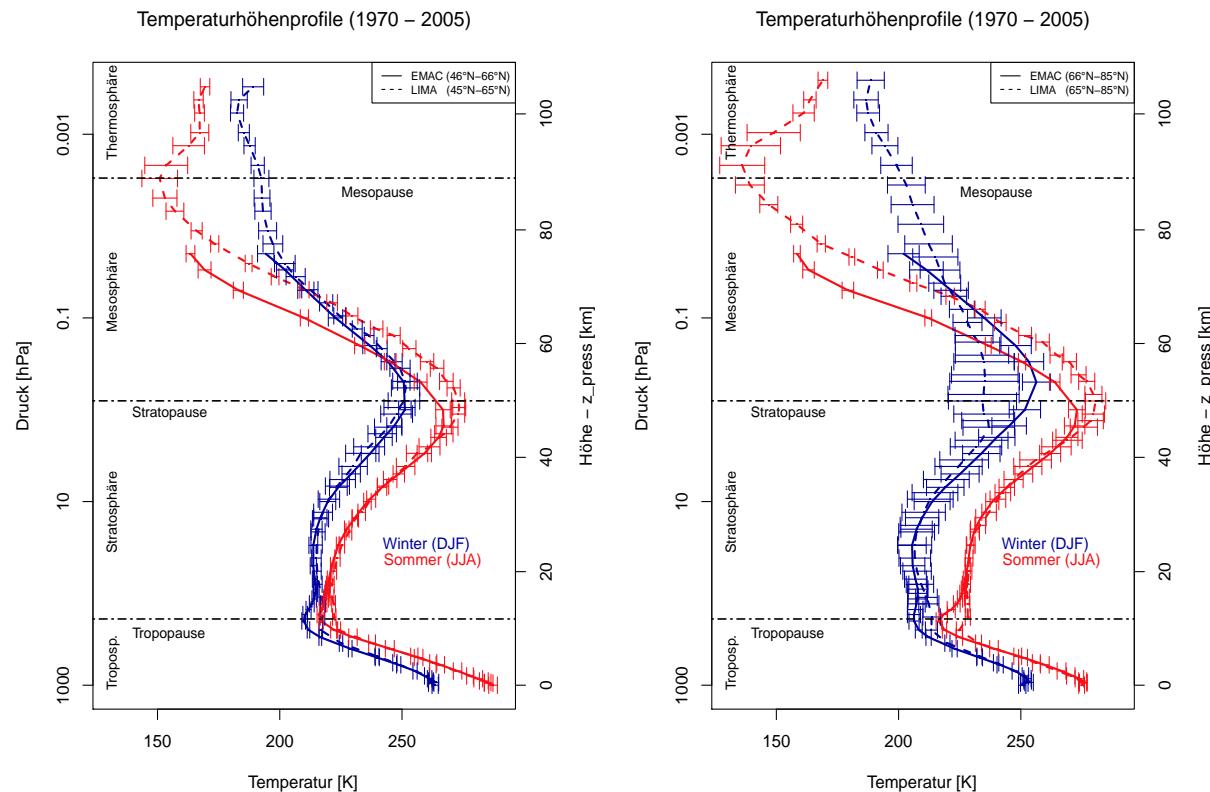


Abbildung 12: Mittlere saisonale Temperaturprofile gemittelt über die Breitenbänder  $45^{\circ}\text{N} - 65^{\circ}\text{N}$  (links) und  $65^{\circ}\text{N} - 85^{\circ}\text{N}$  (rechts). Der Bereich der Temperaturgradientumkehr (Tropo-, Strato- und Mesopause) bezieht sich beispielhaft auf das Sommerprofil des LIMA-Modells (horizontale Linien). Die Fehlerbalken sind die Standardabweichungen der saisonalen Mittlung z.B. über die Monate Juni, Juli und August (JJA) für die Jahre 1970 – 2005.

## 4.2 Höhen- und Breitenschnitt

Um eine Aussage über die Güte der beiden Modelle EMAC und LIMA machen zu können, erfolgt ein Vergleich der Klimatologien der Modelle mit Reanalysedaten (MERRA). Die Klimatologien in den Abbildungen (13 a – d) stimmen mit dem MERRA-Datensatz (Abb. 13 e und f) für den Juli und für den Januar qualitativ gut überein. Im Juli sieht man in den bodennahen Luftsichten in den Sommer tropen Temperaturen von mehr als 290 K und ein Stratopausen-Temperaturmaximum in den polaren Breiten bei etwa 50 km Höhe, das aus solarer Absorption entsteht. Ebenfalls allen Datensätzen gemeinsam ist das Temperaturminimum im Südwinter bei einer Höhe von etwa 20 km und das lokale Temperaturminimum von etwa 200 K im Bereich der tropischen Tropopause. In der Klimatologie von LIMA sieht man, dass sich die niedrigsten Temperaturen im Bereich des Sommerpols in der Mesopausenhöhe befinden, dabei werden weniger als 130 K vom Modell simuliert. Beide Modelle zeigen aber auch Abweichungen gegenüber der MERRA-Klimatologie. Um eine bessere Vergleichbarkeit zu bieten, wird der MERRA-Datensatz über den Juli und Januar gemittelt und jeweils von den entsprechenden Modelldaten EMAC und LIMA subtrahiert (Abb. 14). Die größten Unterschiede der Modelle gegenüber der Reanalyse sind in der unteren Mesosphäre zu finden. Die Abweichungen zwischen EMAC und MERRA (EMAC minus MERRA) im Juli vergrößern sich ab etwa 60 km Höhe ( $-10\text{ K}$ ) mit zunehmender Höhe bis zu mehr als  $-35\text{ K}$ . Diese Zunahme ist nicht konstant, sondern in den mittleren und niedrigen Breiten am größten und im Polbereich am geringsten. Ebenfalls sieht man eine größere Differenz von bis zu  $10\text{ K}$  im Bereich des Winterpols zwischen 45 km und 55 km Höhe (Stratopause). Eine ähnliche klimatologische Konstellation ergibt sich für den Südsommer bzw. Nordwinter im Januar. Eine geringere Abweichung von  $5\text{ K}$  der EMAC-Klimatologie gegenüber MERRA zeigt sich im Winterpolbereich, die auch eine geringere vertikale Ausdehnung von 45 km bis 50 km aufweist. LIMA ist in der unteren Mesosphäre jeweils im Sommer in den polaren Breiten  $20\text{ K}$  bis  $25\text{ K}$  wärmer und im Winter  $15\text{ K}$  bis  $30\text{ K}$  kälter als MERRA. In der Klimatologie zeigt sich außerdem für den Monat Juli eine Differenz von bis zu  $-40\text{ K}$  in den südlichen polaren Breiten zwischen 40 km und 60 km Höhe. In der Troposphäre und Stratosphäre weichen die Temperaturen nur zwischen  $-5\text{ K}$  und  $5\text{ K}$  vom MERRA-Datensatz ab. Das ist gerade der „Nudging“-Bereich der ECMWF-Daten im LIMA-Modell.

Die geringen Temperaturen von weniger als  $170\text{ K}$  am Oberrand der dargestellten EMAC-Klimatologie während der polaren Sommermesosphäre sind in guter Übereinstimmung mit den Beobachtungen von *Murgatroyd* (1969), welche eine Kombination aus In-Situ-Messungen von Raketensonden, fallenden Kugeln und Radiosonden für die unteren Atmosphärenschichten sind. In LIMA und MERRA hingegen liegen die Temperaturen in diesem Höhenbereich zwischen 70 km und 75 km Höhe über  $180\text{ K}$ .

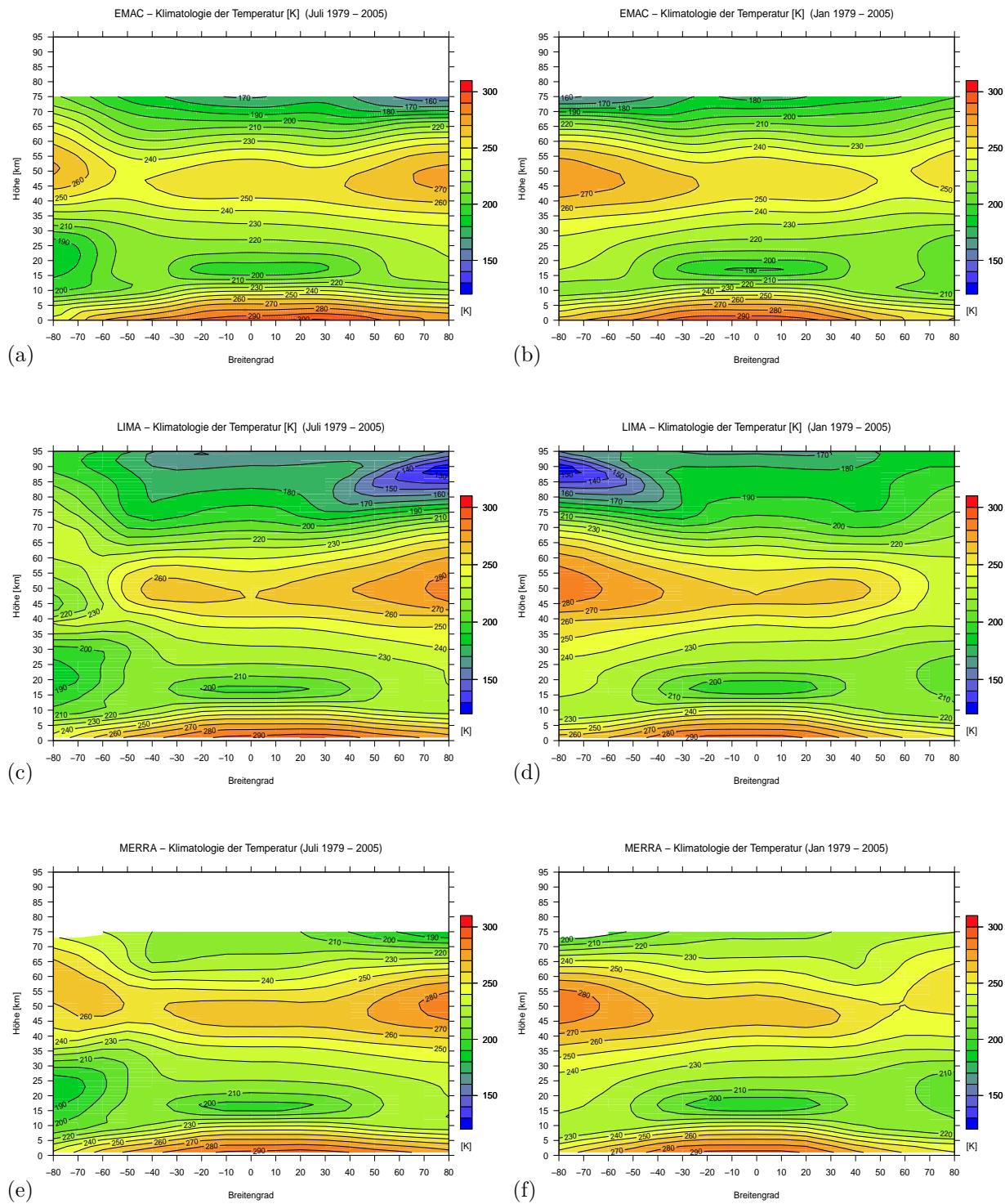


Abbildung 13: Temperatur-Klimatologien der beiden Modelle EMAC (a,b) und LIMA (c,d) und der Reanalyse MERRA (e,f) für Juli (links) und Januar (rechts) auf geometrischer Höhenskala, gemittelt über den gemeinsamen Zeitraum 1979–2005.

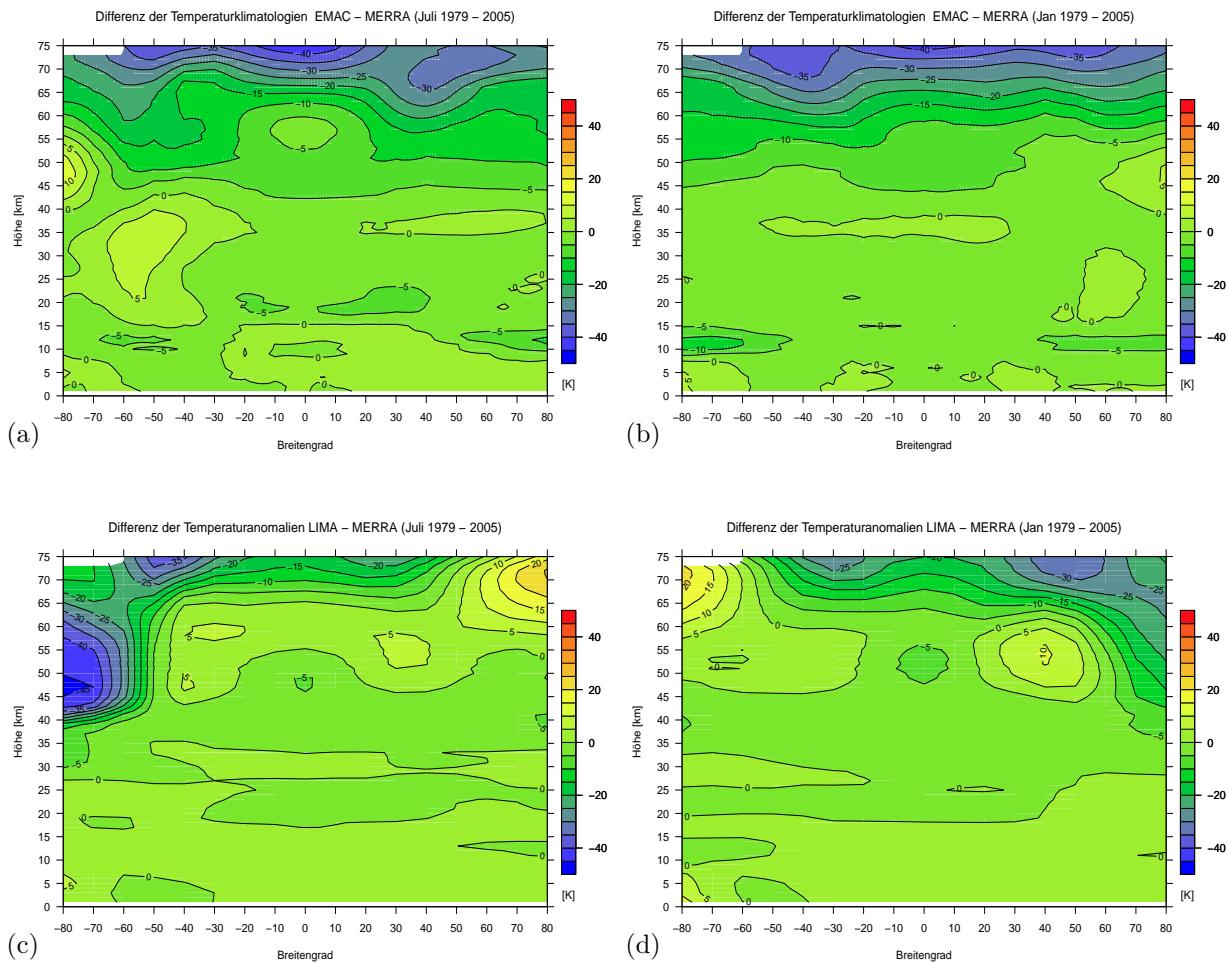


Abbildung 14: Differenzen der Temperatur-Klimatologien zwischen MERRA und den Modellen EMAC (a,b) und LIMA (c,d) für Juli (links) und Januar (rechts) auf geometrischer Höhenskala, dabei wurde über die Jahre 1979–2005 gemittelt.

### 4.3 Jahresgang

Die mittlere Atmosphäre zeichnet sich durch einen starken Jahresgang aus, wie in beiden Modellen und den Vergleichsdatensätzen zu sehen ist (Abb. 15). Die Analyse für EMAC, LIMA und MERRA bezieht sich auf den gemeinsamen Zeitabschnitt 1979–2005 und beschreibt den Breitenabschnitt  $45^{\circ}\text{N} - 65^{\circ}\text{N}$ .

Im Winter ergibt sich eine relativ kalte Stratosphäre, im Sommer eine warme Stratopause und eine kalte Mesopause (LIMA). Die umgekehrte Temperaturschichtung in der Stratosphäre im Vergleich zur Troposphäre und Mesosphäre ist auf die vom Ozon absorbierte UV-Strahlung zurück zu führen. Die absorbierte Strahlung wird größtenteils in Wärme umgewandelt und führt somit in den mittleren Breiten zu einem Temperaturmaximum im Bereich der Sommer-Stratopause. Oberhalb der Stratopause wird infolge der mesosphärischen residualen Zirkulation der Temperaturgradient im Sommer wesentlich steiler (ca.  $-4\text{ K/km}$ ) als im Winter (ca.  $-1\text{ K/km}$ ).

Die Gegenüberstellung der Modelle und der Beobachtungen der Lidar-Messtechniken in Kühlungsborn ( $54^{\circ}\text{N}$ ,  $12^{\circ}\text{O}$ ) zeigen für die untere Stratosphäre eine mögliche Unterschätzung von LIMA und EMAC hinsichtlich der Ausprägung der Sommer- und Wintersaison. Dabei ist zu beachten, dass die Lidar-Daten nur für den Zeitraum 2002 bis 2007 zur Verfügung stehen und keinen direkten Vergleich bieten. In den Lidar-Daten ist eine stärkere Temperaturabnahme mit der Höhe zwischen November und Februar zu sehen. Die Sommermonate sind, wie auch in LIMA, durch einen relativ konstanten Temperaturgradienten bis etwa 25 km Höhe charakterisiert. Eine gute Übereinstimmung mit LIMA zeigt sich ebenfalls in Bezug auf die Stratopausenhöhe, die in fast allen Monaten konstant bei etwa 50 km Höhe liegt. Die Lidar-Beobachtungsdaten zeigen außerdem im Bereich der Winterstratopause eine Erwärmung, die mit plötzlichen Stratosphärenwärmungen (SSW) zu verbinden ist. In EMAC ist die Stratopause etwas unterhalb von 50 km und in MERRA liegt die Stratopause ebenfalls bei etwa 50 km, allerdings nur für die Monate Februar bis September. In den Wintermonaten liegt die Stratopause in MERRA etwas oberhalb von 50 km Höhe. Die Mesopause befindet sich in den Lidar-Daten, ähnlich wie bei LIMA, in den Monaten Mai bis August bei etwa 86 km bzw. 87 km Höhe. Der Bereich der minimalen Temperaturen in LIMA ist etwas geringer ausgedehnt als in den Lidar-Daten. Es werden aber auch in LIMA wie in den Lidar-Messungen Temperaturen unter 150 K erreicht. Der Übergang zu den Wintermonaten vollzieht sich in den Lidar-Messungen rapide. Die Differenz zwischen Januar und Juni/Juli beläuft sich auf mehr als 60 K in 86 km Höhe. Die Mesopause in den Wintermonaten liegt oberhalb von 95 km Höhe und kann hier somit nicht gezeigt werden.

Ein Vergleich der modellierten Jahresgänge mit Messungen, basierend auf fallenden Kugeln bei  $69^{\circ}\text{N}$ , zeigt, dass eine Breitenabhängigkeit vorhanden sein könnte. In der Abbildung 15 e sind höhere Temperaturen für die mittlere Atmosphäre im Sommerhalbjahr zu sehen. Gezeigt sind hier die geglätteten Temperaturprofile von 35 km bis 93 km Höhe als Funktion der Saison (beschrieben im Kapitel 3.1.1). Im Bereich der Sommer-Mesopause bei etwa 88 km Höhe werden Temperaturen von weniger als 130 K erreicht. Ab Mitte Mai nimmt die Temperatur zu den Sommermonaten hin schnell ab und wiederum zum Herbst schnell zu, so dass daraus starke Temperaturgradienten resultieren. Ebenso ergibt sich ein relativ starker vertikaler Temperaturgradient im gesamten Mesosphären-Bereich von der Stratopause zur Mesopause. Die Stratopause weist Temperaturen von mehr als 280 K auf. Im Vergleich zu den anderen Datensätzen befindet sich die Stratopause oberhalb von 50 km. Ebenfalls ist auch die Mesopause mit einer Höhe von etwa 90 km höher in den Sommermonaten als in LIMA und in den Lidar-Daten gelegen.

Abweichungen der Modelle gegenüber MERRA ergeben sich auch im Jahresgang (Abb. 16). Beispielsweise werden die Temperaturen im Bereich vom Frühjahr bis Herbst ab einer Höhe von 70 km vom EMAC-Modell gegenüber MERRA etwa 20 K bis 30 K kälter dargestellt. In den unteren Höhenschichten ist die qualitative und auch quantitative Übereinstimmung

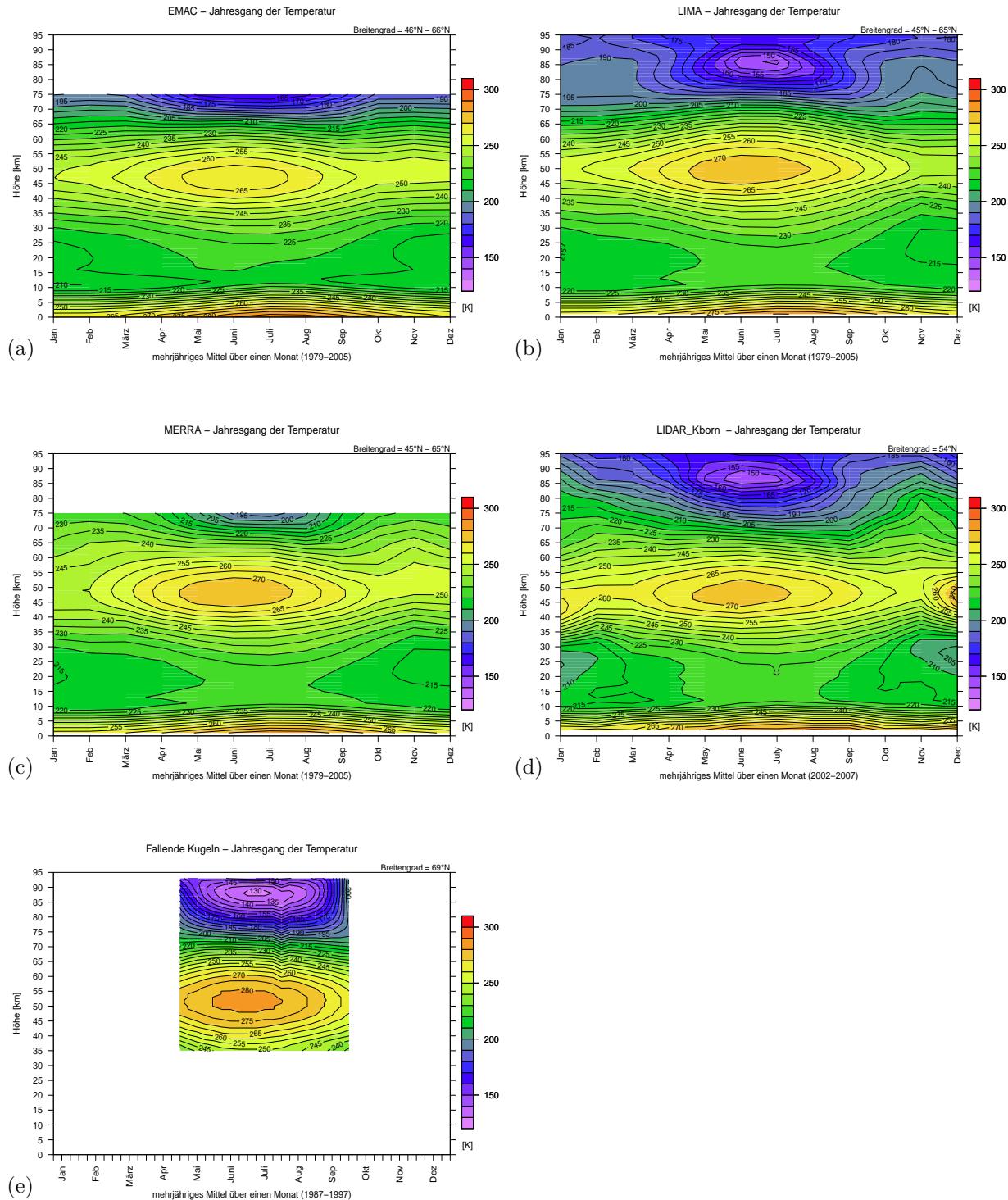


Abbildung 15: Temperatur-Jahresgang der Modelle EMAC (a) und LIMA (b), sowie der Reanalyse MERRA (c) für das Breitenband 45°N–65°N und dem gemeinsamen Zeitabschnitt 1979–2005 auf geometrischen Höhen. Des Weiteren sind die Jahresgänge der Lidardaten von 2002–2007 (d), gemessen in Kühlungsborn (54°N) und der Messungen fallender Kugeln bei etwa 69°N für die Jahre 1987–2011 (e) zu sehen.

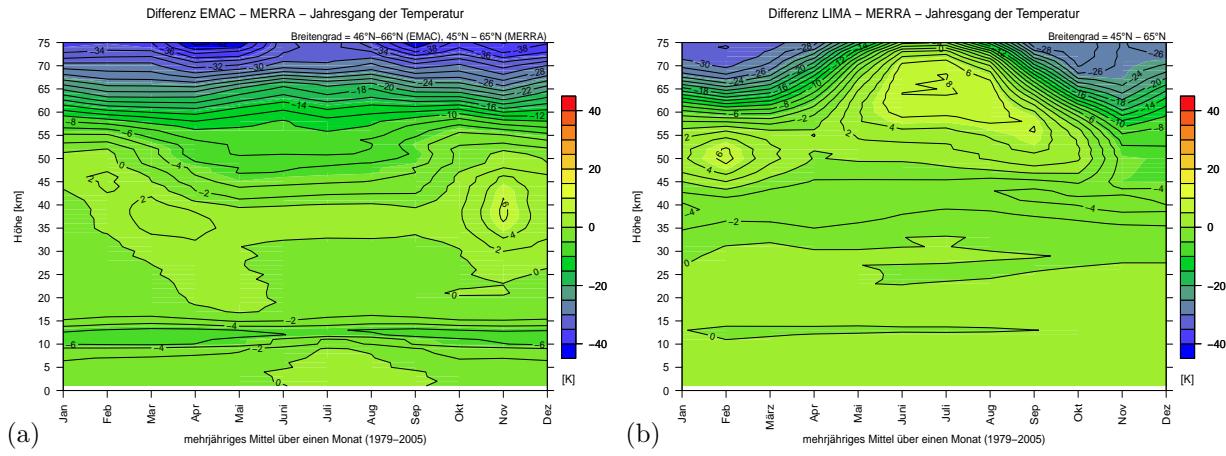


Abbildung 16: Differenzen der Temperatur-Jahresgänge zwischen MERRA und den Modellen EMAC (a) und LIMA (b) auf geometrischen Höhen. Betrachtet wurden die mittleren Breiten und der gemeinsame Zeitabschnitt 1979 – 2005.

sowohl für EMAC als auch für den genutzten Bereich mit ECMWF-Daten in LIMA mit der Reanalyse als gut zu bewerten. Der Differenzenplot LIMA minus MERRA zeigt außerdem, dass es in der Mesosphäre geringere Differenzen im späten Frühjahr und in den Sommermonaten gegenüber den Wintermonaten gibt.

In der oberen Mesosphäre intensiviert sich die Ausprägung des Jahresgangs, wie im LIMA-Modell zu sehen ist. Der Unterschied der sehr kalten Mesopause im Sommer gegenüber der warmen Wintermesopause beläuft sich auf mehr als 50 K.

Die Unterschiede in den einzelnen Modellen und auch in den Beobachtungen bestätigen, dass es insbesondere in der oberen Stratosphäre und in der Mesosphäre noch einige Unsicherheiten gibt und dass die Messungen in sich selbst nicht konsistent sind. Für eine konkrete Aussage über die Güte der beiden Modelle müssten weitere Vergleiche mit Beobachtungsdaten erfolgen. Dies wird allerdings durch die wenigen vorhandenen Beobachtungsdaten erschwert. Die meisten Messungen beziehen sich auf die unteren Atmosphärenschichten oder liegen oftmals nur in kurzen Zeitreihen vor.

## 5 Ergebnisse der Trendanalysen

Die Variabilität des Klimas wird über mehrere Jahre hinweg betrachtet. Die WMO und das IPCC analysieren dabei einen klassischen Referenzzeitraum von mindestens 30 Jahren. Dadurch dass die Beobachtungsdaten nur für einen relativ geringen Zeitraum vorhanden sind, wird unter Umständen im Folgenden eine Analyse auch bei geringfügig weniger Jahren durchgeführt. In diesem Fall wird explizit darauf hingewiesen. Für die Temperaturanalyse stehen neben den Satellitendaten (SSU) und den Reanalysedaten (MERRA) die Datensätze von den Modellen EMAC und LIMA zur Verfügung, welche in Kapitel 3.1.1 beschrieben wurden. Der Fokus liegt auf der Untersuchung von Temperaturänderungen in der mittleren Atmosphäre im LIMA- und EMAC-Modell. Zur Validierung der Trendergebnisse erfolgt außerdem der Vergleich mit den Satelliten- und Reanalysedaten für den Zeitraum von 1979 bis 2005. Der gemeinsame zu analysierende Zeitraum der beiden Modelle umfasst die Jahre 1970 – 2005. Dabei soll der Schwerpunkt in den mittleren Breiten zwischen 45°N und 65°N und im Sommermonat Juli liegen. Im Sommer ist die natürliche Variabilität am geringsten. Außerdem liegen in den nördlichen Breiten unter Sommerkonditionen die längsten Vergleichsmessungen vor. Die Untersuchungen werden mit verschiedenen Regressionsanalysen durchgeführt, wobei die multiple lineare Regression eine gute Hilfe zur Identifizierung verschiedener Einflussfaktoren in der Mesosphäre wie Kohlenstoffdioxid, Ozon und die solare Variabilität (Lyman- $\alpha$ -Linie) bezogen auf den Temperaturverlauf bietet. Weitere Einflussfaktoren wie dynamische Effekte, Vulkaneruptionen und andere werden in dieser Arbeit nur erwähnt und hier nicht ausführlich untersucht. Ziel der Studie ist es, Temperaturtrends in der mittleren Atmosphäre zu detektieren und den Beitrag von CO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> und der dekadischen Sonnenvariabilität am Gesamtrend der Temperaturen zu verifizieren und quantifizieren.

### 5.1 Langzeitvariationen im Temperaturverlauf

Die ERA40-Daten, welche die Reanalyse des ECMWF-Datensatzes bildet und bis zu einer Höhe von etwa 45 km in das Lima-Modell eingehen, unterliegen einer zeitlichen Inhomogenität. Diese Inhomogenität ist mit einer fehlerhaften Satelliten-Bias-Korrektur in den Jahren 1975/76 verbunden (*Gleisner et al.*, 2005), der sich in den Temperaturen bis in die unteren Mesosphärenschichten im Modell durchsetzt. Für die späteren Trendberechnungen werden deshalb die Daten der Jahre 1975/76 im LIMA-Datensatz wegen zu großen Unsicherheiten nicht betrachtet (Abb. 17). Zur Validierung der beiden Modelle EMAC und LIMA werden Beobachtungsdaten herangezogen. Eine der ältesten Dokumentationen sind die SSU-Satellitendaten. Außerdem steht ein weiterer Datensatz des MERRA Reanalyse-Projekts zur Verfügung. Die Satellitendaten entstammen Messungen in bestimmten Kanälen, welche auf diskreten Druckniveaus liegen. Abbildung 17 zeigt Langzeitvariationen im Juli-Temperaturverlauf für SSU-Satellitenmessdaten, die MERRA-Reanalyse und für die

Modelle EMAC und LIMA von der mittleren Stratosphäre bis in die untere Mesosphäre. Die größte mögliche Höhe, die durch das SSU-Infrarot-Radiometer zur Verfügung gestellt werden kann, ist bei  $\sim 0,6$  hPa (Kanal 47x). Das Druckniveau 0,6 hPa ( $\sim 50$ ) liegt damit in einer Höhe, wo LIMA frei laufend ist.

Die Temperaturen sind im zeitlichen Verlauf nicht homogen und können je nach Wahl des betrachteten Zeitabschnittes im Trend variieren. In Abbildung 17 ist besonders in der oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre eine Abnahme der Temperaturen bis Mitte der 90er Jahre und eine Temperaturzunahme ab Mitte der 90er Jahre zu sehen. Für den Vergleich der Trends einzelner Modelle und Beobachtungen ist es deshalb besonders wichtig, gleiche Zeitabschnitte zu wählen.

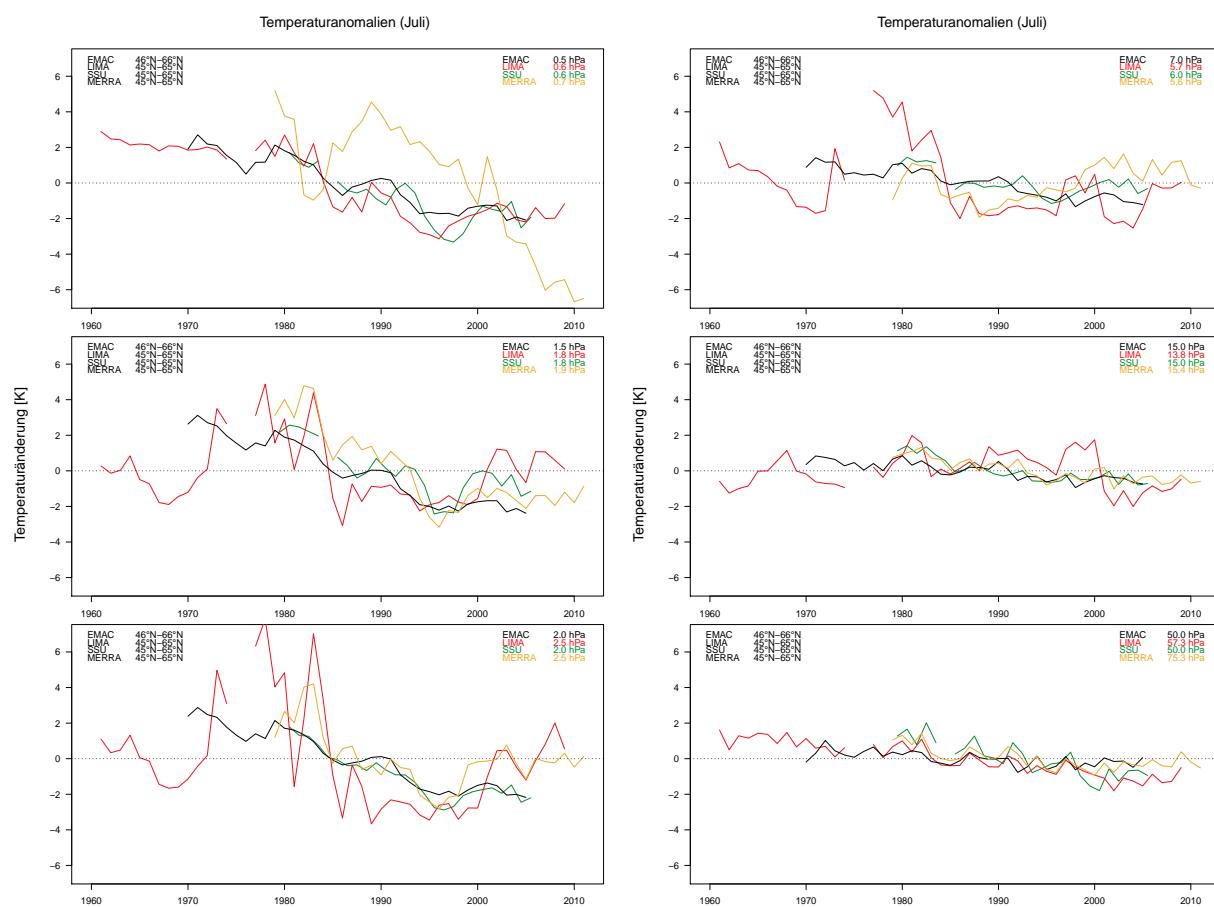


Abbildung 17: Temperaturverlauf im Juli für die Modelle EMAC und LIMA, der Reanalyse MERRA und dem Beobachtungsdatensatz SSU gemittelt über das Breitenband  $45^{\circ}\text{N} - 65^{\circ}\text{N}$ .

## 5.2 Breitenabhängigkeit der Temperaturtrends

Die Abbildung 18 zeigt jährlich gemittelte zonal gemittelte Temperaturtrends verschiedener Datensätze in Abhängigkeit von der geografischen Breite und für bestimmte Höhenlevel zwischen 0,5 hPa und 50 hPa. Die Trends wurden nach der Methode der kleinsten Quadrate ermittelt (Kapitel 3.2.3).

Zur besseren Gegenüberstellung wurden diese für den gemeinsamen Zeitabschnitt 1979 – 2005 berechnet. Man sieht eine gewisse Breitenabhängigkeit der Temperaturtrends, wobei große Unterschiede zwischen den einzelnen Datensätzen vorhanden sind. Während sich in der unteren Stratosphäre noch eine relativ befriedigende Übereinstimmung des MERRA-Datensatzes gegenüber den anderen Trends ergibt, sind die Abweichungen in der unteren

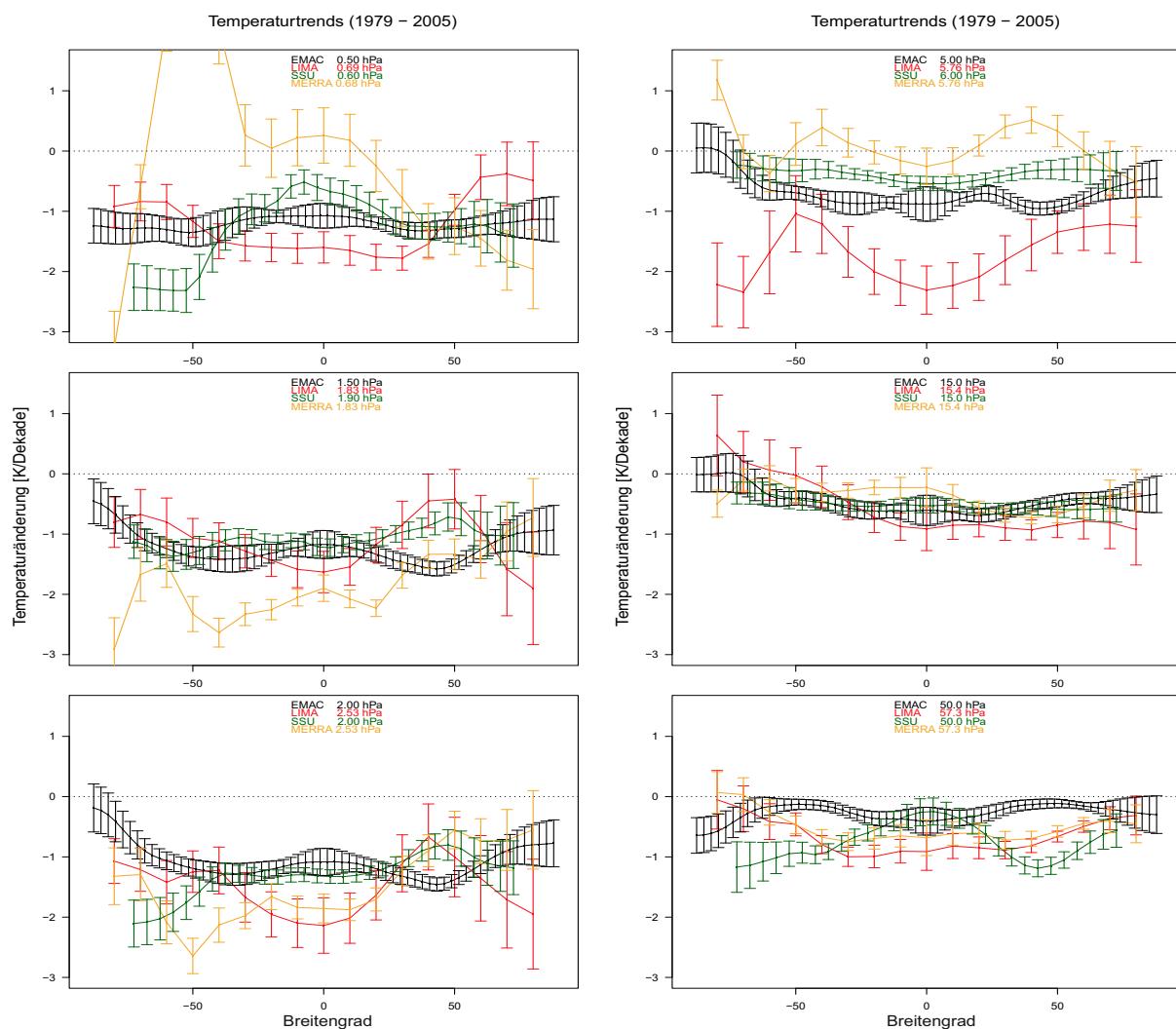


Abbildung 18: Zonal gemittelte jährlich gemittelte Temperaturtrends von 85°S bis 85°N der beiden Modelle EMAC und LIMA, der Reanalyse MERRA und der SSU-Satellitendaten für verschiedene Höhenlevel zwischen ~0,5 hPa und 50 hPa. Betrachtet wird der gemeinsame Zeitabschnitt 1979 – 2005.

Mesosphäre auf der gesamten Südhalbkugel sehr groß. Nach dem Mann-Kendall-Trendtest auf 5 %-igem Signifikanzniveau ist dieser Bereich aber statistisch nicht signifikant. Aufgrund von mangelnder Datenbasis auf der Südhalbkugel in den oberen Atmosphärenschichten sind die Trends mit großen Unsicherheiten behaftet. In der unteren Mesosphäre weisen alle vier Datensätze in den mittleren und nördlichen Breiten einen ähnlichen Trend von etwa  $-1\text{ K/Dekade}$  auf. In der unteren bis mittleren Stratosphäre existiert im Bereich der Tropen eine gute Übereinstimmung des EMAC-Modells mit den SSU-Daten. Des Weiteren fällt auf, dass sich die Fehlerangaben der Regressionskoeffizienten in den SSU-Beobachtungen zu den Polen hin vergrößern. Ebenfalls ergeben sich auch in EMAC und teilweise in LIMA vergleichsweise größere Fehlerbalken im Bereich der Pole. EMAC weist außerdem in den Tropen eine größere Variabilität der Koeffizienten auf. Am geringsten sind diese im EMAC-Modell in den mittleren Breiten. Im Allgemeinen sind die Trends im gesamten betrachteten Höhenbereich von den Tropen bis hin zu den Polen negativ. Eine Ausnahme bildet hier nur die Reanalyse bei etwa 5,76 hPa, EMAC bei 5 hPa und LIMA bei etwa 15,4 hPa. In MERRA sind die positiven Trends allerdings im Sinne des 5 %-igen Signifikanzniveaus als statistisch nicht signifikant anzusehen. Ebenfalls ist der positive Trend in LIMA und in EMAC statistisch nicht signifikant. Alle Temperaturtrends, ausgenommen von den positiven Trends, sind in den beiden Modellen, in der Reanalyse und in den SSU-Satellitendaten signifikant. Die folgenden Trendanalysen beziehen sich auf die mittleren und gegebenenfalls auf die polaren Breiten der Nordhalbkugel.

### 5.3 Saisonale Temperaturtrends

Die Höhenprofile der dekadischen Temperaturänderung (Trend/Dekade) in Abbildung 19 zeigen, dass MERRA, LIMA und EMAC die stärksten Temperaturtrends in der mittleren und oberen Stratosphäre reproduzieren bzw. simulieren, wobei sich hier saisonale Unterschiede in der Trendbetrachtung ergeben. Die Berechnung der linearen Temperaturtrends für den Bereich von etwa  $45^\circ\text{N}$  bis  $65^\circ\text{N}$  (zonale Mittel) erfolgt mit der Methode der kleinsten Quadrate (Kapitel 3.2.3) und bezieht sich auf den Zeitraum 1970–2005, so dass die Datenreihen jeweils 27 Werte umfassen. Betrachtet wird dabei ein Höhenbereich von 0 km bis etwa 105 km (LIMA). Für EMAC und MERRA ist der maximale Höhenbereich auf etwa 75 km begrenzt.

In den beiden Modellen und im Reanalysedatensatz sind die Trends in der Troposphäre signifikant positiv. MERRA weist einen positiven Trend fast aller Jahreszeiten bei etwa 40 km Höhe auf, die jedoch statistisch nicht signifikant sind. Allen drei Datensätzen gemeinsam ist ein signifikanter, maximaler, negativer Trend im Bereich der Stratopause im Sommer, wobei in LIMA ein lokales (kein absolutes) Minimum erreicht wird. EMAC und LIMA sind im Sinne der Fehlerangaben in der Stärke des Trends in diesem Höhenbereich als gleich anzusehen. Die Differenz der beiden Modelle EMAC und LIMA des maximalen

negativen Trends beläuft sich auf etwa  $0,18 \text{ K/Dekade}$  (EMAC:  $-1,64 \pm 0,13 \text{ K/Dekade}$ ; LIMA:  $-1,46 \pm 0,26 \text{ K/Dekade}$ ). Geht man von dem absoluten Trendmaximum in LIMA (Sommer:  $-2,21 \pm 0,71 \text{ K/Dekade}$ ) aus, ergibt sich wiederum eine größere Differenz gegenüber EMAC, die dennoch innerhalb des Standardfehlers des Regressionskoeffizienten von LIMA liegt. Die Reanalyse zeigt in diesem Bereich Werte bis zu  $-3,08 \text{ K/Dekade}$ . Außer-

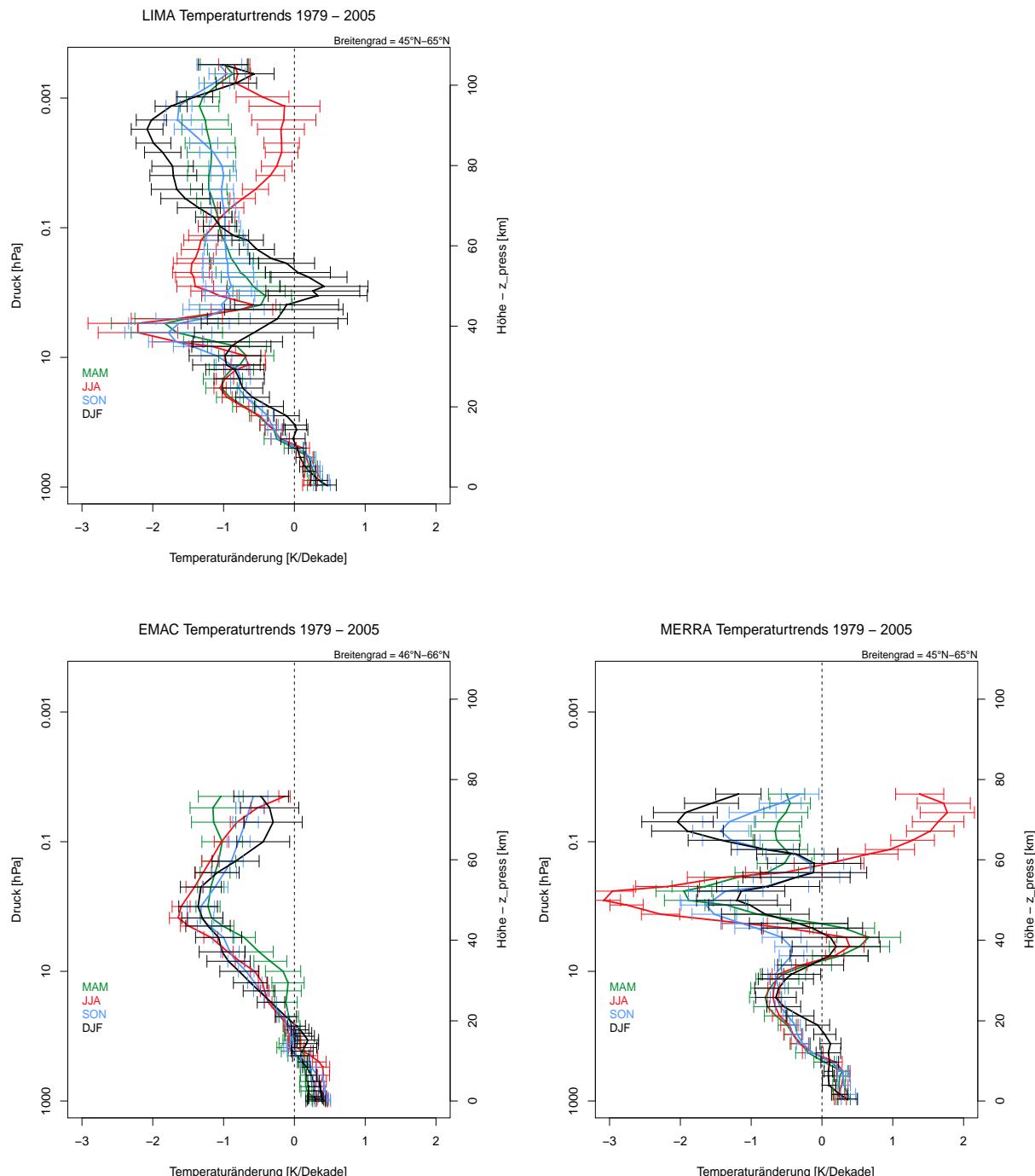


Abbildung 19: Saisonale Temperaturtrends der Modelle EMAC und LIMA und der Reanalyse MERRA für den gemeinsamen Zeitraum 1979 – 2005, berechnet für das Breitenband  $45^{\circ}\text{N} – 65^{\circ}\text{N}$ .

dem gibt es eine gute Übereinstimmung der beiden Simulationen im Sommer in der mittleren und oberen Mesosphäre. Die Trends sind in beiden Modellen hierfür als statistisch signifikant anzusehen. Für EMAC ergibt sich in der unteren und mittleren Mesosphäre ein durchschnittlicher Trend von  $-1,0\text{ K/Dekade}$ , nur geringfügig davon abweichend zeigt sich für LIMA ein durchschnittlicher Trend von  $-1,2\text{ K/Dekade}$ .

Die saisonalen vertikalen Temperaturtrendprofile in EMAC weisen alle eine ähnliche Struktur auf, wobei sich in LIMA der Trend im Winter deutlich von den anderen saisonalen Trends unterscheidet. Bis zu einer Höhe von etwa 60 km ist dieser im Winter als statistisch nicht signifikant anzusehen. Während die saisonalen Abweichungen in der Troposphäre und unteren Stratosphäre relativ gering sind, ergeben sich größere Differenzen in den darüber liegenden Atmosphärenschichten. Eine saisonal ähnliche Struktur ist in MERRA bis zu einer Höhe von etwa 60 km Höhe zu sehen. In den Höhen darüber zeigt insbesondere der MERRA-Trend im Sommer einen stark abweichenden Verlauf gegenüber den anderen saisonalen Verläufen, wobei sich der Temperaturtrend sogar umdreht und positiv wird. Im Vergleich dazu ist im Frühjahr, Sommer und im Herbst eine stärkere Abkühlung zu sehen. Ebenfalls vergrößert sich in EMAC ab etwa 60 km Höhe die Variation in den saisonalen Trendstärken, LIMA weist eine ähnliche Abweichung ab der gleichen Höhe für den Frühling, Sommer und Herbst auf. Dabei ist festzustellen, dass der Winter einer größeren natürlichen Variabilität unterliegt, was sich auch in den größeren Fehlerbalken widerspiegelt. Generell nehmen die saisonalen Variationen und auch die Fehlerbalken in allen abgebildeten Datensätzen mit der Höhe zu.

Die Stratopause hat die stärksten Temperaturänderungen in dem betrachteten Zeitraum zwischen 1979 und 2005, jedoch gibt es hierbei keine Übereinstimmung über die Trendstärke von MERRA und EMAC bzw. MERRA und LIMA. Außerdem variieren die Höhen in allen Datensätzen der absoluten maximalen Temperaturtrends. In LIMA zeigt sich der stärkste absolute negative Trend im Vergleich zu EMAC ( $1,5\text{ hPa}$ ) etwas tiefer bei einer Höhe von etwa  $3\text{ hPa}$  bis  $4\text{ hPa}$ . MERRA hingegen liegt sogar bei  $0,8\text{ hPa}$  und damit oberhalb der Simulationen der absoluten maximalen Temperaturtrends der beiden Modelle. LIMA zeigt oberhalb des absoluten Trendmaximums bei etwa 45 km Höhe eine deutliche Verringerung des Temperaturtrends. Dies ist ein Bereich, in dem alle saisonalen Trends in LIMA statistisch nicht signifikant sind. Hier wird der Übergang von den genutzten ECMWF-Daten und dem frei laufenden Modell in allen vier saisonalen Verläufen sichtbar.

Die gruppierten Balkendiagramme (Abb. 20) liefern eine Gegenüberstellung von Temperaturtrends für verschiedene Höhenlevel und für jeden einzelnen Monat des Jahres. Für den gemeinsamen zu analysierenden Zeitraum der Modelle EMAC und LIMA, der Reanalyse MERRA und der SSU-Satellitendaten stehen wieder die Jahre 1979 bis 2005 zur Verfügung. Die Trends nehmen in allen Datensätzen mit der Höhe von etwa  $50\text{ hPa}$  (21 km) bis etwa  $0,5\text{ hPa}$  (53 km) zu und zeigen untereinander eine relativ gute Übereinstimmung,

wobei die Modelle eine bessere Analogie zum SSU-Datensatz liefern als zu MERRA. Die größten Diskrepanzen ergeben sich bei etwa 6 hPa (40 km), wo MERRA im Gegensatz zu den anderen Temperaturtrends von April bis August eine positive Temperaturentwicklung aufweist. Bei etwa 1,8 hPa (44 km) und 0,6 hPa (52 km) werden die Trends in den Modellen gegenüber MERRA zu gering reproduziert. In Hinblick auf den SSU-Datensatz sind diese jedoch konsistent. In fast allen Datensätzen sind die Wintermonate durch eine große natürliche Variabilität gekennzeichnet und deren Trend ist auch nicht signifikant. Aufgrund dessen, dass die Trends in den Modellen und den Beobachtungen einheitlich in der Mesosphäre größer als in der Stratosphäre sind, wird hier auch ein leichter zu detektierendes, stärkeres Klimasignal erwartet. Klimatologische Änderungen sollen somit besser erkannt und untersucht werden. Die Variabilität in den unteren Atmosphärenschichten im Winterhalbjahr erschweren hingegen die Analysen. Das spiegelt sich auch in der Abbildung 20 wider. In den Wintermonaten gibt es starke Unterschiede in den Trends, welche in den einzelnen Datensätzen noch nicht einmal mit gleichen Vorzeichen versehen sind. Dabei wird die starke natürliche Variabilität durch dynamische Kopplungsprozesse hervorgerufen. Diese sind mit planetaren Wellen und Schwerewellen verbunden, wobei durch Impuls- und Energieübertragung die thermische Struktur der Atmosphäre verändert wird. Bedingt durch die negative Strahlungsbilanz im Polargebiet bildet sich ein abgeschlossener kalter Bereich (Polarwirbel) aus, dessen Rand durch Westwinde geprägt sind. Im Bereich der Stratosphäre brechen die Wellen aufgrund abnehmender Dichte mit der Höhe und größer werdender Amplitude. Infolge von Wechselwirkungen mit dem zonalen Grundstrom kann es in den Wintermonaten zur Umkehr der vorherrschenden West- in Ostwinde kommen. Dieser Effekt kann in einen Zusammenbruch des Polarwirbels und zu einer plötzlichen Erwärmung in der Stratosphäre führen (SSW - sudden stratospheric warming). Die Auswirkungen dieser starken Variabilität sind auch in Abbildung 15 (e) in den Lidar-Daten zwischen 40 km und 55 km Höhe zu sehen.

Die Studie lässt darauf schließen, dass der Reanalysedatensatz speziell im Bereich der Mesosphäre mit Unsicherheiten behaftet sein könnte. Verglichen mit den Modellergebnissen und insbesondere mit den SSU-Beobachtungen zeigt MERRA zu starke Trends im gesamten Sommerhalbjahr. Größere Abweichungen zu den anderen verwendeten Datensätzen sind in den zeitlichen Temperaturverläufen insbesondere im Bereich der Mesosphäre in Abbildung 17 ersichtlich. Die Reanalyse-Daten entstammen verschiedenen Messmethoden, die unterschiedliche Messfehler mit sich bringen. Des Weiteren ist die Datenabdeckung in der Troposphäre und Stratosphäre besser ausgeprägt als in der Mesosphäre. In *Randel et al. (2009)* wurde bereits darauf verwiesen, dass Reanalysen in der mittleren und oberen Stratosphäre weniger geeignet sind, stratosphärische Temperaturtrends zu analysieren. Die Datensätze sind in den höheren Atmosphärenschichten von größeren Differenzen und Kontinuitätsproblemen geprägt und schließen auch Sprünge mit ein.

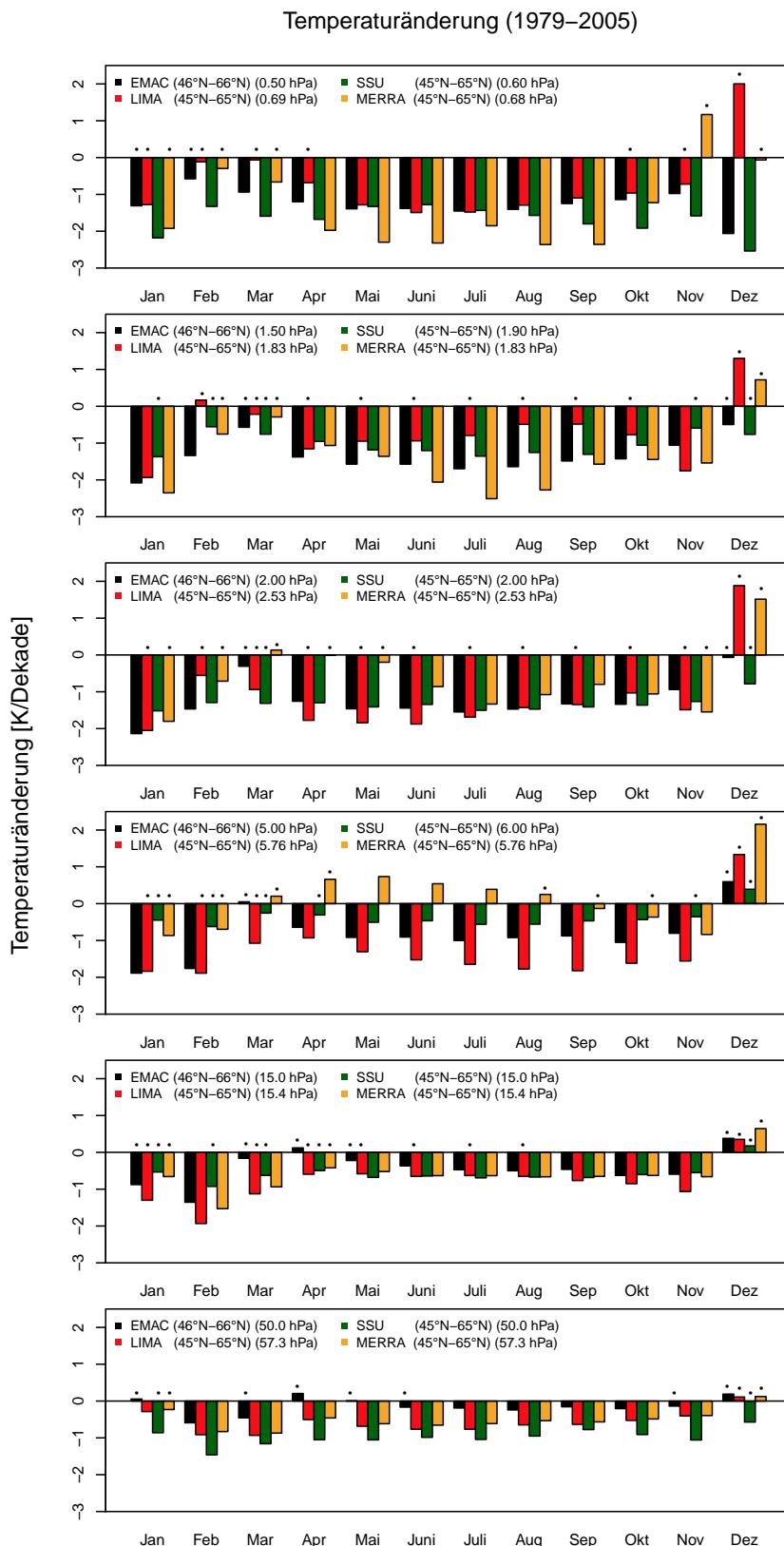


Abbildung 20: Temperaturtrends der beiden Modelle EMAC und LIMA, der Reanalyse MERRA und der SSU-Satellitendaten für verschiedene Höhenlevel zwischen  $\sim 0.6$  hPa und 50 hPa und jeden Monat des Jahres. Betrachtet werden die mittleren Breiten  $45^{\circ}\text{N} – 65^{\circ}\text{N}$  und der Zeitraum zwischen 1979 und 2005. Statistisch nicht signifikante Trends nach dem Mann-Kendall-Trendtest sind mit einem schwarzen Punkt gekennzeichnet.

## 5.4 Trendanalyse für den Sommermonat Juli

In der folgenden Abbildung (Abb. 21) sind Temperaturtrends verschiedener Datensätze für den Sommermonat Juli der mittleren und nördlichen Breiten ( $45^{\circ}\text{N}$ – $65^{\circ}\text{N}$ ) dargestellt. Im Unterschied zu Abbildung 19 erfolgt für die Trendanalyse bezogen auf den Monat Juli eine Gegenüberstellung zu den SSU-Beobachtungsdaten. Betrachtet wurde auch hier wieder der gemeinsame Zeitraum 1979 bis 2005. Ein Vergleich der Datensätze auf der logarithmischen Druckhöhenskala zeigt eine relativ gute Übereinstimmung der Modelldaten mit den SSU-Satellitendaten. In der Troposphäre ist ebenfalls eine gute Übereinstimmung der Modelldaten mit MERRA zu sehen. Mit zunehmender Höhe ergeben sich jedoch größere Differenzen zwischen MERRA und den Modelldaten. Ab etwa 50 km bis 75 km Höhe zeigt sich in MERRA sogar ein positiver Trend. Auch hier der Verweis, dass die Datensammlung für das Reanalyse-Projekt auf verschiedenen Messmethoden beruht und somit zu größeren Unsicherheiten führen kann. Die relativ gute Übereinstimmung der SSU-Daten mit MERRA und den großen Abweichungen von den anderen Datensätzen in den Höhen, in denen keine Satellitendaten vorliegen, legt die Vermutung nahe, dass MERRA sich stark an den Satellitendaten orientiert. Eventuell liegt hier eine höhere Gewichtung auf den Satellitendaten. Auf den Druckniveaus zwischen den fixen SSU-Punkten scheinen die Unsicherheiten der verschiedenen Messmethoden in MERRA zum Tragen zu kommen.

Oftmals ist der direkte Vergleich von Modellergebnissen mit Beobachtungen mit einigen Herausforderungen verbunden. Die meisten physikalischen Prozesse in der Atmosphäre, wie beispielsweise die Absorption von solarer Strahlung, der Strahlungstransfer oder die Anregung von Hydroxylmolekülen, können auf Druckniveaus am besten beschrieben werden (Lübken *et al.*, 2013). Beobachtungen, die von Messungen mit Radargeräten, Lidarinstrumenten, Raketensonden und einigen Instrumenten auf Satelliten abgeleitet werden, sind häufig aber auch an diskrete, geometrische Höhen gebunden. Im Abschnitt statistische Methoden (Kapitel 3.2.1) erfolgte eine Beschreibung zur Berechnung der Temperaturen von Druckniveaus auf geometrische Höhe. Diese Vorgehensweise wurde für EMAC und LIMA angewandt und die verschiedenen Trends auf den beiden Höhenskalen gegenübergestellt. Die Ergebnisse für den Monat Juli und den ausgewählten Breitenabschnitt  $45^{\circ}\text{N}$ – $65^{\circ}\text{N}$  sind in Abbildung 22 zu sehen. Betrachtet wird dabei der Zeitraum von 1970 bis 2005. Die gestrichelten Linien repräsentieren die Daten auf geometrischer Höhe und die durchgezogenen Linien auf Druckniveaus, wobei diese zur besseren Gegenüberstellung auf einer logarithmischen Druckhöhenskala angegeben werden. Allgemein ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Trends auf den beiden Höhenskalen bis zur Stratopause. In der Mesosphäre hingegen existieren in beiden Modellen erhebliche Abweichungen. Diese sind auf Schrumpfungseffekte in der Luftsäule zurück zu führen. Aufgrund von Abkühlung in der Strato- und Mesosphäre kommt es zu einer verringerten Ausdehnung der Atmosphäre.

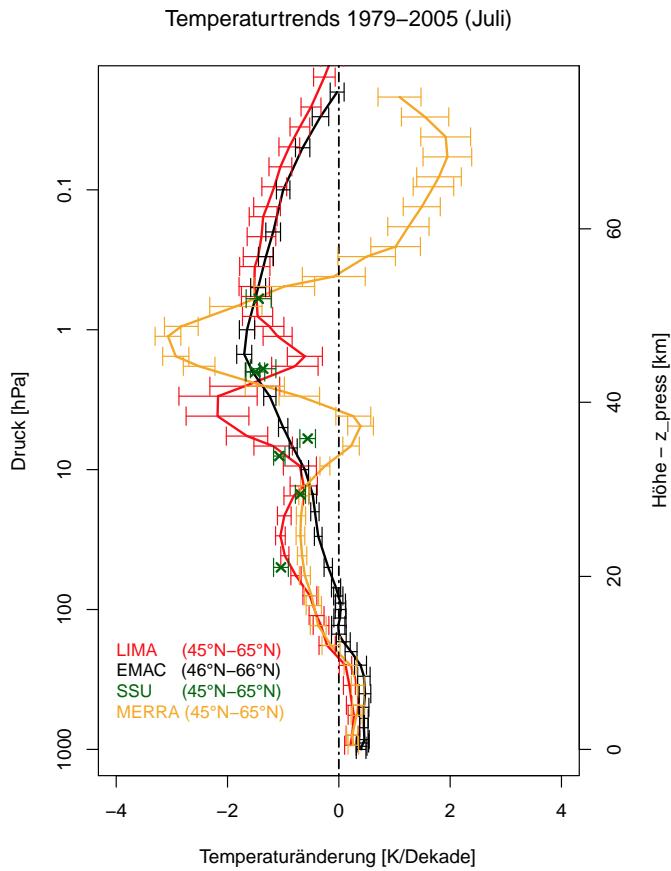


Abbildung 21: Temperaturtrends im Juli der Modelle EMAC und LIMA, der Reanalyse MERRA und der SSU-Beobachtungsdaten gemittelt über das Breitenband  $45^{\circ}\text{N} - 65^{\circ}\text{N}$  und bezogen auf den gemeinsamen Zeitraum 1979 bis 2005.

Der maximale Schrumpfungseffekt ist hier in der Mesosphäre am größten. Die Temperaturtrends auf der geometrischen Höhenskala sind dabei mehr als doppelt so groß wie die Trends auf der logarithmischen Druckhöhenskala. Diese Ergebnisse stimmen mit den Schlussfolgerungen unter Sommerkonditionen in *Lübben et al. (2009)* überein. Deren Sensitivitätsstudie ergibt außerdem, dass nur ein kleinerer Anteil der gesamten Kontraktion von etwa 20 % in der Stratosphäre stattfindet und dennoch nicht zu vernachlässigen ist. Das entspricht in etwa einer Höhenänderung von -200 m in dem Zeitraum 1961 bis 2009. Etwa 80 % der gesamten Kontraktion ist in der Mesosphäre zu finden, wobei eine Höhenänderung von etwa -900 m stattfindet.

Auf der geometrischen Höhenskala liegt der absolute negative Temperaturtrend im EMAC-Modell tiefer als in LIMA. Die Höhendifferenz beträgt hierbei etwa 3 km und die Temperaturtrends weichen nur um  $0,36\text{ K/Dekade}$  voneinander ab (LIMA:  $-2,29 \pm 0,29\text{ K/Dekade}$ ; EMAC:  $-1,94 \pm 0,17\text{ K/Dekade}$ ). Der maximale negative Temperaturtrend auf der logarithmischen Druckhöhe in EMAC beläuft sich auf  $-1,61 \pm 0,08\text{ K/Dekade}$  in etwa 45,6 km Höhe. Dieser Trend ist mit dem lokalen Minimum in LIMA ( $-1,55 \pm 0,17\text{ K/Dekade}$ ) zwischen 53 km und 56 km Höhe innerhalb der Fehlerangaben identisch. Die Höhendifferenz

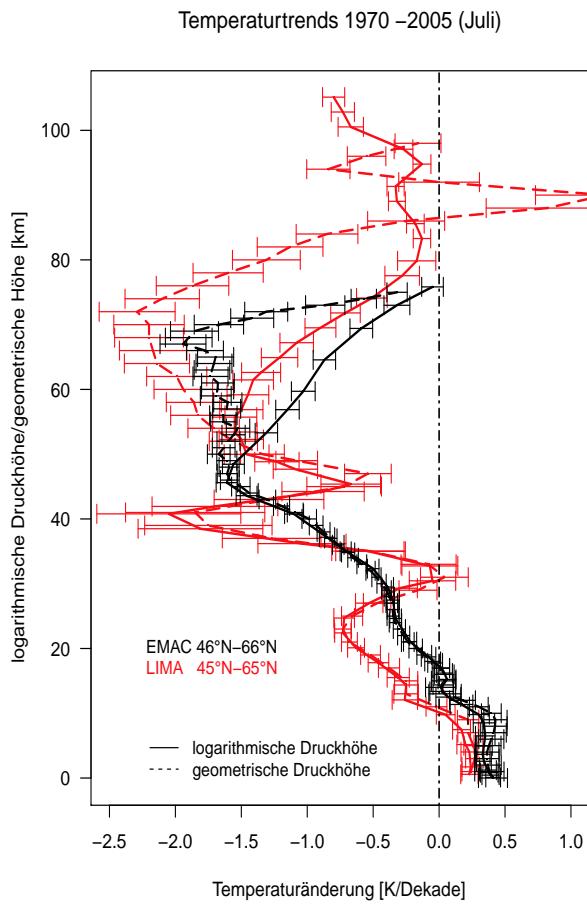


Abbildung 22: Temperaturtrends im Juli der Modelle EMAC und LIMA auf verschiedenen Höhenskalen. Die Trends beziehen sich auf den gemeinsamen Zeitraum 1970 – 2005 und auf die mittleren Breiten ( $45^{\circ}\text{N}$  –  $65^{\circ}\text{N}$ ).

ist für diese Minima mit etwa 8 km relativ hoch. LIMA weist aber noch ein absolutes Minimum in etwa 41 km Höhe mit  $-2,05 \pm 0,55 \text{ K/Dekade}$ , welches auch hier im Sinne der Fehlerangaben mit der stärksten Abkühlungsrate in EMAC auf der logarithmischen Druckhöhenskala identisch ist und in etwa der Hälfte der Höhendifferenz entspricht.

Im Allgemeinen sind die stärksten Trends in der Mesosphäre auf der geometrischen Höhenskala zu finden. Diese sind mit größeren Fehlern behaftet als die Trends auf der Druckskala. In LIMA sieht man, dass sich diese bedeutenden Unterschiede zwischen den beiden Höhenskalen mit zunehmender Höhe in der oberen Mesosphäre und unteren Thermosphäre fortsetzen. Während der Trend auf der logarithmischen Druckskala oberhalb von etwa 80 km Höhe durchschnittlich bei  $-0,45 \text{ K/Dekade}$  liegt, dreht sich der Temperaturtrend auf der geometrischen Höhenskala sogar um und wird zwischen 90 km und 95 km Höhe positiv. Aufgrund der großen Unterschiede in Bezug auf die Trends verschiedener Höhenskalen ist es notwendig, immer im gleichen vertikalen Koordinatensystem zu analysieren. Dies gilt insbesondere für die Mesosphäre und unteren Thermosphäre.

Für die Regressionsanalyse wurden zwei Methoden verwendet und die Ergebnisse in Tabellen zusammengefasst, um beide Verfahren gegenüber zu stellen und die Güte zu bewerten. Zum einen wurde die einfache lineare Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate Schätzer und zum anderen die Regressionsberechnung nach Sen-Theil (Sen-Slope-Methode) angewandt. Letztere basiert auf der Berechnung des Medians, woraus ein anderer Anstieg gegenüber der Methode der kleinsten Quadrate Schätzer resultieren kann. Die Analyse bezieht sich auf die obere Stratosphäre und die untere und mittlere Mesosphäre von 5 hPa bis 0,02 hPa ( $\sim 37 \text{ km} - 75 \text{ km}$ ). Außerdem wird zwischen den mittleren Breiten  $45^\circ\text{N} - 65^\circ\text{N}$  (Tabelle 3) und polaren Breiten  $65^\circ\text{N} - 85^\circ\text{N}$  (Tabelle 4) differenziert.

	EMAC		LIMA		LIMA (NaN)	
Druckniveau	Meth. d. kl. Q.	Sen - Slope	Meth. d. kl. Q.	Sen - Slope	Meth. d. kl. Q.	Sen - Slope
0.02 hPa	0.050 K/dec	0.061 K/dec	-0.290 K/dec	-0.285 K/dec	-0.278 K/dec	-0.272 K/dec
0.05 hPa	-0.590 K/dec	-0.618 K/dec	-0.953 K/dec	-0.938 K/dec	-0.904 K/dec	-0.831 K/dec
0.10 hPa	-0.871 K/dec	-0.870 K/dec	-1.421 K/dec	-1.397 K/dec	-1.345 K/dec	-1.294 K/dec
0.50 hPa	-1.312 K/dec	-1.311 K/dec	-1.688 K/dec	-1.647 K/dec	-1.550 K/dec	-1.490 K/dec
1.00 hPa	-1.565 K/dec	-1.571 K/dec	-1.505 K/dec	-1.303 K/dec	-1.228 K/dec	-1.160 K/dec

Tabelle 3: Gegenüberstellung der Temperatur-Regressionskoeffizienten zweier verschiedener Verfahren der Regressionsanalyse für das EMAC- und LIMA-Modell in verschiedenen Druckniveaus der Mesosphäre. Für den gemeinsamen Zeitraum von 1970 bis 2005 wurde zum einen die Methode der kleinsten Quadrate und zum anderen die Sen-Theil-Methode für die mittleren Breiten  $45^\circ\text{N} - 65^\circ\text{N}$  angewandt. LIMA (NaN) bezieht sich auf die Regression nach Eliminierung der Jahre 1975/76 im LIMA-Modell.

Bei der Anwendung der beiden verschiedenen Regressionsverfahren auf das EMAC-Modell für den Monat Juli zeigen sich beim Vergleich dieser Methoden nur geringe Abweichungen im Anstieg der Geraden. Die Unterschiede der Temperaturtrends liegen in der zweiten Nachkommastelle. Daraus kann man schließen, dass im zeitlichen Verlauf der Temperaturen nur sehr wenige bis gar keine Ausreißer vorhanden sind. Alle ermittelten Trendkoeffizienten sind im Sinne des Mann-Kendall-Tests statistisch signifikant und alle ermittelten p-Werte liegen innerhalb des 5 %-igen Signifikanzniveaus. Die Temperaturtrends des LIMA-Modells sind für die gleichen Höhenlevel wie in EMAC berechnet worden und nehmen auf den selben Zeitraum 1979 – 2005 Bezug (siehe Kapitel 5.1). Die Trends der zeitlichen Verläufe wurden dabei zum einen mit und zum anderen ohne die fehlerbehafteten ECMWF-Daten in den Jahren 1975/76 berechnet. Auch hier sind alle berechneten Trend-

	EMAC		LIMA		LIMA (NaN)	
Druckniveau	Meth. d. kl. Q.	Sen - Slope	Meth. d. kl. Q.	Sen - Slope	Meth. d. kl. Q.	Sen - Slope
0.02 hPa	-0.139 K/dec	-0.142 K/dec	-0.584 K/dec	-0.609 K/dec	-0.501 K/dec	-0.481 K/dec
0.05 hPa	-0.682 K/dec	-0.714 K/dec	-1.196 K/dec	-1.122 K/dec	-1.087 K/dec	-1.010 K/dec
0.10 hPa	-0.867 K/dec	-0.840 K/dec	-1.626 K/dec	-1.565 K/dec	-1.498 K/dec	-1.426 K/dec
0.50 hPa	-1.307 K/dec	-1.281 K/dec	-1.757 K/dec	-1.665 K/dec	-1.568 K/dec	-1.519 K/dec
1.00 hPa	-1.529 K/dec	-1.519 K/dec	-1.188 K/dec	-1.046 K/dec	-0.840 K/dec	-1.903 K/dec

Tabelle 4: Wie Tabelle 3, aber für die polaren Breiten  $65^\circ\text{N} - 85^\circ\text{N}$ .

koeffizienten in dem betrachteten Zeitraum im Sinne des 5%-igen Signifikanzniveaus als statistisch signifikant anzusehen. Die Gegenüberstellung zeigt, dass die Sen-Slope-Methode für das LIMA-Modell Abweichungen in der ersten bis zweiten Nachkommastelle aufweist. Das Potential für kleinere Ausreißer in LIMA ist gerade in den unteren betrachteten Höhen leicht höher als in EMAC, dennoch sind diese als sehr gering zu bewerten. Im Gegensatz zur Methode der kleinsten Quadrate Schätzer entsprechen diese Ausreißer nicht den Erwartungen, innerhalb eines bestimmten Streubereiches zu liegen.

Diese Studie wurde durchgeführt, um zum einen eine Bestätigung zu erhalten, dass die bisher in dieser Arbeit verwendete Methode der kleinsten Quadrate Schätzer für die Analyse der Temperaturtrends gut geeignet ist und die beiden Modelle keine einflussreichen Ausreißer aufweisen und zum anderen die Auswirkungen der Eliminierung der Jahre 1975/76 in LIMA für die Trendberechnung zu untersuchen.

## 5.5 Einfluss von O<sub>3</sub> und CO<sub>2</sub> auf die mesosphärische Temperatur

Die chemische Zusammensetzung der Atmosphäre ist ein wichtiger Klimafaktor, da sie einen entscheidenden Einfluss auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre hat. Auch Vulkane haben einen vorübergehenden Einfluss auf das Klima. Wie in *Hofmann und Solomon* (1989) beschrieben, folgt auf eine Vulkaneruption eine Abnahme im stratosphärischen Ozon. Das führt wiederum zu einer Temperaturabnahme. Die Änderungen im Temperaturverlauf zeigen, dass ein enger Zusammenhang zum Ozonmischungsverhältnis in der mittleren Atmosphäre besteht.

Die verschiedenen Einwirkungen auf die Temperaturtrends sind sehr komplex und noch nicht vollständig verstanden. Ein gutes Hilfsmittel, diese Fragestellung in der Mesosphäre näher zu verfolgen und somit das Verständnis von Klimaänderungen zu verbessern, bietet die multivariate Regressionsanalyse.

Die Abbildung 23 zeigt Ozonverläufe dreier Modelle (EMAC, SOCOL und WACCM), einer Reanalyse (MERRA) und eines Beobachtungsdatensatzes (SBUV-Satellitendaten) für die mittleren Breiten ( $45^{\circ}\text{N}$ – $65^{\circ}\text{N}$ ) in unterschiedlichen Höhenniveaus der mittleren und oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre. Der Vergleich der Ozonverläufe der verschiedenen Modelle zeigt qualitativ eine gute Übereinstimmung mit den SBUV-Satellitenbeobachtungen (Abb. 23). In den untersten dargestellten Höhen (obere Stratosphäre) sieht man besonders in den beiden Modellen SOCOL und EMAC das Einsetzen der Ozonzerstörung Anfang der 80er Jahre, welche im Zusammenhang mit der erhöhten Freisetzung von FCKWs steht. Bis Mitte der 90er Jahre weisen alle Verläufe auf einen Rückgang im Ozonmischungsverhältnis hin. In der folgenden Periode (1997–2010) vergrößern sich die Variationen zwischen den einzelnen Datensätzen, dennoch wird ein Rückgang der Ozonzerstörung beziehungsweise sogar eine Ozonzunahme deutlich.

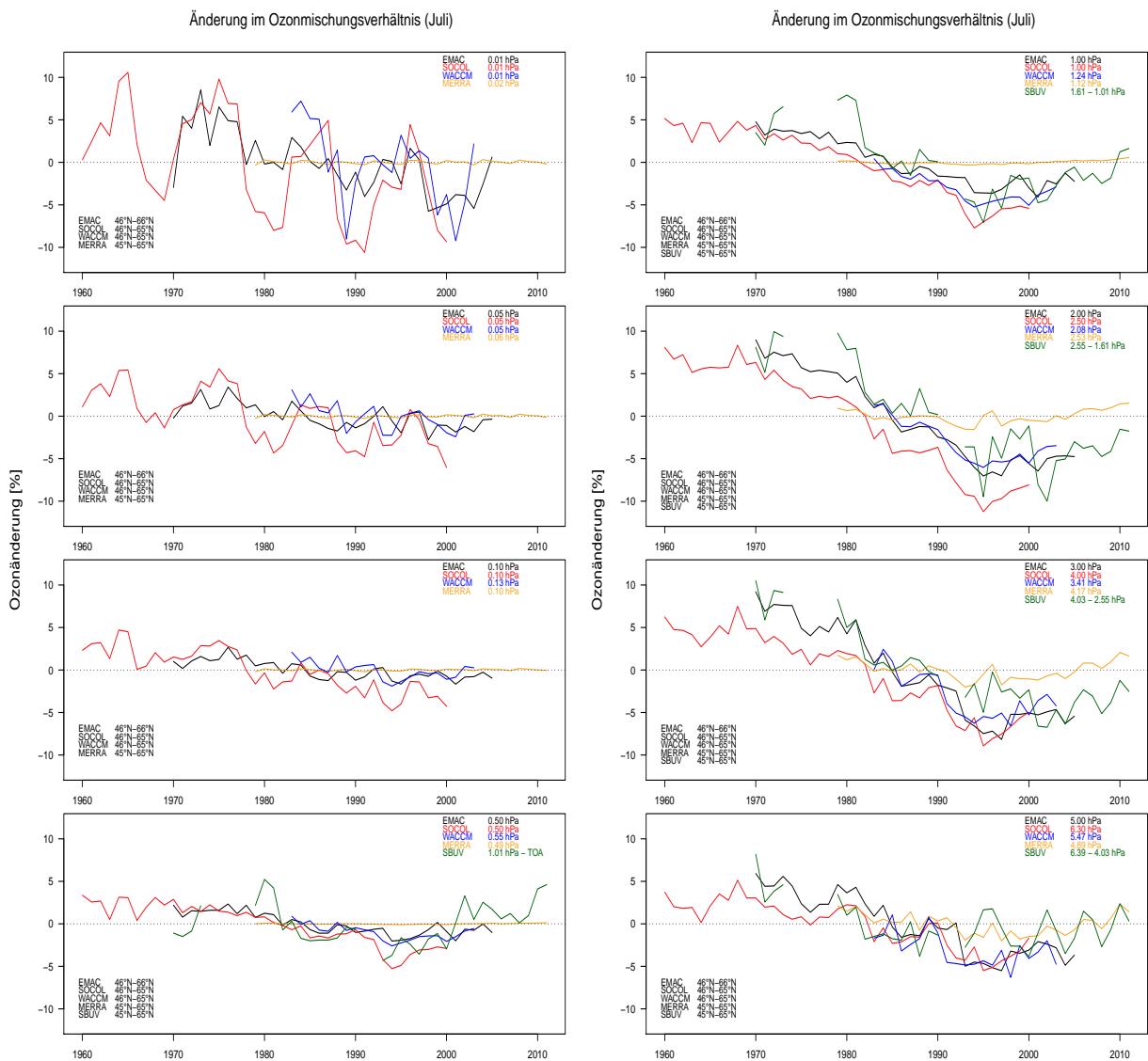


Abbildung 23: Ozonanomalien im Juli, gemittelt über das Breitenband  $45^{\circ}\text{N} – 65^{\circ}\text{N}$

MERRA weist in allen abgebildeten Höhen nur eine sehr geringe Variabilität im Ozonverlauf auf. Qualitativ ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit den SBUV-Daten in der unteren Mesosphäre. Oberhalb von etwa 2 hPa vergrößern sich allerdings die Abweichungen gegenüber den Satellitendaten.

In der unteren und mittleren Mesosphäre nimmt der Einfluss der solaren Variabilität in den Modellen EMAC, WACCM und insbesondere in SOCOL zu. Hier spiegelt sich der 11-jährige Sonnenzyklus wieder, der in SOCOL deutlich stärker ausgeprägt ist als in EMAC. Die Abbildung 24 zeigt Ozontrends von drei Modellen (EMAC, SOCOL und WACCM), einer Reanalyse (MERRA) und eines Beobachtungsdatensatzes (SBUV-Satellitendaten) für die mittleren Breiten ( $45^{\circ}\text{N} – 65^{\circ}\text{N}$ ) und für den gemeinsamen Zeitraum 1983 – 2000. Für die Trendberechnung stehen somit 18 Jahre zur Verfügung.

EMAC weist in der Troposphäre keinen Trend auf. In der unteren Stratosphäre variiert der Ozontrend in EMAC zwischen  $-0,04 \text{ ppmv/Dekade}$  und  $0 \text{ ppmv/Dekade}$  und wird in den darüber liegenden Höhenschichten leicht positiv ( $0,04 \text{ ppmv/Dekade}$ ). Ab etwa 15 hPa stellt sich in der oberen Stratosphäre und in der Mesosphäre ein negativer Ozontrend ein, der in etwa 41 km Höhe minimal ist ( $-0,260 \pm 0,038 \text{ ppmv/Dekade}$ ). Der Vergleich mit den SBUV-Daten zeigt, dass zwischen etwa 3 hPa und 1,3 hPa eine Überschätzung der Trends in EMAC gegenüber den SBUV-Daten erfolgt. Die SBUV-Daten sind für bestimmte Höhenbereiche definiert, symbolisiert durch die vertikalen Balken in der Grafik. Oberhalb von 0,5 hPa geht der Ozontrend in EMAC auf Null zurück, was in guter Übereinstimmung mit dem Trend in den SBUV-Daten bei 0,3 hPa ( $-0,005 \pm 0,006 \text{ hPa}$ ) ist. In der Stratosphäre zwischen etwa 100 hPa und 5 hPa ergeben sich größere Abweichungen der Trends in EMAC gegenüber den SBUV-Daten, wobei die Regressionskoeffizienten der Satellitendaten mit relativ großen Standardfehlern behaftet sind.

Die Gegenüberstellung der Trends mit zwei weiteren Modellen (SOCOL und WACCM) zeigt oberhalb von etwa 2 hPa eine sehr gute Äquivalenz. Außerdem sind EMAC und WACCM in der oberen Stratosphäre und in der Mesosphäre in der Stärke der Trends als identisch anzusehen. SOCOL zeigt hinsichtlich des Minimalwertes in den Trends eine bes-

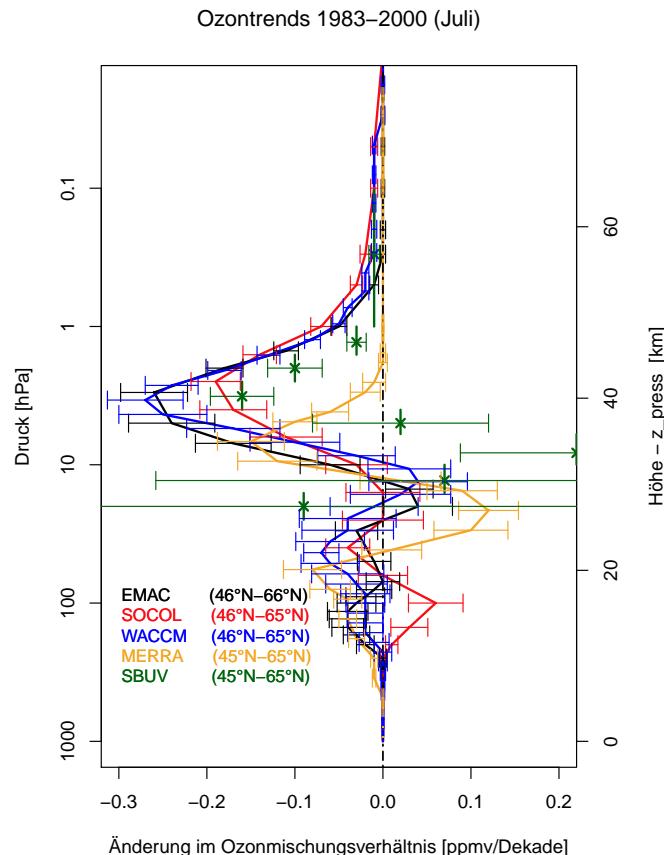


Abbildung 24: Ozontrends im Juli der Modelle EMAC, SOCOL und WACCM, sowie der Reanalyse MERRA und der SBUV-Satellitendaten gemittelt über das Breitenband  $45^{\circ}\text{N} – 65^{\circ}\text{N}$  und auf den gemeinsamen Zeitraum 1983 – 2000 bezogen.

sere Übereinstimmung mit den Beobachtungsdaten als mit den beiden Modellen WACCM und EMAC. Die Trends der Reanalyse MERRA sind in der oberen Stratosphäre und in der Mesosphäre im Vergleich zu der Beobachtung und den Modellen relativ gering und bei etwa 7 hPa minimal ( $-0,15 \text{ ppmv/Dekade}$ ). Ebenfalls zeigt sich zwischen 15 hPa und 30 hPa eine größere Abweichung des MERRA-Datensatzes gegenüber den anderen Modellen und den Satellitendaten. Hier wird ein positiver Trend von mehr als  $0,1 \text{ ppmv/Dekade}$ , der allerdings auch nicht signifikant ist, sichtbar.

Die Ergebnisse dieser Trendanalyse sind für die folgenden Untersuchungen von Bedeutung. Mit Hilfe der multiplen linearen Regression werden neben den Einflüssen des Ozons auch die Einflüsse des Kohlenstoffdioxids und der dekadischen Sonnenvariabilität auf die Langzeitänderungen im mesosphärischen Temperaturverlauf analysiert.

Für die multiple lineare Regression der Temperaturzeitreihe des LIMA-Modells (1961–2009) wurde der langjährige CO<sub>2</sub>-Datensatz von Mauna Loa, der auf Hawaii bei  $21^\circ\text{N}$  aufgenommen wurde, verwendet. Des Weiteren geht die Ozonreihe, die aus zwei Teildatensätzen zusammengesetzt wurde (WMO und SBUV) und die Lyman- $\alpha$ -Datenreihe in die Regression mit ein. Diese erklärenden Variablen sollen helfen, einen optimalen Fit für den zeitlichen Temperaturverlauf zu finden (rote Linie in Abb. 25). Frühere Arbeiten, wie *Akmaev et al.* (2006) und *von Zahn und Berger* (2010) haben gezeigt, dass H<sub>2</sub>O in der mittleren Atmosphäre nur eine untergeordnete Rolle in Hinblick auf Langzeitänderungen im Temperaturverlauf spielt. Andere Spurengase wie CH<sub>4</sub> und N<sub>2</sub>O haben keinen direkten Strahlungseinfluss oberhalb von 50 km und die QBO ist ein Phänomen der unteren und mittleren Stratosphäre. Ebenfalls ist der Einfluss von Vulkanen auf Langzeitvariationen im Temperaturverlauf bereits in der Stratosphäre vergleichsweise klein (WMO, 2007). Es kann somit von der Annahme ausgegangen werden, dass diese Parameter nur geringe Auswirkungen auf die Temperaturtrends in der Mesosphäre haben. Deshalb werden in dieser Studie nur die Einflüsse von O<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub> und des 11-jährigen Sonnenzyklus untersucht.

Die in der Abbildung 25 dargestellte Regression bezieht sich auf den Zeitraum 1961–2009, gemittelt über das Breitenband  $45^\circ\text{N}–55^\circ\text{N}$  und wurde für das Druckniveau 1 hPa bzw. für die Höhe 50 km berechnet. Die Jahre 1975 und 1976 wurden vor der Regression als nicht-initialisierte Werte übergeben, um den Fehler in den ECMWF-Daten weitestgehend zu eliminieren. Die multiple lineare Regression ist jeweils für den Temperaturverlauf auf der geometrischen Höhenskala (tz) und der Druckhöhe (tp) gezeigt. Des Weiteren sind die jeweiligen Regressionsanteile der multiplen linearen Regression unter dem Temperaturverlauf (a) geplottet.

Die Ergebnisse der multiplen linearen Regression bei etwa 1 hPa Höhe bzw. 50 km zeigen, dass das geschätzte Modell den Verlauf der originalen Temperaturreihe gut wiedergibt. Hierbei sind sehr geringe Unterschiede zwischen der Regression auf geometrischer Höhe und Druckhöhe festzustellen. Dies gilt, weil bei 1 hPa die Druckhöhe mit der geometri-

schen Höhe fast übereinstimmt (Kapitel 5.4). Die Modellgüte  $R^2 = 89,6\%$  ist für die Berechnungen auf der Druckhöhe in etwa genauso groß wie bei der geometrischen Höhe ( $R^2 = 89,8\%$ ). Beide Bestimmtheitsmaße sind als hoch anzusehen, woraus geschlussfolgert werden kann, dass die Variablen CO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> und die dekadische Sonnenvariabilität (Lyman- $\alpha$ -Linie) die Hauptfaktoren sind, die einen Einfluss auf langfristige Änderungen im Temperaturverlauf haben. Dies bestätigt sich auch in 0,2 hPa bzw. in 60 km Höhe (Abb. 26). Hier zeigt sich sogar eine Modellgüte von 95,9% (tp) bzw. 93,2% (tz). Die betragsmäßigen t-Werte der Regressionskoeffizienten  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  und  $\beta_3$  liegen sowohl bei der geometrischen Höhe (50 km und 60 km) als auch bei der Druckhöhe (1 hPa und 0,2 hPa) über dem kritischen t-Wert zu einem 5%igen Signifikanzniveau. Somit haben alle gewählten Regressoren einen signifikanten Einfluss auf die Temperatur. Der totale Temperaturtrend ergibt sich aus der Summe der Trends der einzelnen Komponenten (m\_total in b,c und d). Dabei ist die Summe der totalen Trends der Komponenten O<sub>3</sub> und CO<sub>2</sub> (b und c) fast mit dem linearen Trend der einfachen bivariaten Regression ohne die Zerlegung in die einzelnen Komponenten (m\_total in a) identisch, so dass der negative Trend in der Temperatur im Wesentlichen durch die Ozonabnahme und den Kohlenstoffdioxidanstieg erklärt werden kann. Der Einfluss der dekadischen Sonnenvariabilität ist relativ klein. In den multiplen linearen Regressionen verändert sich das *Adjusted R-squared* auch bei Integration der dekadischen Sonnenvariabilität, so dass eine Hinzunahme von Lyman- $\alpha$  berechtigt ist und ebenfalls einen Anteil an der Beschreibung der Änderungen im Temperaturverlauf hat. Das CO<sub>2</sub> ist der Haupteinflussfaktor der Temperaturtrends in der unteren und mittleren Mesosphäre mit Werten von bis zu  $-0,818\text{ K/Dekade}$  in 0,2 hPa und  $-1,015\text{ K/Dekade}$  in 60 km Höhe. Dabei wurde der gesamte zur Verfügung stehende Zeitraum von 1961 bis 2009 betrachtet. Durch das O<sub>3</sub> wird eine Temperaturabnahme bis zu  $-0,465\text{ K/Dekade}$  in 0,2 hPa und bis zu  $-0,588\text{ K/Dekade}$  in 60 km Höhe für den gleichen Zeitraum erreicht. Auf beiden Höhenskalen bewirkt O<sub>3</sub> in etwa ein Drittel und CO<sub>2</sub> in etwa zwei Drittel des totalen Temperaturtrends in der unteren und mittleren Mesosphäre.

Der gesamte betrachtete Zeitraum von 1961 bis 2009 weist keinen konstanten Temperaturtrend auf und lässt sich in Teilzeiträume untergliedern. Zwischen 1980 und 1995 hat die Abnahme im Ozonmischungsverhältnis eine deutlich sichtbare Auswirkung auf den Temperaturverlauf. Der Teilzeitraum 1995 – 2009 weist wiederum eine Ozonzunahme auf, wodurch die Temperaturen ansteigen. Im ersten Abschnitt (1961 – 1980) dominiert im Wesentlichen die Abnahme in den Temperaturen durch den CO<sub>2</sub>-Anstieg.

Die gefundene Modellfunktion mit den Regressionsparametern O<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub> und Lyman $\alpha$  erweist sich auch für den Temperaturverlauf des EMAC-Modells bei 1 hPa bzw. 50 km Höhe und 0,2 hPa bzw. 60 km Höhe als gut annehmbaren Fit (Abb. 27 und 28). Die Modellgüte wird durch das hohe Bestimmtheitsmaß  $R^2 = 96,8\%$  auf dem Druckniveau 0,1 hPa und  $R^2 = 92,7\%$  in 50 km Höhe wiedergegeben. Wie in LIMA wird der Großteil der Tempe-

raturtrends in der unteren Mesosphäre bei 1 hPa bzw. 50 km Höhe durch CO<sub>2</sub> bewirkt. In EMAC wird in etwa ein Viertel sowohl auf der geometrischen Höhe als auch auf der Druckhöhe durch O<sub>3</sub> und in etwa drei Viertel durch CO<sub>2</sub> erklärt. Die dekadische Sonnenvariabilität hat im Vergleich zu LIMA einen größeren Effekt auf den Temperaturverlauf, ist dennoch auch hier relativ klein. Die t-Werte verweisen auf einen signifikanten Einfluss auf die Temperatur aller gewählten Regressoren.

Auf dem Druckniveau 0,2 hPa bzw. in 60 km Höhe wird der Temperatortrend im Wesentlichen alleinig durch das CO<sub>2</sub> beschrieben. Sowohl auf der geometrischen Höhe als auch auf der Druckhöhe haben O<sub>3</sub> und Lyman  $\alpha$  nur einen Regressionsanteil von 1,5 - 2,5 %. Der angegebene t-Wert für den Regressionskoeffizienten  $\beta_1$  (O<sub>3</sub>) liegt allerdings unter dem kritischen t-Wert, so dass der Einfluss von O<sub>3</sub> auf die Temperatur nicht signifikant ist. In Kapitel 3.2.3 (Regressionsverfahren) wurde beschrieben, dass eine hohe Multikollinearität zu verzerrten Regressionskoeffizienten und zu hohen Standardfehlern führt. Bei der Berechnung der Korrelationskoeffizienten der einzelnen Variablen untereinander erhält man eine hohe Multikollinearität aufgrund einer hohen Korrelation zwischen O<sub>3</sub> und CO<sub>2</sub> ( $r^2 = 0,8$ ) in EMAC, woraus wiederum relativ hohe Standardfehler der Regressoren resultieren könnten. Die hohe positive Korrelation zwischen CO<sub>2</sub> und O<sub>3</sub> in EMAC ist auf die Temperaturabnahme durch das vermehrte CO<sub>2</sub> und eine damit verbundene verlangsamte homogene Gasphasenchemie zurückzuführen. Im Falle einer Multikollinearität ist es schwieriger, den Einfluss einer einzelnen Variablen zu zuordnen. Dies hat allerdings keine Auswirkung auf die Bestimmung des gemeinsamen Einflusses auf den Temperaturverlauf ( $R^2$ ). Ein Multikollinearitätsproblem ist dennoch nicht vorhanden, da der VIF-Wert (Kapitel 3.2.3) bei 5 und somit unter dem Referenzwert liegt.

Der Korrelationskoeffizient der Variablen O<sub>3</sub> und CO<sub>2</sub>, die in die multiple Regression der LIMA-Temperaturen eingehen, weisen eine geringere Multikollinearität ( $r^2 = 0,4$ ) auf.

Die quantitativen Ergebnisse der multiplen linearen Regression bei 1 hPa und in 50 km zeigen sowohl in LIMA als auch in EMAC eine gewisse Ähnlichkeit. Dies ist auch in Übereinstimmung mit Abbildung 22, wo die Unterschiede zwischen den beiden Höhenskalen bis zu einer Höhe von etwa 50 km sehr gering sind. Erst in den darüber liegenden Atmosphärenschichten ergeben sich größere Differenzen in den Temperatortrends.

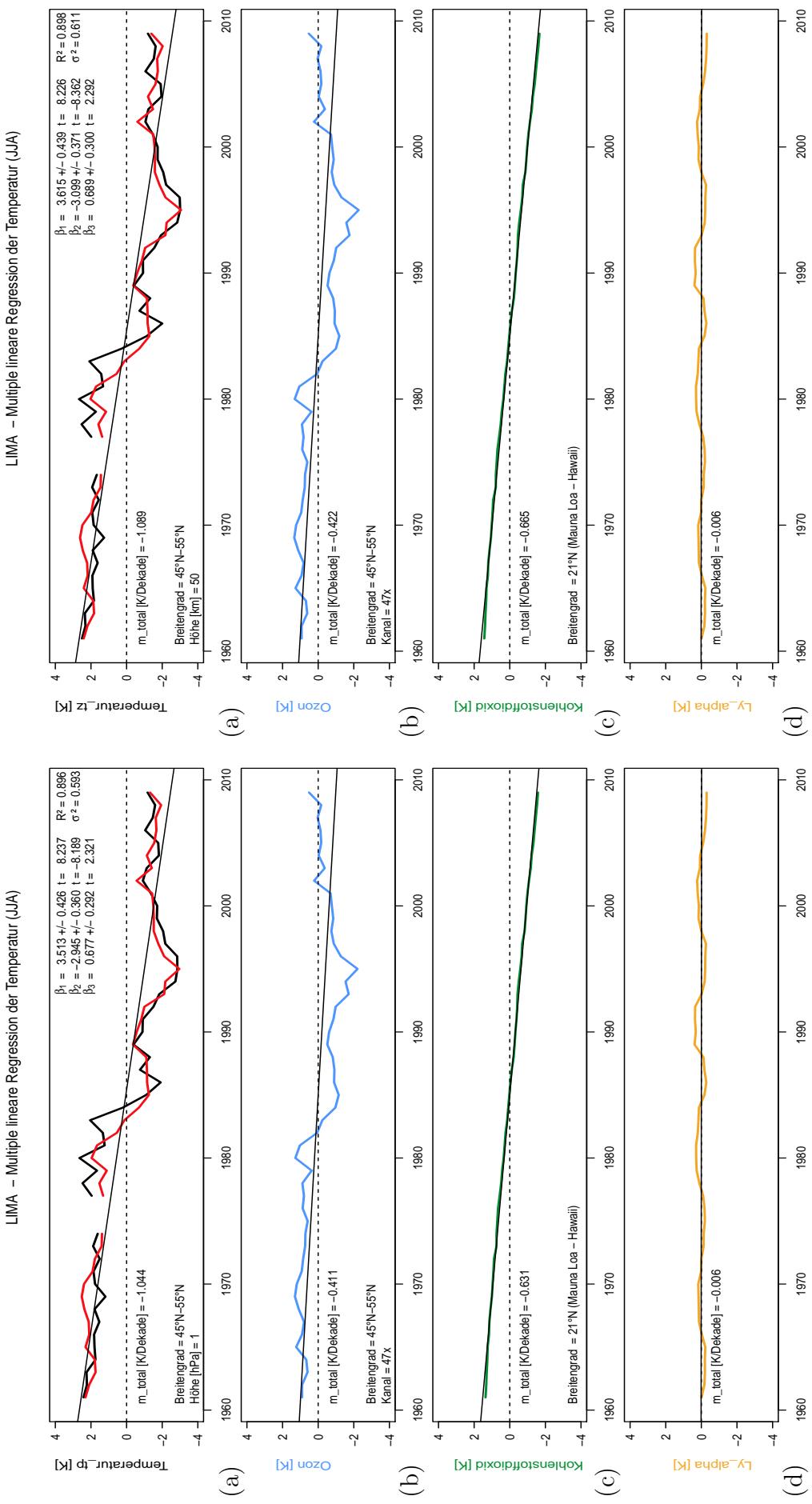


Abbildung 25: LIMA-Temperaturverlauf mit dem multiplen linearen Fit (a - schwarze bzw. rote Kurve) für die Regressionsparameter  $O_3$ ,  $CO_2$  und Lyman- $\alpha$  ( $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ ) auf Druck- (links) und geometrischer Höhenskala (rechts).  $m_{\text{total}}$  beziehen sich auf den linearen Trend einer einfachen bivariaten Regressionsanalyse (schwarze Geraden). Für die detaillierte Beschreibung der statistischen Parameter siehe Kapitel 3.2.3. Die Teilgrafiken zeigen die Regressionsanteile der multiplen linearen Regression -  $O_3$  (b),  $CO_2$  (c) und Lyman- $\alpha$  (d).

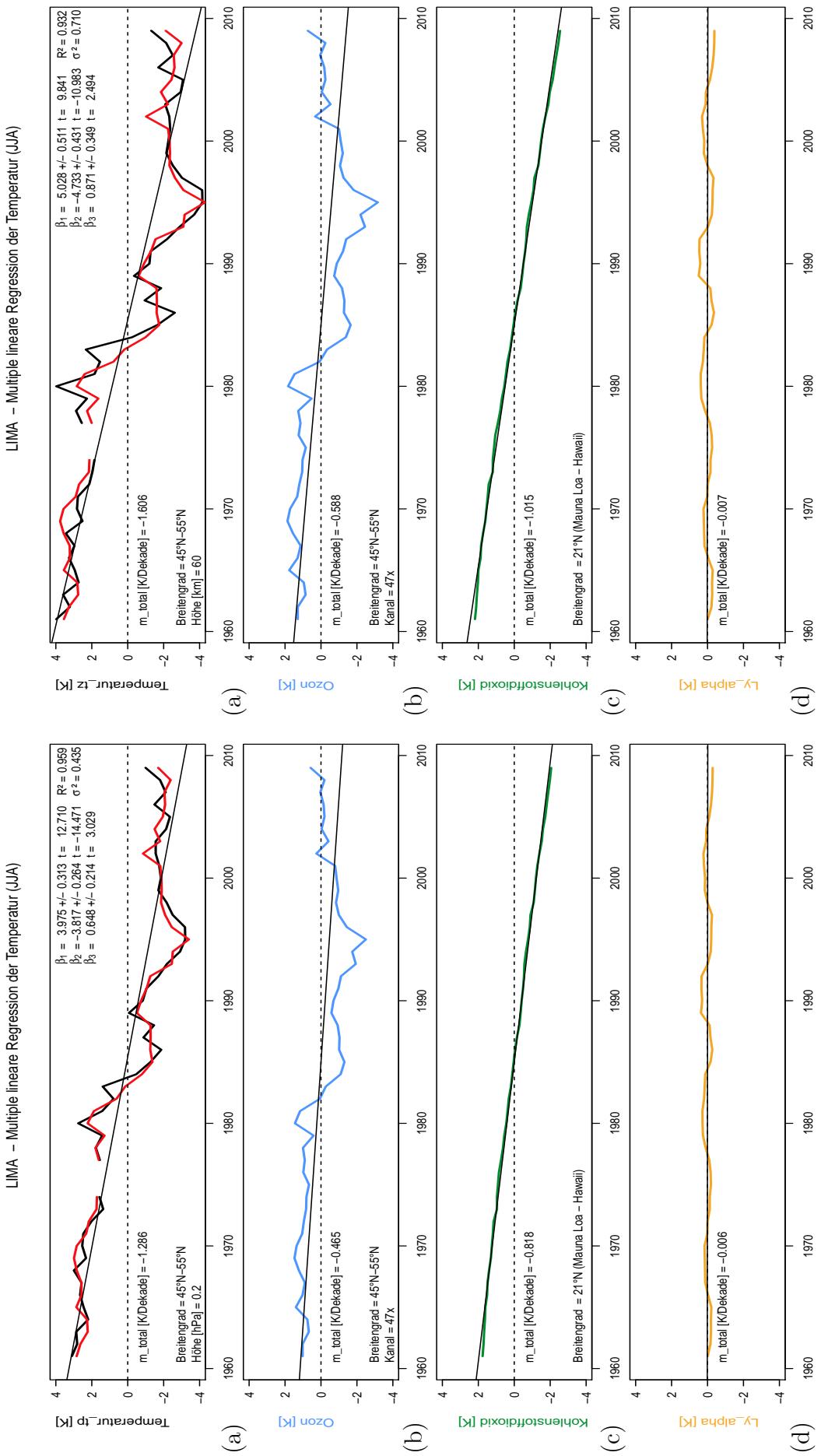


Abbildung 26: Wie in Abb. 25, aber für 0,2 hPa (links - Temperatur\_tp) bzw. 60 km Höhe (rechts - Temperatur\_tz).

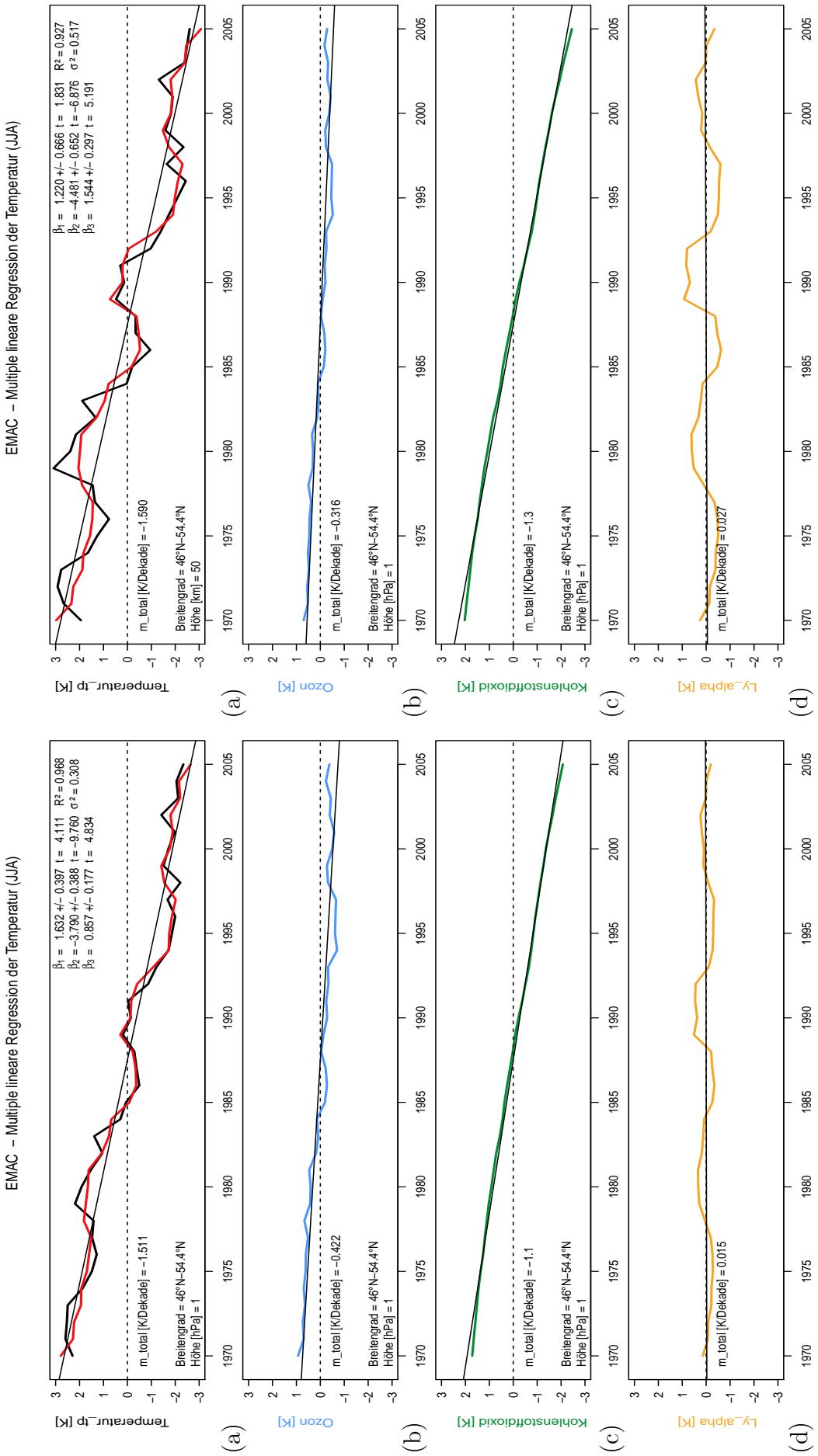


Abbildung 27: Wie in Abb. 25, aber für EMAC.

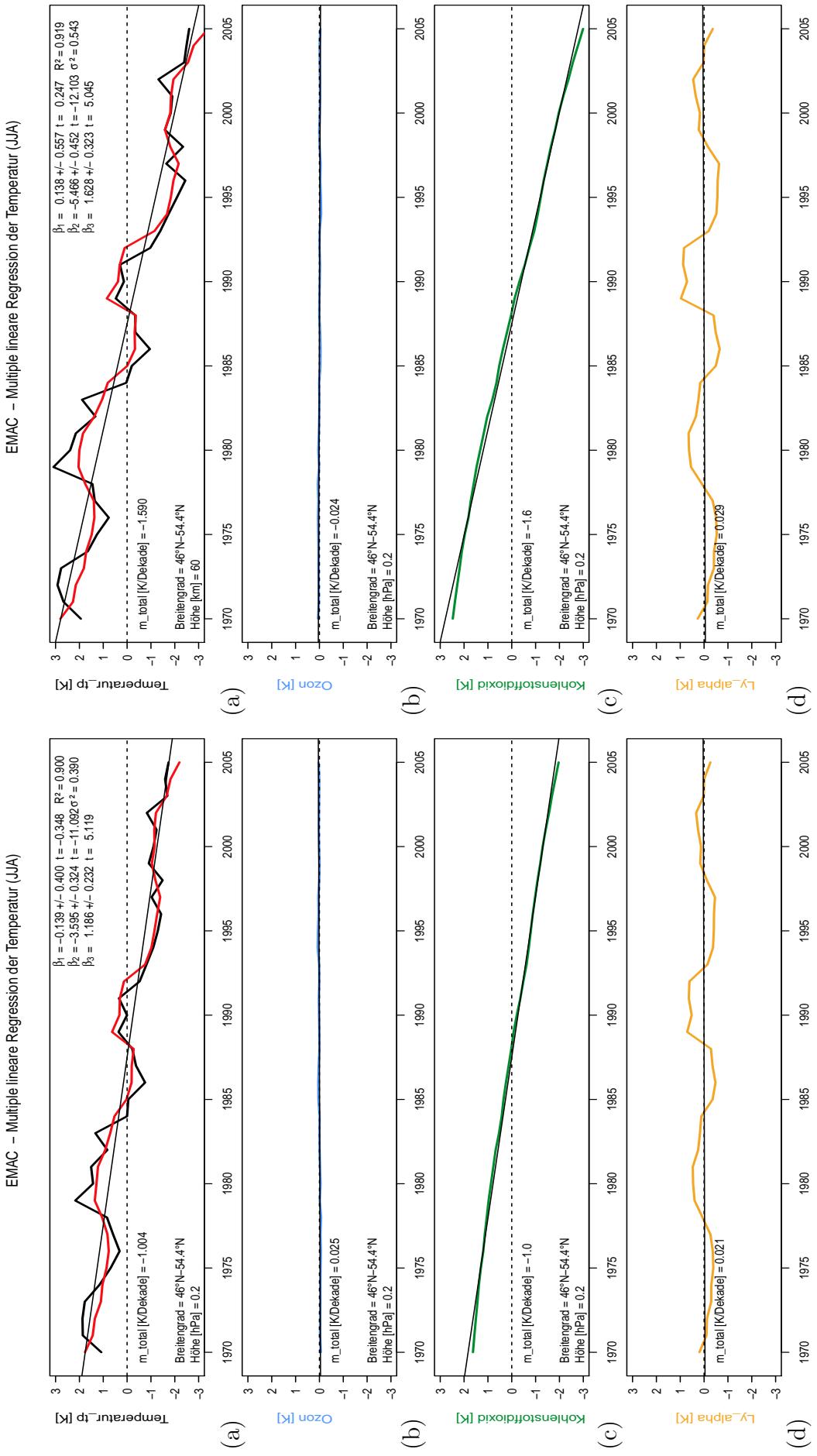


Abbildung 28: Wie in Abb. 25, aber für EMAC und für EIMAC und für 0,2 hPa (links - Temperatur\_tp) bzw. 60 km Höhe (rechts - Temperatur\_tz).

## 6 Zusammenfassung und Diskussion

Die Arbeit zielt auf die qualitative und quantitative Detektion mesosphärischer Temperaturtrends ab und soll die damit verbundenen Schwierigkeiten und Probleme beleuchten. Die Ermittlung von Temperaturtrends in der Mesosphäre ist zum jetzigen Stand der Forschung noch durch größere Unsicherheiten geprägt. Die große natürliche Variabilität im Winter und komplexe, chemische und dynamische Effekte erschweren die Quantifizierung von Trends. Die Studie hat gezeigt, dass sich in dem Zeitraum von 1979 bis 2005 im Allgemeinen in allen Breiten negative Temperaturtrends ergeben und die wenigen positiven Trends nach dem Mann-Kendall-Trendtest statistisch nicht signifikant sind. Es sind nur wenige Vergleichsmessungen bzw. Langzeitbeobachtungen vorhanden, welche oftmals mit großen Unsicherheiten und Diskontinuitäten verbunden sind. Dies spiegelt sich auch in dem Reanalyse-Datensatz MERRA in der unteren Mesosphäre auf der Südhalbkugel wieder. Außerdem variieren die wenigen verwertbaren Langzeitmessungen ebenfalls in der zeitlichen und räumlichen Abfrage von Messpunkten, was wiederum den Vergleich mit Modellsimulationen erschwert. Beispielsweise sind die Messungen mit dem Lidar lokale Beobachtungen, wobei die SSU-Satellitendaten als zonale Mittel bereitgestellt werden. Außerdem sind Lidar-Messungen zeitlich begrenzt und von den örtlichen Wetterbedingungen abhängig. Von den stationären Messungen sind ebenfalls nur wenige verfügbar, welche aufgrund ihrer unterschiedlichen meist von großer Distanz gekennzeichneten Lokalitäten, von größeren Variationen geprägt sind, ähnlich wie die Raketendaten. Dennoch ist das Lidar aufgrund seiner vertikalen und zeitlich hohen Auflösung ein sehr hilfreiches Instrument bei der Validierung von Temperaturklimatologien. Radiosonden messen wiederum durchschnittlich nur bis etwa 20 km Höhe und zeigen eine Abnahme der Qualität der Messungen mit zunehmender Höhe (*Randel et al.*, 2009).

Unter Beachtung der genannten Unsicherheiten ist es ebenso wichtig anzumerken auf welchen Höhenskalen die Trends berechnet bzw. gemessen wurden. Dabei ist es von besonderer Bedeutung zwischen Messungen auf logarithmischer Druck- und geometrischer Höhe zu differenzieren. Die Modellergebnisse von EMAC und LIMA zeigen deutlich, dass sich aufgrund von atmosphärischer Kontraktion infolge der Treibhausgas bedingten Abkühlung in der Stratosphäre und Mesosphäre, starke Abweichungen auf den unterschiedlichen Höhenskalen ergeben. Diese Differenzen sind in der Mesosphäre besonders stark ausgeprägt. Die Temperaturtrends der mittleren und oberen Mesosphäre sind dabei auf der geometrischen Höhenskala unter Sommerkonditionen und in den nördlichen mittleren Breiten für den Zeitraum 1979 – 2005 mehr als doppelt so groß als die Trends auf der logarithmischen Druckhöhenskala. Dieser Effekt hat eine Kontraktion der Luftsäule von etwa 80 % in der Mesosphäre zur Folge. Etwa 20 % der Gesamtkontraktion ist in der Stratosphäre zu finden. Der Vergleich der saisonalen Trends zeigt, dass es speziell im Winter große Abweichungen zwischen den Modellen EMAC und LIMA und der Reanalyse MERRA gibt und die Varia-

bilität hier am größten ist. Die statistisch signifikanten Temperaturtrends sind im Wesentlichen in den Sommermonaten zu finden. Die Mesosphäre reagiert sensibler im Hinblick auf Klimaänderungen als die darunter liegenden Atmosphärenschichten. Die Temperaturtrends sind speziell auf der geometrischen Höhenskala im Bereich der Mesosphäre unter Sommerkonditionen am größten. Der stärkste Trend im Zeitraum 1979–2005 im Juli ist hier im Bereich der mittleren Mesosphäre zu finden (LIMA:  $-2.29\text{ K/Dekade}$ ; EMAC:  $-1.94\text{ K/Dekade}$ ). Der maximale Temperaturtrend auf der Druckskala in der Mesosphäre befindet sich sowohl in LIMA ( $1.46\text{ K/Dekade}$ ) als auch EMAC ( $-1.46\text{ K/Dekade}$ ) bei  $1\text{ hPa}$  und ist in guter Übereinstimmung mit den SSU-Beobachtungsdaten ( $-1.43\text{ K/Dekade}$  - Kanal 47x). In der mittleren und oberen Mesosphäre zeigen sich auf der logarithmischen Druckhöhenskala etwas größere Trends in LIMA gegenüber EMAC. Auf der geometrischen Höhenskala sind insbesondere in der oberen Mesosphäre größere Differenzen zwischen den beiden Modellen zu sehen. Die Unterschiede in den Trends der mittleren Atmosphäre zwischen EMAC und LIMA sind hauptsächlich bedingt durch die unterschiedlichen Ozon-Hintergrundfelder, aber können auch zum Teil in der unterschiedlichen Strahlungsparametrisierung der beiden Modelle begründet sein. Des Weiteren sind beim Vergleich der beiden Modelle mit MERRA hinsichtlich der unterschiedlichen Klimatologien keine einheitlichen Trends im Bereich der Mesosphäre zu erwarten. MERRA ist der längste zur Verfügung stehende Reanalyse-Datensatz, welcher die mittlere Atmosphäre mit abdeckt. Die Trendberechnungen sollten sich idealerweise auf gemeinsame und längere Zeiträume beziehen, was andere bis in die Mesosphäre hoch reichende Reanalysen bisher noch nicht bieten können. Das ist auch der Grund weshalb keine weiteren Reanalysedatensätze zum Vergleich herangezogen werden können.

Ein weiterer wichtiger Aspekt dieser Arbeit ist die Untersuchung der Einflussfaktoren, die sich auf den Temperaturverlauf in der Mesosphäre auswirken. Die multivariate Trendanalyse liefert hierbei Ergebnisse zu den Regressionsanteilen am Gesamtrend der Temperatur. Den größten Beitrag liefert sowohl in EMAC als auch in LIMA das Spurengas  $\text{CO}_2$ . In LIMA zeigt sich, dass  $\text{CO}_2$  zu zwei Dritteln und  $\text{O}_3$  zu einem Drittel zum Temperaturtrend auf der geometrischen Höhe und auf der Druckhöhe beiträgt. Die Trendanalyse in EMAC resultiert in einer höheren Gewichtung des  $\text{CO}_2$ -Beitrages zum Gesamtrend. Auf dem Druckniveau  $1\text{ hPa}$  bzw. in  $50\text{ km}$  Höhe kann  $\text{CO}_2$  etwa drei Viertel und  $\text{O}_3$  ein Viertel des Temperaturtrends erklären. Der Regressionsanteil der dekadischen Variabilität ist in beiden Modellen relativ gering. Der negative Temperaturtrend im Zeitraum von 1961 bis 2009 (LIMA) mit Werten bis zu  $-1,606\text{ K/Dekade}$  (geometrische Höhe) bzw. 1970 bis 2005 (EMAC) bis zu  $-1,590\text{ K/Dekade}$  (geometrische Höhe) wird im Wesentlichen durch den  $\text{CO}_2$ -Anstieg und die  $\text{O}_3$ -Abnahme bewirkt.

## 7 Ausblick

Die Bestimmung von Temperaturtrends wird von einer Reihe von komplexen Vorgängen begleitet, weshalb auch in der Detektion von Klimasignalen und Trendberechnungen weiterhin ein großer Forschungsbedarf besteht. Um die quantitative Auswertung zu verbessern, ist es hilfreich, in den kommenden Jahren die Vergleiche mit Langzeitbeobachtungen bzw. auch Reanalyse-Datensätzen auszubauen.

LIMA wurde in dieser Arbeit mit den ECMWF-Daten ERA40 angetrieben. Der Reanalysedatensatz unterliegt einer zeitlichen Inhomogenität, welche sich besonders in der Trendberechnungen im Übergangsbereich der genudgten Werte zum freilaufenden LIMA-Modell bei etwa 45 km Höhe bemerkbar macht. Eventuell würde ein Nudging mit dem Reanalyse-Datensatz ERA-Interim in der Troposphäre und unteren Stratosphäre zu besseren Ergebnissen im Übergangsbereich und zur Eliminierung möglicher Unsicherheiten führen.

## 8 Anhang

Temperaturverläufe auf Basis von Modellsimulationen mit EMAC und LIMA für die mittleren Breiten mit Angabe der Regressionskoeffizienten, deren Fehler und der Fehler der Residuen. Die simulationsgestütze Trendberechnung wurden nach der Methode der kleinsten Quadrate Schätzer durchgeführt. Die Reproduktion der Temperaturverläufe bezieht sich auf die untere und mittlere Mesosphäre von 1 hPa bis 0,02 hPa.

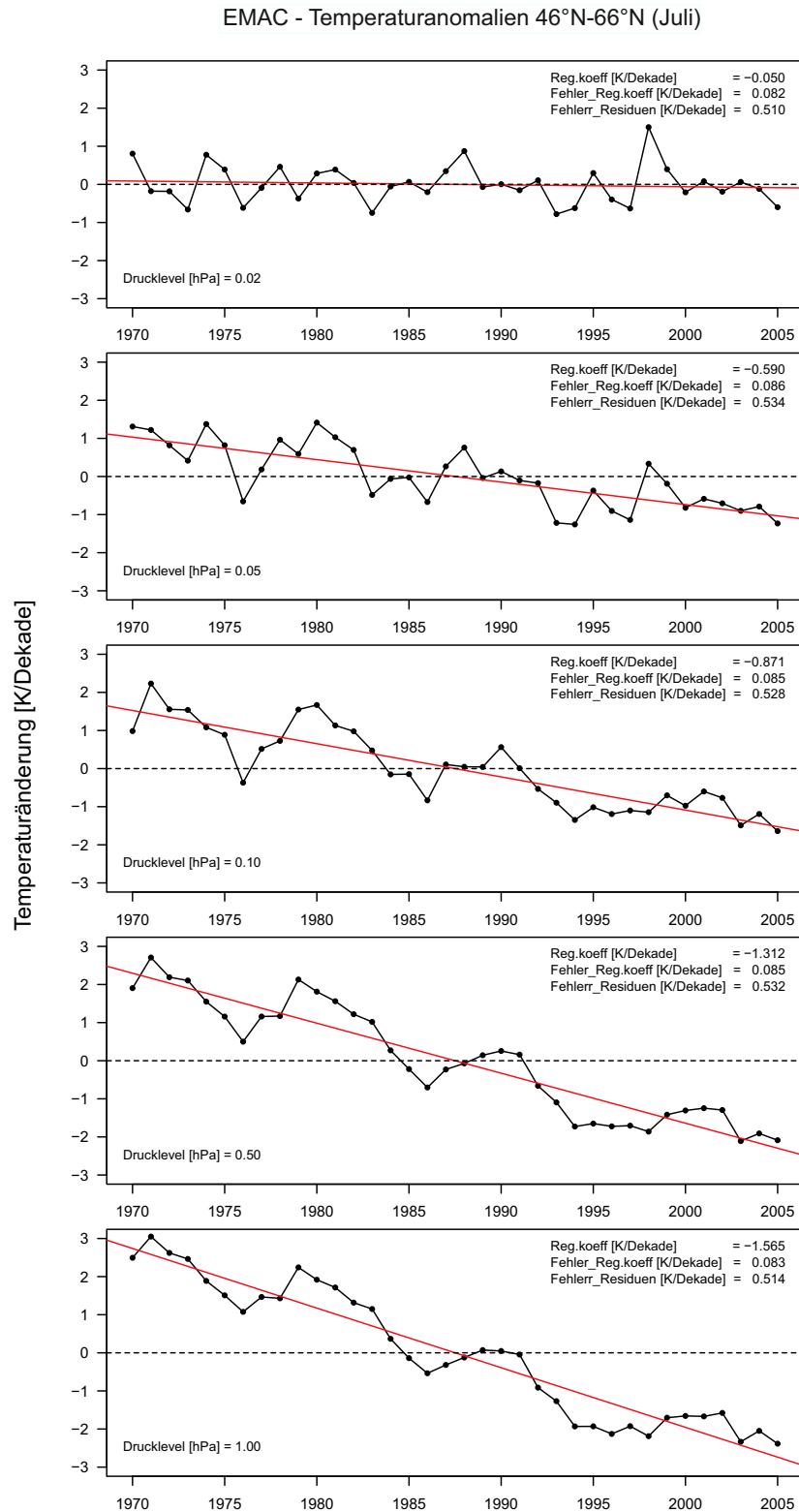


Abbildung 29: EMAC - Temperaturtrends der Mesosphäre im Juli gemittelt über das Breitenbänder 45°N-66°N.

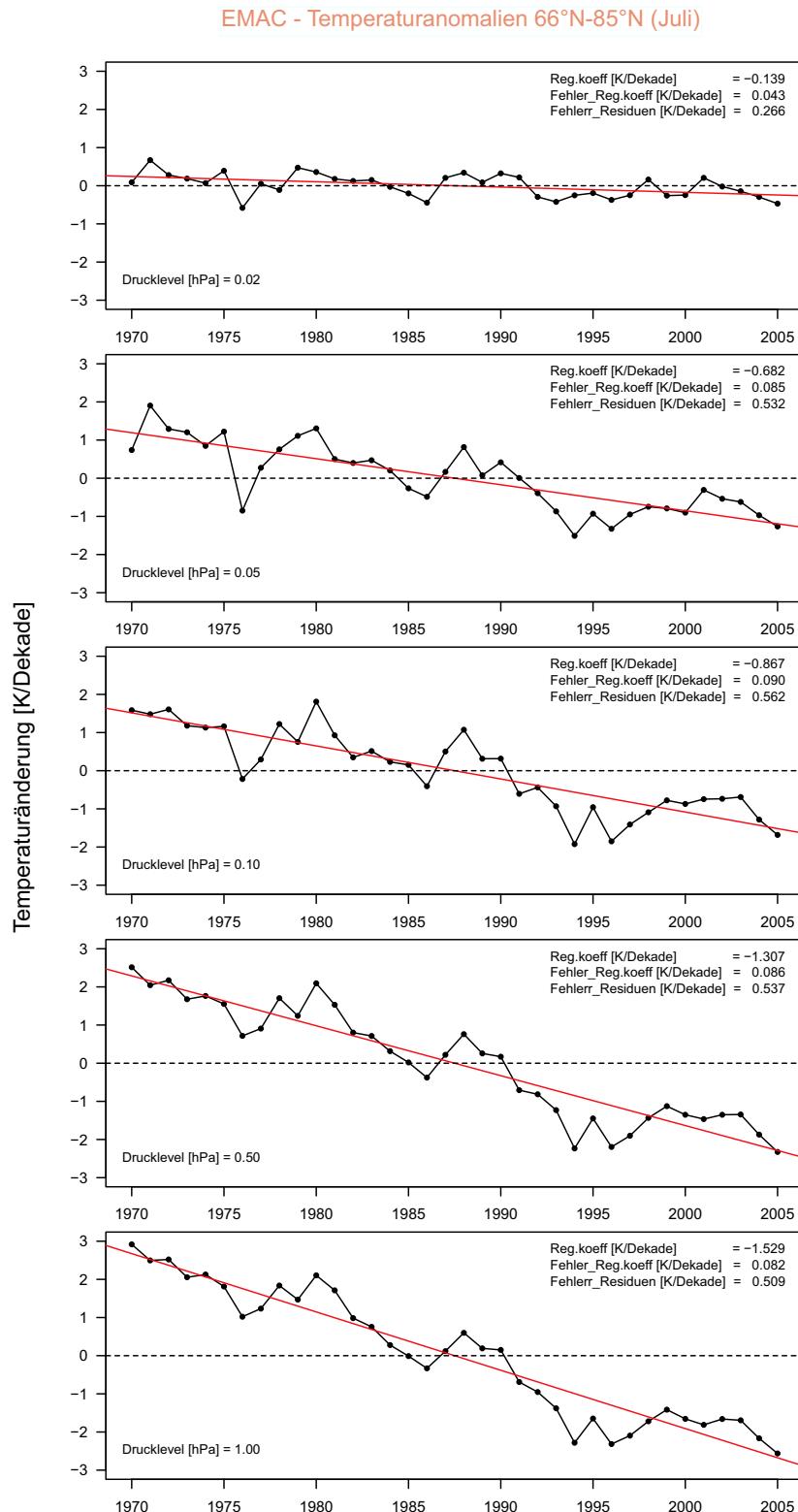


Abbildung 30: Wie Abbildung 29, aber gemittelt über das Breitenbänder 66°N-85°N.

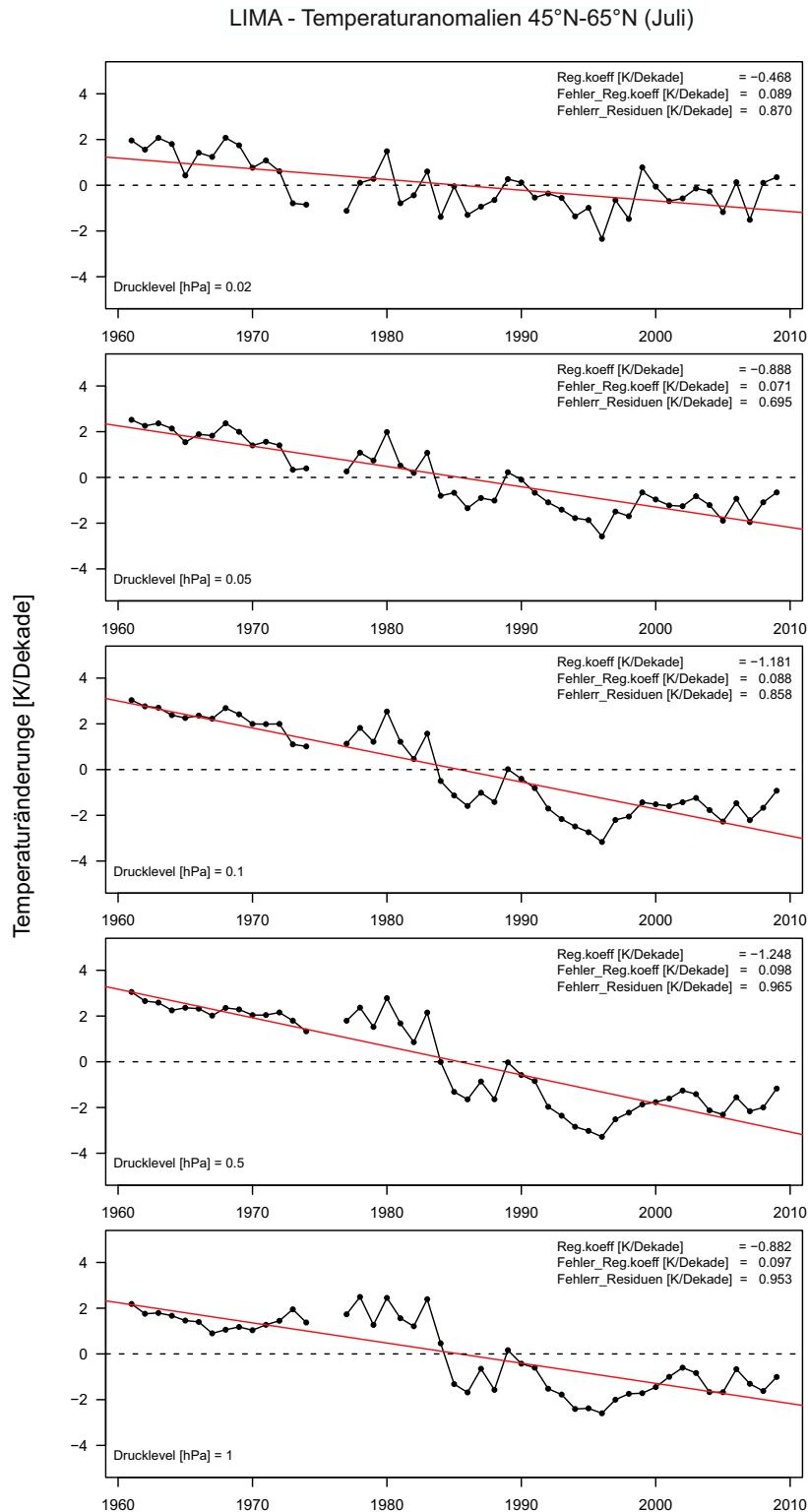


Abbildung 31: LIMA - Temperaturtrends der Mesosphäre im Juli gemittelt über das Breitenbänder 45°N-66°N. Die Jahre 1978/79 wurden aufgrund zu großer Unsicherheiten für die Trendberechnung entfernt. In diesen beiden Jahren ist ein Fehler in den ECMWF-Daten vorhanden.

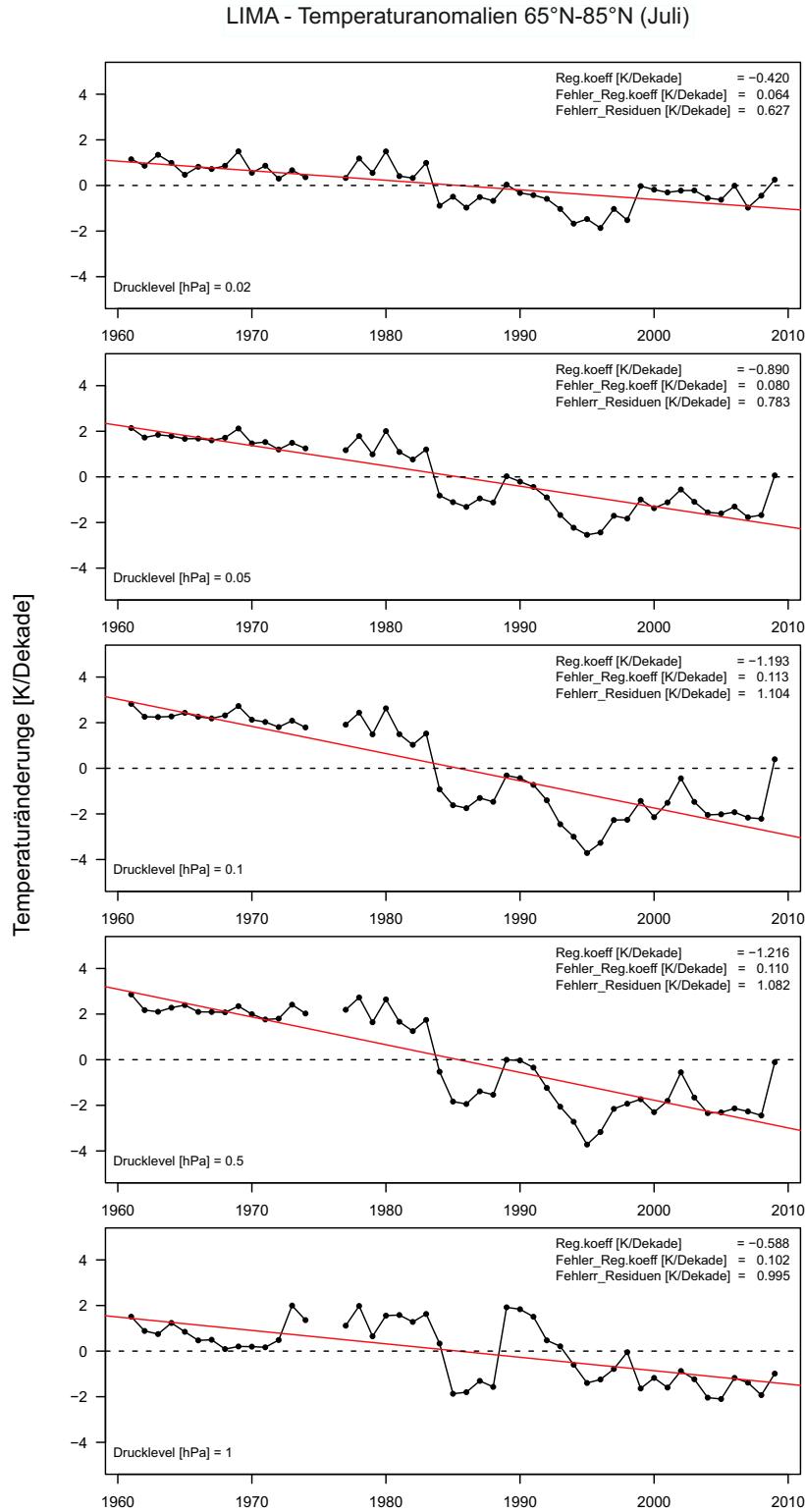


Abbildung 32: Wie Abbildung 31, aber gemittelt über das Breitenbänder 66°N-85°N.



## 9 Abkürzungsverzeichnis

CAWSES	Climate And Weather of the Sun-Earth System
CCMVal	Chemistry-Climate Model Validation Activity
CH <sub>4</sub>	Methan
CO <sub>2</sub>	Kohlenstoffdioxid
CO	Kohlenstoffmonoxid
COMMA/IAP	Cologne Model of the Middle Atmosphere/Institute of Atmospheric Physics, Kühlungsborn
DJF	Dezember, Januar, Februar
ECHAM5	5. Generation des European Centre/HAMburg climate model
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
EMAC	ECHAM/MESSy Modell
FCKW	Fluorchlorkohlenwasserstoffe
H <sub>2</sub> O	Wasserdampf
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
JJA	Juni, Juli, August
$\lambda$	Wellenlänge
lat	Latitude - Breitengrad
Lidar	Light detection and ranging
LIMA	Leibniz-Institut Middle Atmosphere Modell
MECCA	Module Efficiently Calculating the Chemistry of the Atmosphere
MERRA	Modern ERA-Retrospective alansysis for Research and Applications
$m_{total}$	Regressionskoeffizient einer einfachen linearen Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate
N <sub>2</sub> O	Distickstoffmonoxid
NDMC	Network for the Detection of Mesopause Change

NOAA	National Oceanic and Atmospheric Administration
O <sub>2</sub>	Sauerstoff
O <sub>3</sub>	Ozon
PSMOS	Planetary Scale Mesopause Observing System
QBO	Quasi-Zweijährige-Oszillation
R <sup>2</sup>	Bestimmtheitsmaß
r	Korrelationskoeffizient
RAD4ALL-FUBRAD	Untermodul des EMAC-Modells mit einem hochauflösendem Strahlungsschema der Freien Universität Berlin
Ref-B1	Referenzlauf-B1 - Modellsimulation nach CCMVal
SBUV	Solar Backscatter Ultraviolet
SSU	Stratospheric Sounding Unit
TOVS	TIROS Operational Vertical Sounder
UV/VIS	elektromagnetische Wellen des ultravioletten (UV) und des sichtbaren (englisch visible, VIS) Lichts
VIF	Variance Inflation Factor
WACCM	Whole Atmosphere Community Climate Model
WMO	World Meteorological Organization
$z_{geo}$	geometrische Höhe
$z_{press}$	logarithmische Druckhöhe

## Literatur

- Akmaev, R. A., V. I. Fomichev, und X. Zhu, Impact of middle-atmospheric composition changes on greenhouse cooling in the upper atmosphere, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 68, 1879–1889, 2006.
- Alpers, M., R. Eixmann, C. Fricke-Begemann, M. Gerding, und J. Höffner, Temperature lidar measurements from 1 to 105 km altitude using resonance and Rayleigh and Rotational Raman scattering, *Atmos. Chem. Phys.*, 4, 793–800, 2004.
- Angot, G., P. Keckhut, A. Hauchecorne, und C. Claud, Contribution of stratospheric warmings to temperature trends in the middle atmosphere from the lidar series obtained at Haute-Provence Observatory (44°N), *J. Geophys. Res.*, 117, D21,102, 2012.
- Berger, U., Die Mesosphäre: Ein Frühwarnsystem für Klimaänderungen?, *Promet, Jahrg. 31, Nr. 1*, 12–18, 2005.
- Berger, U., Modeling of middle atmosphere dynamics with lima, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 70, 1170–1200, 2008.
- Berger, U., und F.-J. Lübken, Mesospheric temperature trends at mid-latitudes in summer, *Geophysical Research Letters*, 38, L22,804, 2011.
- Chabriat, I., und G. Kockarts, Correction to ‘Simple parameterization of the absorption of the solar Lyman-alpha line’, *Geophysical Research Letters*, 25, 79–80, 1998.
- Chabriat, S., und G. Kockarts, Simple parameterization of the absorption of the solar Lyman-alpha line, *Geophysical Research Letters*, 24, 2659–2662, 1997.
- Danneberg, J., Changes in runoff time series in Thuringia and Germany - Mann-Kendall trend test and extreme value analysis, *Adv. Geosci.*, 31, 49–56, 2012.
- Douglass, A., und V. Fioletov, Stratospheric ozone and surface ultraviolet radiation, S. pp.516, 2011.
- Eyring, V., M. P. Chipperfield, M. A. Giorgi, D. E. Kinnison, E. Manzani, K. Matthes, P. A. Newman, S. Pawson, T. G. Shepherd, und D. W. Waugh, Overview of the New CCMVal Reference and Sensitivity Simulations in Support of Upcoming Ozone and Climate Assessments and the Planned SPARC CCMVal Report, *SPARC Newsletter*, 30, 20–26, 2008.
- Fomichev, V. I., und G. M. Shved, Net radiative heating in the middle atmosphere, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 50, 671–688, 1988.

- Fomichev, V. I., J.-P. Blanchet, und D. S. Turner, Matrix parameterization of the 15 mm CO<sub>2</sub> band cooling in the middle and upper atmosphere for variable CO<sub>2</sub> concentration, *J. Geophys. Res.*, 103, 11.505–11.528, 1998.
- Fouquart, Y., und B. Bonnel, Computation of solar heating of the earth's atmosphere: A new parameterization, *Beitr. Phys. Atmos.*, 53, 35–62, 1980.
- Garcia, R. R., D. R. Marsh, D. E. Kinnison, B. A. Bouville, und F. Sassi, Simulation of secular trends in the middle atmosphere and 1950–2003, *J. Geophys. Res.*, 112, D09301, 2007.
- Gerding, M., J. Höffner, J. Lautenbach, M. Rauthe, und F.-J. Lübken, Seasonal variation of nocturnal temperatures between 1 and 105 km altitude at 54°N observed by lidar, *Atmos. Chem. Phys.*, 8, 7465–7482, 2008.
- Gleisner, H., P. Thejll, M. Stendel, E. Kaas, und B. Machenhauer, Solar signals in tropospheric re-analysis data: Comparing NCEP/NCAR and ERA40, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 67, 785–791, 2005.
- Hair, J. F., R. E. Anderson, R. L. Tatham, und W. C. Black, Multivariate Data Analysis, *Macmillan Publishing Company, New York, 3rd ed*, 1995.
- Hamed, K. H., und A. R. Rao, A modified Mann-Kendall trend test for autocorrelated data?, *Journal of Hydrology*, 204, 182–196, 1998.
- Hofmann, D. J., und S. Solomon, Ozone destruction through heterogeneous chemistry following the eruption of el chichon, *Journal of Geophysical Research*, 94, 029–5041, 1989.
- Huxol, S., Trendanalyse von Zeitreihen der Komponenten des Wasserkreislaufes im Einzugsgebiet der Dreisam zur prozessorientierten Beurteilung hydrologischer Klimafolgen, Masterarbeit, Institut für Hydrologie der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i. Br., 2007.
- IPCC-Report, Kapitel 7: Coupling between changes in the Climate System and Biogeochemistry, *Tech. rep.*, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, 2007.
- Jöckel, P., R. Sander, A. Kerkweg, H. Trost, und J. Lelieveld, Technical Note: The Modular Earth Submodel System (MESSy) - a new approach towards Earth System Modeling, *Atmos. Chem. Phys.*, 5, 433–444, 2005.
- Jöckel, P., H. Tost, A. Pozzer, C. Brühl, J. Buchholz, L. Ganzeveld, P. Hoor, A. Kerkweg, M. G. Lawrence, R. Sander, B. Steil, G. Stiller, M. Tanarthe, D. Taraborrelli,

- J. van Aardenne, und J. Lelieveld, The atmospheric chemistry general circulation model ECHAM5/MESSy1: consistent simulation of ozone from their surface to the mesosphere, *Atmos. Chem. Phys.*, 6, 5067–5104, 2006.
- Keckhut, P., F. J. Schmidlin, A. Hauchecorne, und M. L. Chanin, Stratospheric and mesospheric cooling trend estimates from U.S. rocketsondes at low latitude stations (8°S–34°N), taking into account instrumental changes and natural variability, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 61, 447–459, 1999.
- Keeling, C., R. B. Bacastow, A. E. Bainbridge, C. A. Ekdahl, P. R. Guenther, L. S. Waterman, und J. F. Chin, Atmospheric Carbon Dioxide Variations at Mauna Loa Observatory, Hawaii, *Tellus*, 28, 538–551, 1976.
- Kent, G. S., und R. W. H. Wright, A review of laser radar measurements of atmospheric properties, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 32, 917–945, 1970.
- Kockharts, G., Nitric oxide cooling in the terrestrial thermosphere, *Geophysical Research Letters*, 7, 137–140, 1980.
- Kutepov, A. A., A. G. Feofilov, A. S. Medvedev, A. W. A. Paudlach, und P. Hartogh, Small-scale temperature fluctuations associated with gravity waves cause additional radiative cooling of the mesopause region, *Geophysical Research Letters*, 24, L24,807, 2007.
- Labitzke, K., und M. Kunze, Stratospheric temperatures over the Arctic: Comparison of three data sets, *Meteorol. Z.*, 14, 65–74, 2005.
- Lean, J. L., G. J. Rottman, G. J. Kyle, H. L. Woods, T. N. Hickey, und J. R. Pugga, Detection and parameterization of variations in solar mid- and near-ultraviolet radiation (200–400 nm), *J. Geophys. Res.*, 102, 29,939–29,956, 1997.
- Lean, J. L., G. J. Rottman, J. Harder, und G. Kopp, SORCE contributions to new understanding of global change and solar variability, *Solar Physics*, 230, S. 27, 2005.
- Lübken, F.-J., Thermal structure of the Arctic summer mesosphere, *J. Geophys. Res.*, 104, 9135–9149, 1999.
- Lübken, F.-J., U. Berger, und G. Baumgarten, Stratospheric and solar cycle effects on long-term variability of mesospheric ice clouds, *Journal of Geophysical Research*, 14, D00,106, 2009.
- Lübken, F.-J., U. Berger, D. Keuer, und E. Becker, Temperaturtrends in der Mesosphäre, *Institutsbericht 2010/2011, Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik e. V. an der Universität Rostock, Ostseebad Kühlungsborn*, 25–28, 2012.

- Lübken, F.-J., U. Berger, und G. Baumgarten, Temperature trends in the midlatitude summer mesosphere, *Journal of Geophysical Research*, 118, 1–14, 2013.
- Mlynczak, M. G., und S. Solomon, A detailed evaluation of the heating efficiency in the middle atmosphere, *Journal of Geophysical Research*, 98, 10,517–10,541, 1993.
- Molina, L. T., und M. J. Molina, Absolute absorption cross sections of ozone in the 185- to 350-nm wavelength region, *J. Geophys. Res.*, 91, 14,501–14,508, 1986.
- Moosmüller, G., *Methoden der empirischen Wirtschaftsforschung, Pearson-Studium, München, Kapitel 1.4: Trend- und Saisonbereinigung*, 2004.
- Murgatroyd, R. J., The Global Circulation of the Atmosphere, *Poy. Meteor. Soc.*, S. 159, 1969.
- Mäder, J. A., Haupteinflussfaktoren auf das stratosphärische ozon in der nördlichen hemisphäre, Doktorarbeit, Eidgenössische technische Hochschule Zürich, 2004.
- Nissen, K. M., K. Matthes, U. Langematz, und B. Mayer, Towards a better representation of the solar cycle in general circulation models, *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 5391–5400, 2007.
- Ogibalov, V. P., und V. I. Fomichev, Parametrization of solar heating by the near-IR CO<sub>2</sub> bands in the mesosphere, *Adv. Space Res.*, 32, 759–764, 2003.
- Randel, W. J., K. P. Shine, J. Austin, J. Barnett, C. Claud, N. P. Gillett, P. Keckhut, U. Langematz, R. Lin, C. Long, C. Mears, A. Miller, J. Nash, D. J. Seidel, D. W. J. Thomas, F. Wu, und S. Yoden, An update of observed stratospheric temperature trends, *Journal of Geophysical Research*, 114, DO2107, 2009.
- Rienicker, M. M., MERRA: NASA's Modern-Era Retrospective Analysis for Research and Applications, *J. Climate*, 24, 3624–3648, 2011.
- Roble, R. G., und R. E. Dickinson, How will changes in carbon dioxide and methane modify the mean structure of the mesosphere and thermosphere?, *Geophysical Research Letters*, 16, 1441–1444, 1989.
- Roeckner, E., G. Bäuml, L. Bonaventura, R. Brokopf, M. A. Giorgetta, S. Hagemann, I. Kirchner, L. Kornblueh, E. Manzini, A. Rhodin, U. Schulzweida, und A. Tompkins, The atmospheric general circulation model ECHAM 5. PART I: Model description, *MPI-Report*, 349, 127pp., 2003.
- Roeckner, E., R. Brokopf, M. Esch, M. Giorgetta, S. Hagemann, und L. Kornblueh, Sensitivity od Simulated Climate to Horizontal and Vertical Resolution in the ECHAM5 Atmosphere Model, *J. Climate*, 19, 3771–3791, 2006.

- Sander, R., A. Kerkweg, P. Jöckel, und J. Lelieveld, Technical Note: The new comprehensive atmospheric chemistry module MECCA, *Atmos. Chem. Phys.*, 5, 445–450, 2005.
- Sander, S. P., R. R. Friedl, D. M. Golden, M. J. Kurylo, R. E. Huie, V. L. Orkin, G. K. Morrtgat, A. R. Ravishankara, C. E. Kolb, M. J. Molina, und B. J. Finlayson-Pitts, Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies, *Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, Evaluation Number 14*, Publication 02–25, 2003.
- Schild, K. H., Zeitreihen Ökonometrie, *Tech. rep.*, Wirtschaftswissenschaften Universität Marburg, 2013.
- Schönwiese, C.-D., und R. Janoschitz, Klima-Trendatlas Deutschland 1901-2000, *Tech. rep.*, Institut für Atmosphäre und Umwelt der Universität Frankfurt/Main, 2008.
- Sen, P. K., Estimates of the Regression Coefficient Based on Kendall's Tau, *Journal of the American Statistical Association*, 63, 1379–1389, 1968.
- Shine, K. P., und J. A. Rickaby, Solar radiative heating due to the absorption by ozone, in: Ozone in the atmosphere and edited by: Bojkov and R. D. and Fabian and P.,A. Deepak and, *Hampton, Va.*, 597–600, 1989.
- Shine, K. P., J. J. Barnett, und W. J. Randel, Temperature trends derived from Stratospheric Sounding Units radiance: The effect of increasing CO<sub>2</sub> on the weighting function, *Geophysical Research Letters*, 35, L02,710, 2008.
- Sonnemann, G. R., On the winter anomaly of the night-to-day ratio of ozone in the middle to upper mesosphere in middle to high latitudes, *Adv. Space Res.*, 40, 846–854, 2007.
- Steinbrecht, W., H. Claude, F. Schönenborn, I. S. McDermid, T. Leblanc, S. Godin-Beekmann, P. Keckhut, A. Hauchecorne, J. A. E. V. Gijsel, D. P. J. Swart, G. E. Bodecker, A. Parrish, I. S. Boyd, N. Kämpfer, K. Hocke, R. S. Stolarski, S. M. Frith, L. W. Thomason, E. E. Remsberg, C. von Savigny, A. Rozanov, und J. P. Burrows, Ozone and temperature trends in the upper stratosphere at five stations of the Network for the Detection of Atmospheric Composition Change, *International Journal of Remote Sensing*, 30, 3875–3886, 2009.
- Stocker, H., Einführung in die angewandte Ökonometrie, *Tech. rep.*, Institut für Wirtschaftstheorie, -politik und -geschichte, Universität Innsbruck, 2013.
- Strobel, D. F., Parametrization of the atmospheric heating rate from 15 to 120 km due to O<sub>2</sub> and O<sub>3</sub> absorption of solar radiation, *Journal of Geophysical Research*, 83, 6225–6230, 1978.
- Thomas, G. E., Is the polar Mesosphere the miner's canary of global change?, *Adv. Space Res.*, 18, 149–158, 1996.

- USSA76, *U.S. Standard Atmosphere 1976*, U.S. Government Printing Office, 1976.
- von Storch, H., *Analysis of Climate Variability - Applications of Statistical Techniques*, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1995.
- von Zahn, U., und U. Berger, *Langfristige Änderungen in Eigenschaften der oberen Atmosphäre*, Ferdinand Schöningh, Paderborn, 2010.
- Wang, L., C.-Z. Zou, und H. Qian, Construction of Stratospheric Temperature Data Records from Stratospheric Sounding Units, *American Meteorological Society*, 25, 2931–2946, 2012.
- WMO, Atmospheric ozone 1985, *Global Ozone Res. Monit. Proj. Rep. 16/1, Genve*, 1986.
- WMO, 'Global Ozone' Past and Future, *Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2002, Global Ozone Research and Monitoring Project-Report*, 47, Kapitel 4, 2002.
- WMO, 'Global Ozone' Past and Future, *Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2006, Global Ozone Research and Monitoring Project-Report*, 50, Kapitel 4, 2007.
- Yue, S., P. Pilon, B. Phinney, und G. Cavadias, The influence of autocorrelation on the ability to detect trend in hydrological series, *Hydrological Processes*, 16, 1807–1829, 2002.
- Zhu, X., An accurate and efficient radiation algorithm for middle atmosphere model, *J. Atmos. Sci.*, 51, 3593–3614, 1994.
- Zönnchen, J. H., Modellierung der dreidimensionalen Dichteverteilung des geokoronalen Neutralwasserstoffes auf Basis von TWINS Ly-alpha-Intensitätsmessungen, Doktorarbeit, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, 2006.

Erklärung zu meiner Masterarbeit mit dem Titel

**“Temperaturtrends in der mittleren Atmosphäre“**

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel genutzt habe. Alle wörtlich oder inhaltlich übernommenen Stellen habe ich als solche gekennzeichnet.

Ich erkläre hiermit weiterhin, dass die vorgelegte Arbeit zuvor weder von mir noch von einer anderen Person an dieser oder einer anderen Hochschule eingereicht wurde.

