

VEREIN
DEUTSCHER
INGENIEURE

Fernmessverfahren
Messen in der Atmosphäre nach dem
Passiv-DOAS-Prinzip
Messen von Emissionen und Immissionen
Remote sensing
Atmospheric measurements using passive DOAS
Gaseous emissions and ambient air measurements

VDI 4212

Ausg. deutsch/englisch
Issue German/English

*Der Entwurf dieser Richtlinie wurde mit Ankündigung im Bundesanzeiger einem öffentlichen Einspruchsverfahren unterworfen.
Die deutsche Version dieser Richtlinie ist verbindlich.*

*The draft of this standard has been subject to public scrutiny after announcement in the Bundesanzeiger (Federal Gazette).
The German version of this standard shall be taken as authoritative. No guarantee can be given with respect to the English translation.*

| Inhalt | Seite | Contents | Page |
|---|-----------|---|-----------|
| Vorbemerkung | 2 | Preliminary note | 2 |
| Einleitung | 2 | Introduction | 2 |
| 1 Anwendungsbereich | 3 | 1 Scope | 3 |
| 2 Grundlagen | 3 | 2 Principle | 3 |
| 2.1 Passiv-DOAS-Prinzip | 3 | 2.1 Passive DOAS principle | 3 |
| 2.2 Säulendichte | 6 | 2.2 Column density. | 6 |
| 2.3 Differenzielle optische Dichte | 6 | 2.3 Differential optical density. | 6 |
| 2.4 Fraunhofer-Referenzspektrum | 8 | 2.4 Fraunhofer reference spectrum | 8 |
| 2.5 Ringeffekt | 10 | 2.5 Ring effect | 10 |
| 2.6 Effektiver Lichtweg | 10 | 2.6 Effective optical path length | 10 |
| 2.7 Schräge und vertikale Säulendichten | 10 | 2.7 Slant and vertical column densities | 10 |
| 2.8 Streuung | 11 | 2.8 Scattering. | 11 |
| 3 Übersicht über passive DOAS-Verfahren | 12 | 3 Overview of passive DOAS methods | 12 |
| 3.1 Allgemeines | 12 | 3.1 General remarks | 12 |
| 3.2 Säulendichtemessungen | 14 | 3.2 Column density measurements | 14 |
| 3.3 Konzentrationsmessungen | 20 | 3.3 Concentration measurements | 20 |
| 3.4 Profilmessungen | 21 | 3.4 Profile measurements | 21 |
| 3.5 Flussmessungen | 28 | 3.5 Flux measurements. | 28 |
| 4 Anwendungsbeispiele | 31 | 4 Application examples | 31 |
| 4.1 Säulendichtemessung (Immissionsmessungen) | 31 | 4.1 Column density measurement (ambient air measurements) | 31 |
| 4.2 Konzentrationsmessungen | 35 | 4.2 Concentration measurements | 35 |
| 4.3 Profilmessungen | 36 | 4.3 Profile measurements | 36 |
| 4.4 Flussmessungen mittels MAX-DOAS. | 38 | 4.4 Flux measurements with MAX-DOAS | 38 |
| 5 DOAS-Instrumente und Mindestanforderungen. | 41 | 5 DOAS-instruments and minimum requirements | 41 |
| 5.1 Prinzipieller Aufbau | 41 | 5.1 Basic configuration. | 41 |
| 5.2 Allgemeine Mindestanforderungen | 42 | 5.2 General minimum requirements | 42 |
| 5.3 Spezielle Mindestanforderungen. | 46 | 5.3 Special minimum requirements | 46 |
| 5.4 Beispiele für Messgeräte | 47 | 5.4 Examples of measuring instruments. | 47 |

VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) – Normenausschuss

Fachbereich Umweltmesstechnik

| Inhalt | Seite |
|--|-------|
| 6 Durchführung der Messungen | 51 |
| 6.1 Wahl des Messstandorts | 51 |
| 6.2 Messaufbau | 52 |
| 6.3 Ablauf der Messungen | 53 |
| 7 Auswertung | 55 |
| 7.1 Spektrale DOAS-Auswertung | 55 |
| 7.2 Umrechnung in vertikale Säulen | 67 |
| 7.3 Umrechnung zu Vertikalprofilen | 67 |
| 8 Kalibrierung | 69 |
| 9 Qualitätssicherung | 69 |
| 10 Vorzüge und Grenzen des Messverfahrens | 71 |
| Schrifttum | 72 |

| Contents | Page |
|--|------|
| 6 Performance of measurement | 51 |
| 6.1 Choice of measurement site | 51 |
| 6.2 Measurement set-up | 52 |
| 6.3 Measurement procedure | 53 |
| 7 Evaluation | 55 |
| 7.1 Spectral DOAS evaluation | 55 |
| 7.2 Conversion into vertical columns | 67 |
| 7.3 Conversion into vertical profiles | 67 |
| 8 Calibration | 69 |
| 9 Quality assurance | 69 |
| 10 Advantages and limitations of the measuring method | 71 |
| Bibliography | 72 |

Vorbemerkung

Der Inhalt dieser Richtlinie ist entstanden unter Beachtung der Vorgaben und Empfehlungen der Richtlinie VDI 1000.

Alle Rechte, insbesondere die des Nachdrucks, der Fotokopie, der elektronischen Verwendung und der Übersetzung, jeweils auszugsweise oder vollständig, sind vorbehalten.

Die Nutzung dieser Richtlinie ist unter Wahrung des Urheberrechts und unter Beachtung der Lizenzbedingungen (www.vdi.de/richtlinien), die in den VDI-Merkblättern geregelt sind, möglich.

Allen, die ehrenamtlich an der Erarbeitung dieser Richtlinie mitgewirkt haben, sei gedankt.

Einleitung

Die passive differenzielle optische Absorptionsspektroskopie (DOAS) ist seit den frühen 1970er-Jahren eine weit verbreitete Methode zur Fernerkundung von Spurengasen in der Atmosphäre. Neben der ursprünglichen Anwendung zur Messung von stratosphärischen Absorbern gab es in den letzten Jahren eine Vielzahl von technischen und algorithmischen Entwicklungen, die es ermöglichen, Spurengase auch in der Troposphäre zu messen und dabei Mischungsverhältnisse in Bodennähe und sogar grob aufgelöste Vertikalprofile abzuleiten. Gleichzeitig werden Instrumente für DOAS-Messungen auf Ballons, Flugzeugen und Satelliten eingesetzt, wodurch der Anwendungsbereich auf Messungen in allen Höhen und auf globaler Skala erweitert wird. Es ist mittlerweile eine Vielzahl von Passiv-DOAS-Verfahren bekannt, die einen weiten Bereich der Untersuchung der Atmosphäre abdecken.

Preliminary note

The content of this standard has been developed in strict accordance with the requirements and recommendations of the standard VDI 1000.

All rights are reserved, including those of reprinting, reproduction (photocopying, micro copying), storage in data processing systems and translation, either of the full text or of extracts.

The use of this standard without infringement of copyright is permitted subject to the licensing conditions specified (www.vdi.de/richtlinien) in the VDI Notices.

We wish to express our gratitude to all honorary contributors to this standard.

Introduction

Passive differential optical absorption spectroscopy (DOAS) has been a widespread method for the remote sensing of trace gases in the atmosphere since the early 1970s. In addition to its original application for the measurement of stratospheric absorbers, there have been a multitude of technical and algorithmic developments in the last few years that make it possible to also measure trace gases in the troposphere as well as derive mixing ratios at ground level and even coarsely resolved vertical profiles. Furthermore, instruments are employed for DOAS measurement on balloons, aircraft, and satellites, thus extending the application range to measurement at all altitudes and on the global scale. A large number of passive DOAS methods are now known that cover a broad range of applications in the investigation of the atmosphere.

Mit der raschen Weiterentwicklung in wissenschaftlichen Anwendungen wird die passive DOAS-Messung zunehmend auch für andere Anwendungsbereiche interessant, denn sie ermöglicht automatische Messungen von verschiedenen Spurenstoffen und Aerosoleigenschaften in Bereichen, die nicht ohne Weiteres für In-situ-Messungen zugänglich sind. Insbesondere sind dies Abgasfahnen von Punkt- und Flächenemittern, deren Emissionen mit dieser Methode abgeschätzt werden können. Dies können Schornsteine, Vulkane, aber auch Industrieanlagen oder ganze Städte sein. Die Bestimmung von Konzentrationen und Profilen von zahlreichen Spurenstoffen und Aerosoleigenschaften ist die am weitesten verbreitete Anwendung.

Messungen mit Passiv-DOAS-Verfahren haben eine Reihe von Vorteilen. Die verwendeten Instrumente sind meist klein, robust, relativ kostengünstig und wartungsarm. Sie eignen sich damit auch für automatisierte Langzeitmessungen. Das Messverfahren beruht auf der Absorptionsspektroskopie und ist damit relativ wenig anfällig für Querempfindlichkeiten, Drift und Kalibrierprobleme. Je nach Anwendungsfall können mit dieser Methode auch mehrere Spurengase gleichzeitig gemessen werden.

1 Anwendungsbereich

Diese Richtlinie beschreibt das passive DOAS-Messverfahren mit natürlichen Strahlungsquellen, das vor allem für die Absorptionsspektroskopie im ultravioletten sowie im sichtbaren und nahinfraroten Spektralbereich zum Einsatz kommt. Aufbau, Betrieb, Mindestanforderungen, Kalibrierung und Datenauswertung von Passiv-DOAS-Messsystemen sowie deren Anwendung für Messungen von gasförmigen Komponenten (z.B. SO₂, NO₂, O₃, HCHO, H₂O, HNO₂) sowie von Aerosoleigenschaften in der Atmosphäre werden erläutert. Das Verfahren wird durch eine Vielzahl an Anwendungen illustriert.

With the rapid ongoing development of scientific applications, there is growing interest in the passive DOAS technique in other fields of application, since it permits the automatic measurement of different trace substances and aerosol properties in areas that are not immediately accessible to in-situ measurement. Specifically, these are the exhaust gas plumes of point and area emitters whose emissions can be estimated with this method. These can be chimneys, volcanoes, or also industrial plants or entire cities. The determination of concentrations and profiles of numerous trace substances and aerosol properties is the most widespread application.

Measurements with passive DOAS methods have a number of advantages. The instruments employed are in most cases small, heavy-duty, relatively inexpensive, and low on maintenance. They are therefore also suitable for automated long-time measurements. The measuring method is based on absorption spectroscopy and is thus relatively insusceptible to cross-sensitivities, drift, and calibration problems. In certain fields of application, several trace gases can be measured simultaneously with this method.

1 Scope

This standard describes the passive DOAS measuring method with natural radiation sources that is used especially in absorption spectroscopy in the ultraviolet (UV) as well as in the visible (VIS) and near-infrared (NIR) spectral range. The standard explains the design, operation, minimum requirements, calibration, and data evaluation of passive DOAS measuring systems as well their application in the measurement of gaseous components (e.g. SO₂, NO₂, O₃, HCHO, H₂O, and HNO₂) and aerosol properties in the atmosphere. The method is illustrated by a large number of application examples.