

Abschlussbericht zum DLR-Vorhaben

# **Validation von Sentinel 5 Precursor lv2 Datenprodukten mit bodengestützten DOAS- Messungen (MAXGRAD)**

Verbundvorhaben der Universität Bremen und des MPIC Mainz

FKZ 50EE1709A

**Bewilligungszeitraum:** 01.01.2018 - 31.12.2021

**Projektleitung:** Dr. A. Richter

**Bearbeitet von:**

Dr. A. Richter <http://orcid.org/0000-0003-3339-212X>

Kezia Lange <https://orcid.org/0000-0003-4435-3839>

Universität Bremen / FB1  
Institut für Fernerkundung  
Institut für Umweltphysik  
Postfach 33 04 40  
D-28334 Bremen

---

## Inhaltsverzeichnis

1	Kurze Darstellung der Vorhabensziele .....	3
1.1	Zusammenfassung der Aufgabenstellung .....	3
1.2	Voraussetzungen und Randbedingungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde. ....	3
1.3	Planung und Ablauf des Vorhabens .....	3
1.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand zu Vorhabensbeginn .....	4
1.5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen.....	4
2	Eingehende Darstellung der Vorhabensergebnisse .....	5
2.1	Untersuchungen zur räumlichen und zeitlichen Variabilität von NO <sub>2</sub> in Bremen.....	5
2.1.1	Untersuchung der zeitlichen Variabilität der NO <sub>2</sub> -Säulen.....	5
2.1.2	Aufbau und Betrieb eines DOAS-Gerätes auf einer Straßenbahn.....	7
2.2	Nutzung der Bremer Daten zur Validation des operationellen S5P NO <sub>2</sub> -Produkts.....	11
2.2.1	Beitrag zur koordinierten Validation von S5P-Daten .....	11
2.2.2	Validation von S5P-Daten während der S5P-VAL-DE-Ruhr -Kampagne .....	11
2.3	Ableitung von NO <sub>x</sub> Emissionsstärken aus S5P NO <sub>2</sub> Daten .....	16
2.4	Ausblick.....	19
2.5	Referenzen .....	19
2.5.1	Referenzierte Artikel .....	19
2.5.2	Im Vorhaben entstandene referenzierte Artikel .....	20
2.5.3	Im Vorhaben entstandene Poster .....	20
2.5.4	Im Vorhaben entstandene Vorträge .....	21
2.5.5	Im Vorhaben entstandene Akademische Abschlussarbeiten.....	21

# 1 Kurze Darstellung der Vorhabensziele

## 1.1 Zusammenfassung der Aufgabenstellung

Das Hauptziel des Vorhabens war es, durch die Nutzung von bestehenden und zusätzlichen bodengebundenen NO<sub>2</sub>-Messungen das operationelle NO<sub>2</sub> Produkt von TROPOMI auf S5P zu validieren und zu nutzen. Dies sollte insbesondere auch die Deutsche Rolle bei der Nutzung und Verbesserung von S5P Daten stärken.

Um dieses Ziel zu erreichen, wurden im Vorhaben verschiedene Schwerpunkte verfolgt:

- Die Untersuchung von horizontalen NO<sub>2</sub>-Gradienten auf Skalen unterhalb der TROPOMI Auflösung mit Hilfe von stationären und mobilen DOAS-Messungen.
- Die Validation von TROPOMI NO<sub>2</sub>-Messungen mit Hilfe von bodengestützten DOAS Messungen von stationären und mobilen Plattformen aus.
- Die Nutzung von TROPOMI NO<sub>2</sub>-Messungen zur Abschätzung von NO<sub>x</sub>-Emissionsstärken ausgewählter Punktquellen unter besonderer Berücksichtigung des Einflusses der Corona-Pandemie.
- Die unmittelbare Beteiligung im S5P Projekt durch die Teilnahme an der Mission Advisory Group / Quality Working Group (durch den Projektleiter Andreas Richter).

Die Arbeiten waren Bestandteil der Deutschen Beteiligung am Sentinel-5P Projekt.

## 1.2 Voraussetzungen und Randbedingungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Das Institut für Umweltphysik der Universität Bremen verfügt über langjährige Erfahrung sowohl in der Auswertung und Interpretation von Satellitendaten als auch bei der Durchführung von Validationsmessungen mit DOAS-Geräten auf unterschiedlichen Plattformen. Insbesondere werden seit vielen Jahren eine Reihe von MAX-DOAS Instrumenten betrieben, die operationell Validationsdaten zur Verfügung stellen. Darüber hinaus werden in Kampagnen mobile DOAS-Messungen von Autos durchgeführt und das Flugzeuggestützte AirMAP eingesetzt.

Zum Start des Vorhabens lagen noch keine S5P NO<sub>2</sub>-Daten vor. Im Laufe des Vorhabens wurden dann verschiedene Versionen des operationellen Produkts verfügbar und der in einem Vorgängerprojekt entwickelte Verifikationsalgorithmus für TROPOMI NO<sub>2</sub> konnte auf die operationellen lv1-Daten angewendet werden. Dadurch war die Möglichkeit vorhanden, gezielt einzelne Schritte der NO<sub>2</sub>-Auswertung zu verändern und ihre Auswirkungen auf den Vergleich mit Validationsdaten zu untersuchen.

Die sich während des Projektzeitraums entwickelnde Corona-Epidemie führte zu Verzögerungen bei den experimentellen Arbeiten da zeitweise die Labore am IUP-Bremen nicht benutzt werden konnten, Kampagnen verschoben wurden und das für den Einsatz auf einer Bremer Straßenbahn entwickelte DOAS-Gerät für einen Zeitraum von fast einem Jahr nicht in die Straßenbahn eingebaut werden konnte. Dadurch kam es insgesamt zu Verzögerungen im Vorhaben; die Vorhabensziele konnten aber letztlich erreicht werden.

## 1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Vorhaben lässt sich in die oben aufgeführten unterschiedlichen Aspekte unterteilen, die jeweils ihre eigenen Anforderungen an Planung und Ablauf hatten:

- Die Untersuchung von räumlichen Gradienten basiert vornehmlich auf kontinuierlichen Messungen von Bodenstationen die über den gesamten Zeitraum durchgeführt wurden.
- Das mobile Straßenbahn-DOAS musste zunächst entwickelt und gebaut werden, um dann auf einer Straßenbahn integriert und betrieben zu werden. Wie schon angesprochen verzögerte sich dieser Aspekt durch die Maßnahmen zur Eindämmung der Corona-Epidemie.
- Die Kampagnen-basierten Validationsmessungen in Nordrhein-Westfalen und Wien wurden während relativ kurzer Zeiträume durchgeführt, bedurften aber langfristiger Planung und Abstimmung mit anderen Kampagnenteilnehmern.
- Die Auswertung und Interpretation der Kampagnen konnte erst nach Abschluss der Kampagnen begonnen werden und war auf die Reprozessierung des TROPOMI NO<sub>2</sub>-Datensatzes mit der aktuellen Produktversion angewiesen.
- Die Ableitung der NO<sub>x</sub>-Emissionsstärken aus TROPOMI-Daten setzte die Verfügbarkeit eines ausreichend großen TROPOMI Datensatzes voraus und konnte deshalb erst in 2020 begonnen werden.

Insgesamt wurde der Ablauf des Vorhabens durch die Corona-Beschränkungen deutlich verzögert.

#### **1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand zu Vorhabensbeginn**

Der wissenschaftliche und technische Stand zu Vorhabensbeginn ist im Vorhabensantrag detailliert dargestellt.

Das IUP-Bremen betreibt seit 1993 bodengebundene DOAS-Instrumente, zunächst nur in Zenit-Geometrie, später als MAX-DOAS mit mehreren Elevationswinkeln und dann auch mit mehreren Azimut-Blickrichtungen. Diese Instrumente und ihre Messungen standen im Vorhaben zur Verfügung.

Das IUP-Bremen verfügt auch über mobile DOAS-Geräte für Auto-DOAS-Messungen, die im Vorhaben zum Einsatz kamen und den Ausgangspunkt für die Entwicklung des Straßenbahn-DOAS-Gerätes bildeten.

Da zu Vorhabensbeginn noch keine S5P-Daten zur Verfügung standen, war über die Qualität des operationellen NO<sub>2</sub>-Produktes noch nichts bekannt. Allerdings waren durch die Entwicklung des TROPOMI Verifikationsalgorithmus für NO<sub>2</sub> am IUP-Bremen und die enge Zusammenarbeit mit KNMI, DLR, RAL und anderen an S5P beteiligten Instituten detaillierte Kenntnisse zum TROPOMI-Instrument und seinen Datenprodukten vorhanden. Für die Planung der Validation konnte auf die umfängliche Erfahrung mit der Validation von Messungen der GOME, SCIAMACHY und OMI-Instrumente zurückgegriffen werden.

Da das IUP-Bremen im Bereich der Auswertung von Satellitendaten auf fast 30 Jahre Erfahrung zurückgreifen kann, und insbesondere zu NO<sub>2</sub> schon zahlreiche Studien am IUP-Bremen durchgeführt wurden, waren die Voraussetzungen für eine schnelle Verarbeitung und Interpretation der TROPOMI NO<sub>2</sub>-Daten gegeben.

#### **1.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen**

Das Vorhaben ist ein Verbundvorhaben der Universität Bremen und des MPIC Mainz. Der Schwerpunkt der Aktivitäten am IUP-Bremen lag auf der Erweiterung und Analyse der mobilen Messungen, den Validationskampagnen und der Nutzung der TROPOMI NO<sub>2</sub>-Daten. Die stationären MAX-DOAS Messungen wurden vor allem am MPIC Mainz ausgewertet.

Im Rahmen der Projekte MPC und FRM4DOAS gab es eine regelmäßige Zusammenarbeit mit anderen an der TROPOMI-Validation beteiligten Institutionen (DLR, ESA, SRON, BIRA, KNMI, RAL).

Darüber hinaus wurden im Rahmen von zahlreichen Workshops, Konferenzen und Veröffentlichungen die wissenschaftlichen Vorhabensergebnisse in der Wissenschaftscommunity bekannt gemacht und diskutiert.

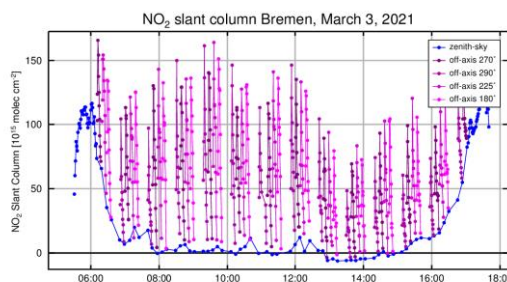
## 2 Eingehende Darstellung der Vorhabensergebnisse

### 2.1 Untersuchungen zur räumlichen und zeitlichen Variabilität von NO<sub>2</sub> in Bremen

#### 2.1.1 Untersuchung der zeitlichen Variabilität der NO<sub>2</sub>-Säulen

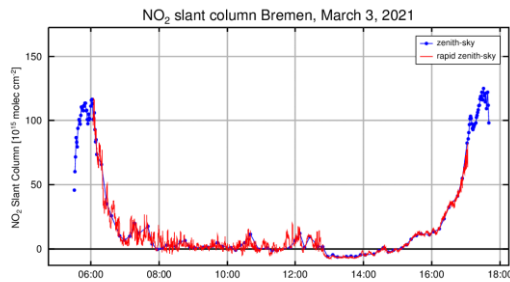
Bei bodengestützte MAX-DOAS NO<sub>2</sub>-Messungen werden üblicherweise sequentiell Messungen in verschiedenen Blickrichtungen durchgeführt. Im Fall des Bremer Gerätes werden dabei nicht nur 15 Messungen unter verschiedenen Elevationswinkeln durchgeführt, sondern auch Messungen in unterschiedlichen Azimutrichtungen. Der Abstand zwischen zwei Messungen in die selbe Azimutrichtung beträgt dadurch ca. 1 Stunde.

Wenn die NO<sub>2</sub>-Verteilung in der Atmosphäre räumlich inhomogen ist, wird an einem festen Messstandort je nach Windrichtung und Windgeschwindigkeit ein variables NO<sub>2</sub>-Signal gemessen. Das Ausmaß der Variationen hängt dabei von der Stärke der räumlichen Variabilität ab aber auch von der Windgeschwindigkeit. Diese Variabilität wirkt auf unterschiedliche Weise auf die Messungen: Einerseits gibt es im Prinzip die Möglichkeit, aus stationären Messungen Informationen über die räumliche Verteilung des NO<sub>2</sub> entlang der Windrichtung abzuleiten. Andererseits beeinflusst die Variabilität auch die Genauigkeit und Aussagekraft der Messung selbst. Der letztere Effekt wurde anhand von parallelen Messungen mit mehreren DOAS-Geräten in Bremen überprüft.



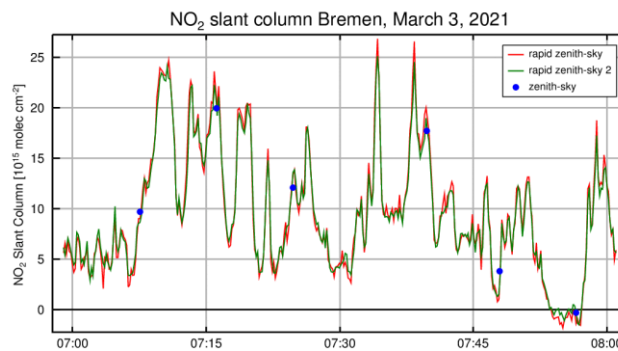
**Abb. 1: Schräge NO<sub>2</sub>-Säulen aus MAX-DOAS Messungen in Bremen vom 3.3.2021. Die blaue Linie sind Zenitmessungen, die übrigen Messungen sind unter unterschiedlichen Elevationswinkeln in vier verschiedene Azimutrichtungen aufgenommen worden.**

In Abb. 1 ist ein typisches Ergebnis für schräge NO<sub>2</sub>-Säulen des MAX-DOAS-Gerätes in Bremen gezeigt. Während die Zenitmessungen in etwa den erwarteten U-Verlauf als Funktion des Sonnenzenitwinkels zeigen, ist in den Horizontmessungen eine starke Abhängigkeit vom Elevationswinkel zu sehen die auf hohe troposphärische NO<sub>2</sub>-Konzentrationen zurückzuführen ist. Die Größe der NO<sub>2</sub>-Säulen aus den Horizontmessungen variiert über den Tag und in geringerem Maße auch über die vier Azimutrichtungen. In den Zenitmessungen ist eine Variabilität zu erkennen, die offensichtlich mit der Größe der troposphärischen Säule zusammenhängt.



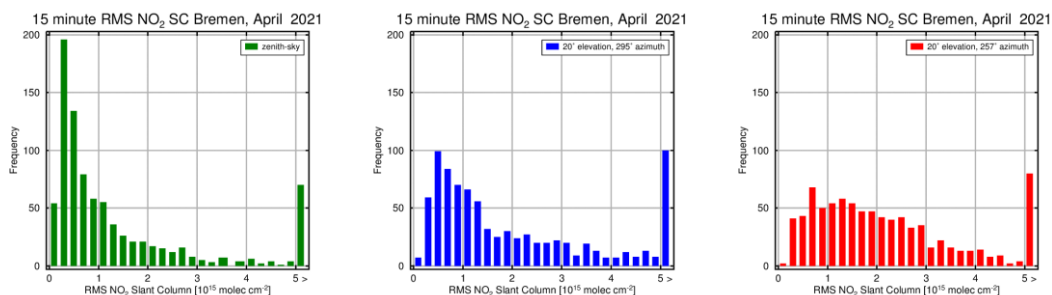
**Abb. 2: Zenitmessungen vom 3.3.2021 mit zwei Messgeräten mit unterschiedlicher zeitlicher Abtastung: Standardmessungen (15 Minuten, blau) und schnelle Messungen (10 Sekunden, rot).**

In Abb. 2 sind zusätzlich zu den Zenitmessungen des Standardgerätes auch parallel Messungen eines zweiten Gerätes gezeigt, das mit wesentlich höherer Geschwindigkeit Messungen nimmt. Es ist deutlich zu erkennen, dass es vormittags zwischen den Messungen des Standardgerätes zu schnellen Variationen in der Größe der  $\text{NO}_2$ -Säule kommt. Am Nachmittag hingegen ist kaum ein Unterscheid zwischen den beiden Messungen zu erkennen.



**Abb. 3: Vergleich der Zenitmessungen von 3 Instrumenten am Morgen des 3.3.2021 in Bremen. Die Zeitaufösung der beiden schnellen Geräte (rot und grün) ist 10 Sekunden.**

Dass diese Variationen die Situation in der Atmosphäre beschreiben und nicht auf Ungenauigkeiten des Messgerätes zurückgehen ist in Abb. 3 gezeigt, in dem eine Stunde Messungen für insgesamt drei Geräte dargestellt sind – zwei schnelle und das Standardgerät. Die Messungen der beiden schnellen Geräte stimmen hervorragend überein, und auch die Messungen des Standardgerätes passen ausgezeichnet zu den Messungen der schnellen Geräte, sind jedoch wesentlich seltener. Zwischen den Messungen des Standardgerätes kommt es zu starker Variabilität der  $\text{NO}_2$ -Säule, die durch die seltenen Messungen des Standardgerätes nicht aufgelöst werden können.



**Abb. 4: Häufigkeitsverteilungen der  $\text{NO}_2$ -Standardabweichungen von 15-Minuten Zeitabschnitten für April 2021 in Bremen. Gezeigt sind Messungen in Zenitrichtung (links), Messungen unter 20° Elevationswinkel und 295° Azimut (Mitte) und Messungen unter 20° Elevation und 257° Azimut (rechts).**

Eine statistische Auswertung der Variabilität des NO<sub>2</sub>-Signals für den Monat April 2021 für drei verschiedene Blickgeometrien ist in Abb. 4 gezeigt. Dargestellt ist die Häufigkeitsverteilung der Standardabweichung der Messungen über 15-Minutenabschnitte, ein Maß für die zeitliche Variabilität der NO<sub>2</sub>-Säule. Es ist eine breite Streuung der RMS-Werte zu beobachten, mit vielen Messungen bei relativ geringer Streuung und einem Anteil von Messungen mit sehr großem RMS. Wie zu erwarten, ist die Variabilität unter 20° Elevation wesentlich größer als bei Zenitmessungen, da eine größere Empfindlichkeit zum troposphärischen NO<sub>2</sub> besteht. Dies hängt allerdings auch vom Blickazimut ab, unter dem gemessen wurde.

Interessant ist der Vergleich der Standardabweichungen mit typischen Messfehlern für DOAS-Messungen. Diese liegen in der Größenordnung  $2 \times 10^{14}$  molec cm<sup>-2</sup>, und damit ganz am linken Rand der Histogramme in Abb. 4. Die Variabilität der NO<sub>2</sub>-Säule über 15 Minuten ist also in vielen Fällen mehr als eine Größenordnung größer als der Messfehler.

Aus diesen Messungen können eine Reihe von Schlussfolgerungen gezogen werden:

1. Die Variabilität der NO<sub>2</sub>-Säulen in städtischen Gebieten kann auf zeitlichen Skalen von Minuten sehr hoch sein (100% und mehr).
2. Dadurch entsteht bei nicht kontinuierlichen Messungen das Problem, dass auch sehr genaue Messungen nicht unbedingt repräsentativ für die atmosphärische Situation sind, wenn die Messrate nicht hoch genug ist.
3. Dies hat Auswirkungen auf die Validation von Satellitenmessungen und die Anwendung von Algorithmen zur Profileitung von MAX-DOAS Messungen, da letztere von einer konstanten atmosphärischen Situation ausgehen.
4. Die hohe zeitliche Variabilität, die hier beobachtet wurde, könnte auch die Tatsache erklären, dass bei der CINDI-2 Vergleichskampagne auch zwischen den besten teilnehmenden DOAS-Geräten Unterschiede in den NO<sub>2</sub>-Säulen beobachtet wurden, die deutlich größer waren als aufgrund der Messfehler zu erwarten (Kreher et al., 2020).

### 2.1.2 Aufbau und Betrieb eines DOAS-Gerätes auf einer Straßenbahn

Um eine Abschätzung der räumlichen Verteilung des NO<sub>2</sub> in Bremen zu erhalten sind mobile DOAS-Messungen eine gute Möglichkeit. Solche Messungen wurden schon in früheren Arbeiten mit Hilfe von Autos durchgeführt (zum Beispiel Schreier et al., 2019) und haben interessante Einblicke in räumliche Inhomogenitäten der NO<sub>2</sub>-Verteilung und wertvolle Beiträge zur Validation von Satellitendaten erbracht (siehe auch Abschnitt 2.2.2). Ein Nachteil dieser Messung ist der hohe zeitliche Aufwand der für die Autofahrten nötig ist.

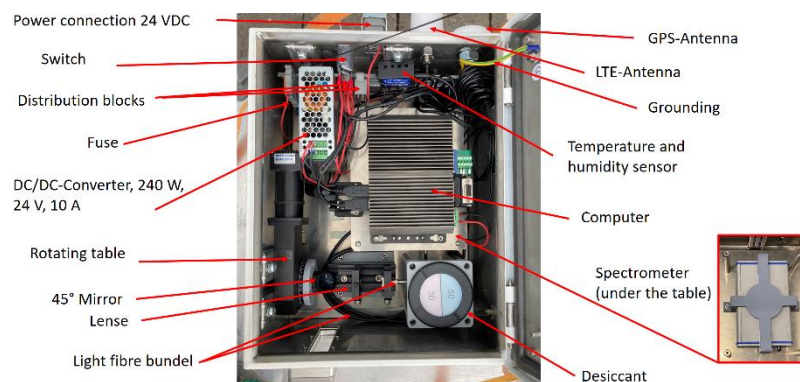
Im Rahmen des Vorhabens wurde deshalb eine Kooperation mit der BSAG (Bremische Straßenbahn AG) initiiert, um ein DOAS-Gerät auf einer Bremer Straßenbahn zu installieren und über einen längeren Zeitraum Messungen während des Normalbetriebs der Bahn durchzuführen. Dadurch werden ohne zusätzlichen Zeitaufwand regelmäßige Messungen entlang des Streckennetzes der Bremer Straßenbahn realisiert. Eine detaillierte Beschreibung von Instrument, Auswerteverfahren und ersten Ergebnissen findet sich in Lange, 2022.

Um einen Betrieb auf einer Straßenbahn zu ermöglichen, musste das Gerät eine Reihe von Anforderungen erfüllen:

- Kompakte Abmessungen
- Unempfindlichkeit gegen Witterungseinflüsse (Regen, Schnee, Sonne)

- Fähigkeit zur unbeaufsichtigten Langzeitmessung
- Stromversorgung über die 24V Gleichspannung der Straßenbahn, Unempfindlichkeit gegen Stromausfälle
- Erfüllung der Sicherheitsvorschriften für den Betrieb auf einer Straßenbahn
- Datentransfer und Wartung über LTE
- GPS zur Standortbestimmung
- Unterdrückung von Vibrationen und Stößen durch den Fahrbetrieb

Ein entsprechendes Gerät wurde auf Basis eines Avantes-Spektrometers realisiert. Das Gerät kann über zwei Fenster Messungen in Zenit- und Horizontrichtungen ( $0^{\circ}$ - $30^{\circ}$  Elevationswinkel) durchführen, die über einen unter  $90^{\circ}$  Reflektionswinkel betriebenen drehbaren  $45^{\circ}$  Spiegel ausgewählt werden. Das Licht wird durch eine Sammellinse in ein Lichtleiterbündel eingekoppelt, das eine effektive Depolarisation des Lichts bewirkt und als Querschnittswandler einen hohen Lichtdurchsatz ermöglicht. Die Messungen werden durch einen passiv gekühlten Industriecomputer betrieben der auch einen Sensor zur Überwachung der Temperatur und Feuchtigkeit in der Gerätebox und Antennen für GPS und LTE angeschlossen hat. Die Stromversorgung ist über einen DC/DC-Wandler realisiert. Um eine übermäßige Erhitzung des Geräts zu verhindern, ist die wasserfeste Gerätebox weiß gestrichen und mit einem zusätzlichen Dach ausgestattet, das auch als Regenschutz dient. Um das Gerät so einfach wie möglich zu halten wurde bewusst auf eine aktive Kühlung verzichtet, auch wenn dies Einbußen bei der Datenqualität bedeutet. Eine Übersicht über den Innenaufbau des Geräts ist in Abb. 5 gezeigt; die Installation auf einer Straßenbahn zeigt Abb. 6.



**Abb. 5:** Innenansicht der Gerätebox des DOAS-Gerätes auf einer Bremer Straßenbahn.





**Abb. 6: Die Bremer Straßenbahn 3117 auf der das DOAS-Gerät betrieben wird (links) und der Aufbau auf dem Dach der Straßenbahn (rechts). Die beiden Fenster des Gerätes (oben für Zenitmessungen, vorne für Horizontmessungen) sind als dunkle Flächen zu erkennen. Die Blickrichtung der Horizontmessungen ist entgegen der Fahrtrichtung um Verschmutzungen zu vermeiden.**

Das Messgerät wurde nach Verzögerungen durch die Maßnahmen zur Bekämpfung der Covid-Epidemie im November 2020 fertiggestellt. Leider konnte aufgrund der Regelungen der BSAG, die aufgrund von Corona den Zutritt durch Betriebsfremde stark eingeschränkt haben, der Einbau auf der Straßenbahn zunächst nicht erfolgen, so dass über einen längeren Zeitraum Messungen auf dem Dach des IUP Bremen durchgeführt wurden. Diese Messungen wurden unter anderem bei den in Abschnitt 2.1.1 diskutierten Untersuchungen verwendet. Im November 2021 konnte das Gerät dann auf der BSAG Straßenbahn 3117 eingebaut werden (siehe Abb. 6) und nimmt seitdem kontinuierlich Messungen auf. Es ist ein Betrieb für mindestens ein Jahr vorgesehen, ein längerer Betrieb wird angestrebt und erscheint möglich. Durch den Einbau kurz vor Vorhabenende können hier leider nur vorläufige Ergebnisse gezeigt werden.

Eine wichtige Entscheidung für die Messungen von einer mobilen Plattform ist die Frage nach Messfrequenz und Blickrichtungen. Das Gerät ist so montiert, dass Horizontmessungen entgegen der Fahrtrichtung erfolgen. Allerdings entsteht durch die Bewegung der Bahn das Problem, dass sich der relative Azimut der Messungen schnell und unvorhersehbar ändern kann. Darüber hinaus ist im Stadtbereich damit zu rechnen, dass der Horizont häufig durch Häuser und Bäume verdeckt ist. Es wurde deshalb entschieden, das Gerät vorrangig im Zenit-Modus zu betreiben und alle 10 Minuten eine Horizontmessung unter  $20^\circ$  Grad durchzuführen. Dadurch wird eine hohe Messfrequenz und eine regelmäßige Kontrollmessung zur Trennung von Troposphäre und Stratosphäre ermöglicht.

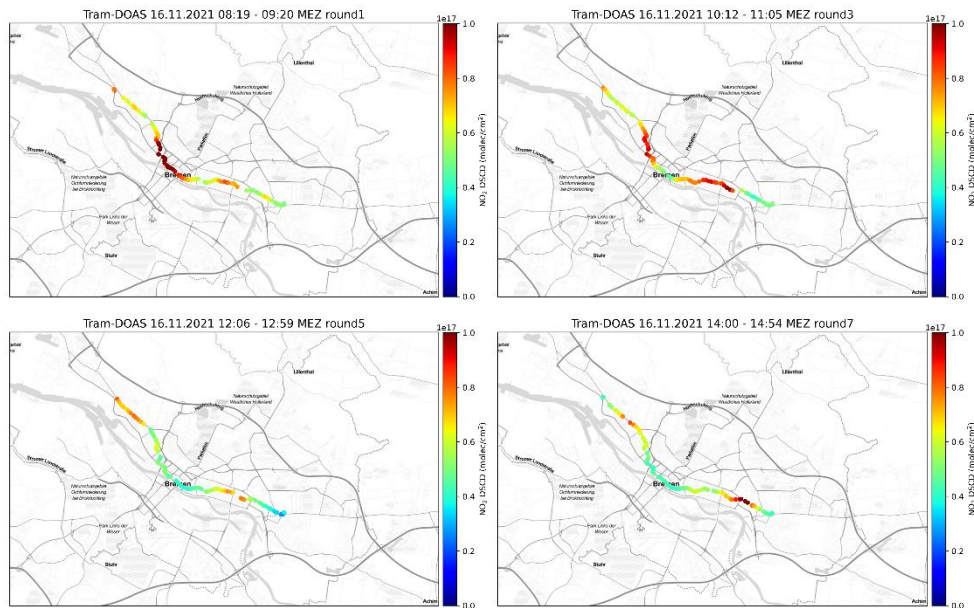


Abb. 7: Beispielmessungen des DOAS-Gerätes auf der Bremer Straßenbahn vom 16.11.2021. Dargestellt sind schräge NO<sub>2</sub>-Säulen ohne Stratosphärenkorrektur.

In Abb. 7 sind als Beispiel Messungen von vier Fahrten am 16.11.2021 gezeigt. Es ist klar zu erkennen, dass sich die Bereiche erhöhter NO<sub>2</sub>-Belastung über den Tag ändern und bestimmte Gebiete wie der industriell geprägte Nordwesten und die Gegend um das Kraftwerk im Südwesten reproduzierbar höhere NO<sub>2</sub>-Werte zeigen.

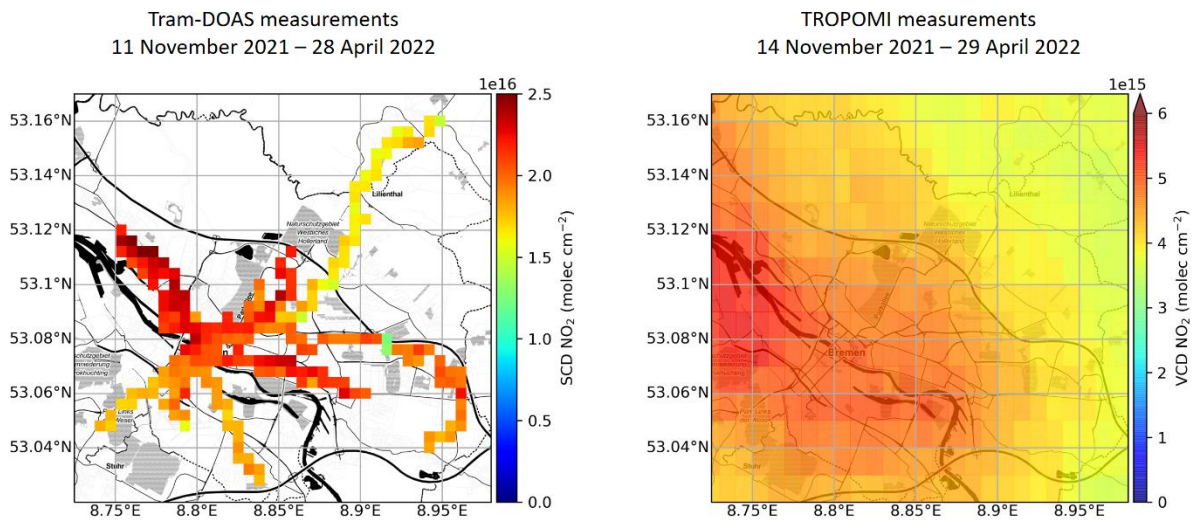


Abb. 8: Mittelwerte aller schrägen NO<sub>2</sub>-Säulen des Straßenbahn-DOAS für den Zeitraum November 2021 bis April 2022 (links). Die entsprechenden vertikalen troposphärischen Säulen von TROPOMI sind rechts dargestellt.

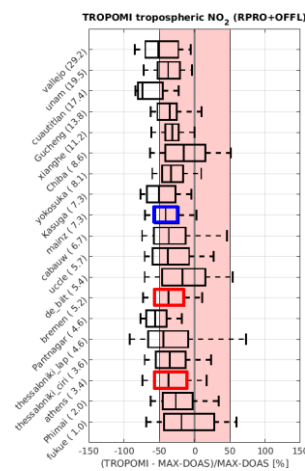
Da die Straßenbahn in Abhängigkeit der BSAG Betriebsplanung verschiedene Linien befährt, können im Laufe der Zeit Messungen in vielen Teilen Bremens durchgeführt werden. Der Mittelwert aller schrägen NO<sub>2</sub> Säulen die im Zeitraum November 2021 – April 2022 aufgenommen wurden ist in Abb. 8 dargestellt. Dabei sind deutlich erhöhte Werte im industriell geprägten Nordwesten zu erkennen und eine Abnahme zu niedrigen Werten im Nordosten. Eine ganz ähnliche Verteilung ist auch in den troposphärischen NO<sub>2</sub>-Säulen des operationellen TROPOMI-Produktes zu erkennen (siehe Abb. 8). Da

die Messungen von der Straßenbahn noch nicht vollständig ausgewertet sind ist dieser Vergleich noch qualitativ; er zeigt jedoch schon das Potential dieser automatisierten mobilen DOAS-Messungen.

## 2.2 Nutzung der Bremer Daten zur Validation des operationellen S5P NO<sub>2</sub>-Produkts

### 2.2.1 Beitrag zur koordinierten Validation von S5P-Daten

Auch wenn das Vorhaben sich vor allem auf die Untersuchung der horizontalen Variabilität des troposphärischen NO<sub>2</sub> konzentrierte, wurden im Rahmen des Vorhabens auch Routinemessungen mit existierenden Geräten weitergeführt, die in internationalen Datenbanken wie der des NDACC abgelegt wurden und für die systematische Validation von TROPOMI-Messungen mit den Daten des ganzen Netzwerks verwendet werden können.



**Abb. 9: Relative Abweichung der operationellen TROPOMI NO<sub>2</sub>-Säulen von Validationsmessungen mit MAX-DOAS Instrumenten. Die Instrumente des Verbundprojektes sind in rot (IUP-Bremen) und blau (MPIC Mainz) hervorgehoben. Die vertikalen Linien in den Boxen sind die Median, die Box zeigt die 25% und 75% Quantilen und die Fehlerbalken den 9% - 91% Bereich. Abbildung aus Verhoelst et al., 2021.**

Ein Beispiel für eine solche Validationsstudie bei der auch Messungen der Bremer Geräte verwendet wurden ist Verhoelst et al., 2021, die detailliert die troposphärische, stratosphärische und Gesamtsäule des TROPOMI NO<sub>2</sub>-Produkts validiert haben. In Abb. 9 ist ein Ergebnis dieser Studie gezeigt, in der die systematische Unterschätzung der troposphärischen NO<sub>2</sub>-Säulen durch das operationelle TROPOMI-Produkt illustriert wird. Die Unterschätzung variiert zwischen 20% und 50% ohne klare Abhängigkeit vom Verschmutzungsgrad. Die Messungen der Geräte des Verbundprojekts (Bremen, Mainz, Athen) liefern dabei Ergebnisse die konsistent mit denen der übrigen Messungen sind.

Details der Vorgehensweise und die Ergebnisse der Validation sind in Verhoelst et al., 2021 zu finden.

### 2.2.2 Validation von S5P-Daten während der S5P-VAL-DE-Ruhr -Kampagne

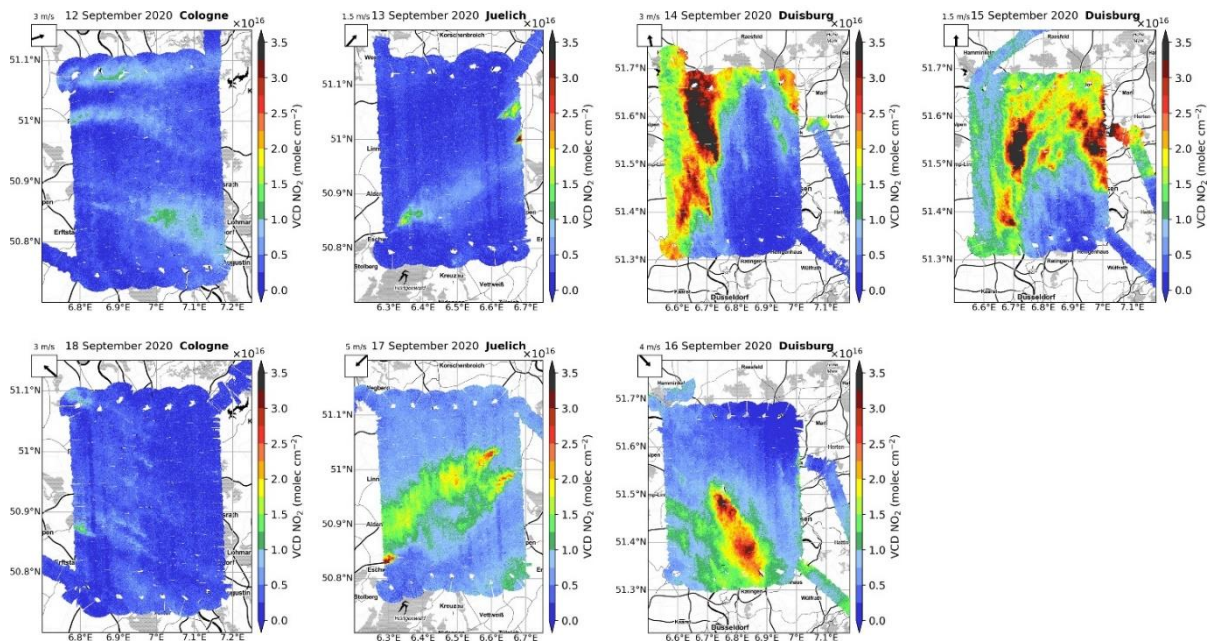
Im September 2020 fand im Gebiet Ruhr / Nordrhein-Westfalen eine von der ESA koordinierte Kampagne zur Validation von TROPOMI NO<sub>2</sub>-Messungen statt. Das Herzstück der Kampagne waren die flugzeuggestützten Messungen des Bremer AirMAP-Gerätes, die die Erstellung räumlich hoch aufgelöster Karten der NO<sub>2</sub>-Verteilung ermöglichen. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden zusätzlich eine Reihe von temporären stationären DOAS-Messungen im Kampagnengebiet durchgeführt, und zusätzlich eine Vielzahl von mobilen Auto-DOAS-Messungen. Diese Daten dienen der Verifikation und Validation der AirMAP-Daten, die wiederum zur Validation der TROPOMI-Daten verwendet werden.

Die Kampagne wurde in Zusammenarbeit mit dem Verbundpartner MPIC Mainz durchgeführt und mit Unterstützung von BIRSA-IASB in Brüssel, die weitere stationäre und mobile Messungen einbrachten. Für die stationären Messungen kamen sowohl einfache Zenitinstrumente mit Avantes-Geräten zum Einsatz, als auch MAX-DOAS Geräte mit mehreren Elevationen und Pandora-Instrumente. Eine Übersicht über die durchgeführten Messungen findet sich in Tab. 1. Eine detaillierte Beschreibung der Messkampagne, der Auswertemethoden und der Ergebnisse findet sich in Lange et al., 2022b.

**Tab. 1: Übersicht über die während der S5P-VAL-DE-Ruhr-Kampagne durchgeführten Messungen**

Instrument	Location	Observation geometry
TROPOMI	Sentinel-5P	Push-broom, nadir
AirMAP	FU-Berlin Cessna T207A aircraft	Push-broom, nadir
IUP car DOAS	Mobile car	Zenith-sky
MPIC car DOAS	Mobile car	Zenith and 22° elevation angle
BIRA car DOAS	Mobile car	Zenith and 30° elevation angle
Pandora COL	Cologne (50.94, 6.98)	Multi-axis
Pandora JUE	Jülich (50.91, 6.41)	Multi-axis
Zenith-DOAS JUE	Jülich (50.91, 6.41)	Zenith-sky
Zenith-DOAS GEL	Gelsenkirchen (51.56, 7.09)	Zenith-sky
MAX-DOAS DUI	Duisburg (51.46, 6.73)	Multi-axis
MAX-DOAS AIRPT	Airport Dinslaken (51.62, 6.87)	Multi-axis

Während der Kampagne wurden drei ausgewählte Gebiete in Nordrhein-Westfalen mehrfach von AirMAP kartiert. Die Messungen sind in Abb. 10 gezeigt und sind von großer räumlicher und zeitlicher Variabilität der  $\text{NO}_2$ -Säulen charakterisiert. Dies macht den Datensatz zu einem besonders interessanten Validationsdatensatz da ein großer Bereich von  $\text{NO}_2$ -Säulen abgedeckt wurde. Die Wetterbedingungen während der Kampagne waren sehr gut, so dass viele wolkenfreie TROPOMI-Messungen validiert werden konnten. Die Aerosolbelastung variierte während der Messungen und teilweise war eine deutlich sichtbare Aerosolschicht vorhanden.



**Abb. 10: Übersicht über die AirMAP-Messungen während der Ruhr-Kampagne. Abbildung aus Lange et al., 2022b.**

Das Konzept der Kampagne war es, zeitgleich zu den AirMAP-Flügen Auto-DOAS-Messungen mit mehreren Fahrzeugen zu machen, um eine direkte Validation der Flugzeugmessungen zu erreichen.

Zusätzlich dazu gab es eine Reihe von stationären Messungen innerhalb des Messgebietes. Diese Stationen wurden ebenfalls überflogen und von den Auto-DOAS-Messungen angefahren. Zum Teil wurden die Messungen auch über mehrere Monate durchgeführt um einen Eindruck der zeitlichen Variation der NO<sub>2</sub>-Säulen zu erhalten.

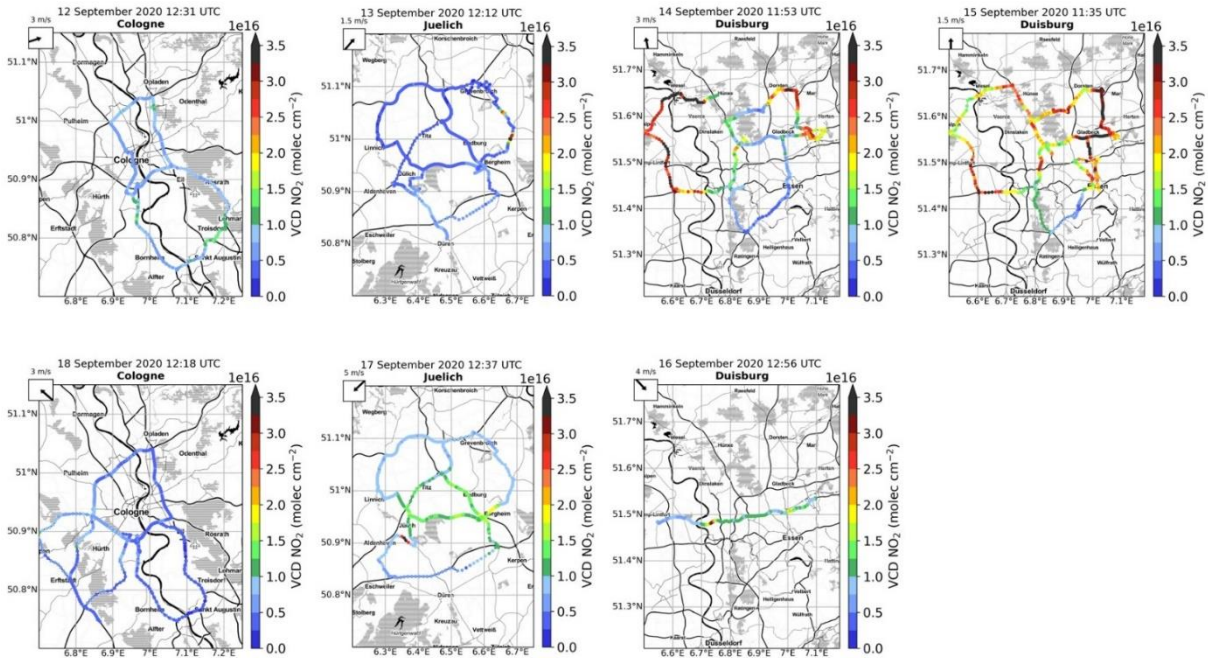


Abb. 11: Übersicht über die Messergebnisse der Auto-DOAS-Messungen während der Ruhr-Kampagne. Abbildung aus Lange et al., 2022b.

In Abb. 11 ist ein Überblick über die NO<sub>2</sub>-Säulen aus den Auto-DOAS-Messungen gegeben. Ein visueller Vergleich mit den AirMAP-Messungen zeigt wie erwartet gute qualitative Übereinstimmung. Allerdings ist die zeitliche Koinzidenz mit den Flugzeugdaten aufgrund der geringen Geschwindigkeit der Autos nur teilweise gut, so dass eine weitere Auswahl nötig ist, um einen quantitativen Vergleich zu ermöglichen.

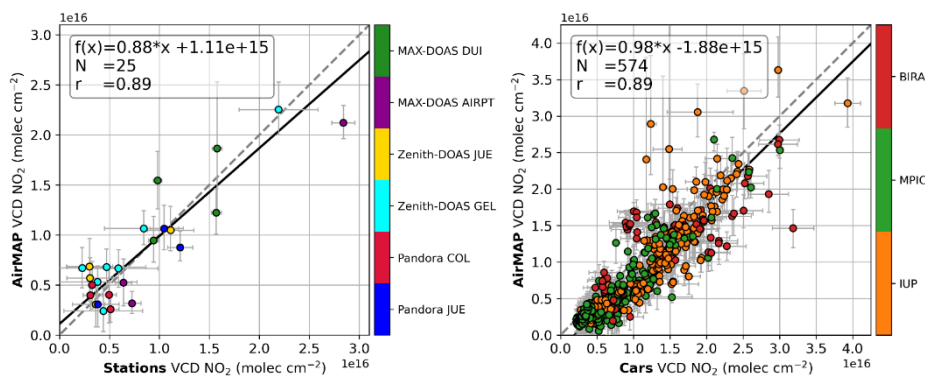
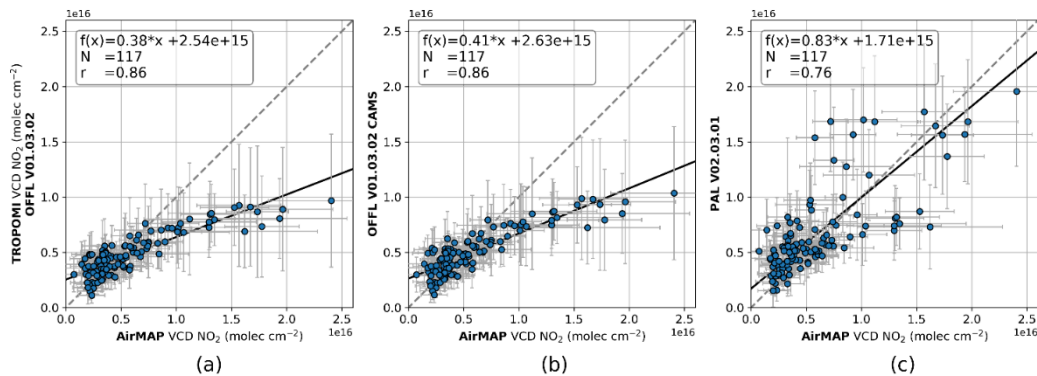


Abb. 12: Validation der AirMAP-Messungen mit Messungen der DOAS-Bodenstationen (links) und mobilen Auto-DOAS-Messungen (rechts). Abbildung aus Lange et al., 2022b.

In Abb. 12 sind direkte Vergleiche der AirMAP-Daten mit Messungen an den Stationen und Auto-DOAS-Daten gezeigt. Wie zu sehen ist besteht eine sehr gute quantitative Übereinstimmung bei hoher Korrelation und relativ geringer Streuung. Ein Teil der Streuung ist auf atmosphärische Variabilität zurückzuführen, die aufgrund der verbleibenden zeitlichen und räumlichen Unterschiede zwischen den

Messungen zu Abweichungen führt. Allerdings tragen auch die Messungenauigkeiten der verwendeten Geräte und die Unsicherheiten in den Annahmen bei der Auswertung zur Streuung bei.



**Abb. 13: Vergleich verschiedener Versionen des troposphärischen NO<sub>2</sub>-Produkts von TROPOMI mit den AirMAP-Messungen während der Ruhr-Kampagne: Offline-Datenversion V01.03.02 (links), Offline-Datenversion V01.03.02 aber mit hochauflösenden CAMS a-priori (Mitte) und der reprozessierte Datensatz PAL V02.03.01 (rechts). Abbildung aus Lange et al., 2022b.**

Nach der Validation der AirMAP-Daten durch stationäre und mobile DOAS-Messungen können diese zur Validation von TROPOMI-Daten verwendet werden. Dazu werden die hochauflösenden AirMAP-Daten so gemittelt, dass sie die Fläche einzelner TROPOMI-Messungen abdecken. Dadurch wird eine sehr gute Vergleichbarkeit der beiden Datensätze erreicht. In Abb. 13 ist der Vergleich der so gemittelten AirMAP-Daten mit drei verschiedenen Versionen der troposphärischen Säulen des TROPOMI Instruments gezeigt:

**V01.03.02:** Dies ist die operationelle offline Datenversion, die zum Zeitpunkt der Kampagne über COPERNICUS verteilt wurde.

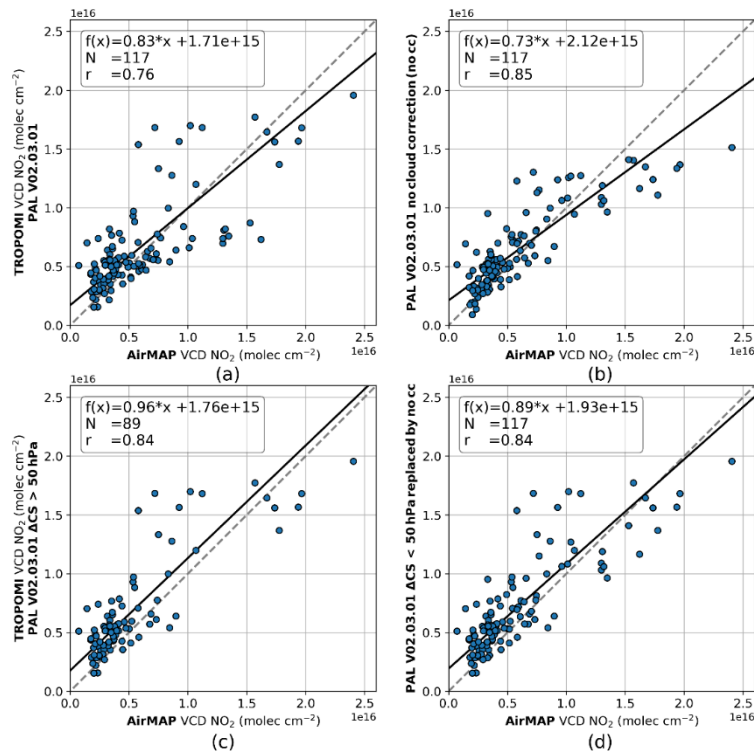
**V01.03.02 mit CAMS a priori:** Dies ist eine von KNMI erzeugte abgewandelte Datenversion, bei der das operationelle NO<sub>2</sub> a priori Profil, das aus einem Lauf des TM5-Modells stammt, durch ein räumlich höher aufgelöstes a priori Profil des CAMS regionalen Ensembles ersetzt wurde. Diese Datenversion hatte in früheren Vergleichen zu besseren Ergebnissen geführt als das operationelle Produkt.

**PAL V02.03.01:** Dies ist ein reprozessierter Datensatz in der Version V02.03.01 der über das PAL-System bereitgestellt wird. Die wesentliche Änderung zu V01.03.02 ist die Verwendung einer überarbeiteten Version des Wolkenalgorithmus FRESCO da es viele Hinweise darauf gibt, dass die Originalversion die Wolkenhöhen systematisch unterschätzt und damit zu einer Unterschätzung der troposphärischen Säulen führt.

Wie in Abb. 13 zu erkennen ist, zeigt der Vergleich zwischen AirMAP und den Daten in V01.03.02 eine deutliche Unterschätzung der TROPOMI-Daten, insbesondere bei größeren Säulen. Die Steigung der Ausgleichsgeraden ist nur 0.38, was noch niedriger ist als in den meisten bekannten Validationsarbeiten, die aber alle eine Unterschätzung durch TROPOMI beobachten.

Auch die Verwendung des höher aufgelösten CAMS a-priori verbessert die Situation kaum. Dies steht im Widerspruch zu einigen früheren Arbeiten, die von einer deutlichen Verbesserung der Ergebnisse berichten, wenn das a-priori ausgetauscht wird. Dies ist aber kein grundsätzlicher Widerspruch da in einem Gebiet mit großflächiger Verschmutzung wie zum Beispiel im Ruhrgebiet auch schlechter aufgelöste Modelle realistische Vertikalprofile modellieren können.

Eine deutliche Änderung und Verbesserung der Übereinstimmung wird hingegen mit der TROPOMI Datenversion V02.03.01 erreicht. Die Steigung der Ausgleichsgeraden ist jetzt 0.83, die Streuung der Werte allerdings deutlich erhöht. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, dass die Unterschätzung der TROPOMI-Daten mit einem Problem in der ursprünglichen FRESCO-Version zusammenhängt und in der neuen Version zumindest in diesem Datensatz weitgehend behoben ist. Die größere Streuung ist allerdings unerwartet und ist ein Anzeichen von verbleibenden Problemen in der TROPOMI-Auswertung.



**Abb. 14: Vergleich des Effekts verschiedener Wolken-Behandlungen in TROPOMI-Daten: PAL V02.03.01 mit Wolkenkorrektur (a, oben links), PAL V02.03.01 ohne Wolkenkorrektur (b, oben rechts), PAL V02.03.01 ohne Daten bei denen die Wolkenhöhe weniger als 50 hPa über dem Bodendruck liegen (c, unten links) und PAL V02.03.01 aber keine Wolkenkorrektur für Szenen mit Wolken die weniger als 50 hPa über dem Bodendruck liegen (d, unten rechts). Abbildung aus Lange et al., 2022b.**

Um diese verbleibenden Unterschiede weiter zu untersuchen, wurde der Vermutung nachgegangen, dass für Szenen in denen von FRESCO sehr niedrige Wolkenhöhen bestimmt wurden besonders große Abweichungen der TROPOMI-Säulen auftreten. In Abb. 14 werden die Auswirkungen unterschiedlicher Ansätze zur Wolkenkorrektur untersucht. Dabei ergibt sich die beste Korrelation (aber die schlechteste Steigung), wenn die Wolkenkorrektur komplett deaktiviert wird. Werden Messungen mit den niedrigsten Wolken (Druckunterschied zwischen Wolke und Boden < 50 hPa) ausgeschlossen, verbessern sich Steigung und Korrelation deutlich. Wenn diese Messungen nicht ausgeschlossen, aber ohne Wolkenkorrektur verwendet werden ergibt sich eine ähnlich gute Korrelation aber mit deutlich mehr Vergleichspunkten.

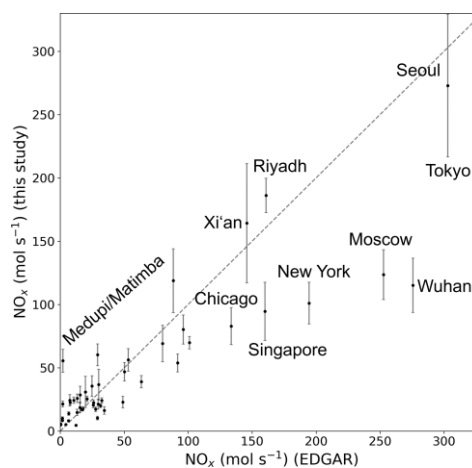
Das Hauptergebnis der S5P-VAL-DE-Ruhr-Kampagne ist, dass zumindest unter nahezu wolkenfreien Bedingungen und über dem Messgebiet die TROPOMI NO<sub>2</sub>-Daten der Version V01.03.02 zu einer starken Unterschätzung der troposphärischen Säule führen. Dieses Problem scheint in der neuen Version V02.03.01 weitgehend behoben, allerdings zum Preis einer höheren Streuung der Daten. Letztere scheint mit Fällen zusammen zu hängen bei denen auch die aktuelle Version von FRESCO sehr

niedrige Wolkenhöhen berechnet; dies könnte eventuell in späteren Versionen des Datenproduktes noch verbessert werden.

### 2.3 Ableitung von NO<sub>x</sub> Emissionsstärken aus S5P NO<sub>2</sub> Daten

Das operationelle TROPOMI NO<sub>2</sub>-Produkt lässt sich für eine Vielzahl von atmosphärischen Anwendungen nutzen. Eine besonders interessante ist die Ableitung von NO<sub>x</sub>-Emissionsstärken, da diese Werte sowohl für die atmosphärische Modellierung, als auch für politische Entscheidungsträger interessant sind. Durch die hohe räumliche Auflösung und das gute Signal-zu-Rausch-Verhältnis der TROPOMI-Daten lassen sich schon aus zwei Jahren Messungen interessante Ergebnisse für viele NO<sub>x</sub>-Quellgebiete ableiten.

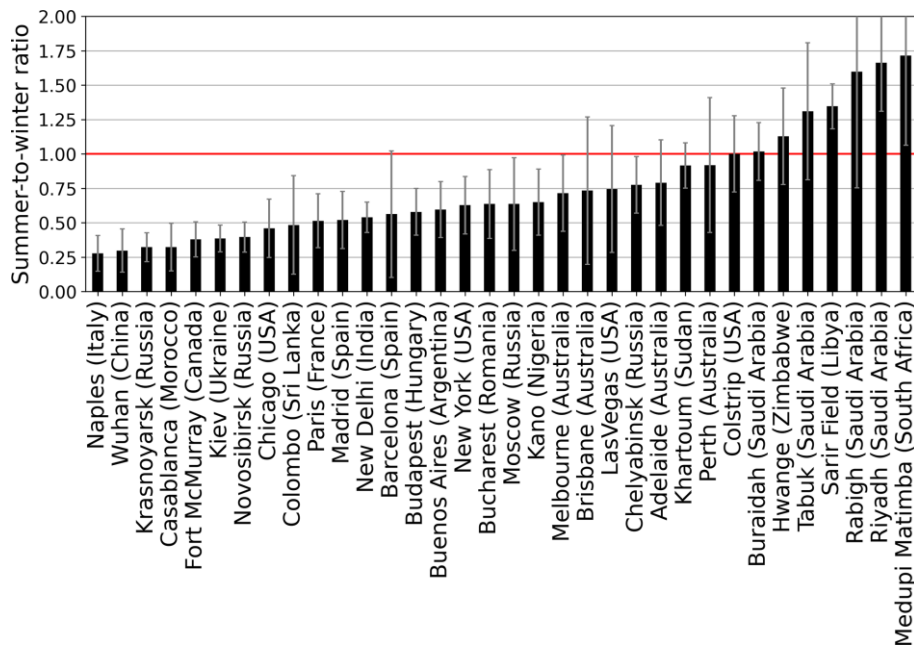
Eine besonders leistungsfähige und von Modelldaten unabhängige Methode zur Abschätzung von NO<sub>x</sub>-Emissionen aus Satellitenmessungen von NO<sub>2</sub> wurde in Beirle et al., 2011 eingeführt. Dabei werden für einzelne NO<sub>x</sub>-Quellgebiete die in Windrichtung gedrehten NO<sub>2</sub>-Verteilungen gemittelt und unter Annahme eines exponentiellen Abfalls die Emissionsstärke und die Lebensdauer des NO<sub>2</sub> bestimmt. In diesem Vorhaben wurde diese EMG (exponentially modified Gaussian) genannte Methode auf zwei Jahre TROPOMI-Daten angewendet und NO<sub>x</sub> Emissionsstärken und ihre Jahresgänge bestimmt, der Wochenendeffekt untersucht und die Breiten- und Jahreszeitabhängigkeit der Lebensdauern bestimmt. Details zur Methodik und zu den Ergebnissen dieser Untersuchung finden sich in Lange et al., 2022a.



**Abb. 15: Vergleich der aus TROPOMI-Daten abgeleiteten NO<sub>x</sub> Emissionsstärken mit Daten des EDGAR Emissionskatasters (v5.0, 2015). Es wurden TROPOMI-Daten des Zeitraums März 2018 – Februar 2020 verwendet. Die Fehlerbalken geben die Standardabweichung der gefitteten Emissionsstärken an. Abbildung aus Lange et al., 2022.**

In Abb. 15 ist ein Überblick über die aus TROPOMI-Daten abgeleiteten NO<sub>x</sub>-Emissionsstärken für 50 Punktquellen im Vergleich zu Daten aus der EDGAR-Datenbank gegeben. Wie zu erkennen ist gibt es eine gute qualitative Übereinstimmung aber in vielen Fällen eine Unterschätzung von bis zu 50%. Diese Unterschätzung wurde auch schon in früheren Arbeiten beobachtet und ist vermutlich auf eine Unterschätzung der NO<sub>2</sub>-Säulen im TROPOMI-Produkt zurückzuführen, die mit der verwendeten Wolkenkorrektur zusammenhängt (siehe Abschnitt 2.2.2).

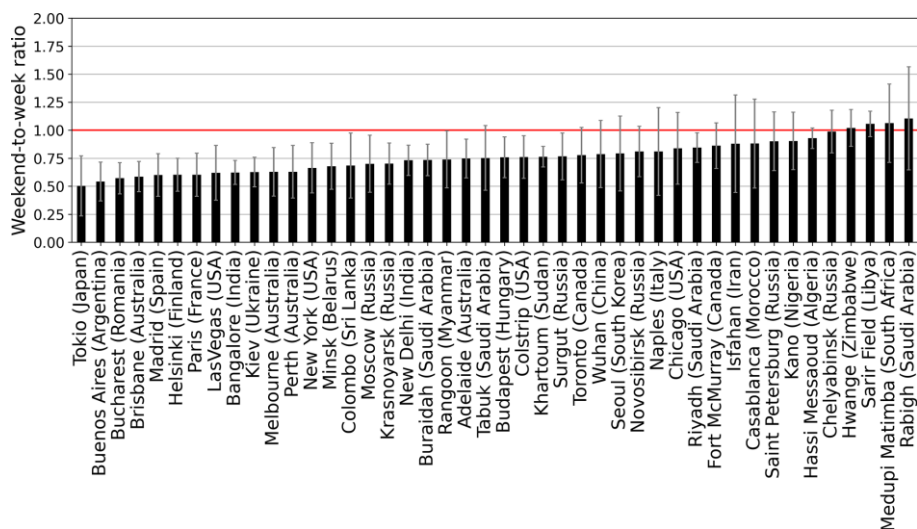




**Abb. 16: Verhältnis der aus TROPOMI-Daten bestimmten Emissionsstärken der Sommermonate (JJA) zu denen der Wintermonate (DJF). Für die Südhemisphäre wurde die Monatsauswahl um 6 Monate verschoben. Die Fehlerbalken geben die Standardabweichung der mit der EMG-Methode bestimmten Emissionsstärken an. Abbildung aus Lange et al., 2022.**

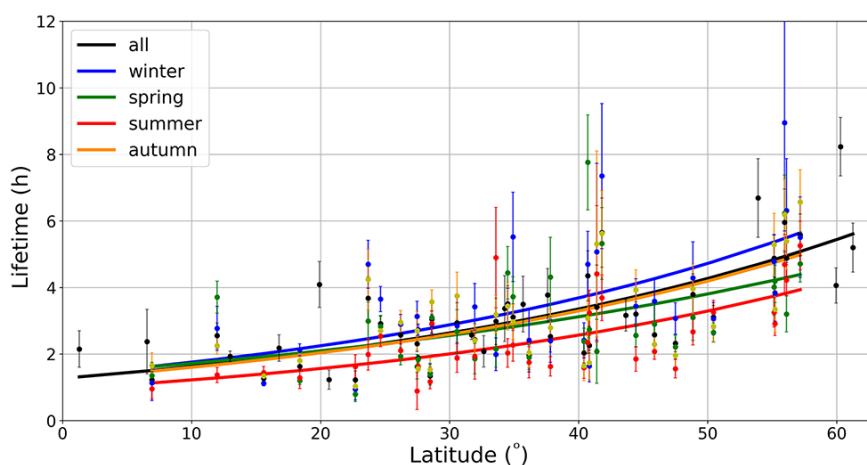
Aufgrund der guten Datenqualität der TROPOMI NO<sub>2</sub>-Säulen lassen sich Emissionsstärken auch getrennt für Sommer- und Wintermonate bestimmen. Die Quotienten dieser Werte sind in Abb. 16 dargestellt und geben den Jahresgang der NO<sub>x</sub>-Emissionen wieder. In den meisten Fällen erwartet man im Winter höhere Emissionen da für die im Winter nötigen Gebäudeheizung fossile Brennstoffe eingesetzt werden. Ein entgegengesetzter Jahresgang ist lediglich dort zu erwarten, wo Kühlung im Sommer die wichtigere Anwendung von fossiler Energie ist. Diese Erwartungen lassen sich in den in Abb. 16 gezeigten Quotienten in den meisten Fällen bestätigen, und auch in der Südhemisphäre sind die Emissionen im Winter höher. Allerdings lassen sich nicht alle Unterschiede zwischen einzelnen Quellen direkt verstehen, so dass eine spätere Wiederholung der Auswertung auf einer längeren Zeitreihe sinnvoll erscheint.

Interessant ist der fehlende Jahresgang für das Kraftwerk Colstrip. Eine genauere Untersuchung der Emissionen für dieses Kraftwerk zeigt deutliche Variationen während der betrachteten zwei Jahre, die gut mit den vom Betreiber angegebenen Emissionen korrelieren. Allerdings werden die Emissionen in den TROPOMI-Daten stark unterschätzt (Faktor 0.4), was für andere Kraftwerke schon in Beirle et al., 2011 diskutiert wird.



**Abb. 17: Quotient der aus TROPOMI-Daten bestimmten Nox Emissionsstärken von Wochenende zu Wochentagen. Die Auswahl der Tage des Wochenendes (Fr, Sa, So) erfolgt je nach Region. Die Fehlerbalken zeigen die Standardabweichung der mit der EMG-Methode bestimmten Emissionsstärken. Abbildung aus Lange et al., 2022.**

Wie schon in früheren Arbeiten demonstriert, lässt sich in den TROPOMI NO<sub>2</sub>-Säulen über vielen anthropogenen Quellen ein Wochenendeffekt nachweisen, da am Wochenende weniger Nox emittiert wird. Die Unterschiede in den NO<sub>2</sub>-Säulen schlagen sich auch in den Emissionsschätzungen mit der EMG-Methode nieder, und für die meisten untersuchten Punktquellen ist ein deutlicher Wochengang sichtbar (siehe Abb. 17). Diejenigen Quellen die durch Kraftwerksemissionen oder Schwerindustrie dominiert werden zeigen hingegen keinen oder nur einen sehr kleinen Wochengang. Interessant ist auch das Ergebnis für Wuhan, der einzigen chinesischen Stadt, die über die zwei betrachteten Jahre ausreichend Daten für die Untersuchung des Wochengangs bot. Dieser liegt mit 0.79 im Mittelfeld der beobachteten Werte. Frühere Arbeiten hatten bislang noch keinen Wochengang für chinesische Städte nachweisen können, ein Hinweis darauf, dass sich die Zusammensetzung der NO<sub>x</sub>-Emissionen in China in den letzten Jahren geändert haben könnte.



**Abb. 18: Abhängigkeit der mit der EMG-Methode bestimmten Lebenszeiten von NO<sub>x</sub> vom Breitengrad und von der Jahreszeit. Jeder Punkt zeigt den Emissionswert (und die Standardabweichung) für eine Punktquelle an. Abbildung aus Lange et al., 2022.**

Ein interessantes Nebenprodukt der EMG-Auswertung ist die Lebensdauer von NO<sub>2</sub>, ein Wert der für den Transport von NO<sub>x</sub> von Bedeutung ist und auch die atmosphärischen Konzentrationen von NO<sub>2</sub> bestimmt. Da die Reaktion von NO<sub>2</sub> mit OH die Hauptsenke für NO<sub>x</sub> in der Troposphäre ist, und OH

photolytisch produziert wird, erwartet man bei hohen Breiten und im Winter eine Zunahme der Lebensdauer. Wie in Abb. 18 zu sehen ist, wird diese Erwartung zumindest qualitativ erfüllt. Die Streuung der Werte ist allerdings relativ groß was einerseits durch andere Einflüsse auf die Lebensdauer erklärt werden könnte aber auch ein Hinweis darauf sein könnte, dass die Unsicherheit der gefitteten Lebensdauern größer ist als die in der Abbildung gezeigte Standardabweichung. Es ist zu erwarten, dass die Auswertung einer längeren Zeitreihe zu einer Verringerung der Unsicherheiten führt.

## 2.4 Ausblick

Die im Vorhaben durchgeführten Arbeiten haben interessante Ergebnisse zur Variabilität von NO<sub>2</sub> in der Troposphäre erbracht, haben zu wichtigen Validationsergebnissen für das TROPOMI NO<sub>2</sub>-Produkt geführt und eine detaillierte Auswertung der zeitlichen und räumlichen Variabilität von NO<sub>x</sub>-Emissionen ermöglicht.

Die in Bremen beobachtete hohe zeitliche Variabilität der NO<sub>2</sub>-Säulen lässt es als sinnvoll erscheinen, die Messfrequenz von MAX-DOAS-Geräten zu erhöhen oder alternativ ein zweites, schnell messendes Gerät in Zenitrichtung zu betreiben um Messfehler und fehlerhafte Vertikalprofile durch atmosphärische Variabilität zu erkennen.

Die DOAS-Messungen auf einer Straßenbahn werden so lange wie möglich weitergeführt und die Ergebnisse bezüglich der räumlichen und saisonalen Variabilität des troposphärischen NO<sub>2</sub> in Bremen interpretiert. Die Daten sollen auch für eine quantitative Validation von TROPOMI-Messungen verwendet werden.

Die Validationsergebnisse der Ruhr-Kampagne zeigen eine ermutigende Verbesserung des aktuellen TROPOMI NO<sub>2</sub>-Produkts. Allerdings ist die Streuung der Werte höher als in früheren Versionen, und dieses Problem sollte besser verstanden und wenn möglich behoben werden. Ähnliche Messungen an anderen Orten und zu anderen Jahreszeiten sind nötig, um die Validationsergebnisse zu generalisieren. Die im Vorhaben entwickelten Ansätze für Messung und Validation können auch auf die Validation andere Satellitengeräte wie zum Beispiel GEMS übertragen werden.

Die NO<sub>x</sub> Emissionsabschätzungen basieren auf zwei Jahren TROPOMI-Messungen und sollten auf einem längeren Datensatz wiederholt werden sobald dieser verfügbar wird. Allerdings müssen dabei die zum Teil erheblichen Änderungen der Emissionen im Zusammenhang mit der Corona-Epidemie gesondert berücksichtigt werden.

## 2.5 Referenzen

### 2.5.1 Referenzierte Artikel

- Beirle, S., Boersma, K. F., Platt, U., Lawrence, M. G. and Wagner, T.: Megacity Emissions and Lifetimes of Nitrogen Oxides Probed from Space, *Science*, 333, 1737–1739, doi:10.1126/science.1207824, 2011.
- Kreher, K., Van Roozendaal, M., Hendrick, F., Apituley, A., Dimitropoulou, E., Frieß, U., Richter, A., Wagner, T., Lampel, J., Abuhassan, N., Ang, L., Anguas, M., Bais, A., Benavent, N., Bösch, T., Bogner, K., Borovski, A., Bruchkouski, I., Cede, A., Chan, K. L., Donner, S., Drosoglou, T., Fayt, C., Finkenzeller, H., Garcia-Nieto, D., Gielen, C., Gómez-Martín, L., Hao, N., Henzing, B., Herman, J. R., Hermans, C., Hoque, S., Irie, H., Jin, J., Johnston, P., Khayyam Butt, J., Khokhar, F., Koenig, T. K., Kuhn, J., Kumar, V., Liu, C., Ma, J., Merlaud, A., Mishra, A. K., Müller, M., Navarro-Comas, M., Ostendorf, M., Pazmino, A., Peters, E., Pinardi, G., Pinharanda, M., Piters, A., Platt, U., Postlyakov, O., Prados-Roman, C., Puentedura, O., Querel, R., Saiz-Lopez, A., Schönhardt, A., Schreier, S. F., Seyler, A., Sinha, V., Spinei, E., Strong, K., Tack, F., Tian, X., Tiefengraber, M., Tirpitz, J.-L., van Gent, J., Volkamer, R., Vrekoussis, M., Wang, S., Wang, Z., Wenig, M., Wittrock, F., Xie, P. H., Xu, J., Yela, M., Zhang, C., and Zhao, X.: [Intercomparison of NO<sub>2</sub>, O<sub>4</sub>, O<sub>3</sub> and](#)

- [HCHO slant column measurements by MAX-DOAS and zenith-sky UV-visible spectrometers during CINDI-2](https://doi.org/10.5194/amt-13-2169-2020), *Atmos. Meas. Tech.*, **13**, 2169–2208, <https://doi.org/10.5194/amt-13-2169-2020>, 2020.
- Lange, K., Richter, A., and Burrows, J. P.: [Variability of nitrogen oxide emission fluxes and lifetimes estimated from Sentinel-5P TROPOMI observations](https://doi.org/10.5194/acp-22-2745-2022), *Atmos. Chem. Phys.*, **22**, 2745–2767, <https://doi.org/10.5194/acp-22-2745-2022>, 2022a.
- Lange, K., Richter, A., Schönhardt, A., Meier, A.C., Bösch, T., Seyler, A., Krause, K., Behrens, L., Wittrock, F., Merlaud, A., Tack, F., Hendrick, F., Dimitropoulou, E., Van Roozendael, M., Kumar, V., Donner, S., Dörner, S., Lauster, B., Razi, M., Borger, C., Uhlmannsieck, K., Wagner, T., Ruhtz, T., Bohn, B., Diaz, D.S., Abuhassan, N., Schüttemeyer, D., Burrows, J.P., Validation of Sentinel-5P TROPOMI tropospheric NO<sub>2</sub> products by comparison with NO<sub>2</sub> measurements from airborne imaging, ground-based stationary, and mobile car DOAS measurements during the S5P-VAL-DE-Ruhr campaign, eingereicht bei: *Atmos. Meas. Tech.*, 2022b.
- Lange, K. Investigating NO<sub>2</sub> distributions from satellite, airborne and ground-based measurements: spatiotemporal variability of NO<sub>x</sub> emissions and validation of the S5P TROPOMI product, Doktorarbeit, Universität Bremen, 2022
- Schreier, S. F., Richter, A., and Burrows, J. P.: [Near-surface and path-averaged mixing ratios of NO<sub>2</sub> derived from car DOAS zenith-sky and tower DOAS off-axis measurements in Vienna: a case study](https://doi.org/10.5194/acp-19-5853-2019), *Atmos. Chem. Phys.*, **19**, 5853–5879, <https://doi.org/10.5194/acp-19-5853-2019>, 2019
- Verhoelst, T., Compornolle, S., Pinardi, G., Lambert, J.-C., Eskes, H. J., Eichmann, K.-U., Fjæraa, A. M., Granville, J., Niemeijer, S., Cede, A., Tiefengraber, M., Hendrick, F., Pazmiño, A., Bais, A., Bazureau, A., Boersma, K. F., Bogner, K., Dehn, A., Donner, S., Elokhov, A., Gebetsberger, M., Goutail, F., Grutter de la Mora, M., Gruzdev, A., Gratsea, M., Hansen, G. H., Irie, H., Jepsen, N., Kanaya, Y., Karagkiozidis, D., Kivi, R., Kreher, K., Levelt, P. F., Liu, C., Müller, M., Navarro Comas, M., Piters, A. J. M., Pommereau, J.-P., Portafaix, T., Prados-Roman, C., Puentedura, O., Querel, R., Remmers, J., Richter, A., Rimmer, J., Rivera Cárdenas, C., Saavedra de Miguel, L., Sinyakov, V. P., Stremme, W., Strong, K., Van Roozendael, M., Veefkind, J. P., Wagner, T., Wittrock, F., Yela González, M., and Zehner, C.: [Ground-based validation of the Copernicus Sentinel-5P TROPOMI NO<sub>2</sub> measurements with the NDACC ZSL-DOAS, MAX-DOAS and Pandora global networks](https://doi.org/10.5194/amt-14-481-2021), *Atmos. Meas. Tech.*, **14**, 481–510, <https://doi.org/10.5194/amt-14-481-2021>, 2021.

## 2.5.2 Im Vorhaben entstandene referenzierte Artikel

- Lange, K., Richter, A., and Burrows, J. P.: [Variability of nitrogen oxide emission fluxes and lifetimes estimated from Sentinel-5P TROPOMI observations](https://doi.org/10.5194/acp-22-2745-2022), *Atmos. Chem. Phys.*, **22**, 2745–2767, <https://doi.org/10.5194/acp-22-2745-2022>, 2022.
- Lange, K., Richter, A., Schönhardt, A., Meier, A.C., Bösch, T., Seyler, A., Krause, K., Behrens, L., Wittrock, F., Merlaud, A., Tack, F., Hendrick, F., Dimitropoulou, E., Van Roozendael, M., Kumar, V., Donner, S., Dörner, S., Lauster, B., Razi, M., Borger, C., Uhlmannsieck, K., Wagner, T., Ruhtz, T., Bohn, B., Diaz, D.S., Abuhassan, N., Schüttemeyer, D., Burrows, J.P., Validation of Sentinel-5P TROPOMI tropospheric NO<sub>2</sub> products by comparison with NO<sub>2</sub> measurements from airborne imaging, ground-based stationary, and mobile car DOAS measurements during the S5P-VAL-DE-Ruhr campaign, eingereicht bei: *Atmos. Meas. Tech.*, 2022
- Verhoelst, T., Compornolle, S., Pinardi, G., Lambert, J.-C., Eskes, H. J., Eichmann, K.-U., Fjæraa, A. M., Granville, J., Niemeijer, S., Cede, A., Tiefengraber, M., Hendrick, F., Pazmiño, A., Bais, A., Bazureau, A., Boersma, K. F., Bogner, K., Dehn, A., Donner, S., Elokhov, A., Gebetsberger, M., Goutail, F., Grutter de la Mora, M., Gruzdev, A., Gratsea, M., Hansen, G. H., Irie, H., Jepsen, N., Kanaya, Y., Karagkiozidis, D., Kivi, R., Kreher, K., Levelt, P. F., Liu, C., Müller, M., Navarro Comas, M., Piters, A. J. M., Pommereau, J.-P., Portafaix, T., Prados-Roman, C., Puentedura, O., Querel, R., Remmers, J., Richter, A., Rimmer, J., Rivera Cárdenas, C., Saavedra de Miguel, L., Sinyakov, V. P., Stremme, W., Strong, K., Van Roozendael, M., Veefkind, J. P., Wagner, T., Wittrock, F., Yela González, M., and Zehner, C.: [Ground-based validation of the Copernicus Sentinel-5P TROPOMI NO<sub>2</sub> measurements with the NDACC ZSL-DOAS, MAX-DOAS and Pandora global networks](https://doi.org/10.5194/amt-14-481-2021), *Atmos. Meas. Tech.*, **14**, 481–510, <https://doi.org/10.5194/amt-14-481-2021>, 2021.

## 2.5.3 Im Vorhaben entstandene Poster

- Lange, K., Meier, A. C., Van Roozendael, M., Wagner, T., Ruhtz, T., and Schüttemeyer, D. and the S5p-VAL-DE-Ruhr campaign team: Validation of Sentinel-5P TROPOMI tropospheric NO<sub>2</sub> with airborne imaging, ground-based stationary, and mobile DOAS measurements from the S5P-VAL-DE-Ruhr campaign, *EGU General Assembly 2021, online*, 19–30 Apr 2021, EGU21-10637, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-10637>, 2021.

- Richter, A., Lange, K., Latsch, M., and Burrows, J. P.: Investigating fire NO<sub>x</sub> emissions with TROPOMI, *EGU General Assembly 2021*, online, 19–30 Apr 2021, EGU21-10108, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-10108>, 2021.
- Meier, A. C., Behrens, L., Bösch, T., Burrows, J. P., Dimitropoulou, E., Donner, S., Dörner, S., Kumar, V., Lange, K., Lauster, B., Merlaud, A., Richter, A., Roozendael, M. V., Ruhtz, T., Schönhardt, A., Schüttemeyer, D., Seyler, A., Tack, F., Uhlmansiek, K., Wagner, T. and Wittrock, F.: First results from the S5PVAL-Ruhr campaign, *OMI-TROPOMI Workshop*, online, October 2020.
- Lange, K. Richter, A., Burrows, J.P.: Variability of nitrogen oxide lifetimes and emission fluxes estimated by Sentinel-5P observations, *9<sup>th</sup> DOAS workshop*, online, July 2020
- Lange, K. Richter, A., Burrows, J.P.: Variability of nitrogen oxide emission fluxes and lifetimes estimated by Sentinel-5P TROPOMI observations, *AGU fall meeting*, online, December 2020
- Lange, K., Richter, A., Burrows, J.P., Lifetimes and emission fluxes of nitrogen oxides from cities and power plants estimated by Sentinel-5P observations, *EGU 2019, Vienna, Austria*, April 2019
- Lange, K., Richter, A., Burrows, J.P., Emissionen und Lebenszeiten von Stickoxiden aus Sentinel-5P-Daten, *DACH 2019, Garmisch-Partenkirchen, Germany*, March 2019

#### 2.5.4 Im Vorhaben entstandene Vorträge

- Lange, K. et al., Variability of nitrogen oxide lifetimes and emission fluxes estimated by Sentinel-5P observations, *Yonsei University, Seoul, Republic of Korea*, October 13, 2021
- Lange, K. et al., Representativeness and variability of the ground based measurements from the S5P-VAL-DE-Ruhr campaign, *MAX-DOAS Workshop*, online, May 12, 2021
- Lange, K. et al., First results from the Sentinel-5P-VAL-DE-Ruhr campaign in 2020, *IUP-AWI-Blockseminar*, online, February 22, 2021
- Lange, K. et al., First results from the Sentinel-5P-VAL-DE-Ruhr campaign in 2020, *Sentinel-5P Validation Team Meeting*, online, October 20, 2020
- Lange, K., Validation of TROPOMI S5P tropospheric NO<sub>2</sub> using ground-based MAX-DOAS and additional mobile DOAS campaign measurements, *Copernicus Sentinel-5 Precursor Validation Team Workshop*, Frascati, Italy, November 2019
- Richter, A., Satellite observations of nitrogen dioxide pollution from global to local scale, *5th Sino-German Symposium on Marine Sciences: Multi-Scale Processes in Ocean and Atmosphere*, Bremen, Germany, September 2019
- Lange, K., Horizontal variations of NO<sub>2</sub> and HCHO measured with MAX-DOAS and Sentinel-5P, *Seminar on Physics and Chemistry of the Atmosphere*, University of Bremen, Germany, November 30, 2018

#### 2.5.5 Im Vorhaben entstandene Akademische Abschlussarbeiten

- Die im Vorhaben entstandene Doktorarbeit von Kezia Lange steht kurz vor dem Abschluss und wird im Herbst 2022 eingereicht.