

AUSTAL2000

Programmbeschreibung zu Version 2.0

Stand 2004-09-06

Ingenieurbüro Janicke, Dunum

Stoffe nach TA Luft im Auftrag von:

Umweltbundesamt, Berlin

Geruchsausbreitung im Auftrag von:

Landesanstalt für Umweltschutz, Karlsruhe
Niedersächsisches Landesamt für Ökologie, Hildesheim
Landesumweltamt NRW, Essen

Inhaltsverzeichnis

1	Übersicht	2
2	Änderungen in Version 2.0	4
3	Installation	5
3.1	Windows	6
3.2	Linux	6
4	Arbeitsweise	6
5	Eingabedaten für die Ausbreitungsrechnung	8
6	Ergebnisse der Ausbreitungsrechnung	15
7	Rechnen mit Zeitreihen	19
8	Rechnen mit situationsabhängigen Parametern	25
9	Ausbreitungsrechnung für komplexes Gelände	27
9.1	Festlegung des Geländeprofils	27
9.2	Berechnung des Windfeldes	28
9.3	Praktische Durchführung	29
10	Verwendung extern erzeugter meteorologischer Felder	30
11	Festlegung der Rechennetze	34
12	Ableitung von Abgasen über Kühltürme	35
13	Beispiele	37
	Anhänge	38
A	Dateistruktur	38
B	Programmstruktur	43
C	Das Windfeldmodell <i>TALdiames</i>	44
C.1	Das Rechenprinzip	44
C.2	Die Modellierung der Prandtl–Schicht	48
D	Sedimentierender Staub	49
E	Verifikationsrechnungen	51

1 Übersicht

Das Programmsystem AUSTAL2000 berechnet die Ausbreitung von Schadstoffen und Geruchsstoffen in der Atmosphäre. Es ist eine Umsetzung von Anhang 3 der TA Luft von 2002-07-24.¹ Das dem Programm zu Grunde liegende Modell ist in der Richtlinie VDI 3945 Blatt 3 beschrieben.

Bis zur Version 1.1 erfaßte AUSTAL2000 nur die Stoffe, für die Immissionswerte in der TA Luft festgelegt sind.² Die Version 2.0 erfaßt auch Geruchsstoffe und berechnet hierfür Geruchsstundenhäufigkeiten.³

Diese Dokumentation beschreibt die Version 2.0 des Programmsystems. Es stehen ausführbare Programme für Windows (NT/2000/XP) und für Linux einschließlich der Quelltexte zur Verfügung (siehe www.austal2000.de).

Die Programme sind unter Windows 2000 entwickelt und auch unter Windows NT, Windows XP und Linux (SuSE 9.1) getestet worden. Es sind keine Tests unter Windows 95/98/ME durchgeführt worden.

Das Programmsystem AUSTAL2000 ist eine beispielhafte Umsetzung des Anhang 3 der TA Luft 2002. Folgende Aspekte sind in ihm realisiert:

- Zeitreihenrechnung
- Statistikrechnung
- Alle Stoffe, für die Immissionswerte angegeben sind
- Punkt-, Linien-, Flächen- und Volumenquellen
- Beliebig viele Quellen
- Abgasfahnenüberhöhung (nach VDI 3782 Blatt 3, VDI 3784 Blatt 2 oder explizit vorgegeben)
- Umwandlung von NO nach NO₂ (nach VDI 3782 Blatt 1)
- Deposition
- Sedimentierende Stäube

¹siehe <http://www.bmu.de/download/dateien/taluft.pdf>

²Vorhaben *Entwicklung eines modellgestützten Beurteilungssystems für den anlagenbezogenen Immissionsschutz* des Umweltbundesamtes Berlin, UFOPLAN Forschungskennzahl 200 43 256, siehe www.austal2000.de.

³Im Auftrag von: Landesanstalt für Umweltschutz (Karlsruhe), Niedersächsisches Landesamt für Ökologie (Hildesheim), Landesumweltamt NRW (Essen). Zusammenfassender Bericht: LUTZ JANICKE, ULF JANICKE: *Die Entwicklung des Ausbreitungsmodells AUSTAL2000G*, Berichte zur Umweltphysik, Nummer 5, ISSN 1439-8222, Hrsg. Ing.-Büro Janicke, Dunum (August 2004), siehe www.janicke.de.

- Zeitabhängige Emissionsparameter
- Situationsabhängige Emissionsparameter
- Schätzung der statistischen Unsicherheit
- Automatische Festlegung des Rechenetzes
- Automatische Berechnung von z_0
- Meteorologische Zeitreihen (AKTerm) auch im neuen Format des DWD
- Übernahme der Anemometerhöhe aus der neuen AKTerm des DWD
- Rechnung für ein Raster von Aufpunkten
- Berechnung der Zeitreihe der Zusatzbelastung für Beurteilungspunkte
- Berechnung der Immissionskennwerte der Zusatzbelastung
- Berechnung der Immissionskennwerte der Gesamtbelastung aus Zeitreihen
- Gegliedertes Gelände
- Geschachtelte Netze
- Verifikation nach VDI 3945 Blatt 3

Für die Behandlung der Geruchsausbreitung sind folgende Erweiterungen vorgenommen:

- Berechnung der Geruchsstundenhäufigkeit
- Schätzung des Stichprobenfehlers für Geruchsstundenhäufigkeiten

Die Berechnung der Abgasfahnenüberhöhung nach der Richtlinie VDI 3784 Blatt 2 *Ausbreitungsrechnung bei Ableitung von Abgasen über Kühltürme* erfordert das Programm *VDISP*. Die Windows-Version kann vom VDI kostenlos bezogen werden,⁴ sie wird aber auch unter www.austal2000.de wie auch eine Linux-Version zur Verfügung gestellt.

Da es zur Zeit kein Windfeldmodell zur Gebäudeumströmung gibt, das generell von den zuständigen Landesbehörden für Ausbreitungsrechnungen nach TA Luft 2002 akzeptiert wird, ist in AUSTAL2000 eine Schnittstelle vorgesehen, über die extern vorgegebene Wind- und Turbulenzfelder eingelesen und für die Ausbreitungsrechnung verwendet werden können (siehe Abschnitt 10).

Senden Sie bitte Anmerkungen, Anregungen und evtl. Fehlerberichte⁵ per eMail an

⁴siehe www.vdi.de/vdisp

⁵Zur Bearbeitung eines Fehlerberichtes ist es erforderlich, daß alle Dateien mitgesandt werden, die zur Rekonstruktion des Fehlers notwendig sind.

- `info@austal2000.de` bei Rechnungen nach TA Luft,
- `info@austal2000g.de` bei Rechnungen zur Geruchsstundenhäufigkeit.

Die Ergebnisse einer Rechnung zur Geruchsausbreitung müssen in der Regel noch auf die in der Geruchs-Immissions-Richtlinie (GIRL) festgelegten Beurteilungsflächen umgerechnet werden. Hierfür wird das Zusatzprogramm A2KArea zur Verfügung gestellt, das von `www.austal2000g.de` bezogen werden kann. Installation (JAVA-Programm) und Handhabung sind in einem separaten Dokument beschrieben.

2 Änderungen in Version 2.0

Gegenüber Version 1.1 ist die Möglichkeit hinzugekommen, für einen Geruchsstoff die Geruchsstundenhäufigkeit zu bestimmen. Die Maßeinheit ist *Prozent der Gesamtstundenzahl*. In der Ausbreitungsrechnung wird der Geruchsstoff als inertes Gas behandelt. Folgende Erweiterungen gibt es:

1. In der Eingabedatei können zusätzlich Emissionen für den Stoff odor angegeben werden, wobei als Einheit GE/s zu wählen ist.
2. In der Protokolldatei wird zusätzlich die Geruchsstundenhäufigkeit in Prozent der Gesamtstundenzahl angegeben. Die statistische Unsicherheit wird — anders als bei den Konzentrationswerten — als Absolutwert angegeben, und zwar ebenfalls in Prozent der Gesamtstundenzahl.
3. In den Dateien `odor-j00x.dma` werden Geruchsstundenhäufigkeit und der geschätzte Stichprobenfehler abgespeichert.
4. In der Datei `odor-zbpz.dma` wird die Zeitreihe des Auftretens von Geruchsstunden an den Beurteilungspunkten abgespeichert. Angegeben ist die Wahrscheinlichkeit (in Prozent) für das Vorliegen einer Geruchsstunde zu der betreffenden Stunde. Die Wahrscheinlichkeit wird aus dem berechneten Konzentrationswert und seiner statistischen Unsicherheit bestimmt.
5. In der Verifikation 01 wird die Berechnung der Geruchsstundenhäufigkeit geprüft.

Die Ausbreitungsrechnung für den Stoff odor kann zusammen mit der Ausbreitungsrechnung für andere Stoffe durchgeführt werden.

3 Installation

Es wird eine Reihe von Archiven benötigt, die kostenlos von www.austal2000.de heruntergeladen werden können. Dort werden zur Verfügung gestellt:

<code>a2k-vers-programme-sys.zip</code>	Programme <i>AUSTAL2000</i> , <i>TALdiames</i> , <i>VDISP</i> und Batch-Dateien für das System <i>sys</i>
<code>a2k-vers-anleitung.zip</code>	Programmbeschreibung zu <i>AUSTAL2000</i>
<code>a2k-vers-rauhigkeit.zip</code>	Kataster der Rauheitslängen (Datei <code>r1.dat</code>)
<code>a2k-vers-verifikation.zip</code>	Verifikationsrechnungen (siehe Anhang E) zu <i>AUSTAL2000</i>
<code>a2k-vers-beispiele.zip</code>	Beispielrechnungen (Eingabedateien und Protokoll-dateien für EXE-Version W2)
<code>a2k-vers-quelltexte.zip</code>	Quelltexte der Programme
<code>a2k-vers-bericht.zip</code>	Projektbericht zu <i>AUSTAL2000</i>
<code>a2k-vers-validierung.zip</code>	Validierungsrechnungen (siehe Projektbericht)
<code>a2k-vers-test-scatter.zip</code>	Testrechnungen zur statistischen Unsicherheit (siehe Projektbericht)
<code>a2k-vers-test-area.zip</code>	Testrechnungen für eine große Flächenquelle (siehe Projektbericht)

Die aktuelle Versionsnummer *vers* ist 2.0.1. Sie benötigen mindestens die ersten 3 Archive. Zur Zeit werden Programme für folgende Systeme bereitgestellt (in Anhang B steht ein Geschwindigkeitsvergleich):

<i>sys</i>	System	<i>K</i>
<code>linux</code>	Linux, übersetzt mit GNU-C-Compiler 3.3.3	L2P
<code>linux-icc</code>	Linux, übersetzt mit Intel C-Compiler 7.1	I2P
<code>windows</code>	Windows NT/2000/XP, übersetzt mit GNU-C-Compiler 3.2.3	W2
<code>windows-msc</code>	Windows NT/2000/XP, übersetzt mit Microsoft C-Compiler 12.0	M2P

Der GNU-C-Compiler für Linux ist in der Regel bereits Bestandteil der jeweiligen Distribution, die Windows-Version ist kostenlos unter www.mingw.org zu erhalten.

Die Ergebnisse von Programmen, die mit verschiedenen Compilern übersetzt wurden, können sich im Rahmen der statistischen Unsicherheit des Verfahrens unterscheiden (ab Version 1.1 sollte dies nur noch in seltenen Fällen auftreten). In den Protokolldateien ist neben der Versionsnummer des Programms auch das Kürzel *K* angegeben, aus dem der verwendete Compiler zu ersehen ist.

3.1 Windows

1. Legen Sie zunächst einen Ordner an, in dem AUSTAL2000 installiert werden soll. Er kann einen beliebigen Namen haben, im folgenden wird er mit *AUSTAL2000* bezeichnet.
2. Kopieren Sie in den Ordner *AUSTAL2000* die gewünschten Archive.
3. Entpacken Sie die Archive in den Ordner *AUSTAL2000* unter Beibehaltung der in den Archiven vorgesehenen Pfade.

Damit ist die Installation abgeschlossen. Es werden keine Änderungen am System oder Eintragungen in die *Registry* vorgenommen. Sie können anschließend die Archive wieder löschen. Zum Deinstallieren löschen Sie einfach den gesamten Ordner *AUSTAL2000*.

3.2 Linux

1. Legen Sie zunächst ein Verzeichnis an, in dem AUSTAL2000 installiert werden soll. Es kann einen beliebigen Namen haben, im folgenden wird es mit *AUSTAL2000* bezeichnet.
2. Kopieren Sie in das Verzeichnis *AUSTAL2000* die gewünschten Archive.
3. Entpacken Sie jedes der Archive, also beispielsweise

```
lj@linde:/austal2000 > unzip a2k-2.0.1-programme-linux
```

Damit ist die Installation abgeschlossen. Sie können anschließend die Archive wieder löschen. Zum Deinstallieren löschen Sie einfach das gesamte Verzeichnis *AUSTAL2000*.

4 Arbeitsweise

Die Darstellung der Arbeitsweise bezieht sich auf ein Windows-System. Die Unterschiede bei einem Linux-System sind so geringfügig, daß auf sie nicht besonders hingewiesen wird.

Das Programm *AUSTAL2000* arbeitet nicht interaktiv. Vor Beginn der Ausbreitungsrechnung für ein Projekt sind alle erforderlichen Eingabedaten in einem Projektordner zusammenzustellen (siehe Abschnitt 5). Dann wird das Programm gestartet, die Ausbreitungsrechnung ohne weitere Interaktion mit dem Anwender durchgeführt und das Ergebnis der Rechnung im Projektordner abgespeichert (siehe Abschnitt 6). Die Rechnung wird in einer Protokolldatei protokolliert.

Das Programm wird in der Regel aus einem DOS-Fenster heraus gestartet. Sie erhalten ein DOS-Fenster über die Menu-Folge Start/Programme/Zubehör/Eingabeaufforderung. Machen Sie den Ordner *AUSTAL2000* zum aktuellen Ordner des DOS-Fensters. Anschließend können Sie das Programm durch Eingabe von

```
austal2000 [-D] Projekt [Option]
```

starten, wobei *Projekt* durch den Namen des von Ihnen angelegten Projektordners zu ersetzen ist. Bei dieser Pfadangabe kann unter Windows wahlweise der Vorwärts-Schrägstrich (/) oder der Rückwärts-Schrägstrich (\) verwendet werden.

Ist keine Option angegeben, dann wird vom Programm eine Ausbreitungsrechnung durchgeführt. Sonst wird, je nach dem Wert von *Option*, eine der folgenden Aktionen ausgeführt:

- a : Die Auswertung der Rechenergebnisse aus einer zuvor durchgeführten Ausbreitungsrechnung, insbesondere der Zeitreihen für Beurteilungspunkte, wird noch einmal durchgeführt (siehe Abschnitt 7).
- l : Es wird eine Windfeldbibliothek erzeugt (siehe Abschnitt 9), sofern komplexes Gelände vorliegt, und es wird keine Ausbreitungsrechnung durchgeführt. Eine eventuell schon vorhandene Windfeldbibliothek wird dabei überschrieben.
- z : Ist eine Zeitreihenrechnung mit einer AKTerm vorgesehen, dann wird mit dieser Option nur die Umwandlung der AKTerm in eine Zeitreihendatei *zeitreihe.dmna* bewirkt. Diese Datei kann dann für die Ausbreitungsrechnung ergänzt werden (siehe Abschnitt 7).

Wird beim Programmaufruf als erstes Argument -D angegeben, dann wird eine bereits vorhandene Protokolldatei zu Anfang gelöscht. Sonst wird das neue Protokoll an das alte angehängt.

Mit der Option -Agerman kann das Programm angewiesen werden, in den Ausgabedateien bei der Darstellung von Gleitkommazahlen ein Dezimal-Komma zu verwenden (Standard ist ein Dezimal-Punkt). Dies betrifft auch die Ergebnisse in der Protokolldatei. Diese Option betrifft nicht die Eingabedateien. Dort sind beide Schreibweisen zulässig, wobei in DMNA-Dateien im Dateikopf explizit angegeben werden muß, welche Schreibweise verwendet wird (siehe Anhang A).

Sie können das Programm auch durch einen Doppelklick auf den Programmnamen im Explorer starten. Dann wird automatisch ein DOS-Fenster geöffnet und Sie werden nach dem Namen des Projektordners gefragt. Optionen können durch Leerzeichen getrennt dahinter angegeben werden. Ist die Rechnung fertig, dann müssen Sie noch einmal die Return-Taste drücken, damit das Fenster wieder verschwindet.

5 Eingabedaten für die Ausbreitungsrechnung

Die Rechnung wird in einem kartesischen Koordinatensystem durchgeführt, dessen x -Achse von West nach Ost und dessen y -Achse von Süd nach Nord verläuft. Alle Längen- und Koordinatenangaben erfolgen in Meter und beziehen sich auf dieses Koordinatensystem. Die absolute Lage des Nullpunktes des Koordinatensystems wird vom Anwender für jedes Projekt in Gauß-Krüger-Koordinaten festgelegt. Praktischerweise wählt man den Nullpunkt so, daß er in der Nähe des Emissionsschwerpunktes liegt.

Die Parameter gx und gy sind die einzigen Parameter, bei denen Koordinatenangaben in Gauß-Krüger-Darstellung zulässig sind. Alle anderen Koordinatenangaben dürfen betragsmäßig nicht größer als 200 000 sein.

Es wird ein rechteckiges Rechennetz verwendet, das horizontal äquidistant unterteilt ist und vertikal (z -Achse) mit der Höhe zunehmende Maschenweiten besitzt. Es können auch mehrere Rechennetze gleichzeitig verwendet werden, die vertikal gleich gerastert sind, sich aber horizontal durch Ausdehnung und Maschenweite unterscheiden (siehe Abschnitt 11).

Folgende Dateien werden benötigt:

1. Die Textdatei `austal2000.txt` mit den wichtigsten Eingabeparametern wie z.B. Rechengebiet, Emissionsquellen, Quellstärken (im Projektordner).
2. Eine meteorologische Zeitreihe oder eine Häufigkeitsstatistik von Ausbreitungssituationen (Pfadangabe in `austal2000.txt`).
3. Bei zeitabhängigen Emissionsparametern: Die Zeitreihe der Parameterwerte in der Datei `zeitreihe.dmna` (im Projektordner).
4. Bei situationsabhängigen Parametern (Statistikrechnung): Für jeden situationsabhängigen Parameter eine DMNA-Datei mit den Werten (im Projektordner).
5. Bei automatischer Bestimmung von z_0 : Das Rauigkeitskataster von Deutschland in der Datei `r1.dat` (im Ordner `AUSTAL2000`).
6. Bei komplexem Gelände: Das Geländeprofil für das gewählte Rechengebiet in der Datei `zg00.dmna` (im Projektordner). Es kann automatisch aus einem digitalen Geländemodell erzeugt werden (Pfadangabe mit dem Parameter `gh` in `austal2000.txt`).

Die Eingabe für `AUSTAL2000` besteht mindestens aus der Textdatei `austal2000.txt` und entweder einer meteorologischen Zeitreihe (AKTerm) oder einer Häufigkeitsstatistik von Ausbreitungssituationen (AKS). Beide können beim Deutschen Wetterdienst (DWD) bezogen werden. Für Testzwecke hat der DWD 5 Zeitreihen über aufeinander folgende Jahre (`anno95.akt` bis `anno99.akt`⁶) und die entsprechende AKS über diesen Zeitraum (`anonym.aks`) zur Verfügung gestellt.

⁶Die Zeitreihen im neuen Format haben die Dateinamen `anno95.akterm` bis `anno99.akterm`

Statt einer AKTerm können Sie auch direkt die Zeitreihe `zeitreihe.dmn` der meteorologischen Parameter und eventueller zeitabhängiger Emissionsparameter vorgeben. Näheres hierzu ist im Abschnitt 7 beschrieben.

Bei Rechnungen für komplexes Gelände wird zusätzlich die Datei `zg00.dmn` mit dem Geländeprofil benötigt. Sie enthält für die Gitterpunkte des Rechengitters die Geländehöhen (siehe Abschnitt 9, beachten Sie auch Abschnitt 11).

Die Textdatei `austal2000.txt` enthält die Angaben zu dem zu bearbeitenden Projekt. Sie kann mit einem einfachen Editor, z.B. *Notepad*, erreichbar über die Menu-Folge `Start/Programme/Zubehör/Editor`, erstellt werden. Bei Verwendung eines anderen Editors ist es wichtig, darauf zu achten, daß die Datei als einfache Textdatei und nicht als RTF-Datei oder als Word-Dokument gespeichert wird.

Die Eingabedatei besteht aus Kommentarzeilen und aus Datenzeilen.⁷ Kommentarzeilen beginnen mit einem Minuszeichen und können beliebig eingestreut sein. Datenzeilen beginnen mit dem Namen eines Parameters und enthalten anschließend durch Leerzeichen oder Tabulatoren getrennt einen oder mehrere Werte, die diesem Parameter zugeordnet sind. Als Werte können Zahlen oder Zeichenketten auftreten. Zahlen können wahlweise mit einem Dezimal-Punkt oder einem Dezimal-Komma geschrieben werden (Tausender-Trennzeichen sind nicht zulässig), Zeichenketten sind in der Regel in Doppelhochkommata eingeschlossen. An Datenzeilen können, durch ein einfaches Hochkomma⁸ getrennt, Kommentare angefügt werden.

Zahlenwerte werden in den Einheiten Gramm, Meter und Sekunde angegeben, der Wärmestrom in MW, die Temperatur in Grad Celsius. Dies bedeutet beispielsweise auch, daß Windgeschwindigkeiten in m/s und Quellstärken in g/s anzugeben sind. Geruchsemissionen sind in GE/s anzugeben. Für Parameter, die nicht angegeben sind, werden Standardwerte angenommen. Zeitangaben haben das Format *Jahr-Monat-Tag.Stunde:Minute:Sekunde*.

Die Eingabe ist beendet, wenn entweder die Eingabedatei zu Ende ist oder eine Zeile mit einem Stern in der ersten Spalte angetroffen wird. Eine einfache Eingabedatei könnte beispielsweise folgendermaßen aussehen:

⁷Eine Zeile darf höchstens 31996 Zeichen lang sein.

⁸auf der deutschen Tastatur über dem Zeichen #.

```

-- Beispiel einer einfachen Eingabedatei
-----
ti "demo-1"          ' Kennzeichnung des Projektes
az "../anno95.akt"  ' zu verwendende AKTerm
gx 3500000          ' Rechtswert des neuen Nullpunktes
gy 5500000          ' Hochwert des neuen Nullpunktes
hq      50          ' Quellhöhe (m)
-----
so2  5.56          ' g/s, entspricht 20 kg/h
*
```

In diesem Beispiel befindet sich die Quelle in der Mitte des Rechengebiets, das vom Programm festgelegt wird, und z_0 wird vom Programm unter Rückgriff auf das Rauigkeits-Kataster berechnet.

Die folgende Auflistung enthält die zur Zeit angebbaren Parameter (ohne die Definition der Quellstärken) und ihre Standardwerte. Sie sind hier in alphabetischer Folge aufgeführt, können aber in beliebiger Reihenfolge stehen. In runden Klammern ist jeweils die Anzahl der erforderlichen Werte angegeben, wobei n_q die Anzahl der Quellen, n_n die Anzahl der Rechenetze, n_p die Anzahl der Beurteilungspunkte (maximal 10) und n_z die Anzahl der Schichten in der Vertikalen bezeichnet.

aq (n_q) Ausdehnung der Quelle in x -Richtung, wenn keine Drehung vorliegt (Standardwert 0). Eine Quelle wird als Quader definiert, der um die vertikale Achse gedreht sein kann. Ohne Drehung bezeichnen xq und yq in der Aufsicht die linke untere Ecke des Quaders und hq ist sein Abstand vom Erdboden. aq , bq und cq sind seine Ausdehnungen in x -, y - und z -Richtung. Der Winkel wq bezeichnet eine Drehung um die linke untere Ecke gegen den Uhrzeigersinn (in Grad).

as (1) Name der Häufigkeitsstatistik von Ausbreitungssituationen (AKS). Steht die AKS nicht im Projektordner, dann ist der Pfad relativ zum Projektordner oder absolut anzugeben. Beispiele:

```

as anonym.aks      ' Datei steht im Projektordner
as ../anonym.aks   ' Datei steht im übergeordneten Ordner
as f:/aks/anonym.aks ' Datei steht auf einer anderen Platte
```

Wenn im Projekt-Ordner keine Zeitreihe `zeitreihe.dma` steht (siehe Abschnitt 7), dann muß für eine Rechnung entweder mit `as` eine Statistik oder mit `az` eine AKTerm angegeben sein.

az (1) Name der meteorologischen Zeitreihe (AKTerm) (vgl. `as`).

bq (n_q) Ausdehnung der Quelle in y -Richtung, wenn keine Drehung vorliegt (Standardwert 0), vgl. `aq`.

cq (n_q) Vertikale Ausdehnung der Quelle (Standardwert 0), vgl. `aq`.

d0 (1) Verdrängungshöhe d_0 der meteorologischen Profile (Standardwert $6z_0$).

- dd (n_n) Horizontale Maschenweite des Rechengitters (Standardwert ist die kleinste angegebene mittlere Quellhöhe $hq+0.5*cq$, mindestens aber 15 m). Das Rechengitter besteht in x -Richtung aus nx Gittermaschen beginnend bei $x0$, entsprechend in y -Richtung. Ist die Lage und die Ausdehnung des Rechengebietes nicht angegeben, dann wird es so gewählt, daß für jede Quelle ein Kreis mit dem 50-fachen der mittleren Quellhöhe im Inneren des Rechengebietes liegt.
- dq (n_q) Durchmesser der Quelle (Standardwert 0). Dieser Parameter wird nur zur Berechnung der Abgasfahnenüberhöhung verwendet, vgl. qq.
- gh (1) Name der Datei mit dem digitalen Geländemodell (im Format Arcinfo-GRID-ASCII), sofern das Geländeprofil `zg00.dma` noch nicht vorliegt. Andernfalls wird dieser Parameter nur verwendet um anzuzeigen, daß für komplexes Gelände gerechnet werden soll. In diesem Fall reicht als Parameterwert ein Stern (siehe Abschnitt 9). Die maximale Steilheit des Geländes wird in der Protokolldatei vermerkt.
- gx (1) Rechtswert des Koordinaten-Nullpunktes in Gauß-Krüger-Koordinaten. Die angegebenen Koordinaten werden bei Bedarf, z.B. zur Berechnung von z_0 , auf den dritten Streifen umgerechnet (wird in der Protokoll-Datei vermerkt). Zulässiger Wertebereich bei Darstellung im dritten Streifen: $3279000 \leq gx \leq 3957000$.
- gy (1) Hochwert des Koordinaten-Nullpunktes in Gauß-Krüger-Koordinaten (vgl. gx). Zulässiger Wertebereich bei Darstellung im dritten Streifen: $5229000 \leq gy \leq 6120000$.
- ha (1) Anemometerhöhe h_a über Grund (Standardwert $10 \text{ m} + d_0$). Wird eine AKTerm verwendet, die Angaben zur Anemometerhöhe für alle Rauigkeitsklassen enthält, dann wird standardmäßig hieraus der zum verwendeten z_0 gehörige Wert genommen.⁹
- hh ($n_z + 1$) Vertikales Raster, angegeben durch die z -Koordinaten der Randpunkte der Schichten als Höhe über Grund. Die Standardsetzung ist
 hh 0 3 6 10 16 25 40 65 100 150 200 300 400 500 600 700 800 1000 1200 1500.
 Ein Setzen dieses Parameters ist nur wirksam, wenn gleichzeitig die Option NOSTANDARD angegeben ist (siehe Parameter os).
- hp (n_p) Höhe des Monitorpunktes (Beurteilungspunkt) über Grund (Standardwert 1.5).
- hq (n_q) Höhe der Quelle (Unterkante) über dem Erdboden (Standardwert nicht vorhanden, dieser Parameter muß gesetzt werden), vgl. aq.

⁹ Zur Klarstellung:

Die Windgeschwindigkeit u wird bei neutraler Schichtung gemäß TA Luft und VDI 3783 Blatt 8 nach folgender Gleichung bestimmt:

$$u(z) = u_a \ln\left(\frac{z - d_0}{z_0}\right) / \ln\left(\frac{h_a - d_0}{z_0}\right) \quad \text{für } z \geq d_0 + 6z_0 \quad (1)$$

Hier ist u_a die Windgeschwindigkeit am Ort des Anemometers (aus AKTerm, AKS oder selbst definierter Zeitreihe), z die Höhe über dem Erdboden und für h_a wird der Zahlenwert eingesetzt, der als Parameter ha angegeben ist.

lq (n_q) Flüssigwassergehalt der Abgasfahne in kg/kg bei Ableitung der Abgase über einen Kühlturm (Standardwert 0). Ist dieser Parameter mit einem Wert größer 0 angegeben, dann wird für die betreffende Quelle die Abgasfahnenüberhöhung gemäß VDI 3784 Blatt 2 berechnet. lq kann zeitabhängig vorgegeben werden.

nx (n_n) Anzahl der Gittermaschen in x -Richtung, vgl. dd.

ny (n_n) Anzahl der Gittermaschen in y -Richtung, vgl. dd.

os (1) Zeichenkette zur Festlegung von Optionen. Werden mehrere Optionen angegeben, dann sind die Schlüsselworte bzw. Zuweisungsteile unmittelbar hintereinander durch ein Semikolon getrennt zu schreiben.

Bei Standardrechnungen sind folgende Optionen möglich:

NESTING Statt eines einzigen Netzes mit einheitlicher Maschenweite werden geschichtete Netze mit unterschiedlicher Maschenweite verwendet (siehe Abschnitt 11).

SCINOTAT Alle berechneten Konzentrations- oder Depositionswerte werden in wissenschaftlicher Schreibweise (Exponential-Darstellung mit 4 signifikanten Stellen) dargestellt.

Abweichungen vom Standard-Verhalten werden durch die Option **NOSTANDARD** ermöglicht. So wird mit dieser Option die Vorgabe des Parameters **hh** aktiviert (siehe **hh**). Es sind u.a. folgende Angaben in Kombination mit der Option **NOSTANDARD** möglich (siehe auch Anhang E):

BS= c_{BS} Bei Rechnungen mit dem Stoff **odor** wird der Wert c_{BS} als Beurteilungsschwelle verwendet.

SPECTRUM Bei sedimentierendem Staub wird die Masse innerhalb einer Korngrößenklasse gleichmäßig über den gesamten Korngrößenbereich verteilt und die Sedimentationsgeschwindigkeit wird für jedes Partikel entsprechend seinem aerodynamischen Durchmesser berechnet, siehe Anhang D.

qq (n_q) Wärmestrom M_q des Abgases in MW (Standardwert 0) zur Berechnung der Abgasfahnenüberhöhung nach VDI 3782 Blatt 3. Er ist aus der Abgastemperatur T_q (in ° Celsius) und dem Volumenstrom des Abgases (f) im Normzustand R^{10} (in m^3/s) gemäß $M_q = 1.36 \cdot 10^{-3} \cdot (T_q - T_0) \cdot R$ zu berechnen mit $T_0 = 10^\circ$ Celsius. Wird nur der Parameter **qq** aber nicht **vq** angegeben, dann wird die Abgasfahnenüberhöhung nach VDI 3782 Blatt 3 nur mit dem thermischen Anteil (wie in der alten TA Luft) berechnet. Der Impulsanteil kann nur wirksam werden, wenn sowohl **vq** wie **dq** größer 0 sind. **qq** kann zeitabhängig vorgegeben werden.

Wird der Parameter **qq** verwendet, dann sollte der Parameter **tq** nicht angegeben werden oder den Wert 0 besitzen.

¹⁰Umrechnungsformel $R = 0.25 \cdot 3.1415926 \cdot dq \cdot dq \cdot vq \cdot 273.15 / (273.15 + tq)$

- qs (1) Qualitätsstufe zur Festlegung der Freisetzungsrates von Partikeln (Standardwert 0). Eine Erhöhung um 1 bewirkt jeweils eine Verdoppelung der Partikelzahl und damit eine Verringerung der statistischen Unsicherheit (Streuung) um den Faktor $1/\sqrt{2}$. Allerdings verdoppelt sich damit auch die Rechenzeit. Entsprechendes gilt für eine Verringerung des Wertes. Standardmäßig wird eine AKS mit mindestens 43 000 000 Partikeln gerechnet, eine AKTerm mit mindestens 63 000 000 Partikeln.
- rq (n_q) Relative Feuchte der Abgasfahne in Prozent bei Ableitung der Abgase über einen Kühlturm (Standardwert 0). Ist dieser Parameter mit einem Wert größer 0 angegeben, dann wird für die betreffende Quelle die Abgasfahnenüberhöhung gemäß VDI 3784 Blatt 2 berechnet. rq kann zeitabhängig vorgegeben werden.
- sd (1) Anfangszahl des Zufallszahlengenerators (Standardwert 11111). Durch Wahl einer anderen Zahl wird eine andere Folge von Zufallszahlen generiert, so daß in den Ergebnissen eine andere Stichprobe vorliegt.
- sq (n_q) Zeitskala T_U (siehe VDI 3945 Blatt 3 Abschnitt D5) zur Berechnung der Abgasfahnenüberhöhung. Wird dieser Parameter angegeben, dann wird die Abgasfahnenüberhöhung nach dem in VDI 3945 Blatt 3 Abschnitt D5 angegebenen Verfahren berechnet, wobei der Parameter vq als Zusatzgeschwindigkeit U interpretiert wird. sq kann zeitabhängig vorgegeben werden.
- ti (1) Zeichenkette zur Kennzeichnung des Projektes (maximal 31 Zeichen). Diese Kennzeichnung wird in alle bei der Rechnung erzeugten Dateien übernommen.
- tq (n_q) Abgastemperatur in Grad Celsius (Standardwert 0) zur Berechnung der Abgasfahnenüberhöhung. tq kann zeitabhängig vorgegeben werden.
Wird der Parameter tq verwendet, dann sollte der Parameter qq nicht angegeben werden oder den Wert 0 besitzen.
- vq (n_q) Ausströmgeschwindigkeit des Abgases (Standardwert 0), vgl. qq. Dieser Parameter ist nur wirksam, wenn der Parameter dq auf einen Wert größer Null gesetzt ist. vq kann zeitabhängig vorgegeben werden.
- wq (n_q) Drehwinkel der Quelle um eine vertikale Achse durch die linke untere Ecke (Standardwert 0), vgl. aq.
- x0 (n_n) Linker (westlicher) Rand des Rechengebietes, vgl. dd.
- xa (1) x -Koordinate der Anemometerposition (Standardwert 0). Die Position des Anemometers muß innerhalb des Rechengebietes liegen.
- xp (n_p) x -Koordinate des Monitorpunktes (Beurteilungspunkt).
- xq (n_q) x -Koordinate der Quelle (Standardwert 0), vgl. aq.
- y0 (n_n) Unterer (südlicher) Rand des Rechengebietes, vgl. dd.
- ya (1) y -Koordinate der Anemometerposition (Standardwert 0), vgl. xa.

y_p (n_p) y -Koordinate des Monitorpunktes (Beurteilungspunkt).

y_q (n_q) y -Koordinate der Quelle (Standardwert 0), vgl. a_q .

z_0 (1) Rauigkeitslänge z_0 . Ist dieser Parameter nicht angegeben, dann wird er automatisch mit Hilfe des Rauigkeits-Katasters berechnet (erfordert g_x und g_y). Sind mehrere Quellen definiert, wird dabei zunächst für jede Quelle ein eigener Wert von z_0 berechnet und anschließend ein mittleres z_0 , wobei die Einzelwerte mit dem Quadrat der Quellhöhe gewichtet werden. Der berechnete Wert wird in der Protokolldatei vermerkt.

Die Quellstärken bzgl. der verschiedenen Schadstoffe werden so angegeben wie die anderen Quellparameter auch. Der Parametername bezeichnet die Stoffkomponente und als Werte sind die Quellstärken der einzelnen Quellen bezüglich dieser Komponente aufzuführen (in g/s bzw. GE/s).

Folgende Gase können angegeben werden:

so2	Schwefeldioxid, SO ₂
no	Stickstoffmonoxid, NO
no2	Stickstoffdioxid, NO ₂
nox	Stickstoffoxide, NO _x (angegeben als NO ₂)
bz1	Benzol
tce	Tetrachlorethen
f	Fluorwasserstoff, angegeben als F
nh3	Ammoniak, NH ₃
hg	Quecksilber, Hg
xx	Unbekannt
odor	Geruchsstoff

Der Stoff NO_x wird vom Programm unabhängig von den Stoffen NO und NO₂ behandelt. Das bedeutet, daß hier noch einmal die gleichen Emissionen anzugeben sind wie bei NO und NO₂, also nach der Rechenvorschrift $nox = no2 + 1.53 * no$. Der Stoff xx kann verwendet werden, wenn für einen Stoff, der nicht zuvor aufgeführt wurde, eine Ausbreitungsrechnung „gemäß TA Luft“ durchgeführt werden soll. Die gasförmige Komponente von xx und der Geruchsstoff odor werden ohne Deposition gerechnet.

Für Stäube sind verschiedene Korngrößenklassen (1 bis 4 und *unbekannt*) zu unterscheiden. Der Parametername besteht aus dem Stoffnamen, einem Minuszeichen und der Nummer der Korngrößenklasse. Staub mit einem aerodynamischen Korngrößendurchmesser größer als 10 µm hat, wenn seine Aufteilung auf Klasse 3 und 4 nicht bekannt ist, die Klassenbezeichnung u. Folgende Stäube können angegeben werden:

pm	Staub allgemein
as	Arsen, As
pb	Blei, Pb
cd	Cadmium, Cd
ni	Nickel, Ni
hg	Quecksilber, Hg
tl	Thallium, Tl
xx	Unbekannt

Schwebstaub (PM-10) wird durch die beiden Komponenten pm-1 und pm-2 repräsentiert.

6 Ergebnisse der Ausbreitungsrechnung

Das Programm legt zunächst im Projektordner eine Protokolldatei (Textdatei) mit dem Namen `austal2000.log` an, in der es u.a. den Zeitpunkt der Rechnung, die Programmversion und den Namen des Projektordners vermerkt. Ist eine solche Datei bereits vorhanden, wird sie nicht neu beschrieben sondern das neue Protokoll wird an das alte angehängt.¹¹ Anschließend werden die aus der Eingabedatei `austal2000.txt` gelesenen Parameter aufgelistet. Nach einigen Informationen zum Rechenlauf folgt eine Kurzauswertung der Ergebnisse.

Die Ergebnisse der Ausbreitungsrechnung werden für die verschiedenen Stoffe jeweils in separaten Dateien abgelegt. Die Dateinamen haben die Form

Stoff-TypParameterNetz

und die Namensweiterung `.dmna`. Der Aufbau dieser Dateien ist im Anhang A beschrieben. Die Daten werden schichtweise ausgeschrieben, wobei so viele Schichten ausgegeben werden, daß alle Aufpunkthöhen erfaßt werden. Haben alle Aufpunkte die Standardhöhe von 1.5 m, dann wird nur die bodennächste Schicht ausgegeben. Die Höhenwerte der Begrenzungsflächen dieser Schichten stehen im Kopf der Datei als Parameter SK (siehe Eingabeparameter `hh`).

Welche Ergebnistypen *Typ* ausgegeben werden, hängt davon ab, welche Immissionswerte für den betreffenden Stoff existieren. Die folgende Tabelle gibt eine Übersicht über die verwendeten Typen:

¹¹Wenn beim Testen häufig derselbe Projektordner verwendet wird, sollte man die Projektdatei vor jedem Lauf per Hand löschen, damit man leichter die aktuellen Ergebnisse findet, oder die Option `-D` beim Programmaufruf verwenden.

Stoff	Mittelungszeit		
	Jahr	Tag	Stunde
so2	j00	t03	s24
no2	j00		s18
nox	j00		
pm	j00 dep	t35	
nh3	j00 dep		
xx	j00 dep		
odor	j00		

j00 : Jahresmittel der Konzentration/Geruchsstundenhäufigkeit

dep : Jahresmittel der Deposition

t nn : Maximales Tagesmittel mit nn Überschreitungen

s nn : Maximales Stundenmittel mit nn Überschreitungen

Konzentrationswerte für Stäube (betrifft nur pm, pb, cd und xx) werden nur aus den Korngrößenklassen 1 und 2 berechnet. In den Depositionswerten sind alle Komponenten berücksichtigt (auch Gas bei hg).

Für so2 und pm wird zusätzlich der höchste Tagesmittelwert (Typbezeichnung t00) ausgegeben, für so2 und no2 zusätzlich der höchste Stundenmittelwert (Typbezeichnung s00). Für alle anderen, in der Tabelle nicht erwähnten Stoffe wird nur der Jahresmittelwert der Konzentration (Typbezeichnung j00) bzw. der Deposition (Typbezeichnung dep) ausgegeben.

Die Parameterbezeichnung *Parameter* besteht aus einem Buchstaben. Dabei steht z für den Wert der Zusatzbelastung. Kann vom Programm für die betreffende Größe die statistische Unsicherheit geschätzt werden, dann wird sie in einer separaten Datei gespeichert, die die Parameterbezeichnung s hat. In dieser Datei steht bei Stoffen, für welche die Konzentration oder die Deposition berechnet wird, die geschätzte relative statistische Unsicherheit (bezogen auf den berechneten Wert \bar{c} , also σ_c/\bar{c}). Beim Stoff odor steht dort die absolute Unsicherheit der ausgewiesenen Geruchsstundenhäufigkeit \bar{h} , also σ_h (beide angegeben als Prozent der Jahresstunden).¹² Bei tagesbezogenen Werten wird zusätzlich noch eine Datei erzeugt, die die Nummer des Tages angibt, an dem der ausgewiesene Immissionskennwert auftrat. Sie hat die Parameterbezeichnung i. Die Numerierung der Tage beginnt für den ersten Tag der Zeitreihe mit der Zahl 1.

Die Netzbezeichnung *Netz* fehlt, wenn nur mit einem einzigen Rechnernetz gearbeitet wird. Werden mehrere, geschachtelte Netze verwendet, dann enthält *Netz* die Nummer des Netzes, dargestellt als zweistellige Zahl mit führender Null, beginnend mit 1.

¹²Bei Schwebstaub kann es sein, daß der ausgewiesene Wert für die statistische Unsicherheit zu gering ist. Das liegt daran, daß hier für das Ergebnis mehrere Komponenten addiert werden, von denen das Programm annimmt, daß die statistischen Unsicherheiten nicht miteinander korreliert sind. Das ist aber bei den Komponenten pm-1 und pm-2 nicht der Fall, wenn sie von demselben Emittenten stammen.

Zeitreihen an den Beurteilungspunkten (Monitorpunkte) haben die Typbezeichnung zbpz. Sie werden ausgeschrieben, wenn mit einer meteorologischen Zeitreihe gerechnet wird, Monitorpunkte definiert sind und für den betreffenden Stoff ein Kurzzeit-Immissionswert existiert.

Bei einer Statistikrechnung können keine tagesbezogenen Immissionskennwerte berechnet werden. Stundenbezogene Immissionskennwerte werden als Perzentile berechnet.

Ist beispielsweise bei einer Ausbreitungsrechnung ohne Netzschachtelung als emittierter Stoff SO₂ angegeben und sind Monitorpunkte definiert, dann werden folgende Dateien erzeugt:

Zeitreihenrechnung: so2-j00z.dmna
so2-j00s.dmna
so2-t03z.dmna
so2-t03s.dmna
so2-t03i.dmna
so2-t00z.dmna
so2-t00s.dmna
so2-t00i.dmna
so2-s24z.dmna
so2-s24s.dmna
so2-s00z.dmna
so2-s00s.dmna
so2-zbpz.dmna

Statistikrechnung: so2-j00z.dmna
so2-j00s.dmna
so2-s24z.dmna
so2-s00z.dmna

Die Konzentrationsfelder werden als 3-dimensionale Tabellen (Indizes i , j und k) gespeichert. Der Index i läuft dabei in x -Richtung, der Index j in y -Richtung und der Index k in z -Richtung. Die Indexzählung beginnt mit dem Wert 1. In der Regel wird nur die Konzentration in der bodennahen Schicht ausgewiesen, so daß der Index k nur den Wert 1 annimmt. Sind höher gelegene Aufpunkte definiert, dann enthält die Ausgabe so viele Schichten, daß auch der höchst gelegene Beurteilungspunkt noch erfaßt wird. Die Tabelle ist so ausgedruckt, daß die Zahlen innerhalb einer Schicht die gleiche räumliche Anordnung besitzen wie die zugehörigen Maschenmittelpunkte auf der Landkarte. Die Zahlenwerte sind in der gleichen Einheit angegeben wie der Immissionswert. Geruchsstundenhäufigkeiten sind in Prozent (der Jahresstunden) angegeben.

Die Depositionsfelder sind 2-dimensionale Tabellen und ansonsten genauso angelegt wie die

Konzentrationsfelder.

Die Zeitreihen der stündlichen Konzentrationswerte an den Monitorpunkten sind 2-dimensionale Tabellen. Der Zeilenindex i läuft über die Stunden des Jahres, der Spaltenindex j über die Monitorpunkte. Beide Indizes beginnen mit dem Wert 1. Ungültige Werte sind durch einen negativen Wert gekennzeichnet. Die Zahlenwerte sind in der gleichen Einheit angegeben wie der Immissionswert.

Die genaue Struktur der Dateien ist im Anhang A beschrieben.

In der Protokolldatei werden alle erzeugten Dateien aufgelistet. Zusätzlich werden die aus diesen Dateien gewonnenen Immissionskennwerte aufgelistet. Jeder Kennwert steht dabei in einer Zeile mit folgendem Aufbau:

Stoff Typ : Wert (+/- Toleranz%) bei $x= x$ m, $y= y$ m (*Netz* : i , j)

Hierbei sind	<i>Stoff</i>	der betrachtete Schadstoff,
	<i>Typ</i>	Mittelungszeit und zulässige Überschreitungen,
	<i>Wert</i>	der berechnete Immissionskennwert,
	<i>Toleranz</i>	seine statistische Unsicherheit,
	x, y	die Koordinaten des gefundenen Maximums,
	i, j	die Indexwerte der zugehörigen Masche,
	<i>Netz</i>	die Nummer des zugehörigen Netzes (kann fehlen).

Beispiel:

S02 S24 : 163 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (+/- 41.0%) bei $x= -125$ m, $y= 325$ m (1: 18, 27)

7 Rechnen mit Zeitreihen

Bisher wurde davon ausgegangen, daß in den Eingabedaten eine Zeitreihe nur in Form einer AKTerm (meteorologische Zeitreihe des DWD, Eingabeparameter az) auftritt. Eine AKTerm ist eine Textdatei, die fortlaufend für jede Stunde des Jahres eine Zeile mit meteorologischen Parametern enthält. Es werden zwei Formate unterstützt:

1. Jede Zeile entält 24 Zeichen mit folgender Bedeutung:¹³

Parameter	Position
Stationsnummer	1 bis 5
Datum (JJJJMMTTSS)	6 bis 15
Interpolationskennung	16
Windrichtung (Dekagrad)	17 bis 18
Windgeschwindigkeit (Knoten)	19 bis 20
Klug/Manier-Klasse (1..6)	21
Turner-Klasse	22
ww-Schlüsselzahl	23 bis 24

Die Stationsnummer muß eine 5-stellige ganze Zahl sein. Bei fehlenden Datensätzen sind zwar Stationsnummer und Datum angegeben, aber die Meßwerte sind durch Leerzeichen ersetzt. AUSTAL2000 wertet auch Datensätze, bei denen die Klug/Manier-Klasse den Wert 0 hat, als ungültig bzw. fehlend.

2. Die Datei besteht aus einem Dateikopf und einem Datensatz.¹⁴ In dem Dateikopf stehen zu Anfang bis zu 5 Kommentarzeilen, die mit einem Stern ('*') als erstes Zeichen eingeleitet werden. Nach den Kommentarzeilen folgt eine Zeile mit den rechnerischen Anemometerhöhen für verschiedene Rauigkeitslängen. Sie beginnt mit der Zeichenfolge

+ Anemometerhoehen (0.1m):

gefolgt von den 9 ganzzahligen Anemometerhöhen in Einheiten von 0,1 m (jeweils 4 Ziffern ohne führende Nullen, getrennt durch ein Leerzeichen) für die Rauigkeitslängen 0,01 m bis 2 m aus dem Anhang 3 der TA Luft.

Der Datensatz enthält Zeilen mit jeweils 16 Einträgen, die durch genau ein Leerzeichen voneinander getrennt sind. Die Bedeutungen der Einträge sind:

¹³Dieses Format wird vom DWD seit dem 01.04.1998 verwendet.

¹⁴Dieses Format wird vom DWD seit dem 01.04.2002 verwendet.

Eintrag	Bedeutung	Position	Wertebereich
KENN	Kennung für das Datenkollektiv	1 bis 2	AK
STA	Stationsnummer	4 bis 8	00001-99999
JAHR	Jahr	10 bis 13	1800-2...
MON	Monat	15 bis 16	1-12
TAG	Tag	18 bis 19	1-31
STUN	Stunde	21 bis 22	0-23
NULL	numerisches Leerfeld	24 bis 25	0
QDD	Qualitätsbyte (Windrichtung)	27	0,1,2,9
QFF	Qualitätsbyte (Windgeschwindigkeit)	29	0,1,2,3,9
DD	Windrichtung	31 bis 33	0-360,999
FF	Windgeschwindigkeit	35 bis 37	0-999
QB	Qualitätsbyte (Wertstatus)	39	0-5,9
KM	Ausbreitungsklasse nach Klug/Manier	41	1-7,9
QB	Qualitätsbyte (Wertstatus)	43	0,1,9
HM	Mischungsschichthöhe (m)	45 bis 48	0-9999
QB	Qualitätsbyte (Wertstatus)	50	0-5,9

Beispiel:

* AKTERM-Zeitreihe, Deutscher Wetterdienst, Offenbach (KB1A)
 * Zeitraum 01/1995 bis 12/1995
 * anonymisierte Daten, Stand: 11.04.2002
 + Anemometerhoehen (0.1 m): 32 41 57 74 98 144 200 244 283
 AK 10999 1995 01 01 00 00 1 1 210 56 1 3 1 -999 9
 AK 10999 1995 01 01 01 00 1 1 220 64 1 3 1 -999 9
 AK 10999 1995 01 01 02 00 1 1 260 68 1 3 1 -999 9
 AK 10999 1995 01 01 03 00 1 1 270 65 1 3 1 -999 9
 AK 10999 1995 01 01 04 00 1 1 250 64 1 3 1 -999 9
 AK 10999 1995 01 01 05 00 1 1 250 64 1 3 1 -999 9
 ...

Das Qualitätsbyte für die Windrichtung kann folgende Werte annehmen:

QDD	Bedeutung
0	Windrichtung in Dekagrad
1	Windrichtung in Grad, Original in Dekagrad
2	Windrichtung in Grad, Original in Grad
9	Windrichtung fehlt

Das Qualitätsbyte für die Windgeschwindigkeit kann folgende Werte annehmen:

QFF	Bedeutung
0	Windgeschwindigkeit in Knoten
1	Windgeschwindigkeit in 0,1 m/s, Original in 0,1 m/s
2	Windgeschwindigkeit in 0,1 m/s, Original in Knoten (0,514 m/s)
3	Windgeschwindigkeit in 0,1 m/s, Original in m/s
9	Windgeschwindigkeit fehlt

Der Eintrag KM hat den Wert 7, wenn die Ausbreitungsklasse nicht bestimmbar ist und den Wert 9 als Fehlkennung.

Die Uhrzeit ist in UTC (GMT) angegeben. Werden die Daten als repräsentativ für den Zeitraum einer Stunde angesehen, dann ist die angegebene Uhrzeit das Ende dieser Stunde. Vom DWD sind 5 Zeitreihen dieser Art für aufeinander folgende Jahre (anno95.akt bis anno99.akt im kurzen Format bzw. im langen Format anno95.akterm bis anno99.akterm) für Testzwecke allgemein zur Verfügung gestellt worden.

Die AKTerm wird von AUSTAL2000 zunächst in eine Zeitreihe von Windrichtung r_a , Windgeschwindigkeit u_a und Monin-Obukhov-Länge L_M umgewandelt. Dabei werden die in Anhang 3 der TA Luft angegebenen Vorschriften zur Verarbeitung dieser Werte beachtet (Auffüllen von Lücken, Mindestgeschwindigkeit, Umverteilung der Windrichtung bei sehr geringer Windgeschwindigkeit, Beseitigung von Stufen).

Da der DWD explizit die Umrechnung $1 \text{ kn} = 0,514 \text{ m/s}$ angibt und bei seinen eigenen Rechnungen auch so verfährt, werden Windgeschwindigkeiten, die in Knoten angegeben sind, nach dieser Formel umgerechnet. Auch Windgeschwindigkeiten, die in Einheiten von 0,1 m/s angegeben sind aber im Original auf Knoten beruhen, werden zunächst in (ganzzahlige) Knoten umgerechnet und anschließend wieder in die Einheit m/s. Anschließend werden die Werte gleichmäßig auf die vorliegende Wertestufe verteilt. Die Windrichtung wird, auch wenn sie gradgenau angegeben ist, formal über eine Stufe von 1 Grad Breite verteilt und später wieder auf ganze Zahlen gerundet, damit die Verteilung auf Sektoren konsistenter berechnet werden kann. Die gesamte Umrechnung erfolgt in folgenden Schritten:

- AKTerm einlesen und Termine mit ungültigen Daten durch die Klug/Manier-Klasse 0 kennzeichnen.
- Windrichtung auf Grad und Windgeschwindigkeit auf m/s umrechnen und die Werte gleichmäßig über die Wertestufe verteilen (auswürfeln).
- Für umlaufende Winde zufällige Windrichtung wählen.
- Windrichtungsverteilung für geringe Windgeschwindigkeiten bestimmen.
- Meßlücken von 1 oder 2 Stunden Dauer durch Interpolation schließen.
- Windrichtung bei kurzzeitigen Kalmern durch Interpolation bestimmen.

- Windrichtung bei längeren Kalmen entsprechend der Verteilung für geringe Windgeschwindigkeiten auswürfeln.
- Minimalwerte der Windgeschwindigkeit einsetzen.
- Windgeschwindigkeit auf Vielfaches von 0,1 m/s und Windrichtung auf Vielfaches von 1 Grad runden.
- Mittlere Windgeschwindigkeiten berechnen (für *TALdiames*).

Ruft man *AUSTAL2000* mit der Option `-z` auf, also beispielsweise

```
austal2000 test/h50a95 -z
```

dann wird nur diese Umwandlung ausgeführt und die Zeitreihe wird in dem im Anhang A beschriebenen Format als Textdatei *zeitreihe.dmna* ausgeschrieben. Bei ungültigen (fehlenden) Datensätzen hat die Monin-Obukhov-Länge L_M den Wert 0. Aus der AKTerm *anno95.akt* erhält man zum Beispiel

```

                                Zeitreihe zeitreihe.dmna
                                form "te%20lt" "ra%5.0f" "ua%5.1f" "lm%7.1f"
                                mode "text"
                                ha 13.0 13.0 13.0 13.0 13.0 13.0 13.0 13.0 13.0
                                z0 0.50
                                d0 3.00
                                sequ "i"
                                dims 1
                                size 20
                                lowb 1
                                hghb 8760
                                *
AKTerm anno95.akt              1995-01-01.01:00:00    206    5.5 99999.0
                                1995-01-01.02:00:00    216    6.4 99999.0
                                1995-01-01.03:00:00    255    6.6 99999.0
                                1995-01-01.04:00:00    271    6.8 99999.0
                                1995-01-01.05:00:00    251    6.3 99999.0
                                1995-01-01.06:00:00    250    6.0 99999.0
                                1995-01-01.07:00:00    247    7.2 99999.0
                                1995-01-01.08:00:00    252    6.2 99999.0
                                ...

```

Die Zeitreihe enthält 4 Spalten. In der ersten steht die Uhrzeit t_e (=Endzeitpunkt der betrachteten Stunde) in GMT+1 und die folgenden Spalten enthalten r_a , u_a und L_M . Die Benennung dieser Spalten und die Art ihrer Darstellung ist durch den Parameter `form` im Kopf der Datei festgelegt.

Statt der AKTerm kann auch direkt diese Zeitreihe verwendet werden. Wenn *AUSTAL2000* im Arbeitsordner eine Datei mit dem Namen *zeitreihe.dmna* findet, liest es sie ein und interpretiert sie als umgesetzte AKTerm. Eine Angabe von `as` (AKS) oder `az` (AKTerm) in der Eingabedatei wird dann ignoriert. Auf diese Weise können eigene meteorologische Mes-

sungen in der Ausbreitungsrechnung verwendet werden. Die Zeitreihe muß mit der ersten Stunde eines Tages beginnen und sollte den Zeitraum eines Jahres umfassen.

In der Zeitreihe können in weiteren Spalten auch zeitabhängige Emissionsparameter aufgeführt werden. Quellstärken und die Parameter vq , qq , sq , tq , rq und lq dürfen zeitabhängig sein. Die Zeitabhängigkeit wird dem Programm dadurch mitgeteilt, daß in der Eingabedatei statt eines Zahlenwertes ein Fragezeichen steht. Die Zeitreihe muß dann für jeden zeitabhängigen Parameter eine Spalte mit der Bezeichnung *Quelle . Parameter* enthalten. *Quelle* ist die Nummer der Quelle, für die dieser Wert gilt (zweistellig mit führender Null und beginnend mit 01).

Um die Erstellung einer solchen Zeitreihe zu erleichtern, wird von *AUSTAL2000*, wenn es mit der Option *-z* aufgerufen wird, in der ausgeschriebenen Zeitreihe bereits für jeden Parameter, der zeitabhängig definiert ist, eine Spalte mit den Zahlenwerten 0 eingefügt. Diese Nullwerte brauchen dann nur noch durch die richtigen Werte ersetzt zu werden.

Beispielsweise könnte die Zeitreihe bei einem Werk, das im 2-Schichtenbetrieb arbeitet und nur zwischen 6 Uhr und 22 Uhr SO₂ emittiert, folgendermaßen beginnen:¹⁵

```
form  "te%20lt" "ra%5.0f" "ua%5.1f" "lm%7.1f" "01.so2%10.3e"
mode  "text"
sequ  "i"
dims  1
size  24
lowb  1
hghb  8760
```

```
*
1995-01-01.01:00:00    209    5.7 99999.0 0.000e+000
1995-01-01.02:00:00    217    5.8 99999.0 0.000e+000
1995-01-01.03:00:00    259    6.3 99999.0 0.000e+000
1995-01-01.04:00:00    267    6.7 99999.0 0.000e+000
1995-01-01.05:00:00    253    6.1 99999.0 0.000e+000
1995-01-01.06:00:00    248    6.0 99999.0 0.000e+000
1995-01-01.07:00:00    253    7.1 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.08:00:00    247    6.0 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.09:00:00    260    6.7 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.10:00:00    261    7.0 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.11:00:00    263    7.0 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.12:00:00    256    8.2 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.13:00:00    267    8.6 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.14:00:00    273    8.5 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.15:00:00    260    9.0 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.16:00:00    254    8.5 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.17:00:00    251    9.1 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.18:00:00    259    8.4 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.19:00:00    247    7.6 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.20:00:00    250    7.7 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.21:00:00    242    6.4 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.22:00:00    243    7.1 99999.0 1.168e+001
1995-01-01.23:00:00    253    7.0 99999.0 0.000e+000
1995-01-02.00:00:00    237    6.8 99999.0 0.000e+000
...
```

Als Ergebnis einer Zeitreihenrechnung wird für jeden emittierten Stoff, bei dem ein Kurzzeit-Immissionswert existiert, die Zeitreihe der Konzentration an den Beurteilungspunkten ausgegeben. Jede Spalte enthält die Werte für einen Beurteilungspunkt, die Zeitangabe ist als Kommentar am Ende einer Zeile angehängt. Negative Konzentrationswerte (Zahlenwert - 1) bedeuten, daß die Konzentration wegen fehlender Eingabedaten nicht berechnet werden konnte.

¹⁵Das Jahr 1995 begann mit einem Sonntag. In einer realen Simulation würde vermutlich am ersten Tage nichts emittiert und der Schichtbetrieb erst am zweiten Tag beginnen.

Im folgenden ist eine solche Zeitreihe für einen kurzen Zeitraum beispielhaft aufgelistet.

```

idnt  "Test H50A95"
mntn  "01"  "02"
mntx   375.0  -375.0
mnty   -25.0  125.0
mntz    1.5    1.5
T1  "1995-04-01.00:00:00"
T2  "1995-04-02.00:00:00"
interval  "01:00:00"
axes  "ti"
name  "so2"
file  "so2-zbpz"
unit  "ug/m3"
form  "con%5.1f"
refv   50.0
undf  -1
...
dims  2
sequ  "i,j"
lowb   1    1
hghb  24    2
*
    0.0    0.0 ' 1995-04-01.01:00:00
    0.0    0.0 ' 1995-04-01.02:00:00
    0.0    0.0 ' 1995-04-01.03:00:00
    0.0    0.0 ' 1995-04-01.04:00:00
    0.8    0.0 ' 1995-04-01.05:00:00
    3.1    0.0 ' 1995-04-01.06:00:00
    0.0    0.0 ' 1995-04-01.07:00:00
...

```

Im Kopf der Datei stehen noch einmal die Parameter der Beurteilungspunkte aufgelistet: Name *mntn*, *x*-Koordinate *mntx*, *y*-Koordinate *mnty* und Höhe über dem Erdboden *mntz* (hier sind nur die wichtigsten Parameter aufgeführt).

Liegen die Vorbelastungswerte ebenfalls als Zeitreihe vor, dann kann *AUSTAL2000* auch die Immissionskennwerte der Gesamtbelastung ausrechnen. Hierzu müssen die Vorbelastungswerte in eine Textdatei geschrieben werden, die der aufgelisteten Zeitreihe entspricht, und als Datei *Stoff-zbpv.dma* im Arbeitsordner bereitgestellt werden. In der Protokolldatei *austal2000.log* erscheint dann hinter der Zusatzbelastung an den Beurteilungspunkten auch ein Abschnitt mit Angabe der Gesamtbelastung an den Beurteilungspunkten.

Diese Auswertung kann auch nachträglich durchgeführt werden. Wird *AUSTAL2000* mit der Option *-a* aufgerufen, dann wird keine Ausbreitungsrechnung durchgeführt, sondern es werden nur die bereits berechneten

Daten noch einmal hinsichtlich der Immissionskennwerte ausgewertet.

8 Rechnen mit situationsabhängigen Parametern

Zeitlich variable Emissionsbedingungen sollten in der Regel in einer Zeitreihenrechnung erfaßt werden (siehe Abschnitt 7). Bei Verwendung einer AKS ist eine zeitliche Zuordnung nicht mehr möglich.

In manchen Fällen ist aber die zeitliche Variation allein durch meteorologische Veränderungen bedingt, wie beispielsweise bei windinduzierten Quellen. Hier hängt die Quellstärke von der Windgeschwindigkeit ab (Beispiel: NH_3 -Emission aus Offenställen). Auch bei der Abgasfahnenüberhöhung hängt die Weite und Höhe des Fahnenanstiegs von der Windgeschwindigkeit und der Stabilität der atmosphärischen Schichtung ab, doch braucht sich der Anwender in der Regel darum nicht zu kümmern, da die Überhöhung nach VDI 3782 Blatt 3 bereits programmintern gehandhabt wird.

Obwohl windinduzierte Quellen oder eine andere Modellierung des Fahnenanstiegs (beispielsweise bei Ableitung über einen Kühlturm entsprechend VDI 3784 Blatt 2) in Zeitreihenrechnungen berücksichtigt werden können, wurde den Anhängern der Statistikrechnung mit der Einführung situationsabhängiger Parameter die Möglichkeit gegeben, dies auch bei Verwendung einer AKS zu tun.

Situationsabhängige Parameter sind Parameter, deren Wert von der Windgeschwindigkeit und der Stabilitätsklasse abhängen. Es können die gleichen Parameter situationsabhängig vorgegeben werden, die auch zeitabhängig sein dürfen, also vq , qq , sq , tq , rq , lq und die Quellstärken bezüglich der einzelnen Stoffe. Sie sind auch ebenso zu kennzeichnen, also durch Angabe eines Fragezeichens statt eines Zahlenwertes.

Die Werte eines situationsabhängigen Parameters v sind als 2-dimensionale Tabelle $v_{i,j}$ in Form einer DMNA-Datei (siehe Abschnitt A) anzugeben, wobei $i = 1, 2, \dots, 6$ die Stabilitätsklassen und $j = 1, 2, \dots, 9$ die Windgeschwindigkeitsklassen durchläuft. Der Dateiname hat, entsprechend der Kennzeichnung des Parameters in einer Zeitreihe, die Form *Quelle.Parameter.dmna*, wobei *Quelle* die Nummer der Quelle und *Parameter* der Name des Parameters ist, also beispielsweise `01.nh3.dmna` für die NH_3 -Emission der ersten Quelle oder `143.vq.dmna` für die Ausströmgeschwindigkeit der 143-ten Quelle.

Die folgende Auflistung (Datei `01.nh3.dmna` aus dem Beispiel `test/h00aks-nh3`) enthält Werte der Quellstärke, die proportional $\sqrt{u_a}$ und bei $u_a=1$ m/s gleich 0.04 g/s sind:

```

dims      2
lowb      1   1
hghb      6   9
size      4
form      "%6.3f"
sequ      "i,j"
mode      "text"
unit      "g/s"
fact      25
*
1.000 1.225 1.414 1.732 2.121 2.449 2.739 3.000 3.464
1.000 1.225 1.414 1.732 2.121 2.449 2.739 3.000 3.464
1.000 1.225 1.414 1.732 2.121 2.449 2.739 3.000 3.464
1.000 1.225 1.414 1.732 2.121 2.449 2.739 3.000 3.464
1.000 1.225 1.414 1.732 2.121 2.449 2.739 3.000 3.464
1.000 1.225 1.414 1.732 2.121 2.449 2.739 3.000 3.464
***

```

9 Ausbreitungsrechnung für komplexes Gelände

Geländeunebenheiten können mit Hilfe des diagnostischen mesoskaligen Windfeldmodells *TALdiames* berücksichtigt werden. Dies wird durch Setzen des Parameters `gh` in der Eingabedatei `austal2000.txt` ausgelöst. Der Wert des Parameters ist der Name der Datei mit dem digitalen Geländemodell (DGM), das die Information über die Geländehöhe im Rechengebiet enthält.

Warnung: Rechnungen für komplexes Gelände sind erheblich aufwendiger und bergen wesentlich mehr Fehlermöglichkeiten als Rechnungen für ebenes Gelände!

9.1 Festlegung des Geländeprofiles

Das DGM kann von dem jeweiligen Landesvermessungsamt bezogen werden. Länderübergreifende Daten stellt auch das Bundesamt für Kartographie und Geodäsie (BKG, siehe www.ifag.de) zur Verfügung. Das Datenformat scheint wenig genormt zu sein. AUSTAL2000 erwartet die Daten im Format Arcinfo-GRIDASCII,¹⁶ das folgendermaßen aufgebaut ist:

- Die Datei besteht aus Textzeilen, kann also mit jedem Editor eingesehen oder geändert werden.
- Die Geländehöhen werden auf einem regelmäßigen Gitter angegeben, dessen Maschenweite typischerweise 20, 40, 50 oder 100 m beträgt. Die angegebenen Werte sind dabei als Geländehöhe in der Mitte einer Gitterzelle zu verstehen.
- Die ersten 6 Zeilen enthalten allgemeine Informationen, wobei in jeder Zeile ein Parametername und der zugehörige Wert stehen:

<code>ncols</code>	Anzahl der Spalten des Gitters
<code>nrows</code>	Anzahl der Zeilen des Gitters
<code>xllcorner</code>	Gauß-Krüger-Rechtswert der linken unteren Ecke der linken unteren Gitterzelle
<code>yllcorner</code>	Gauß-Krüger-Hochwert der linken unteren Ecke der linken unteren Gitterzelle
<code>cellsize</code>	Maschenweite (m)
<code>NODATA_value</code>	Höhenwert bei fehlenden Daten

- Anschließend folgen die Höhenwerte als 2-dimensionale Tabelle, wobei die Zahlen so angeordnet sind wie die Gitterzellen auf der Landkarte. Die erste Zahl der ersten Da-

¹⁶Alternativ können die Daten auch als DMNA-Datei (siehe Beispiel `h30a95h1`) bereitgestellt werden oder als Textdatei, die in jeder Zeile die drei Werte *X*, *Y* und *Z* enthält (*X* und *Y* in Gauß-Krüger-Koordinaten, sofern *gx* und *gy* angegeben sind). Diese Liste muß genau alle Gitterpunkte eines rechteckigen, äquidistanten Rasters enthalten.

tenzeile ist also die Geländehöhe an dem Punkt mit dem Rechtswert $xllcorner+0.5*cellsize$ und dem Hochwert $yllcorner+(nrows-0.5)*cellsize$.

```
Beispiel17(Ausschnitt): ncols      261
                       nrows      241
                       xllcorner   4597475.0000
                       yllcorner   5396475.0000
                       cellsize    50.0000
                       NODATA_value -9999
                       542.9  532.4  517.1  503.5  497.3  497.7  501.7
                       549.5  539.3  526.0  511.8  499.0  491.0  490.1
                       544.0  536.0  527.3  518.2  507.3  495.9  487.6
                       532.3  525.2  518.1  512.9  507.5  499.0  488.3
                       523.5  515.8  509.0  505.0  502.1  497.4  489.4
```

Das Programm erwartet, daß im DGM für alle Gitterpunkte gültige Höhenwerte angegeben sind. Aus dem DGM bestimmt das Programm die Geländehöhen an den Gitterpunkten des Rechenrasters (Geländeprofil) und speichert sie als Datei `zg00.dmn` im Projektordner ab. Die Maschenweite des Rechenrasters braucht dabei nicht mit der Maschenweite des DGM übereinzustimmen, allerdings muß das Rechengelände vollständig innerhalb des vom DGM abgedeckten Bereiches liegen. Die bei der Festlegung des Rechengeländes verwendeten Gauß-Krüger-Koordinaten müssen aus demselben Meridianstreifen stammen wie die Koordinatenangaben im DGM.

Enthält das Projektverzeichnis bereits die Datei `zg00.dmn` und ist das entsprechende Rechenetz explizit in der Eingabedatei definiert, dann wird der im Parameter `gh` angegebene Dateiname ignoriert und das Geländeprofil wird nicht neu berechnet.

In der Protokolldatei wird zur Information die maximale Steilheit des Geländes vermerkt. Dabei werden die Geländehöhen an benachbarten Gitterpunkten verglichen und es wird der Anstieg in Achsenrichtung beispielsweise in folgender Form ausgeschrieben:

Die maximale Steilheit des Geländes ist 0.52 (0.47)

Die erste Zahl ist die Steilheit, die beim Vergleich unmittelbar benachbarter Gitterpunkte gefunden wird, die zweite Zahl in Klammern ist der Wert, den man beim Vergleich mit dem jeweils übernächsten Gitterpunkt erhält. Die Punkte haben dann in der Regel einen Abstand von der doppelten Bauhöhe der Quelle. Die Zahl 0.2 bedeutet einen Anstieg 1:5.

9.2 Berechnung des Windfeldes

Das Windfeld wird mit dem in Anhang C beschriebenen diagnostischen mesoskaligen Windfeldmodell *TALdiames* berechnet. Ein Windfeld braucht nicht für jede Wettersituation neu berechnet zu werden, denn das Programm macht sich die Tatsache zu Nutze, daß bei gleicher

¹⁷Diese Daten (Datei `tittling.grid`) wurden aus den vom Bayerischen Landesvermessungsamt im Internet (www.bayern.de/vermessung) zur Verfügung gestellten Testdaten umgewandelt und beschreiben ein Gebiet von 13×12 km² in der Nähe von Tittling.

Stabilität eine Linearkombination von zwei Windfeldern (Addition mit unterschiedlichen Faktoren) wieder ein gültiges Windfeld für diese Stabilität darstellt.

Das Programm *TALdiames* berechnet also für jede der 6 Stabilitätsklassen nur zwei Windfelder, eins mit Süd-Anströmung und eins mit West-Anströmung, und speichert diese 12 Felder in einer Bibliothek. Bei der Ausbreitungsrechnung werden dann für jede Ausbreitungssituation die beiden zu der gerade vorliegenden Stabilitätsklasse gehörenden Windfelder so kombiniert, daß die am Ort des Anemometers vorgegebene Windgeschwindigkeit und Windrichtung exakt getroffen werden.

Die Windfelder in der Windfelbibliothek werden iterativ berechnet. Das Programm startet mit einem nicht divergenzfreien Feld und versucht, dies iterativ divergenzfrei zu machen. Wie weit dies dem Programm gelingt, sollte anhand der Protokolldatei *TALdiames.log* überprüft werden. Dort wird als „Divergenz-Fehler“ der betragsmäßig größte im Rechenetz gefundene Divergenzwert angegeben, multipliziert mit Δ/u_a (Δ : horizontale Maschenweite, u_a : Windgeschwindigkeit am Anemometer). Der angegebene Zahlenwert sollte unter 0.05 liegen.

Es ist im Prinzip möglich, daß die Iterationen nicht konvergieren. Das Programm meldet dies mit einer Fehlermeldung. Werden aber die in der TA Luft angegebenen Beschränkungen an die zulässige Geländesteilheit beachtet, dann sollte dieser Fall in der Praxis nicht auftreten.

Bei Rechnungen für komplexes Gelände oder bei Verwendung externer Windfelder ist es wichtig, daß das Anemometer möglichst frei angeströmt wird. Liegt es im Einflußbereich von Hindernissen,¹⁸ dann ist es den hier verwendeten meteorologischen Modellen in der Regel nicht möglich, mit hinreichender Genauigkeit auf die Art der Anströmung zurückzuschließen. Um solche unbrauchbaren Anemometerpositionen auszuschließen, sind zwei Prüfungen eingebaut, die gegebenenfalls zum Programmabbruch führen:

1. Für jedes der Windfelder in der Windfelbibliothek muß die Windgeschwindigkeit am Ort des Anemometers größer als 0.5 m/s sein.
2. Das Windfeld, das in der Ausbreitungsrechnung schließlich verwendet wird, darf an keiner Stelle eine Vertikalkomponente besitzen, die betragsmäßig größer als 25 m/s ist.¹⁹

9.3 Praktische Durchführung

Um komplexes Gelände in der Ausbreitungsrechnung zu berücksichtigen, sind nur zwei Schritte erforderlich:

¹⁸In der Regel tritt dieser Fall nur ein, wenn an einem anderen Ort erhobene meteorologische Daten auf das Rechengebiet übertragen werden und die ersatzweise angenommene Anemometerposition nicht sorgfältig genug ausgesucht wird.

¹⁹Die betrachtete Vertikalkomponente ist die im Gelände-folgenden Koordinatensystem ausgewiesene Komponente, die auch durch die Geländesteilheit und die Horizontalkomponente beeinflusst wird.

1. Das Digitale Geländemodell wird als Datei im Arcinfo-GRIDASCII-Format bereitgestellt. Es muß das Rechengebiet umfassen.
2. Der Name dieser Datei wird in der Eingabedatei `austal2000.txt` als Parameter `gh` angegeben.

Das Programm *AUSTAL2000* ruft dann von sich aus das Programm *TALdiames* auf, welches das Geländeprofil `zg00.dma` im Projektordner und die Windfeldbibliothek im Unterverzeichnis `lib` anlegt. Anschließend führt *AUSTAL2000* die Ausbreitungsrechnung unter Verwendung dieser Windfelder durch. Die Turbulenzfelder werden lokal in Abhängigkeit von der Höhe über dem Erdboden wie bei ebenem Gelände berechnet. Die Rechenzeit verlängert sich aus folgenden Gründen:

1. Die Windfelder der Windfeldbibliothek müssen berechnet werden.
2. Für jede Stunde des Jahres (bei einer Zeitreihenrechnung) müssen 3-dimensionale Wind- und Turbulenzfelder berechnet werden.
3. Die Berechnung der Partikelbahnen ist bei 3-dimensionaler Meteorologie aufwendiger als bei 1-dimensionaler.

Insgesamt kann dies dazu führen, daß sich die Rechenzeit um den Faktor 5 bis 10 erhöht. Will man von diesem Standardvorgehen abweichen, ist folgendes zu beachten:

- Existiert im Projektordner bereits eine Datei `zg00.dma`, dann wird diese verwendet, ungeachtet des angegebenen Digitalen Geländemodells.
- Existiert im Projektordner ein Unterverzeichnis `lib`, dann wird davon ausgegangen, daß sich darin die Windfeldbibliothek befindet, und es werden keine Bibliotheksfelder neu angelegt.
- Wird *AUSTAL2000* mit der Option `-l` aufgerufen, dann wird nur die Windfeldbibliothek erzeugt und keine Ausbreitungsrechnung durchgeführt. In diesem Fall werden die Windfelder in einer bestehenden Bibliothek überschrieben.
- Statt *AUSTAL2000* mit der Option `-l` aufzurufen, kann das Windfeldmodell auch direkt in der Form

`taldiames Projektordner`

aufgerufen werden.

10 Verwendung extern erzeugter meteorologischer Felder

Wie bereits im Abschnitt 9 erwähnt, verwendet *AUSTAL2000* bei Rechnungen in komplexem Gelände die Windfelder, die es im Unterverzeichnis `lib` vorfindet. Diese brauchen nicht

mit *TALdiames* erzeugt zu sein sondern können auch von einem anderen meteorologischen Modell stammen, z.B. einem prognostischen Modell oder einem Modell, das die Umströmung von Gebäuden berechnen kann. Dabei können außer dem Windvektor auch die Austauschkoeffizienten und die turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen vorgegeben werden.

Damit *AUSTAL2000* diese Felder erkennt und sie richtig verwendet, sind folgende Bedingungen einzuhalten:

1. Die Dateien müssen die Struktur besitzen, die in Anhang A beschrieben ist. Die Daten sind Gleitkommazahlen und können in Textform oder in Binärform (4 Byte pro Zahl) angegeben sein.
2. Anhand des Dateinamens wird unterschieden, welche Größe in der Datei dargestellt ist. Folgende Namen werden verwendet:

w????a00.dmna	Windvektor mit den Komponenten z_p (Höhe über NN), v_x (x -Komponente des Windvektors), v_y (y -Komponente des Windvektors), v_s (s -Komponente des Windvektors, vertikal vgl. Anhang C). <i>AUSTAL2000</i> verwendet nicht den angegebenen Wert von v_s sondern berechnet ihn neu aus der Divergenzfreiheit des Windfeldes. Die Zahlenwerte sind in m bzw. in m/s anzugeben.
v????a00.dmna	Turbulente Geschwindigkeitsfluktuationen (Turbulenzfeld) mit den Komponenten σ_u , σ_v , σ_w und ϑ (potentielle Temperatur in Grad). Sie ersetzen die Werte aus dem Grenzschichtmodell von <i>AUSTAL2000</i> . Die Zahlenwerte sind in m/s anzugeben.
v????d00.dmna	Turbulente Geschwindigkeitsfluktuationen, die zu denen aus dem Grenzschichtmodell von <i>AUSTAL2000</i> (quadratisch) addiert werden. Die Zahlenwerte sind in m/s anzugeben.
k????a00.dmna	Austauschkoeffizienten (K-Feld) mit den Komponenten K_H (horizontaler Austauschkoeffizient) und K_V (vertikaler Austauschkoeffizient). Sie ersetzen die Werte aus dem Grenzschichtmodell von <i>AUSTAL2000</i> . Die Zahlenwerte sind in m^2/s anzugeben.
k????d00.dmna	Austauschkoeffizienten, die zu denen aus dem Grenzschichtmodell von <i>AUSTAL2000</i> addiert werden. Die Zahlenwerte sind in m^2/s anzugeben.
zp00.dmna	z -Koordinaten der Gitterpunkte (in m über NN)
zg00.dmna	Geländeprofil (unterste Schicht von zp00.dmna)

Die durch Fragezeichen symbolisierten 4 Zeichen kennzeichnen die Ausbreitungssituation, beispielsweise könnte 2019 für „stabile Schichtung (II), Windrichtung 190 Grad“ stehen. Die Wahl der Zeichen ist beliebig, solange damit ein gültiger Dateiname gebildet wird. Das Windfeld muß für jede der vorkommenden Situationen angegeben sein. Wenn ein Feld vom Typ „v“ oder „k“ für eine Situation angegeben ist, muß es für alle Situationen angegeben sein.

3. Es muß kenntlich gemacht sein, zu welcher Stabilitätsklasse eine Datei gehört. Dies

kann entweder über den Parameter `ak1` im Dateikopf geschehen, dem ein Wert zwischen 1 (entspricht I) und 6 (entspricht V) zugeordnet wird, oder über die Art der Kennzeichnung, wobei das erste Zeichen als Nummer der Ausbreitungsklasse interpretiert wird (s.o.).

- Die Dateien stellen 3-dimensionale Tabellen dar (mit Ausnahme von `zg00.dmna`), deren Indizes den Wertebereich $0..n_x$, $0..n_y$ und $0..n_z$ durchlaufen. n_x und n_y sind die in der Eingabedatei definierten Größen `nx` (Anzahl der Intervalle in x -Richtung) und `ny` (Anzahl der Intervalle in y -Richtung). Die Anzahl der Intervalle in z -Richtung ergibt sich aus dem vertikalen Raster, das mit dem Eingabeparameter `hh` (Höhe über dem Erdboden) explizit festgelegt werden kann. Standardsetzung ist

```
hh 0 3 6 10 16 25 40 65 100 150 200 300 400 500 600 700 800 1000 1200 1500
also  $n_z = 19$ .
```

- Die Geschwindigkeitskomponenten sind auf einem Arakawa-C-Netz festgelegt, also beispielsweise v_x in x -Richtung auf Gitterpunkten ($0 \leq i \leq n_x$), in y - und z -Richtung jeweils auf den Mittelpunkten der Intervalle ($1 \leq j \leq n_y$, $1 \leq k \leq n_z$). Entsprechendes gilt für v_y und v_s . Alle anderen Größen sind auf den Gitterpunkten definiert.

Um dies zu kennzeichnen, ist bei den Windfeldern im Dateikopf der Parameter `vldf` anzugeben, der für jede der Komponenten mit einem Buchstaben festhält, wie diese Komponente im Netz definiert ist. Es ist

```
vldf PXYs  bei den Windfeldern
vldf PPPP  bei den turbulenten Geschwindigkeiten
vldf PP    bei den Turbulenzfeldern
vldf P     bei den Gitterdefinitionen
```

Weiterhin müssen im Dateikopf die Netzparameter `dd`, `x0`, `y0` und `hh` angegeben sein und zusätzlich die folgenden Parameter:²⁰

```
axes  xyz
lsbf  1
sscl  0
zscl  0
```

- Bei Windfeldern, die eine Gebäudeumströmung beschreiben, sind die Gitterzellen ausgespart, die im Inneren von Gebäuden liegen. Um dem Programm kenntlich zu machen, um welche Zellen es sich handelt, ist bei diesen Zellen der Wert von v_s am Boden der Zelle auf -99 zu setzen. Überhängende Gebäude oder Brückenbauwerke, die dazu führen, daß eine ausgesparte Gitterzelle über einer nicht ausgesparten liegt, sind nicht zulässig.

Findet *AUSTAL2000* eine solche Bibliothek (also Unterverzeichnis `lib` im Arbeitsverzeichnis), dann werden die darin enthaltenen Felder katalogisiert und auf Vollständigkeit geprüft.

²⁰Die Angabe „`lsbf 1`“ bedeutet, daß bei binär abgespeicherten Zahlen das niedrigstwertige Byte (*least significant byte*) zuerst abgespeichert ist. Dies ist der Standard bei Intel- und AMD-Prozessoren.

Im Unterverzeichnis dürfen keine weiteren Dateien stehen. Sodann wird in dem Katalog eingetragen, zu welcher Stabilitätsklasse die betreffende Situation gehört und welche Windrichtung und Windgeschwindigkeit im Windfeld am Ort des Anemometers auftritt.

Wird später ein Windfeld für eine bestimmte Stabilitätsklasse, Windrichtung und Windgeschwindigkeit benötigt, dann wird zunächst im Katalog nachgesehen, welche beiden Windfelder dieser Stabilitätsklasse eine Windrichtung besitzen, die der vorgegebenen am nächsten kommt.²¹ Sodann werden diese beiden Felder linear überlagert, so daß das resultierende Feld am Anemometerort genau die gewünschte Windrichtung und Windgeschwindigkeit besitzt. Mit den gleichen Faktoren werden auch die zugehörigen Turbulenzfelder und K-Felder — sofern vorhanden — überlagert.

Bei einer Netzschachtelung (siehe Abschnitt 11) wird genauso verfahren. Die Felder sind für jedes Netz anzugeben. Die Nummer n des verwendeten Netzes ($1 \leq n \leq n_n$) ist im Namen jeder Datei anzugeben, und zwar ist die Ziffernfolge 00 am Ende des Dateinamens (ohne Namenserweiterung) durch $i1$ zu ersetzen mit $i = n_n + 1 - n$. Zum Beispiel haben bei einer Schachtelung mit 3 Netzen die Windfelder des feinsten Netzes die Namen `w????a31.dma`.

Der Windvektor am Anemometerort wird vom Programm aus dem Netz bestimmt, das die kleinste Maschenweite hat, aber den Anemometerort noch enthält. Die daraus berechneten Überlagerungsfaktoren werden dann für alle Netze der jeweiligen Situation verwendet.

Bei einer Netzschachtelung in komplexem Gelände müssen die Geländeprofile aufeinander abgestimmt sein. Dabei müssen in einem feinen Netz in einem Randstreifen von 2 Maschenweiten Breite die Höhenwerte des nächst gröbereren Netzes übernommen werden, gegebenenfalls durch lineare Interpolation. Es ist daher zweckmäßig, zuerst von AUSTAL2000 bzw. TALdiames diese Geländeprofile ausrechnen zu lassen und sie dann für die eigene Windfeldberechnung zu verwenden.

Beispiel

Im Verzeichnis `haus-01` ist ein Beispiel für die Verwendung einer extern vorgegebenen Windfeldbibliothek. Sie beschreibt die Umströmung eines U-förmigen Gebäudes auf einem Raster mit 4 m Maschenweite und horizontal 50×50 Maschen. Vertikal ist das Raster ebenfalls äquidistant mit 4 m Maschenweite und erstreckt sich nur bis 60 m Höhe. Die Quelle liegt zur besseren Illustration des Gebäudeeffektes in der Mitte des Innenhofes in 2 m Höhe, die Emission besteht aus SO_2 mit einer Quellstärke von 10 % des Bagatellmassenstromes.

Die Bibliothek enthält Windfelder, zusätzliche Turbulenzfelder und zusätzliche K-Felder (Wirkung der durch das Gebäude verursachten zusätzlichen Turbulenz), allerdings nur für neutrale Schichtung und Windrichtungen zwischen 200 Grad und 280 Grad (in Schritten von 10 Grad). Dies reicht jedoch aus, um den ersten Tag der Zeitreihe `anno95.akt erm` durchzurechnen.

²¹Das bedeutet auch, daß es zu jeder Stabilitätsklasse mindestens 2 Windfelder geben muß, denn sonst kann nicht interpoliert werden.

11 Festlegung der Rechennetze

Normalerweise wird mit einem einzigen Rechennetz gerechnet. Dieses kann entweder vom Programm oder vom Anwender festgelegt werden. Das Programm wählt es so, daß für die niedrigste Quelle die Maschenweite hinreichend fein ist und alle Quellen hinreichend weit umfaßt werden. Entsprechend TA Luft bedeutet dies, daß die Maschenweite gleich der Bauhöhe der niedrigsten Quelle gesetzt wird (mindestens aber 15 m beträgt) und für jede Quelle ein Kreis um die Quelle mit einem Radius vom 50-fachen der Bauhöhe darin enthalten ist. Als Bauhöhe wird hierbei die mittlere Bauhöhe eingesetzt, die sich aus der Summe von tatsächlicher Bauhöhe h_q und der Hälfte der vertikalen Ausdehnung c_q ergibt.

Wird das Rechennetz in der Eingabedatei explizit festgelegt, müssen alle zu seiner Festlegung notwendigen Parameter angegeben sein, also dd , x_0 , nx , y_0 und ny . Die Parameter dd , x_0 und y_0 sollten nur ganzzahlige Werte erhalten, da rechnerbedingte Ungenauigkeiten bei der Übernahme von Dezimalbrüchen²² zu Problemen führen können.

Bei Quellkonfigurationen mit mehreren Quellen, die sich in der Bauhöhe stark unterscheiden, ist dieses Vorgehen unzuweckmäßig. Für die niedrigen Quellen wird ein feinmaschiges Netz benötigt, das aber auch noch in großer Entfernung, wo die Beiträge der hohen Quellen wirksam sind, verwendet wird. Dort erhält man für die berechneten Konzentrationswerte eine hohe statistische Unsicherheit, da die Auszählvolumina unnötig klein sind.

Dies kann vermieden werden, wenn das feinmaschige Netz nur in der Umgebung der niedrigen Quellen verwendet wird und weiter außen mit einem gröberen Netz gerechnet wird, also mehrere Netze unterschiedlicher Maschenweite ineinander geschachtelt werden. Für eine solche Schachtelung gibt es eine Reihe von Einschränkungen, damit das berechnete Konzentrationsfeld möglichst wenig Artefakte enthält:

- Eine Vergrößerung der Maschenweite muß genau um den Faktor 2 erfolgen.
- Die Ränder eines feinen Netzes müssen auf den Gitterlinien des nächst gröberen Netzes liegen.
- Ein grobes Netz muß mindestens die Ausdehnung des nächst feineren Netzes besitzen.

Das Programm legt von sich aus ein System von geschachtelten Netzen an, wenn als Option os in der Eingabedatei die Zeichenkette NESTING angegeben ist. Die Parameter der Netzschachtelung werden in der Protokolldatei vermerkt. Sie können in der angegebenen Form auch direkt in die Eingabedatei kopiert werden. Wird die Art der Netzschachtelung vom Anwender vorgegeben, dann müssen die Parameter der Netze in aufsteigender Folge der Maschenweite angegeben sein,²³ also beispielsweise

dd	50	100	200
x_0	-1000	-2000	-2600
nx	40	40	26
y_0	-1000	-2000	-2600
ny	40	40	26

²²Zum Beispiel ist rechnerintern $3*0.1$ nicht unbedingt gleich 0.3.

²³Die Option NESTING kann dann entfallen.

Das Programm berechnet die Konzentration und die Deposition auf jedem dieser Netze. Um die Ergebnisse unterscheiden zu können, ist an den eigentlichen Namen der Ergebnisdatei noch die Nummer des zu Grunde liegenden Netzes angehängt (beginnend mit 1 für das feinste Netz). Beispielsweise werden unter Verwendung der oben angegebenen Netzschachtelung statt der Dateien `so2-j00z.dmnx` die Dateien `so2-j00z01.dmna`, `so2-j00z02.dmna` und `so2-j00z03.dmna` erzeugt.

Die in der Protokolldatei angegebenen Immissionskennwerte sind die Maxima aus den verwendeten Netzen. Für den Ergebnistyp `s24` (höchster Stundenmittelwert, der 24 mal überschritten wird) bedeutet dies beispielsweise, daß zunächst für jedes Netz und jede Masche die Größe `S24` ausgerechnet und netzweise gespeichert wird. Dann wird aus allen Netzen der insgesamt höchste Wert herausgesucht und im Protokoll vermerkt. Aus welchem Netz der Wert stammt, ist ebenfalls angegeben.

Eine Netzschachtelung ist auch beim Rechnen für komplexes Gelände möglich. Für den Anwender ergibt sich kein Unterschied. Es ist lediglich darauf zu achten, daß das verwendete digitale Geländemodell auch das größte Netz umfaßt. Die aus dem digitalen Geländemodell berechneten Geländeprofile enthalten jetzt in ihrem Namen statt `00` die Nummer des zugehörigen Rechennetzes, also beispielsweise `zg03.dmna`.

12 Ableitung von Abgasen über Kühltürme

Bei der Ableitung von Abgasen über Kühltürme wird die Abgasfahnenüberhöhung gemäß VDI 3784 Blatt 2 berechnet.²⁴ Intern wird hierfür das vom VDI zur Verfügung gestellte Programm `VDISP` verwendet. *AUSTAL2000* erzeugt die entsprechende Eingabedatei `VDIIN.DAT`, ruft das Programm `vdisp.exe` auf und liest anschließend die Ergebnisse aus der Datei `VDIOUT.DAT` ein. Der von `VDISP` berechnete Anstieg der Fahnenachse wird analysiert und intern werden die Parameter `vq` und `sq` so gesetzt, daß die gleiche Endhöhe (effektive Quellhöhe) erreicht wird und der halbe Wert der Überhöhung in der gleichen Entfernung erzielt wird (siehe Verifikation 51c). Damit geht das Programm noch über die Forderung der VDI 3784 Blatt 2 hinaus, nach der nur die effektive Quellhöhe in das Ausbreitungsmodell übernommen zu werden braucht.

Um nicht für jedes Partikel eine solche Analyse durchführen zu müssen, legt *AUSTAL2000* intern eine Tabelle an, in der vermerkt ist, welche Situationen schon mit `VDISP` gerechnet und welche Werte von `vq` und `sq` hierfür erhalten wurden. Wenn für ein Partikel die Überhöhung zu bestimmen ist, wird zuerst diese Tabelle überprüft, ob die zu berechnenden Werte schon bekannt sind. Dabei wird für die Windgeschwindigkeit eine Abweichung von maximal 10 % toleriert.

Zur Verwendung von `VDISP` im Rahmen der TA Luft macht Prof. Schatzmann, Mitautor von Modell, Richtlinie und Programm `VDISP`, folgende Anmerkungen:

²⁴Eine Quelle wird als Kühlturm interpretiert, wenn die Parameter `lq` (Flüssigwassergehalt) oder `rq` (Relative Feuchte) Werte größer 0 haben.

Die Ableitung der Rauchgase zusammen mit dem Wasserdampfschwaden über einen Naturzugnasskühlturm ist attraktiv, weil Kühlturmschwaden verglichen mit Schornsteinfahnen einen wesentlich größeren Wärmeinhalt besitzen. Die das Verhältnis von Impuls- zu Auftriebskräften am Einleitungsort kennzeichnende hydrodynamische Ähnlichkeitskennzahl, die densimetrische Froudezahl, unterscheidet sich bei Schornsteinfahnen und Kühlturmschwaden um etwa eine Größenordnung. Die relative Bedeutung der Auftriebskräfte ist bei Kühlturmschwaden somit etwa 10 mal größer als bei Rauchgasfahnen aus Schornsteinen. Dies führt vor allem bei geringen Windgeschwindigkeiten zu größeren effektiven Quellhöhen. Da sich das zu erwartende Bodenkonzentrationsmaximum in etwa invers proportional zum Quadrat der effektiven Quellhöhe verhält, wird in diesem Geschwindigkeitsbereich der Kühlturm zu geringeren Immissionen führen als der Schornstein.

Bei Starkwind kehren sich die Verhältnisse dagegen um. Kühlturmschwaden treten im Vergleich zu Schornsteinfahnen mit einer viel geringeren Vertikalgeschwindigkeit in die Atmosphäre ein. Bei Starkwind übersteigt in Kühlturmkronehöhe die Windgeschwindigkeit die Schwadenaustrittsgeschwindigkeit, mit der Folge, dass Teile des Schwadens in den Kühlturmnachlauf gezogen und zum Boden gemischt

werden. Zusätzliche „down-wash“-Effekte gehen von anderen hohen Bauwerken des Kraftwerks und seiner Umgebung aus. Da hohe Windgeschwindigkeiten seltener vorkommen als geringe, bleibt — betrachtet über repräsentative Zeiträume — die Ableitung der Abgase zusammen mit dem Kühlturmschwaden die günstigere Ableitungsvariante. Da die Intensität der „down-wash“-Erscheinungen von der speziellen Geometrie des Kraftwerkskomplexes und seiner Umgebung abhängt, ist allerdings jeweils zu prüfen, ob diese generelle Aussage auch im Einzelfall zutrifft und die in der TA-Luft festgeschriebenen Immissionswerte eingehalten werden.

Die komplexen Schwaden/Bauwerks-Wechselwirkungen lassen sich mit numerischen Modellen derzeit noch nicht simulieren. Deshalb werden üblicherweise in Grenzschicht-Windkanälen Experimente durchgeführt, mit dem Ziel, sogenannte Verstärkungsfaktoren zu bestimmen. Diese Faktoren dienen dazu, Rechenergebnisse zu korrigieren, wie sie mit den im Genehmigungsverfahren üblicherweise verwendeten Standardmodellen für die Bestimmung von Immissionskennwerten nach TA-Luft ermittelt werden. Diese Standardmodelle setzen die freie Abströmung der Abgase in eine ungestörte Windströmung voraus. Bauwerkseinflüsse können sie nicht berücksichtigen.

Beispielrechnungen für den in VDI 3784 Blatt 2 als Beispiel angegebenen Kühlturm sind in den Ordnern tower-01 und tower-02. Die Standardrechnung in tower-01 zeigt, daß das Konzentrationsmaximum wegen der großen Überhöhung sehr weit entfernt liegt und die erforderliche statistische Sicherheit der Ergebnisse nur schwer zu erreichen ist. Daher ist in tower-02 das Rechengebiet vergrößert und die Maschenweite von 130 m auf 500 m erhöht worden.

Eine Gegenüberstellung des Fahnenanstiegs, wie er von *VDISP* berechnet und von *AUSTAL2000* realisiert wird, ist in der Verifikation 51c enthalten.

13 Beispiele

Der Ordner `test` enthält die in folgender Tabelle aufgeführten Beispielrechnungen:

Nr.	Ordner	Beschreibung
1	h50aks	AKS anonym.aks, Kamin mit $h_q = 50$ m, keine Überhöhung, Stoffe SO ₂ , NO, NO ₂ , PM-10.
2	h50a95	AKTerm anno95.akterm, Kamin mit $h_q = 50$ m, keine Überhöhung, Stoffe SO ₂ , NO, NO ₂ , PM-10, XX.
3	h50a96	AKTerm anno96.akterm, Kamin mit $h_q = 50$ m, keine Überhöhung, Stoffe SO ₂ , NO, NO ₂ , PM-10.
4	h50a97	AKTerm anno97.akterm, Kamin mit $h_q = 50$ m, keine Überhöhung, Stoffe SO ₂ , NO, NO ₂ , PM-10.
5	h50a98	AKTerm anno98.akterm, Kamin mit $h_q = 50$ m, keine Überhöhung, Stoffe SO ₂ , NO, NO ₂ , PM-10.
6	h50a99	AKTerm anno99.akterm, Kamin mit $h_q = 50$ m, keine Überhöhung, Stoffe SO ₂ , NO, NO ₂ , PM-10.
7	2h50a95	AKTerm anno95.akt, 2 Kamine mit $h_q = 50$ m im Abstand von 750 m, keine Überhöhung, Stoffe SO ₂ , NO, NO ₂ .
8	h50a95-2	AKTerm anno95.akterm, Kamin mit $h_q = 50$ m (keine Überhöhung, zeitabhängige Emission von SO ₂) und diffuse Quelle mit zeitlich konstanter Emission von Pb-Staub.
9	h50a95g	Wie Beispiel 2, aber es wird zusätzlich eine Zeitreihe von Vorbelastungswerten verarbeitet und z_0 wird automatisch berechnet.
10	h00aks-nh3	Statistikrechnung für windinduzierte Emission aus einem Stall, der als Volumenquelle dargestellt wird.
11	h30a95h1	Einfache Demonstration einer Rechnung mit komplexem Gelände (idealisierte Gauß-Hügel).
12	h30a95h0	Wie Beispiel 11, aber mit ebenem Gelände.
13	h50a95c	Wie Beispiel 2, aber die Rechnung wird für komplexes Gelände durchgeführt.
14	h50a95n	Wie Beispiel 2, aber mit automatischer Generierung von geschachtelten Netzen (ebenes Gelände).
15	h50a95cn	Wie Beispiel 13, aber mit automatischer Generierung von geschachtelten Netzen (komplexes Gelände).
16	haus-01	Gebäudeumströmung unter Verwendung einer externen Windfeldbibliothek.
17	tower-nn	Ableitung von SO ₂ über einen Kühlturm.
18	h50a95-sci	Wie Beispiel 2, aber Ergebnisse in wissenschaftlicher Schreibweise.

Das Unterverzeichnis `test\dust` enthält Rechnungen zu sedimentierenden Stäuben (siehe Abschnitt D). Die Unterverzeichnisse `test\scatter` und `test\area` enthalten Daten zu Untersuchungen, die im Projektbericht beschrieben sind.

A Dateistruktur

Alle Dateien, die Ein- oder Ausgabefelder (Tabellen) repräsentieren, sind nach dem gleichen Prinzip aufgebaut. Sie enthalten zuerst einen Kopf, in dem alle Angaben zur Struktur und Darstellung der Tabelle stehen. Es folgt der Rumpf mit der eigentlichen Tabelle. Dieser Rumpf kann unmittelbar an den Kopf angehängt sein, wenn die Tabelle formatiert ausgeschrieben wird. Bei unformatierter Darstellung bildet der Rumpf immer eine eigene Datei. In dieser Binärdatei stehen die Tabellenelemente so, wie sie intern dargestellt sind, unmittelbar hintereinander ohne jegliche Steuerzeichen. Ein Tabellenelement kann eine einzelne Zahl (Datenelement) oder ein Verbund von mehreren Zahlen (*record*) sein.

Der Kopf ist eine Textdatei mit der Namensweiterung *dmna*, die aus einzelnen Zeilen besteht. In jeder Zeile ist ein Parameter definiert. Der Name des Parameters steht zu Beginn der Zeile, gefolgt von einem oder mehreren Werten. Zulässige Trennzeichen sind Leerzeichen, Tabulator und Semikolon, die einzeln oder kombiniert verwendet werden können. Die Zeile kann durch LF oder CR+LF abgeschlossen sein.

Neben den vom Programm benötigten Parametern kann der Kopf auch weitere Parameter enthalten. Parameter, die das Programm nicht kennt, werden ignoriert. Der Kopf endet mit einer Zeile, die zu Anfang einen Stern, also ***, enthält. Mit der nächsten Zeile beginnt der Rumpf, sofern er mit dem Kopf zusammen eine einzige Datei bildet. Die (formatierten) Tabellenelemente im Rumpf werden durch Leerzeichen, Semikolon, Tabulator, CR oder LF getrennt. Die Tabelle wird durch eine Zeile, die mit drei Sternen beginnt, beendet.

Folgende Parameter im Kopf der Datei werden vom Programm erkannt und interpretiert (die Namen müssen klein geschrieben sein):

data *string*(1)

Name der Datei, die die eigentliche Tabelle enthält. Ist *data* nicht spezifiziert oder hat es den Wert **,**, dann wird bei formatierter Ausgabe die Tabelle in die gleiche Datei geschrieben wie der Kopf. Bei unformatierter Ausgabe wird der Dateiname des Kopfes übernommen, er erhält aber statt *dmna* die Endung *dmnb*. Falls in *data* eine Pfadangabe gemacht ist, gilt diese relativ zu dem Ordner, in dem der Kopf gespeichert ist.

dims *integer*(1)

Anzahl der Dimensionen (maximal 5).

fact *float*(1)

Faktor, mit dem bei formatierter Ausgabe alle Datenelemente vom Typ *float* oder *double* multipliziert werden, bevor sie im angegebenen Format ausgeschrieben werden. Bei der Eingabe formatierter Daten werden diese Datenelemente nach dem Einlesen durch *fact* dividiert. Der Faktor wirkt nur auf die Datenelemente, für die in der Formatangabe (siehe *form*) kein eigener Faktor angegeben ist.

form *string*(1)

Format, nach welchem bei formatierter Speicherung die Daten abgelegt sind. Bestehen die Tabellenelemente des gespeicherten Feldes aus mehreren Datenelementen, dann ist für jedes Datenelement eine Formatangabe erforderlich, und alle Einzelformate

verkettet oder separat hintereinander geschrieben ergeben den Parameter *form*.

Format = *Format*₁ *Format*₂ ...

*Format*_{*i*} = *Name*%(**Factor*)*Length*.*PrecisionSpecifier*

Es bedeuten:

Name Name des Datenelementes (optional).

Factor Skalierungsfaktor (optional einschl. Klammern).

Length Länge des Datenfeldes.

Precision Anzahl der Nachkommastellen (bei *float*-Zahlen).

Specifier Umwandlungsangabe.

Der Skalierungsfaktor *Factor* wird genauso gehandhabt wie der Parameter *fact*. Die Längenangabe *Length* ist die Mindestlänge des Datenfeldes. Sie kann überschritten werden, wenn dies zur korrekten Darstellung der Zahl erforderlich ist. Zwischen den Zahlen steht immer mindestens ein Trennungszeichen.

Folgende Umwandlungsangaben sind möglich:

<i>Spec.</i>	Typ	Länge	Beschreibung
c	<i>character</i>	1	einzelne Buchstaben
d	<i>integer</i>	4	Dezimalzahl
x	<i>integer</i>	4	Hexadezimalzahl
f	<i>float</i>	4	Festkommazahl (ohne Exponent)
e	<i>float</i>	4	Gleitkommazahl (mit Exponent)
t	<i>integer</i>	4	Zeitangabe (ohne Datum)

Den Angaben *f* und *e* kann ein 1 vorangestellt sein (*double* mit Länge 8 Bytes), den Angaben *d* und *x* ein *h* (*short integer* mit der Länge 2 Bytes).

Zeitdarstellung bei Binärausgabe: Bei Zeitangabe ohne Datum bezeichnet die Zahl die vergangenen Sekunden. Ist der Angabe *t* ein 1 vorangestellt, wird die Zahl (*double* mit Länge 8 Bytes) als Zeitangabe mit Datum interpretiert: Die Vorkommastellen bezeichnen die Anzahl der Tage seit 1899-12-30.00:00:00 plus 10⁶, die Nachkommastellen den Anteil der vergangenen Sekunden an diesem Tag. Zeitdarstellung bei Textausgabe: Bei der Angabe *t* hat die Zeitangabe die Form *dd.hh:mm:ss* oder *hh:mm:ss*, bei der Angabe *1t* die Form *yyyy-mm-dd.hh:mm:ss*.

Gleichartige Formatangaben können zusammengefaßt werden:

vx%5.2fvy%5.2fvz%5.2f ist äquivalent zu *vx%[3]5.2f*²⁵

*hg**hb* *integer*(*dims*)

Höchster Indexwert für die verschiedenen Laufindizes.

loc1 *string*(1)

Darstellung von Gleitkommazahlen: Durch C (dies ist der Standard) wird angezeigt,

²⁵Bei zusammengefaßten Formatangaben gilt der angegebene *Name* nur für das erste Element. Bei den folgenden Elementen wird der letzte Buchstabe in *Name* jeweils um eine Stelle im Alphabet weitergerückt, so daß schließlich der angegebene Ausdruck entsteht.

daß ein Dezimal-**Punkt** verwendet wird, bei `german` wird ein Dezimal-**Komma** verwendet. In einer Eingabedatei, die ein Dezimal-Komma verwendet, muß der Parameter `loc1` gesetzt sein.

`lowb` *integer(dims)*

Niedrigster Indexwert für die verschiedenen Laufindizes.

`mode` *string(1)*

Bei `binary` sind die Daten unformatiert gespeichert, sonst formatiert.

`sequ` *string(1)*

Angabe, in welcher Indexfolge die Daten gespeichert sind. Normalerweise läuft der am weitesten rechts stehende Index am schnellsten (C-Konvention). Dies entspricht bei einem 3-dim. Feld A_{ijk} der Angabe `i+, j+, k+`. FORTRAN speichert gemäß `k+, j+, i+`. Ein Minuszeichen statt des Pluszeichens bedeutet, daß der betreffende Index rückwärts läuft.

Für eine 2-dimensionale Tabelle mit Geländehöhen, bei der die Werte so angeordnet sind, wie es der Lage der Punkte auf der Landkarte entspricht, hat `sequ` den Wert `"j-, i+"`.

`size` *integer(1)*

Länge der einzelnen Daten (*record size*) in Bytes. Bei formatierter Speicherung muß die aus der Formatangabe resultierende Summe der Längen der einzelnen Datenelemente gleich `size` sein.

Zeichenketten müssen, wenn sie Leerzeichen enthalten, in Doppelhochkomma eingeschlossen sein, ansonsten sind diese optional.

Beispiel:

Ein Feld von Gleitkommazahlen $A_{ijk} = 100i + 10j + k, i = 1..3, j = 2..4, k = 0..1$ wird in horizontalen Schichten gespeichert:

```
form "%4.1f"
mode "text"
sequ "k+,j-,i+"
fact 1.000e-001
dims 3
size 4
lowb 1 2 0
hghb 3 4 1
*
 14.0  24.0  34.0
 13.0  23.0  33.0
 12.0  22.0  32.0

 14.1  24.1  34.1
 13.1  23.1  33.1
```

12.1 22.1 32.1

Bei Abspeicherung von Größen, die auf einem kartesischen Arakawa-C-Netz definiert sind, gilt folgende Konvention:

Für jede der drei kartesischen Koordinaten x , y , z ist ein Punktraster (x_i, y_j, z_k) definiert:

$$\begin{aligned} x_i & \text{ für } i = 0..n_x \\ y_j & \text{ für } j = 0..n_y \\ z_k & \text{ für } k = 0..n_z \end{aligned}$$

Die Mittelpunkte der Intervalle dieser Punktraster haben die Koordinaten

$$\begin{aligned} \hat{x}_i &= (x_{i-1} + x_i)/2 \text{ für } i = 1..n_x \\ \hat{y}_j &= (y_{j-1} + y_j)/2 \text{ für } j = 1..n_y \\ \hat{z}_k &= (z_{k-1} + z_k)/2 \text{ für } k = 1..n_z \end{aligned}$$

Die Intervalle in den 3 Achsenrichtungen, $D_{x;i}$, $D_{y;j}$, $D_{z;k}$, haben den gleichen Indexwert wie ihr Mittelpunkt. Beispielsweise enthält $D_{x;i}$ alle x -Werte zwischen x_{i-1} und x_i , also

$$D_{x;i} = \{x \mid x_{i-1} \leq x \leq x_i\}$$

Die drei Punktraster bilden zusammen ein 3-dimensionales Gitter. Die Zellen V_{ijk} des 3-dimensionalen Gitters sind so indiziert wie die zugehörigen Achsenintervalle, also

$$\begin{aligned} V_{ijk} &= \{(x, y, z) \mid x_{i-1} \leq x \leq x_i, y_{j-1} \leq y \leq y_j, z_{k-1} \leq z \leq z_k\} \\ & \text{für } i = 1..n_x, j = 1..n_y, k = 1..n_z \end{aligned}$$

Im Arakawa-C-Netz sind die Geschwindigkeitskomponenten in der jeweiligen Achsenrichtung auf Gitterpunkten, in den beiden anderen Richtungen auf Mittelpunkten definiert. Also beispielsweise v_x ist definiert auf den Punkten $(x_i, \hat{y}_j, \hat{z}_k)$. Die Werte von v_x werden genauso indiziert wie die Punkte, auf denen sie definiert sind. Es gilt also:

$$\begin{aligned} v_{x;ijk} & \text{ ist der Wert von } v_x \text{ bei } (x_i, \hat{y}_j, \hat{z}_k) \text{ mit } i = 0..n_x, j = 1..n_y, k = 1..n_z \\ v_{y;ijk} & \text{ ist der Wert von } v_y \text{ bei } (\hat{x}_i, y_j, \hat{z}_k) \text{ mit } i = 1..n_x, j = 0..n_y, k = 1..n_z \\ v_{z;ijk} & \text{ ist der Wert von } v_z \text{ bei } (\hat{x}_i, \hat{y}_j, z_k) \text{ mit } i = 1..n_x, j = 1..n_y, k = 0..n_z \end{aligned}$$

Treten in einer Tabelle Indexwerte auf, für die ein Datenelement nicht definiert ist, dann steht an der betreffenden Stelle ersatzweise der Wert 0. Beispielsweise enthält beim Windvektor W das Tabellenelement W_{ijk} die Datenelemente z_k , $v_{x;ijk}$, $v_{y;ijk}$ und $v_{z;ijk}$. Die Indexwerte sind $i = 0..n_x$, $j = 0..n_y$, $k = 0..n_z$. Daher steht bei $j = 0$ oder $k = 0$ an der Stelle von v_x der Wert

0, entsprechend für v_y bei $i = 0$ oder $k = 0$ und für v_z bei $i = 0$ oder $j = 0$.

Rauhigkeitskataster

Das Rauhigkeitskataster `r1.dat` ist in einer abweichenden Form gespeichert, um Platz zu sparen. Es enthält in einer Tabelle den Rauhigkeitsindex R (Werte 1..9) für quadratische Felder von $100 \times 100 \text{ m}^2$ in einem rechteckigen Gebiet, das ganz Deutschland überdeckt. Die linke untere Ecke des Gebietes hat in Gauß-Krüger-Koordinaten den Rechtswert 3279000 und den Hochwert 5229000. Die Tabelle hat 8910 Zeilen und 6780 Spalten, das Gebiet hat also eine Ausdehnung von $678 \times 891 \text{ km}^2$. Die Indexwerte sind als Binärzahlen (jeweils 1 Byte) zeilenweise abgespeichert, wobei mit der untersten Zeile begonnen wird und alle Zeilen ohne Trennzeichen hintereinander stehen.

Jede Zeile ist mit einer Lauflängenkodierung komprimiert, um Platz zu sparen. Der Aufbau einer Zeile ist

$M N_1 R_1 N_2 R_2 \dots N_M R_M$

Es bedeuten:

M Anzahl der Blöcke $N_i R_i$, die in dieser Zeile stehen (2 Bytes, LSB an erster Stelle).

N_i Anzahl der aufeinander folgenden Felder, die alle den gleichen Rauhigkeitsindex besitzen (1 Byte).

R_i Rauhigkeitsindex (1 Byte).

In der Tabelle hat der Rauhigkeitsindex den Wert 0, wenn keine Informationen über die Rauhigkeit vorliegen, das Feld also beispielsweise außerhalb Deutschlands liegt. Ihm ist die Rauhigkeitslänge 0.05 m zugeordnet.

B Programmstruktur

Das Programmsystem AUSTAL2000 besteht aus den Programmen *AUSTAL2000* und *TALdiames* im Hauptverzeichnis *AUSTAL2000*. Unter Windows sind die Dateinamen der Programme *austal2000.exe* und *tal diames.exe*, unter Linux sind es *austal2000* und *tal diames*. Zusätzlich werden zur Auswertung der Verifikationsrechnungen noch die Programme *verifx* benötigt, wobei *x* für die Nummer der Verifikation steht. Sie befinden sich im Unterverzeichnis *AUSTAL2000/verif*.

Sämtliche Programme sind in der Programmiersprache C geschrieben, wobei versucht wurde, Erweiterungen des ANSI-C-Standards möglichst nur im Modul *TalUt1.c* zu nutzen. Unter Windows und unter Linux wird der gleiche Quelltext verwendet, lediglich die Make-Files sind unterschiedlich.

Der Quelltext wurde so verfaßt, daß er ohne Änderungen mit allen unterstützten Compilern übersetzt werden kann. Für Windows ist der GNU-C-Compiler kostenlos im Internet unter www.mingw.org erhältlich, bei Linux gehört er in der Regel zur Distribution. Beim Übersetzen der Programme ist zu beachten, daß alle Strukturen ohne Lücken zu packen sind, was durch die Compiler-Option `-fpack-struct` erreicht wird. Der Datentyp `char` ist standardmäßig als `unsigned` einzustellen.

Die benötigten Unterprogramme und die Abhängigkeit der Programme untereinander sind im Make-File *Makefile* aufgeführt. Für jeden unterstützten Compiler ist ein eigener Make-File in einem separaten Verzeichnis vorgesehen. Alle ausführbaren Programme werden erzeugt, indem man in das Unterverzeichnis für den betreffenden Compiler geht und dort `make` (von GNU) aufruft:

```
make           erzeugt alle ausführbaren Programme
make clean    löscht alle erzeugten Programme
```

Anschließend sind die ausführbaren Programme in die richtigen Verzeichnisse zu kopieren, also *AUSTAL2000* und *TALdiames* nach *AUSTAL2000* und die Auswerteprogramme der Verifikationen nach *AUSTAL2000/verif*.

Bei den verschiedenen Compilern wurden folgende Rechenzeiten für die Verifikation 11 beobachtet:

System	Compiler	Zeit
Windows 2000 Pentium 4 mit 2.4 GHz	GNU-C 3.2	257 s
	Microsoft C 12.0	157 s
Linux SuSE 8.1 Athlon2000+	GNU-C 3.2	232 s
	Intel C 7.1	162 s

C Das Windfeldmodell *TALdiames*

Das diagnostische mesoskalige Windfeldmodell *TALdiames* erzeugt zu einem vorgegebenen Geländeprofil und Anströmprofil ein divergenzfreies Windfeld und verwendet dafür ein dem Geländeprofil folgendes Koordinatensystem.

Die Berechnung des Windfeldes geschieht in folgenden Schritten:

- Es wird ein Anströmprofil gebildet, das im wesentlichen homogen ist.
- Das Geländeprofil wird hiermit angeströmt und unter Berücksichtigung der Stabilität ein divergenzfreies Windfeld berechnet (charakteristische Höhe ist die mittlere Geländeunebenheit).
- Der logarithmische Anteil des Windprofils einer Prandtl-Schicht wird aufgeprägt.
- Durch Beseitigen der Divergenz (zum zweiten Mal) erhält man das endgültige Windfeld.

C.1 Das Rechenprinzip

Wenn die Geländehöhe in kartesischen Koordinaten durch

$$z = b(x, y) \quad (2)$$

gegeben ist mit der Obergrenze des Rechengebietes bei $z = \hat{z}$, dann wird die vertikale Koordinate z durch eine Größe s ersetzt, die dem Abstand vom Erdboden $h = z - b$ proportional ist,

$$s = \hat{s} \frac{z - b(x, y)}{\hat{z} - b(x, y)}, \quad (3)$$

$$z = b(x, y) + \frac{s}{\hat{s}} [\hat{z} - b(x, y)] \quad (4)$$

TALdiames verwendet nur den Sonderfall $\hat{z} \rightarrow \infty$, $\hat{s} \rightarrow \infty$ und $\hat{z}/\hat{s} \rightarrow 1$, es ist also $s \equiv h$.

Die vertikale Komponente v_z des Geschwindigkeitsvektors wird ersetzt durch

$$v_s = \frac{ds}{dt} \quad (5)$$

$$v_z = \phi v_x + \chi v_y + \psi v_s \quad (6)$$

$$\text{mit } \phi = (1 - \rho) \frac{\partial b}{\partial x}, \quad (7)$$

$$\chi = (1 - \rho) \frac{\partial b}{\partial y}, \quad (8)$$

$$\psi = \frac{\hat{z} - b(x, y)}{\hat{s}}, \quad (9)$$

$$\rho = s/\hat{s}. \quad (10)$$

Durch die Vorgabe von $v_s = 0$ für $s = 0$ kann garantiert werden, daß die Strömung exakt parallel zur Erdoberfläche verläuft.²⁶

Wird das Geländeprofil $b(x, y)$ und eine Strömung $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ ²⁷ vorgegeben, dann sucht das Modell dasjenige Feld $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, das die Bedingungen

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (11)$$

$$\int \frac{1}{2} \{ a_h (v_x - u_x)^2 + a_h (v_y - u_y)^2 + a_v (v_z - u_z)^2 \} dV = \min! \quad (12)$$

erfüllt. Die Faktoren a_v und $a_h = a_v^{-1}$ legen fest, ob bei der Minimierung der Abweichung mehr Gewicht auf die vertikale oder die horizontale Geschwindigkeitskomponente gelegt wird. Wird \mathbf{u} als horizontales homogenes Feld vorgegeben, dann erhält man mit $a_v = 1$ eine Potentialströmung. Bei $a_v \gg 1$ wird ein Feld erzeugt, bei dem Hindernisse eher seitlich umströmt als überströmt werden, wie es den Verhältnissen bei stabiler Schichtung entspricht.

Mit dem Lagrange-Parameter $\lambda(\mathbf{r})$ erhält man aus Gln. (11) und (12) das folgende Variationsproblem

$$\delta \left\{ \int \frac{1}{2} [a_h (v_x - u_x)^2 + a_h (v_y - u_y)^2 + a_v (v_z - u_z)^2] dV + \int \lambda(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{v} dV \right\} = 0 \quad (13)$$

²⁶Die in den Windfeldbibliotheken abgespeicherte Komponente vs ist ψv_s , so daß der Algorithmus zur Berechnung der z -Komponente der Partikelbahn etwas einfacher wird.

²⁷Zur Schreibweise: Fett gedruckte Symbole bezeichnen Vektoren, beispielsweise ist \mathbf{r} der Ortsvektor. Ein hochgestellter Punkt bezeichnet das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren, $\nabla \cdot \mathbf{v}$ ist die Divergenz des Feldes $\mathbf{v}(\mathbf{r})$. dV ist das Volumenelement um den Punkt \mathbf{r} , df ein Flächenelement.

Hieraus erhält man für das gesuchte $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ die Beziehungen

$$\begin{aligned} v_x &= u_x + \frac{1}{a_h} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \\ v_y &= u_y + \frac{1}{a_h} \frac{\partial \lambda}{\partial y} \\ v_z &= u_z + \frac{1}{a_v} \frac{\partial \lambda}{\partial z} \end{aligned} \quad (14)$$

sofern die Beziehung

$$\oint \lambda \delta \mathbf{v} \cdot d\mathbf{f} = 0 \quad (15)$$

erfüllt ist. Dies bedeutet, daß überall dort am Rand, wo die Normalkomponente von \mathbf{v} nicht vorgegeben ist, die Funktion λ den Wert 0 annehmen muß.

Zur numerischen Berechnung der Funktion $\lambda(\mathbf{r})$ wird diese diskretisiert, wobei als Stützpunkte die Mittelpunkte der Zellen des Rechnernetzes gewählt werden. Die Forderung nach Divergenzfreiheit von $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ wird umgesetzt in die Forderung, daß der Fluß durch die gesamte Oberfläche einer jeden Zelle verschwinden soll. Dies ergibt genau so viele Gleichungen wie Unbekannte λ_{ijk} vorhanden sind und das erhaltene Gleichungssystem kann iterativ gelöst werden. Hierzu wird nicht, wie meist üblich, das SOR-Verfahren (*successive overrelaxation*) verwendet sondern das ADI-Verfahren (*alternate directions implicit*). Es ist zwar in manchen Situationen nicht so effektiv, hat aber bei steilem Gelände und stark variierenden Maschenweiten die besseren Konvergenzeigenschaften.

Der Parameter a_v ist eine Funktion der Strouhal-Zahl S_r und wird — wie in anderen diagnostischen Modellen auch — als

$$a_v = \sqrt{\frac{a_v}{a_h}} = \frac{1}{2} S_r^2 + \sqrt{1 + \frac{1}{4} S_r^4} \quad (16)$$

angesetzt. Die Strouhal-Zahl ist das Produkt aus der Brunt-Väisälä-Frequenz N_{BV} ,

$$N_{BV} = \sqrt{\frac{g \vartheta'}{\vartheta}}, \quad (17)$$

mit ϑ = potentielle Temperatur, ϑ' = vertikaler Gradient von ϑ , g = Erdbeschleunigung 9.81 m/s^2 , und einer charakteristischen Zeit t_c ,

$$S_r = N_{BV} t_c. \quad (18)$$

Die charakteristische Zeit t_c kann man als Quotient aus einer charakteristischen Länge L_c und einer charakteristischen Geschwindigkeit v_c darstellen,

$$t_c = \frac{L_c}{v_c}. \quad (19)$$

Hier wird die Länge L_c als geometrisches Mittel aus der Höhe h_c der Geländeerhebungen und ihrer horizontalen Ausdehnung l_c angesetzt²⁸

$$L_c = \sqrt{l_c h_c} \quad (20)$$

Im Rahmen dieses Modelles werden nur neutrale und stabile atmosphärische Schichtungen betrachtet, es ist also immer $\vartheta' \geq 0$.

Für $v_c(z)$ werden die Geschwindigkeiten des ungestörten, eindimensionalen Windprofils ohne logarithmischen Anteil verwendet. Die Höhe h_c wird aus der mittleren Varianz der Geländehöhe $b(x, y)$ und die Länge l_c aus dem mittleren Quadrat der Geländesteigung $\gamma(x, y)$ berechnet:

$$h_c = 4 \sqrt{\int [b(x, y) - \bar{b}]^2 dx dy / F} \quad (21)$$

$$\text{mit } F = \int dx dy = (x_{\max} - x_{\min})(y_{\max} - y_{\min}) \quad (22)$$

$$\bar{b} = \int b(x, y) dx dy / F \quad (23)$$

$$l_c = \frac{h_c}{2\gamma} \quad (24)$$

$$\gamma^2 = \int \left[\left(\frac{\partial b}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial b}{\partial y} \right)^2 \right] dx dy / F \quad (25)$$

Führt man bei konstantem a_v die Substitutionen $a_v v_z \rightarrow v_z$ und $a_v z \rightarrow z$ durch, dann erhält man bei $u_z \equiv 0$ wieder die Gln. (11) und (12), aber für den Fall $a_h = a_v = 1$. Das beutet, daß man — falls \mathbf{u} als konstant vorgegeben wird — mit dem Parameter a_v nichts anderes bewirkt, als daß für ein entsprechend überhöhtes Geländeprofil eine Potentialströmung berechnet und anschließend wieder auf das ursprüngliche Geländeprofil zurückskaliert wird. Damit werden auch die Grenzen dieses Modells sichtbar: Selbst ein hoher Wert von a_v verhindert nicht die Überströmung eines Hügels sondern erschwert sie nur, im Gegensatz zu einer realen Strömung bei stabiler Schichtung.

²⁸In diagnostischen Windfeldmodellen wird häufig $L_c = h_c$ gesetzt. Der Test des hier verwendeten Ansatzes ist im Projektbericht im Abschnitt *Test des Diagnostischen Mesoskaligen Windfeldmodells* beschrieben.

C.2 Die Modellierung der Prandtl-Schicht

Die Prandtl-Schicht wird erst zum Schluß modelliert, wenn bereits Geländeeinflüsse berücksichtigt sind. Dies scheint korrekter zu sein, als von vornherein das Anströmfeld mit einem vollständigen Windprofil auszustatten, und wird im folgenden erläutert.

Die Divergenz wird im Endeffekt dadurch beseitigt (bei neutraler Schichtung mit $a_h = a_v = 1$), daß ein geeignetes Gradientenfeld $\nabla\lambda$ addiert wird. Dabei bleibt die Rotation des ursprünglichen Feldes unverändert. Einen wesentlichen Teil der Rotation liefert die Windscherung in der Prandtl-Schicht, also die Zunahme der Windgeschwindigkeit mit wachsendem Abstand vom Erdboden, insbesondere der logarithmische Anteil. Die Erhaltung der Rotation bedeutet, daß die Geschwindigkeitsdifferenz zwischen unterem und oberem Rand der Prandtl-Schicht erhalten bleibt.

Bei einer Strömung quer zu einem Bergrücken erhält man auf dem Rücken eine Erhöhung der Windgeschwindigkeit. Wenn das Anströmfeld bereits die Prandtl-Schicht enthält, dann reicht auf dem Bergrücken die Abnahme der Geschwindigkeit mit abnehmender Höhe nicht mehr aus, um am Erdboden die Geschwindigkeit Null zu erreichen. Eine unrealistisch hohe Windgeschwindigkeit in Bodennähe ist die Folge.

Das nachträgliche Aufprägen einer Prandtl-Schicht durch einen höhenabhängigen Faktor ist zwar vom theoretischen Standpunkt aus auch nicht befriedigend, scheint aber zumindest den aufgeführten systematischen Fehler zu vermeiden. Praktisch wird so vorgegangen, daß das Anströmprofil zwar aus dem Grenzschichtmodell bestimmt wird, aber der logarithmische Teil in den untersten 200 Metern durch Division durch $\ln(z/z_0)/l_{200}$ beseitigt wird ($l_{200} = \ln(200/z_0)$). Im vorletzten Schritt der Windfeldgenerierung werden dann die Werte der untersten 200 Meter wieder mit diesem Faktor multipliziert. Der tatsächlich verwendete Faktor ist etwas komplizierter und berücksichtigt die Nullpunktverschiebung d_0 und die Interpolationsvorschrift für die Windgeschwindigkeit in Bodennähe.

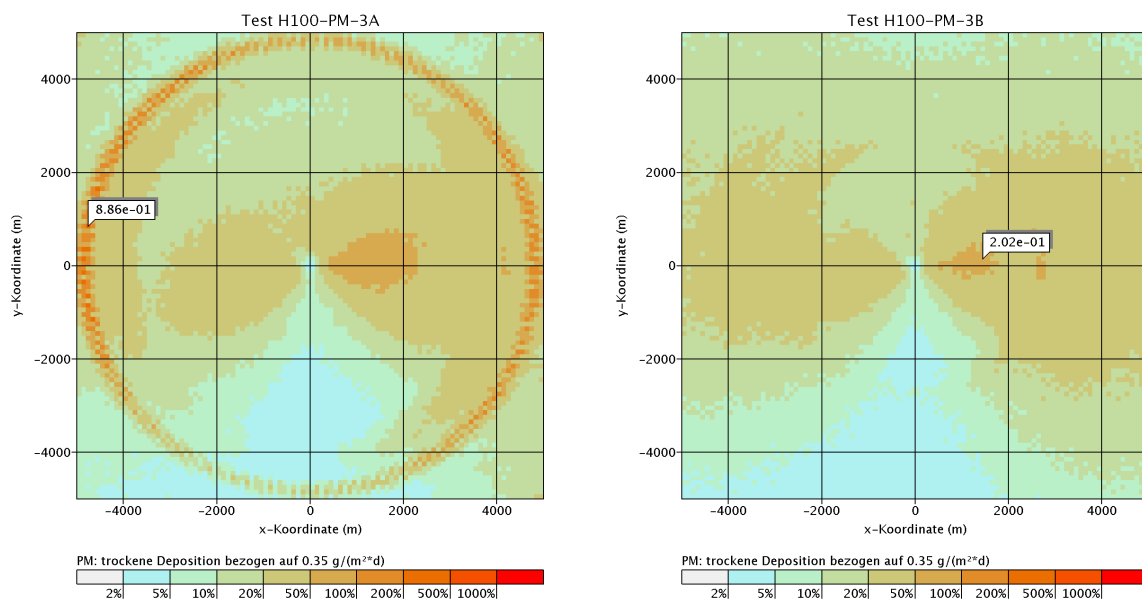
D Sedimentierender Staub

Die TA Luft spezifiziert für sedimentierende Stäube (Korngrößenklassen 3, 4 und u) jeweils einen einzigen Wert der Sedimentationsgeschwindigkeit. Das bedeutet, daß bei gleicher Windgeschwindigkeit alle Trajektorien der Partikel einer Klasse den gleichen Neigungswinkel aufweisen, was zu einer ringförmige Struktur im Depositionsbild führen kann. Voraussetzung hierfür ist, daß nahezu alle der folgenden Umstände zusammentreffen:

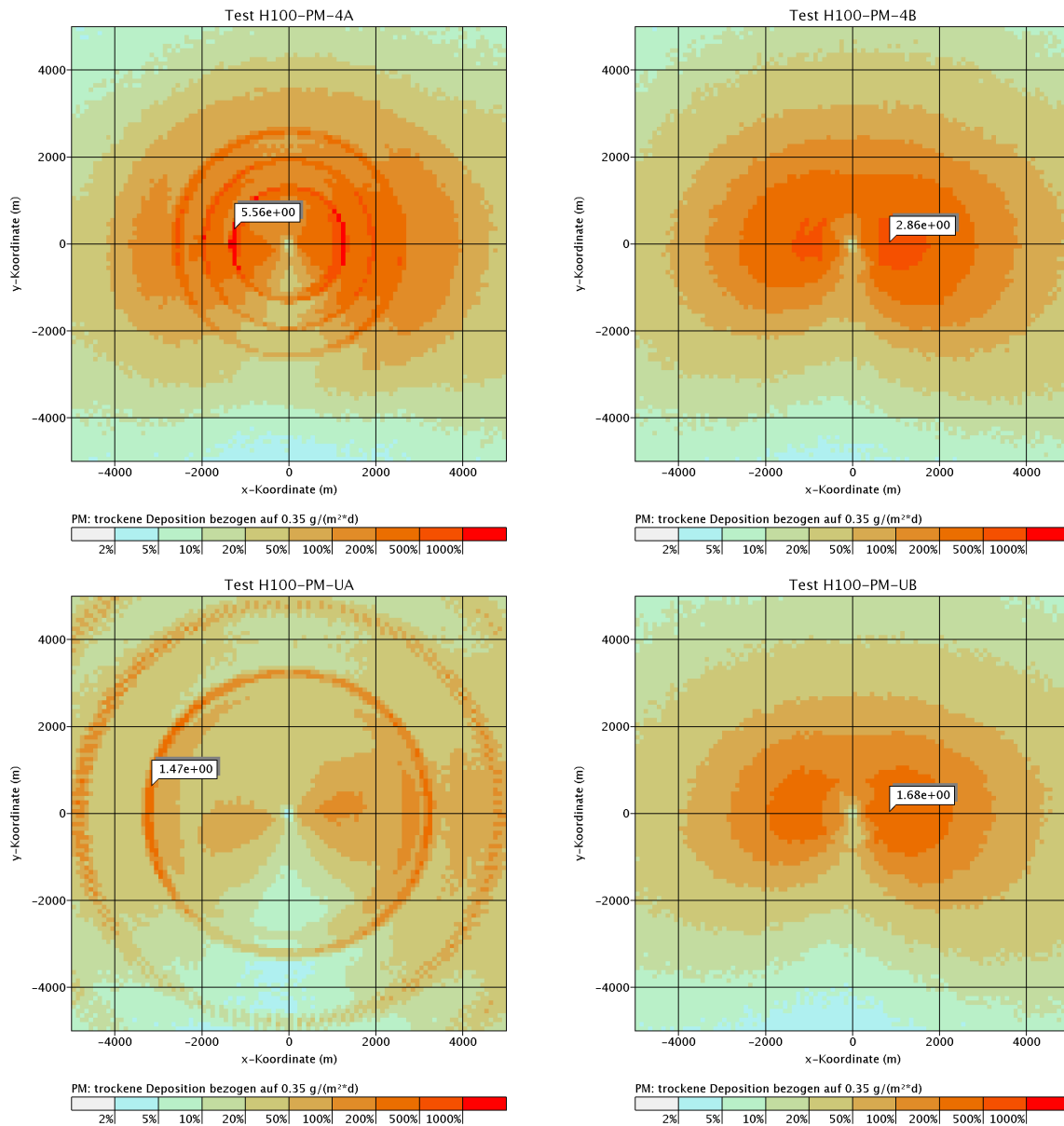
- Ausbreitungsrechnung mit einer AKS,
- häufiges Auftreten stabiler, windschwacher Wetterlagen,
- hohe Emissionsquelle ohne Abgasfahnenüberhöhung,
- niedrige Bodenrauigkeit,
- geringer Anteil von PM-10 im Gesamtstaub.

Andernfalls ist die Ringstruktur nicht sichtbar, nicht relevant für die Immissionsbeurteilung oder sie liegt außerhalb des Beurteilungsgebietes.

Die folgenden Bilder zeigen in den Testrechnungen²⁹ H100-PM-3A, H100-PM-4A und H100-PM-UA den Jahresmittelwert der Deposition für die drei Korngrößenklassen bei einer 100 m hohen Quelle ohne Abgasfahnenüberhöhung, $z_0 = 0.1$ m und einer AKS aus dem süddeutschen Raum. Zusätzlich zur Ringstruktur ist oft auch, wie in H100-PM-3A, noch die Andeutung einer Sternstruktur zu erkennen, die daher rührt, daß bei sehr stabiler Schichtung die Fahnenbreite in dieser Entfernung geringer als 2 Grad ist, so daß sich die „Fußabdrücke“ der einzelnen Fahnen beim Durchlaufen der Windrose unterscheiden lassen.



²⁹Die Eingabedaten stehen in den entsprechenden Unterverzeichnissen von test/dust/



In einem solchen Fall ist die Vereinfachung, eine Korngrößenklasse durch Partikel einer einzigen Größe zu repräsentieren, nicht angebracht und es ist besser, die Masse innerhalb einer Korngrößenklasse gleichmäßig über den gesamten Korngrößenbereich zu verteilen. Dabei wird hier für Klasse 4 und Klasse u(nbekannt) eine obere Grenze des aerodynamischen Durchmessers von $100\ \mu\text{m}$ angesetzt. Die Sedimentationsgeschwindigkeit v_s wird für jedes Partikel entsprechend seinem aerodynamischen Durchmesser nach VDI 3782 Blatt 1 berechnet, seine Depositionsgeschwindigkeit v_d wird um $0.01\ \text{m/s}$ höher als v_s angesetzt.

Diese Modellierungsart wird vom Programm gewählt, wenn im Parameter os die Optionen NOSTANDARD und SPECTRUM angegeben werden. Die Rechnungen H100-PM-3B, H100-PM-4B und H100-PM-UB zeigen, daß jetzt sowohl die Ringstruktur als auch die Ansätze einer Sternstruktur verschwinden.

E Verifikationsrechnungen

Die Richtlinie VDI 3945 Blatt 3 führt in ihrem Anhang D eine Reihe von Testrechnungen auf, mit denen das korrekte Arbeiten des Simulationsmodells überprüft werden soll. Es handelt sich hierbei um sehr spezielle Situationen, für die einige Eigenschaften des korrekten Ergebnisses bekannt sind, so daß hieran die Simulationsergebnisse geprüft werden können.

Da AUSTAL2000 auf die Bedürfnisse der TA Luft hin konzipiert worden ist, lassen sich diese speziellen Situationen bei AUSTAL2000 normalerweise nicht nachbilden. Um trotzdem die Verifikationsrechnungen durchführen zu können, wurden im Programm Erweiterungen eingebaut, die über den Eingabeparameter `os` angesprochen werden. Diese Erweiterungen sind allein auf die im folgenden beschriebenen Testrechnungen hin entwickelt und geprüft und sind nicht bei Ausbreitungsrechnungen nach TA Luft zu verwenden.

Alle Erweiterungen erfordern das Schlüsselwort `NOSTANDARD` als Teil der Zeichenkette, die für `os` angegeben wird. Ist dieses Schlüsselwort gesetzt, wird in der Protokolldatei ein entsprechender Hinweis ausgegeben.

Durch das Schlüsselwort `PERIODIC` werden periodische Randbedingungen spezifiziert. Dies bedeutet, daß Partikel, die in x - oder y -Richtung das Rechengebiet verlassen, auf der gegenüberliegenden Seite des Rechengebietes wieder hineingeschickt werden. In z -Richtung wird das Partikel an der Oberseite des Rechengebietes reflektiert (wie auch am Erdboden). Damit kann also kein Partikel das Rechengebiet verlassen.

In der Zeichenkette `os` können folgende Parameter in der Form „*Name=Wert*;“ festgelegt werden (Groß-/Kleinschreibung beachten, keine Leerzeichen zulässig):

`Blm` : Nummer eines anderen Grenzschichtmodells (s.u.).

`Groups` : Anzahl der Partikel-Gruppen zur Schätzung des Stichprobenfehlers.

`Kmax` : Es werden zusätzlich die Konzentrationsverteilungen für jedes Tagesmittel ausgeschrieben, und zwar alle Schichten $1 \leq k \leq Kmax$. Der Dateiname hat die Form *Stoff-nnnp.dmma*, wobei *nnn* eine fortlaufende Numerierung ist und *p* die dargestellte Größe angibt (*z* für die Konzentration, *s* für die statistische Unsicherheit).

`Kref` : Wie `Kmax`, aber es wird nur die Schicht $k = Kref$ ausgegeben.

`Rate` : Freisetzungsrates der Partikel in Partikel pro Sekunde (ersetzt die Festlegung durch `qs`).

`Su`, `Sv`, `Sw` : Direkte Festlegung der Geschwindigkeitsfluktuationen $\sigma_{u,v,w}$.

`Tau` : Maximaler Zeitschritt bei der Bewegung der Partikel. Hier wird er immer so gewählt, daß er kleiner ist als der vom Programm sonst gewählte Zeitschritt, so daß bei Vorgabe von `Tau` mit räumlich konstantem Zeitschritt gerechnet wird.

`Us` : Direkte Festlegung der Schubspannungsgeschwindigkeit u_* .

Vd : Direkte Festlegung der Depositionsgeschwindigkeit (ersetzt den Standardwert des betreffenden Stoffes).

Vs : Direkte Festlegung der Sedimentationsgeschwindigkeit (ersetzt den Standardwert des betreffenden Stoffes).

Es sind folgende, von der Richtlinie VDI 3783 Blatt 8 abweichende Grenzschichtprofile einstellbar, die durch die Angabe ihrer Versionsnummer Blm ausgewählt werden:

Blm=0.1: Es wird ein homogenes Turbulenzfeld mit einem homogenen Windfeld der Stärke u_a erzeugt. Die Geschwindigkeitsfluktuationen σ_u , σ_v und σ_w werden explizit über die Parameter Su, Sv und Sw vorgegeben, ebenfalls die Schubspannungsgeschwindigkeit u_* (Parameter Us). Die Lagrange-Korrelationszeiten werden folgendermaßen berechnet:

$$T_{u,v} = 100$$

$$T_w = 10z_0/u_*$$

Blm=0.5: Es wird folgendes inhomogenes Profil eingestellt:

$$u(z) = u_a \left(\frac{z}{h_a} \right)^{0.3}$$

$$\sigma_{u,v} = 10^{-6} \text{ m/s}$$

$$\sigma_w(z) = Sw \sqrt{z/h_a}$$

$$T_{u,v,w} = z_0/u_*$$

Blm=0.7: Es wird ein inhomogenes Turbulenzfeld eingestellt:

$$\sigma_{u,v} = Su, Sv$$

$$\sigma_w(z) = Sw \left[1 - \frac{z_0}{h_a} \sin \left(\frac{z\pi}{2\hat{z}} \right) \right]$$

$$T_{u,v} = 20z_0/u_*$$

$$T_w = \frac{z_0}{u_*} \left[1 + 20 \sin \left(\frac{z\pi}{2\hat{z}} \right) \right]$$

\hat{z} ist die Obergrenze des Rechengebietes.

Welche weiteren Zusatzangaben möglich sind, ist bei den einzelnen Verifikationsrechnungen beschrieben.

Die Verifikationsrechnungen haben 2-stellige Kennziffern nn , die den Abschnittsnummern der VDI-Richtlinie entsprechen. Sie stehen jeweils im Unterverzeichnis `verif\nn`. Zu jeder Rechnung gibt es ein eigenes Analyseprogramm mit dem Namen `verifnn`. Das ausführbare

Programm steht im Verzeichnis `verif`, der Quelltext (Datei `verifnn.c`) im Verzeichnis `source`.

Die Testrechnung `nn` wird ausgeführt durch den Aufruf `austal2000 verif/nn`. Das Ergebnis wird ausgewertet durch `verif\verifnn`. Sollen alle Verifizierungsrechnungen hintereinander durchgeführt und ausgewertet werden, dann kann man dies durch die Aufrufe

```
verif\verify
verif\evaluate
```

erreichen. Die Auswertung steht anschließend in der Datei `verif\result.txt`. Die im folgenden aufgeführten Ergebnisse stammen aus Rechnungen mit der Programmversion 1.1.8-W2.

00 Schätzung des Stichprobenfehlers

Die statistische Unsicherheit der berechneten Konzentrationswerte führt zu Abweichungen von den Sollwerten. Ob diese Abweichungen signifikant sind, kann anhand des vom Programm geschätzten Stichprobenfehlers beurteilt werden. Deswegen muß zuerst geprüft werden, ob das Programm den Stichprobenfehler tatsächlich korrekt schätzt.

Hierzu wird ein Rechengebiet von $1000 \times 1000 \text{ m}^2$ Grundfläche festgelegt, das horizontal in 50×50 Maschen aufgeteilt wird. Vertikal gibt es nur eine Masche bis 200 m Höhe. Es wird eine Zeitreihe von 10 Tagen gerechnet, wobei nur während der letzten Stunde des ersten Tages Partikel freigesetzt werden. Die Randbedingungen werden so modifiziert, daß die Partikel das Rechengebiet nicht verlassen können. Es wird eine zeitlich und räumlich konstante Turbulenz angesetzt. In allen Zellen sollte die gleiche mittlere Konzentration herrschen, Abweichungen hiervon sind rein zufällig.

Rechengebiet: $1000 \times 1000 \times 200 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $50 \times 50 \times 1$ Maschen mit periodischen Randbedingungen.

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit `ua=0.2, ra=270, z0=0.5` und
„`Blm=0.1; Su=1.2; Sv=1.0; Sw=0.65; Tau=10; Us=0.2`“; Zeitreihe über 10 Tage.

Quelle: Volumenquelle über das gesamte Rechengebiet. Die Emission erfolgt nur in der letzten Stunde des ersten Tages. Bei `Groups=36; Rate=0.01`; bedeutet dies, daß jede Gruppe nur ein einziges Partikel enthält. Die Gesamtemission ist 360 kg, die mittlere Konzentration also $1800 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

N	Mean	Observed	Estimated
1	37.6	96.6	74.1
2	1800.0	13.8	14.0
3	1800.0	14.5	14.0
4	1800.0	14.8	14.1
5	1800.0	14.2	14.0
6	1800.0	13.7	14.1
7	1800.0	14.4	14.0
8	1800.0	13.6	14.0
9	1800.0	13.5	14.0
10	1800.0	14.4	14.1

Bei der Auswertung in der nebenstehenden Tabelle wird für jeden Tag N der beobachtete Mittelwert Mean angegeben, aus der Variation der Konzentrationswerte in den 50×50 Maschen der tatsächliche Stichprobenfehler berechnet (Spalte Observed, Angabe in Prozent) und mit dem Stichprobenfehler verglichen, den das Programm selbst für jede Masche schätzt (Spalte Estimated, quadratisches Mittel über alle Zellen, Angabe in Prozent). Der Median des tatsächlichen Stichproben-

fehlers über alle 9 verwertbaren Tage beträgt 14.2 %, der mittlere vom Programm geschätzte Stichprobenfehler beträgt 14.0 %.

01 Berechnung der Geruchsstundenhäufigkeit

Es wird getestet, ob das Vorliegen einer Geruchsstunde richtig erkannt wird und die Schätzung des Stichprobenfehlers für die Geruchsstundenhäufigkeit korrekt ist.

Es wird ähnlich wie bei Verifikation 00 ein Rechengebiet von $200 \times 200 \text{ m}^2$ Grundfläche festgelegt, das horizontal in 10×10 Maschen aufgeteilt wird. Vertikal gibt es nur eine Masche bis 200 m Höhe. Es wird eine Zeitreihe von 10 Tagen gerechnet, wobei nur während der letzten Stunde des ersten Tages Partikel freigesetzt werden. Die Randbedingungen werden so modifiziert, daß die Partikel das Rechengebiet nicht verlassen können. Es wird eine zeitlich und räumlich konstante Turbulenz angesetzt. In allen Zellen sollte die gleiche mittlere Konzentration herrschen, Abweichungen hiervon sind rein zufällig.

Die Emission wird so gewählt, daß die mittlere Konzentration 0.25 GE/m^3 beträgt, also mit 50 % Wahrscheinlichkeit eine Geruchsstunde angenommen wird. Um neben der Geruchsstundenhäufigkeit auch die Konzentration verfolgen zu können, wird neben dem Stoff odor auch der Stoff xx mit gleicher Quellstärke emittiert. Zusätzlich zu den 10 Tagesmittelwerten wird auch für 10 Beurteilungspunkte die Zeitreihe von Konzentration und von Geruchsstundenhäufigkeit berechnet.

Rechengebiet: $200 \times 200 \times 200 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $10 \times 10 \times 1$ Maschen mit periodischen Randbedingungen.

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $ua=0.2$, $ra=270$, $z0=0.5$ und „Blm=0.1; Su=1.2; Sv=1.0; Sw=0.65; Tau=10; Us=0.2;“, Zeitreihe über 10 Tage.

Quelle: Volumenquelle über das gesamte Rechengebiet. Die Emission erfolgt nur in der letzten Stunde des ersten Tages. Bei Groups=36; Rate=0.1; bedeutet dies, daß jede Gruppe 10 Partikel enthält. Die Gesamtemission ist 2000 kGE (bzw. 2000 kg), die mittlere Konzentration also 0.25 GE/m^3 .

Tagesmittel der Konzentration:

N	Mean	Observed	Estimated
1	0.005220	5.50	5.96
2	0.250023	0.82	0.83
3	0.250023	0.99	0.83
4	0.250019	0.97	0.84
5	0.250019	0.88	0.82
6	0.250019	0.74	0.82
7	0.250021	0.71	0.83
8	0.250019	0.83	0.82
9	0.250017	0.87	0.83
10	0.250019	0.89	0.82

Bei der Auswertung in der nebenstehenden Tabelle wird für jeden Tag N der beobachtete Mittelwert Mean der Konzentration angegeben, aus der Variation der Konzentrationswerte in den 10×10 Maschen der tatsächliche Stichprobenfehler berechnet (Spalte Observed, Angabe in Prozent) und mit dem Stichprobenfehler verglichen, den das Programm selbst für jede Masche schätzt (Spalte Estimated, quadratisches Mittel über alle Zellen, Angabe in Prozent). Der Mittelwert liegt im Rahmen der Darstellungsgenauigkeit in den Ergebnisdateien (4 signifikante Stellen) bei den vorgesehenen 0.25 GE/m^3 . Der Median des tatsächlichen Stichprobenfehlers über alle 9 verwertbaren Tage beträgt 8.3 %, der mittlere vom Programm geschätzte Stichprobenfehler beträgt 8.7 %.

Zeitreihe der Konzentration:

P	Mean	Observed
1:	0.25070	4.433
2:	0.25088	3.965
3:	0.25041	3.995
4:	0.25096	4.122
5:	0.25031	4.243
6:	0.24856	4.043
7:	0.25096	4.092
8:	0.25006	4.186
9:	0.25024	4.323
10:	0.25022	3.987

Die nebenstehende Tabelle zeigt die Auswertung der Konzentrationszeitreihen für die 10 Beurteilungspunkte (Spalte P) bezüglich der Tage 2 bis 10. Die Spalte Mean enthält die über die 9 Tage gemittelte Konzentration, die Spalte Observed den beobachteten Stichprobenfehler der Stundenmittelwerte. Theoretisch sollte er um den Faktor $\sqrt{24}=4.9$ über dem Stichprobenfehler des Tagesmittels liegen, also bei 4.07 %. Der beobachtete Wert ist 4.11 % (Median).

Tagesmittel der Geruchsstundenhäufigkeit:

N	Mean	Observed	Estimated
1	0.00	0.00	0.00
2	49.55	6.17	8.26
3	49.37	6.98	8.32
4	49.30	6.71	8.27
5	49.28	6.39	8.29
6	49.30	5.18	8.28
7	49.34	5.11	8.30
8	49.40	5.83	8.18
9	49.31	6.01	8.28
10	49.41	6.27	8.27

Bei der Auswertung in der nebenstehenden Tabelle wird für jeden Tag N der beobachtete Mittelwert Mean der Geruchsstundenhäufigkeit angegeben (in Prozent der Tagesstunden), aus der Variation der Häufigkeitsswerte in den 10×10 Maschen der tatsächliche Stichprobenfehler berechnet (Spalte Observed, Angabe in Prozent der Tagesstunden) und mit dem Stichprobenfehler verglichen, den das Programm selbst für jede Masche schätzt (Spalte Estimated, quadratisches Mittel über alle Zellen, Angabe in Prozent der Tagesstunden). Der Mittelwert liegt knapp unter dem theoretischen Wert von 50 %. Der Median des tatsächlichen Stichprobenfehlers über alle 9 verwertbaren Tage beträgt 6.17, der mittlere vom Programm geschätzte Stichprobenfehler beträgt 8.28.

Den theoretisch zu erwartenden Wert für den vom Programm geschätzten Stichprobenfehler erhält man durch folgende Überlegung. Die Parameter dieser Rechnung sind so gewählt, daß der Erwartungswert \bar{c} der einzelnen Stundenmittelwerte c gleich der Beurteilungsschwelle $c_{\text{BS}} = 0.25 \text{ GE/m}^3$ ist. Die Einzelwerte streuen um diesen Mittelwert mit einer Streuung σ ,

die etw 4 % des Mittelwertes beträgt, wie zuvor gezeigt wurde. Man kann daher näherungsweise von einer Gauß-Verteilung ausgehen,

$$g(c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(c - c_{BS})^2}{2\sigma^2}\right] \quad (26)$$

$$G(c) = \int_{-\infty}^c g(c') dc' \quad (27)$$

Tritt der Wert c auf, dann wird diesem Wert die Geruchsstundenhäufigkeit α mit der Varianz v zugeordnet,

$$\alpha(c) = G(c) \quad (28)$$

$$v(c) = \alpha(c)[1 - \alpha(c)] \quad (29)$$

Der Mittelwert der Varianz ist

$$\bar{v} = \int_{-\infty}^{+\infty} v(c)g(c) dc \quad (30)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} G(c)[1 - G(c)]g(c) dc \quad (31)$$

$$= \frac{1}{6} \quad (32)$$

Das Integral läßt sich durch partielle Integration exakt berechnen. Die für das Tagesmittel (Mittel über 24 Einzelwerte) zu erwartende Streuung ist daher $1/\sqrt{6 \times 24} = 0.083333$, also 8.33 % der Tagesstunden, was sehr gut mit dem vom Programm angegebenen Wert übereinstimmt.

Die tatsächlich beobachtete Streuung ist deutlich geringer. Das liegt daran, daß das Tagesmittel nicht über die Binär-Werte (ja/nein-Entscheidung) des Auftretens einer Geruchsstunde gebildet wird sondern über die Eintrittswahrscheinlichkeit α .

Zeitreihe der Geruchsstundenhäufigkeit:

P	Mean	Observed	Counted
1:	51.43	29.81	53.24
2:	51.94	28.58	52.78
3:	50.76	28.72	48.61
4:	50.78	29.42	48.61
5:	50.52	29.94	52.78
6:	45.16	28.86	43.98
7:	52.34	29.25	54.17
8:	48.99	29.26	50.00
9:	49.83	30.67	50.93
10:	50.15	29.12	49.07

Die nebenstehende Tabelle zeigt die Auswertung der Zeitreihe der Geruchsstundenhäufigkeit für die 10 Beurteilungspunkte (Spalte P) bezüglich der Tage 2 bis 10. Die Spalte Mean enthält die über die 9 Tage gemittelte Geruchsstundenhäufigkeit (Median ist 50.66 % der Gesamtstunden), die Spalte Observed den beobachteten Stichprobenfehler der Häufigkeitswerte. Theoretisch sollte er um den Faktor $\sqrt{24}=4.9$ über dem Stichprobenfehler des Tagesmittels liegen, also bei 29.7 %. Der beobachtete Wert ist 29.2 % (Median). Die Spalte Counted enthält zum Vergleich die Häufigkeit der Geruchsstunden, die sich durch Auszählen der Konzentrationswerte $c \geq c_{BS}$ aus der Zeitreihe für den Stoff xx ergibt. Der Median liegt hier bei 50.5 % der Gesamtstunden.

11 Homogenitätstest: Homogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt

Wenn keine äußeren Kräfte einwirken, sollte sich in einem abgeschlossenen Rechengebiet bei einmaliger Freisetzung einer bestimmten Stoffmenge mit der Zeit eine konstante Konzentrationsverteilung einstellen.

K	C _{min}	C	C _{max}	
1	467.9	487.4	506.9	Rechengebiet: 1000 × 1000 × 200 m ³ , aufgeteilt in 1 × 1 × 20 Maschen (vertikal äquidistant) mit periodischen Randbedingungen.
2	468.5	486.0	503.5	
3	473.5	489.2	504.9	
4	482.7	497.6	512.5	Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $u_a=0.2$, $z_0=0.08$ und „Blm=0.1; Su=0.5; Sv=0.5; Sw=0.5; Tau=2; Us=0.2;“, Zeitreihe über 10 Tage.
5	488.1	502.2	516.3	
6	486.5	500.5	514.5	
7	484.3	497.2	510.1	
8	484.8	496.7	508.6	
9	491.4	504.5	517.6	
10	492.9	506.1	519.3	
11	488.5	501.5	514.5	
12	492.9	506.1	519.3	
13	485.7	498.7	511.7	
14	484.7	497.6	510.5	
15	479.2	492.0	504.8	
16	478.0	491.8	505.6	
17	491.8	506.0	520.2	
18	492.6	507.8	523.0	
19	500.5	518.1	535.7	
20	493.2	513.8	534.4	

Quelle: Volumenquelle über das gesamte Rechengebiet. Die Emission erfolgt nur in der ersten Stunde des ersten Tages. Bei Groups=36; Rate=0.1; bedeutet dies, daß jede Gruppe 10 Partikel enthält. Die Gesamtemission ist 100 kg, die mittlere Konzentration also 500 µg/m³. Die nebenstehende Tabelle enthält für den 10-ten Tag das Vertikalprofil (Index K) der Konzentration (Spalte C). Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der hier zwischen 1 % und 2 % liegt, sind die untere Grenze (Spalte C_{min}) und obere Grenze (Spalte C_{max}) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Im statistischen Mittel ist zu erwarten, daß der korrekte Konzentrationswert $\bar{c} = 500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ nur in einem von 20 Fällen zufällig außerhalb der angegebenen Vertrauensintervalle liegt. Hier liegt er in einem Fall außerhalb des Vertrauensintervalls.

12 Homogenitätstest: Homogene Turbulenz, variabler Zeitschritt

Diese Rechnung kann mit AUSTAL2000 nicht durchgeführt werden, da der Zeitschritt nicht explizit vorgebar ist. Das Programm wählt bei homogener Turbulenz immer einen konstanten Zeitschritt.

13 Homogenitätstest: Inhomogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt

Wie Test 11, aber mit inhomogener Turbulenz.

K	Cmin	C	Cmax		
1	472.0	494.8	517.6	Rechengebiet: $1000 \times 1000 \times 200 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $1 \times 1 \times 20$ Maschen (vertikal äquidistant) mit periodischen Randbedingungen.	
2	462.6	480.9	499.2		
3	476.0	492.8	509.6		
4	481.5	496.4	511.3		
5	483.3	497.2	511.1	Meteorologie: Inhomogene Turbulenz mit $u_a=0.2$, $z_0=0.8$, $h_a=1$ und „Blm=0.7; Su=0.5; Sv=0.5; Sw=0.5; Tau=2; Us=0.8;“, Zeitreihe über 10 Tage.	
6	480.0	493.8	507.6		
7	479.4	492.2	505.0		
8	485.9	499.9	513.9		
9	497.7	511.0	524.3		
10	493.1	507.3	521.5		Quelle: Volumenquelle über das gesamte Rechengebiet. Die Emission erfolgt nur in der ersten Stunde des ersten Tages. Bei Groups=36; Rate=0.1; bedeutet dies, daß jede Gruppe 10 Partikel enthält. Die Gesamtemission ist 100 kg, die mittlere Konzentration also $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$.
11	497.1	512.5	527.9		
12	485.7	501.8	517.9		Die nebenstehende Tabelle enthält für den 10-ten Tag das Vertikalprofil (Index K) der Konzentration (Spalte C). Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der hier zwischen 1% und 3% liegt, sind die untere Grenze (Spalte Cmin) und obere Grenze (Spalte Cmax) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Im statistischen Mittel ist zu erwarten, daß der korrekte Konzentrationswert $\bar{c} = 500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ nur in einem von 20 Fällen zufällig außerhalb der angegebenen Vertrauensintervalle liegt. Hier liegt er in zwei Fällen außerhalb des Vertrauensintervalls.
13	476.0	492.8	509.6		
14	473.1	489.8	506.5		
15	476.3	494.1	511.9		
16	473.9	492.6	511.3		
17	473.4	493.1	512.8		
18	481.8	502.9	524.0		
19	499.8	523.9	548.0		
20	500.3	531.1	561.9		

Die nebenstehende Tabelle enthält für den 10-ten Tag das Vertikalprofil (Index K) der Konzentration (Spalte C). Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der hier zwischen 1% und 3% liegt, sind die untere Grenze (Spalte Cmin) und obere Grenze (Spalte Cmax) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Im statistischen Mittel ist zu erwarten, daß der korrekte Konzentrationswert $\bar{c} = 500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ nur in einem von 20 Fällen zufällig außerhalb der angegebenen Vertrauensintervalle liegt. Hier liegt er in zwei Fällen außerhalb des Vertrauensintervalls.

14 Homogenitätstest: Inhomogene Turbulenz, variabler Zeitschritt

Wie Test 11, aber mit inhomogener Turbulenz und variablem Zeitschritt.

K	Cmin	C	Cmax	
1	496.1	505.2	514.3	Rechengebiet: $1000 \times 1000 \times 200 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $1 \times 1 \times 20$ Maschen (vertikal äquidistant) mit periodischen Randbedingungen.
2	499.7	506.8	513.9	
3	498.8	505.9	513.0	
4	496.7	502.7	508.7	
5	490.8	496.8	502.8	Meteorologie: Inhomogene Turbulenz mit $ua=0.2$, $z0=0.8$, $ha=1$ und „Blm=0.7; Su=0.5; Sv=0.5; Sw=0.25; Us=0.8;“, Zeitreihe über 10 Tage.
6	491.4	497.4	503.4	
7	490.9	496.9	502.9	
8	492.3	498.3	504.3	
9	492.8	499.8	506.8	
10	493.2	500.2	507.2	
11	491.7	498.7	505.7	
12	500.3	507.4	514.5	
13	497.2	504.3	511.4	
14	490.9	498.9	506.9	
15	486.8	494.7	502.6	
16	492.2	500.2	508.2	
17	491.7	499.7	507.7	
18	494.1	503.2	512.3	
19	485.6	494.5	503.4	
20	478.2	489.0	499.8	

Quelle: Volumenquelle über das gesamte Rechengebiet. Die Emission erfolgt nur in der ersten Stunde des ersten Tages. Bei Groups=36;Rate=1.0; bedeutet dies, daß jede Gruppe 100 Partikel enthält. Die Gesamtemission ist 100 kg, die mittlere Konzentration also $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Der vom Programm gewählte Zeitschritt variiert zwischen 3.2 Sekunden in Bodennähe und 20 Sekunden am oberen Rand des Rechengebietes. Die nebenstehende Tabelle enthält für den 10-ten Tag das Vertikalprofil (Index K) der Konzentration (Spalte C).

Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der hier bei etwa 1 % liegt, sind die untere Grenze (Spalte Cmin) und obere Grenze (Spalte Cmax) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Im statistischen Mittel ist zu erwarten, daß der korrekte Konzentrationswert $\bar{c} = 500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ nur in einem von 20 Fällen zufällig außerhalb der angegebenen Vertrauensintervalle liegt. Hier liegt er in zwei Fällen außerhalb des Vertrauensintervalls.

21 Depositionstest: Deposition, keine Sedimentation

Die trockene Deposition wird durch die Depositionsgeschwindigkeit v_d parametrisiert. Diese ist kein unmittelbarer Parameter des Algorithmus, denn dort wird eine Depositionswahrscheinlichkeit p_d verwendet. Es ist daher nachzuweisen, daß bei Vorgabe von v_d und Berechnung von p_d tatsächlich eine Deposition der geforderten Größe auftritt.

Die durch Deposition hervorgerufene Verarmung der bodennahen Schichten erschwert die korrekte Bestimmung der Konzentration in Bodennähe und könnte damit das Ergebnis verfälschen. Es wird daher ein stationärer Prozeß betrachtet, bei dem eine hoch gelegene Quelle kontinuierlich emittiert, die Spurenstoffe durch ein Gebiet homogener Turbulenz zum Boden diffundieren und dann dort deponiert werden. Im Gleichgewicht wird genauso viel deponiert wie von der Quelle emittiert wird, und aus dem sich einstellenden Konzentrationsprofil kann dann auf die korrekte Behandlung der Deposition geschlossen werden.

Es wird nur vertikale Diffusion betrachtet. Die Konzentrationsverteilung $c(z)$ eines Stoffes mit einer Sedimentationsgeschwindigkeit v_s und einer Depositionsgeschwindigkeit v_d erfüllt bei Diffusion durch ein ruhendes Medium mit dem Diffusionskoeffizienten K die Differentialgleichung

$$-v_s \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial c}{\partial z} \right). \quad (33)$$

Die Lösung für konstantes K ist

$$c(z) = c_0 \exp\left(-z \frac{v_s}{K}\right) + \frac{F_c}{v_s} \left[1 - \exp\left(-z \frac{v_s}{K}\right) \right]. \quad (34)$$

Hierbei ist c_0 die Konzentration am Erdboden und F_c die von der Quelle erzwungene Massenstromdichte, die gleich der am Erdboden deponierten Massenstromdichte ist, $F_c = c_0 v_d$. Ohne Sedimentation erhält man

$$c(z) = F_c \left(\frac{1}{v_d} + \frac{z}{K} \right) \text{ für } v_s \rightarrow 0. \quad (35)$$

K	Cmin	C	Cmax	C0
1	14.3	15.3	16.3	15.0
2	24.4	26.1	27.8	25.0
3	34.0	36.2	38.4	35.0
4	43.9	46.5	49.1	45.0
5	53.6	56.5	59.4	55.0
6	63.1	66.3	69.5	65.0
7	74.3	77.7	81.1	75.0
8	84.4	88.3	92.2	85.0
9	93.8	97.7	101.6	95.0
10	103.3	107.4	111.5	105.0
11	113.6	117.6	121.6	115.0
12	124.8	128.9	133.0	125.0
13	134.6	138.8	143.0	135.0
14	143.3	147.7	152.1	145.0
15	152.5	157.2	161.9	155.0
16	158.6	163.2	167.8	165.0
17	167.3	172.1	176.9	175.0
18	177.1	182.6	188.1	185.0
19	186.8	192.6	198.4	195.0
20	196.9	203.8	210.7	205.0

Rechengebiet: $1000 \times 1000 \times 200 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $1 \times 1 \times 20$ Maschen (vertikal äquidistant) mit periodischen Randbedingungen.

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $ua=0.2$, $z0=0.08$ und „Blm=0.1; Sw=0.50; Tau=2; Vd=0.1; Us=0.2;“, Zeitreihe über 10 Tage.

Quelle: Flächenquelle in 200 m Höhe. Die Emission erfolgt kontinuierlich mit 1 g/s und Rate=0.01; es werden also 864 Partikel pro Tag freigesetzt.

Die nebenstehende Tabelle enthält für den 10-ten Tag das Vertikalprofil (Index K) der Konzentration (Spalte C). Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der hier zwischen 1 % und 3 % liegt, sind die untere Grenze (Spalte Cmin)

und obere Grenze (Spalte Cmax) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Die Spalte C0 enthält die theoretischen Werte entsprechend Gleichung (35) mit $F_c = 1 \mu\text{g m}^{-2}\text{s}^{-1}$, $v_d = 0.1 \text{ m s}^{-1}$, $K = 1 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Alle Werte liegen innerhalb des Vertrauensintervalls.

22a Depositionstest: Sedimentation ohne Deposition

Hat man sedimentierende Partikel, die nicht deponiert werden, dann stellt sich, ähnlich wie bei der barometrischen Höhenformel, eine exponentielle Dichteverteilung ein, die man aus Gleichung (34) durch die Spezialisierung auf $F_c = 0$ erhält.

K	Cmin	C	Cmax	Csoll
1	1052.7	1080.8	1108.9	1100.6
2	949.2	970.6	992.0	995.8
3	868.2	885.9	903.6	901.1
4	789.9	806.0	822.1	815.3
5	711.9	726.4	740.9	737.7
6	645.1	658.3	671.5	667.5
7	590.4	603.7	617.0	604.0
8	542.8	556.1	569.4	546.5
9	490.8	502.9	515.0	494.5
10	445.9	458.7	471.5	447.5
11	396.8	409.1	421.4	404.9
12	354.9	366.6	378.3	366.3
13	323.8	334.5	345.2	331.5
14	293.7	304.7	315.7	299.9
15	269.2	280.4	291.6	271.4
16	242.5	253.7	264.9	245.6
17	217.6	228.6	239.6	222.2
18	199.6	210.6	221.6	201.1
19	181.2	192.8	204.4	181.9
20	158.9	170.5	182.1	164.6

Rechengebiet: $1000 \times 1000 \times 200 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $1 \times 1 \times 20$ Maschen (vertikal äquidistant) mit periodischen Randbedingungen.

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $u_a=0.2$, $z_0=0.08$ und „Blm=0.1; Sw=0.50; Tau=2; Vs=0.01; Us=0.2;“, Zeitreihe über 10 Tage.

Quelle: Volumenquelle über das gesamte Rechengebiet. Die Emission erfolgt nur in der ersten Stunde des ersten Tages. Bei Groups=36; Rate=0.1; bedeutet dies, daß jede Gruppe 10 Partikel enthält.

Die nebenstehende Tabelle enthält für den 10-ten Tag das Vertikalprofil (Index K) der Konzentration (Spalte C). Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der hier zwischen 1 % und 3 % liegt, sind die untere Grenze (Spalte Cmin)

und obere Grenze (Spalte Cmax) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Die Spalte Csoll enthält die theoretischen Werte entsprechend Gleichung (34) mit $F_c = 0 \mu\text{g m}^{-2}\text{s}^{-1}$, $v_s = 0.01 \text{ m s}^{-1}$, $K = 1 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Hier liegt ein Wert außerhalb des Vertrauensintervalls.

22b Depositionstest: Deposition mit Sedimentation

Mit $v_d = v_s$ erhält man in Gleichung (34) eine konstante Konzentrationsverteilung. Bei einer Quellstärke von $1 \mu\text{g m}^{-2}\text{s}^{-1}$ und $v_d = 0.05 \text{ m s}^{-1}$ beträgt der Konzentrationswert $20 \mu\text{g/m}^3$.

K	Cmin	C	Cmax	Csoll
1	19.2	20.1	21.0	20.0
2	19.0	20.0	21.0	20.0
3	19.3	20.5	21.7	20.0
4	19.6	20.8	22.0	20.0
5	19.2	20.5	21.8	20.0
6	18.7	20.0	21.3	20.0
7	18.8	20.0	21.2	20.0
8	18.8	20.0	21.2	20.0
9	18.9	20.3	21.7	20.0
10	19.0	20.3	21.6	20.0
11	19.1	20.4	21.7	20.0
12	19.0	20.3	21.6	20.0
13	18.5	19.7	20.9	20.0
14	18.9	20.1	21.3	20.0
15	18.9	20.1	21.3	20.0
16	19.2	20.4	21.6	20.0
17	19.2	20.4	21.6	20.0
18	19.2	20.3	21.4	20.0
19	19.0	20.2	21.4	20.0
20	18.9	20.1	21.3	20.0

Rechengebiet: $1000 \times 1000 \times 200 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $1 \times 1 \times 20$ Maschen (vertikal äquidistant) mit periodischen Randbedingungen.

Meteorologie: Homogene Turbulenz

mit $u_a=0.2$, $z_0=0.08$ und

„Blm=0.1; Sw=0.50; Tau=2; Vd=0.05; Vs=0.05; Us=0.2;“, Zeitreihe über 10 Tage.

Quelle: Flächenquelle in 200 m Höhe. Die Emission erfolgt kontinuierlich mit 1 g/s und Rate=0.01; es werden also 864 Partikel pro Tag freigesetzt.

Die nebenstehende Tabelle enthält für den 10-ten Tag das Vertikalprofil (Index K) der Konzentration (Spalte C). Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der hier zwischen 2 % und 4 % liegt, sind die untere Grenze (Spalte Cmin) und

obere Grenze (Spalte Cmax) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Die Spalte Csoll enthält den theoretischen Wert $20 \mu\text{g/m}^3$. Hier liegen alle Werte innerhalb des Vertrauensintervalls.

31 Test des Taylor-Theorems

Für den Fall homogener Turbulenz mit den Geschwindigkeitsfluktuationen $\sigma_{u,v,w}$ und Lagrange-Korrelationszeiten $T_{u,v,w}$ für die drei Koordinatenrichtungen (x,y,z) ergibt sich aus dem Taylor-Theorem (siehe z.B. SEINFELD³⁰) als Aufweitung einer anfangs punktförmigen Teilchenwolke

$$\sigma_{x,y,z}^2(t) = 2T_{u,v,w}^2 \sigma_{u,v,w}^2 [t/T_{u,v,w} - 1 + \exp(-t/T_{u,v,w})] . \quad (36)$$

Um diese Beziehung zu prüfen, muß die Konzentrationsverteilung bei üblichen Werten von $\sigma_{u,v,w}$ und $T_{u,v,w}$ auf einer Zeitskala von Sekunden überprüft werden. Das ist mit AUSTAL2000 nicht möglich, da hier Konzentrationsverteilungen über mindestens einen Tag gemittelt werden. Die Turbulenz muß also so vorgegeben werden, daß sich die Aufweitung auf einer Zeitskala von Tagen abspielt.

Rechengebiet: $1220 \times 1220 \times 410 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $61 \times 61 \times 41$ Maschen (vertikal äquidistant).

³⁰J.H. SEINFELD, S.N. PANDIS: *Atmospheric Chemistry and Physics*. New York: John Wiley & Sons 1998, Seite 891.

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $ua=0$, $z0=2$ und „Blm=0.1;Us=0.0001; Su=0.8e-4;Sv=0.6e-4;Sw=0.4e-4;Tau=1800;“, Zeitreihe über 30 Tage.

Quelle: Punktquelle im Mittelpunkt des Rechengebietes. Nur in der ersten Stunde des ersten Tages werden 3600 Partikel freigesetzt (Rate=1;).

Die Aufweitung der Wolke wird über das zweite Moment der Konzentrationsverteilung $c(x, y, z)$ bestimmt, also beispielsweise

$$\sigma_x^2 = \frac{\int (x - \bar{x})^2 c(x, y, z) dx dy dz}{\int c(x, y, z) dx dy dz} . \quad (37)$$

N	Sx	sx	Sy	sy	Sz	sz
1	6.7	3.3	6.0	2.5	3.3	1.6
2	13.0	10.1	10.4	7.6	6.1	4.6
3	19.0	16.8	15.0	12.6	8.4	7.3
4	25.0	23.5	19.6	17.6	10.5	9.6
5	31.4	30.0	24.0	22.5	12.6	11.8
6	37.6	36.4	28.7	27.3	14.3	13.7
7	44.0	42.8	33.4	32.1	15.9	15.4
8	50.2	49.1	38.0	36.8	17.4	17.0
9	56.4	55.2	42.5	41.4	18.9	18.6
10	62.6	61.3	47.0	46.0	20.2	20.0
11	68.7	67.4	51.6	50.5	21.5	21.3
12	74.6	73.3	55.8	55.0	22.6	22.5
13	80.7	79.2	60.1	59.4	23.7	23.7
14	86.4	84.9	64.4	63.7	24.8	24.9
15	92.3	90.6	68.6	68.0	25.9	25.9
16	98.2	96.3	72.8	72.2	26.9	27.0
17	103.8	101.9	76.7	76.4	27.9	28.0
18	109.4	107.3	81.0	80.5	28.8	29.0
19	115.1	112.8	84.9	84.6	29.6	29.9
20	120.6	118.1	88.6	88.6	30.6	30.8
21	126.1	123.4	92.7	92.6	31.5	31.7
22	131.3	128.7	96.6	96.5	32.4	32.6
23	136.7	133.8	100.4	100.4	33.2	33.4
24	141.9	138.9	104.4	104.2	33.9	34.2
25	146.9	144.0	108.1	108.0	34.7	35.0
26	152.2	149.0	112.1	111.7	35.3	35.8
27	157.2	153.9	115.7	115.4	36.0	36.6
28	162.4	158.7	119.2	119.1	36.7	37.3
29	167.3	163.6	123.0	122.7	37.5	38.0
30	172.1	168.3	126.5	126.2	38.1	38.8

Die oben stehende Tabelle enthält für jeden Tag N die modellierten Werte Sx, Sy, Sz und die theoretischen Werte sx, sy, sz gemäß Gleichung (36). Die Abweichungen zu Anfang sind wohl im Wesentlichen auf die endliche Maschenweite (20 m horizontal, 10 m vertikal) zurückzuführen.

41 Test des Berljand-Profiles

Die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (38)$$

wird für folgenden Sonderfall betrachtet:

- Die Ausbreitung ist stationär.
- Der Wind weht nur in x -Richtung.
- Die Diffusionskoeffizienten sind nur eine Funktion von z .
- Diffusion in x -Richtung wird vernachlässigt.
- Die Gleichung wird über die y -Koordinate integriert.

Für $c_y = \int c \, dy$ erhält man dann die Gleichung

$$u \frac{\partial c_y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial c_y}{\partial z} \right). \quad (39)$$

Für den Fall einer punktförmigen Quelle (Quellstärke Q) bei $x = 0$, $z = H$, einem Potenzgesetz für das Windprofil,

$$u(z) = u_H (z/H)^n, \quad (40)$$

linear ansteigendem K_{zz} ,

$$K_{zz}(z) = K' z, \quad (41)$$

und ohne Deposition am Erdboden,

$$K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ bei } z = 0, \quad (42)$$

kann die Gleichung (39) exakt gelöst werden:³¹

$$\frac{Hu_H}{Q} c_y(x, z) = \frac{1+n}{\xi} \exp\left(-\frac{1+\xi^{1+n}}{\xi}\right) I_0\left(2\frac{\xi^{(1+n)/2}}{\xi}\right) \quad (43)$$

mit $\xi = x \frac{(1+n)^2 K'}{Hu_H}$
 $\zeta = z/H$

I_0 ist die modifizierte Bessel-Funktion.³² Mit den Parameterwerten

³¹M.E. Berljand. *Moderne Probleme der atmosphärischen Diffusion und der Verschmutzung der Atmosphäre*. Akademie-Verlag, Berlin, 1982.

³²W.H. PRESS, B.P. FLANNERY, S.A. TEUKOLSKY, W.T. VETTERLING: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press 1989.

n	0.3
H	100 m
u_H	6 m/s
K'	0.1 m/s

erhält man eine Fahne, die ihr bodennahes Konzentrationsmaximum in einer Quellentfernung $x = 2361$ m annimmt. Wählt man im Lagrange-Modell die Parameter σ_u , σ_v , σ_w und T_u , T_v , T_w so, daß die oben angegebenen Diffusionskoeffizienten reproduziert werden und die Flugzeit der Partikel groß ist gegenüber den Lagrange-Korrelationszeiten, dann sollte das Modell genau diese Fahne reproduzieren.

Rechengebiet: $5000 \times 150 \times 800$ m³, aufgeteilt in $100 \times 3 \times 80$ Maschen (vertikal äquidistant).

Meteorologie: Profil mit $ua=6$, $z0=2.5$, $ha=100$ und „Blm=0.5;Us=1.0;Su=1.e-6; Sv=1.e-6;Sw=2.0;Tau=2;“, Zeitreihe über einen Tag.

Quelle: Punktquelle bei (75, 75, 100). Nur in der ersten Stunde des ersten Tages werden 360 000 Partikel freigesetzt (Rate=100;) bei einer Quellstärke³³ von 24 g/s. Die mittlere Quellstärke über den ganzen Tag beträgt also 1 g/s.

Da die Ausbreitung quer zur Windrichtung unterbunden wird, hat nur die Schicht $50 \leq y \leq 100$ von Null verschiedene Konzentrationswerte. Die folgenden Tabellen zeigen die Vertikalprofile der Konzentration bis 400 m Höhe in den Quellentfernungen 500 m, 1000 m, 2000 m und 4000 m. Aus dem vom Programm ausgewiesenen Stichprobenfehler, der in der Höhe des Maximums zwischen 0.3 % und 0.6 % liegt, sind die untere Grenze (Spalte Cmin) und obere Grenze (Spalte Cmax) des 95-Prozent-Vertrauensintervalls gebildet. Die Spalte Csol1 enthält den theoretischen Wert gemäß Gleichung (43).

Signifikante Abweichungen gibt es nur in Bodennähe. Dies ist vermutlich auf die Art des Windprofils zurückzuführen, das in Bodennähe wegen seiner starken Krümmung nur schlecht linear interpoliert werden kann.

³³In der Ausbreitungsrechnung wird tatsächlich mit einer Quellstärke von 1 200 g/s gerechnet. Da dies um einen Faktor 50 zu hoch ist, bekommt man in der Auflistung der Konzentration für den Vertikalschnitt $y = 75$ schon gleich den Wert von c_y , der in diesem Fall aus c durch Multiplikation mit der Maschenweite von 50 m hervorgeht.

Z	----- X = 500 -----				----- X = 1000 -----			
	Cmin	C	Cmax	Csoll	Cmin	C	Cmax	Csoll
5	38.8	43.1	47.4	25.5	298.3	312.0	325.7	261.7
15	92.6	97.9	103.2	88.4	404.6	414.5	424.4	391.0
25	214.9	221.5	228.1	214.0	536.2	546.0	555.8	546.6
35	395.4	402.6	409.8	411.0	692.2	703.5	714.8	709.2
45	641.5	650.6	659.7	669.6	838.1	850.0	861.9	863.5
55	937.1	948.5	959.9	960.4	976.1	990.0	1003.9	997.0
65	1209.1	1221.3	1233.5	1241.7	1078.8	1087.5	1096.2	1100.3
75	1444.2	1455.8	1467.4	1470.8	1148.5	1162.4	1176.3	1167.6
85	1600.6	1613.5	1626.4	1615.1	1176.2	1188.1	1200.0	1196.9
95	1644.7	1658.0	1671.3	1659.1	1186.5	1196.1	1205.7	1189.9
105	1605.0	1617.9	1630.8	1605.4	1154.7	1166.4	1178.1	1150.4
115	1493.7	1505.7	1517.7	1471.7	1081.6	1092.5	1103.4	1084.3
125	1298.0	1308.5	1319.0	1284.2	1008.3	1018.5	1028.7	998.5
135	1081.8	1092.7	1103.6	1070.7	891.2	902.0	912.8	899.8
145	853.4	863.8	874.2	855.8	785.8	793.7	801.6	794.7
155	653.5	660.1	666.7	657.6	693.4	701.8	710.2	688.8
165	476.8	483.6	490.4	487.0	583.2	591.5	599.8	586.5
175	337.9	344.8	351.7	348.4	488.6	496.5	504.4	491.1
185	230.2	234.4	238.6	241.1	406.6	413.2	419.8	404.8
195	154.4	158.2	162.0	161.8	324.7	330.7	336.7	328.6
205	95.3	98.5	101.7	105.4	255.2	260.9	266.6	263.0
215	60.2	62.6	65.0	66.8	196.7	201.5	206.3	207.6
225	35.4	37.6	39.8	41.1	155.7	159.5	163.3	161.8
235	21.0	22.4	23.8	24.7	117.6	121.5	125.4	124.5
245	11.7	12.8	13.9	14.5	86.7	89.9	93.1	94.6
255	6.2	7.0	7.8	8.3	67.6	70.1	72.6	71.1
265	3.1	3.7	4.3	4.6	47.6	49.4	51.2	52.8
275	1.8	2.2	2.6	2.5	35.4	37.4	39.4	38.8
285	0.7	0.9	1.1	1.4	25.3	26.6	27.9	28.2
295	0.5	0.7	0.9	0.7	18.1	19.3	20.5	20.3
305	0.2	0.4	0.6	0.4	12.4	13.3	14.2	14.5
315	0.0	0.1	0.2	0.2	8.9	9.8	10.7	10.2
325	0.0	0.0	0.0	0.1	5.3	5.9	6.5	7.2
335	0.0	0.0	0.0	0.0	3.6	4.2	4.8	5.0
345	0.0	0.0	0.0	0.0	3.1	3.5	3.9	3.4
355	0.0	0.0	0.0	0.0	1.7	2.1	2.5	2.3
365	0.0	0.0	0.0	0.0	1.1	1.4	1.7	1.6
375	0.0	0.0	0.0	0.0	0.7	0.9	1.1	1.1
385	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4	0.6	0.8	0.7
395	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.3	0.4	0.5

Z	----- X = 2000 -----				----- X = 4000 -----			
	Cmin	C	Cmax	Csoll	Cmin	C	Cmax	Csoll
5	689.1	710.4	731.7	669.6	774.9	797.2	819.5	790.0
15	736.9	750.4	763.9	720.9	788.2	802.6	817.0	784.1
25	780.7	795.0	809.3	773.9	774.4	788.6	802.8	775.6
35	824.7	833.0	841.3	820.9	758.3	770.6	782.9	764.6
45	849.0	864.6	880.2	858.1	745.1	758.8	772.5	751.0
55	872.4	886.6	900.8	883.5	732.9	743.3	753.7	735.0
65	884.5	893.4	902.3	896.5	712.6	722.7	732.8	716.8
75	884.5	895.2	905.9	897.0	690.8	700.6	710.4	696.4
85	876.1	886.7	897.3	886.0	670.6	680.1	689.6	674.1
95	852.1	862.4	872.7	864.4	645.4	653.2	661.0	650.3
105	814.7	824.6	834.5	833.8	615.3	625.3	635.3	625.1
115	782.1	791.6	801.1	795.8	595.7	602.9	610.1	598.8
125	739.7	747.2	754.7	751.8	571.1	579.2	587.3	571.6
135	695.8	704.3	712.8	703.6	539.1	546.8	554.5	543.9
145	653.9	661.8	669.7	652.7	507.7	516.0	524.3	516.0
155	598.0	605.3	612.6	600.3	476.9	483.7	490.5	487.9
165	546.3	555.2	564.1	547.7	452.4	459.8	467.2	459.9
175	488.4	496.3	504.2	496.0	430.8	437.8	444.8	432.3
185	443.2	449.5	455.8	445.8	401.3	407.0	412.7	405.2
195	392.3	397.9	403.5	398.0	375.9	381.2	386.5	378.7
205	350.7	355.7	360.7	352.9	350.4	355.4	360.4	353.0
215	308.4	313.4	318.4	310.9	327.0	333.0	339.0	328.2
225	273.0	278.0	283.0	272.3	299.2	305.3	311.4	304.3
235	233.7	238.0	242.3	237.0	275.1	279.0	282.9	281.5
245	202.0	206.5	211.0	205.1	257.4	261.6	265.8	259.7
255	171.8	175.7	179.6	176.6	230.1	234.8	239.5	239.1
265	149.0	152.7	156.4	151.2	213.2	217.5	221.8	219.6
275	127.9	131.0	134.1	128.8	200.0	204.1	208.2	201.2
285	107.0	110.1	113.2	109.1	185.5	188.9	192.3	184.0
295	89.5	91.9	94.3	92.0	165.6	169.7	173.8	167.8
305	74.0	76.3	78.6	77.3	149.3	152.3	155.3	152.8
315	61.5	63.8	66.1	64.6	136.6	140.2	143.8	138.8
325	51.9	54.0	56.1	53.7	125.1	128.7	132.3	125.9
335	42.4	44.0	45.6	44.5	110.2	112.7	115.2	113.9
345	34.4	36.1	37.8	36.7	101.0	103.1	105.2	102.9
355	28.2	29.6	31.0	30.1	90.1	93.1	96.1	92.7
365	22.4	23.6	24.8	24.6	81.5	84.5	87.5	83.4
375	18.5	19.6	20.7	20.1	72.2	74.9	77.6	75.0
385	15.1	16.2	17.3	16.3	63.7	65.8	67.9	67.2
395	11.6	12.7	13.8	13.2	57.2	59.6	62.0	60.1

51a Test der Abgasfahnenüberhöhung (VDI 3782 Blatt 3)

Zur Modellierung einer Abgasfahnenüberhöhung erhält jedes Partikel zu Anfang eine vertikale Zusatzgeschwindigkeit U , die mit jedem Zeitschritt (Länge τ) um den Anteil τ/T_U reduziert wird. Dies bedeutet einen exponentiellen Abfall mit der Zeit auf einer Zeitkonstanten T_U . Die insgesamt dadurch bewirkte Versetzung Δh des Partikels ist:

$$\Delta h = UT_U \quad (44)$$

Die Richtlinie VDI 3782 Blatt 3 gibt an, daß der Fahnenanstieg proportional $x^{1/3}$ verlaufen soll, und gibt die Überhöhung und die Entfernung x_{\max} an, in der diese Überhöhung erreicht wird. Eine exakte Übereinstimmung des Verlaufs der Fahnenachse ist daher nicht zu erzielen. Die Parameter U und T_U werden aber so festgelegt, daß der Verlauf näherungsweise übereinstimmt.

X	Za	za	Sz	sz
40	68.2	69.8	5.5	3.0
80	80.1	78.5	7.0	5.5
120	90.3	85.8	8.7	7.5
160	99.1	92.4	10.2	9.3
200	106.7	98.4	11.7	10.9
240	113.2	104.0	13.0	12.3
280	118.9	109.3	14.2	13.6
320	123.8	114.3	15.4	14.7
360	128.0	119.2	16.4	15.8
400	131.7	123.8	17.4	16.8
440	134.9	128.4	18.3	17.8
480	137.6	132.7	19.2	18.7
520	140.0	137.0	20.0	19.6
560	142.0	141.2	20.8	20.4
600	143.8	145.2	21.6	21.2
640	145.4	149.2	22.3	22.0
680	146.7	153.1	23.1	22.7
720	147.8	155.0	23.8	23.5
760	148.8	155.0	24.4	24.2
800	149.7	155.0	25.2	24.8
840	150.4	155.0	25.8	25.5
880	151.1	155.0	26.4	26.1
920	151.6	155.0	27.1	26.8
960	152.1	155.0	27.7	27.4
1000	152.5	155.0	28.3	28.0
1040	152.9	155.0	28.8	28.6
1080	153.3	155.0	29.4	29.2
1120	153.6	155.0	29.9	29.7
1160	153.8	155.0	30.5	30.3
1200	154.1	155.0	31.1	30.8
1240	154.2	155.0	31.6	31.4
1280	154.7	155.0	32.2	31.9
1320	155.4	155.0	32.7	32.4
1360	155.4	155.0	33.2	32.9
1400	155.3	155.0	33.7	33.4

Rechengebiet: $2000 \times 60 \times 300 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $100 \times 3 \times 30$ Maschen (vertikal äquidistant).

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $ua=6$, $z0=1$, $lm=99999$ und „Blm=0.1;Us=1; Su=1.e-6;Sv=1.e-6;Sw=0.5;Tau=1;“, Zeitreihe über einen Tag.

Quelle: Punktquelle bei (30, 30, 55). Die Emission erfolgt nur in der ersten Stunde des Tages. Der Wärmestrom beträgt $qq=19.17$, so daß sich für neutrale Schichtung gemäß VDI 3782/3 eine Überhöhung von 100 m ergibt.

Die nebenstehende Tabelle enthält für verschiedene Quellentfernungen X die beobachtete Fahnenhöhe Za, berechnet aus dem Schwerpunkt der vertikalen Konzentrationsverteilung, und die geforderte Fahnenhöhe za nach VDI 3782 Blatt 3. Zusätzlich ist die beobachtete Fahnenaufweitung Sz und die theoretische Fahnenaufweitung sz gemäß Gleichung (36) angegeben.

51b Test der Abgasfahnenüberhöhung (Parameter sq)

Damit auch abweichend von VDI 3782 Blatt 3 eine Überhöhung explizit vorgegeben werden kann, ist der Eingabeparameter sq vorgesehen, der die charakteristische Zeit für die Überhöhung T_U angibt (siehe Verifikation 51a). Zusammen mit dem Parameter vq, der den Wert von U angibt, wird der Verlauf der Fahnenachse $h(z)$, wie bei der Verifikation 51a beschrieben, festgelegt:

$$h(z) = H_q + UT_U [1 - \exp(-t/T_U)] \quad (45)$$

X	Za	za	Sz	sz
40	70.4	70.4	5.9	3.0
80	83.7	83.3	7.0	5.5
120	94.8	94.3	8.7	7.5
160	104.2	103.7	10.2	9.3
200	112.2	111.5	11.7	10.9
240	118.9	118.2	13.0	12.3
280	124.5	123.9	14.2	13.6
320	129.3	128.6	15.4	14.7
360	133.3	132.7	16.4	15.8
400	136.7	136.1	17.4	16.8
440	139.6	139.0	18.3	17.8
480	142.0	141.5	19.2	18.7
520	144.1	143.5	20.0	19.6
560	145.8	145.3	20.8	20.4
600	147.2	146.8	21.6	21.2
640	148.5	148.1	22.3	22.0
680	149.6	149.1	23.1	22.7
720	150.3	150.0	23.8	23.5
760	151.1	150.8	24.5	24.2
800	151.7	151.4	25.1	24.8
840	152.2	152.0	25.8	25.5
880	152.7	152.4	26.4	26.1
920	153.1	152.8	27.1	26.8
960	153.4	153.2	27.7	27.4
1000	153.7	153.4	28.2	28.0
1040	153.9	153.7	28.8	28.6
1080	154.1	153.9	29.4	29.2
1120	155.2	154.1	29.9	29.7
1160	155.2	154.2	30.5	30.3
1200	155.3	154.3	31.1	30.8
1240	155.3	154.4	31.6	31.4
1280	155.3	154.5	32.2	31.9
1320	155.3	154.6	32.7	32.4
1360	155.3	154.7	33.2	32.9
1400	155.2	154.7	33.7	33.4

Rechengebiet: $2000 \times 60 \times 300 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $100 \times 3 \times 30$ Maschen (vertikal äquidistant).

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $ua=6$, $z0=1$, $lm=99999$ und „Blm=0.1;Us=1; Su=1.e-6; Sv=1.e-6; Sw=0.5; Tau=1;“, Zeitreihe über einen Tag.

Quelle: Punktquelle bei (30, 30, 55). Die Emission erfolgt nur in der ersten Stunde des Tages. Die Ausströmgeschwindigkeit vq beträgt 2.5 m/s, die Zeitskala sq 40 Sekunden, so daß sich eine Überhöhung von 100 m ergibt.

Die nebenstehende Tabelle enthält für verschiedene Quellentfernungen X die beobachtete Fahnenhöhe Za, berechnet aus dem Schwerpunkt der vertikalen Konzentrationsverteilung, und die geforderte Fahnenhöhe za gemäß Gleichung (45). Zusätzlich ist die beobachtete Fahnenaufweitung Sz und die theoretische Fahnenaufweitung sz gemäß Gleichung (36) angegeben.

51c Test der Abgasfahnenüberhöhung (VDI 3784 Blatt 2)

Bei Ableitung von Abgasen über Kühltürme ist die Berechnung der Abgasfahnenüberhöhung gemäß VDI 3784 Blatt 2 vorgeschrieben. Die Anwendung dieser Richtlinie erfolgt mit dem vom VDI zur Verfügung gestellten Programm *VDISP*. Als Ergebnis listet *VDISP* die Höhe der Fahnenachse als Funktion der Quellentfernung auf. *AUSTAL2000* übernimmt aus dieser Auflistung die Gesamtüberhöhung und die Entfernung, in der die Hälfte der Gesamtüberhöhung erreicht ist, und setzt intern entsprechend die Parameter v_q und s_q . In dieser Verifikation wird der modellierte Verlauf der Fahnenachse mit dem von *VDISP* berechneten verglichen.

X	Za	za
40	144.4	145.1
80	155.0	154.7
120	165.4	163.9
160	175.2	172.6
200	184.3	180.9
240	192.2	188.8
280	199.1	196.3
320	205.7	203.5
360	211.7	210.3
400	216.9	223.5
440	221.8	229.4
480	226.1	235.1
520	230.0	240.6
560	233.6	245.8
600	236.9	250.6
640	239.8	255.1
680	242.5	259.2
720	244.9	262.7
760	247.0	265.3
800	249.0	266.8
840	250.8	267.4
880	252.4	267.6
920	253.8	267.6
960	255.2	267.6
1000	256.4	267.6
1040	257.4	267.6
1080	258.4	267.6
1120	259.3	267.6
1160	260.1	267.6
1200	260.8	267.6
1240	261.5	267.6
1280	262.1	267.6
1320	262.6	267.6
1360	263.1	267.6
1400	263.6	267.6

Es werden die gleichen Daten verwendet wie im Beispiel VDI 3784 Blatt 2 Anhang B2.

Rechengebiet: $2000 \times 60 \times 400 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $100 \times 3 \times 40$ Maschen (vertikal äquidistant).

Meteorologie: Homogene Turbulenz mit $u_a=15.82$ bei $h_a=130$, $z_0=1$, $l_m=-200$ (Stabilitätsklasse III/2) und „ $B_l m=0.1$; $U_s=1$; $S_u=1 \cdot e^{-6}$; $S_v=1 \cdot e^{-6}$; $S_w=0.5$; $\tau=1$;“, Zeitreihe über einen Tag.

Quelle: Quelle bei (30, 30, 130) mit einem Durchmesser d_q von 65 m. Die Emission erfolgt nur in der ersten Stunde des Tages. Die Ausströmgeschwindigkeit v_q beträgt 4.1 m/s, die Austrittstemperatur t_q 36 Grad Celsius, die relative Feuchte r_q 100 %, der Flüssigwassergehalt l_q 0.003 kg/kg.

Die nebenstehende Tabelle enthält für verschiedene Quellentfernungen X die beobachtete Fahnenhöhe Za, berechnet aus dem Schwerpunkt der vertikalen Konzentrationsverteilung, und die von *VDISP* geforderte Fahnenhöhe za. Die von *VDISP* vorgegebene effektive Quellhöhe wird nur asymptotisch erreicht, so daß in größerer Quellentfernung die Fahnenachse bei *AUSTAL2000* niedriger verläuft als bei *VDISP*.

61 Test der Bahn im 3-dimensionalen Windfeld

Es wird die Bahn von Partikeln in einem Windfeld getestet, das einer starren Rotation um die z -Achse des Koordinatensystems entspricht,

$$V_x = -\omega y \quad (46)$$

$$V_y = \omega x \quad (47)$$

$$V_z = 0 \quad (48)$$

Das Windfeld wird auf einem Netz vom Typ Arakawa-C dargestellt, d.h. V_x ist auf denjenigen Flächen einer Gitterzelle definiert, deren Normalenrichtung parallel zur x -Achse verlaufen, und entsprechend V_y auf den Flächen senkrecht zur y -Achse. Innerhalb einer Zelle wird V_x linear in x -Richtung und V_y linear in y -Richtung interpoliert.

Das Gelände ist eben, Turbulenz wird nicht berücksichtigt. Mit $\omega = \pi/60 \text{ s}^{-1}$ erhält man eine gegen den Uhrzeigersinn rotierende Strömung, die 120 s für einen Umlauf benötigt.

Diese Verifikationsrechnung erfordert, daß im Eingabeparameter `os` das Schlüsselwort `TRACE` angegeben ist. Dies bewirkt, daß die Koordinaten der Partikel bei jedem Zeitschritt in die Protokolldatei geschrieben werden. Außerdem wird die Turbulenz ignoriert und keine Modifizierung am Zeitschritt vorgenommen.

Um das zuvor beschriebene Windfeld verwenden zu können, wird es in der Bibliothek `verif/61/lib` als Datei `w3001a00.dma` gespeichert. Da das Programm mindestens 2 Windfelder in der Bibliothek erwartet, ist es noch einmal unter dem Namen `w3002a00.dma` hineinkopiert. Jetzt gibt es zwar eine Warnung, daß die Windfelder linear abhängig sind, da sie aber gar nicht umskaliert zu werden brauchen, hat dies keine negativen Auswirkungen.

Rechengebiet: $310 \times 310 \times 10 \text{ m}^3$, aufgeteilt in $31 \times 31 \times 1$ Maschen. Es ist komplexes Gelände angegeben mit der Geländehöhe $z_g = 0 \text{ m}$.

Meteorologie: Turbulenz wird ignoriert, „`B1m=0.1;Tau=1;`“. Das Windfeld wird aus der Bibliothek eingelesen und entsprechend `ua=7.328 m/s` und `ra=90 Grad` skaliert (tatsächlich besitzt das Windfeld bereits diesen Windvektor am angegebenen Anemometerort). Es wird eine Zeitreihe über einen Tag gerechnet.

Quelle: Punktquelle bei $(0, 70, 5)$. Die Emission erfolgt nur in der letzten Stunde des Tages. Mit `Groups=1;Rate=0.0001;` wird genau ein Partikel erzeugt.

T	X	x	Y	y
0	0.00	0.00	70.00	70.00
5	-18.32	-18.11	67.91	67.62
10	-35.34	-34.99	60.58	60.63
15	-49.73	-49.49	49.32	49.50
20	-60.73	-60.61	34.93	35.01
25	-67.79	-67.61	17.91	18.13
30	-69.89	-70.00	-0.41	0.02
35	-67.27	-67.62	-18.73	-18.09
40	-59.94	-60.64	-35.49	-34.98
45	-48.69	-49.52	-49.88	-49.48
50	-34.03	-35.03	-60.88	-60.60
55	-17.01	-18.15	-67.42	-67.60
60	1.31	-0.04	-69.51	-70.00
65	19.63	18.07	-66.90	-67.63
70	36.12	34.96	-59.57	-60.65
75	50.52	49.46	-47.79	-49.53
80	61.51	60.59	-32.87	-35.05
85	68.06	67.60	-15.85	-18.17
90	69.63	70.00	2.47	-0.06
95	66.48	67.63	20.79	18.05
100	59.16	60.66	37.28	34.94
105	47.38	49.55	51.15	49.45
110	32.46	35.07	61.62	60.58
115	15.44	18.19	68.17	67.59
120	-2.88	0.08	69.74	70.00

Die nebenstehende Tabelle enthält für verschiedene Zeiten T die in der Protokolldatei ausgegebenen Koordinaten X und Y des Partikels und die für eine ideale Kreisbewegung berechneten Koordinaten x und y. Das Partikel ist der idealen Bewegung etwas voraus und ist nach 120 Sekunden knapp einen Zeitschritt zu weit gekommen (etwa 2.4 Grad, also 0.7%). Der Bahnradius wird noch besser eingehalten (Abweichung 0.4%).