

ANLAGE 06

EXPERTISE ZU AUSTAL 2000

Auftraggeber:

Auftragnehmer:

Ingenieurbüro für Umweltschutz und Strömungstechnik
Prof. Dr.-Ing. habil. R. Schenk
Rosenberg 17

06193 WETTIN-LÖBEJÜN
OT Wettin

Wettin, den 25. 08. 2014

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'R. Schenk', written in a cursive style.

Prof. Dr.-Ing. habil. Rainer Schenk

GLIEDERUNG	Seite
I. VORBEMERKUNGEN UND GRUNDLAGEN	04
II. VALIDIERUNG	14
II.1 Validierung mittels analytischen Lösungen	17
II.1.1 Untersuchung von Fallbeispielen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL	17
Fall 21: Deposition, keine Sedimentation	17
<i>Eingabeparameter</i>	
<i>Massenbilanz</i>	
<i>Ergebnisvergleich</i>	<i>Deposition, keine Sedimentation</i>
<i>Konduktive Massenströme</i>	
<i>Bewertung</i>	
Fall 22a: Sedimentation ohne Deposition	19
<i>Eingabeparameter</i>	
<i>Massenbilanz</i>	
<i>Ergebnisvergleich</i>	<i>Sedimentation ohne Deposition</i>
<i>Konduktive Massenströme</i>	
<i>Bewertung</i>	
Fall 22b: Deposition mit Sedimentation	22
<i>Eingabeparameter</i>	
<i>Ergebnisvergleich</i>	<i>Deposition mit Sedimentation</i>
<i>Bewertung</i>	
II.1.2 Test des BERLJAND Profiles	25
II.1.3 Richtigstellung der Fallbeispiele Sedimentation und Deposition 21, 22a und 22b	29
II.2 Verifikationstests	30
II.2.1 Homogenitätstest	30
II.2.2 Sedimentation und Deposition	34
<i>Deposition ohne Sedimentation</i>	
<i>Sedimentation ohne Deposition</i>	
<i>Sedimentation mit Deposition</i>	

II.2.3	BERLJAND Lösung	38
II.3	Validierung mittels Windkanalversuchen und Naturexperimenten	44
II.3.1	Windkanalversuche	44
II.3.2	Naturexperimente	46
II.3.3	Windfeld	47
III.	EXTERNE BEITRÄGE ZUR ENTWICKLUNG VON AUSTAL/PARTIKELMODELL	48
IV.	ZUSAMMENFASSUNG	50
V.	LITERATUR	
	Steht als Anlage zur Verfügung	

I. VORBEMERKUNGEN UND GRUNDLAGEN

Die Validierung von numerischen Verfahren mittels analytischer Vergleichsrechnungen ist unverzichtbar. Mit den Ergebnissen dieser numerischen Experimente kann nachgewiesen werden, dass die ermittelte Näherungslösung die zutreffende Bilanzgleichung genügend genau erfüllt. Damit hat man eine weitestgehende Sicherheit erlangt, den entwickelten Lösungsalgorithmus auch auf andere Aufgabenstellungen anwenden zu können, für welche keine analytischen Lösungen zur Verfügung stehen. Unter einer analytischen Lösung versteht man einen zeitlich und räumlich kontinuierlich aufgelösten Funktionsverlauf, welcher die vorgegebene Differentialgleichung einschließlich aller Randbedingungen widerspruchsfrei erfüllt. Numerische Lösungsverfahren können dagegen nur an diskret ausgewählten Gitterpunkten das Lösungsverhalten beschreiben. Die Gewährleistung integraler Stoffbilanzen im Falle von Schadstoffausbreitungsvorgängen ist dabei als ein notwendiges Gütemaß anzusehen. Eine Vergleichsrechnung kann nur durchgeführt werden, wenn eine analytische Lösung zur Verfügung steht und die Existenz einer Lösung bereits nachgewiesen ist. Analytische Lösung und numerischer Algorithmus sind dabei zwei von einander unabhängige Verfahren. Eine fehlerhafte analytische Lösung kann dabei durch die numerische Lösung und umgekehrt ein fehlerhafter numerischer Algorithmus durch eine analytische Lösung erkannt werden. Wird festgestellt, dass die numerischen und analytischen Verfahren das Lösungsverhalten gleichermaßen widersprüchlich beschreiben, so sind beide Algorithmen zu verwerfen.

Bereits aus diesen Darlegungen geht hervor, dass den beschriebenen Vergleichsrechnungen eine große Bedeutung beizumessen ist. Beispielhaft hat auch BERLJAND (1) auf dieses Erfordernis schon frühzeitig hingewiesen und diese Selbstverständlichkeit nachdrücklich unterstrichen.

Die Notwendigkeit, Vergleichsrechnungen durchführen zu müssen wurde auch von den Autoren*) von AUSTAL/PARTIKELMODELL erkannt. Aus diesem Grunde wurde nach (66) für einen relativ einfachen eindimensionalen Schadstoffausbreitungsvorgang eine analytische Lösung eigenständig hergeleitet sowie ein stark vereinfachtes BERLJAND Profil nach (74) nachgerechnet. Während nach (1) durch BERLJAND eine dreidimensionale Aufgabenstellung beschrieben wird, verwenden die Autoren*) nach (74) lediglich eine zweidimensionale Lösung zur Validierung.

Im ersten Fall werden Sedimentations- und Depositionsvorgänge berücksichtigt. Es werden ausschließlich stationäre Problemstellungen behandelt. Rückschlüsse auf ein instationäres Verhalten, wie es versucht wird, sind fehlerhaft. Im Falle einer oberflächlichen Beurteilung wird auf diese Weise der Eindruck hinterlassen, man hätte AUSTAL/PARTIKELMODELL für instationäre Ausbreitungsvorgänge validiert, was nicht zutreffend ist. Zudem sind die

analytischen Lösungen hierzu sämtlich fehlerhaft und lassen eine Validierung nicht zu.

Im zweiten Fall hat man lediglich die bereits schon benannte vereinfachte zweidimensionale BERLJAND Lösung verwendet, obwohl AUSTAL/PARTIKELMODELL den Anspruch erhebt, dreidimensionale Ausbreitungsvorgänge beschreiben zu können. Die von BERLJAND für dreidimensionale Problemstellungen

AUSTAL2000, Programmbeschreibung

----- X = 500 -----				
Z	Cmin	C	Cmax	Csoll
5	38.2	<u>43.4</u>	48.6	<u>25.5</u>
15	94.1	99.1	104.1	88.4

angegebene Originallösung nach, (1), S. 39, sowie die ebenfalls hierfür geeigneten Windkanalversuche werden ignoriert. Im Nahbereich unter 500m ist AUSTAL/PARTIKELMODELL mit einem Fehler größer ca. 65% behaftet.

Es ist weiterhin anzumerken, dass allein nur eine weitestgehende Approximation der Differentialgleichung geeignet ist, Zuverlässigkeit und Güte von numerischen Verfahren sicher beurteilen zu können. Numerische Zeitschritte werden beispielsweise aus Stabilitätsbetrachtungen heraus von gültigen Algorithmen selbstständig ermittelt. Überschreitet man die auf diese Weise die ermittelte Zeitschrittweite, so ist das Lösungsverhalten instabil, und der Lösungsalgorithmus ist nicht verwendungsfähig. In (66), s. 26, wird z.B. festgestellt, dass es möglich ist, dass die Iterationen nicht konvergieren, was auf ein instabiles Lösungsverhalten schließen lässt. Die Wahl der Zeitschrittweite bleibt allein dem Anwender unter Berücksichtigung spekulativer Empfehlungen überlassen. Betrachtungen zur Stabilität, Konvergenz und Konsistenz können nicht nachgelesen werden, obwohl nach (70) diese Eigenschaften numerische Verfahren zwingend zu erfüllen haben. Nur wenn diese Nachweise geführt sind, ist eine gültige Fehlerabschätzung möglich (71). Fehlen diese Nachweise, so sind anderweitige theoretische Fehlerbetrachtungen kaum von Bedeutung und wertlos.

Die benannten Vergleichsrechnungen sind in AUSTAL/PARTIKELMODELL, (66), beschrieben und hier in den nachfolgenden Bildern A01.01 bis A01.04 übernommen worden. Es handelt sich um die Testfälle 21, Deposition ohne Sedimentation, 22a, Sedimentation ohne Deposition sowie 22b, Deposition mit Sedimentation. Beschrieben wird dort ein stationärer eindimensionaler Ausbreitungsvorgang, bei dem wahlweise die Sedimentations- und Depositionsgeschwindigkeit sowie die Quellstärke variiert werden. Nachfolgend wird mit dem Fall 41 nach Bild A01.04 ein sog. BERLJAND Profil lediglich zweidimensional nachgerechnet.

Im Falle der Behandlung des eindimensionalen stationären Ausbreitungsvorganges sind bereits aus den ermittelten Konzentrationsverläufen verschiedene Unstimmigkeiten zu erkennen. So ist z.B.

für den Fall 22a nicht zu verstehen, weshalb überhaupt Konzentrationen in einer erheblichen Größenordnung auftreten können, wenn die Emission ausdrücklich gleich Null gesetzt wurde. Betrachtet man weiterhin den Gradientenverlauf, so ist abgesehen davon, dass überhaupt keine Konzentrationen auftreten können, auch nicht einzusehen, wie bei dem zu erkennenden konduktiven Stoffstrom auf eine Deposition geschlossen werden kann. Auch im Fall 22b ist das Auftreten einer Deposition nicht zu erklären. Außerdem ist in allen drei Fällen der Massenerhaltungssatz verletzt. Diese physikalisch bedingten Unstimmigkeiten sind augenfällig relativ leicht zu erkennen.

Die in den Fallbeschreibungen gewählte Darstellung ist als eine Aufforderung an den Lesenden aufzufassen, die Darlegungen der dortigen Autoren*) zu verstehen, um ihre Fachkunde bestätigen zu können. Der Außenstehende hat daher nicht nur das Recht, sich mit diesen Ausführungen ernsthaft zu beschäftigen sondern folgt auch den Erwartungen der Autoren*).

Die Bilder A01.01 bis A01.04 beschreiben für die u.a. hier zu untersuchenden drei Fälle die Ergebnisse der Autoren*) von AUSTAL/PARTIKELMODELL.

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

$$-v_s \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (25)$$

Die Lösung für konstantes K ist

$$c(z) = c_0 \exp\left(-z \frac{v_s}{K}\right) + \frac{F_c}{v_s} \left[1 - \exp\left(-z \frac{v_s}{K}\right)\right] \quad (26)$$

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

$$c(z) = F_c \left(\frac{1}{v_d} + \frac{z}{K} \right) \text{ für } v_s \rightarrow 0 \quad (27)$$

K	Cmin	C	Cmax	C0	Rechengebiet: 1000 × 1000 × 200 m ³ , aufgeteilt in 1 × 1 × 20 Maschen (vertikal äquidistant) mit periodischen Randbedingungen.
1	14.9	15.8	16.7	15.0	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.
2	24.4	26.1	27.8	25.0	
3	34.2	36.5	38.8	35.0	
4	43.7	46.4	49.1	45.0	
5	53.8	56.9	60.0	55.0	
6	62.0	65.3	68.6	65.0	
7	71.3	74.7	78.1	75.0	
8	81.0	84.7	88.4	85.0	
9	91.1	94.9	98.7	95.0	
10	101.7	105.7	109.7	105.0	
11	113.4	117.6	121.8	115.0	
12	124.4	129.0	133.6	125.0	
13	133.6	138.0	142.4	135.0	
14	141.3	145.7	150.1	145.0	
15	149.4	153.7	158.0	155.0	
16	158.9	163.5	168.1	165.0	
17	167.3	172.1	176.9	175.0	
18	176.4	181.9	187.4	185.0	
19	187.5	193.7	199.9	195.0	
20	199.4	206.4	213.4	205.0	

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 Cso11 enthält die theoretischen Werte entsprechend Gleichung (27) 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.

Bild A01.01 Gl. 26 erfüllt nicht die vorgegebenen Randbedingungen und führt zu fehlerhaften Lösungen, die Bodenkonzentration von $15 \mu\text{g/m}^3$ ist fehlerhaft berechnet. Mit diesem Ergebnis wird AUSTAL/PARTIKELMODELL falsch validiert.

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 (26) durch die Spezialisierung auf $F_c = 0$ erhält.

K	Cmin	C	Cmax	Csoll
1	1082.3	1111.2	1140.1	1100.6
2	978.2	1000.2	1022.2	995.8
3	889.4	907.5	925.6	901.1
4	801.8	816.5	831.2	815.3
5	723.2	738.0	752.8	737.7
6	656.2	669.6	683.0	667.5
7	582.4	594.3	606.2	604.0
8	523.7	535.5	547.3	546.5
9	475.7	487.4	499.1	494.5
10	432.1	443.6	455.1	447.5
11	392.5	404.6	416.7	404.9
12	353.8	365.5	377.2	366.3
13	315.3	327.1	338.9	331.5
14	282.9	294.1	305.3	299.9
15	259.4	270.2	281.0	271.4
16	236.1	247.0	257.9	245.6
17	217.5	228.5	239.5	222.2
18	199.6	210.5	221.4	201.1
19	173.7	184.4	195.1	181.9
20	154.5	165.4	176.3	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 (26) mit $F_c = 0 \mu\text{g m}^{-2}\text{s}^{-1}$, $v_s = 0.01 \text{ m s}^{-1}$, $K = 1 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Alle Werte liegen innerhalb des Vertrauensintervalls.

Bild A01.02 Die Ergebnisse verweisen auf einen konduktiven Stoffstrom vom Boden aus in die freie Atmosphäre, was mit einer negativen Deposition gleichzusetzen wäre. Der Depositionsstrom, welcher eigentlich überhaupt nicht auftreten sollte, ist nicht nur nicht Null sondern verläuft auch noch in umgekehrter Richtung. Mit diesem Ergebnis wird AUSTAL/PARTIKELMODELL falsch validiert.

22b Depositionstest: Deposition mit Sedimentation

Mit $v_d = v_s$ erhält man in Gleichung (26) 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 $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

K	Cmin	C	Cmax	Cso11
1	19.4	20.3	21.2	20.0
2	19.6	20.6	21.6	20.0
3	19.6	20.8	22.0	20.0
4	19.8	21.1	22.4	20.0
5	20.8	22.2	23.6	20.0
6	19.9	21.2	22.5	20.0
7	19.5	20.8	22.1	20.0
8	19.5	20.9	22.3	20.0
9	19.2	20.6	22.0	20.0
10	19.2	20.6	22.0	20.0
11	18.8	20.1	21.4	20.0
12	18.5	19.7	20.9	20.0
13	18.9	20.2	21.5	20.0
14	18.5	19.7	20.9	20.0
15	19.4	20.6	21.8	20.0
16	19.3	20.5	21.7	20.0
17	19.1	20.2	21.3	20.0
18	19.4	20.5	21.6	20.0
19	19.3	20.5	21.7	20.0
20	19.3	20.5	21.7	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 Cso11 enthält den theoretischen Wert $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$. In einem Fall liegt der Wert außerhalb des Vertrauensintervalls.

Bild A01.03 Eine Deposition verlangt einen nicht verschwindenden Konzentrationsgradienten am Boden, was hier nicht der Fall ist. Die Bodenkonzentration mit $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ist falsch berechnet. Mit diesem Ergebnis wird AUSTAL/PARTIKELMODELL falsch validiert.

Im Folgenden werden die in AUSTAL/PARTIKELMODELL durchgeführten Vergleichsrechnungen nachgerechnet und die Konzentrationsverläufe im Abschnitt II.1.3 korrigiert. In diesem Zusammenhang wird sich zeigen, dass die Ergebnisse sämtlich falsch und widersprüchlich sind. Eine Validierung ist damit nicht möglich. Um diesen Umstand erkennen zu können, sind die dazu erforderlichen mathematischen und physikalischen Grundlagen für den Lesenden nachvollziehbar darzustellen.

Der beschriebene Ausbreitungsvorgang kann durch folgende Differentialgleichung

$$-v_s \cdot \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad -v_s \cdot \frac{dc}{dz} = K \cdot \frac{d^2c}{dz^2} \quad \text{GI (A01.01)}$$

beschrieben werden.

In dieser Gleichung bedeuten:

$K [m^2 / s]$	den vertikalen konstanten Diffusionskoeffizient
$z [m]$	die Höhenkoordinate
$v_s [m / s]$	die Sedimentationsgeschwindigkeit und
$c [\mu g / m^3]$	die Konzentration

Außerdem werden noch die Quellstärke und die Depositionsgeschwindigkeit benötigt:

$Q [\mu g / (m^2 \cdot s)]$	Quellstärke
$v_d [m / s]$	Depositionsgeschwindigkeit

Bei der Differentialgleichung GI (A01.01) handelt es sich um eine homogene lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung. Es ist bekannt, dass die Lösung von Differentialgleichungen zweiter Ordnung auf zwei Integrationskonstanten führt, zu deren Bestimmung Randbedingungen benötigt werden. Da es sich um eine Differentialgleichung mit konstantem Koeffizienten handelt, kann man sofort eine Integration über die z-Koordinate ausführen. Somit erhält man

$$c \cdot + \frac{K}{v_s} \frac{dc}{dz} = A \cdot \quad \text{GI (A01.02)}$$

wobei A als die erste Integrationskonstante anzusehen ist. Nachfolgend wird man erkennen, dass A in Beziehung zur Gesamtemission Q zu setzen ist und für Nachweise zur Massenkonstanz herangezogen werden kann.

Die Beziehung GI (A01.02) beschreibt eine inhomogene Differentialgleichung erster Ordnung, ebenfalls wieder mit konstantem Koeffizienten. Diese Gleichung wird dadurch gelöst, dass man zunächst eine Lösung der homogenen Gleichung aufsucht und mittels des in der Literatur nach (73) beschriebenen üblichen und bekannten LAGRANGE'schen Verfahren die Lösung der inhomogenen Gleichung findet. Für die homogene Gleichung erhält man

$$c_h \cdot + \frac{K}{v_s} \frac{dc_h}{dz} = 0 \cdot \quad \text{homogene Differentialgleichung} \quad \text{GI (A01.03)}$$

Mit $a = v_s / K$ ergibt sich die homogene Lösung zu

$$c_h = c_0 \cdot e^{-a \cdot z} \quad \text{GI (A01.04)}$$

wobei unter c_0 die Bodenkonzentration zu verstehen ist. Zur Lösung der inhomogenen Differentialgleichung GI (A01.02) wählt man nun folgenden Ansatz

$$c = B(z) \cdot c_0 \cdot e^{-az} \quad \text{GI (A01.05)}$$

wobei $B(z)$ eine Funktion ist, welche man durch Einsetzen in die Gleichung GI (A01.02) bestimmen kann. Nach dieser Überlegung erhält man die Beziehung

$$c_0 \cdot e^{-az} + \frac{1}{a} \cdot \left(\frac{dB(z)}{dz} \cdot c_0 \cdot e^{-az} - a \cdot e^{-az} \cdot B(z) \cdot c_0 \right) = A$$

Daraus ergibt sich eine Gleichung zur Bestimmung von $B(z)$

$$\frac{dB(z)}{dz} = \frac{A \cdot a}{c_0} \cdot e^{az} ,$$

welche die Lösung

$$B(z) = \frac{A \cdot a}{c_0} \cdot \int e^{az} dz = \frac{A}{c_0} \cdot (e^{az} + D) \quad \text{GI (A01.06)}$$

besitzt. Unter D ist die zweite Integrationskonstanten zu Gleichung GI (A01.01) zu verstehen. Setzt man Gleichung GI (A01.05) in GI (A01.06) ein, so erhält man letztlich die Lösung der ursprünglichen Differentialgleichung GI (A01.01)

$$c = A \cdot (1 + D \cdot e^{-az}) \quad \text{GI (A01.07)}$$

Benötigt wird noch die Ableitung von c in der Form

$$\frac{dc}{dz} = -a \cdot A \cdot D \cdot a^{-az}$$

Zur Bestimmung der Integrationskonstanten A und D sind zwei Randbedingungen zu erfüllen. Damit erhält man zwei Gleichungen für A und D .

1. $c(z=0) = c_0 = A \cdot (1 + D)$ GI (A01.08)
2. $K \cdot a \cdot A \cdot D + v_d \cdot A \cdot (1 + D) = 0 \quad (z=0)$

Das vorstehende Gleichungssystem besitzt die Lösung

$$A = c_0 \cdot \frac{v_s + v_d}{v_s} \quad D = -\frac{v_d}{v_s + v_d} \quad \text{GI (A01.09)}$$

Mit diesen Konstanten erhält man schließlich die endgültige Lösung der ursprünglichen Differentialgleichung GI (A01.01)

$$c(z) = c_0 \frac{v_s + v_d}{v_s} \cdot \left(1 - \frac{v_d}{v_s + v_d} \cdot e^{-\frac{v_s}{K} z} \right) \quad \text{GI (A01.10)}$$

Somit erkennt man auch, dass die Gesamtemission nach der Beziehung

$$Q = A \cdot v_s = c_0 \cdot (v_s + v_d) \quad \text{GI (A01.11)}$$

berechnet werden kann. **Auch erkennt man, dass die in (66), GI 26, nach Bild 01.01 angegebene Lösung fehlerhaft ist.** Bemerkenswert ist bei diesem Ergebnis, dass die Gesamtemission von der Höhe unabhängig ist. Dieser Umstand ist damit zu begründen, dass der Schadstoff sich lediglich entlang einer einzigen Koordinate ausbreiten kann. Im stationären Fall muss demnach durch jeden beliebigen Querschnitt parallel zur unteren Begrenzung die gleiche Schadstoffemission bewegt werden, womit die Gültigkeit von GI (A01.11) belegt werden kann. Dieser Umstand wird auch durch die Gleichung GI (A01.02) beschrieben. Im Falle von numerischen Kontrollrechnungen ist nachzuweisen, dass A in jedem zu z gehörenden Querschnitt konstant ist.

Auch können die konduktiven Stoffströme ermittelt werden. Man erhält für die Sedimentation und Deposition die Beziehungen:

$$Q_s = c_0 \cdot v_s \quad \text{Sedimentation} \quad \text{GI (A01.12)}$$

$$Q_d = c_0 \cdot v_d \quad \text{Deposition} \quad \text{GI (A01.13)}$$

Gibt man sich die Gesamtemission Q, die Sedimentationsgeschwindigkeit v_s und die Depositionsgeschwindigkeit v_d vor, so ist die Bodenkonzentration nach GI (A01.11) festgelegt und kann wie nachfolgend mit

$$c_0 = \frac{Q}{(v_s + v_d)} \quad \text{GI (A01.14)}$$

berechnet werden.

Mit den Gleichungen GI (A01.10), GI (A01.11), GI (A01.12), GI (A01.13) und GI (A01.14) ist die Aufgabe vollständig und widerspruchsfrei gelöst.

Allerdings ist zu erkennen, dass die Lösungsfunktion GI (A01.10) für $v_s = 0$ eine Singularität besitzt und dadurch nicht verwendungsfähig ist. Aus diesem Grunde ist die Ausgangsgleichung GI (A01.01) für diesen Sonderfall erneut zu integrieren. Damit erhält man die Beziehung

$$\frac{d^2 c}{dz^2} = 0 \quad \text{GI (A01.15)}$$

Mittels einer zweifachen Integration und Beachtung der Randbedingungen nach Gl (A01.08) erhält man hierfür die Lösung

$$c(z) = c_0 \cdot \left(1 + \frac{v_d}{K} \cdot z \right) \quad \text{Gl (A01.16)}$$

Auch kann die Bodenkonzentration nach der Beziehung Gl (A01.14) für $v_s = 0$ ermittelt werden.

Nachfolgend werden die Testfälle 21, 22,a und 22b mit den vorstehend ermittelten Lösungsfunktionen Gl (A01.16) und Gl (A01.10) nachgerechnet und mit den Ergebnissen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL, Bild A01.01, Bild A01.02 und Bild A01.03 verglichen.

II. VALIDIERUNG

Untersuchungen zur Validierung von AUSTAL/PARTIKELMODELL werden in den folgenden Arbeiten beschrieben:

- (83) JANICKE L.; KLUG W.; RAFAILIDES S.; SCHATZMANN M.; STRIMADIS D.; YAMARTINO R.: Validierung des „Kinematic Simulation Particle Model (KSP-Modell“ für Anwendungen im Vollzug des BImSchG, Bericht 98-295 433 54 des Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Hamburg 2000
- (66) JANICKE: AUSTAL 2000, Programmbeschreibung, Dunum, 2002
- (77) JANICKE, L.: IBJparticle, Eine Implementierung des Ausbreitungsmodells, Bericht IBB Janicke
- (78) JANICKE U., JANICKE L.: Entwicklung eines modellgestützten Beurteilungssystems für den anlagenbezogenen Immissionsschutz, IB Janike, 2002

Im Zusammenhang mit Modellvalidierungsarbeiten werden in (83) u.a. Vergleiche mit analytischen Lösungen, mit Windkanaldaten und mit Naturdaten beschrieben. Diese betreffen auch Vergleiche mit der BERLJAND Lösung, Vergleiche mit integralen Mittelwerten, welche quer zur Windrichtung aus Windkanalmessungen ermittelt worden sind, und verschiedene Vergleiche mit Naturdaten. Homogenitätsbetrachtungen und Untersuchungen zur Deposition und Sedimentation sind nicht Gegenstand des Forschungsberichtes (83).

Analytische Untersuchungen zur Homogenität sowie zur Sedimentation und Deposition sind im Zusammenhang mit Modellvalidierungsarbeiten in den Arbeiten (66) und (77) sehr umfänglich beschrieben. Die Ergebnisse von analytischen Untersuchungen werden in Form von Tabellen und Graphiken getrennt in beiden Berichten dargestellt. Eine geschlossene Beschreibung der Aufgabenstellungen, Lösungsmethoden und Ergebnisse ist nicht zu erkennen, worunter die Verständlichkeit leidet. Der Lesende muss sich vielfach die Aufgabenstellung selbst erarbeiten um zu verstehen, wie sich die Autoren*) ausdrücken wollen.

In (78) beschäftigt man sich mit Windkanalversuchen und mit Vergleichen zu dem Naturdatensatz der Prairier-Grass-Experimente.

Während der Hauptbericht (83) mit maßgeblicher universitärer Beteiligung und Aufsicht entstanden ist, handelt es bei den Berichten (66), (77) und (78) um weitestgehende Eigenleistungen der Autoren*). Die Ergebnisse von analytischen Untersuchungen sind ausnahmslos falsch und widersprechen allen Lehrmeinungen der Thermo- und Strömungsmechanik. Auch ist man nicht in der Lage die für diese physikalischen Zusammenhänge zutreffenden Anfangsrandwertaufgaben ordnungsgemäß zu formulieren, geschweige denn zu lösen. Beispielhaft betrifft dies die Angabe einer durchweg einheitlichen Simulationszeit, nach welcher unabhängig von der Aufgabenstellung und Modellparametern alle Simulationen zur Homogenität, Sedimentation und Deposition nach 10 Tagen die stationäre Lösung erreicht worden sein soll. Die ausgewiesenen vertikalen Konzentrationsverläufe sind ebenso wie die analytische Lösung nach (66, Gl. 26) fehlerhaft und widersprechen dem II. Hauptsatz der Thermodynamik. Die Autoren sind nicht in der Lage mit der NEUMANN'schen Funktion umzugehen. **Die Nachrechnung der BERLJAND Lösung ergibt im Nahbereich einen Fehler von mindestens ca. 65% und für die Lage des Maximums der Bodenkonzentrationen wird hier ein Fehler von ca. 33% ermittelt.**

Begrifflichkeiten stiften Verwirrung. So versteht man unter Homogenitätstests die Nachrechnung eines einfachen Diffusionsvorganges, bei welchem nach genügend langer Zeit ein Konzentrationsausgleich stattgefunden hat. Bei fehlender Konvektion spricht man beispielsweise von einer homogenen und inhomogenen Turbulenz. Man versteht darunter schlicht einmal die Verwendung eines konstanten und zum anderen einen veränderlichen Diffusionskoeffizienten. Mit diesen von den Autoren*) gewählten Beschreibungen entsteht bei Lesenden hinsichtlich Modellierung und Qualitätssicherung eine hohe Erwartungshaltung, welche nicht erfüllt wird. Eine instationäre Lösung wurde nicht in einem einzigen Fall validiert.

Die Bedeutung von analytischen Untersuchungen besteht darin, dass man sehr gut diagnostizieren kann. Physikalisch unstrittige Effekte, wie z.B. die Richtung konduktiver Stoffströme und beispielsweise die Erfüllung physikalisch begründeter Randbedingungen, müssen bei analytischen Betrachtungen zweifelsfrei nachgebildet werden können. Im Falle praktischer Nutzenanwendungen, wo beispielsweise unterschiedlichste Emissionsquellen, komplizierte Orographien, verwirbelte Strömungen und weitere Unsicherheiten zu berücksichtigen sind, wird man nicht mehr selektieren können. Umso bedeutsamer sind analytische Überlegungen und Vergleichsrechnungen. Im Vollzug eines Genehmigungsverfahrens muss man die Gewissheit haben, dass alle bedeutsamen physikalischen Effekte korrekt abgebildet werden.

Von den Autoren wurden weiter die Anlagen

- (81) HEIMANN D.: *Ausbreitung von Spurenstoffen bei Schwachwindlagen, DLR Oberpfaffenhofen, 2001*
- (80) RÖCKLE, R.: *Gebäudeumströmung. IMA Freiburg, 2001*

in Auftrag gegeben.

Eine weitere Anlage betrifft

- (79) THIELEN H.; MARTENS R.: *Beiträge der GRS im Rahmen der AUSTAL Workshops, Auftr. Nr. 400003 (AG 1983).*

In (81) wird empfohlen, Ausbreitungsrechnungen nur für Windgeschwindigkeiten durchzuführen, welche oberhalb 1 m/s liegen. Die Verwendung eines diagnostischen Windfeldes wird in (80) beschrieben.

Die Messungen von Windgeschwindigkeiten unter 1 m/s sind mit größeren Unsicherheiten verbunden, weshalb diese Schwachwindlagen üblicherweise aus Häufigkeitsverteilungen herausgerechnet werden. Warum man bei einem guten numerischen Algorithmus ebenso verfahren sollte, ist nicht einzusehen. Die Argumentation in (81) ist nicht überzeugend. Obwohl in allen hier kommentierten Berichten uneingeschränkt die Notwendigkeit hervorgehoben wird, numerische Verfahren am Beispiel analytischer Lösungen zu validieren, verzichtet man ohne Begründung in (80) auf die Nachrechnung von Windprofilen. Auch die Autoren*) halten diese Selbstverständlichkeit nicht für erforderlich.

Selbstverständlich gibt es schließlich dazu auch noch eine VDI Richtlinie.

II.1 Validierung mittels analytischen Lösungen

Nachfolgend werden die in AUSTAL/PARTIKELMODELL (66) beschriebenen Untersuchungen der Autoren*) zur Sedimentation und Deposition sowie die Validierung mittels des BERLJAND Profils kommentiert. Die Ergebnisse werden der Gliederung der Autoren*) folgend in diesem Abschnitt ebenfalls tabellarisch dargestellt.

In (77) werden diese Versuche nochmals beschrieben. Dort werden die Simulationsergebnisse graphisch ausgewertet. Diese Graphiken werden hier im Abschnitt II.2.2 kommentiert.

Die Fallbeispiele 21, 22a und 22b sind mit der korrekten Lösung Gl (A01.10) anschließend im Abschnitt II.1.3 nachzurechnen und richtig zu stellen.

II.1.1 Untersuchung von Fallbeispielen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL

Fall 21: Deposition, keine Sedimentation

Eingabeparameter

In der Tabelle A01.01 sind die Eingabeparameter für diese Vergleichsrechnung zusammengestellt. Für beide Rechnungen sind die Daten

Eingabeparameter Fall 21					
	Fc	Q	K	vd	vs
	[$\mu\text{g}/(\text{m}^2\cdot\text{s})$]	[$\mu\text{g}/(\text{m}^2\cdot\text{s})$]	[m^2/s]	[m/s]	[m/s]
AUSTAL	1		1	0,1	0
IBS		1	1	0,1	0

Tabelle A01.01

identisch. Im Falle AUSTAL/PARTIKELMODELL ist zusätzlich mit angegeben, dass die Emission in einer Höhe von 200m freigesetzt wird.

Bodenkonzentration und Vergleich mit AUSTAL/PARTIKELMODELL

Zunächst muss nach Gl (A01.14) die Bodenkonzentration berechnet werden. Somit erhält man

$$c_0 = \frac{Q}{(v_s + v_d)} = \frac{1}{(0 + 0,1)} = 10 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$$

Vergleicht man die ermittelte Bodenkonzentration mit der nach AUSTAL/PARTIKELMODELL, so erkennt man, dass dort mit einer Konzentration von

$$(c_0)_A = 15 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$$

gerechnet wurde, was offensichtlich fehlerhaft ist.

Massenbilanz

Mit diesem Unterschied in den Bodenkonzentrationen ergibt sich, dass die Massenbilanz verletzt ist. In der nachfolgenden Formeldarstellung kann man diesen Sachverhalt rechnerisch leicht nachvollziehen.

$$F_c = 1 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \neq (c_0)_A \cdot v_d = 15 \cdot 0,1 = 1,5 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad (\text{A01.17})$$

Ergebnisvergleich

Deposition, keine Sedimentation

In der nebenstehenden Tabelle A01.02 sind die Ergebnisse der Vergleichsrechnungen zu erkennen. Die 1. Spalte bezeichnet die Kennung der einzelnen Höhengschichten, die 2. Spalte die Höhenkoordinate z mit einer maximalen Vertikalausdehnung von 200m, die 3. Spalte beschreibt den Lösungsverlauf nach Gl (A01.16)

Lf. Nr	Höhe z [m]	Konzentration		Massendurchsätze		Fehler
		IBS c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	AUSTAL c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	IBS Q [$\mu\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$]	AUSTAL F _c [$\mu\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$]	AUSTAL [%]
1	0	10	15	1	1,5	50
2	10	20	25	1	1,5	50
3	20	30	35	1	1,5	50
4	30	40	45	1	1,5	50
5	40	50	55	1	1,5	50
6	50	60	65	1	1,5	50
7	60	70	75	1	1,5	50
8	70	80	85	1	1,5	50
9	80	90	95	1	1,5	50
10	90	100	105	1	1,5	50
11	100	110	115	1	1,5	50
12	110	120	125	1	1,5	50
13	120	130	135	1	1,5	50
14	130	140	145	1	1,5	50
15	140	150	155	1	1,5	50
16	150	160	165	1	1,5	50
17	160	170	175	1	1,5	50
18	170	180	185	1	1,5	50
19	180	190	195	1	1,5	50
20	190	200	205	1	1,5	50

Tabelle A01.02 Falsche Konzentrationsverläufe nach AUSTAL/PARTIKELMODELL und Korrektur nach Gl.(A01.16?*)

$$c(z) = c_0 \cdot \left(1 + \frac{v_d}{K} \cdot z\right),$$

die 4. Spalte den Lösungsverlauf nach AUSTAL/PARTIKELMODELL und die 5. und 6. Spalte beschreiben den Massendefizit nach der Beziehung (A01.17). Schließlich ist in der 7. Spalte der numerische Fehler ausgewiesen. In der 6. Spalte ist der Depositionsstrom eingetragen, welcher zu der berechneten vertikalen Konzentrationsverteilung nach AUSTAL/PARTIKELMODELL gehört.

Die Massenströme Sedimentation und Deposition können nach den Gl (A01.12) und Gl (A01.13) berechnet werden, und man erhält

Konduktive Massenströme

$$Q_s = c_0 \cdot v_s = 10 \cdot 0 = 0 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$$

$$Q_d = c_0 \cdot v_d = 10 \cdot 0,1 = 1 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$$

Bewertung

Es ist zu erkennen, dass im Falle AUSTAL/PARTIKELMODELL die Bodenkonzentration mit Gl 27 nach Bild A01.03 fehlerhaft berechnet wurde. Die Bodenkonzentration fällt deutlich überhöht aus, wodurch der Massenerhaltungssatz verletzt wird. Demzufolge ist auch die vertikale Konzentrationsverteilung fehlerhaft ermittelt worden. Der deponierte Massenstrom mit $(c_0)_A \cdot v_d = 15 \cdot 0,1 = 1,5 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$ wird ebenfalls unrichtig

beschrieben, was auf eine unkorrekte Ermittlung der Bodenkonzentration zurückzuführen ist. Es wird sich herausstellen, dass es sich dabei um einen systematischen Fehler handelt, welcher für AUSTAL/PARTIKELMODELL offensichtlich typisch ist. Eine **Fehlerabweichung von ca. 50%** kann nicht hingenommen werden. Bemerkenswert ist weiterhin, dass nach Gl (A01.16) die Konzentrationsverteilung von der Lage der Quelle unabhängig ist. Die Höhenangabe ist nur im Zusammenhang mit der Anwendung des Partikelmodells erforderlich, was auch verständlich ist. Gleichwohl hat man hier aber die Möglichkeit ausgelassen, die Lage der Quelle beliebig zu variieren. In diesen Fällen hätte man nachweisen müssen, dass sich die vertikalen Konzentrationsverteilungen für unterschiedliche Höhenlagen voneinander nicht unterscheiden. Dieser Nachweis wäre außerordentlich bedeutsam und ein sinnfälliger Beitrag zur Validierung gewesen.

In der Fallbeschreibung nach AUSTAL/PARTIKELMODELL (Bild A01.01) wird weiter angemerkt, dass diese Lösung für den 10. Tag einer Zeitreihe gültig sein soll. Es ist nicht zu erkennen, was dem Lesenden dieser Hinweis bedeuten soll. Wie nachvollziehbar ist, beschreibt die Aufgabenstellung nach Gl (A01.01) allein stationäre Verhältnisse, was auch mit der Lösung nach Gl (A01.10) und Gl (A01.16) bestätigt wird. Bei Außenstehenden wird der Eindruck hinterlassen, man hätte AUSTAL/PARTIKELMODELL auch für zeitabhängige Rechnungen validiert. Tatsächlich ist dies in keinem einzigen Fall geschehen.

Die analytische und numerische Lösung sind gleichermaßen fehlerhaft. Man kann demzufolge auch nicht behaupten, dieses Fallbeispiel wäre ein Beitrag zur Validierung von AUSTAL/PARTIKELMODELL.

Fall 22a: Sedimentation ohne Deposition

Die nachfolgenden Ausführungen orientieren sich an dem Fallbeispiel 21.

Eingabeparameter

Obwohl nicht ausdrücklich ausgeführt, kann davon ausgegangen werden, dass sich die Quelle, wie auch hier, für alle Fallbeispiele in einer Höhe von 200m

Eingabeparameter Fall 22a					
	Fc	Q	K	vd	vs
	[$\mu\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$]	[$\mu\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$]	[m^2/s]	[m/s]	[m/s]
AUSTAL	0		1	0	0,01
IBS		0	1	0	0,01

Tabelle A01.03

befindet. Die Eingabeparameter sind wiederum identisch.

Bodenkonzentration und Vergleich mit AUSTAL/PARTIKELMODELL

Bodenkonzentration nach Gl (A01.14)

$$c_0 = \frac{Q}{(v_s + v_d)} = \frac{0}{(0 + 0,1)} = 0 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$$

Konzentration AUSTAL/PARTIKELMODELL

$$(c_0)_A = 1100,6 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$$

Vergleichend kann man erkennen, dass $(c_0)_A$ fehlerhaft berechnet wurde.

Massenbilanz

$$F_c = 0 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \neq (c_0)_A \cdot v_d = 1100,6 \cdot 0,1 = 110,06 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad (\text{A01.18})$$

Auch hier ist eine Verletzung des Massenerhaltungssatzes festzustellen.

Ergebnisvergleich

Sedimentation ohne Deposition

Mit Bezug zur nebenstehenden Tabelle A01.04 sind in den Spalten 3 und 4 die ermittelten Konzentrationsverläufe ausgewiesen. Die 3. Spalte beschreibt den Lösungsverlauf nach Gl (A01.10), da $v_s \neq 0$ vorgegeben ist. Die Konzentrationsverteilung in der Spalte 4 ist nach dem AUSTAL/PARTIKELMODELL gemäß Gl(26) und Bild A01.01 berechnet worden. Die Spalten 5 und 6 beschreiben die Massendurchsätze. Die Berechnung eines Fehlers in der 7. Spalte ist angesichts der

Lf. Nr	Höhe z [m]	Konzentration		Massendurchsätze		Fehler
		IBS c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	AUSTAL c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	IBS Q [$\mu\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$]	AUSTAL F _c [$\mu\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$]	AUSTAL %
1	0	0	1100,6	0	0	
2	10	0	995,8	0	0	
3	20	0	901,1	0	0	
4	30	0	815,3	0	0	
5	40	0	737,7	0	0	
6	50	0	667,5	0	0	
7	60	0	604,0	0	0	
8	70	0	546,5	0	0	
9	80	0	494,5	0	0	
10	90	0	447,5	0	0	
11	100	0	404,9	0	0	
12	110	0	366,3	0	0	
13	120	0	331,5	0	0	
14	130	0	299,9	0	0	
15	140	0	271,4	0	0	
16	150	0	245,6	0	0	
17	160	0	222,2	0	0	
18	170	0	201,1	0	0	
19	180	0	181,9	0	0	
20	190	0	164,6	0	0	

Tabelle A01.04 Falsche Konzentrationsverläufe nach AUSTAL/PARTIKELMODELL und Korrektur nach Gl.

widersinnigen Konzentrationsverteilung nach AUSTAL/PARTIKELMODELL nicht möglich und wenig aussagefähig. Theoretisch ist der Fehler unendlich groß.

Mit der Gleichung

$$c(z) = c_0 \frac{v_s + v_d}{v_s} \cdot \left(1 - \frac{v_d}{v_s + v_d} \cdot e^{-\frac{v_s}{K} \cdot z} \right) \quad (\text{A01.10})$$

erkennt man, dass für $v_d = 0$ die vertikale Konzentrationsverteilung konstant und identisch mit der Bodenkonzentration c_0 ist. Da aber diese gleich Null ist, wird man im Kontrollraum keine Luftbeimengungen beobachten können. Diesen Sachverhalt beschreibt die Spalte 3 der Tabelle A01.04.

Konduktive Massenströme

$$Q_s = c_0 \cdot v_s = 0 \cdot 0,1 = 0 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad \text{Sedimentation}$$

$$Q_d = c_0 \cdot v_d = 0 \cdot 0 = 0 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad \text{Deposition}$$

Bewertung

Wie aus der Tabelle A01.04 zu erkennen ist, ist der Massenstrom gleich Null. Es ist daher völlig unverständlich, wie hierfür überhaupt eine vertikale Konzentrationsverteilung gemäß Spalte 4 ausgewiesen werden kann. Wenn in einem Kontrollraum kein Schadstoff emittiert wird, wird man auch nicht erwarten können, dass dort mit Luftverunreinigungen zu rechnen ist. Das Ergebnis ist dem gesunden Menschenverstand völlig fern. Es ist erklärungsbedürftig, wie man damit Vergleichsrechnungen und eine Validierung vorgenommen hat.

Auch in diesem Fall verweist man auf den 10. Tag einer Zeitreihe, obwohl man doch wissen müsste, dass man keinen Vergleich mit einer instationären Lösung vorgenommen hat. Es wäre wünschenswert gewesen, zu mindest auf diesen Umstand hinzuweisen um zu verhindern, dass bei dem Lesenden Verwirrung entsteht. Dass man absichtlich darauf setzt, kann nicht behauptet werden.

Die ausgewiesene Konzentrationsverteilung widerspricht allen strömungstechnischen und thermodynamischen Grundsätzen und ist zu verwerfen. Die ausgewiesenen Ergebnisse sind kein Beitrag zur Validierung des AUSTAL/PARTIKELMODELLS. Analytische und numerische Lösung sind wiederum falsch.

Fall 22b: Deposition mit Sedimentation

Eingabeparameter

Die Eingabeparameter sind wiederum identisch. Deposition und Sedimentation treten gleichermaßen auf, da v_s und v_d von Null verschieden sind.

Eingabeparameter Fall 22b					
	Fc	Q	K	vd	vs
	[$\mu\text{g}/(\text{m}^2\cdot\text{s})$]	[$\mu\text{g}/(\text{m}^2\cdot\text{s})$]	[m^2/s]	[m/s]	[m/s]
AUSTAL	1		1	0,05	0,05
IBS		1	1	0,05	0,05

Tabelle A01.05

Bodenkonzentration und Vergleich mit AUSTAL/PARTIKELMODELL

Bodenkonzentration nach Gl (A01.14)

$$c_0 = \frac{Q}{(v_s + v_d)} = \frac{1}{(0,05 + 0,05)} = 10 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$$

Konzentration AUSTAL/PARTIKELMODELL

$$(c_0)_A = 20 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$$

Vergleichend kann man wiederum erkennen, dass $(c_0)_A$ fehlerhaft berechnet wurde.

Massenbilanz

$$F_c = 1 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \neq (c_0)_A \cdot (v_d + v_s) = 20 \cdot (0,05 + 0,05) = 2 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad (\text{A01.19})$$

Eine Verletzung des Massenerhaltungssatzes ist zu erkennen.

Konduktive Massenströme

$$Q_s = c_0 \cdot v_s = 10 \cdot 0,05 = 0,5 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad \text{Sedimentation}$$

$$Q_d = c_0 \cdot v_d = 10 \cdot 0,05 = 0,5 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad \text{Deposition}$$

$$Q = A \cdot v_s = c_0 \cdot (v_s + v_d) = 10 \cdot (0,05 + 0,05) = 1 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad \text{Gesamtmassenstrom}$$

Ergebnisvergleich

Deposition mit Sedimentation

Mit Bezug zur nebenstehenden Tabelle A01.06 sind in den Spalten 3 und 4 wiederum die ermittelten Konzentrationsverteilungen ausgewiesen. Die 3. Spalte beschreibt den Lösungsverlauf nach Gl (A01.10) bzw. (A01.20). Die Konzentrationsverteilung in der Spalte 4 ist nach dem AUSTAL/PARTIKELMODELL gemäß Gl(26) und Bild A01.01 berechnet worden. In der Spalte 5 ist der Fehler ausgewiesen.

Beachtet man, dass die Sedimentations- und Depositionsgeschwindigkeit identisch sind, so erhält man aus (A01.10) die Gleichung (A01.20)

$$c(z) = c_0 \frac{v_s + v_d}{v_s} \cdot \left(1 - \frac{v_d}{v_s + v_d} \cdot e^{-\frac{v_s}{K} \cdot z} \right) \quad (\text{A01.10})$$

$$c(z) = c_0 \cdot \left(2 - e^{-\frac{v_s}{K} \cdot z} \right) \quad (\text{A01.20})$$

Bewertung

Es ist zu erkennen, dass die vertikale Konzentrationsverteilung im Gegensatz zu Gl(A01.20) nach dem AUSTAL/PARTIKELMODELL unveränderlich ist. Der Konzentrationswert bleibt von z unabhängig $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Augenscheinlich ist somit zu erkennen, dass der Konzentrationsgradient an der unteren Berandung des Kontrollraumes Null ist. Es wird außer Acht gelassen, dass in diesem Falle eine Deposition nicht auftreten kann. Die Folge wäre, dass die Depositionsgeschwindigkeit gleich Null sein müsste, was aber im Widerspruch zu den getroffenen Annahmen der formulierten Aufgabenstellung steht. Depositions- und Sedimentationsgeschwindigkeit sind gleich groß und ungleich Null. Auch hier wird die Bodenkonzentration nach AUSTAL/PARTIKELMODELL erheblich überhöht berechnet. **In Bodennähe**

Lf. Nr	Höhe z [m]	Konzentration		Fehler
		IBS c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	AUSTAL c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	AUSTAL %
1	0	10	20	100,0
2	10	13,9	20	43,5
3	20	16,3	20	22,5
4	30	17,8	20	12,6
5	40	18,6	20	7,3
6	50	19,2	20	4,3
7	60	19,5	20	2,6
8	70	19,7	20	1,5
9	80	19,8	20	0,9
10	90	19,9	20	0,6
11	100	19,9	20	0,3
12	110	20,0	20	0,2
13	120	20,0	20	0,1
14	130	20,0	20	0,1
15	140	20,0	20	0,0
16	150	20,0	20	0,0
17	160	20,0	20	0,0
18	170	20,0	20	0,0
19	180	20,0	20	0,0
20	190	20,0	20	0,0

Tabelle A01.06 Falsche Konzentrationsverläufe nach AUSTAL/PARTIKELMODELL und Korrektur nach Gl. (A01.10)

beträgt dieser Fehler 100%. Die Konzentrationsverteilung verhält sich exponentiell und nimmt im Gegensatz zu AUSTAL/PARTIKELMODELL nach oben hin richtigerweise zu.

Auch hier wird wieder ausdrücklich vermerkt, dass die Konzentrationsverteilung nach AUSTAL/PARTIKELMODELL für den 10. Tag einer Zeitreihe zutreffend ist. Was mit diesem Hinweis vermittelt werden soll, wird ebenfalls nicht deutlich.

Die beschriebenen Beispiele zur Deposition und Sedimentation sind keine Beispiele zur Validierung von AUSTAL/PARTIKELMODELL.

II.1.2 Test des BERLJAND Profils

Die in BERLJAND (1), S. 39, angegebenen Originallösungen beschreiben grundsätzlich stationäre dreidimensionale Schadstoffausbreitungsvorgänge. Die Autoren*) hätten somit die Möglichkeit gehabt, das eigene dreidimensionale Partikelmodell damit auch zu validieren. Es wird stattdessen ein dreidimensionaler numerischer Algorithmus mit einer zweidimensionalen Lösung verglichen. Schon allein aus diesem Grunde kann man nicht behaupten, man hätte AUSTAL/PARTIKELMODELL mit einem BERLJAND Profil verglichen. Tatsächlich handelt es sich um eine weitere Vereinfachung nach (74), welche in BERLJAND (1) nicht zu finden ist. Die Literaturangabe ist irreführend und unkorrekt. Zudem zeigt es sich, dass selbst dieser Vergleich im Nahbereich bis zu 500m mit einem Fehler größer als 65% behaftet ist.

In BERLJAND (1) wird von der allgemeinen Stofftransportgleichung

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial c}{\partial y} + w \cdot \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (\text{A01.21})$$

ausgegangen.

Der betrachtete Ausbreitungsvorgang beschränkt sich auf die nachfolgend erläuterte übliche Spezialisierung:

- Auf eine zeitliche Änderung der Emissionsverhältnisse wurde verzichtet, so dass nur stationäre Verhältnisse betrachtet werden. Auf ein zeitabhängiges Lösungsverhalten kann nicht geschlossen werden.
- Ein konvektiver Stofftransport senkrecht und quer zur Hauptströmung ist unterbunden, betrachtet wird ein ebener Ausbreitungsvorgang.
- In Richtung der Hauptströmung und quer zu ihr findet kein konduktiver Schadstofftransport statt. Eine Diffusion ist nur in Richtung der Höhenkoordinate zugelassen.
- Die Hauptströmung in x-Richtung wird durch ein Potenzgesetz approximiert.
- Der turbulente Diffusionskoeffizient ist linear von der Höhenkoordinate abhängig.
- Deposition am Boden ist nicht zugelassen

Unter Beachtung dieser Vereinfachungen ergeben sich zur Beschreibung dieses Ausbreitungsvorganges folgende Gleichungen, welche zu berücksichtigen sind:

$$u \cdot \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (\text{A01.22})$$

Stofftransportgleichung

$$u(z) = u_H \cdot \left(\frac{z}{H} \right)^n$$

Potenzgesetz zur Approximation des Geschwindigkeitsprofils

$$K_{zz} = K' \cdot z \quad (\text{A01.23})$$

Vertikale Diffusion (m=1 im Vergleich zu (1))

$$\left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=0} = 0$$

Am Boden ist keine Deposition zugelassen

Nach (01) wird das Lösungsverhalten durch ein Produkt zwischen einer Exponential- und Besselfunktion beschrieben. Die Original-BERLJAND Lösung berücksichtigt zusätzlich noch den Term $\frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)$.

Es reicht an dieser Stelle aus, die in (66) nach Bild A01.04 ausgewiesenen Lösungen hinsichtlich ihrer Übereinstimmung mit der vereinfachten analytischen Lösung nach (74) zu vergleichen, um Schlussfolgerungen daraus ziehen zu können. Die Lösung selbst wird durch die Gleichung (A01.33) bzw. (A01.35) des Abschnittes II.2.3 beschrieben. Die Simulationsergebnisse sind im Bild A01.04 dargestellt. In der Spalte c_{Soll} sind die analytischen Lösungen und c die Simulationsergebnisse nach AUSTAL/PARTIKELMODELL eingetragen.

AUSTAL2000, Programmbeschreibung

Z	X = 500				X = 1000			
	Cmin	C	Cmax	Csoll	Cmin	C	Cmax	Csoll
5	38.2	<u>43.4</u>	48.6	<u>25.5</u>	316.5	<u>329.0</u>	341.5	<u>261.7</u>
15	94.1	<u>99.1</u>	104.1	<u>88.4</u>	403.3	<u>414.1</u>	424.9	<u>391.0</u>
25	209.1	216.0	222.9	214.0	534.6	544.4	554.2	546.6
35	399.3	407.5	415.7	411.0	696.2	706.1	716.0	709.2
45	646.3	655.5	664.7	669.6	845.5	857.5	869.5	863.5
55	927.2	938.5	949.8	960.4	972.7	982.5	992.3	997.0
65	1203.6	1210.9	1218.2	1241.7	1080.6	1091.5	1102.4	1100.3
75	1451.0	1462.7	1474.4	1470.8	1150.1	1164.1	1178.1	1167.6
85	1590.9	1603.7	1616.5	1615.1	1190.0	1199.6	1209.2	1196.9
95	1653.3	1666.6	1679.9	1659.1	1183.6	1193.1	1202.6	1189.9

AUSTAL2000, Programmbeschreibung

Z	X = 2000				X = 4000			
	Cmin	C	Cmax	Csoll	Cmin	C	Cmax	Csoll
5	691.2	714.0	736.8	669.6	770.7	791.3	811.9	790.0
15	736.3	749.8	763.3	720.9	793.7	808.2	822.7	784.1
25	761.6	774.0	786.4	773.9	779.6	792.3	805.0	775.6
35	814.6	827.8	841.0	820.9	754.2	766.5	778.8	764.6
45	853.8	865.9	878.0	858.1	734.8	745.2	755.6	751.0
55	873.5	885.9	898.3	883.5	721.6	734.8	748.0	735.0
65	887.4	896.4	905.4	896.5	712.9	721.6	730.3	716.8
75	883.7	894.4	905.1	897.0	693.0	702.8	712.6	696.4
85	880.3	889.2	898.1	886.0	662.0	672.8	683.6	674.1
95	856.6	867.0	877.4	864.4	640.2	649.3	658.4	650.3

Bild A01.04 Numerischer Vergleich mit einer zweidimensionalen BERLJAND Lösung

Geht man davon aus, dass zur Beurteilung der Immissionsverhältnisse die Schadstoffkonzentrationen besonders in Bodennähe von Interesse sind, so erkennt man unschwer, dass die Fehlerabweichung erheblich von der Entfernung x des Emissionspunktes abhängt.

In einer Entfernung von 500 m beträgt der Fehler ca. 70%. Erst ab einer Entfernung von ca. 1750m liegt der sonst bei numerischen Verfahren zu tolerierende Fehler unter 10 %.

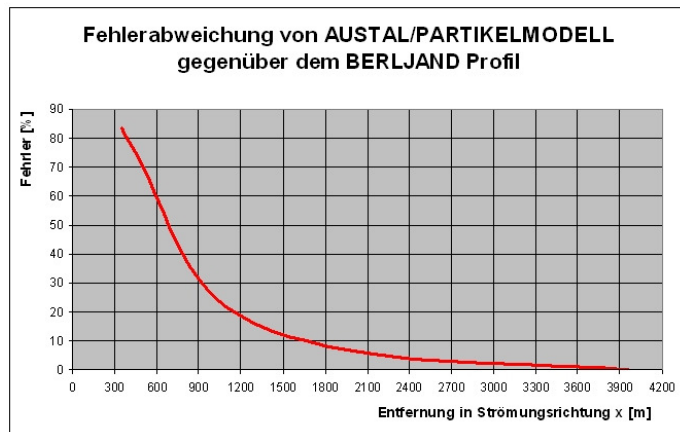


Bild A01.05** Fehlerabweichung im Nahbereich, **bei einer Entfernung von ca. 500 m vom Quellpunkt liegt der Fehler bei ca. 70%.**

Demnach muss man davon ausgehen, dass zwar die vereinfachte BERLJAND Lösung die Immissionsverhältnisse in jeder Entfernung richtig beschreibt, aber nach diesen Ergebnissen die Lösung nach dem AUSTAL/PARTIKELMODELL für den Nahbereich nicht anwendbar ist.

Dieser Vergleich ist ein Hinweis darauf, dass Trajektorienmodelle, zu denen Partikelmodelle zu zählen sind, die Schadstoffausbreitung eher in großen Entfernungen richtig beschreiben als im Nahbereich. Aus diesem Grunde

werden Trajektorienmodelle bevorzugt zur Berechnung von Langstreckentransporten über mehrere 1000km erfolgreich angewendet, wie z.B. in (75, 76) erläutert wird. Für Anwendungen im Nahbereich sind diese Modelle nicht bekannt.

Die Abhängigkeit des Fehlers mit der Entfernung von der Punktquellen zeigt das Bild A01.06.

Für die Durchführung beispielsweise von Immissionsprognosen, Ursachenanalysen und Störfalluntersuchen sind die Immissionsverhältnisse im Nahbereich von größerem Interesse als umgekehrt. **Nach diesen Vergleichsrechnungen der Autoren*) ist AUSTAL/PARTIKELMODELLS mit einer Fehlerabweichung im Nahbereich bis zu ca. 70% für anspruchsvolle Aufgaben des Umweltschutzes nicht verwendbar.**

In der Beschreibung des AUSTAL/PARTIKELMODELLS nach (66) wird weiter ausgeführt, dass das Maximum der Bodenkonzentrationen in einer Entfernung von 2361m liegen soll, was aber nach Bild A01.06 nicht zutreffend ist. Das tatsächliche Maximum liegt bei ca. 3550m. **Der Fehler hierfür liegt bei ca. 33%.**

Weiterhin kann nachgelesen werden, dass nur in der ersten Stunde des ersten Tages eine Emission wirksam ist. Diese Annahme ist aus dem Grunde unverständlich, da im vorliegenden Fall nach Gl A01.01 wieder von einer stationären Aufgabenstellung auszugehen ist. Außerdem ist nicht nachvollziehbar, wie

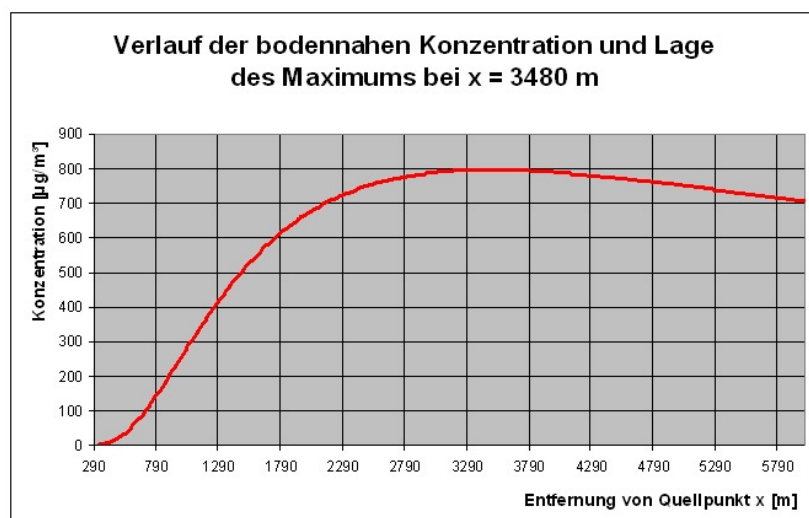


Bild A01.06 Bodenkonzentration nach Gleichung (A01.33), das Maximum im AUSTAL/PARTIKELMODELL wird fehlerhaft beschrieben.

man diese kurzzeitige Emission in der vereinfachten BERLJAND Lösung überhaupt berücksichtigen möchte. Diese Lösung sieht zeitabhängige Emissionen nicht vor. Damit wird fälschlicherweise wieder der Eindruck hinterlassen, man hätte ein instationäres Ausbreitungsverhalten mit dieser Vergleichsrechnung validiert. Auch hier sind die Darstellungen und Beschreibungen irreführend.

Das AUSTAL/PARTICELMODELL ist im Nahbereich nicht verwendungsfähig.

II.1.3 Richtigstellung der Fallbeispiele Sedimentation und Deposition 21, 22a und 22b

Im Abschnitt II.1.1 wurden verschiedene Fallbeispiele zur Berechnung des konvektiven und konduktiven Stofftransportes auf der Grundlage der Differentialgleichung

$$-v_s \cdot \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad \text{GI (A01.01)}$$

beschrieben. Diese Fallbeispiele sollten dazu dienen, AUSTAL/PARTIKELMODELL zu validieren. Die Differentialgleichung (A01.01) besitzt die korrekte Lösung

$$c(z) = c_0 \frac{v_s + v_d}{v_s} \cdot \left(1 - \frac{v_d}{v_s + v_d} \cdot e^{-\frac{v_s}{K} z} \right) \quad \text{GI (A01.10)}$$

In AUSTAL/PARTIKELMODELL (66) wird beklagt, dass in der dort beschriebenen Gleichung (26) die Depositionsgeschwindigkeit v_d „kein unmittelbarer Parameter des Algorithmus“ ist. Tatsächlich ist aber bereits schon diese Aussage unrichtig, denn mit der dortigen Definition $F_c = c_0 \cdot v_d$ ist die Lösung sehr wohl von der

Eingabeparameter			
Q =	1	µg/(m ² s)	Vs = 0,1 m/s K = 4 m ² /s
Ergebnisse			
Vd		Deposition	Gesamtemission
[m/s]	[µg/(m ² s)]	[µg/(m ² s)]	[µg/(m ² s)]
0,010	0,91	0,09	1,00
0,025	0,80	0,20	1,00
0,040	0,71	0,29	1,00
0,075	0,57	0,43	1,00

Tabelle A01.07 Eingabeparameter

Depositionsgeschwindigkeit abhängig. Richtig ist dagegen, dass die Gleichung (26) in AUSTAL/PARTIKELMODELL die physikalischen Zusammenhänge von Sedimentation und Deposition falsch beschreibt. Aus diesem Grunde können die Autoren*) selbst ihre eigene Lösung nicht richtig kommentieren.

In STEPHAN&MAYINGER (82, S. 269), wie auch in allen anderen Lehrbüchern der Thermodynamik, können diese Zusammenhänge elementar und verständlich empfehlenswert nachgelesen werden.

Im Ergebnis der obigen Betrachtungen konnte nachgewiesen werden, dass kein einziges der beschriebenen Fallbeispiele die tatsächlichen Verhältnisse richtig beschreibt und zur Validierung geeignet ist. Analytische und numerische Lösung sind gleichermaßen falsch.

Um den AUTOREN*) eine Vorstellung zu geben, wie diese Formen des Stofftransportes richtig beschrieben werden können, werden unter Berücksichtigung von Gleichung (A01.10) am Beispiel verschiedener Datensätze nach Tabelle A01.07 die dazugehörigen vertikalen Konzentrationsverteilungen ermittelt.

Die Ergebnisse sind im Bild A01.07 zu erkennen. Alle Konzentrationsverteilungen besitzen einen einheitlichen Grenzwert

$$\lim_{z \rightarrow \infty} c(z) = \frac{Q}{v_s} = \frac{1}{0,1} = 10 \frac{\mu\text{m}^3}{\text{m}^3}.$$

Die Proportionalität zwischen Depositionsgeschwindigkeit und Konzentrationsgradient am Boden ist im Gegensatz zu AUSTAL/PARTIKELMODELL deutlich zu erkennen. Das gegensätzlich korrekte Verhalten gegenüber AUSTAL/PARTIKELMODELL ist offensichtlich.

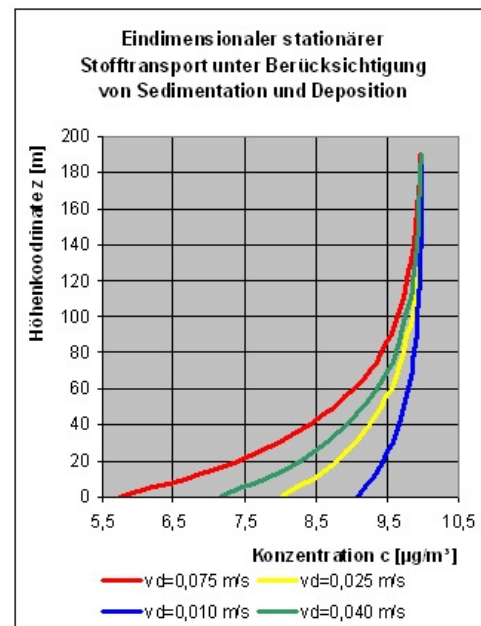


Bild A01.07 Konzentrationsverläufe

II.2 Verifikationstests

Nachfolgend werden die in AUSTAL/PARTIKELMODELL (66) und (77) beschriebenen Untersuchungen der Autoren*) zur Sedimentation und Deposition sowie die Validierung mittels des BERLJAND Profils kommentiert. Die Ergebnisse werden der Gliederung der Autoren*) folgend in diesem Abschnitt vorzugsweise graphisch dargestellt, die Ergebnistabellen sind im Abschnitt II.1. nachzulesen. Zusätzlich werden die sog. Homogenitätstests insbesondere hinsichtlich der Berechnung von Ausgleichszeiten nach (77) bewertet.

Anmerkungen zu den Windkanalversuchen und Naturexperimenten beziehen sich zusätzlich auf (83). Weiterhin werden dazu Erläuterungen nach (78) mit herangezogen.

II.2.1 Homogenitätstest

In (66) und (77) werden verschiedene Homogenitätstests diskutiert. Dem fachkundigen Leser sei hier mitgeteilt, dass die Autoren*) darunter einen nach dem II. Hauptsatz der Thermodynamik allein durch Diffusion verursachten irreversiblen Ausgleichsvorgang verstehen, (83 S. 191). Im Folgenden sollen diese Ausgleichsvorgänge untersucht werden, um offensichtliche Unstimmigkeiten zur Berechnung der Ausgleichszeiten aufzuklären.

Dieser Ausgleichsvorgang wird durch die Differentialgleichung GI (A01.24) einschließlich der zugehörigen Randbedingungen GI (A01.25) beschrieben. Die Randbedingung GI (A01.25) legt fest, dass keine Masse den Kontrollraum verlassen kann. Es wird kurzzeitig eine bestimmte Masse emittiert, so dass sich die Konzentrationen zeitlich ausgleichen werden.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \cdot \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right) + Q \quad \text{Gl. (A01.24)}$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial n} \right)_{\text{Berandung}} = 0 \quad \text{GI (A01.25)}$$

Beschreibende Differentialgleichung und Randbedingung

Die Autoren*) verfolgen mit diesen Testrechnungen das Ziel nachzuweisen, dass das AUSTAL/PARTIKELMODELL das instationäre Ausbreitungsverhalten richtig beschreibt. Es wird festzustellen sein, dass dieser Anspruch nicht gerechtfertigt ist.

Die Rechnungen werden einmal für eine sog. homogene und zum anderen für eine inhomogene Turbulenz durchgeführt. Unter homogener Turbulenz verstehen die Autoren*) einen konstanten vertikalen Diffusionskoeffizienten K_{zz} . Im anderen Fall ist dieser allein von der z-Koordinate abhängig, wie beispielhaft in (77) mit Gleichung (4.3) angegeben worden ist. Der Verlauf dazu ist im Bild A01.08 dargestellt. Allerdings muss hier schon angemerkt werden, dass man sich das Auftreten einer turbulenten Strömung ohne Konvektion nicht vorstellen kann. Eine Erklärung dazu wird nicht gegeben. Im Falle eines ruhenden Fluids von einer homogenen oder inhomogenen Turbulenz auszugehen, ist gegenstandslos und stiftet lediglich Verwirrung.

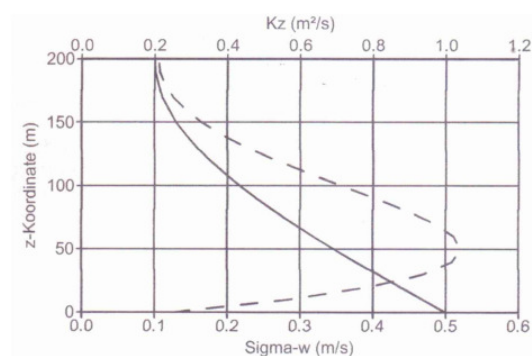


BILD 3: Vertikalprofile von $\sigma_w(z)$ nach Gleichung (4.1) (durchgezogene Linie) und von $K_{zz}(z)$ nach Gleichung (4.3) (gestrichelte Linie)

Bild A01. 08 Vertikale Abhängigkeit des Diffusionsparameters

Insgesamt werden bei gleich bleibenden Emissionen die vier unterschiedliche Fallrechnungen

- Homogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt,
- Homogene Turbulenz variabler Zeitschritt,
- Inhomogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt und
- Inhomogene Turbulenz, variabler Zeitschritt

durchgeführt. Im Folgenden werden hier nur die beiden Fälle eines konstanten (Homogene Turbulenz) und veränderlichen (Inhomogene Turbulenz) Diffusionskoeffizienten betrachtet. Die Ergebnisse können auf die weiter beschriebenen Fallrechnungen sinngemäß übertragen werden.

Es wird ein Kontrollraum von 1000 x 1000 x 200 m³ betrachtet, wobei von 200 000 möglichen Maschen lediglich nur 20 betrachtet werden. In der ersten Stunde der durchgeführten instationären Rechnung wird eine Masse von 100 kg frei gesetzt. Für alle vier Fälle wird ausgewiesen, dass sich der stationäre Ausgleich nach 10 Tagen eingestellt hat. Es ist auffällig, dass die variierte vertikale Diffusion auf die zeitliche Entwicklung des Lösungsverhaltens keinen Einfluss haben soll. Verständlich sollte dagegen sein, dass eine verminderte Diffusionswirkung den Ausgleichsvorgang verzögert und umgekehrt beschleunigt. Dem steht das numerische Ergebnis entgegen, dass in allen Fällen der Ausgleichsvorgang am 10. Tag einheitlich abgeschlossen sein soll.

Diese Unstimmigkeit ist nicht hinzunehmen und aufzuklären. Mittels Ähnlichkeitsbetrachtungen wird die Abhängigkeit der Ausgleichszeit von den Diffusionskoeffizienten nachzuweisen sein. Man wird erkennen können, dass eine einheitliche Ausgleichszeit von 10 Tagen für alle Fälle nicht glaubwürdig ist. Dabei reicht es aus, nur die Diffusion zu variieren.

Zunächst zeigt es sich, dass nach der in (77) und (78) gegebenen Beschreibung die Anfangsrandwertaufgabe nach Gl (A01.24) vereinfacht werden kann. Die Größe des gewählten Kontrollraumes von 20 Millionen Kubikmeter ist zur Durchführung dieser relativ einfachen Testrechnungen mit 20 Maschen nicht erforderlich, und man veröffentlicht eine verwirrende Umfänglichkeit, welche nicht vorhanden und erforderlich ist. Tatsächlich wird der betrachtete Ausgleichsvorgang durch die Differentialgleichung mit gleichen Randbedingungen durch die Beziehungen (A01.26) und (A01.27) beschrieben.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right) + Q \quad K_{xx} = K_{yy} = 0 \quad \text{Gl (A01.26)}$$

Eindimensionaler instationärer Diffusionsvorgang (Inhomogene Turbulenz)

Betrachtet man eine konstante vertikale Diffusion, so erhält man die vereinfachte Gleichung (A01.27).

$$\frac{\partial c}{\partial t} = K_{zz} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + Q \quad K_{zz} = konst \quad \text{Gl (A01.27)}$$

Eindimensionaler instationärer Diffusionsvorgang (Homogene Turbulenz)

Diese Gleichung kann man in eine dimensionslose Form

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{z}^2} + 1 \quad \text{GI (A01.28)}$$

Dimensionslose Differentialgleichung

überführen, wobei die Konzentration sowie die Zeit- und Ortskoordinaten durch die Gleichungen (A01.29)

$$\bar{c} = c \cdot \frac{K_{zz}}{Q \cdot h^2} \quad \bar{t} = t \cdot \frac{K_{zz}}{h^2} \quad \bar{z} = \frac{z}{h} \quad \text{GI (A01.29)}$$

Dimensionslose Konzentration, Zeit und y-Koordinate

dimensionslos dargestellt werden können. Diese Kennzahlen sind zugleich auch die gesuchten Ähnlichkeitskennzahlen. Sie legen fest, dass sich alle Ausgleichsvorgänge, welche durch die Differentialgleichung (A01.27) beschrieben werden können, sich zueinander ähnlich verhalten. Sie unterscheiden sich um einen Maßstabsfaktor.

$$A_1 = \frac{t_1 \cdot (K_{zz})_1}{h^2} \quad A_2 = \frac{t_2 \cdot (K_{zz})_2}{h^2} \quad A_2 \approx A_1 \quad \text{GI (A01.30)}$$

Ähnlichkeitskennzahlen

Vergleicht man nun zwei unterschiedliche Fälle (1) und (2), so erhält man die Beziehungen (A01.31).

$$t_2 = t_1 \cdot \frac{(K_{zz})_1}{(K_{zz})_2} \cdot \frac{A_2}{A_1} = t_1 \cdot \frac{(K_{zz})_1}{(K_{zz})_2} \cdot A_3 \quad A_3 = \frac{A_2}{A_1} \quad \text{GI (A01.31)}$$

Die Ausgleichszeiten verhalten sich umgekehrt proportional zu den Diffusionskoeffizienten

Damit ist zu erkennen, dass die Ausgleichszeit von der Größenordnung der Diffusionskoeffizienten abhängig ist. Bei kleineren Diffusionskoeffizienten vergrößern sich die Ausgleichszeiten. Umgekehrt fallen diese kleiner aus.

Vergleicht man nun zwei Fallrechnungen mit unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten, so kann man diese Abhängigkeit auch numerisch belegen, wobei hierzu die in (66) und (77) beschriebenen Eingabeparameter verwendet werden.

Im ersten Fall (1) wird davon ausgegangen, dass der Diffusionskoeffizient konstant mit $1 \text{ m}^2/\text{s}$ angenommen werden kann. Die Rechnung der Autoren*) von (66) und (77) hat ergeben, dass die Ausgleichszeit einheitlich 10 Tage betragen soll.

Fall (1)

$$t_1 = 10 \text{ Tage} \quad (K_{zz})_1 = 1 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

Im zweiten Fall rechnet man mit einem variierten Diffusionskoeffizient nach Bild A01.08 (gestrichelte Linie, Gleichungen 4.1, 4.2 und 4.3 in (77)). Bildet man von diesem Funktionsverlauf den Mittelwert, so liegt dieser bei $0,59673169 \text{ m}^2/\text{s}$. Mit diesem erheblich verkleinerten Diffusionskoeffizient wird man auch eine vergrößerte Ausgleichszeit erwarten müssen, was für den Fall (2) nachgewiesen werden kann.

Fall (2)

$$(K_{zz})_2 = 0,59673169 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$t_2 = t_1 \cdot A_3 \cdot \frac{(K_{zz})_1}{(K_{zz})_2} = 10 \cdot \frac{1}{0,59673169} = 16.75 \text{ Tage} \quad A_1 = A_2 \quad \text{GI (A01.32)}$$

Prognostizierte Ausgleichszeit im Falle variiertes Diffusion mit einem Fehler von ca. 67 %

Somit sollte der Ausgleichvorgang die Zeitspanne von 10 Tagen erheblich überschreiten. Das Simulationsmodell AUSTAL/PARTIKELMODELL weist dagegen eine konstante Ausgleichszeit aus, was keinen vernünftigen Sinn ergibt. Bedeutsam ist, dass der mittlere Diffusionskoeffizient im zweiten Fall kleiner ausfällt. Die tatsächlich vertikale Veränderlichkeit der Diffusion ist dabei unerheblich und führt im räumlichen Mittel zu dem gleichen Ergebnis. **Damit kann nachgewiesen werden, dass AUSTAL/PARTIKELMODELL für instationäre Ausgleichsvorgänge mit einem Fehler von mindestens 67 % rechnet.** Weitere Vergleichsrechnungen zur Validierung instationärer Ausbreitungsvorgänge wurden nicht durchgeführt.

Es ist zu erkennen, dass man nicht davon ausgehen kann AUSTAL/PARTIKELMODELL wäre auch für instationäre Ausbreitungsvorgänge validiert. Der einzige dazu beschriebene Versuch ist falsch und widersprüchlich. Anspruchsvolle analytische Lösungen, wie sie z.B. in (84) beschrieben sind, werden nicht herangezogen.

II.2.2 Sedimentation und Deposition

Im Rahmen von Homogenitätstests wurden für AUSTAL/PARTIKELMODELL nach (77) für unterschiedliche Stoffströme, Sedimentation und Deposition, Testrechnungen durchgeführt. Die Eingabeparameter dazu sind in der Tabelle A01.08, zusammengefasst dargestellt.

Eingabeparameter				
Fc	K	Vs	Vd	Co
[µg/m³]	[m²/s]	[m/s]	[m/s]	[µg/m³]
Ohne Sedimentation mit Deposition				
1	1	0	0,1	10
Mit Sedimentation ohne Deposition				
0	1	0,01	0	0
Sedimentation und Deposition				
1	1	0,05	0,05	10

Tabelle A01. 08

Die Ergebnisse nach AUSTAL/PARTIKELMODELL sind für die beschriebenen Fälle in den Bildern A01.10, A01.12 und A01.14 ausgewiesen. Der Fall ohne Sedimentation wurde nach der fehlerhaften Gleichung (4.6), S.32, und die beiden anderen Fälle nach Gleichung (4.5), S.32, berechnet. Die verwendeten Beziehungen können auch den Arbeiten (66, Gl (27 und 26)) entnommen werden.

Die korrekten Lösungen werden dagegen wie folgt beschrieben:

$$c(z) = c_0 \frac{v_s + v_d}{v_s} \cdot \left(1 - \frac{v_d}{v_s + v_d} \cdot e^{-\frac{v_s}{K} \cdot z} \right)$$

Sedimentation mit oder ohne Deposition GI (A01.10)

$$c_0 = \frac{Q}{(v_s + v_d)}$$

Berechnung der Bodenkonzentration GI (A01.14)

$$c(z) = c_0 \cdot \left(1 + \frac{v_d}{K} \cdot z \right)$$

Ohne Sedimentation und beliebiger Deposition GI (A01.16)

Die fehlerfreien Lösungen sind in den Bildern A01.09 A01.11 und A01.13 dargestellt. Die Eingabeparameter sind mit denen nach (66) identisch. Daraus ergibt sich auch, dass unter 1 ME zugleich 1 µg zu verstehen ist, womit die Ergebnisse auch zahlenwertmäßig verglichen werden können.

Eine Gegenüberstellung beider Lösungen lässt erhebliche Unterschiede im Lösungsverlauf erkennen, welche nachfolgend kommentiert werden.

Bild A01.10, 09

Deposition ohne Sedimentation

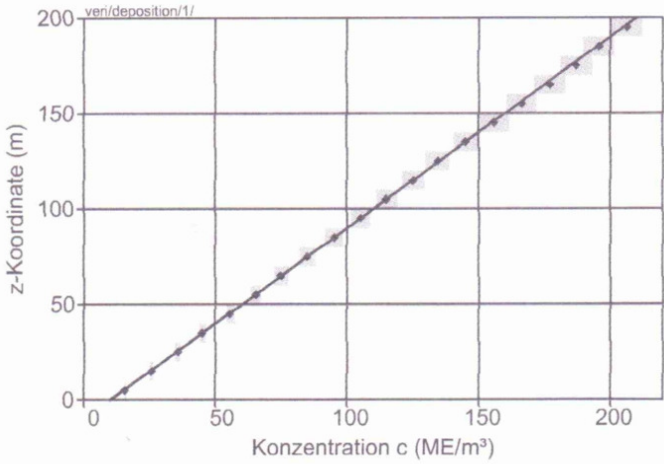
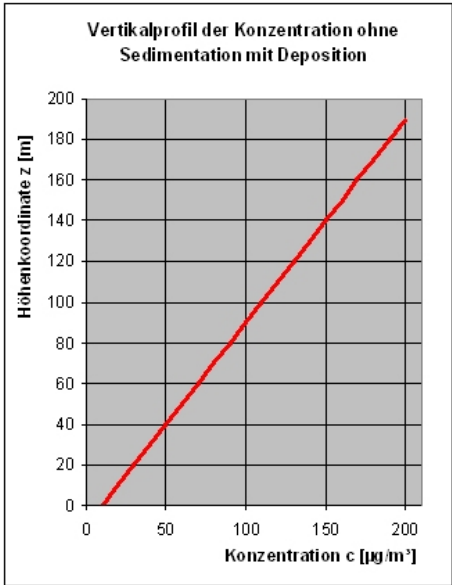


BILD 6: Vertikalprofil der Konzentration bei Deposition mit $v_d = 0,1 \text{ m/s}$ ohne Sedimentation. Die Turbulenz ist homogen ($K = 1 \text{ m}^2/\text{s}$), die Quelle bei $z = 200 \text{ m}$ emittiert konstant mit $F_c = 1 \text{ ME}/\text{m}^2\text{s}$.

Bild A01.09 Richtiger Konzentrationsverlauf nach GI (A01.16)

Bild A01.10 Fehlerhafter Konzentrationsverlauf nach AUSTAL/PARTIKELMODELL (77, S.31)

Die Bodenkonzentration wird mit $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (vergl. (66)) fehlerhaft angegeben. **Die tatsächliche Konzentration beträgt $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Hinsichtlich der Berechnung der Bodenkonzentrationen beträgt der Fehler in dieser Darstellung damit 50%.**

Bild A01. 12/11

Sedimentation ohne Deposition

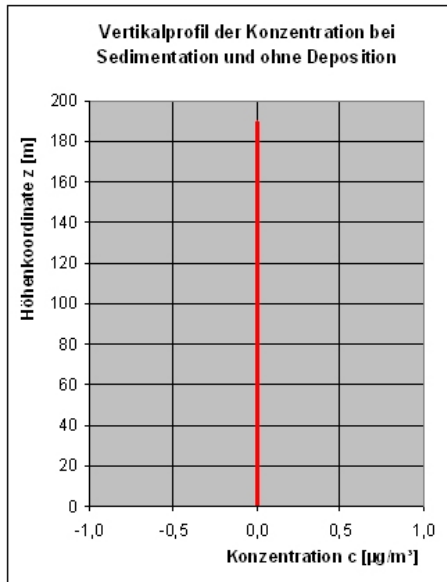


Bild A01.11 Richtiger Konzentrationsverlauf nach Gl (A01.10)

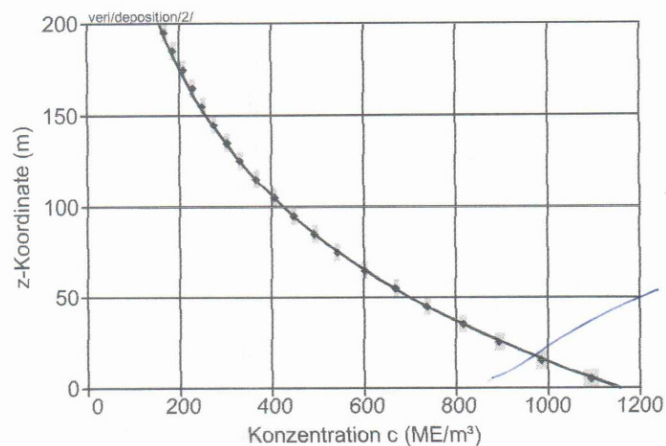


BILD 7: Vertikalprofil der Konzentration bei Sedimentation mit $v_g = 0,01 \text{ m/s}$ und ohne Deposition. Die Turbulenz ist homogen ($K = 1 \text{ m}^2/\text{s}$). Die durchgezogene Kurve ist der theoretische Verlauf nach Gleichung (4.5) für $F_c = 0$. Die über die gesamte Höhe gemittelte Konzentration hat den Wert $500 \text{ ME}/\text{m}^3$.

Bild A01.12 Fehlerhafter Konzentrationsverlauf nach AUSTAL/PARTIKELMODELL (77, S.33)

Nach den Eingabeparametern der Tabelle A01.08 ist hier der Quellterm gleich Null. Es ist verwunderlich und nicht einzusehen, warum das AUSTAL/PARTIKELMODELL Konzentrationen im Kontrollraum berechnet, wenn überhaupt keine Emissionen auftreten. Von den Autoren*) wird hierzu keine Erklärung gegeben. Weiterhin ist in dieser Graphik zu erkennen, dass der Konzentrationsgradient am Boden negativ ist. Die Konzentrationen erreichen mit $1140,1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ am Boden das Maximum, um nach oben exponentiell wieder abzufallen, was nicht nachvollzogen werden kann. Man hätte erkennen müssen, dass in einem solchen Fall keine Deposition in den Boden, sondern nur umgekehrt aus dem Boden heraus in die Atmosphäre, stattfinden müsste. Außerdem kommt noch bei fehlender Emission die unrealistische Größenordnung der Konzentration von ca. $1 \text{ mg}/\text{m}^3$ am Boden hinzu, was man nicht hätte übersehen können. Der ausgewiesene Konzentrationsverlauf ist völlig abwegig und physikalisch nicht zu begründen.

Bei fehlender Emission ergibt sich nach Gl (A01.10) und GL (A0.14) nur die Trivillösung einer verschwindenden Konzentration, was die Graphik A01.11 belegt.

Bild A01.14/13

Sedimentation mit Deposition

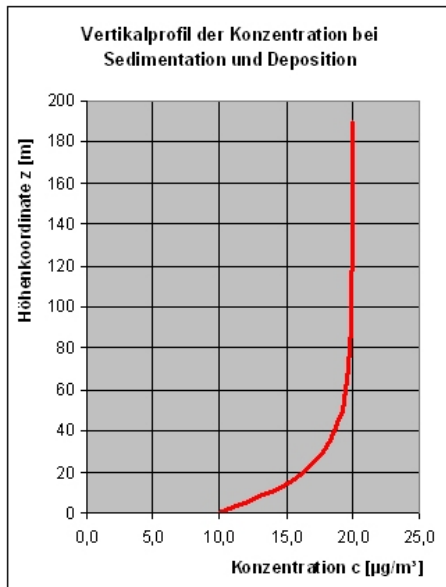


Bild A01.13 Richtiger Konzentrationsverlauf nach GI (A01.10)

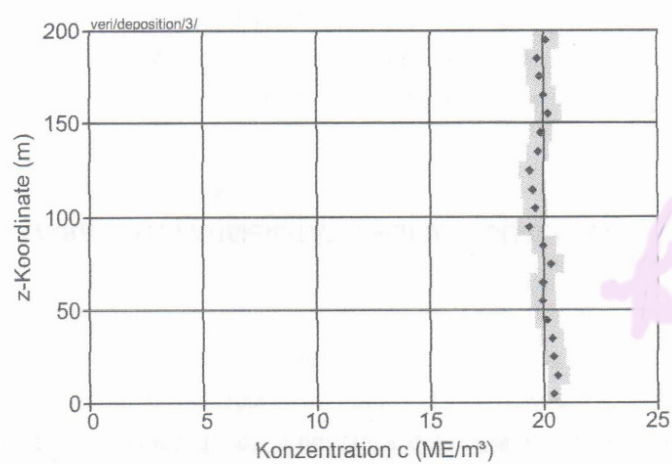


BILD 8: Vertikalprofil der Konzentration bei Deposition mit $v_d = 0,05$ m/s und Sedimentation mit $v_s = 0,05$ m/s. Die Quelle bei $z = 200$ m emittiert konstant und erzwingt eine Massenstromdichte $F_c = 1$ ME/m²s. Der theoretische Wert der Konzentration ist $c(z) = 20$ ME/m³.

Bild A01.14 Fehlerhafter Konzentrationsverlauf nach AUSTAL/PARTIKELMODELL (77, S.33)

Die für diesen Fall ausgewiesene Bodenkonzentration beträgt fälschlicherweise $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$, die tatsächliche beläuft sich auf $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$. **Der damit für die Bodenkonzentration berechnete Fehler liegt bei 100 %.** Sofort zu erkennen ist auch, dass der Konzentrationsgradient am Boden gleich Null ist, wodurch keine Deposition zulässig wäre. Man hätte sofort erkennen müssen, dass das Simulationsergebnis im Widerspruch zu der getroffenen Annahme eines endlichen Depositionsstromes steht. Es wäre zu erklären, wie man sich bei einem solchen Simulationsergebnis das Eindringen von Stoff in den Boden vorstellen kann. Auch in diesem dritten Fall sind weder die Größenordnungen der berechneten Konzentrationen noch der vertikale Konzentrationsverlauf plausibel.

Für alle drei betrachteten Beispiele, wird in (66) wieder darauf hingewiesen, dass sich diese Lösungen nur nach einer kurzfristigen Freisetzung einstellen. Was dieser Hinweis bedeuten soll, kann auch hier nicht erkannt werden. Bei den behandelten Ausbreitungsfällen handelt es sich ausnahmslos um stationäre Situationen, bei denen auch von einer zeitunabhängigen Emission auszugehen ist. Außerdem wird das Lösungsverhalten so dargestellt, als wäre es nur für eine Quellhöhe von 200m zutreffend. Man geht offensichtlich davon aus, dass die Konzentrationsverteilung von der Quellhöhe abhängig ist, was physikalische Überlegungen allerdings nicht zu lassen. Ein vernünftiges numerisches Experiment hätte darin bestehen müssen nachzuweisen, dass die Lösungen von der Quellhöhe unabhängig sind und nicht umgekehrt. Dieser wichtige Nachweis wurde nicht erbracht.

Nach diesen Darlegungen ist schlussfolgernd festzustellen, dass mit dem AUSTAL/PARTIKELMODELL keine vernünftigen Bodenkonzentrationen

berechnet werden können. Auch die vertikalen Konzentrationsverläufe sind fehlerhaft. Die Vorstellung, es handelt sich um eine instationäre Lösung ist völlig unverständlich. Eine Validierung mit diesen analytischen Lösungen ist fehlgeschlagen. Sie sind spekulativ ermittelt und stehen im Widerspruch zu strömungsmechanischen und thermodynamischen Erhaltungssätzen. Den Autoren*) fehlt das erforderliche Wissen, eigene Simulationsergebnisse auf Plausibilität überprüfen zu können. Auch sind sie nicht in der Lage anerkannte Fallbeispiele zur Validierung ihres Modells aus der Literatur herauszusuchen.

II.2.3 BERLJAND Lösung

In (66) wurden für verschiedene Quellentfernungen die Lösung nach AUSTAL/PARTIKELMODELL mit dem BERLJAND Profil verglichen. Bei der Auswertung bezieht man sich allerdings lediglich auf bodennahe Konzentration in 5m Höhe. Von Interesse sind jedoch die unmittelbaren Konzentrationen am Boden für $z=0m$. Der im Abschnitt II.1.2 ermittelte Fehler von ca. 70 % bezieht sich auf die bodennahen Konzentrationen. Über die Abweichung für die unmittelbaren Bodenkonzentrationen kann daher zunächst keine Aussage getroffen werden. Allerdings hat man die Möglichkeit durch Auswertung des BERLJAND Profils, nach Gl A01.33, die Konzentrationsverteilungen in beliebiger Höhe einschließlich Boden zu ermitteln. Damit ist man in der Lage, den theoretischen Unterschied zwischen Bodenkonzentrationen und bodennahen Immissionen zu ermitteln. Es wird damit auch die Bedeutung der Bodenkonzentrationen verdeutlicht, und dass diese in eine Validierung unbedingt mit einzubeziehen sind. Ein hervorgehobenes Qualitätsmaß ist dabei die Erfüllung der Randbedingung nach Gl (A01.34). Warum man die unmittelbaren Bodenkonzentrationen in eine Berechnung und Validierung nicht mit einbezogen hat ist unverständlich und wird auch nicht erläutert. Dieses Versäumnis der Autoren*) ist hiermit gewissermaßen nachgeholt. Um hierzu Aussagen treffen zu können, ist die Lösung der Gleichung (A01.22) numerisch auszuwerten.

$$c(z) = A_0 \cdot e^{A_1} \cdot J_0(A_2) \quad \text{Gl (A01.33)}$$

Lösung von Gl (A01.22)

$$\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)_{z=0} = 0 \quad \text{Gl (A01.34)}$$

$$A_0 = \frac{Q}{x \cdot (1+n) \cdot K'} \quad A_1 = -\frac{H \cdot u_H}{x \cdot K'} \cdot \frac{1 + \left(\frac{z}{H}\right)^{n+1}}{(1+n)^2} \quad \text{Gl (A01.35)}$$

$$A_2 = \frac{2}{x} \cdot \frac{\left(\frac{z}{H}\right)^{\frac{n+1}{2}} \cdot H \cdot u_H}{(1+n)^2 \cdot K'} \quad J_0(iA_2) = i^0 \cdot \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{A_2}{2}\right)^{2\mu}}{\Gamma(\mu+1) \cdot \Gamma(\mu+1)}$$

Parameter und BESSEL Funktion

Die damit erhaltenen Vergleichsergebnisse sind in den Bildern A01.16, A01.18, A01.20 und A01.22 graphisch dargestellt, jedoch ist aus Maßstabsgründen das Lösungsverhalten unmittelbar am Boden nicht erkennbar. Insbesondere ist nicht zu erkennen, ob die Randbedingung nach Gl (A01.34), welche die Höhe der Bodenkonzentration maßgeblich festlegt, erfüllt ist. Dass die Lösung Gl (A01.22) die Randbedingung erfüllt, ist bekannt und kann analytisch nachgewiesen werden.

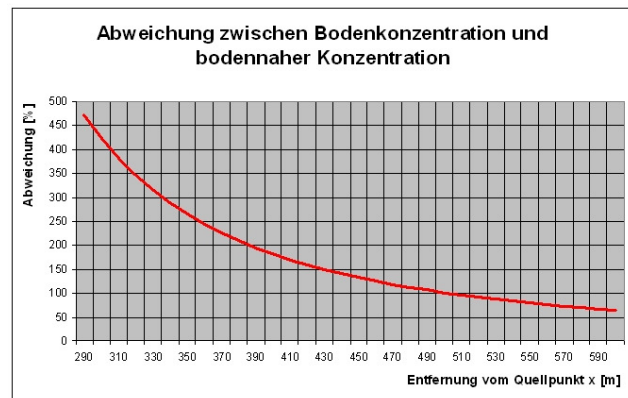


Bild A01. 15 Prozentuale Abweichung zwischen Bodenkonzentrationen für $z=0$ m und bodennaher Konzentration für $z=5$ m nach BERLJAND Lösung im Nahbereich

Wie hoch die Abweichung zwischen bodennahen Konzentrationen und Bodenimmissionen ausfallen, zeigt die Auswertung im Bild A01.15. Besonders im Nahbereich fällt diese Abweichung sehr deutlich aus und ist nicht zu unterschätzen. Es besteht daher auch das Erfordernis nachzuweisen, dass das AUSTAL/PARTIKELMODELL diesen Ansprüchen genügt. Eine Beschränkung auf $z=5$ m ist keinesfalls ausreichend, zumal auch hierfür im Nahbereich unter 500m bereits schon ein Fehler von größer 70% nachzuweisen ist. Der Fehler fällt eher noch größer aus.

Für die Entfernungen $x=500$ m, 1000m, 2000m und 4000m wurden mit dem BERLJAND Profil die Bodenkonzentrationen berechnet. Die Parameter, welche dazu verwendet wurden, sind in der nebenstehenden Tabelle A0.09 zusammengefasst dargestellt. Sie sind mit den Parametern in (77) identisch.

Parameter			
Höhe des Ausbreitungsraumes	$L_z =$	400,0	m
Diffusionsparameter	$K' =$	0,1	m/s
Quellhöhe	$H =$	100,0	m
Referenzgeschwindigkeit	$u_H =$	6,0	m/s
Quellstärke	$Q =$	1,0	kg/s
Exponent	$n =$	0,3	

Tabelle A01.09 Eingabeparameter wie in (77) zur Berechnung der Konzentrationen nach BERLJAND Lösung

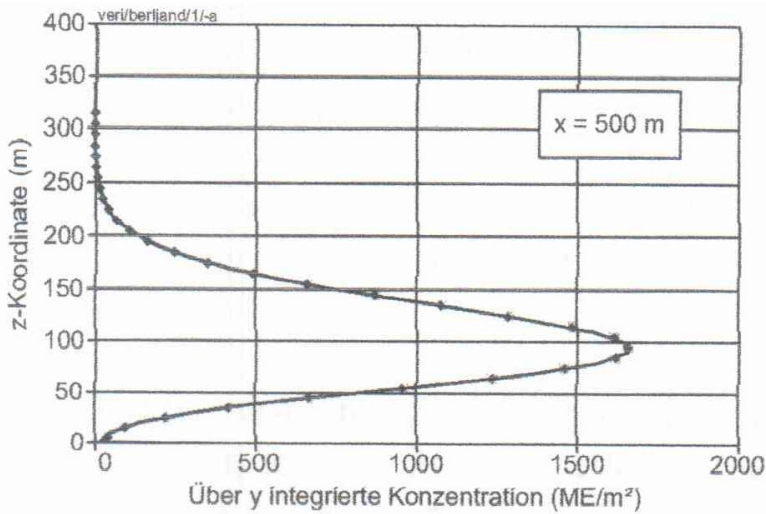


Bild A01. 16
AUSTAL/PARTIKELMODELL und BERLJAND LÖSUNG,
Vertikalprofile der Konzentrationen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL
und BERLJAND Lösung für x=500 m, die Erfüllung der
Randbedingung ist nicht zu erkennen

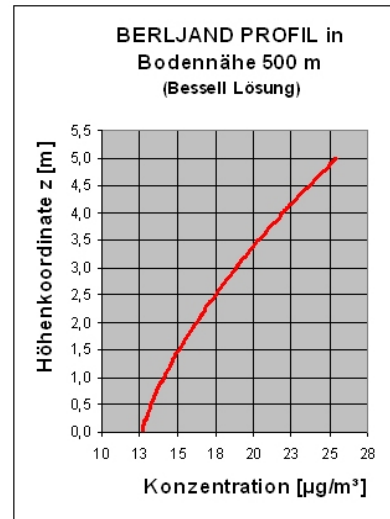


Bild A01.17 BERLJAND Lösung
erfüllt die Randbedingung,
für AUSTAL/PARTIKELMODELL
nicht nachgewiesen

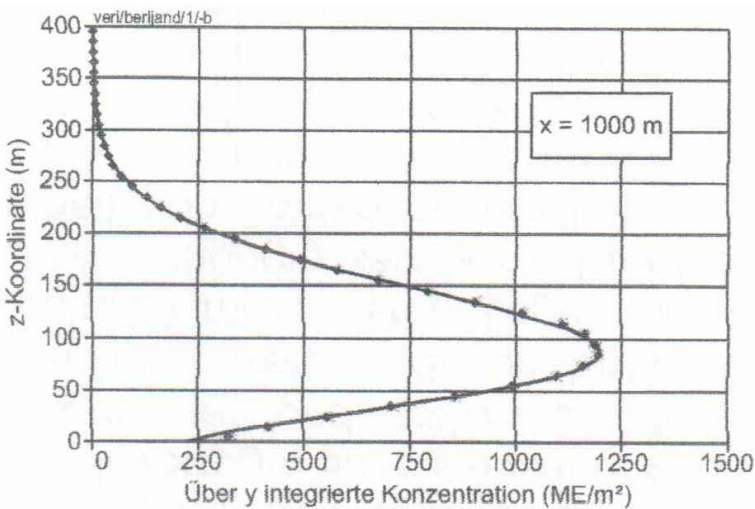


Bild A01.18
AUSTAL/PARTIKELMODELL und BERLJAND LÖSUNG,
Vertikalprofile der Konzentrationen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL
und BERLJAND Lösung für x=1000 m, die Erfüllung der
Randbedingung ist nicht zu erkennen

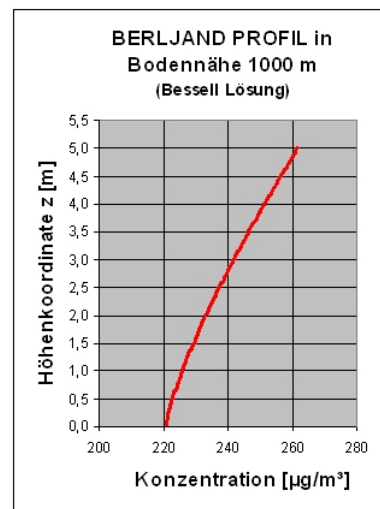


Bild A01.19 BERLJAND Lösung
erfüllt die Randbedingung,
für AUSTAL/PARTIKELMODELL
nicht nachgewiesen

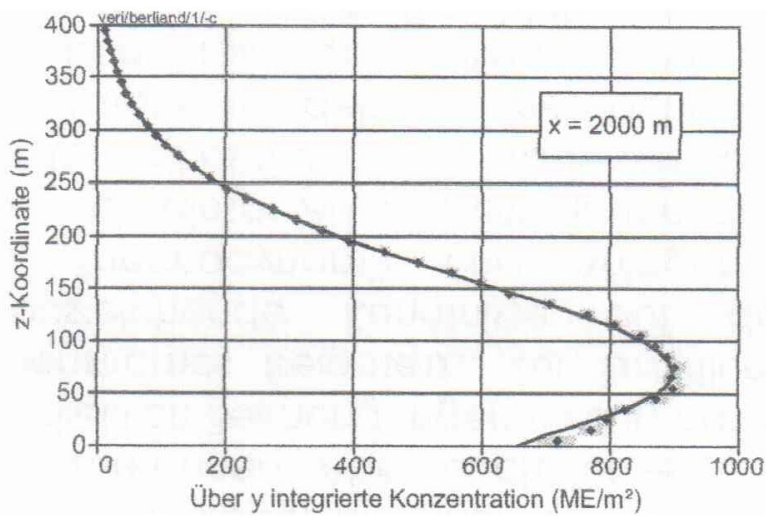


Bild A01.20
AUSTAL/PARTIKELMODELL und BERLJAND LÖSUNG,
Vertikalprofile der Konzentrationen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL
und BERLJAND Lösung für $x=2000\text{ m}$, die Erfüllung der
Randbedingung ist nicht zu erkennen

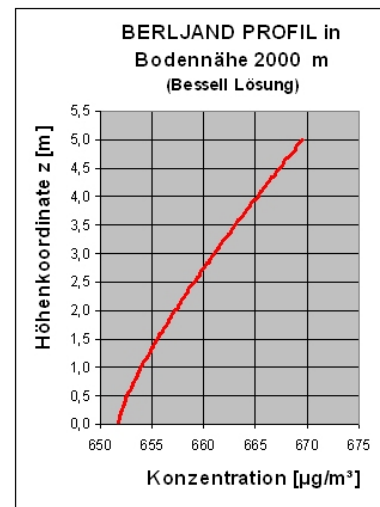


Bild A01.21 BERLJAND Lösung
erfüllt die Randbedingung,
für AUSTAL/PARTIKELMODELL
nicht nachgewiesen

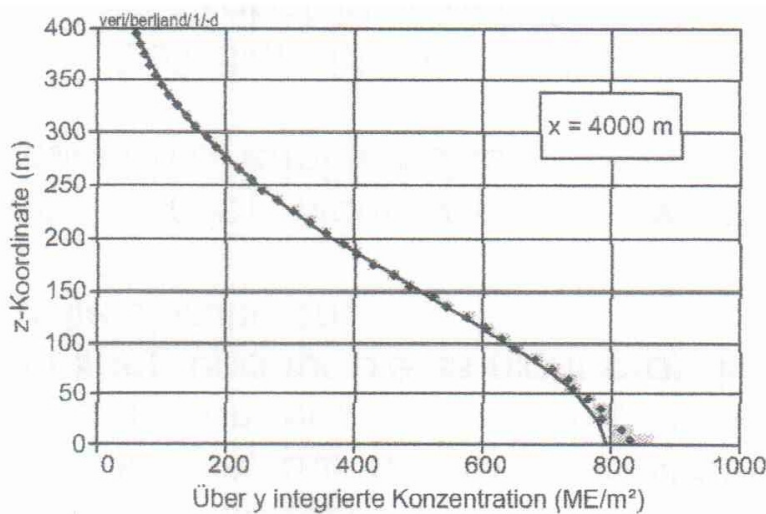


Bild A01.22
AUSTAL/PARTIKELMODELL und BERLJAND LÖSUNG,
Vertikalprofile der Konzentrationen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL
und BERLJAND Lösung für $x=4000\text{ m}$, die Erfüllung der
Randbedingung ist nicht zu erkennen

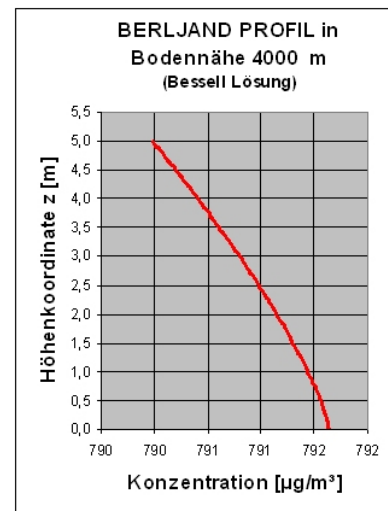


Bild A01.23 BERLJAND Lösung
erfüllt die Randbedingung,
für AUSTAL/PARTIKELMODELL
nicht nachgewiesen

Die Ergebnisse sind in den Bildern A01.17, A01.19, A01.21 und A01.23 dargestellt. Man kann aus den Graphiken erkennen, dass die Randbedingung nach GI (A01.34) erfüllt ist.

Die entsprechenden Nachweise für das AUSTAL/PARTIKELMODELL sind nicht geführt.

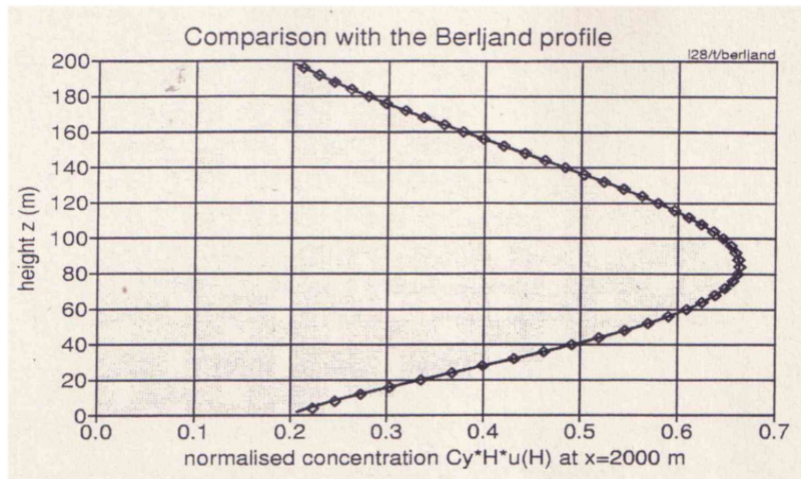


Bild A01.24
AUSTAL/PARTIKELMODELL und BERLJAND LÖSUNG,
Vertikalprofile der Konzentrationen nach AUSTAL/PARTIKELMODELL
und BERLJAND Lösung für $x=2000\text{ m}$, die Erfüllung der
Randbedingung ist nicht zu erkennen

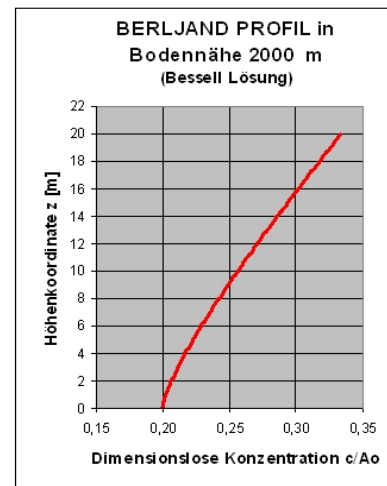


Bild A01.25 BERLJAND Lösung
erfüllt die Randbedingung,
für AUSTAL/PARTIKELMODELL
nicht nachgewiesen

In (83) ist mit variierten Eingabeparametern ein weiterer Fall berechnet worden. Die Eingabeparameter sind der Tabelle A01.10 zu entnehmen. Die Verhältnisse gestalten sich hier ebenso wie für die obigen Fallbeispiele beschrieben. Die Ergebnisse hierzu sind in den Bildern A01.24 und A01.25 dargestellt.

Parameter		
Höhe des Ausbreitungsraumes	$Lz =$	200,0 m
Diffusionsparameter	$K' =$	0,1 m/s
Quellhöhe	$H =$	100,0 m
Referenzgeschwindigkeit	$uH =$	10,0 m/s
Quellstärke	$Q =$	1,0 kg/s
Exponent	$n =$	0,3
Quellentfernung	$x =$	2000,0 m

Tabelle A01.10 Parameter nach (83)

Auch hier ist die geforderte Randgängigkeit nach Gleichung GI (A01.34) für das AUSTAL/PARTIKELMODELL nicht nachgewiesen.

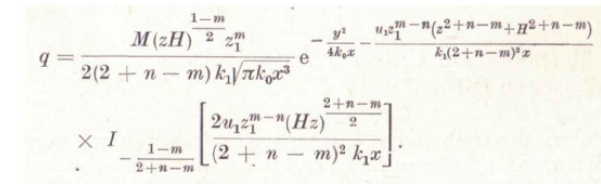
Man könnte Bereitschaft zeigen, über diesen Mangel hinwegzusehen, jedoch ist diese Großzügigkeit für Anwendungen im Nahbereich und für unmittelbare Bodenkonzentrationen nicht hinzunehmen, wenn man die erheblichen Unterschiede in Betracht zieht, welche in der Graphik A01.15 ausgewiesen sind.

Bei einer Quellentfernung von ca. 300m beträgt der Unterschied das Vierfache der Bodenkonzentration. Bei einer Entfernung von 500m das immerhin noch das Zweifache. Hinzu kommt, dass der Fehler zwischen AUSTAL/PARTIKELMODELL und der BERLJAND Lösung bei 500m Entfernung für die bodennahe Schicht von 5m ohnehin schon bei ca. 70% liegt, was aus dem Bild A01.04 mühelos zu erkennen und nachzurechnen ist. Diese Fehlerabweichung ist unbedingt noch mit hinzuzurechnen. Diese erheblichen Abweichungen sind nicht zu akzeptieren.

Auch dieses Ergebnis belegt, dass das AUSTAL/PARTIKELMODELL eher für größere Entfernungen einsetzbar ist, als für den Nahbereich.

Im Zusammenhang mit der Auswahl von geeigneten BERLJAND Lösungen zur Validierung wäre noch anzumerken, dass man die Lösung Gl (A01.35) bzw. Gl 2, nach Formeltafel A01.01 verwendet. Die Formeltafel belegt, dass es sich um keine von BERLJAND angegebenen Originallösung handelt. Die BERLJAND Original Lösungen werden in der Formeltafel durch die Beziehungen Gl 1 und Gl 2 beschrieben. Beide Gleichungen sind zur Validierung stationärer dreidimensionaler

Ausbreitungsvorgänge geeignet. Obwohl man dreidimensionale Simulationen durchführen möchte, verzichtet man auf eine Validierung mit dreidimensionalen Lösungen, was zumindest erklärungsbedürftig ist. Zumindest hätte man die Bodenkonzentrationen flächendeckend validieren müssen. Statt einer dreidimensionalen verwendet man eine zweidimensionale Lösung nach Gl 2 der Formeltafel. Damit ver gibt man sich die Möglichkeit, das Ausbreitungsmodell flächendeckend bodennah zu validieren. Auch zur Verfügung stehende Windkanalmessungen werden dazu nicht genutzt.



$$q = \frac{M(zH)^{\frac{1-m}{2}} z_1^m}{2(2+n-m)k_1\sqrt{\pi k_0 x^3}} e^{-\frac{y^2}{4k_y x} - \frac{u_1 z_1^{m-n}(z^2+n-m+H^2+n-m)}{k_1(2+n-m)^2 x}}$$

$$\times I_{-\frac{1-m}{2+n-m}} \left[\frac{2u_1 z_1^{m-n}(Hz)^{\frac{2+n-m}{2}}}{(2+n-m)^2 k_1 x} \right]$$

GL 1

Originallösung nach BERLJAND (1), dreidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang

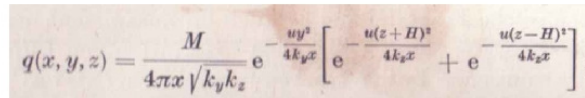
$$c(z) = A_0 \cdot e^A \cdot J_0(A_2)$$

$$A_0 = \frac{Q}{x \cdot (1+n) \cdot K'} \quad A_1 = -\frac{H \cdot u_H}{x \cdot K'} \cdot \frac{1 + \left(\frac{z}{H}\right)^{n+1}}{(1+n)^2}$$

$$A_2 = \frac{2}{x} \cdot \left(\frac{z}{H}\right)^{\frac{n+1}{2}} \cdot \frac{H \cdot u_H}{(1+n)^2 \cdot K'} \quad J_0(A_2) = i^0 \cdot \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{A_2}{2}\right)^{2\mu}}{\Gamma(\mu+1) \cdot \Gamma(\mu+1)}$$

GL 2

BERLJAND Lösung nach (74), zweidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang, verwendet zur Validierung durch die Autoren*



$$q(x, y, z) = \frac{M}{4\pi x \sqrt{k_y k_z}} e^{-\frac{uy^2}{4k_y x}} \left[e^{-\frac{u(z+H)^2}{4k_z x}} + e^{-\frac{u(z-H)^2}{4k_z x}} \right];$$

GL 3

GAUSS Verteilung nach BERLJAND (1), dreidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang

$$c(x, y, z) = \frac{E}{2 \cdot \pi \cdot v_x \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z} \cdot \exp\left(-0.5 \cdot \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right) \cdot \left\{ \exp\left(-0.5 \cdot \frac{(z-H)^2}{\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-0.5 \cdot \frac{(z+H)^2}{\sigma_z^2}\right) \right\}$$

GL 4

GAUSS Verteilung nach BERLJAND (1), dreidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang, verwendet zur Validierung durch IBS

Formeltafel A0.01

II.3 Validierung mittels Windkanalversuchen und Naturexperimenten

Windkanalversuche und Vergleiche mit Naturexperimenten werden beispielsweise in den Arbeiten (78) und (83) beschrieben. In (83) wird darauf hingewiesen, dass den „Modellvalidierungsarbeiten“, wie z.B. Vergleiche mit analytischen Lösungen sowie mit Windkanal- und Naturdaten eine besondere Aufmerksamkeit beizumessen ist. Es wird zusammenfassend allerdings hervorgehoben, dass „sämtliche Naturdaten in der einen oder anderen Weise unvollständig“ sind. „Aus der gesamten Datenmenge werden regelmäßig nur mehr oder weniger subjektiv ausgewählte Episoden, die der Erwartungshaltung des Messteams am besten entsprechen, veröffentlicht.“

Aus dieser durchaus nachvollziehbaren Auffassung muss die Schlussfolgerungen gezogen werden, dass insbesondere den Windkanalversuchen eine besondere Aufmerksamkeit beizumessen ist und ihre Möglichkeiten voll auszuschöpfen sind. Hier hat man die Gelegenheit, den Versuchsaufbau so zu wählen, dass zuverlässige Nachrechnungen durchgeführt werden können. Mittels analytischer Lösungen werden diese Versuche flankiert.

Der besondere Vorteil von Ausbreitungsrechnungen sollte sein, mit ihnen flächenverteilte Immissionskonzentrationen berechnen zu können. So wird man demzufolge auch nicht darauf verzichten können, dort wo geeignete Messwerte zur Verfügung stehen, auch flächenverteilte Simulationsergebnisse zur Validierung mit heranzuziehen. Die betrifft insbesondere flächendeckende Vergleiche mit Bodenkonzentrationen.

Der Vergleich allein mit Integralwerten ist wenig aussagefähig und für hochwertige Simulationsmodelle nicht ausreichend. Diese Aussage trifft gleichermaßen auch für die Durchführung von Naturexperimenten zu. Auch hier sollte man so weit wie möglich mit flächenverteilten Messwerten und Simulationen arbeiten.

II.3.1 Windkanalversuche

Im Zusammenhang mit der Durchführung von Windkanalversuchen wurden keine flächendeckende Vergleichsrechnungen durchgeführt, obwohl dazu sehr gute Möglichkeiten vorhanden gewesen wären. Man beschränkt sich allein darauf quer zur Windrichtung integrierte Mittelwerte zu bestimmen. Allerdings sind für Anwendungen im Vollzug des BImSchG, wie z.B. die Erarbeitung von Luftreinhalteplänen und Immissionsprognosen oder die Anfertigung von Störfallanalysen und Gefahrenabwehrplänen, integrale Mittelwerte von keinem Interesse. Von Interesse sind dagegen punktgenaue Aussagen zu Schadstoffkonzentrationen an bestimmt vorgegebenen Immissionspunkten. Die Ansprüche der Praxis sind höher, als man sie mit integralen Mittelwerten erfüllen könnte. Eine flächenverteilte Validierung ist daher unverzichtbar. Es muss weiterhin festgestellt werden, dass die

nachgewiesenen relativ großen Abweichungen im Nahbereich für die beschriebenen Aufgaben der Luftreinhaltung nicht hingenommen werden können. Instationäre Vergleichsrechnungen, wie sie für Aufgaben der Ausbreitung von beispielsweise schweren Gasen und Dämpfen zwingend erforderlich gewesen wären, werden nicht einmal erwähnt. Weitere analytische Untersuchungen zur Modellierung instationärer Ausbreitungsvorgänge sucht man ebenfalls vergebens.

Zusammenfassend ist einzuschätzen, dass zwar die Windkanalversuche auf einem hohen Niveau durchgeführt worden sind, aber die damit gegebenen vorzüglichen Möglichkeiten zur flächenverteilten Validierung von Ausbreitungsmodellen leichtfertig verschenkt worden sind. Es sind keine Versuche erkennbar, diese offensichtlichen Lücken durch weiterführende Überlegungen und Untersuchungen zu schließen.

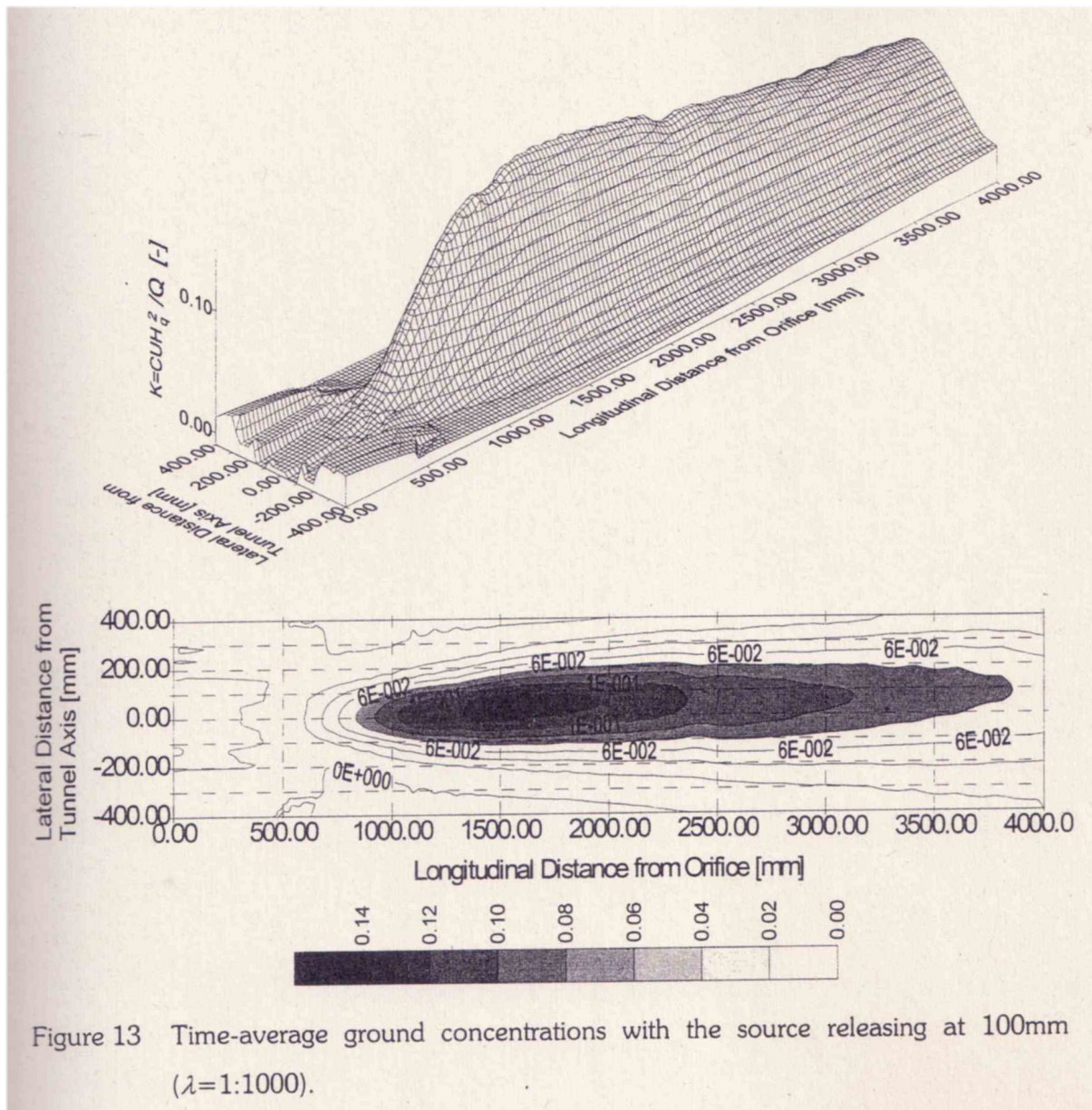


Bild A01.26 Im Windkanal ermittelte Bodenkonzentrationen

Das Bild A 01.26 lässt die Qualitätsansprüche der Windkanaluntersuchungen erkennen. Versuche der Autoren*), auf einem ebensolchen hohen Niveau das AUSTAL/PARTIKELMODELL zu validieren, sind nicht unternommen worden.

Dass Trajektorienmodelle, zu denen das AUSTAL/PARTIKELMODELL zu zählen ist, Ausbreitungsvorgänge über große Entfernungen, wie z.B. Langstreckentransporte, sehr gut beschreiben, ist bereits bekannt, z.B. (75 und 76). Ansprüche damit auch im Nahbereich Ausbreitungsrechnungen von hoher Qualität durchführen zu können, sind mit diesen Ergebnissen nicht begründet.

II.3.2 Naturexperimente

In (78) ist ein Prairie-Grass-Experiment beschrieben. In niedriger Höhe und ebenem Gelände wird Schwefeldioxid freigesetzt. Die Konzentrationen werden in Abständen 50, 100, 200, 400 und 800 m auf Kreisbögen gemessen. Es erhebt sich die Frage, weshalb man mit einer flächendeckenden Ausbreitungsrechnung nicht in der Lage sein sollte, diese Messwerte auch auf denselben Kreisbögen nachzurechnen. Auch hier beschränkt man sich auf die Ermittlung von wenig interessierenden Integralwerten.

Man begründet die mangelnde Validierung mit verschiedenen kaum verständlichen Problemen. Bei der Beschreibung hierfür stellt man beispielsweise fest, dass es sich bei den Messwerten nicht immer um bodennahe Konzentrationen handelt. Man erklärt diese Feststellung mit Ergebnissen von Modellrechnungen. Es ist die Frage erlaubt, weshalb man überhaupt solche Modellvergleiche durchführt, wenn man angeblich bereits schon über Ausbreitungsmodelle verfügt, mit denen man die Richtigkeit von Messwerten überprüfen kann, aber diese eigentlich validieren möchte.

instationär betrachtet. Anderweitige Betrachtungen sind wenig hilfreich und sind keine Beiträge zur Validierung von Ausbreitungsmodellen.

Hinweise und Feststellungen, wie z.B.

- Korrektur des Windfeldes und Einführung einer effektiven Windgeschwindigkeit v_{eff} ,
- Angaben darüber, wie viel Partikel zu betrachten sind,
- dimensionsbehaftete Angaben, um wie viel Meter sich die Partikel bei einem Umlauf verschieben, oder
- Angaben zu radialen Driftbewegungen

sind kaum nützlich und ersetzen keine analytischen Vergleiche. Sie belegen das Unvermögen der Autoren*), physikalische Sachverhalte mathematisch korrekt zu beschreiben.

Hinsichtlich der Wahl des Koordinatensystems bieten sich üblicherweise Zylinderkoordinaten an.

Zusammenfassend kann eingeschätzt werden, dass im Gegensatz zur Ankündigung kein dreidimensionales Windfeld in die Untersuchungen einbezogen wurde. Eine Validierung des Ausbreitungsmodells am Beispiel der gewählten ebenen Geschwindigkeitsverteilung ist nicht vorgenommen worden.

Auch wird die Erwartungshaltung, zu welcher sich der Lesende durch die viel versprechende Abschnittsbezeichnung „Dreidimensionales Windfeld“ veranlasst fühlen muss, nicht erfüllt. Vorwürfe, man würde absichtlich derartige verwirrende Begrifflichkeiten wählen, sind aber nicht stichhaltig.

III. EXTERNE BEITRÄGE ZUR ENTWICKLUNG VON AUSTAL/PARTIKELMODELL

Zur Dokumentation der Software AUSTAL/PARTIKELMODELL gehören noch die Anlagen:

- (81) HEIMANN D.: Ausbreitung von Spurenstoffen bei Schwachwindlagen, DLR Oberpfaffenhofen, 2001
- (80) RÖCKLE, R.: Gebäudeumströmung, IMA Freiburg, 2001
- (79) THIELEN H.; MARTENS R.: Beiträge der GRS im Rahmen der AUSTAL Workshops, Auftr. Nr. 400003 (AG 1983)

Die Arbeiten (81) und (80) sind von den Autoren*) nach eigenem Ermessen in Auftrag gegeben worden.

Analytische Vergleichsrechnungen werden in diesen Berichten nicht beschrieben. Aus diesem Grunde sind sie im Zusammenhang mit Modellvalidierungsarbeiten weniger von Interesse.

Die behandelten Themen betreffen interessante Untersuchungen zum Lösungsverhalten des Ausbreitungsmodells LASAT im Falle von schwachen Winden und Windstille, zur Ermittlung von Strömungsfeldern für Untersuchungsgebiete mit dichter Bebauung und zur Bestimmung verschiedener Modellparameter, wie z.B. Rauigkeitslängen und zur Auswahl von Grenzschichtprofilen.

In(81) wird die Empfehlung ausgesprochen, Ausbreitungsrechnungen nur für Windgeschwindigkeiten größer 1m/s durchzuführen. Diese Empfehlung ist insofern interessant, da bisher nur bekannt war, dass derartige Windgeschwindigkeiten sich hauptsächlich nur messtechnisch schwer erfassen lassen. Aus diesem Grunde auch werden Schwachwinde in Häufigkeitsverteilungen in der Regel nicht mit berücksichtigt. Sofern jedoch die entwickelten numerischen Modelle das Strömungs- und Ausbreitungsverhalten korrekt beschreiben ist die Möglichkeit, Schwachwinde auch entgegen der ausgesprochen Empfehlung mit berücksichtigen zu können, immer noch als ein besonderer Vorzug numerischer Algorithmen und Verfahren anzusehen. Die Feststellung, Winde mit einer Geschwindigkeit kleiner 1 m/s nicht berücksichtigen zu können, ist nicht nachvollziehbar und widerspricht allen Erfahrungen. Schließlich haben die Autoren*) im Zusammenhang mit den durchgeführten „Homogenitätstests“ selbst demonstriert, dass sie nicht nur für Schwachwinde Ausbreitungsrechnungen durchführen können, sondern auch für absolute Windstille. Der dort zusätzlich erhobene Anspruch, man habe die zeitliche Entwicklung des Diffusionsvorganges beschreiben können, ist nicht gerechtfertigt.

In (80) wird für AUSTAL/PARTIKELMODELL die Verwendung eines diagnostischen Windfeldes empfohlen. Mit ihnen werden Strömungsfelder berechnet, ohne die strömungsmechanischen Grundgleichungen überhaupt zur Kenntnis zu nehmen. Aus diesem Grunde sind sie nicht validierbar. Analytische Lösungen können hierfür nicht zur Verfügung gestellt werden. Die Geschwindigkeitskomponenten werden so variiert, bis das Strömungsfeld divergenzfrei ist. Divergenzfreie Strömungsfelder sind aber nur bei Flüssigkeitsströmungen, wie z.B. Wasser und Öle, zu beobachten. Es handelt sich im Gegensatz zur freien Atmosphäre um inkompressible Fluide mit unveränderlicher Dichte. Man kann analytisch belegen, dass ohne Dichteänderungen Strömungsumlenkungen in der freien Atmosphäre nicht denkbar sind, es sei denn, man lässt Straßenschluchten mit Flüssigkeiten durchfluten. Ein Umstand, welcher wohl alle vernünftigen Vorstellungen überfordert. Zutreffend ist allein die Verwendung prognostischer Strömungsmodelle mit veränderlicher Dichte.

IV. ZUSAMMENFASSUNG

Die Untersuchungsergebnisse können zusammengefasst werden:

1. Im Rahmen dieser Untersuchungen wurde folgende Primärliteratur
 - (83) JANICKE L.; KLUG W.; RAFAILIDES S.; SCHATZMANN M.; STRIMADIS D.; YAMARTINO R.: Validierung des „Kinematic Simulation Particle Model (KSP-Modell“ für Anwendungen im Vollzug des BImSchG, Bericht 98-295 433 54 des Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Hamburg 2000
 - (66) JANICKE: AUSTAL 2000, Programmbeschreibung, Dunum, 2002
 - (77) JANICKE, L.: IBJparticle, Eine Implementierung des Ausbreitungsmodells, Bericht IBB Janicke
 - (78) JANICKE U., JANICKE L.: Entwicklung eines modellgestützten Beurteilungssystems für den anlagenbezogenen Immissionsschutz, IB Janike, 2002
 - (85) IB JANICKE: Umweltmeteorologie, Atmosphärische Dispersionsmodelle. Partikelmodell, VDI 3945, Blatt 3 1996
 - (81) HEIMANN D.: Ausbreitung von Spurenstoffen bei Schwachwindlagen, DLR Oberpfaffenhofen, 2001
 - (80) RÖCKLE, R.: Gebäudeumströmung. IMA Freiburg, 2001
 - (79) THIELEN H.; MARTENS R.: Beiträge der GRS im Rahmen der AUSTAL Workshops, Auftr. Nr. 400003 (AG 1983).

studiert.

Die Arbeiten (81) und (80) wurden von den Autoren*) eigenständig in Auftrag gegeben und werden als Anlagen geführt. Zu den Anlagen gehört auch (79). Die Arbeiten (81) und (79) sind als eigenständige Beiträge der Deutschen Gesellschaft für Luft- und Raumfahrt bzw. der Gesellschaft für Reaktorsicherheit zur Entwicklung von AUSTAL/PARTIKELMODELL ausgewiesen.

Die maßgeblichen Berichte zur Entwicklung und Beschreibung von AUSTAL/PARTIKELMODELL, (66), (77), (78) und (85) sind außerordentlich unübersichtlich und weitestgehend verwirrend abgefasst. Eine geschlossene und übersichtliche Beschreibung der Aufgabenstellung, des Lösungsweges, der Ergebnisdarstellung und Softwareentwicklung sowie Hinweise zu einer Nutzenanwendung einschließlich Programmbeschreibung sind nicht zu erkennen.

Weiterhin wurde bevorzugt folgende Sekundärliteratur herangezogen:

(01) BERLJAND, M. E.: Moderne Probleme der atmosphärischen Diffusion und Verschmutzung der Atmosphäre, Akademie-Verlag Berlin, 1982

(70) ISAACSON, E.; KELLER, H.: Analyse numerischer Verfahren, Edition Leipzig, Verlag für Kunst und Wissenschaft

(73) KNESCHKE, A.: Differentialgleichung und Randwertprobleme, Verlag Technik, Berlin, 1964

(74) PRESS, W.; FLANNERY, B.; TEUKOLSKY, S.; W. VETTERLING: Numerical Recipes in C., Cambridge University Press 1989

(84) SCHLICHTING: Grenzschichttheorie, Verlag G. Braun, Karlsruhe, 1965

2. Die Primärliteratur (66), (77), (78) und (85) ist schwer verständlich. Der Lesende hat Mühe sich durchzuarbeiten.

Fortgesetzte Wiederholungen, die beispielsweise Darstellung von ein und denselben Sachverhalten in drei unterschiedlichen Berichten und einer VDI Richtlinie sowie z.B. die fehlerhafte physikalische und mathematische Beschreibung bekannter Sachverhalte erschweren die Lesbarkeit und das Verständnis.

Vielfach versprechen gewählte Abschnittsüberschriften bedeutend mehr, als nachfolgend im Text erläutert wird. So wird z.B. unter der Abschnittsbezeichnung „Test der Bahn im 3-dimensionalen Windfeld“ in (66) und „Dreidimensionales Windfeld“ in (77) der gleiche physikalische Sachverhalt falsch beschrieben. Es handelt sich nicht wie zu erwarten um ein dreidimensionales Windfeld, sondern lediglich um die starre Rotation eines Festkörpers mit zwei Geschwindigkeitskomponenten.

Die Autoren*) bedienen sich eigenartiger Begrifflichkeiten und erzeugen hohe Erwartungen, welche nicht erfüllt werden. So spricht man z.B. von Homogenitätstests und meint die Nachrechnung eines einfachen Diffusionsvorganges. Homogenisieren beschreibt eher einen Arbeitsvorgang der Prozessverfahrenstechnik als einen Transportvorgang auf dem Gebiet der Ausbreitung von Luftschadstoffen. Nur Fachkundige sind in der Lage, diese Sonderlichkeiten zu detektieren.

Die gewählten Bezeichnungen zur Beschreibung von Diffusion, Turbulenz und beispielsweise Rotation, sind irreführend. Sedimentations- und Depositionsvorgänge werden falsch beschrieben. Man formuliert Diffusionstensoren ohne zu erwähnen und nachzuweisen, dass seine Koordinaten den Transformationsgesetzen zu genügen haben und nicht willkürlich, wie die Autoren*) sich das vorstellen, gewählt werden können. Es ist

zu verhindern, dass Ausbreitungsmodelle allein durch eine Drehung des Koordinatensystems verschiedene Konzentrationen berechnen.

Internetanfragen zu merkwürdigen Simulationsergebnissen sind korrekt zu behandeln. Es wird z.B. berichtet, dass man mit AUSTAL/PARTIKELMODELL innerhalb von Gebäuden Konzentrationen berechnet, obwohl diese doch lediglich um- und nicht durchströmt werden. Man beantwortet diese Frage so, dass es Partikel gibt, welche die Gebäudezellen nicht „sehen“ und aus diesem Grunde auch einen Beitrag zur Gesamtimmission liefern. Man nimmt derartige Fragen nicht ernst. Tatsächlich wird mit dieser Antwort lediglich eine miserable Programmieretechnik verschleiert. Eine andere berechnete Frage betrifft beispielsweise die unterschiedliche Lage von Depositions- und Konzentrationsmaxima. Die Beantwortung dieser Frage ist ebenso abwegig zu beurteilen. Die Lage muss in jedem Fall identisch sein. Im Abschnitt II.1.1 und II.2.1 ist bereits nachgewiesen, dass Sedimentations- und Depositionsvorgänge durch die Autoren*) falsch beschrieben werden. Diese Ergebnisse dort beantworten die gestellte Frage schlüssig. Wie sollen Umweltingenieure und Immissionsschutzbeauftragte mit solchen Simulationsergebnissen und Erklärungen umgehen. Die Fragenden werden irregeführt.

Was soll der Hinweis bedeuten, dass sich nur dann konstante Konzentrationsverteilungen einstellen, wenn keine „äußeren Kräfte wirken“. Man versteht offensichtlich nicht die beschreibenden Differentialgleichungen und ist der Auffassung, dass durch sie auch Kräfte bilanziert werden. Besonders aufmerksam muss man zur Kenntnis nehmen, dass dabei auch noch zwischen inneren und äußeren Kräften unterschieden wird.

Die Aufzählung hier ist lediglich abgebrochen und kann beliebig fortgesetzt werden.

3. Die theoretischen Grundlagen des AUSTAL/PARTIKELMODELLS sind nicht umfänglich genug beschrieben. Die Gültigkeit der numerischen Lösungen ist in Frage zu stellen.

Für das AUSTAL/PARTIKELMODELL sind beispielsweise die für numerische Verfahren nach (70) verlangten Eigenschaften, wie KONSISTENZ, KONVERGENZ und STABILITÄT, nicht nachgewiesen. In den Arbeiten (83), (66), (77), (78) und (85) sucht man vergeblich dazu Hinweise.

Unter KONSISTENZ wird der Nachweis verstanden, dass die gewählten Approximationen die vorgegebene Differentialgleichung einschließlich aller partiellen Ausdrücke erfüllen. KONVERGENZ ist gegeben, wenn mittels Grenzübergänge nachgewiesen werden kann, dass die stationäre Lösung endlich ist und einen Limes besitzt. Die numerische Lösung unterscheidet sich von einer exakten lediglich um das Restglied der TAYLOR Entwicklung. STABILITÄT ist dann gewährleistet, wenn ein numerischer Fehler nicht

angefacht sondern gedämpft wird. Ist STABILITÄT nachgewiesen, so kann das Restglied der TAYLOR Entwicklung ermittelt und damit eine Fehlerabschätzung vorgenommen werden. Ohne STABILITÄT ist KONVERGENZ nicht gewährleistet. In (66), S. 26, wird ausgeführt, dass es möglich ist, „dass die Iterationen nicht konvergieren“. Dieser Hinweis belegt, dass keine allgemeingültigen Stabilitätsuntersuchungen durchgeführt wurden. Es ist daher tatsächlich zu erwarten, dass die Lösungen nicht konvergent sind, und das Verfahren nicht stabil ist.

An keiner Stelle aller Verfahrensbeschreibungen ist theoretisch nachgewiesen, dass durch den entwickelten Algorithmus die allgemeine Stofftransportgleichung

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

Allgemeine Stofftransportgleichung

approximiert wird. Lediglich im Zusammenhang mit der Durchführung von numerischen Experimenten werden ausgewählte physikalische Sachverhalte mit stark vereinfachten Gleichungen

$$-v_s \cdot \frac{\partial c}{\partial z} = K_{zz} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Deposition und Sedimentation

$$\frac{\partial c}{\partial t} = K_{zz} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + Q \quad K_{zz} = konst$$

Instationäre Diffusion

$$u_H \cdot \left(\frac{z}{H} \right)^n \cdot \frac{\partial c}{\partial x} = K'_{zz} \cdot z \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

BERLJAND Profil

untersucht. Vergleichsrechnungen zur Homogenität, Sedimentation und Deposition sind falsch, instationäre Lösungen werden nicht verglichen.

4. Zur Beurteilung der Gültigkeit von numerischen Verfahren sind analytische Vergleichsrechnungen unverzichtbar. Dieses Erfordernis wird in (83), (66) und (77) gleichlautend hervorgehoben. In diesem Zusammenhang werden sämtlich alle stationären Sedimentations- und Depositionsvorgänge mittels analytischen Lösungen und durch AUSTAL/PARTIKELMODELL fehlerhaft beschrieben. Es handelt sich in diesem Zusammenhang um drei bedeutsame Vergleichsrechnungen, mit denen man AUSTAL/PARTIKELMODELL validieren wollte. Die ermittelten Bodenimmissionen und die vertikalen Konzentrationsverläufe widersprechen dem II. Hauptsatz der Thermodynamik und verletzen den Massenerhaltungssatz. So berechnet man beispielsweise einen Depositionsstrom obwohl der dazu erforderlich konduktive Stoffstrom in entgegen gesetzter Richtung verläuft. Man versteht nicht, mit der NEUMANN'schen Funktion umzugehen, mittels welcher Sedimentations- und Depositionsvorgänge sicher beschrieben werden können.

5. Unter der Bezeichnung Homogenitätstest mit konstanter Zeitschrittweite werden unter Vernachlässigung konvektiver Bewegungen zwei durch Diffusion hervorgerufene einfache instationäre Ausgleichsvorgänge untersucht. Die Rechnungen werden mit Diffusionskoeffizienten durchgeführt, welche sich für diese zwei Falluntersuchungen durchschnittlich um den Faktor ca. 1,7 unterscheiden. Man kommt dort widersinnig zu dem Ergebnis, dass sich in beiden Fällen die Konzentrationen einheitlich nach dem 10. Tag ausgeglichen haben sollen.

AUSTAL2000, Programmbeschreibung

22a Depositionstest: Sedimentation ohne Deposition

Es fällt offensichtlich nicht auf, dass die Ausgleichszeiten von den Diffusionskoeffizienten nach der Proportionalität $t_2 \approx t_1 \cdot (K_{zz})_1 / (K_{zz})_2$ abhängen müssen. Hohe Diffusionskoeffizienten bewirken kleine Ausgleichszeiten und umgekehrt. Der Fehler beträgt ca. 67%. Man spricht von Turbulenz, obwohl man doch wissen müsste, dass turbulente Transportvorgänge an konvektive Bewegungen nach $u_i \cdot c_i$ zwingend gebunden sind, diese aber nach Aufgabenstellung ausdrücklich vernachlässigt worden sind. Die Autoren*) müssen sich die Frage gefallen lassen, was der Lesende von der in (66) zu findenden oben stehende Abschnittsbezeichnung halten soll. So verwirrend wie die Überschriften, so präsentieren sich auch die Ergebnisse.

6. AUSTAL/PARTICKELMODELL erhebt den Anspruch, auch instationäre Simulationen durchführen zu können. Auch dieser Vorzug ist zu validieren. Hinweise auf ein instationäres Verhalten erfährt der Lesende im Zusammenhang mit der Durchführung der bereits erwähnten Homogenitätstests und Vergleichsrechnungen zu

Vergleichsrechnung	Quelle	Stationäre Lösung [Tag]
Homogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt	[66], S. 52	10
Inhomogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt	[66], S. 53	10
Deposition keine Sedimentation	[66], S. 55	10
Sedimentation ohne Deposition	[66], S. 56	10
Deposition mit Sedimentation	[66], S. 57	10

Sedimentations- und Depositionsvorgängen. Alle durchgeführten Testrechnungen beschreiben unterschiedliche Aufgabenstellungen mit allein dafür formulierten Differentialgleichungen und verschiedenen Randbedingungen sowie variierten Stoffparametern. Dass die Ausgleichszeiten von der Größenordnung des Diffusionskoeffizienten abhängig sein müssen, wird ignoriert. Trotz dieser unterschiedlichen Aufgabenstellungen und Modellparameter wird behauptet, dass alle Ausgleichsvorgänge einheitlich nach 10 Tagen beendet gewesen sein sollen. Hinzu kommt, dass die ausgewiesenen Lösungsfunktionen ohnehin sämtlich fehlerhaft sind. Eine Zusammenstellung der durchgeführten Vergleichsrechnungen ist der nebenstehenden Tabelle zu entnehmen. Die Ergebnisse sind in jeder Hinsicht anzuzweifeln. Während im Falle Sedimentation und Deposition von einer stationären Differentialgleichung ausgegangen wird und dadurch die getroffene Aussage unstrittig ist, hat man im Falle der Homogenitätstests keine Aufgabenstellung und Differentialgleichung formuliert. Hier könnten die Autoren*) argumentieren, es

handele sich noch nicht um die stationäre Lösung. Diesem Argument kann leicht widersprochen werden. Schließlich haben die Autoren selbst nach (66), S. 52, vorgerechnet, dass aus Bilanzgründen die Ausgleichskonzentration höchstens nur 500 µg/m³ betragen kann, was stationäre Verhältnisse voraussetzt. In allen Berichten sucht man vergebens eine instationäre Lösung, mit welcher man AUSTAL/PARTIKELMODELL weiter hätte validieren können.

Nach diesem Ergebnis kommt man zwingend zu der Schlussfolgerung, dass AUSTAL/PARTIKELMODELL für instationäre und zeitabhängige Ausbreitungsvorgänge nicht validiert ist. Ein derartiger Anspruch ist durch kein einziges Simulationsergebnis gerechtfertigt. Nicht einmal ein ernsthafter Versuch ist zu erkennen.

7. Eine bedeutsame Vergleichsrechnung wurde mit dem sog. BERLJAND Profil durchgeführt. In (1) sind dazu verschiedene Lösungen, wie z.B. die Originallösung nach BERJAND (1), Gl. 1, und die GAUSS Verteilung nach BERJAND (1), Gl. 3, angegeben. Beides sind dreidimensionale stationäre Lösungen und sind zur Durchführung von Vergleichsrechnungen sehr gut geeignet. Die Modellgleichungen sind in der nebenstehenden Graphik zu erkennen. Wenn die Autoren*) den Anspruch erheben, ein dreidimensionales Ausbreitungsmodell

entwickelt zu haben, so hätte man auch erwarten dürfen, dass sie eine dreidimensionale analytische Lösung zur Validierung benutzen und dazu flächenverteilte Konzentrationen mit heranziehen. Die dazu erforderlichen Lösungen stehen bereits seit Jahrzehnten schon zur Verfügung. Sie werden auch umfänglich für praktische Nutzenanwendung verwendet. Statt diese Möglichkeit zu nutzen, verwendet man keine BERLJAND Originallösung

sondern lediglich eine vereinfachte zweidimensionale Verteilung nach Gl 2, welche in (74) beschrieben, aber nicht angegeben worden ist. Die zutreffende BESSELFUNKTION nullter Ordnung war eigens hierfür erneut zu entwickeln, um eine Nachrechnung zu ermöglichen.

$$q = \frac{M(zH)^{\frac{1-m}{2}} z_1^m}{2(2+n-m)k_1\sqrt{\pi k_0 x^3}} e^{-\frac{y^2}{4k_y x} - \frac{u_1 z_1^{m-n}(z^2+n-m+H^2+n-m)}{k_1(2+n-m)^2 x}}$$

$$\times I_{-\frac{1-m}{2+n-m}} \left[\frac{2u_1 z_1^{m-n}(Hz)^{\frac{2+n-m}{2}}}{(2+n-m)^2 k_1 x} \right]$$

GL 1

Originallösung nach BERJAND (1), dreidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang

$$c(z) = A_0 \cdot e^A \cdot J_0(A_2)$$

$$A_0 = \frac{Q}{x \cdot (1+n) \cdot K'}$$

$$A_1 = -\frac{H \cdot u_H}{x \cdot K'} \cdot \left(1 + \left(\frac{z}{H}\right)^{n+1}\right)$$

$$A_2 = \frac{2}{x} \cdot \left(\frac{z}{H}\right)^{\frac{n+1}{2}} \cdot H \cdot u_H$$

$$J_0(A_2) = i^0 \cdot \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{A_2}{2}\right)^{2\mu}}{\Gamma(\mu+1) \cdot \Gamma(\mu+1)}$$

GL 2

BERLJAND Lösung nach (74), zweidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang, verwendet zur Validierung durch die Autoren*)

$$q(x, y, z) = \frac{M}{4\pi x \sqrt{k_y k_z}} e^{-\frac{uy^2}{4k_y x}} \left[e^{-\frac{u(z+H)^2}{4k_z x}} + e^{-\frac{u(z-H)^2}{4k_z x}} \right];$$

GL 3

GAUSS Verteilung nach BERLJAND (1), dreidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang

$$c(x, y, z) = \frac{E}{2 \cdot \pi \cdot \sigma_x \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z} \cdot \exp\left(-0.5 \cdot \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right) \cdot \left\{ \exp\left(-0.5 \cdot \frac{(z-H)^2}{\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-0.5 \cdot \frac{(z+H)^2}{\sigma_z^2}\right) \right\}$$

GL 4

GAUSS Verteilung nach BERLJAND (1), dreidimensionaler stationärer Ausbreitungsvorgang, verwendet zur Validierung durch IBS

Wenn im Abschnitt II.3 der Einwand erhoben wurde, dass zur Validierung von AUSTAL/PARTIKELMODELL keine flächenverteilten Lösungen genutzt wurden, so ist belegt, dass dieser kritische Vorbehalt gerechtfertigt ist. Auch flächenverteilte Windkanalmessungen hätten zur Verfügung gestanden, um Bodenkonzentrationen zu validieren. Man nutzt nicht einmal die selbst ermittelten Messwerte nach Bild A01.26.

So ist zu verstehen, dass mit dem sog. BERLJAND Profil der Autoren*), was lediglich ein Profil der Autoren von (74) ist, nur zweidimensionale Konzentrationsverteilungen nach Bild A01.04 ermittelt und verglichen werden können, was man kaum als Stand der Technik bezeichnen kann. Die Auswertung der Autoren*) selbst lässt erkennen, dass AUSTAL/PARTIKELMODELL im Nahbereich für eine Quellpunktentfernung von 500m immer noch mit einem Fehler von ca. 70% behaftet ist. In kleineren Entfernungen vom Quellpunkt fällt dieser Fehler noch größer aus. Dabei ist noch mit zu berücksichtigen, dass nur Konzentrationen in Bodennähe für eine Höhe von 5m betrachtet wurden. Betrachtet man tatsächlich Bodenkonzentrationen, so fällt der Fehler noch größer aus. Das Konzentrationsmaximum in Strömungsrichtung wird außerdem mit einem Fehler von ca. 33% berechnet, was ebenfalls nicht hingenommen werden kann. Der Normbereich für numerische Lösungen liegt erfahrungsgemäß maximal bei ca. 10%.

Von einer zufrieden stellenden Validierung kann demnach auch hier nicht gesprochen werden.

Man könnte einwenden, dass es sich hierbei lediglich um theoretische Betrachtungen handelt, und sich die Verhältnisse in praktischen Anwendungen völlig anders darstellen. Dieser Auffassung ist nicht zu folgen. Bei den mittels dieser analytischen Untersuchungen festgestellten Abweichungen handelt es sich um einen systematischen Fehler, welcher durch Hinzunahme von weiteren Unwägbarkeiten eher vergrößert als verkleinert wird. Falls man dennoch im Einzelfall eine Minderung des Fehlers beobachtet, so handelt es sich um ausgesprochene Zufälligkeiten, welche nicht kalkulierbar sind. Grundsätzlich ist damit zu rechnen, dass der systematische Fehler in seiner Größenordnung erhalten bleibt.

Diese Überlegungen kann man auf praktische Anwendungsfälle übertragen. Nebenstehendes Bild verdeutlicht die geographische Lage einer Punktquelle und eines nahe gelegenen Immissionspunktes. Die Entfernung beträgt ca. 350m und liegt damit unter 500m mit dem systematischen Fehler von ca. 70%. Schaltet man alle übrigen Quellen ab und betrachtet aus der Häufigkeitsverteilung allein die Windrichtung, welche mit der Verbindung



zwischen Quelle und Immissionspunkt zusammenfällt, so unterscheiden sich die Ausbreitungsbedingungen zwischen Realfall und analytischer Lösung nur noch unerheblich. Die einzige Unsicherheit besteht in der veränderlichen Orographie, welche zur Minderung des Fehlers aber keinen Beitrag liefern wird. Man kann demzufolge davon ausgehen, dass man auch hier mit dem angegebenen systematischen Fehler rechnen muss. Nimmt man weitere Quellen und Windrichtungen hinzu, so werden sich die Verhältnisse grundlegend nicht ändern.

Man ist demzufolge darauf angewiesen, dass gerade im Nahbereich Ausbreitungsmodelle die Immissionsverhältnisse weitestgehend sicher beschreiben. AUSTAL/PARTIKELMODELL besitzt für den Nahbereich einen systematischen Fehler von mindestens ca. 70%,

8. Zur Approximation des Windfeldes stehen für AUSTAL/PARTIKELMODELL die diagnostischen Windfeldmodelle nach (80) sowie *TALdiames* nach (66) zur Verfügung. Die Besonderheit der diagnostischen Windfeldmodelle besteht darin, dass sie die strömungstechnischen Grundgleichungen, wie z.B. den Impulserhaltungssatz, ignorieren. Während man im Falle des atmosphärischen Stofftransportes anerkennt, dass analytische Vergleichsrechnungen unumgänglich sind, verzichtet man hier großzügig auf die Möglichkeit, das Strömungsmodell mit den Grundgleichungen der Strömungsmechanik zu validieren. Diese Merkwürdigkeit ist damit zu begründen, dass wegen fehlender Impulsgleichungen auch keine analytischen Lösungen angegeben werden können. Schlussfolgernd ist man offensichtlich der Meinung, man müsse sich um eine Validierung auch nicht kümmern. Man ermittelt lediglich ein divergenzfreies Strömungsfeld mit konstanter Dichte. Es ist allerdings bekannt, dass Divergenzfreiheit und Dichtekonstanz nur für inkompressible Fluide, wie z.B. für Wasser und Öle, zutreffend sind. Man kann sich nicht vorstellen, dass man damit Straßenschluchten durchfluten lässt und mit diesem Strömungsfeld Ausbreitungsrechnungen durchführt. Die Ignoranz geht soweit, dass man sich nicht einmal veranlasst fühlt, den Lesenden auf diesen Umstand hinzuweisen. Es ist nicht in Abrede zu stellen, dass man zur Berechnung einer hindernisfreien atmosphärischen Luftbewegungen in großen Höhen eine solche Annahme treffen kann, jedoch ist diese Vereinfachung im Falle von bodennahen Strömungen, welche maßgeblich von Bebauungsstrukturen und Geländeunebenheiten gekennzeichnet sind, nicht zu rechtfertigen und nach dem Stand der Technik auch nicht erforderlich. Es kann analytisch nachgewiesen werden, dass atmosphärische Strömungsumlenkungen ohne Dichteänderungen nicht möglich sind, sofern man die Gültigkeit der Gaszustandsgleichung und die Impulsgleichungen anerkennt. Die Annahme einer Divergenzfreiheit bleibt auch nicht ohne Folgen. So werden Geschwindigkeitsfelder bedenkenlos addiert, obwohl man doch wissen müsste, dass die zuständigen Bewegungsgleichungen zweiten Grades und damit nichtlinear sind, was die Anwendung des Superpositionsprinzips verbietet. Der damit verursachte Fehler wird nicht betrachtet. Immerhin stellt man Schnittstellen für andere Windfeldmodelle zur Verfügung, jedoch muss man davon ausgehen, dass diese in verschiedenen

Koordinatensystemen angeboten werden. Daraus ergibt sich das Erfordernis, eine Interpolation aller Feldfunktionen auf ein einziges Raster vornehmen zu müssen, was mit zusätzlichen Fehlerquellen verbunden ist. Um eine Beurteilung der damit verbundenen Fehlerfortpflanzung bemüht man sich nicht.

Die Verwendung diagnostischer Windfeldmodelle ist abzulehnen. Zur Approximation der Windfelder stehen exzellente prognostische Strömungsmodelle zur Verfügung. Moderne Verfahren betrachten die Berechnung des atmosphärischen Windfeldes und der Ausbreitung von Luftschadstoffen als eine geschlossene Anfangsrandwertaufgabe mit einem einheitlichen numerischen Algorithmus, wie es z.B. für die EULER'schen Verfahren zutreffend ist. Bei Ihnen ist KONSISTENZ; KONVERGENZ und STABILITÄT sicher gestellt. Sie ermöglichen eine theoretische und praktische Fehlerabschätzung, was zur Beurteilung aller Simulationsergebnisse unumgänglich ist.

9. AUSTAL/PARTIKELMODELL ist durch analytische Lösungen nicht validiert. Die durchgeführten Homogenitätstests, Vergleichsrechnungen zur Sedimentation und Deposition für stationäres und instationäres Ausbreitungsverhalten sind sämtlich falsch. Die Validierung mit einer BERLJAND Lösung bezieht sich lediglich auf zweidimensionale Ausbreitungsverhältnisse. Im Nahbereich bis zu 500m Quellentfernung beträgt der minimale Fehler ca. 70%. Flächendeckende Vergleichsrechnungen wurden nicht durchgeführt, obwohl hierfür BERLJAND Profile und weitere analytische Lösungen zur Verfügung stehen. Auch die vorhandenen Windkanaldaten wurden für eine flächenverteilte Validierung nicht genutzt. Allein die Vergleiche mit integralen Mittelwerten reicht nicht aus, um flächendeckend sichere Ausbreitungsrechnungen durchführen zu können. Nicht in einem einzigen Fall ist eine instationäre Lösung zur Validierung von AUSTAL/PARTIKELMODELL herangezogen worden.

10. In (78), S. 41, wird ausgeführt, dass das AUSTALPARTIKELMODELL auch Akkumulationen bei Windstille modellieren kann, allerdings wird diese Möglichkeit sogleich wieder in Frage gestellt. Die verwendeten Begriffe lassen darauf schließen, dass man die Berechnung von Immissionen bei geringen Windgeschwindigkeiten meint. Die Begründung, weshalb man diese Möglichkeit in Frage stellt, ist aus strömungstechnischer Sicht nicht verständlich und verwirrend. Flankiert wird diese Aussage durch Untersuchungsergebnisse, welche in (81) beschrieben worden sind. Auch dort kommt man zu der Schlussfolgerung, dass man mit Windgeschwindigkeiten unter 1 m/s nicht rechnen sollte. Abgesehen davon, dass derartige Erklärungen allen praktischen Erfahrungen widersprechen, muss man die Frage stellen, welchen Sinn dann noch Ausbreitungsrechnungen haben sollen, wenn man gerade die sensiblen meteorologischen Ausbreitungssituationen ausspart, welche z.B. für Grenzwertüberschreitungen verantwortlich sind. Als Folge einer solchen Praxis würde es sich im Rahmen von Ursachanalysen herausstellen, dass nur die Betreiber für Überschreitungen verantwortlich gemacht werden könnten. Die Begründung hierfür würde

dann so aussehen, dass das verwendete Ausbreitungsmodell meteorologisch komplizierte Ausbreitungssituationen nicht analysieren kann. Das mag zwar für AUSTAL/PARTIKELMODELL zutreffend sein, kann aber auf prognostische Strömungs- und Ausbreitungsmodelle nicht übertragen werden. Falls es sich allerdings herausstellen sollte, dass sich die Autoren von (66) und (81) schlichtweg geirrt haben sollten und hier eine Verwechslung vorliegt, dann wäre diese Merkwürdigkeit aufgeklärt. Bekannt ist nämlich, dass sich die Verhältnisse genau umgekehrt darstellen, als von den Berichterstatter angenommen wurde. Kleine Windgeschwindigkeiten können richtigerweise messtechnisch nur mit einem hohen Aufwand erfasst werden, jedoch kann man bis auf Singularitäten mit ihnen relativ sicher rechnen. Es sieht eher danach aus, dass das AUSTAL/PARTIKELMODELL für kleine Windgeschwindigkeit zusätzlich zu den ausgewiesenen hohen Fehlerquoten versagt, was angesichts der fehlenden theoretischen Grundlagen zu erwarten und verständlich ist.

11. Während nahezu alle prognostischen Strömungs- und Ausbreitungsmodelle aus graduierten Promotionsverfahren einschließlich akademischer Begutachtung hervor gegangen sind, ist dies für AUSTAL/PARTIKELMODELL nicht zutreffend. Es werden drei Workshops veranstaltet, zu denen 30 Experten auf dem Gebiet der Luftreinhaltung aus Landesämtern, Universitäten und weiteren wissenschaftlichen Einrichtungen eingeladen werden.

Die Teilnehmer hätten erwarten dürfen, dass ihnen wissenschaftlich fundierte Beiträge vorgestellt und fehlerfreie Arbeitsvorlagen übergeben worden wären. Man kann von ihnen nicht erwarten, die vorgetragenen Modellgrundlagen und Simulationsergebnisse auf Richtigkeit zu überprüfen.

12. Es ist die Frage aufzuwerfen, wie man mit der vorliegenden Ausführung von AUSTAL/PARTIKELMODELL erfolgreich beispielsweise Luftreinhaltungspläne und Immissionsprognosen erarbeiten und weitere verschiedene Anwendungen auf dem Gebiet des Umweltschutzes erfolgreich realisieren kann, obwohl nach diesen Untersuchungen davon auszugehen ist, dass dieses Strömungs- und Ausbreitungsmodell nicht validiert ist.

Diese Frage haben die Autoren*) selbst zu beantworten.