



Büro für Umweltinformation
Immissionsschutz und
Ausbreitungsmodellierung

Dr. Axel Zenger

Dr.A.Zenger
Werderstr. 6a
69120 Heidelberg

Unterschiedliche Verfahren zur Prognose atmosphärischer Immissionen im Rahmen von Umweltverträglichkeitsprüfungen - Methoden, Möglichkeiten und Grenzen

1. Einleitung

Atmosphärische Ausbreitungsmodelle sind das Bindeglied zwischen der Information über die luftseitige Freisetzung eines Schadstoffes (Emission) und der Beurteilung der zu erwartenden Konzentration in der Umgebung des Freisetzungsortes (Immission). Derartige Modelle werden unter anderem zur Immissionsprognose bei Umweltverträglichkeitsprüfungen, Genehmigungsverfahren, Risikoabschätzungen und in lufthygienischen Regionalstudien eingesetzt. Ausbreitungsmodelle sollten den Jahresmittel- und den 98-Perzentilwert¹ einer Schadstoffimmission prognostizieren können, da diese Größen meist zur Bewertung der lufthygienischen Relevanz herangezogen werden.

Für alle Verfahren, die eine atmosphärische Ausbreitungsmodellierung zur Beurteilung genehmigungsbedürftiger Anlagen vorsehen, schreibt die technische

¹ der 98-Perzentilwert ist die Immissionskonzentration, die in 2% der Jahresstunden überschritten wird.

Anleitung Luft²(1986) die Anwendung eines speziellen "Gaußmodells" vor. Für die Immissionsprognose im Rahmen von Luftreinhalteplänen schlägt die VDI-Richtlinie 3782 (1992), für die Störfallanalyse die VDI-Richtlinie 3783 (1987) die Verwendung eines speziellen Gaußmodells vor.

Die bisherigen Erfahrungen zeigen, daß Gauß'sche Ausbreitungsmodelle den Jahresmittel- und 98-Perzentilwert der atmosphärischen Immissionskonzentrationen in Standardsituationen meist zufriedenstellend³ prognostizieren. In vielen Fällen wird dieser Typ von Ausbreitungsmodell jedoch auch außerhalb seines fachlich begründeten Anwendungsbereiches eingesetzt, wodurch grobe Fehleinschätzungen auftreten können.

Um auch außerhalb von "Standardsituationen" eine realitätsnahe Vorhersage der zu erwartenden Immissionskonzentrationen zu ermöglichen, wurden in den letzten Jahren verschiedene "neuere" Modellierungsverfahren für die praxismgerechte Anwendung umgesetzt. Der mögliche Einsatzbereich der jeweiligen Modelltypen und die durch die unterschiedlichen Verfahren zu erwartenden Vorteile und Genauigkeiten sind jedoch nur selten detailliert aufgeschlüsselt.

Um die Anwendungsgebiete verschiedener Modelltypen zur Prognose der mittelskaligen⁴ atmosphärischen Immissionskonzentrationen grob voneinander abzugrenzen, werden im 2. Kapitel unterschiedlich komplexe Ausbreitungssituationen definiert. Bezug nehmend auf diese Unterteilung werden in Kap.3 verschiedene, hierbei jeweils anzuwendende Prognoseverfahren vorgestellt und deren Charakteristika und Genauigkeiten im 4. Kapitel miteinander verglichen.

² TA-Luft; erste allgemeine Verwaltungsvorschrift zum Bundes-Immissionsschutzgesetz vom 27.2.86

³ die Definition einer Standardsituationen folgt in Kap. 3.2.1, was eine zufriedenstellenden Übereinstimmung bedeutet wird in Kap. 4.1.1 dargelegt

⁴ unter "mittelskalig" werden horizontale Ausdehnungen von etwa 100 m bis ca. 10 km verstanden.

2. Atmosphärische Ausbreitung - unterschiedlich komplexe Fragestellungen

Die atmosphärische Ausbreitung einer passiven Luftbeimengung (hier im Weiteren als "Schadstoff" bezeichnet) wird durch die sogenannte

- Advektion, das ist die Verfrachtung einer Schadstofffahne durch das Strömungs- bzw. Windfeld
- und die Diffusion, das ist die Verbreiterung und damit die Verdünnung der Fahne durch Mischungsprozesse

bestimmt (Abb.1). Hinsichtlich der anzuwendenden Modellierungsmethoden zur Analyse der Ausbreitungsbedingungen im Micro-? ? und Meso-?-scale (etwa 100 m bis ca. 10 km; Orlanski, 1975), kann man die zu behandelnden Problemstellungen **grob** in die nachfolgend aufgeführten, nach zunehmender Komplexität geordneten Gruppen unterteilen (Abb.2):

- a.) ebenes Gelände ohne ausgeprägte lokale Windsysteme (d.h. ohne z.B. Land-Seewind, Flurwinde, Kaltluftabflüsse u.ä.) und ohne die Ausbreitung im Nahfeld dominierende Gebäudeeinflüsse
- b.) topographisch mäßig gegliedertes Gelände ohne ausgeprägte lokale Windsysteme
- c.) topographisch gegliedertes Gelände, niedrige Freisetzungshöhen und/ oder Vorherrschen lokaler Windsysteme, Ausbreitung unter komplexen Gebäudeeinflüssen

Nur im Fall a.) kann man von einer horizontal homogenen Windverteilung ausgehen und somit auf eine explizite Berechnung der räumlichen Struktur des Strömungsfeldes verzichten. Der Fall b.) stellt einen Übergangsbereich dar, der je nach Problemstellung unterschiedlich behandelt werden muß. Im Fall von topographisch gegliedertem Gelände, bei der Dominanz von lokalen Windsystemen und einer wesentlichen Modifikation der Ausbreitung durch Gebäudeeinflüsse ist eine explizite Modellierung des Strömungsfeldes und eine an eben dieses Windfeld gekoppelten Ausbreitungsmodellierung notwendig.

3 Modellkonzepte

Wie im Kapitel 2 erläutert, wird die atmosphärische Ausbreitung sowohl durch das Strömungs- bzw. Windfeld (Advektion) als auch durch die atmosphärische Mischung (turbulente Diffusion) bestimmt. Komplexe atmosphärische Ausbreitungsmodelle verfügen deshalb (im Gegensatz z.B. zu Gaußfahnenmodellen) über zwei getrennte Komponenten, mit denen zuerst das Windfeld und die Turbulenz und dann die Ausbreitung berechnet wird. Bevor die Einsatzbereiche und die Genauigkeiten der verschiedenen Verfahren diskutiert werden, sollen zunächst die Konzepte der gängigsten Windfeld- (Kap. 3.1) und Ausbreitungsmodelle (Kap. 3.2) vorgestellt werden.

3.1 Modelle zur Berechnung des atmosphärischen Strömungsfeldes

Strömungs- bzw. Windfeldmodelle berechnen flächenhaft das über topographisch gegliedertem Gelände oder im Bereich lokaler thermischer Windsysteme zu erwartende Strömungsfeld. Nur so können advektive⁵ Prozesse bei der Ausbreitungsmodellierung berücksichtigt werden. Je nach Komplexität der betrachteten Phänomene werden hierbei entweder **diagnostische** oder **prognostische** Windfeld- bzw. Strömungsmodelle eingesetzt.

3.1.1 Diagnostische Strömungsmodelle

Diagnostische Strömungs- bzw. Windfeldmodelle modifizieren ein vorgegebenes (durch einige Messungen angenähertes oder aber theoretisch approximiertes) Initialwindfeld unter Berücksichtigung der zugrunde gelegten Topographie derart, daß eine massenkonsistente Strömung erreicht wird (siehe z.B. Abb.3). Die iterative Annäherung des vorgegebenen (geschätzten) Windfeldes an eine massenkonsistente Strömung (Erfüllung der Kontinuitätsgleichung) ist der einzige physikalische Hintergrund derartiger Modelle. Die Auswirkung einer stabilen atmosphärischen Schichtung auf das dreidimensionale Windfeld kann dabei

⁵ Umlenkungs- bzw. Kanalisierungseffekte durch topographische Gegebenheiten, lokale Transportphänomene durch thermische Windsysteme u.ä.

ansatzweise durch die Verminderung der vertikalen Ausweichbewegung ⁶ mit Hilfe von "Steuerparametern" erreicht werden. Hierbei liegt jedoch bisher noch kein allgemeiner, verifizierter Parametersatz vor. Eine labile atmosphärische Schichtung wird in diagnostischen Windfeldmodellen nur über die Erstellung des Initialwindfeldes, jedoch nicht über eine modifizierte Berechnung der vertikalen Ausgleichsbewegung berücksichtigt.

Thermische Prozesse, wie z.B. Tal- und Bergwindssysteme, Kaltluftabflüsse u.ä., aber auch dynamische Effekte wie z.B. Ablösevorgänge hinter Geländeerhebungen (Leewirbel u.ä.) und zeitabhängige Prozesse können mit diagnostischen Windfeldmodellen nicht explizit⁷ berechnet werden.

Für die Berechnung des Strömungsfeldes über einem topographisch mäßig gegliedertem Gelände mit einer maximalen effektiven Geländeneigung von weniger als etwa 10% ⁸, welches nicht durch lokale Windsysteme und Wetterlagen mit labiler Schichtung dominiert wird und dessen Initialwindfeld realistisch vorgegeben werden kann, liefern diagnostische Windfeldmodelle jedoch vergleichsweise gute Ergebnisse.

Diagnostische Windfeldmodelle zeichnen sich durch relativ geringe Rechenzeiten aus. Das berechnete Strömungsfeld ist von der Windgeschwindigkeit unabhängig. Dadurch ist es möglich, die große Anzahl⁹ von Windfeldern vorzugeben, die bei der Berechnung von Jahresmittel- und 98-Perzentilwerten benötigt werden.

⁶ dies führt mit zunehmender Stabilität zu einem stärkeren Umströmen statt zum Überströmen eines Hindernisses

⁷ in manchen mikroskaligen, diagnostischen Windfeldmodellen werden die Rezirkulationszonen in Lee von einzelnen Gebäuden in parametrisierter Form vorgegeben. Komplexe Gebäudestrukturen können hiermit jedoch nur unzureichend behandelt werden.

⁸ dann tritt nach Taylor et al. (1987) keine Strömungsablösung in Lee der Geländeerhebung auf

⁹ Die TA-Luft-Rechnung unterscheidet 1944 verschiedene meteorologische Situationen denen prinzipiell jeweils ein Windfeld zugewiesen werden muß. Die unterschiedlichen Windgeschwindigkeiten sind bei den diagnostischen Modellen jedoch einfach skalierbar, die 6 Stabilitätsklassen werden meist zu zwei Gruppen (stabil und neutral) zusammengefaßt. Unter Berücksichtigung von 36 Windrichtungen ergeben sich damit 72 verschiedene Windfelder, die berechnet werden müssen.

Diagnostische Windfeldmodelle	
Vorteile	Zeitökonomisches Verfahren; Berechnung einer großen Anzahl von Strömungsfeldern als Grundlage zur Ermittlung von Jahresmittelwerten möglich
Nachteile	Kontinuitätsgleichung und Erstellung des Initialwindfeldes ist einzige physikalische Grundlage. Eingeschränkter Anwendungsbereich. Lokale (thermische) Windsysteme, labile Schichtung u.ä. Prozesse können nicht behandelt werden.
Anwendungsmöglichkeiten	Windfeldmodellierung in topographisch moderat gegliedertem Gelände. Ablöseeffekte und lokale (thermische) Windsysteme können nicht berücksichtigt werden.

3.1.2 Prognostische Strömungsmodelle

Im Gegensatz zu den diagnostischen Modellen werden in den prognostischen Strömungsmodellen explizit die dynamischen Grundgleichungen der atmosphärischen Strömungsmechanik¹⁰ verwendet. Prognostische Strömungsmodelle können je nach Modellkonzeption die wesentlichen dynamisch und thermisch induzierten meteorologischen Phänomene berücksichtigen, die eine räumliche Erstreckung zwischen wenigen Dekametern bis einigen hundert Kilometern und einen Zeitraum im Bereich von Minuten bis Tagen aufweisen. Dadurch wird die Untersuchung von z.B. Land-Seewindsystemen, nächtlichen Kaltluftabflüssen u.ä. möglich.

Je nach Behandlung der vertikalen Bewegungsgleichung unterscheidet man bei den prognostischen Mesoscale- Modellen zwischen sogenannten hydrostatischen und nicht hydrostatischen Verfahren. In den Modellen mit der "hydrostatischen Approximation" (wie z.B. in der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 6 anhand des Modells REWIMET beschrieben) werden bezüglich der Behandlung der vertikalen Bewegungsgleichung starke Vereinfachungen vorgenommen, so daß die minimale horizontale Maschenweite der Modelle mindestens 2 km und die maximale Steigung etwa 6° beträgt. "Hydrostatische" Modelle können für kleinräumige Fragestellungen somit nicht angewendet werden.

¹⁰ siehe z.B. Pielke (1984)

“Nicht hydrostatische Modelle“, die je nach Spezifikation mehr oder weniger uneingeschränkt eingesetzt werden können, sind hingegen so rechenintensiv, daß mit ihnen meist nur Einzelfalluntersuchungen durchgeführt werden. Von dem nicht hydrostatischen Modell FITNAH sind zwei Untersuchungen veröffentlicht (Thehos et al., 1994), bei denen ausgehend von 150 einzeln berechneten Windfeldern eine Immissionsprognose der Jahresmittelwerte ermittelt wurde. Die 150 betrachteten Situationen wurden dabei mit Hilfe einer Clusteranalyse ausgewählt. Zur Windfeldberechnung und Immissionsprognose benötigte eine Großrechenanlage fast 60 Stunden Rechenzeit. Da 150 Fälle zur Bestimmung eines 98-Perzentilwertes nicht ausreichen¹¹, konnte dieser hierbei nicht ermittelt werden.

Prognostische nicht hydrostatische Windfeldmodelle	
Vorteile	Physikalische Grundgleichungen werden explizit berücksichtigt. Eine hohe räumliche Auflösung ist möglich.
Nachteile	Sehr rechenzeitaufwendig
Anwendungsmöglichkeiten	Modellierung des Strömungsfeldes auch für thermisch und dynamisch geprägte Windsysteme

3.1.3 Strömungsmodelle für die praxisbezogene Ausbreitungsrechnung

Wind- bzw. Strömungsfelder über topographisch gegliederten Gelände oder beim Vorliegen thermischer Windsysteme können im Fall von komplexen Fragestellungen mit einer ausreichenden räumlichen Auflösung mit nicht-hydrostatischen prognostischen Modellen berechnet werden. Wegen der langen Rechenzeiten werden nicht hydrostatische Strömungsmodelle derzeit jedoch fast ausschließlich für Einzelfalluntersuchungen und zeitlich eng begrenzte Szenarienrechnungen eingesetzt. Die große Anzahl von verschiedenen (stationären) Strömungsfeldern, die als Grundlage zur Berechnungen von Jahresmittel- und vor allem von 98-Perzentilwerten benötigt werden, können im Rahmen von praxisorientierten Analysen zur Zeit realistischerweise wohl hauptsächlich nur von diagnostischen Modellen bereitgestellt werden.

¹¹ die TA-Luft-Rechnung berücksichtigt 1944 unterschiedliche Fälle

3.2 Modelle zur Berechnung der atmosphärischen Ausbreitung

Ausbreitungsmodelle berechnen den Transport und die Verdünnung einer Schadgasfahne (siehe Kap. 2, bzw. Abb.1). Im wesentlichen unterscheidet man zwischen den

- Teilchen-Simulations- (**Lagrange**),
- **K- (Euler)**
- und den **Gaußfahnen- und den Gauß-Puff**modellen.

Gaußfahnenmodelle stellen hierbei eine Besonderheit dar, da sie auf der analytischen Lösung einer stark vereinfachten Advektions-Diffusionsgleichung beruhen und keine ortsabhängigen Wind- und Turbulenzfelder vorgegeben werden können. Nachfolgend sollen die Grundlagen und die wesentlichen Merkmale der verschiedenen Ausbreitungsmodelle beschrieben werden.

3.2.1 Gaußfahnenmodelle

Für Fragen der Luftreinhaltung wurden (und werden) bislang meist Gaußmodelle eingesetzt. Dieser Klasse von Ausbreitungsmodellen liegt die analytische Lösung einer vereinfachten Advektions-Diffusionsgleichung zugrunde. Um die analytische Lösung zu erhalten wurde ein horizontal homogenes Windfeld, einheitliche Diffusionskonstanten, Stationarität und eine zu vernachlässigende Diffusion in Ausbreitungsrichtung vorausgesetzt. Diese den Anwendungsbereich zunächst sehr einschränkenden und nicht realistischen Annahmen werden jedoch durch die Verwendung von höhen- und abstandsabhängigen empirischen Ausbreitungsparametern, die durch Anpassung an Freilandexperimente gewonnen wurden, zum Teil kompensiert.

Voraussetzung zur Anwendung des Gauß'schen Modellansatzes ist, daß

- kontinuierliche Emissionen vorliegen
- nur Abstandsbereiche von ca. 100m^{12} bis einigen km untersucht werden
- möglichst ebenes bzw. nur gering gegliedertes Gelände vorliegt
- keine lokalen Windfelder dominieren
- windschwache Wetterlagen ($u < \text{ca. } 1 \text{ m/s}$) und Situationen mit großer Windscherung ausgeklammert werden

Der Vorteil von Gaußfahnenmodellen liegt in ihrer geringen Rechenzeit, der einfachen Handhabbarkeit und der Kopplung an eine große Zahl verschiedener experimenteller Freilanduntersuchungen. Es muß jedoch in jedem Fall genau überprüft werden, inwieweit die zugrunde gelegten Annahmen, Voraussetzungen und Eingangsgrößen zur Anwendung erfüllt sind.

Gaußfahnenmodelle können auch in gering bis mäßig strukturiertem Gelände eingesetzt werden. Grundlage der hierbei durchgeführten, sogenannten "Terrain-Korrektur" sind Ergebnisse aus der Theorie von Potentialströmungen und Windkanaluntersuchungen (siehe z.B. Hanna et al., 1982). Hierbei wird die Emissionshöhe (und nicht wie in manchen anderen Verfahren fälschlicherweise die Aufpunkthöhe) geländeabhängig modifiziert. Das Verfahren ist jedoch nur dann einzusetzen, wenn die Effekte, die eine geradlinige Ausbreitung modifizieren, wesentlich kleiner sind als die diffusive Verbreiterung der Fahne. Dies kann für ungünstige Windrichtungen z.B. mit einem diagnostischen Windfeldmodell überprüft werden.

Gaußfahnenmodelle	
Vorteile	Einfache Handhabbarkeit, geringe Rechenzeiten, Ankopplung an eine Vielzahl experimenteller Freilanduntersuchungen
Nachteile	Nur in einfachen "Standardsituationen" einsetzbar. Immissionsprognose in schwach gegliedertem Gelände nur "bedingt" möglich.
Anwendungsmöglichkeiten	Ermittlung von Jahresmittel- und 98-Perzentilwerten beim Vorliegen von "Standardsituationen".

¹² für kleinere Distanzen gibt es wenige empirisch bestimmte Sigma-Parameter. Außerdem nähert man sich der sogenannten Lagrang'schen Korrelationszeit, in deren Bereich der Gradientansatz zur Beschreibung der turbulenten Diffusion nur eingeschränkt gültig ist.

3.2.2 Eulermodelle

Eulermodelle lösen die Advektions- Diffusionsgleichung auf einem diskreten Rechengitter. Mit prognostischen oder diagnostischen Windfeldmodellen berechnete Strömungsfelder können explizit berücksichtigt werden. Der diffusive Teil des Stofftransportes wird dabei (analog zu den Grundlagen des Gaußmodells) proportional zum Gradienten der mittleren Konzentration des Schadstoffes angesetzt. Der Proportionalitätsfaktor, der turbulenter Diffusionskoeffizient K , kann hierbei jedoch orts-, höhen- und zeitabhängig explizit vorgegeben werden. Somit kann das Ausbreitungsmodell sehr gut an die jeweils vorliegenden topographischen und meteorologischen Gegebenheiten angepaßt werden.

Ein Nachteil vor allem älterer Ausbreitungsmodelle ist die mit dem jeweils verwendeten Rechenverfahren zusammenhängende numerische Diffusion. Diese kann, vor allem bei stabilen Ausbreitungsbedingungen, die tatsächliche Diffusion übersteigen. Weiterhin muß betont werden, daß es kein allgemein verwendetes Verfahren zur Ermittlung der (stabilitätsabhängigen) Diffusionskoeffizienten gibt, so daß sich die Ergebnisse verschiedener Modelle für die Analyse der gleichen Ausbreitungssituation untereinander zum Teil deutlich unterscheiden.

K- bzw. Eulermodelle	
Vorteile	Ausbreitungsmodellierung auch in gegliedertem Gelände durch Einbindung geeigneter Windfeld- und Turbulenzmodelle möglich.
Nachteile	Vor allem bei älteren Modellen Probleme mit numerischer (Pseudo-) Diffusion und Massenerhaltung. Sehr rechenzeitintensiv. Für die Ermittlung der vertikalen und horizontalen Diffusionskoeffizienten liegen bei verschiedenen Modellen sehr unterschiedliche Ansätze vor.
Anwendungsmöglichkeiten	Je nach der Güte des verwendeten Windfeldmodells alle Arten der Ausbreitungsmodellierung.

3.2.3 Lagrange-Modelle

Lagrangemodelle berechnen die Schadstoffausbreitung, indem sie die Trajektorien (Bahnen) einer Vielzahl von (gedachten) "Teilchen" in einem dreidimensionalen Windfeld ermitteln (Abb. 3b). Die Bewegung der Partikel wird dabei in einen advektiven Part (Windfeld) und einen Anteil mit einer (Stabilitäts- bzw. turbulenzabhängigen) Zufallsbewegung aufgespalten. Durch Auszählen der Partikel in einem Zeit- und Raumraster erhält man die gesuchten Immissionskonzentrationen. Ein Windfeld muß vorgegeben werden.

Die Vorgabeparameter zur Berechnung der die Diffusion bestimmenden Zufallsbewegung sind die horizontalen und vertikalen Windfluktuationen und die Lagrange'schen Korrelationszeiten. Sie werden meist aus Parametrisierungen ausgewählter meteorologischer Messungen übernommen. Dabei ist jedoch zu beachten, daß diese Parametrisierungen nur aus Messungen über ebenem Gelände abgeleitet worden sind. Ihre Übertragung auf gegliedertes Gelände muß noch verifiziert werden.

Der Vorteil von Lagrangemodellen ist ihre physikalisch realitätsnahe Behandlung der Ausbreitungsvorgänge selbst bei kleinen Quellabständen. Durch geeignete programmtechnische Umsetzung ist eine rechenzeitökonomische Behandlung von Ausbreitungsphänomenen bis hin zur Bestimmung von 98-Perzentil- und Jahresmittelwerten möglich.

Lagrangemodelle	
Vorteile	Ausbreitungsmodellierung realitätsnah. Rechenzeitökonomische Bestimmung selbst von Jahresmittel- und 98-Perzentilwerten möglich.
Nachteile	Die mögliche Variabilität bei der Bestimmung der sensitiven Eingangsgrößen ist noch zu überprüfen
Anwendungsmöglichkeiten	Je nach der Güte des verwendeten Windfeldmodells alle Arten der Ausbreitungsmodellierung.

4 Genauigkeit der Modelle und Fehlerbetrachtung

Derzeit liegt keine umfassende Fehleranalyse verschiedener Typen von Ausbreitungsmodellen vor. Die meisten Studien, die sich auf Vergleiche verschiedener Modelltypen beziehen, beschränken sich auf die Untersuchung

ausgewählter Einzelmodelle anhand von Fallbeispielen. Im Folgenden werden die wesentlichen sensitiven Parameter verschiedener Modelltypen aufgezeigt. Anhand der möglichen, in der Literatur aufgeführten Bandbreite dieser Parameter wird danach die Unsicherheit der verschiedenen Verfahren grob eingegrenzt.

Dies wird für den Fall einer

- Ausbreitungsmodellierung in ebenem Gelände und
- für eine Situation mit topographisch mäßig gegliedertem Gelände

durchgeführt. Danach wird anhand von in der Literatur aufgeführten Vergleichsrechnungen eine Fehleranalyse vorgenommen.

Es muß schon an dieser Stelle betont werden, daß die zum Vergleich verschiedener Modelltypen herangezogenen Einzelmodelle keine "typischen" Vertreter ihrer Klasse sind. Es wurde häufig beobachtet, daß die Abweichungen zwischen Immissions-prognosen verschiedener Modelle aus ein und derselben Gruppe (z.B. verschiedene Eulermodelle) untereinander zum Teil größer sind, als die Differenzen zwischen ausgewählten Modellen verschiedener Gruppen. Da es nicht möglich ist, alle oder zumindest nur einen wesentlichen Teil der derzeit in Verwendung befindlichen Modelle einzeln für verschiedene Situationen zu untersuchen, werden nachfolgend nur Modellvergleiche im Sinne einer sichprobenartigen Überprüfung durchgeführt.

4.1 Ebenes Gelände ohne lokale Windsysteme

In ebenem Gelände können unter bestimmten Voraussetzungen sowohl Gaußrechnungen als auch Windfeldmodelle mit nachgeschalteten Euler- und Lagrangeverfahren zur Ausbreitungsmodellierung angewendet werden. Im vorliegenden Kapitel wird davon ausgegangen, daß es sich um einen Standardfall in ebenem Gelände mit einem horizontal homogenen Windfeld handelt. D.h., es wird angenommen, daß keine meteorologischen Besonderheiten wie eine Strömungsumkehr in der Höhe, thermische Windsysteme, Inversionen, starke Rauigkeitsänderungen in Zusammenhang mit einer bodennahen Freisetzung u.ä. auftreten.

4.1.1 Gaußmodelle

Sensitivitätsanalysen ergeben, daß die Unsicherheiten bei einer Ausbreitungsmodellierung mit dem Gauß'schen Ansatz stark durch die möglichen Variationen der sogenannten "Sigma-y und Sigma-z- Ausbreitungsparameter" und der mittleren Windgeschwindigkeit bestimmt werden.

Es zeigt sich, daß die mit dem Gaußmodell im Bereich der Fahnenachse prognostizierten Kurzzeit-Immisionen¹³ bei labiler oder stabiler Schichtung alleine schon durch die mögliche Wahl der (von verschiedenen Autoren für vergleichbare Ausbreitungsbedingungen bestimmten) mittleren Ausbreitungsparameter um einen Faktor 2 bis 3 variieren¹³. Hierbei wird vorausgesetzt, daß alle notwendigen Anforderungen zur Anwendung des Gaußmodells erfüllt sind und die restlichen Eingangsparameter genau bekannt sind. Die Unsicherheit bei der Bestimmung des Jahresmittelwertes ist geringer, da die Abweichungen der von verschiedenen Autoren angegebenen Sigma-Parameter für unterschiedliche Ausbreitungsklassen zum Teil gegenläufig sind und ausgewählte Sigma-Parameter¹⁴ für die (meist am häufigsten auftretende) neutrale Schichtung nur um etwa 30% differieren. Das heißt, theoretisch kann man erwarten, daß Prognosen des Jahresmittelwertes einer Immissionskonzentration, die meist von Situationen mit neutraler Schichtung dominiert werden, auch bei genauer Kenntnis aller sonstigen meteorologischen Eingangsgrößen eine Unsicherheit von etwa 30% aufweisen können. Immissionsprognosen bei speziellen meteorologischen Situationen (die z.B. den 98-Perzentilwert prägen) wie z.B. bei stabiler Schichtung, weisen eine Unsicherheit bis zu einem Faktor von 2-3 auf. Dies deckt sich mit der Einschätzung von z.B. F.Paquill (zitiert in Gifford,1976), der seit 1956 intensiv auf dem Gebiet der atmosphärischen Ausbreitungsmodellierung arbeitet. Pasquill weist Gaußmodellen eine Genauigkeit von etwa 20% für Langzeitprognosen und von einem Faktor 2 für Kurzzeitszenarien zu, vorausgesetzt, daß sehr gute meteorologische Eingangsdaten zugrunde liegen und alle Bedingungen zur Anwendung dieses Modelltypes erfüllt sind. In diesem Zusammenhang muß

¹³ Mittelwert über eine Anzahl von Fällen vergleichbarer Ausbreitungssituationen. Gilt nicht für Einzelsituationen wie z.B. einzelne Stunden- oder Halbstundenmittelwerte.

¹⁴ hier wurden Briggs-und TA-Luft-Werte verglichen, da beide Parametersätze häufig verwendet werden

erwähnt werden, daß Unsicherheiten in den verwendeten meteorologischen Daten¹⁵ zum Teil größere Ungenauigkeiten der prognostizierten Immissionskonzentrationen bewirken können, als dies durch die Bandbreite der modellspezifischen Eingangsgrößen hervorgerufen wird.

In der Literatur beschriebene Ausbreitungsuntersuchungen in ebenem Gelände wie z.B. von Binaris und Wilhelm¹⁶ (1991) belegen, daß sich die prognostizierten und gemessenen Jahresmittelwerte mancherorts um bis zu einem Faktor 2, die zugehörigen 98-Perzentilwerte bis zu einem Faktor 4 unterscheiden können. Es sind jedoch auch Untersuchungen bekannt, bei denen die mit einem Gaußmodell prognostizierten (Langzeit-) Mittelwerte für drei verschieden weit entfernte Stationen nur um etwa +30% von den zugehörigen Meßergebnissen abweichen (Levin et al. 1992). Bei der zuletzt zitierten Untersuchung ist jedoch zu beachten, daß die Ausbreitungsexperimente in dem gleichen Areal durchgeführt wurden, in dem auch die Sigma-Parameter der TA-Luft ermittelt wurden und sehr genaue meteorologische Eingangsdaten vorlagen.

4.1.2 Euler - Modelle

Bezüglich der Sensitivität kann man die bei den Eulermodellen benötigten Diffusionskoeffizienten mit den bei den Gaußmodellen zugrunde gelegten Ausbreitungsparametern vergleichen. Zur Bestimmung des sogenannten Mischungsweges, der bei vielen Modellen bei der Berechnung der Diffusionskoeffizienten eingeht, findet man in der Literatur eine zweistellige Anzahl unterschiedlicher Vorschläge. Eine Untersuchung von Detering (1985) zeigt, daß die mögliche Variabilität der vertikalen Diffusionskoeffizienten bei der Berücksichtigung einiger ausgewählter Ansätze bis zu einem Faktor 2 betragen kann.

¹⁵ übliche Variationen für den Jahresmittelwert der Windgeschwindigkeit können bis zu 30% betragen. Da die Immissionskonzentration umgekehrt proportional zur Windgeschwindigkeit ist, liegt der zugehörige Fehler ebenfalls bei etwa 30%. Eine Drehung der Windrichtungsverteilung, die diese um nur ca.10 Grad von der Richtungsverteilung des langjährigen Mittels abweichen läßt, kann mancherorts zu Änderungen der Jahresmittelwerte der Immissionskonzentrationen von bis zu einem Faktor 2 und des 98-Perzentilwertes von bis zu einem Faktor 3 führen.

¹⁶ in der zitierten Untersuchung speziell für „hohe Emittenten“

Vergleicht man die Ansätze der Modelle Transloc (Batelle), von Dunst (Meteorologisches Institut Hamburg) und TRADI (Meteorologisches Institut Köln) so werden die horizontalen Diffusionskoeffizienten je nach Modell mit $K_x=K_y^{17}=2K_z(H)$, $K_x=K_y=3 K_{z,max}$ bzw. $K_x, K_y=K_z$ ermittelt. Teilweise werden die Unterschiede in den Diffusionskoeffizienten verschiedener Modelle dadurch kompensiert, daß eine verschieden starke numerische Diffusion auftritt. Das bedeutet, daß verschiedene Modelle wahrscheinlich unterschiedliche Diffusionskoeffizienten benötigen, um ähnliche Ergebnisse zu liefern.

In der Literatur aufgeführte Anwendungsbeispiele von Eulermodellen beziehen sich meist auf Fälle mit komplexen Strömungsfeldern, chemischen Umwandlungen u.ä.. Die hierbei beobachteten Abweichungen von den Naturbeobachtungen können daher nicht alleine dem meteorologischen Ausbreitungsmodul zugeordnet werden. Vergleichsrechnungen mit an vier verschiedenen Standorten (für eine größere Anzahl von Einzelversuchen) durchgeführten Ausbreitungsexperimenten¹⁸ sind bei Päsler-Sauer (1986) beschrieben. Die prognostizierten Immissionen variierten dabei zwischen zwei verschiedenen Eulermodellen zum Teil mehr als im Vergleich zu den entsprechenden Ergebnissen von ausgewählten Gauß- und Lagrangemodellen.

4.1.3 Lagrange-Modelle

Der Vorteil von Lagrangemodellen liegt in der realitätsnahen Beschreibung der Ausbreitungsvorgänge. Das "Nachrechnen" von mittleren Verhältnissen bei Ausbreitungsversuchen, die im Bereich der KfA-Jülich bzw. der KfK Karlsruhe über ebenem Gelände durchgeführt wurden, ergab für ausgewählte Lagrangemodelle eine gute Übereinstimmung. Da die untersuchten Ausbreitungsexperimente als Grundlage zur Ermittlung der Gauß'schen Ausbreitungsparameter der TA-Luft benutzt wurden, ist für diese speziellen Fälle auch eine befriedigende Übereinstimmung mit den Ergebnissen des zugehörigen

¹⁷ K_x, K_y und K_z sind die turbulenten Diffusionskoeffizienten in horizontaler (x,y) und vertikaler (z) Richtung

¹⁸ Freisetzungshöhe 60 m - 115 m; $Z_0 = 0.2 - 1.2$ m; Ausbreitungsklasse C-E.

(TA-Luft-) Gaußmodells zu erwarten. Die universelle Gültigkeit der in Lagrangemodellen verwendeten Standardparameter wird jedoch dadurch in Frage gestellt, daß unterschiedliche Modelle leicht verschiedene Parametrisierungen benutzen, deren Übertragung auf topographisch gegliedertes Gelände zudem noch verifiziert werden muß.

4.1.4 Vergleich der Modelle untereinander (ebenes Gelände, Standardsituation)

Vergleichsrechnungen zwischen ausgewählten Modellen verschiedener Modellklassen in ebenem Gelände unter Standardsituationen wurden u.a. von Glaab (1986), Maßmeyer et al. (1993), Päsler-Sauer (1986) und Thehos et al. (1994) durchgeführt.

Die Vergleichsrechnungen für ausgewählte Situationen und mittlere Verhältnisse über die jeweilige Ausbreitungsklasse belegen, daß das Gaußmodell im Vergleich zu den Resultaten der Lagrange'schen Ausbreitungsrechnung je nach Stabilität, Freisetzungshöhe, Rauigkeit und Quellabstand bis etwa zu einem Faktor 2 zu hohe und zu niedrige Immissionen prognostiziert. Diese Spannbreite kann in der ersten Näherung als Unterschied in den berechneten 98-Perzentilwerten angesetzt werden. Für die Berechnung von Jahresmittelwerten wird der Unterschied zwischen den betrachteten Modellen wahrscheinlich geringer sein, da sich die zum Teil gegenläufigen Effekte bei der Mittelung über eine Vielzahl von unterschiedlichen meteorologischen Situationen zum Teil kompensieren. Für einen speziellen Einzelfall, der Berechnung eines Jahresmittelwertes im Umkreis eines 70 m hohen Kamins in ebenem Gelände unterschied sich z.B. das Ergebnis der TA-Luft-Rechnung vom dem Resultat einer Lagrange'schen Rechnung im Bereich des maximalen Aufpunktes nur um ca. 30%.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die mit Gauß-, Euler- und Lagrangemodellen in Standardsituationen in ebenem Gelände durchgeführten Immissionsprognosen zur Bestimmung von 98%- und Jahresmittelwerten im allgemeinen eine vergleichbare Genauigkeit haben. Dies deckt sich auch mit der Einschätzung von Prof. Manier, der auf der Tagung "Werkzeuge des Umweltmeteorologen" (Hamburg 1990) feststellte, daß "Gaußmodelle genauso gut und so schlecht sind wie andere Rechenmethoden, seien es K-(Euler-) oder

Lagrange- Verfahren“ wenn streng darauf geachtet wird, daß die Geltungsbereiche und die Rahmenbedingung zur Anwendung des jeweiligen Modells gewährleistet sind. Abweichungen der prognostizierten Zusatzbelastung von Naturbeobachtungen von etwa 30% bezüglich des Jahresmittelwertes sind dabei als gute Übereinstimmung zu werten.

Dem oben gesagten widerspricht eine kürzlich erschienene, gemeinsame Veröffentlichung des Deutschen Wetterdienstes mit der Hessischen Landesanstalt für Umweltschutz (Thehos et al., 1994). Nach den Ergebnissen dieser Studie können sich die mit dem Gaußmodell nach TA- Luft und die mit einem gekoppelten FITNAH/Lagrange-Modell berechneten Jahresmittelwerte der bodennahen Immissionen in größeren Entfernungen auch in ebenem Gelände mancherorts um mehr als einen Faktor 6 unterscheiden. Dabei ist die Lage des maximalen Aufpunktes bei dem FITNAH/Lagrange-Modell im Vergleich zum Gaußmodell zu sehr großen Abständen hin verschoben. Manche Isolinien der Immissionskonzentrationen liegen um etwa einen Faktor 10 weiter entfernt als bei den TA-Luft- Ergebnissen. Der Deutsche Wetterdienst (als Mitentwickler und Nutzer dieses Modells) räumt dabei ein, daß sich derzeit nicht abschließend beurteilen läßt, welches der beiden verglichenen Modelle die wirklichkeitsnäheren Aussagen liefert.

4.2 Topographisch moderat gegliedertes Gelände

Wird das Strömungsfeld maßgeblich durch die Topographie bestimmt, können nur noch gekoppelte Strömungs-/Ausbreitungsmodelle die zu erwartenden Immissionen angemessen prognostizieren. In orographisch nur mäßig gegliedertem Gelände ohne lokale Windsysteme können hierfür diagnostische Windfeldmodelle in Kopplung mit Lagrange'schen und Euler'schen Ausbreitungsmodellen eingesetzt werden. Die in Kap. 4.1 angegebenen Unsicherheiten bezüglich der Immissionsprognose in ebenem Gelände sind auch auf die Verhältnisse in topographisch gegliedertem Gelände zu übertragen. Zusätzlich muß hier jedoch noch die Unsicherheit in der Vorhersage des Strömungsfeldes berücksichtigt werden.

Die Vergleiche zwischen den beobachteten und den mit diagnostischen Windfeldmodellen berechneten Strömungsfeldern für neutrale und stabile Schichtung werden von verschiedenen Autoren in nicht zu stark gegliedertem Gelände als zufriedenstellend bis gut eingestuft. Als anschauliches Maß für die Einschätzung möglicher Fehler sei darauf hingewiesen, daß selbst bei einer Ungenauigkeit der berechneten Windrichtung von nur $\pm 10^\circ$ die Unsicherheit in der Lage des Konzentrationsmaximums in z.B. 2 km Entfernung quer zur Windrichtung ± 350 m beträgt. Dies ist bei neutraler Schichtung mehr als die Standardabweichung der Konzentrationsverteilung quer zur Fahnenachse.

Ein Vergleich zwischen einem Tracergas-Freilandexperiment (Zeitdauer 9 x 10 Minuten) in orographisch gegliedertem Gelände (der Freilandversuch wurde an der Sophienhöhe in Jülich durchgeführt) mit einer Immissionsprognose, die eine diagnostische Strömungsmodellierung gekoppelt mit einer Lagrange'sche Ausbreitungsmodellierung beinhaltet, ist in Maßmeyer (1989) beschrieben. Hierbei standen jedoch weit mehr Eingangsdaten zur Verfügung als üblicherweise bei einer Ausbreitungsrechnung zugrunde gelegt werden können. Die Rechnung zeigte, daß die beobachtete Umströmung des Hindernisses qualitativ richtig modelliert wurde. Ein Vergleich der beobachteten und prognostizierten Schadstoffverteilung ergab, daß etwa 70% aller berechneten Immissionen um weniger als einen Faktor 5 von den gemessenen Konzentrationen abwichen. Diese Abweichung ist jedoch nicht auf die möglichen Fehler bei der Prognose von 98-Perzentil- oder gar von Jahresmittelwerten zu übertragen. Die bei der Prognose einzelner Stundenmittelwerte zu erwartenden Variationen übersteigen die Abweichungen der beobachteten mittleren Immissionen innerhalb einer Stabilitätsklasse (die z.B. den 98%-Wert prägen) deutlich.

Es ist jedoch nicht zu erwarten, daß die von gekoppelten Strömungs-Ausbreitungsmodellen berechneten Immissionen in topographisch gegliedertem Gelände eine geringere Abweichung von den zugehörigen Naturbeobachtungen aufweisen, als dies die entsprechenden Ausbreitungsmodelle in ebenem Gelände tun. D.h. eine mögliche Abweichung des von einem gekoppelten Strömungs-/Ausbreitungsmodell prognostizierten Jahresmittelwertes von den entsprechenden

Naturbeobachtungen von etwa 30%¹⁹ ist auch bei gekoppelten Strömungs-/Ausbreitungsmodellen als sehr gute Übereinstimmung zu bewerten.

4.3 Topographisch stark gegliedertes Gelände

In topographisch stark gegliedertem Gelände bzw. bei dem Vorliegen lokaler, thermisch bedingter Windsysteme können bei den im Bereich von Genehmigungsfragen interessierenden Untersuchungsgebieten (etwa 100 m bis 10 km) nur nicht hydrostatische Strömungsmodelle gekoppelt mit Lagrange'schen oder Euler'schen Ausbreitungsmodellen²⁰ angewendet werden.

Prognostische Strömungsmodelle sind, wie im Kap. 3.1.2 beschrieben, jedoch meist nur für die Untersuchung von meteorologischen Einzelfällen und nicht zur Bestimmung von Jahresmittel- oder 98-Perzentilwerten anzuwenden. Eine Ausnahme stellt das Modell FITNAH/LPDM dar, mit dem zumindest Jahresmittelwerte ermittelt werden können. Das Modell ist jedoch so rechenzeitintensiv (eine Großrechenanlage benötigt fast 60 Stunden zur Prognose des Jahresmittelwertes), daß es sich wahrscheinlich in nächster Zeit auch wegen den noch nicht geklärten Widersprüchen im Vergleich zu Ergebnissen anderer Modelle im ebenen Fall nicht als "Standardverfahren" etablieren kann.

¹⁹ dies ist keinesfalls als maximal möglicher Fehler einer Immissionsprognose zu interpretieren

²⁰ oder sogenannte Gauß-Puffmodelle, die in dieser Studie jedoch nicht näher betrachtet werden

Literatur

- Binaris und Wilhelm (1991): Ausbreitungsberechnungen nach TA-Luft 1986 im Vergleich mit Meßdaten. Meteorologische Rundschau, 44. Jahrgang, Heft 1-4. Seite 2-6.
- Detering, W.H. (1985): Mischungsweg und turbulenter Diffusionskoeffizient in atmosphärischen Simulationsmodellen. Bericht des Inst. für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover Nr. 25.
- Glaab, H. (1986): Lagrangesche Simulation der Ausbreitung passiver Luftbeimengungen in inhomogener atmosphärischer Turbulenz. Dissertation am Fachbereich Mechanik der TH Darmstadt, 1986.
- Gifford, F.A. (1976): Turbulent diffusion typing schemes: A review. Nuclear safety, 17, 68-86.
- Hanna, S.R., G.A. Briggs and R.P. Hosker (1982): Handbook of atmospheric diffusion. Techn. Information Center. US Dep. of energy.
- Levin, I und K.O. Münnich (1992): Experimentelle Bestimmung der Langzeitausbreitungsfaktoren durch simultane C14 und Kr85-Messungen in der Umgebung der Wiederaufbereitungsanlage Karlsruhe (WAK). Abschlußbericht zum BMU-Forschungsvorhaben St.Sch.993.
- Manier, G. (1991): Gauß-Modelle und ihre Anwendung in der Luftreinhaltepraxis. Meteorologische Rundschau, 44. Jahrgang, Heft 1-4, S94- 98.
- Maßmeier, K, R. Martens, W. Pfeffer, H. Druwe (1989): Bereitstellung eines Programmsystems zur realitätsnahen Simulation der Ausbreitung und Ablagerung luftgetragener Schadstoffe. Gesellschaft für Reaktorsicherheit, Köln, GRS - A -1632.
- Maßmeier, K, R. Martens, E. Hofer und B. Krzykacz (1993): Untersuchungen zur Verifizierung von komplexen Modellen zur Beschreibung des Schadstofftransportes. Gesellschaft für Reaktorsicherheit, Köln, GRS - A -1985.
- Orlanski, I. (1975): A rational subdivision of scales for atmospheric processes. Bull. Am. Met. Soc., 56, 527-530.
- Päsler-Sauer, J. (1986): Comparative Calculations and validation studies with atmospheric dispersion models. KfK Karlsruhe, Bericht 4164.
- Pielke (1984): Mesoscale meteorological Modeling. Academic Press London, 1984.
- Szepesi, D.J. (1989): Compendium of regulatory air quality simulation models. Akademiai Kiado, Budapest 1989.

- TA-Luft (1986): Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft. Erste allgemeine Verwaltungsvorschrift zum Bundes-Immissionsschutzgesetz. 1.März 1986.
- Taylor, P.A., P.J. Mason and E.F. Bradley (1987): Boundary-layer flow over low hills. In: Boundary-layer meteorology 39, pp. 107-132.
- Thehos, R., U.Pflüger, E.Dittmann, M.Baltrusch, M.Büchen (1994): Vergleich von Ausbreitungsrechnungen mit der Modellkombination FITNAH/ LPDM und dem Verfahren der TA-Luft. Hessische Landesanstalt für Umweltschutz, Wiesbaden, Heft 173.
- VDI-Richtlinie 3783, Blatt 6 (1992): Regionale Ausbreitung von Luftverunreinigungen über komplexem Gelände. Modellierung des Windfeldes I. Oktober 1992
- VDI-Richtlinie 3782, Blatt 1 (1992): Gaußsches Ausbreitungsmodell für Luftreinhaltepläne. Verein Deutscher Ingenieure, 1992.
- VDI-Richtlinie 3783, Blatt 1 (1987): Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen, Sicherheitsanalyse. Verein Deutscher Ingenieure, 1987.
- Wippermann, F. (1981) : The applicability of several approximations in mesoscale modelling - a linear approach. Contr. Atm. Phys., 54, 298-308.