Ausbreitung von Kfz - Emissionen

DASIM - KFZ

Darmstädter Simulationsmodell zur

Simulation der Ausbreitung von Kfz-Emissionen

Eine Übersicht

Institut für Meteorologie

Technische Hochschule Darmstadt

Juni 1995

Vorbemerkungen

Nach der 23. BIMSchV sind für NO_2, Ruß und Benzol Konzentrationen als Grenzwerte definiert worden. Überschreitungen dieser Grenzwerte müssen erkannt werden können. Bei Bedarf müssen geeignete Maßnahmen ausgewählt werden. Bei Planungen muß im Voraus eine Einhaltung der Grenzwerte sichergestellt sein.

Die Einhaltung von Grenzwerten kann durch Messungen oder Ausbreitungsrechnungen kontrolliert werden. Nur die Ausbreitungsrechnung liefert flächendeckende Informationen, die Auswirkungen von Maßnahmen können vor der Realisierung untersucht werden und es können im Zusammenhang mit Planungen Zusatzbelastungen vorhergesagt werden.

NO_2, Ruß und Benzol werden auch beim Kfz-Verkehr emittiert. Es ist daher notwendig, die dadurch entstehende Schadstoffbelastung zu berechnen. Aus diesem Grunde wurde das Programmsystem DASIM-Kfz entwickelt. Das Programmsystem kann zur Berechnung von Einzelfällen, Zeitreihen, Langzeitmittelwerten und Überschreitungswahrscheinlichkeiten eingesetzt werden. Die Informationen liegen als dreidimensionale Felder vor.

Die optimale Gebietsgröße liegt bei 500 x 500 m. Prinzipiell gibt es aber keine Größenbeschränkungen. Die räumliche Auflösung kann beliebig gewählt werden. Normalwerte sind 5 x 5 m in der Horizontalen und zwischen 3 und 20 m in der Vertikalen.

Als Eingangsgrößen benötigt man ein Hinderniskataster, Straßenkataster, Verkehrsdaten und meteorologische Informationen.

Topographische Strukturen können in der zur Zeit vorliegenden Version noch nicht erfaßt werden. Die Vorbelastung und die NO/NO_2 Umwandlung werden nicht berechnet. Entsprechende Ergänzungen sind in Arbeit.

Das Programmsystem wird den jeweils gültigen gesetzlichen Vorgaben angepaßt.

Das Programmsystem ist modular aufgebaut. Folgende Module sind vorhanden.

- Hindernisdatei erstellen
- Straßendatei erstellen
- Verkehrsdatendatei erstellen
- Datei mit meteorologischen Informationen erstellen
- Datei der spezifischen Emissionen
- Windfelder berechnen
- Turbulenzfelder berechnen
- Emissionen berechnen
- Normierte Konzentrationen berechnen
- Konzentrationen berechnen (Einzelfall und Zeitreihen)
- Statistische Kenngrößen berechnen
- Ausgabe der Ergebnisse

1. Hindernisdatei erstellen

Die Hindernisdatei enthält die Koordinaten der Gebäudekanten und der sonstigen Hindernisse. Die Erdoberfläche ist eben. Grundlage der Hindernisdatei sind Katasterblätter im Maßstab 1:1000 oder 1:2000 und Informationen über die Gebäudehöhen. Normalerweise ist die linke untere Ecke des Katasterblattes der Koordinatenursprung und die untere und linke Kante definieren das x-, y-Koordinatensystem. Alle Hindernisse haben einen rechteckigen Grundriß. Hindernisse mit anderen Grundrissen werden in mehrere einzelne Hindernisse aufgeteilt. Die Einzelhindernisse können sich überschneiden. Die Eingabe in den Rechner erfolgt über die Tastatur, durch die Maus oder über ein Digitalisierbrett. Die Höhen können aus Geschoßzahlen berechnet werden oder müssen bei einer Begehung ermittelt werden.

Mit einem separaten DOS-Programm können Daten mehrerer Katasterblätter zusammengefaßt werden, und aus einer großen Katasterdatei können Ausschnitte ausgewählt und gedreht werden.

2. Straßendatei erstellen

Die Straßen in dem Beurteilungsgebiet müssen in Fahrstreifenabschnitte konstanter Emission aufgeteilt werden. Da für jeden dieser Abschnitte die normierten Konzentrationsverteilungen berechnet werden müssen, sollte die Anzahl der Fahrstreifenabschnitte möglichst klein sein.

Straßen bzw. Fahrstreifen mit kleiner Verkehrsbelastung können weggelassen werden. Die Grenze liegt bei ca. 100 Fahrzeugen pro 1/2 Stunde.

Die Fahrstreifenabschnitte werden als Linienstücke mit Anfangs- und Endpunkt sowie Höhe eingegeben. Für die Eingabe wird das Hinderniskataster auf dem

Bildschirm dargestellt. Die Eingabe erfolgt über die Tastatur, mit der Maus oder mit Hilfe eines Digitalisierbrettes. Damit bei wiederholten Rechnungen für das gleiche Beurteilungsgebiet die Zuordnung von Verkehrsdaten zu den im voraus berechneten normierten Konzentrationen fehlerlos vor sich gehen kann, müssen in der Straßendatei alle potentiellen Fahrstreifenabschnitte erfaßt werden. Diese Datei darf im Anschluß daran nur noch ergänzt werden.

3. Verkehrsdatendatei erstellen

Die Verkehrsdaten sind zur Zeit die Anzahl der Fahrzeuge pro 1/2 Stunde, Fahrmodus nach MLuS-92 und Aufteilung der Fahrzeuge nach Fahrzeugarten.

Wenn ein Einzelfall berechnet werden soll, erfolgt die Eingabe über den Bildschirm. Hinderniskataster und Fahrstreifenabschnitte werden auf dem Bildschirm dargestellt. Mit der Maus können einzelne Fahrstreifenabschnitte nacheinander ausgewählt und für diese die Verkehrsdaten über die Tastatur eingegeben werden. Bei der Zeitreihenberechnung oder bei statistischen Untersuchungen muß eine Datei mit den Verkehrsdaten (z. B. mit einem Editor) erstellt werden.

4. Spezifische Emissionen

Die spezifischen Emissionen entsprechen den Angaben der MLuS-92 für das Jahr 1995.

5. Datei mit meteorologischen Informationen erstellen

Die notwendigen meteorologischen Daten sind Windrichtung, Windgeschwindigkeit, Stabilität und Mischungsschichthöhe. Die Stabilität wird in drei Klassen eingeteilt, da sonst der Rechenaufwand zu groß würde. Außerdem muß die Höhe der Windmessung angegeben werden. Die Rauhigkeitshöhe und die Nullpunkt-verschiebung, die zur Berechnung der Höhenabhängigkeit der Windgeschwindigkeit benötigt werden, können angegeben werden.

Die Meßstation sollte im Beurteilungsgebiet oder in der Nähe liegen. Die Windmessung darf nicht durch Hindernisse gestört sein. Die Stabilität sollte aus Messungen (Sonic-Anemometer) abgeleitet sein. Selbstverständlich ist es auch möglich, mit fiktiven meteorologischen Daten zu rechnen.

Sollen Jahresmittelwert und Überschreitungswahrscheinlichkeit bestimmt werden, müssen die Häufigkeitsverteilungen der Ausbreitungsparameter vorgegeben werden. Hierfür müssen Messungen von Windgeschwindigkeit, Windrichtung und Stabilität aus mindestens 5 Jahren vorliegen. Da meteorologische Einflußgrößen und Verkehrsdaten einen Tagesgang haben, müssen die Häufigkeitsverteilungen für die Nacht, die Mittagszeit und die Übergangszeiten getrennt ermittelt werden. Der Deutsche Wetterdienst kann derartige Häufigkeitsverteilungen aus den Messungen

an seinen Stationen ermitteln. Die Übertragung von dem Meßort auf das topographisch ähnlich gelegene Beurteilungsgebiet kann ebenfalls vom DWD vorgenommen werden.

Für den Einzelfall werden die meteorologischen Daten über ein Fenster eingegeben. Will man Zeitreihen oder statistische Kenngrößen ermitteln, so müssen die Eingabedateien vom Benutzer eingerichtet werden.

Die Mischungsschichthöhe spielt nur dann eine Rolle, wenn sie mit der Obergrenze des Rechengebietes zusammenfällt.

6. Windfelder berechnen

Prinzipiell kann jedes beliebige Windprofil vorgegeben werden. Wenn sich die Modellanwendung auf einen Höhenbereich bis ca. 100 m beschränkt, kann angenommen werden, daß die Windrichtung höhenkonstant ist. Viele Messungen haben gezeigt, daß das Windgeschwindigkeitsprofil in diesem Höhenbereich durch folgende Formel beschrieben werden kann:

$$u(z) = u(z_A)\left[\ln\frac{z-d_0}{z_0} - \Psi\left(\frac{z-(z_0+d_0)}{L}\right)\right]\left[\ln\frac{z_A-d_0}{z_0} - \Psi\left(\frac{z_A-(z_0+d_0)}{L}\right)\right]^{-1} \quad (1)$$

z_A ist die Höhe, für die die Windgeschwindigkeit vorgegeben ist (z. B. 10 m Höhe oder der obere Rand des Rechengebietes).

z_0 ist die Rauhigkeitshöhe, die entweder aus Windgeschwindigkeitsmessungen in zwei Höhen, aus der Landnutzung oder aus dem Verbauungsgrad durch Hindernisse bestimmt werden kann.

Tabelle 1.6.1 liefert einen Zusammenhang zwischen Landnutzung und Rauhigkeitshöhe.

z_0 [m]	Beschreibung des Geländes
0.02	extrem glatt: homogenes, extrem ebenes Gelände; Wasserflächen und keine Gebäude, Bäume oder Büsche im weiten Umkreis
0.2	glatt: homogenes, ebenes Gelände; nur einzelne Gebäude oder Bäume im weiten Umkreis
0.5	wenig rauh: relativ ebenes Gelände; nur wenige Gebäude und mäßiger Bewuchs im weiten Umkreis
0.8	mäßig rauh: unebenes Gelände; Ortschaften bzw. kleine

Waldgebiete im weiten Umkreis

1.2 sehr rauh: Stadt- und Waldgebiete

Tabelle 1.6.1: Zusammenhang zwischen Rauhigkeitshöhe und Landnutzung

Im bebauten Gelände kann die Rauhigkeitshöhe nach folgender Gleichung bestimmt werden:

$$z_0 = \frac{0.1 \sum_i \left(b_i^1 \, l_i^1 \, h_i^1 \right) + 0.2 \sum_i \left(b_i^2 \, l_i^2 \, h_i^2 \right)}{N_x \, \Delta x \; N_y \, \Delta y} \quad . \tag{2}$$

Die Rauhigkeitshöhe ist 10 % des undurchlässigen Gebäudevolumens plus 20 % des porösen Hindernisvolumens dividiert durch die Horizontalfläche des Simulationsgebietes. b, l, h sind Breite, Länge und Höhe der Hindernisse. Die hochgesetzte 1 steht für undurchlässige, die hochgesetzte 2 für poröse Hindernisse.

d_0 ist die Nullpunktverschiebung. Sie ist nur dann von Null verschieden, wenn das Simulationsgebiet dicht bebaut ist. Man kann d_0 als 80 % der mittleren Gebäudehöhe annehmen, wobei sich die mittlere Gebäudehöhe $\bar{h}$ aus dem Gebäudevolumen und der Gebäudegrundfläche nach folgender Gleichung ergibt:

$$\bar{h} = \frac{\sum_i \left(b_i^1 \, l_i^1 \, h_i^1 \right)}{\sum_i \left(b_i^1 \, l_i^1 \right)} \quad . \tag{3}$$

Ψ ist eine Stabilitätsfunktion. Häufig werden folgende Ansätze verwendet:

<u>Labile Schichtung:</u>

$$\Psi \left(\frac{z - (z_0 + d_0)}{L} \right) = 2 \ln \left(\frac{(1+x)}{2} \right) + \ln \left(\frac{(1+x^2)}{2} \right) - 2 \operatorname{atan} x + \frac{\pi}{2} \tag{4}$$

mit

$$x = \left(1 - \gamma \, \frac{z - (z_0 + d_0)}{L} \right)^{\frac{1}{4}} \tag{5}$$

<u>Indifferente Schichtung:</u>

$$\Psi = 0 \tag{6}$$

<u>Stabile Schichtung:</u>

$$\Psi \left(\frac{z - (z_0 + d_0)}{L} \right) = - 4.7 \, \frac{z - (z_0 + d_0)}{L} \tag{7}$$

L ist die Monin-Obukhow'sche Stabilitätslänge, sie ist definiert als

$$L = \frac{T}{g} \frac{\overline{u'w'}^{\frac{3}{2}}}{\overline{w'T'}\kappa} \quad . \tag{8}$$

T: Lufttemperatur in K, g: Schwerebeschleunigung, $\overline{u'w'}$: Kovarianz der horizontalen Windgeschwindigkeitsfluktuation in Windrichtung und in der Vertikalen, $\overline{w'T'}$: turbulenter vertikaler Temperaturtransport, $\kappa = 0.4$

L kann aus Messungen von $\overline{u'w'}$ und $\overline{w'T'}$ bestimmt werden (z. B. mit einem Sonic-Anemometer). Aus den Ausbreitungsklassen und der Rauhigkeitshöhe kann die Stabilitätslänge nach folgender Gleichung

$$L = \frac{a}{\log z_0 - b} \tag{9}$$

(z_0 in cm, L in m) bestimmt werden .

Die Koeffizienten a und b hängen von der Stabilitätsklasse ab:

Klasse	A	B	C	D	E	F
a	31.77	38.83	58.25	---	- 49.93	-27.96
b	4.86	3.36	2.23	---	2.20	2.98

In dem Programm ***DASIM-KFZ*** werden die Klassen B, D und E verwendet.

Mit dem Windprofilansatz wird jeweils für die Mitte der Rechenboxen die ungestörte Windgeschwindigkeit als Eingangsgröße für das Rechenmodell ermittelt.

Hindernisse wie Häuser, Straßenschluchten, Tanks, Wälle, Gräben, Brücken und Bäume modifizieren die Strömung. Schon bei einem einfachen Quader entstehen mehrere Bereiche, in denen sich die Strömung grundlegend geändert hat. Im Luv entsteht ein Fußwirbel, im Lee der nahe und ferne Nachlauf, und es bildet sich eine hufeisenförmige Zone erhöhter Turbulenz aus. Bei mehreren Gebäuden können sich die Störgebiete überlagern und bei dicht stehenden Gebäuden und in Straßenschluchten bilden sich eigenständige Zirkulationen aus. Aus Windkanaluntersuchungen und Naturmessungen können Gesetzmäßigkeiten über die Abhängigkeit der Größe und der Intensität der Störung von den Abmessungen der Hindernisse abgeleitet werden . Diese Gesetzmäßigkeiten werden verwendet, um ein Anfangswindfeld zu bestimmen, das die Störungen durch die Hindernisse schon enthält, aber noch nicht divergenzfrei ist.

Die Divergenzfreiheit wird durch eine Variationsrechnung erreicht. Das vorgegebene, nicht divergenzfreie Windfeld wird dadurch so geändert, daß der mittlere quadratische Fehler der Differenzen zwischen Anfangswindfeld und berechnetem Windfeld minimal wird, d. h.

$$H(u,v,w) = \iiint \left\{ \alpha_h^2 \left(u - u^0\right)^2 + \alpha_h^2 \left(v - v^0\right)^2 + \alpha_v^2 \left(w - w^0\right)^2 \right\} dx\, dy\, dz \qquad (10)$$

soll unter der Nebenbedingung

$$G(u,v,w) = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \qquad (11)$$

minimiert werden.

x, y, z: Koordinaten eines kartesischen, rechtwinkligen Koordinatensystems

u, v, w: resultierendes Windfeld mit den Komponenten in x-, y- und z-Richtung

u^0, v^0, w^0: Ausgangswindfeld

α_h , α_v : Horizontale und vertikale Wichtungsfaktoren

Die Wichtungsfaktoren α_i sind für die Anpassung des vorgegebenen an das zu berechnende Windfeld verantwortlich. Es kommt dabei nur auf das Verhältnis α_v/α_h an. Bei α_h sehr viel größer als α_v oder α_v/α_h <<1 wird ein Hindernis bevorzugt überströmt, d. h. die Vertikalkomponenten werden viel stärker verändert als die Horizontalkomponenten. Bei α_h sehr viel kleiner als α_v oder α_v/α_h >>1 werden nur die Horizontalkomponenten verändert, die Hindernisse werden bevorzugt umströmt. Entspricht der horizontale Wichtungsfaktor dem vertikalen Wichtungsfaktor, $\alpha_h = \alpha_v$, so werden Hindernisse gleichermaßen um- und überströmt.

Mit der Lagrange'schen Multiplikationsmethode kann man die Gleichungen (10) und (11) unter ein Funktional zusammenziehen und erhält

$$F\left(u,v,w,u^0,v^0,w^0\right) = \iiint \left(H + \lambda G\right) dx\, dy\, dz \quad . \qquad (12)$$

Unter der Bedingung F = Minimum stellen die Euler-Lagrange-Gleichungen die Lösung der Gleichung (12) dar:

$$u = u^0 + \frac{1}{2\,\alpha_h^2} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \qquad (13)$$

$$v = v^0 + \frac{1}{2\,\alpha_h^2} \frac{\partial \lambda}{\partial y} \qquad (14)$$

$$w = w^0 + \frac{1}{2\,\alpha_v^2} \frac{\partial \lambda}{\partial z} \qquad (15)$$

Die Euler-Lagrange-Gleichungen werden differenziert und in (11) eingesetzt, man erhält:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2\,\alpha_h^2}\,\frac{\partial \lambda}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{2\,\alpha_h^2}\,\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{2\,\alpha_v^2}\,\frac{\partial \lambda}{\partial z}\right)=-\left(\frac{\partial u^0}{\partial x}+\frac{\partial v^0}{\partial y}+\frac{\partial w^0}{\partial z}\right). \quad (16)$$

Sind die Wichtungsfaktoren räumlich konstant, so erhält man

$$\frac{\partial^2\lambda}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\lambda}{\partial y^2}+\left(\frac{\alpha_h^2}{\alpha_v^2}\right)\frac{\partial^2\lambda}{\partial z^2}=-2\,\alpha_h^2\left(\frac{\partial u^0}{\partial x}+\frac{\partial v^0}{\partial y}+\frac{\partial w^0}{\partial z}\right). \quad (17)$$

Die Lösungen der Gleichungen (16) oder (17) liefern λ.

Durch Einsetzen in die Euler-Lagrange-Gleichungen erhält man das divergenzfreie Geschwindigkeitsfeld.

Randbedingungen

An den Rändern des Rechengebietes muß für die randsenkrechten Komponenten das Produkt aus λ und der Differenz zwischen den vorgegebenen und berechneten Windgeschwindigkeitskomponenten Null sein.

Für den Rand bei $x = x_{MAX}$ gilt z. B.: $\lambda(u - u_0) = 0$

Dieses kann man durch $\lambda = 0$ oder durch $u = u_0$ erreichen.

Für den Fall $\lambda = 0$ können sich die Geschwindigkeitskomponenten senkrecht zum Rand ändern (freier Rand). Dieses gilt für die seitlichen Ränder und den oberen Rand des Modellgebietes, wenn die Mischungsschichthöhe nicht mit dem Oberrand des Rechengebietes zusammenfällt.

Im anderen Fall, z. B. wenn $u = u_0$ ist, sind die Randbedingungen ebenfalls erfüllt. Die vorgegebenen Strömungskomponenten werden nicht geändert. Die Euler-Lagrange-Gleichungen zeigen, daß dieses gleichbedeutend mit einem senkrecht zum Rand verschwindenden Gradienten von λ ist. An festen Hindernissen, am Boden und an einer Mischungsschichtgrenze gilt diese Randbedingung.

Die Gleichungen (16) und (17) können nur numerisch gelöst werden.

Es ist möglich, das Initialwindfeld und das resultierende divergenzfreie Windfeld mit einer Windgeschwindigkeit (z. B. vom oberen Rand des Untersuchungsgebietes) zu normieren. Das divergenzfreie Windfeld kann dann durch Entnormierung jeder beliebigen gewünschten Windgeschwindigkeiten angepaßt werden.

7. Turbulenzfelder berechnen

Die Diffusionskoeffizienten für den Transport von Schadstoffen werden aus den Diffusionskoeffizienten für den turbulenten Transport von Bewegungsgröße abgeleitet. Dabei wird zusätzlich angenommen, daß der turbulente Transport von Wärme und Schadstoffen identisch ist.
Die Diffusionskoeffizienten für den turbulenten Transport von Bewegungsgröße können nach folgenden Gleichungen berechnet werden:

$$K_x = l_x^2 \left\{ \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \qquad (18)$$

$$K_y = l_y^2 \left\{ \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \qquad (19)$$

$$K_z = l_z^2 \left\{ \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \qquad (20)$$

Die Geschwindigkeitsgradienten werden aus dem Windfeld berechnet. Die Mischungsweglängen l_x, l_y und l_z können aus dem Abstand vom festen Rand bestimmt werden. Nach Blackadar gilt für den vertikalen Mischungsweg bei indifferenter Schichtung

$$l_i = \frac{\kappa \left(\xi + z_o \right)}{\left(1 + \frac{\kappa \xi}{\Lambda} \right)} \quad , \qquad (21)$$

mit κ = 0.4, ξ dem Abstand vom festen Rand und Λ dem asymptotischen Grenzwert von l_i.

Die Abhängigkeit der turbulenten Diffusion von der Stabilität kann durch eine Korrekturfunktion F und eine Variation von Λ berücksichtigt werden.

Die Korrektur ist gegeben durch:

$$l = l_i \cdot F \quad . \qquad (22)$$

Die Funktion F ist von der Stabilität abhängig und gegeben durch:

$$F = \left(1 - 15\, Rif \right)^{\frac{1}{4}} \qquad \text{(labile Schichtung)} \qquad (23)$$

$$F = 1 \qquad \text{(indifferente Schichtung)} \qquad (24)$$

$$F = \left(1 + 4.7\, Rif \right)^{-1} \qquad \text{(stabile Schichtung)} \qquad (25)$$

Rif ist die Richardson'sche Flußzahl, die sich aus den Profilfunktionen Φ_M und Φ_H berechnen läßt:

$$\mathrm{Rif} = \frac{z}{L} \left| \frac{\Phi_H\left(\frac{z}{L}\right)}{\left(\Phi_M\left(\frac{z}{L}\right)\right)^2} \right| \quad . \qquad (26)$$

Der asymptotische Grenzwert des Mischungsweges ist gegeben durch:

$$|\Lambda| = 30$$

8. Emissionen berechnen

Eingangsgrößen für die Emissonsberechnungen sind Verkehrsdaten und spezifische Emissionen. Zur Zeit werden noch die spezifischen Emissionen aus der MLuS-92, extrapoliert auf das Jahr 1995, verwendet. Eingangsgrößen für die entsprechenden Tabellen sind

- Fahrmodus und
- Fahrzeugart.

Man erhält die spezifische Emission pro Fahrzeug in g/s für eine Reihe von Substanzen.

Eingangsgröße für die Ausbreitungsrechnung ist die Emission als Halbstundenmittelwert. Dieser ergibt sich aus dem Fahrmodus (konstant innerhalb des Halbstundenintervalls), der Anzahl der Fahrzeuge und den prozentualen Anteilen von PKW, Nutzfahrzeuge < 3.5 t und $\geq$ 3.5 t.

Bei der Berechnung von statistischen Kenngrößen werden nicht die Einzelwerte der Emissionen verwendet, sondern Häufigkeitsverteilungen. Die Häufigkeitsverteilungen der Emissionen müssen aus Häufigkeitsverteilungen der Verkehrsdaten ermittelt werden.

Jeder Straße kann ein Fahrmodus zugeordnet werden, der z. Z. nicht von der Verkehrsdichte abhängt.

9. Normierte Konzentrationen berechnen

Zur Berechnung der Konzentrationen wird die stationäre Diffusionsgleichung verwendet. Die Gleichung kann mit der Windgeschwindigkeit und der Quellstärke

normiert werden. Hierdurch wird viel Rechenzeit eingespart, da aus den normierten Konzentrationen durch Multiplikation mit der jeweils gültigen Quellstärke und Division durch die vorhandene Windgeschwindigkeit die realen Konzentrationen berechnet werden können.

Die stationäre Diffusiongleichung ist gegeben durch:

$$\bar{u}\,\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v}\,\frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w}\,\frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = P \quad . \tag{27}$$

Die Produktion P ist gleich dem Transport durch den mittleren Wind und dem turbulenten Transport.

Die numerische Lösung der diskretisierten stationären Diffusionsgleichung erfolgt mit dem gleichen Iterationsverfahren wie es bereits für das Windfeld verwendet wird.

Es gibt freie und feste Ränder. Durch einen festen Rand erfolgt kein Massenstrom. Bei einem freien Rand ist ein Massenstrom möglich. Feste Ränder sind der Erdboden, Wände und Dächer von Gebäuden und gegebenenfalls eine Mischungsschichtgrenze. Freie Ränder sind die seitlichen Begrenzungen des Rechengebietes und, wenn keine Mischungsschichtgrenze vorliegt, der obere Rand.

Feste Ränder

Der advektive Massenstrom verschwindet, wenn die wandsenkrechte Strömungskomponente Null ist.
Der diffusive Massenstrom ist Null, wenn der wandsenkrechte Konzentrationsgradient oder der Austauschkoeffizient Null sind.

Freie Ränder

Freie Ränder sind halbdurchlässig, von außen wird keine Masse in das Rechengebiet transportiert. Am Ausströmrand wird aber Masse aus dem Rechengebiet heraustransportiert. Erreicht wird dieses durch Nullsetzen der Konzentration außerhalb des Rechengebietes. Hierdurch wird der diffusive Fluß aus dem Rechengebiet unverhältnismäßig vergrößert, da die Konzentration im Rechengebiet den Konzentrationsgradienten bestimmt. Dieser Fehler tritt nicht auf, wenn bei den freien Anströmrändern angenommen wird, daß der diffusive Fluß konstant ist.

Bei sehr niedrigen Windgeschwindigkeiten sind die Diffusionskoeffizienten nahezu gleich Null. Da dieses in der Natur nicht vorkommt, wird der Diffusionskoeffizient in diesem Falle auf einen Minimalwert gesetzt. Das hat aber zur Folge, daß die Diffusionsgleichung nicht mehr mit der Strömungsgeschwindigkeit normiert werden kann. Sehr kleine Austauschkoeffizienten treten bei Strömungsgeschwindigkeiten von 1 oder 2 m/s oberhalb der Bebauung auf. Ab 3 m/s ist wiederum eine Normierung der Diffusionsgleichung mit der Windgeschwindigkeit möglich. Es werden daher jeweils 3 normierte Konzentrationen für 1, 2 und 3 m/s in 30 m Höhe berechnet.

10. Konzentration berechnenen (Einzelfall und Zeitreihe)

Die Konzentration in einer Gitterbox ergibt sich aus der Überlagerung der Konzentrationsanteile der Fahrstreifenabschnitte konstanter Emission. Die Berechnung erfolgt in mehreren Schritten:

a) Bestimmung der aktuellen Windgeschwindigkeit zur Entnormierung der normierten Konzentration.

b) Entnormierung der normierten Konzentration für den 1. Fahrstreifenabschnitt durch Multiplikation mit der Emission in g/s, Multiplikation mit 5 m/s und Division durch die aktuelle Windgeschwindigkeit. Hierdurch erhält man den Konzentrationsanteil durch den 1. Fahrstreifenabschnitt.

c) Entnormierung der normierten Konzentrationen für den 2. Fahrstreifenabschnitt und Addition zu den schon berechneten Konzentrationen.

d) Weiterführung der Rechnungen bis zum letzten Fahrstreifenabschnitt.

e) Speicherung der Ergebnisse.

Bei einer Zeitreihe werden nur die normierten Konzentrationen an dem vorgegebenen Aufpunkt entnormiert und addiert. Der Vorgang wird für alle Zeitreihenabschnitte wiederholt. Die Ergebnisse werden ebenfalls abgespeichert.

11. Konzentration berechnen (Statistische Kenngrößen)

Die statistischen Kenngrößen werden aus den Häufigkeitsverteilungen der Konzentrationen bestimmt.

Die Häufigkeitsverteilungen werden (am Beispiel eines Gitterelementes) wie folgt bestimmt:

1. Auswahl der 1. Stabilitätsklasse

2. Auswahl der 1. Windrichtung bei dieser Stabilitätsklasse

3. Auswahl der 1. Windgeschwindigkeit bei dieser Windrichtung. (Die Häufigkeit dieser Kombination von Stabilitätsklasse, Windrichtung und Windgeschwindigkeit beträgt z. B. 0.03 %.)

4. Auswahl des 1. Emissionsintervalles. (Die Häufigkeit ist bei jedem Emissionsintervall 10 %.)

5. Auswahl des 1. Fahrstreifens konstanter Emission. (Hierzu gehört eine normierte Konzentration.)

6. Entnormierung der Konzentration. (Multiplikation mit der Emission und mit 5 m/s und Division durch die Windgeschwindigkeit.)

7. Auswahl des nächsten Fahrstreifens konstanter Emission. (Entnormierung wie unter Punkt 6.) Addition der beiden Konzentrationen.

8. Weiterführung der Rechnungen bis zum letzten Fahrstreifen konstanter Emission. (Die Gesamtkonzentration durch alle Fahrstreifen an diesem Aufpunkt ist berechnet.)

9. Bestimmung der Häufigkeit, mit der die Konzentration nach Punkt 8 auftritt. (Multiplikation der Häufigkeit der Ausbreitungsbedingung mit der des Emissionsintervalls, z. B. 0.03 % × 0.1 = 0.003 %.)

10. Auswahl des nächsten Emissionsintervalls und weiter wie unter Punkt 5 bis 9. (Damit werden die nächsten Konzentrationen und die Häufigkeiten, mit denen sie vorkommen, bestimmt.)

11. Auswahl des nächsten Windgeschwindigkeitsintervalls. (Wenn alle 10 Emissionsintervalle abgearbeitet worden sind.) Dann weiter mit den Punkten 4 bis 10.

12. Auswahl des nächsten Windrichtungsintervalles. (Nachdem alle Windgeschwindigkeitsintervalle abgearbeitet worden sind.) Dann weiter mit den Punkten 3 bis 11.

13. Auswahl der nächsten Stabilitätsklasse. (Nachdem alle Windrichtungsklassen abgearbeitet worden sind.) Dann weiter mit den Punkten 2 bis 12.

14. Nachdem alle Stabilitätsklassen abgearbeitet worden sind, sind alle Konzentrationen und die dazugehörenden Häufigkeiten für das ausgewählte Gitterelement berechnet worden.

15. Sortierung der Konzentrationen nach der Größe. (Häufigkeitsverteilung mit 100 Klassen.)

16. Berechnung der gesuchten Kenngrößen. (Mittelwert und 98%-Überschreitungswahrscheinlichkeit.)

17. Anderer Schadstoff. Wenn zwischen den Emissionen der beiden Stoffe ein linearer Zusammenhang besteht, werden die Konzentrationen mit dem Quotienten der Emissionen der beiden Stoffe multipliziert. Besteht kein linearer Zusammenhang, muß mit den neuen Häufigkeitsverteilungen der Emissionen die Rechnung ab Punkt 1 wiederholt werden.

Statistische Kenngrößen können nur für jeweils eine Schicht berechnet werden und es werden auch immer alle freien Gitterelemente in der Schicht berechnet.

12. Ausgabeprozeduren

Prinzipiell kann alles, was auf dem Bildschirm angezeigt werden kann, auch ausgedruckt werden.

12.1 Hinderniskataster

Auf dem Bildschirm kann das gesamte Hinderniskataster oder ein Ausschnitt in verschiedenen Vergrößerungen angezeigt werden. Der auf dem Monitor dargestellte Ausschnitt kann ausgedruckt werden.

12.2 Emissionen

Die Emissionen im Einzelfall können zusammen mit den Hindernissen (aufgelöst entsprechend den Gitterelementen) als Horizontalschnitt ausgedruckt werden. Farben können vom Benutzer definiert werden.

12.3 Fahrstreifen

Die Fahrstreifen werden in den Konzentrationsverteilungen als Linien angezeigt und ausgedruckt.

12.4 Windfelder

Die Windfelder sind alle mit 5 m/s in 30 m Höhe berechnet worden. Vor der Anzeige müssen sie entsprechend der aktuellen Windgeschwindigkeit in 30 m Höhe entnormiert werden. Anzeige und Ausdruck erfolgen in Horizontalschnitten. Dargestellt werden Trajektorien, d. h. hypothetische Partikelbahnen. Verfolgungszeit, Anzahl der Startpositionen und der Stützstellen können vom Benutzer verändert werden.

12.5 Konzentrationsfelder, Einzelfall

Horizontalschnitte der Konzentration können angezeigt und ausgedruckt werden. Die Farben können vom Benutzer ausgewählt werden.
Mit der Maus kann ein Gitterelement ausgewählt und die Konzentration angezeigt werden.

12.6 Konzentration, Zeitreihe

Für jede Substanz wird die Zeitreihe der Immissionen für den ausgewählten Aufpunkt als Grafik angezeigt. Diese Grafik kann ausgedruckt werden. Gleichzeitig wird der zeitliche Verlauf der Emissionen für das Gesamtgebiet dargestellt. Eine Grafik enthält die Zeitreihe der meteorologischen Eingangsgrößen.

12.7 Statistische Kenngrößen

Die Ausgabe erfolgt wie beim Einzelfall. Es stehen aber nur die Werte aus der untersten Schicht zur Verfügung.

13. Chemische Umwandlungen

Chemische Umwandlungen können zur Zeit nicht direkt berücksichtigt werden, da die reaktionskinetischen Daten noch nicht bekannt sind. Jahresmittelwert und die 98%- Überschreitungswahrscheinlichkeit von NO und NO_2 wird aus $N0_x$ berechnet.

14. Systemanforderungen

Zum Arbeiten mit ***DASIM-KFZ*** ist folgende Minimalkonfiguration ist notwendig:

- ein IBM PC oder IBM-kompatibler PC mit einem 80386 Prozessor mit mathematischem Koprozessor, 80486 Prozessor oder Pentium Prozessor
- Festplatte mit mindestens 7 MByte freiem Speicherplatz
- Diskettenlaufwerk (3 ½-Zoll mit 1.44 MByte)
- 4 MByte RAM (Arbeitsspeicher)
- VGA-Karte, Super VGA-Karte
- Microsoft DOS 5.0 oder höher
- Microsoft Windows 3.1 oder höher

Die Berechnungen mit ***DASIM-KFZ*** können je nach Anwendungsfall sehr rechenzeit- und speicherplatzintensiv sein. Höhere Taktfrequenzen des Prozessors (≥ 33MHz) und ein größerer Arbeitsspeicher (mindestens 8 MByte, bei größeren Gebieten z. B. 32 MByte) sind daher empfehlenswert.