

Zusammenfassung

Diese Dissertation besteht aus mehreren Beiträgen zur kurzreichweitigen Schadstoffausbreitung in der atmosphärischen Grenzschicht. Sie umfassen die Entwicklung, Validierung und Anwendung eines Modells namens Puff-Partikel Modell (PPM), die Untersuchung einer Methode zur Dichteschätzung für reine Partikel-Ausbreitungsmodelle mittels Dichtekerne, und die Behandlung der Auswirkungen von städtischen Oberflächen auf die Ausbreitungscharakteristiken.

Das PPM ist die Kombination eines Lagrange'schen Gauss'schen Puff-Modells und eines stochastischen Lagrange'schen Partikelmodells. Im PPM wird die Schadstoffemission simuliert durch anfänglich kleine Wölkchen (nachfolgend nach dem Englischen "Puff" genannt), welche durch den mittleren Wind fortbewegt werden. Der dispersive Effekt von turbulenten Wirbeln, welche kleiner sind als das jeweilige Puff, wird durch eine Parametrisierung der relativen Dispersion beschrieben. Zusätzlich weisen die Puffs ein künstliches Mäandrieren auf mit Zeitskalen, welche kürzer sind als die Zeitspanne zwischen zwei aufeinanderfolgenden Aufdatierungen des mittleren Windfeldes.

Üblicherweise verwenden Puff-Modelle entweder eine Parametrisierung der absoluten Dispersion, welche auch die Dispersion aufgrund des Mäandrierens umfasst. Solche Modelle vermögen das Ensemblemittel der Schadstoffkonzentration vorherzusagen. Alternativ können Puff-Modelle den Beitrag des Mäandrierens separat aus den statistischen Eigenschaften der Turbulenz ableiten. Dies ermöglicht die Vorhersage der instantanen Konzentration zusammen mit ihrer Varianz. In beiden Fällen wird die Emission einer Schadstoffwolke durch ein "Puff" simuliert. Im Gegensatz dazu weisen die Puffs im PPM ein stochastisches aber realistisches Mäandrieren auf. Um Ensemblemittel zu erhalten, muss für jede emittierte Schadstoffwolke eine Ensemble von Puffs simuliert werden. Jede simulierte Puff-Trajektorie stellt dabei einen möglichen Ablauf der Schadstoffausbreitung dar. Der Hauptvorteil dieses Ansatzes besteht darin, dass die Puffs immer mit dem mittleren Wind ihrer aktuellen Position transportiert werden können. Die Varianz kann nicht nur für die instantane Konzentration errechnet

werden, sondern wegen zeitlichen Korrelation zwischen aufeinanderfolgenden Positionen des mäandrierenden Puffs, auch für jene andere Mittelungsdauer.

Das Mäandrieren der Puffs erlaubt dem PPM, gleichzeitig mit dem Mittel der Konzentration auch die höheren Momente zu berechnen. Dies erlaubt die Risikoabschätzung für die Freisetzung von giftigen Gasen oder die Berechnung der Übertretenshäufigkeit einer bestimmten Geruchswahrnehmungsschranke. Das im PPM eingebaute Partikelmodell beschreibt die zeitliche Entwicklung von Partikelgeschwindigkeit und -ort als Markovprozess. Damit wird die räumliche und zeitliche Abhängigkeit zwischen zwei benachbarten Partikeln vernachlässigt. Um das PPM nicht nur für die Emission von Puffs, sondern auch für Rauchfahnen verwenden zu können, wurde ein spezieller Puff-Rauchfahne-Mäandrierungs-Algorithmus eingebaut. Es führt eine Abhängigkeit der einzelnen Puffs von ihren Vorgängern in der Rauchfahne ein.

Um sicherzustellen, dass diese Trajektorie die korrekte Menge an kinetischer Energie abbildet, berechnet das PPM für jedes Puff eine vollständige, drei-dimensionale Partikeltrajektorie. Diese Partikeltrajektorie wird mit Hilfe eines stochastischen Lagrangeschen Partikelmodells berechnet. Solche Partikeltrajektorien bilden das gesamte Turbulenzspektrum ab. Deshalb wird ein Tiefpassfilter verwendet, welches den Effekt aller turbulenten Wirbel entfernt, welche kleiner sind als das gegenwärtige Puff. Die resultierende Zeitreihe von stochastischen Geschwindigkeiten wird als Pufftrajektorie verwendet. Auf diese Weise wird vermieden, dass ein (mit wachsendem Puff) zunehmender Teil der Dispersion doppelt berücksichtigt wird, sowohl durch die Pufftrajektorie als auch durch die Parametrisierung der relativen Dispersion.

Das PPM kann verwendet werden, um herkömmliche mittlere Konzentrationen vorherzusagen. Dazu wird das Mittel über viele individuelle Pufftrajektorien gebildet. Für drei Tracerexperimente wird die Vorhersage des PPM mit jener anderer Modelle verglichen. Das PPM weist– wegen des eingebauten vollständigen Partikelmodells – etwa die gleiche Vorhersagefähigkeit auf wie vergleichbare reine Partikelmodelle (welche die besten Vorhersagen liefern), ist aber etwa eine Größenordnung schneller. Dies ist auf die Verwendung der Puffs zurückzuführen, welche zu einer glatten Konzentrationsfeld-Vorhersage führen. Reine Partikelmodelle müssen dazu wesentlich mehr Partikel simulieren. Es wird eine Methode vorgeschlagen, wie auch Partikelmodelle glatte Konzentrationsfelder produzieren können,

was sie entsprechend beschleunigt. Dazu wird jedem Partikel eine Dichtefunktion zugeordnet. Zum Zeitpunkt der Konzentrationsberechnung wird dann die optimale Ausdehnung dieser Dichtefunktionen ermittelt, indem zwischen Glattheit und Überglättung des Konzentrationsfeldes optimiert wird.

Neben dem PPM bildet die Anwendung von Gauss'schen Rauchfahnen-Modellen über städtischem Gebiet ein weiterer Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit. Für die Konzentrationsvorhersage alleinstehender Hochkaminen erzielen Gaussmodelle akzeptable Resultate, weil die Bedingung der Homogenität oft näherungsweise erfüllt ist. Heutzutage treten ernsthafte Luftreinhaltungsprobleme in den immer noch wachsenden Städten auf. Bebaute Gebiete weisen eine andere Turbulenzstruktur auf. Anhand eines konkreten Beispiels wird gezeigt, welche Änderungen in Einsatz und Programmcode notwendig sind, um einen Einsatz für städtische Gebiete zu ermöglichen.