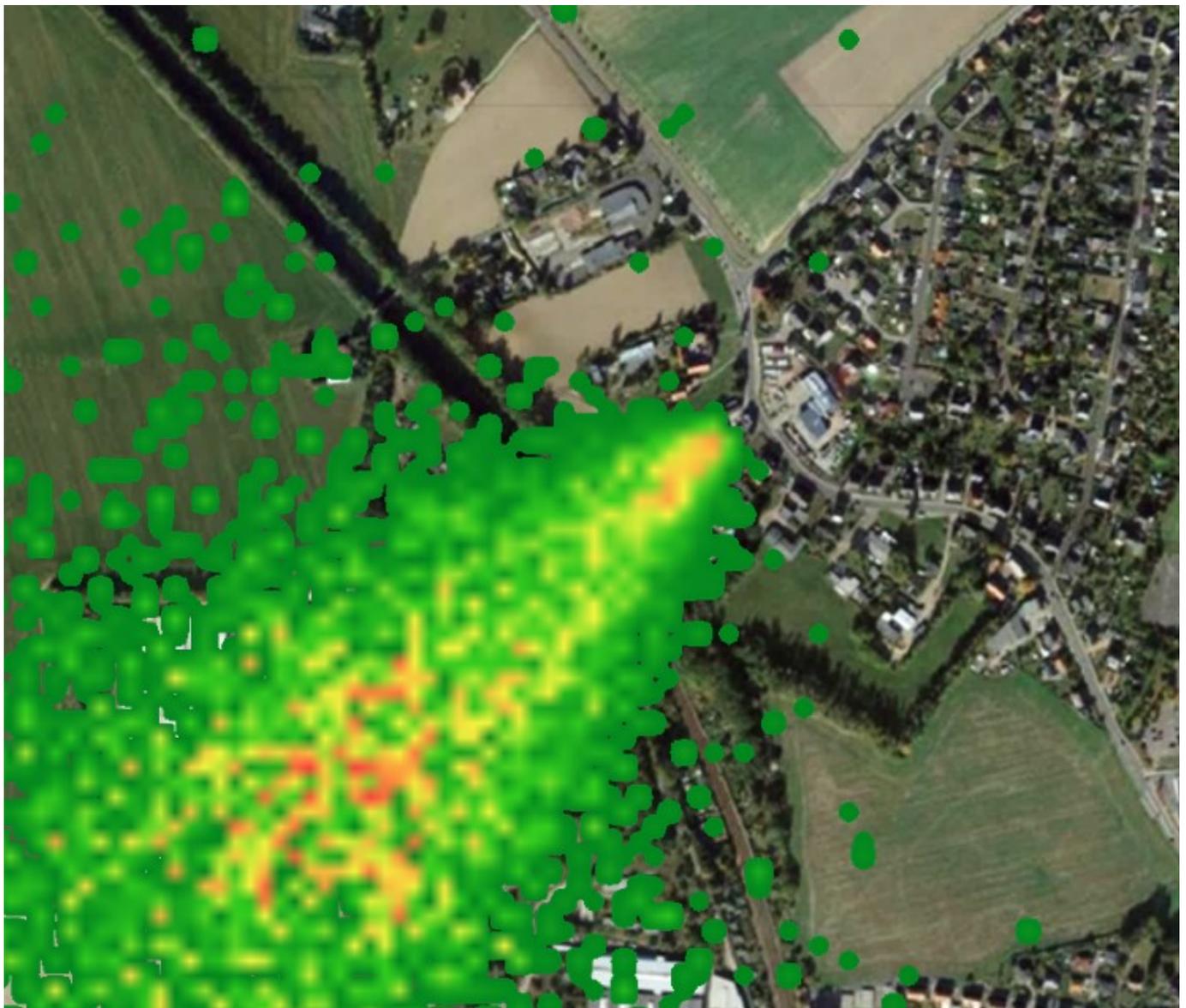


Lagrange-Rückrechnung bei Geruchsmessungen

Schriftenreihe, Heft 8/2022



Einsatz der Lagrange-Rückrechnung bei der Auswertung von Geruchsmessungen

Bericht zum Forschungsvorhaben
Stand: 30.11.2021

Ralf Petrich (IfU GmbH Privates Institut für Analytik)

im Auftrag des Sächsischen Landesamtes für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Motivation	5
1.2	Anwendungsbereich	5
1.3	Begriffsbestimmung	6
1.3.1	Ausbreitungsrechnung	6
1.3.2	Immissionsprognose nach TA Luft	6
1.3.3	Lagrange-Ausbreitungsmodell	6
1.3.4	Rückrechnung	7
1.3.5	Lagrange-Trajektorien	7
1.3.6	Windfeldmodell	7
1.3.7	Windfeld	7
1.3.8	Windfeldbibliothek	8
1.3.9	Windfeldzeitreihe	8
2	Theoretische Betrachtungen zur Lagrange-Rückrechnung	9
2.1	Ausgangssituation	9
2.2	Lösungsansatz	9
2.3	Voraussetzungen für die Verwendung der Lagrange-Rückrechnung	12
2.4	Modellgrenzen und Einschränkungen	12
2.5	Möglichkeiten zur Fortentwicklung	13
3	Praktische Anwendung der Lagrange-Rückrechnung	13
3.1	Allgemeine Betrachtungen	13
3.2	Besondere Aspekte bei der praktischen Anwendung	14
3.2.1	Anforderungen an die Messwertaufnahme	14
3.2.2	Prognostische instationäre Modellierung von Windfeldzeitreihen	15
3.3	Anforderungen für die Verwendung in der Praxis	18
4	Beispiele für die Anwendung der Lagrange-Rückrechnung	18
4.1	Beispiel 1: St. Egidien (2014)	19
4.2	Beispiel 2: Freiberg-Neuhilbersdorf (2015-2016)	19
4.3	Beispiel 3: Mittweida-Lauenhain (2018-2019)	20
4.4	Beispiel 4: Großhartmannsdorf (2021-2022)	21
5	Zusammenfassung	22
	Schrifttum	23

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Wahrscheinlichkeitswolke im Luv des Aufpunktes dafür, dass die Quelle an diesem Ort liegt.....	10
Abbildung 2: Schematische Darstellung von überlagerten Wahrscheinlichkeiten bei zwei instationär modellierten meteorologischen Stationen.....	11
Abbildung 3: Beispiel für eine Rückrechnung mit Lagrange-Trajektorien	14
Abbildung 4: Beispiel Freiberg-Neuhilbersdorf für eine Rückrechnung mit Lagrange-Trajektorien	20
Abbildung 5: Beispiel Mittweida-Lauenhain für eine Rückrechnung mit Lagrange-Trajektorien.....	21

Tabellenverzeichnis

Tabelle: Angaben zu den einzelnen Messperioden.....	19
---	----

1 Einleitung

1.1 Motivation

Künftig ist die Ausbreitungsmodellierung von Gerüchengebiet in der TA Luft [1], insbesondere in den Anhängen 2 und 7. Zur Anwendung ist ein Lagrange-Modell nach VDI-Richtlinie 3945 Blatt 3 vorgeschrieben, das in den Programmsystemen Austal [2] und LASAT [3] umgesetzt ist. Diese Ausbreitungsmodelle sind in der Lage, Konzentrationen von Luftbeimengungen bei bekannter Quellstärke und Quellgeometrie flächendeckend zu berechnen.

Für Problemsituationen im Immissionsschutz ist aber auch oft die umgekehrte Fragestellung von großer Bedeutung, wenn beispielsweise Geruchsmissionen aufgrund von Beschwerdesituationen und Messwerten „bekannt“ sind, aber die Quelle, also der Verursacher gefunden werden muss. In diesem Falle spricht man von einer Rückrechnung auf Quellen.

Solche Aufgabenstellungen wurden vom LfULG in der jüngeren Vergangenheit schon mehrfach im Rahmen von Forschungstätigkeit bearbeitet, beispielsweise an den Standorten St. Egidien, Freiberg und Mittweida. Dabei kam die Smellmaster-Technologie zum Einsatz, die das kontinuierliche Erfassen von Geruchsmissionen über längere Zeiträume wie ein Vierteljahr und länger gestattet. Die Ergebnisse dieser Projekte ließen eine Richtungsdiskussion hinsichtlich des vermuteten Verursachers zu, außerdem konnten Anhaltspunkte gewonnen werden, welche Geruchsstundenhäufigkeit am Aufstellort des Messgerätes vorgelegen hat.

In den letzten beiden Jahren sind Verfahren zur Rückrechnung veröffentlicht worden, die das in der TA Luft vorgeschriebene Lagrange-Verfahren für eine Rückrechnung benutzen und mit leistungsfähiger Rechen-technik wesentlich detailliertere Auswertungen zulassen [4]. Mit dem genannten Verfahren ist es möglich, nicht nur die Quellstärke eines Emittenten zu bestimmen, sondern auch dessen Lage, wenn nicht bekannt ist, wer der Verursacher ist. Durch Anwendung des Lagrange-Modells lässt sich ebenfalls ermitteln, wie hoch die Geruchsstundenhäufigkeit als für die Belästigung relevante Kenngröße nicht nur punktuell, sondern flächendeckend im gesamten Beschwerdegebiet ist.

1.2 Anwendungsbereich

Das vorliegende Dokument soll eine Verfahrensweise zur praktischen Anwendung der Lagrange-Rückrechnung bei der Auswertung von Geruchsmessungen aufzeigen.

In diesem Rahmen wird ein Referenzalgorithmus vorgestellt, der nach gegenwärtigem Erkenntnisstand in der Lage ist, bei zeitlich hochaufgelösten Messungen der Immissionskonzentration einer Luftbeimengung sowie meteorologischer Parameter auf Quellstärke und die Lage von Quellen zurückzurechnen.

Die Entwicklung dieses Algorithmus erfolgte aufbauend auf Erkenntnissen von bereits erfolgreich abgeschlossenen Forschungsprojekten des LfULG, insbesondere:

- Modellierung von Kaltluftabflüssen (2012, Kaltluft-Leitfaden) [5],
- Modellierung von steilem Gelände (2016, LfULG-Forschungsprojekt),
- Messung von Geruchsraddar-daten (verschiedene Pilotprojekte).

Es wurde dabei versucht, für bisherige Pilotprojekte mit durchgeführten Geruchsmessungen zur Aufklärung der Beschwerdesituation an verschiedenen Standorten mit weiterer Forschungstätigkeit die bisher erfassten Daten mittels der neuartigen Lagrange-Rückrechnung zu untersuchen.

Insbesondere sollte es aber Ziel sein, ein Verfahren zu erarbeiten, mit dem künftig routinemäßig eine Auswertung von Daten aus dem Geruchsmonitoring erfolgen kann, um in Problemsituationen zielgerichtet eine Aufklärung von Beschwerdesituationen durchführen zu können. Zur Datenerfassung der Geruchsbelastung bei Beschwerden können Daten der Smellmaster-Technologie dienen, jedoch ist das Prinzip der Rückrechnung auch für andere Schadstoffe und Messsysteme geeignet, wenn diese hoch zeitaufgelöst messen können.

1.3 Begriffsbestimmung

1.3.1 Ausbreitungsrechnung

Unter Ausbreitungsrechnung ist hier die Ermittlung von Immissionskenngrößen von Luftbeimengungen (Schadstoffe, Gerüche) unter Anwendung des in TA Luft Anhang 3 vorgegebenen Formalismus zu verstehen. Gegenwärtig stehen dazu die Softwarepakete AUSTAL [2] und LASAT [3] zur Verfügung.

1.3.2 Immissionsprognose nach TA Luft

Unter Immissionsprognose nach TA Luft ist hier die Durchführung einer Ausbreitungsrechnung im Kontext einer immissionsschutzrechtlichen Fragestellung zu verstehen. Während das Ziel der Ausbreitungsrechnung eine möglichst genaue Ermittlung der Immissionskenngrößen ist, können im Rahmen einer Immissionsprognose auch Abschätzungen in Kauf genommen werden, die zu einer Überschätzung der Immissionskenngrößen führen.

Die Immissionsprognose soll zur Entscheidungsfindung in immissionsschutzrechtlichen Fragestellungen dienen und geht damit über die mathematisch formale Durchführung einer Ausbreitungsrechnung hinaus. Die Immissionsprognose kann beispielsweise eine Bewertung der ermittelten Immissionskenngrößen enthalten, zusätzliche Prozeduren zur Ermittlung von Vorbelastung oder Gesamtbelastung oder, wie oben erwähnt, fallbezogene Abschätzungen oder Vereinfachungen.

1.3.3 Lagrange-Ausbreitungsmodell

Lagrange-Ausbreitungsmodelle (beispielsweise Austal [2], LASAT [3], GRAL [6]) beruhen auf beweglichen Lagrange-Partikeln, die an den Quellpunkten starten und sich geführt von Windfeld und Turbulenzfeld durch das Rechengebiet bewegen. Dabei wird angenommen, dass jedes Lagrange-Partikel eine definierte Masse an Luftbeimengung trägt, deren Ausbreitung modelliert werden soll. Die Anzahl der pro Zeiteinheit emittierten Lagrange-Partikel hat die Dimension Masse pro Sekunde, was dem Emissionsmassenstrom entspricht. Zu jedem Zeitpunkt der modellierten Ausbreitung ist es dann möglich, die Anzahl von Lagrange-Partikeln in einer Gitterzelle zu zählen. Diese Anzahl pro Volumeneinheit hat die Dimension einer Konzentration, woraus über die den Partikeln zugeordnete Masse auf die Konzentration der Luftbeimengung in dieser Zelle zu schließen ist.

Damit ergibt sich eine räumliche (über die Gitterzellen) und zeitliche (über die Zeitschritte der Ausbreitungsmodellierung) Verteilung der Konzentration der Luftbeimengung im ganzen Rechengebiet. Die Partikel können rechenstechnisch mit einer Markierung versehen werden, um zwischen verschiedenen Quellen oder verschiedenen Luftbeimengungen zu unterscheiden. In Auswertung der Ausbreitungsrechnung werden für bestimmte Aufpunkte (Immissionsorte) bzw. flächendeckend zeitliche Mittelwerte der Konzentration oder Perzentile ausgerechnet, die den zu ermittelnden Kenngrößen entsprechen.

1.3.4 Rückrechnung

Aufgabenstellung einer Rückrechnung ist das Auffinden und Charakterisieren einer Quelle von Luftbeimengungen ausgehend von Messungen der Konzentration dieser Luftbeimengung an einem oder mehreren Aufpunkten.

Herkömmliche Methoden zur Rückrechnung ermitteln meist mit Messtechnik oder bei Gerüchen durch Begehung einen zeitlichen Mittelwert der betrachteten Kenngröße an einem oder mehreren Aufpunkten.

Dann wird versucht, über Variationen der Quellstärke und iterativ wiederholten Ausbreitungsrechnungen solche Parameter zu finden, die bei durchgeführter Ausbreitungsrechnung die an den Aufpunkten ermittelten Kenngrößen möglichst gut reproduzieren. Der zu erwartende Informationsgewinn ist bei diesem Verfahren meist nicht besonders groß, da man bei bekannter Lage und Quellgeometrie nur versucht, wenigstens die Quellstärke zu ermitteln. Dass insbesondere bei Betrachtung von Gerüchen während der Ausbreitungsrechnung noch eine Perzentilbildung stattfindet, erschwert dieses Verfahren weiterhin.

1.3.5 Lagrange-Trajektorien

Lagrange-Trajektorien sind die Flugbahnen der virtuellen Lagrange-Partikel bei der Ausbreitungsrechnung mit einem Lagrange-Ausbreitungsmodell (siehe Abschnitt 1.3.3). Bei der Rückrechnung mittels Lagrange-Trajektorien werden diese vom Aufpunkt (Konzentrationsmessung) zu möglichen Quellorten zurückverfolgt.

1.3.6 Windfeldmodell

Unter Windfeldmodell ist hier ein Algorithmus zu verstehen, der bei Bereitstellung verschiedener Eingangsdaten (beispielsweise Geländemodell, Bodenrauigkeit) Windfelder (siehe Abschnitt 1.3.7) liefert, die zur Durchführung einer Ausbreitungsrechnung (siehe Abschnitt 1.3.1) verwendet werden können.

Für immissionsschutzrechtliche Fragestellungen spielen gegenwärtig hauptsächlich diagnostische und prognostische Windfeldmodelle eine Rolle. Beide unterscheiden sich hinsichtlich des Umfangs und des Detaillierungsgrades, mit dem die meteorologischen und physikalischen Prozesse in der Atmosphäre modelliert werden. Diagnostische Windfeldmodelle gehen von Schätzungen (Initialisierungswindfelder) aus, für die dann unter Einfluss von Geländeunebenheiten und gegebenenfalls umströmten Hindernissen Divergenzfreiheit hergestellt wird. Prognostische Windfeldmodelle können darüber hinaus über Modellansätze die Erhaltung von Impuls und Energie berücksichtigen, wobei je nach Detaillierungsgrad bestimmte meteorologische Phänomene besser modelliert werden können als mit diagnostischen Windfeldmodellen. Zu diesen meteorologischen Phänomenen zählen beispielsweise Verwirbelungen in steilem Gelände oder im Lee-Bereich von umströmten Hindernissen, aber auch lokale Besonderheiten wie Kaltluftabflüsse.

Die gegenwärtig hauptsächlich für Ausbreitungsrechnungen eingesetzten Softwarepakete AUSTAL 2000 und LASAT enthalten jeweils ein diagnostisches Windfeldmodell.

1.3.7 Windfeld

Unter Windfeld ist hier ein Datensatz zu verstehen, der für jede Gitterzelle bei einer Ausbreitungsrechnung den dort anzutreffenden Wind beschreibt. Somit sind diese Datensätze dreidimensionale Felder, die das Rechengebiet abbilden. Für jede Gitterzelle sind drei Komponenten der vektoriellen Windgeschwindigkeit abgelegt.

Windfelder sind zumeist Dateien, die nach einem bestimmten Ordnungsprinzip in Windfeldbibliotheken oder Windfeldzeitreihen zusammengefasst sein können.

1.3.8 Windfeldbibliothek

Unter Windfeldbibliothek ist hier die Sammlung von Windfeldern zu verstehen, die zur Verwendung für eine Ausbreitungsrechnung meist nach Anströmrichtung und Ausbreitungsklasse vorsortiert sind.

Um die Ausbreitungsrechnung für eine konkrete meteorologische Situation (Anströmrichtung, Ausbreitungsklasse, Windgeschwindigkeit) durchzuführen, wird beispielsweise in der Windfeldbibliothek ein passendes Windfeld gesucht, das möglichst gut mit der konkreten Anströmrichtung und der konkreten Ausbreitungsklasse übereinstimmt. Dieses Windfeld wird dann auf die konkrete Windgeschwindigkeit skaliert und für die Ausbreitungsrechnung verwendet. Meist wird zur besseren Repräsentation der konkreten Anströmrichtung nicht nur das am besten passende Windfeld einer Windfeldbibliothek verwendet, sondern eine gewichtete Überlagerung von zwei Windfeldern gebildet, die die konkrete Anströmrichtung „einrahmen“.

Im Standardfall zur Berücksichtigung von Geländeunebenheiten und umströmten Hindernissen arbeiten die Softwarepakete AUSTAL und LASAT mit Windfeldbibliotheken, die Windfelder für 6 Ausbreitungsklassen und 36 Anströmrichtung beinhalten, insgesamt also 36 Windfelder.

Windfeldbibliotheken haben den Vorteil, dass bei Ausbreitungsrechnungen, die für einen größeren Zeitraum und damit für viele einzelne konkrete meteorologische Situationen durchgeführt werden, nicht für jede konkrete Situation ein separates Windfeld vorhanden sein muss. Beispielsweise müssen für die Berechnung einer Jahreszeitreihe mit stündlicher Auflösung nicht 8760 Windfelder berechnet und vorgehalten werden, sondern nur die (beispielweise) 216 Bibliothekswindfelder. Für jede der 8760 konkreten meteorologischen Situationen (Stunden eines Jahres) werden dann je nach Anströmrichtung und Ausbreitungsklasse die passenden Vertreter aus der Windfeldbibliothek entnommen, mit der Windgeschwindigkeit skaliert und für die Ausbreitungsrechnung verwendet.

Modellrechnungen haben gezeigt, dass die dabei hinzunehmenden Genauigkeitseinbußen so gering sind, dass sich die Verwendung von Windfeldbibliotheken lohnt.

Allerdings können Windfeldbibliotheken insbesondere bei der Berücksichtigung von Kaltluftabflüssen nur unter Annahme von einschneidenden Kompromissen verwendet werden, die eine sachgerechte Modellierung nicht mehr ermöglichen.

1.3.9 Windfeldzeitreihe

Unter Windfeldzeitreihe ist hier die Sammlung von Windfeldern zu verstehen, die zur Verwendung für eine Ausbreitungsrechnung zeitlich sortiert sind, wobei für jede konkrete meteorologische Situation genau ein Windfeld vorgehalten wird.

Bei diesem Konzept müssen für die Berechnung einer Jahreszeitreihe mit stündlicher Auflösung 8760 Windfelder berechnet und vorgehalten werden. Dadurch steigt der Aufwand für Berechnung und Speicherung der Windfelder gegenüber der Verwendung einer Windfeldbibliothek um ein Vielfaches an. Vorteilhaft dabei ist aber, dass für jede konkrete meteorologische Situation (Anströmrichtung, Ausbreitungsklasse, Windgeschwindigkeit) genau ein Windfeld modelliert wird, das (je nach Güte des Windfeldmodells) eine bestmögliche Beschreibung der tatsächlichen Situation widerspiegelt.

2 Theoretische Betrachtungen zur Lagrange-Rückrechnung

2.1 Ausgangssituation

Herkömmliche Methoden zur Rückrechnung ermitteln meist mit Messtechnik oder bei Gerüchen durch Begehung einen zeitlichen Mittelwert der betrachteten Kenngröße an einem oder mehreren Aufpunkten im Rechengebiet.

Dann wird versucht, über Variationen der Quellstärke und iterativ wiederholten Ausbreitungsrechnungen solche Parameter zu finden, die bei durchgeführter Ausbreitungsrechnung die an den Aufpunkten ermittelten Kenngrößen möglichst gut reproduzieren. Der zu erwartende Informationsgewinn ist bei diesem Verfahren meist nicht besonders groß, da man bei bekannter Lage und Quellgeometrie nur versucht, wenigstens die Quellstärke zu ermitteln. Dass insbesondere bei Betrachtung von Gerüchen während der Ausbreitungsrechnung noch eine Perzentilbildung stattfindet, erschwert dieses Verfahren weiterhin.

Deshalb wurde nach neuen Ansätzen gesucht, um die Rückrechnung effektiver im Hinblick auf die Informationsausbeute zu gestalten. Dazu gehört, dass man eine größere Menge an Informationen in die Berechnung einfließen lässt. Grundidee war deshalb, möglichst hoch zeitaufgelöste Messwerte für die Konzentration am Aufpunkt oder an mehreren Aufpunkten und für die Windparameter zu erheben und für die Berechnung zu verwenden.

2.2 Lösungsansatz

Als ein möglicher Ansatz zur Verbesserung der Effizienz bei Rückrechnungen wurde die Rückverfolgung von Trajektorien bei der Lagrange-Ausbreitungsmodellierung untersucht. Lagrange-Ausbreitungsmodelle (beispielsweise Austal, LASAT, GRAL) beruhen auf beweglichen Lagrange-Partikeln, die an den Quellpunkten starten und sich geführt von Windfeld und Turbulenzfeld durch das Rechengebiet bewegen. Dabei wird angenommen, dass jedes Lagrange-Partikel eine definierte Masse an Luftbeimengung trägt, deren Ausbreitung modelliert werden soll. Die Anzahl der pro Zeiteinheit emittierten Lagrange-Partikel hat die Dimension Masse pro Sekunde, was dem Emissionsmassenstrom entspricht. Zu jedem Zeitpunkt der modellierten Ausbreitung ist es dann möglich, die Anzahl von Lagrange-Partikeln in einer Gitterzelle zu zählen. Diese Anzahl pro Volumeneinheit hat die Dimension einer Konzentration, woraus über die den Partikeln zugeordnete Masse auf die Konzentration der Luftbeimengung in dieser Zelle zu schließen ist.

Damit ergibt sich eine räumliche (über die Gitterzellen) und zeitliche (über die Zeitschritte der Ausbreitungsmodellierung) Verteilung der Konzentration der Luftbeimengung im ganzen Rechengebiet. Die Partikel können rechen technisch mit einer Markierung versehen werden, um zwischen verschiedenen Quellen oder verschiedenen Luftbeimengungen zu unterscheiden. In Auswertung der Ausbreitungsrechnung werden für bestimmte Aufpunkte (Immissionsorte) bzw. flächendeckend zeitliche Mittelwerte der Konzentration oder Perzentile ausgerechnet, die den zu ermittelnden Kenngrößen entsprechen.

Grundidee der hier vorgestellten Rückrechnung ist, dass die an einem Aufpunkt eintreffenden Lagrange-Partikel auf ihrer simulierten Flugbahn (Trajektorie) zurückverfolgt werden können. Eine am Aufpunkt vorgefundene Konzentration (beispielsweise durch Messung bestimmt) muss sich im Kontext der Lagrange-Modellierung über Lagrange-Partikel abbilden lassen, die zuvor am Ort einer Quelle emittiert wurden und sich hin zum Aufpunkt ausgebreitet haben. Für den vereinfachten Fall einer einzigen Punktquelle bedeutet diese Überlegung, dass alle am Aufpunkt ankommenden Lagrange-Partikel am Ort dieser einen Punktquelle emittiert worden sein müssen. Damit ist es durch Rückverfolgung der Lagrange-Trajektorien möglich, ein Gebiet

zu finden, in dem die Punktquelle liegt. Da für die Auswertung möglichst viele Lagrange-Partikel statistisch betrachtet werden, ergibt sich für den gesuchten Quellort natürlich nicht ein einziger Punkt, sondern eine Wahrscheinlichkeitswolke. Diese gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit der gesuchte Quellort an diesem Punkt im Rechengebiet liegt. Für eine stationär modellierte Ausbreitung, also bei als zeitlich konstant angenommenen Parametern für Windrichtung, Windgeschwindigkeit und Schichtung, entspricht diese Wahrscheinlichkeitswolke dem Luv-Bereich vor dem Aufpunkt. Sie lässt sich als eine Art rückwärts gerichtete Fahne verstehen. Abbildung 1 verdeutlicht dies in einer vereinfachten Grafik.

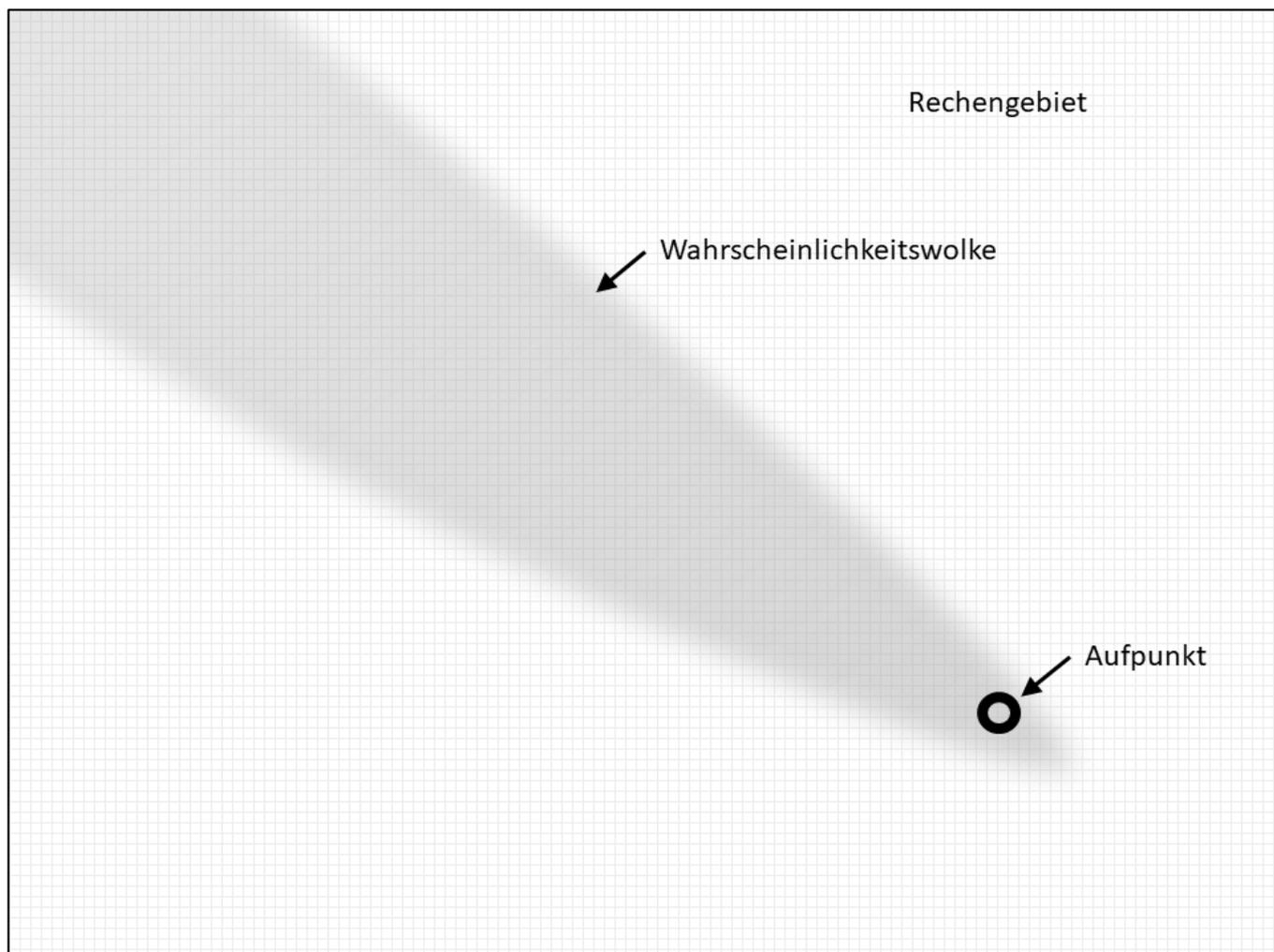


Abbildung 1: Wahrscheinlichkeitswolke im Luv des Aufpunktes dafür, dass die Quelle an diesem Ort liegt

Allein durch diese Auswertung lässt sich zwar die ungefähre Richtung ermitteln, in der die Quelle liegt, nicht jedoch die Entfernung. Dies ist verständlich, da aus Richtung der Quelle über die gesamte Entfernung Lagrange-Partikel am Aufpunkt eintreffen.

Eine Bestimmung der Entfernung wird darüber hinaus möglich, wenn man anstelle der stationär modellierten Ausbreitung eine instationäre Modellierung durchführt. Dies sei anhand von zwei meteorologischen Situationen und Abbildung 2 erklärt. Dabei werden die Wahrscheinlichkeitswolken überlagert, die sich für jede der instationär modellierten Situationen ergeben. Für die erste Situation dreht der Wind im Laufe der Modellierung von West nach Nordwest, für die zweite Situation von Nord nach Nordwest. Das sich im Überlappungs-

bereich der Wahrscheinlichkeitswolken ergebende lokale Maximum kann als Hinweis auf eine Quelle in diesem Bereich gewertet werden.

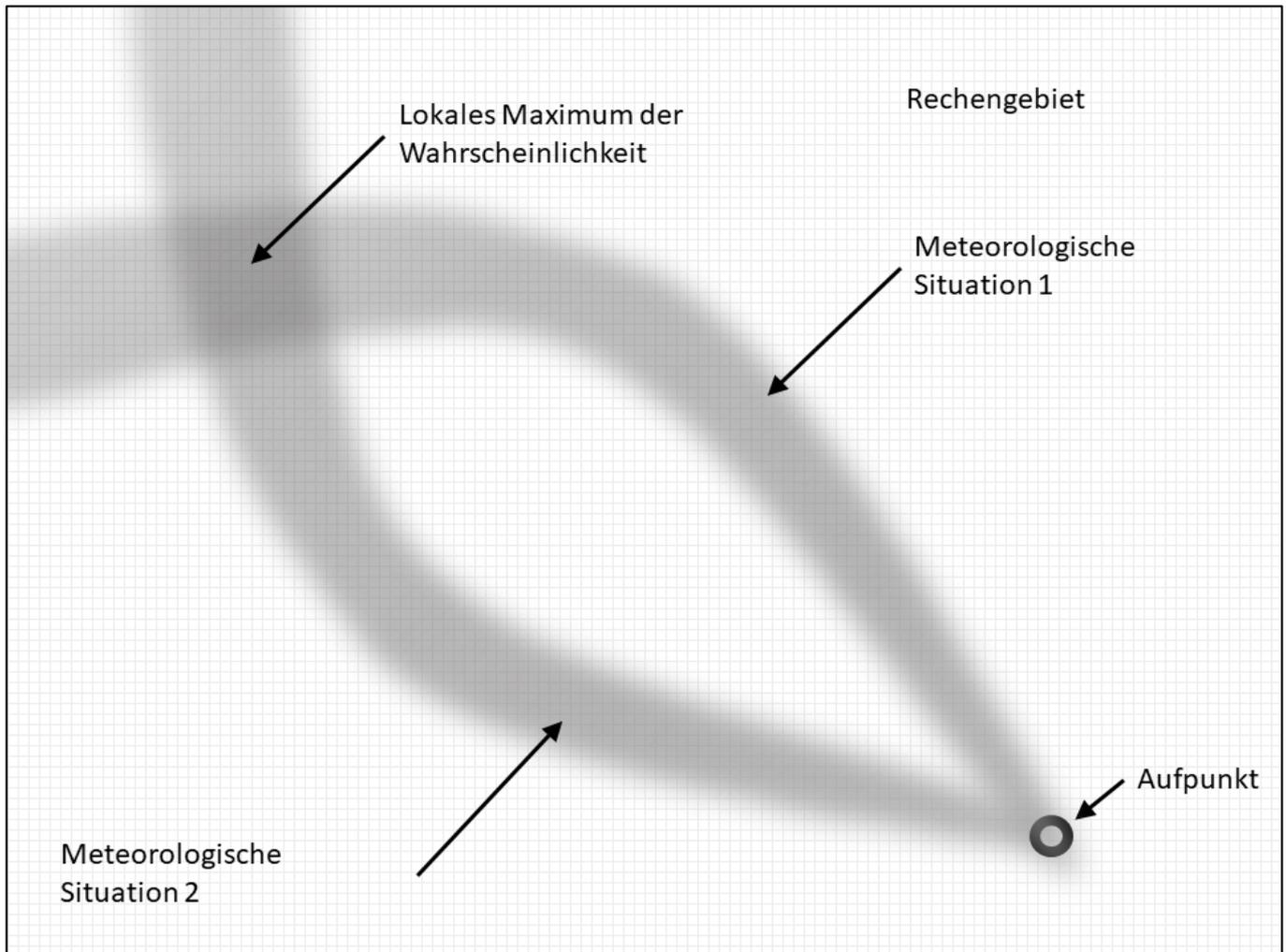


Abbildung 2: Schematische Darstellung von überlagerten Wahrscheinlichkeiten bei zwei instationär modellierten meteorologischen Stationen

Je mehr instationäre Situationen in die Auswertung eingehen, umso bessere Ergebnisse liefert die Statistik hinter diesem Verfahren. Dies setzt voraus, dass auch die instationäre Modellierung dieser Situationen möglichst realitätsnah erfolgt. Dies gelingt nur unter Anwendung moderner prognostischer Windfeldmodelle, die eine instationäre Modellierung erlauben und dabei numerisch stabil sind. Weiterhin ist es notwendig, Lagrange-Partikel im gesamten Rechengebiet und sogar in allen Modellebenen zu emittieren, in denen Quellen vermutet werden. Dies führt in der Praxis zu einem um Mehrfaches größeren Rechenaufwand als eine Ausbreitungsrechnung mit fixierten Quellorten. Die Leistungsfähigkeit des Verfahrens steigt, wenn an mehreren Orten gleichzeitig Konzentrationsmessungen durchgeführt werden (mehrere Aufpunkte), wodurch sich die einzelnen Wahrscheinlichkeitswolken zu einem schärferen Maximum überlagern.

2.3 Voraussetzungen für die Verwendung der Lagrange-Rückrechnung

Die im Rahmen des Forschungsprojektes erarbeitete Methodik zur Lagrange-Rückrechnung ist einerseits anspruchsvoll was ihren theoretischen Hintergrund angeht, erfordert andererseits aber auch eine Reihe von Bedingungen zur erfolgreichen Anwendung. Die notwendigen Voraussetzungen zur Anwendung lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

- instationäre prognostische Windfeldmodellierung und daran gekoppelte Lagrange-Ausbreitungsrechnung mit Protokollierung der Partikel-Trajektorien und genügend feinem Zeitschritt (beispielsweise eine Minute),
- Emission von Lagrange-Partikeln im gesamten Rechengebiet, oder dem Gebiet, in dem Quellen vermutet werden,
- zeitlich aufgelöste Erfassung der Winddaten (Messung im Rechengebiet, Zeitauflösung beispielsweise zehn Minuten, vektorielle Interpolation der Zwischenwerte)
- zeitlich aufgelöste Erfassung der Konzentration der betrachteten Luftbeimengung an einem oder mehreren Aufpunkten (passend zum Zeitschritt der Lagrange-Ausbreitungsrechnung)
- genügend häufiges Auftreten von drehenden Winden und wechselnden meteorologischen Situationen, im Zusammenhang mit einer ausreichend langen Messzeit (beispielsweise über mehrere Wochen)

Weitere Anforderungen für die Verwendung der Lagrange-Rückrechnung in der Praxis finden sich in Abschnitt 3.3.

2.4 Modellgrenzen und Einschränkungen

Bei der konsequenten Umsetzung des Algorithmus hat sich der enorme Rechenaufwand und die zur Speicherung der Zwischenergebnisse (Lagrange-Trajektorien) notwendige Infrastruktur zunächst als eine Hürde erwiesen. Dies sollte jedoch im Zuge der sich derzeit rasant weiterentwickelnden Technik kein Hindernis für die Anwendung des Verfahrens darstellen. Letztlich wurden alle bisherigen Projekte mit handelsüblicher PC-Technik bearbeitet.

Als numerisches Problem beim vorgestellten Verfahren hat sich gezeigt, dass unvermeidlich auch in unmittelbarer Nähe des Aufpunktes eine Überlappung der Wahrscheinlichkeitswolken stattfindet, ähnlich der Überlappung an Orten, an denen tatsächlich eine Quelle ist. Wenn sich aber um den Aufpunkt eine Quelle ausschließen lässt, kann dieser Bereich aus den Betrachtungen ausgeklammert werden.

Schließlich muss eingeräumt werden, dass eine möglichst realistische instationäre prognostische Windfeldmodellierung außerordentlich wichtig für eine Brauchbarkeit der Ergebnisse ist. Werden bei der Windfeldmodellierung systematische Fehler gemacht, beispielsweise bei der Modellierung lokaler thermischer Effekte, so summieren sich diese in der statistischen Auswertung der Trajektorien und führen zu falschen Ergebnissen wie „Geister-Quellen“ an Orten, wo in der Realität keine Quellen sein können. Eine Plausibilitätsprüfung der Ergebnisse ist also sehr wichtig.

2.5 Möglichkeiten zur Fortentwicklung

Das vorgestellte Verfahren hat aufgrund seiner numerischen Eleganz verschiedene Möglichkeiten einer Weiterentwicklung. Beispielsweise können mehrere Aufpunkte festgelegt werden, an denen die Konzentration gemessen wird. Damit erhöht sich die Güte und Schärfe der Ergebnisse deutlich.

Weiterhin hat die zur Konzentrationsmessung verwendete Smellmaster-Technologie die Möglichkeit, an einem Aufpunkt nicht nur eine einzige, sondern mehrere Luftbeimengungen unabhängig voneinander zu vermessen. So können beispielsweise in einer Gemengelage mehrere Gerüche voneinander getrennt werden und es kann für jedes einzelne Geruchsmuster eine zugehörige Quelle lokalisiert werden.

Das zur Auswertung verwendete statistische Verfahren lässt es zu, bei bekannten zeitlich variablen Emissionen auch diese Effekte einzubeziehen.

3 Praktische Anwendung der Lagrange-Rückrechnung

3.1 Allgemeine Betrachtungen

Ein Teil der Aufgabenstellung für das Forschungsprojekt bestand darin, neben der theoretischen Erarbeitung eines Algorithmus zur Lagrange-Rückrechnung auch die Eignung des Algorithmus für eine künftige routinemäßige Anwendung bei Beschwerdesituationen zu ermöglichen. Dazu wurden mehrere Projekte mit dem vorgestellten Verfahren bearbeitet, die dem Charakter nach hauptsächlich Forschungsprojekte waren bzw. auf bisherige Messprojekte aufbauten.

Die instationäre Windfeldmodellierung wurde mit dem prognostischen Windfeldmodell GRAMM (Versionen 17.01 und 19.01) [6] durchgeführt, das sich dabei als ausreichend präzise und numerisch stabil erwiesen hat. Darüber hinaus gab es Versuche, ebenfalls das Windfeldmodell METRAS-PCL (Version 5.0) [7] zu verwenden, die aber nach einer Entscheidung zur Verwendung von GRAMM nicht weiterverfolgt wurden.

Die Lagrange-Ausbreitungsmodellierung erfolgte mit LASAT (Version 3.4) [3]. Dabei wurde auf eine Funktionalität in LASAT zurückgegriffen, die es erlaubt, dass die einzelnen Lagrange-Partikel während ihrer Ausbreitung durch das Rechengebiet in jedem Zeittakt verfolgt werden können. Dies stellt hinsichtlich der zu verarbeitenden Datenmenge enorme Anforderungen an die Rechentechnik, was aber durchaus zu bewältigen ist. Da im Vorfeld keine Annahmen über die Lage der Quelle gemacht werden sollten, musste eine bodennahe Flächenquelle über das gesamte Rechengebiet aufgespannt werden, um zu gewährleisten, dass Lagrange-Partikel von allen Gitterzellen im Rechengebiet starten. Durch diese Maßgabe musste die Partikelanzahl im Rechenlauf entsprechend hoch gewählt werden, was den notwendigen Rechenaufwand weiter erhöhte.

Abbildung 3 zeigt beispielhaft ein Ergebnis für eine Rückrechnung mit Lagrange-Trajektorien. Die zeitaufgelösten Windmessungen wurden mit einem Ultraschallanemometer durchgeführt, wobei ein Mittelungszeitraum von zehn Minuten angesetzt wurde. Die zeitaufgelösten Konzentrationsmessungen am Aufpunkt wurden mit einem Smellmaster-Gerät durchgeführt, das für jede einzelne Minute einen Konzentrationswert lieferte. Die Messungen wurden über drei Monate durchgeführt.

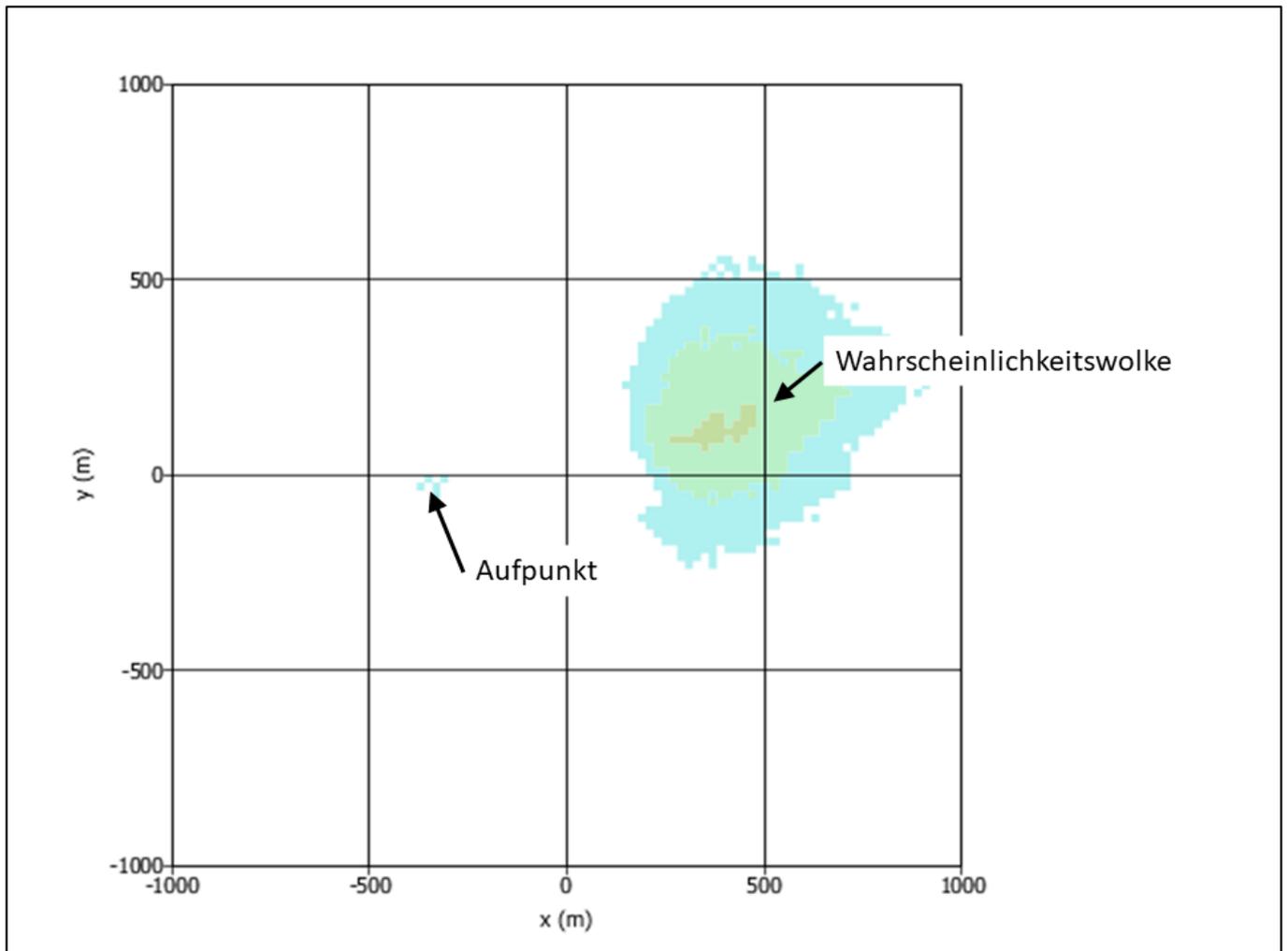


Abbildung 3: Beispiel für eine Rückrechnung mit Lagrange-Trajektorien

Zur prognostischen Windfeldmodellierung und für die Lagrange-Ausbreitungsrechnung mit Partikelverfolgung wurden mehrere Hochleistungsrechner (DELL Poweredge 930) mit insgesamt 160 Intel-Rechenkernen eingesetzt. Als schnelle Speichermedien zur Zwischenspeicherung der Partikelpositionen und deren Auswertung dienten Disk-Stationen von Synology mit zehn Gigabit-Netzwerk-Anbindung an die Hochleistungsrechner und einem gesamten installierten Speicher von 120 Terabyte.

3.2 Besondere Aspekte bei der praktischen Anwendung

3.2.1 Anforderungen an die Messwertaufnahme

Bei den Untersuchungen zur praktischen Anwendbarkeit des Verfahrens zur Lagrange-Rückrechnung stellte sich die Aufnahme geeigneter Messdaten als zentraler Aspekt dar. Wie in Abschnitt 2.3 bereits bei den theoretischen Betrachtungen erwähnt, müssen Immissionskonzentrationen der betrachteten Luftbeimengungen und meteorologische Ausbreitungsparameter zeitaufgelöst bestimmt werden.

Für die Messung der Immissionskonzentration der betrachteten Luftbeimengung wurde bisher ausschließlich die Smellmaster-Technologie eingesetzt. Damit ist eine langzeitstabile und zeitlich hochauflösende Bestimmung von Schadstoffkonzentrationen und Geruchsstoffkonzentrationen möglich. Die der Smellmaster-Technologie zugrundeliegende Ionenmobilitätsspektrometrie (kurz: IMS) zählt zu den analy-

tischen Methoden, die seit mehr als 40 Jahren Gegenstand vieler Forschungsarbeiten sind. Das Einsatzgebiet erstreckt sich von der Detektion von Sprengstoffen und Drogen bis hin zum Auffinden chemischer Kampfstoffe. Durch Vorteile wie

- eine schnelle Arbeitsweise und ein rein physikalisches Messprinzip bei Atmosphärendruck (kein Vakuum notwendig),
- ein empfindlicher Nachweis von Substanzen bis in den ppb-Bereich,
- eine hohe Selektivität und die Möglichkeit der Detektion von organischen und anorganischen Komponenten sowie
- die Möglichkeit zum portablen Einsatz bei kleinen Abmaßen und Akkubetrieb

findet die Ionenmobilitätsspektrometrie gegenüber den teuren und zeitaufwendigen Analyseverfahren (Gaschromatographie, Massenspektroskopie) zunehmend Anwendung in den Bereichen der Pharmazie, Biotechnik und Umwelttechnik. Anhand der bislang untersuchten Beispiele wurde ermittelt, dass die zeitliche Auflösung der Konzentrationsmessung bei einem Messwert pro Minute liegen sollte. Nur damit lassen sich instationäre Ausbreitungssituationen präzise genug abbilden, um eine Lagebestimmung von unbekanntem Quellen durchführen zu können.

Ähnlich hohe Anforderungen müssen an die Messung der meteorologischen Ausbreitungsparameter gestellt werden. Vor dem Hintergrund der Notwendigkeit einer leistungsfähigen prognostischen Windfeldmodellierung (siehe Abschnitt 3.2.2) werden Antriebsdaten benötigt, die folgende Parameter enthalten:

- Windrichtung, Auflösung in 1°-Schritten
- Windgeschwindigkeit, Auflösung in 0,1 Meter pro Sekunde
- Obukhov-Länge zur Charakterisierung der atmosphärischen Schichtung und Turbulenz

Diese Parameter werden in einer zeitlichen Auflösung von einem Messwert pro Minute benötigt. Dabei hat es sich als sinnvoll erwiesen, Zehn-Minuten-Mittelwerte der Größen zu erfassen und dann eine (vektorielle) Interpolation auf die Zwischenschritte im Minutentakt durchzuführen.

Zusätzlich wird ein Digitales Geländemodell und eine räumlich variable Beschreibung der Landnutzung (CORINE-Klasse) zur Beschreibung der Topografie im Rechengebiet benötigt.

3.2.2 Prognostische instationäre Modellierung von Windfeldzeitreihen

Unter Windfeldmodellierung ist hier ein Verfahren zu verstehen, der bei Bereitstellung verschiedener Eingangsdaten (beispielsweise Geländemodell, Landnutzung) Windfelder (siehe Abschnitt 1.3.7) liefert.

Für immissionsschutzrechtliche Fragestellungen spielen gegenwärtig hauptsächlich diagnostische und prognostische Windfeldmodelle eine Rolle. Beide unterscheiden sich hinsichtlich des Umfangs und des Detaillierungsgrades, mit dem die meteorologischen und physikalischen Prozesse in der Atmosphäre modelliert werden. Diagnostische Windfeldmodelle gehen von Schätzungen (Initialisierungswindfelder) aus, für die dann unter Einfluss von Geländeunebenheiten und gegebenenfalls umströmten Hindernissen Divergenzfreiheit hergestellt wird. Prognostische Windfeldmodelle können darüber hinaus über Modellansätze die Erhaltung von Impuls und Energie berücksichtigen, wobei je nach Detaillierungsgrad bestimmte meteorologische Phänomene besser modelliert werden können als mit diagnostischen Windfeldmodellen. Zu diesen

meteorologischen Phänomenen zählen beispielsweise Verwirbelungen in steilem Gelände oder im Lee-Bereich von umströmten Hindernissen, aber auch lokale Besonderheiten wie Kaltluftabflüsse.

Unter Windfeld ist ein Datensatz zu verstehen, der für jede Gitterzelle bei einer Ausbreitungsrechnung den dort anzutreffenden Wind beschreibt. Somit sind diese Datensätze dreidimensionale Felder, die das Rechengebiet abbilden. Für jede Gitterzelle sind drei Komponenten der vektoriellen Windgeschwindigkeit abgelegt.

Windfelder sind zumeist Dateien, die nach einem bestimmten Ordnungsprinzip in Windfeldbibliotheken oder Windfeldzeitreihen zusammengefasst sein können.

Unter Windfeldbibliothek ist die Sammlung von Windfeldern zu verstehen, die zur Verwendung für eine Ausbreitungsrechnung meist nach Anströmrichtung und Ausbreitungsklasse vorsortiert sind.

Um die Ausbreitungsrechnung für eine konkrete meteorologische Situation (Anströmrichtung, Ausbreitungs-klasse, Windgeschwindigkeit) durchzuführen, wird beispielsweise in der Windfeldbibliothek ein passendes Windfeld gesucht, das möglichst gut mit der konkreten Anströmrichtung und der konkreten Ausbreitungs-klasse übereinstimmt. Dieses Windfeld wird dann auf die konkrete Windgeschwindigkeit skaliert und für die Ausbreitungsrechnung verwendet. Meist wird zur besseren Repräsentation der konkreten Anströmrichtung nicht nur das am besten passende Windfeld einer Windfeldbibliothek verwendet, sondern eine gewichtete Überlagerung von zwei Windfeldern gebildet, die die konkrete Anströmrichtung „einrahmen“.

Im Standardfall zur Berücksichtigung von Geländeunebenheiten und umströmten Hindernissen arbeiten die Softwarepakete AUSTAL und LASAT mit Windfeldbibliotheken, die Windfelder für 6 Ausbreitungs-klassen und 36 Anströmrichtung beinhalten, insgesamt also 36 Windfelder. Windfeldbibliotheken haben den Vorteil, dass bei Ausbreitungsrechnungen, die für einen größeren Zeitraum und damit für viele einzelne konkrete meteorologische Situationen durchgeführt werden, nicht für jede konkrete Situation ein separates Windfeld vorhanden sein muss. Beispielsweise müssen für die Berechnung einer Jahreszeitreihe mit stündlicher Auflösung nicht 8760 Windfelder berechnet und vorgehalten werden, sondern nur die (beispielweise) 216 Bibliothekswindfelder. Für jede der 8760 konkreten meteorologischen Situationen (Stunden eines Jahres) werden dann je nach Anströmrichtung und Ausbreitungs-klasse die passenden Vertreter aus der Windfeldbibliothek entnommen, mit der Windgeschwindigkeit skaliert und für die Ausbreitungsrechnung verwendet.

Im Gegensatz zu den diagnostischen Modellen werden in prognostischen Windfeldmodellen die strömungs-dynamischen Grundgleichungen verwendet. Im Wesentlichen sind dies die Gleichungen für die

- Impulserhaltung (Bewegungsgleichung)
- Massenerhaltung (Kontinuitätsgleichung)
- Energieerhaltung (erster Hauptsatz der Thermodynamik)
- Erhaltungsgleichung für die Feuchte

Eine ausführliche Beschreibung der strömungsdynamischen Grundgleichungen findet sich z. B. in Pielke (2013) [8] oder in Stull (1991). Der Gleichungssatz wird in den prognostischen Strömungsmodellen jedoch oft nicht vollständig behandelt. Welche Prozesse in einem prognostischen Modell noch berücksichtigt werden, hängt im Wesentlichen von der Skala des betrachteten Problems, der geforderten Genauigkeit sowie der

verfügbaren Rechnerleistung ab. Je nach Problemstellung ist es möglich, bestimmte Näherungen vorzunehmen und den Satz der zu lösenden Gleichungen damit zu reduzieren.

In der atmosphärischen Grenzschicht unterscheidet man zwei Arten von Druckänderungen. Dynamische Druckvariationen werden durch Änderungen der Windgeschwindigkeit, statische Druckänderungen durch Dichteänderungen der Luftmassen verursacht. Vernachlässigt man die dynamischen Druckschwankungen, so spricht man von der hydrostatischen Approximation.

Es zeigt sich, dass die dynamischen Druckänderungen bei Fragestellungen in der Mikroskala dominieren, die hydrostatische Approximation somit in mikroskaligen Strömungsmodellen nicht angewendet werden darf.

Die Lösungen des vollständigen Satzes der Grundgleichungen beinhalten sämtliche strömungsdynamischen Prozesse, die in der Atmosphäre auftreten können. Dazu gehören z.B. auch Schallwellen, die sich über Druckschwankungen aus der prognostischen Kontinuitätsgleichung ergeben.

Die sehr hohe Ausbreitungsgeschwindigkeit der Schallwellen erfordert bei der numerischen Lösung der Grundgleichungen sehr kleine Zeitschritte und vervielfacht dadurch den Rechenaufwand. Da Schallwellen meteorologisch jedoch nicht relevant sind, versucht man sie als mögliche Lösungen der Differentialgleichungen auszuschließen. Dies geschieht durch eine Filterung, die z. B. dadurch erreicht werden kann, dass man lokale zeitliche Änderungen der Dichte gegenüber der Divergenz des Massenflusses vernachlässigt.

Die strömungsdynamischen Grundgleichungen können numerisch nicht an jedem Punkt und in beliebig kleinen Zeitschritten, sondern nur auf einem finiten Differenzgitter gelöst werden. Alle subskaligen Prozesse, d. h. Änderungen der Variablen in Bereichen, die kleiner als der Abstand des Rechengitters sind, werden hierdurch nicht erfasst. Deshalb versucht man, diese subskaligen Prozesse unter Verwendung geeigneter Verfahren zu parametrisieren. Hierzu spaltet man die Variablen in einen mittleren und einen fluktuierenden Anteil auf. So wird beispielsweise die Turbulenz als subskaliger Prozess in der Modellierung berücksichtigt, ohne dabei die Gitterabstände auf die Größenordnung der Turbulenzphänomene verringern zu müssen.

Für weitere Details zur prognostischen Windfeldmodellierung sei auf die Veröffentlichung von Pielke [8] verwiesen.

Für die Windfeldmodellierung zur Lagrange-Rückrechnung sind nur hochwertige Verfahren geeignet, um vor allem die instationären Situationen realitätsnah abzubilden, die für die Quelllokalisierung benötigt werden. Es hat sich gezeigt, dass weder diagnostische Windfeldmodelle eingesetzt noch eine Vereinfachung durch Windfeldbibliotheken angewendet werden kann. Selbst in flachem Gelände ist ein diagnostisches Windfeldmodell meist nicht in der Lage, räumlich variable Orographie und Landnutzung korrekt in inhomogenen Windfeldern und Turbulenzfeldern abzubilden. Auch das Konzept der Windfeldbibliotheken ist hier nicht als Vereinfachung geeignet, da für jede instationäre Situation die meteorologische Situation der unmittelbar vorangegangenen Zeit berücksichtigt werden muss.

Windfelder müssen deshalb mit einem prognostischem Windfeldmodell gemäß VDI-Richtlinie 3783 Blatt 7 [9] als Windfeldzeitreihe in Schritten von einer Minute bereitgestellt werden.

3.3 Anforderungen für die Verwendung in der Praxis

Die Anforderungen der vorgestellten Verfahrensweise an Messwerte und Modellierungsverfahren lassen sich für praxisrelevante Routineauswertungen folgendermaßen zusammenfassen:

- Messung der Immissionskonzentration der Luftbeimengung in Zeitschritten von einer Minute an einem oder mehreren Aufpunkten
- Messung der Windrichtung bei räumlicher Auflösung in 1° -Schritten und zeitlicher Auflösung in Schritten von einer Minute (Erfassung als zehnminütiges Mittel, danach vektorielle Interpolation auf Minutenschritte)
- Messung der Windgeschwindigkeit bei Messwertauflösung von 0,1 m/s und zeitlicher Auflösung in Schritten von einer Minute (Erfassung als zehnminütiges Mittel, danach vektorielle Interpolation auf Minutenschritte)
- Messung der Obukhov-Länge über ein geeignetes Ultraschallanemometer zur Charakterisierung der atmosphärischen Schichtung und Turbulenz in Schritten von einer Minute (Erfassung als zehnminütiges Mittel, danach Interpolation auf Minutenschritte)
- Modellierung einer instationären Windfeldzeitreihe mit prognostischem Windfeldmodell nach VDI-Richtlinie 3783 Blatt 7 unter Berücksichtigung räumlich variabler Orographie, Landnutzung und thermischer Ausgleichsströmungen für Zeitschritte von einer Minute
- Dauer der Messwertaufnahme vor Ort mindestens drei Monate, besser jedoch sechs Monate, um genügend statistisch unabhängige Situationen für eine Auswertung zu erlangen

4 Beispiele für die Anwendung der Lagrange-Rückrechnung

Als beispielhafte Anwendungen für die Lagrange-Rückrechnung wurden gemäß Aufgabenstellung verschiedene bisherige Projekte ins Auge gefasst, an denen eine Smellmaster-Geruchserfassung bereits durchgeführt wurde. Dazu gehören:

- St. Egidien (2015)
- Freiberg-Neuhilbersdorf (2015-2016)
- Mittweida-Lauenhain (2018)

Weiterhin war vorgesehen, ein zeitgleich zum vorliegenden Forschungsprojekt geplantes Messprojekt am Standort Großhartmannsdorf so durchzuführen, dass Messwertaufnahme, Modellierung und Rückrechnung bereits als eine komplette Beispielimplementation des vorgestellten Algorithmus dienen können.

Für St. Egidien, Freiberg-Neuhilbersdorf und Mittweida-Lauenhain lagen Messwerte für Immissionskonzentrationen und meteorologische Ausbreitungsparameter aus verschiedenen zurückliegenden Zeiträumen vor. Es wurde anhand der theoretischen Betrachtungen untersucht, inwieweit diese Messreihen für eine Auswertung mit der Lagrange-Rückrechnung geeignet sind. Die folgende Tabelle macht Angaben zu den einzelnen Messperioden.

Tabelle:Angaben zu den einzelnen Messperioden

Standort	Messzeitraum	Zeitauflösung Konzentration	Zeitauflösung Meteorologie	Anzahl Geruchsmuster
St. Egidien	30.10.2014 bis 15.12.2014	10 Minuten	10 Minuten	6
Freiberg- Neuhilbersdorf	30.11.2015 bis 07.04.2016	10 Minuten	10 Minuten	25
Mittweida- Lauenhain	03.12.2018 bis 01.07.2019	10 Minuten	10 Minuten	8
Großhartmannsdorf (geplant)	(01.09.2021 bis 30.11.2021)	(1 Minute)	(1 Minute)	(?)

4.1 Beispiel 1: St. Egidien (2014)

Bei einer versuchten Auswertung der für St. Egidien 2014 erfassten Messwerte hat sich ergeben, dass die zeitliche Auflösung von Konzentrationsmessungen und meteorologischen Messungen (10 Minuten) zu grob ist, um eine vollumfängliche Auswertung mit der Lagrange-Rückrechnung durchzuführen.

Darüber hinaus war der Messzeitraum mit 1,5 Monaten zu kurz, um die statistische Absicherung möglicher Endergebnisse zu erreichen.

Für diesen Standort führte die versuchte Anwendung der Lagrange-Rückrechnung zu keinen Ergebnissen.

4.2 Beispiel 2: Freiberg-Neuhilbersdorf (2015-2016)

Bei einer versuchten Auswertung der für Freiberg-Neuhilbersdorf 2015 bis 2016 erfassten Messwerte hat sich ergeben, dass die zeitliche Auflösung von Konzentrationsmessungen und meteorologischen Messungen (10 Minuten) zu grob ist, um eine vollumfängliche Auswertung mit der Lagrange-Rückrechnung durchzuführen.

Dennoch wurde versucht, das Verfahren zumindest prinzipiell abzuarbeiten und zu Ergebnissen zu kommen. Abbildung 4 zeigt kartografisch das Gebiet zwischen dem untersuchten Gewerbegebiet in Freiberg und am östlichen Bildrand die Wohnbebauung von Hilbersdorf. Überlagert ist halbtransparent das Ergebnis der Lagrange-Rückrechnung für ein Geruchsmuster, das einer Quelle im Gewerbegebiet zugeordnet werden kann. Die grob anmutende räumliche Auflösung der Wahrscheinlichkeitswolke ergibt sich aus der Rasterung in Gitterzellen, um die Lagrange-Partikel auszählen zu können. Feinere Auflösungen waren aufgrund der damaligen Messkonzeption, besonders der zehnmütigen Zeitauflösung, hier nicht zu erreichen. Weiterhin wurde an meteorologischen Parametern nur Windgeschwindigkeit und Windrichtung gemessen, nicht jedoch die Obukhov-Länge als Parameter für atmosphärische Schichtung und Turbulenz. Dies ist aber für eine präzise Rückrechnung unabdingbar.

Anhand dieses Beispiels ist gezeigt, dass die Lagrange-Rückrechnung prinzipiell funktioniert. Allerdings ist aufgrund der groben räumlichen Auflösung der Wahrscheinlichkeitswolke keine genaue Zuordnung zu einer Einzelquelle möglich. Es ergibt sich also für dieses Messprojekt leider kein zusätzlicher Erkenntnisgewinn.

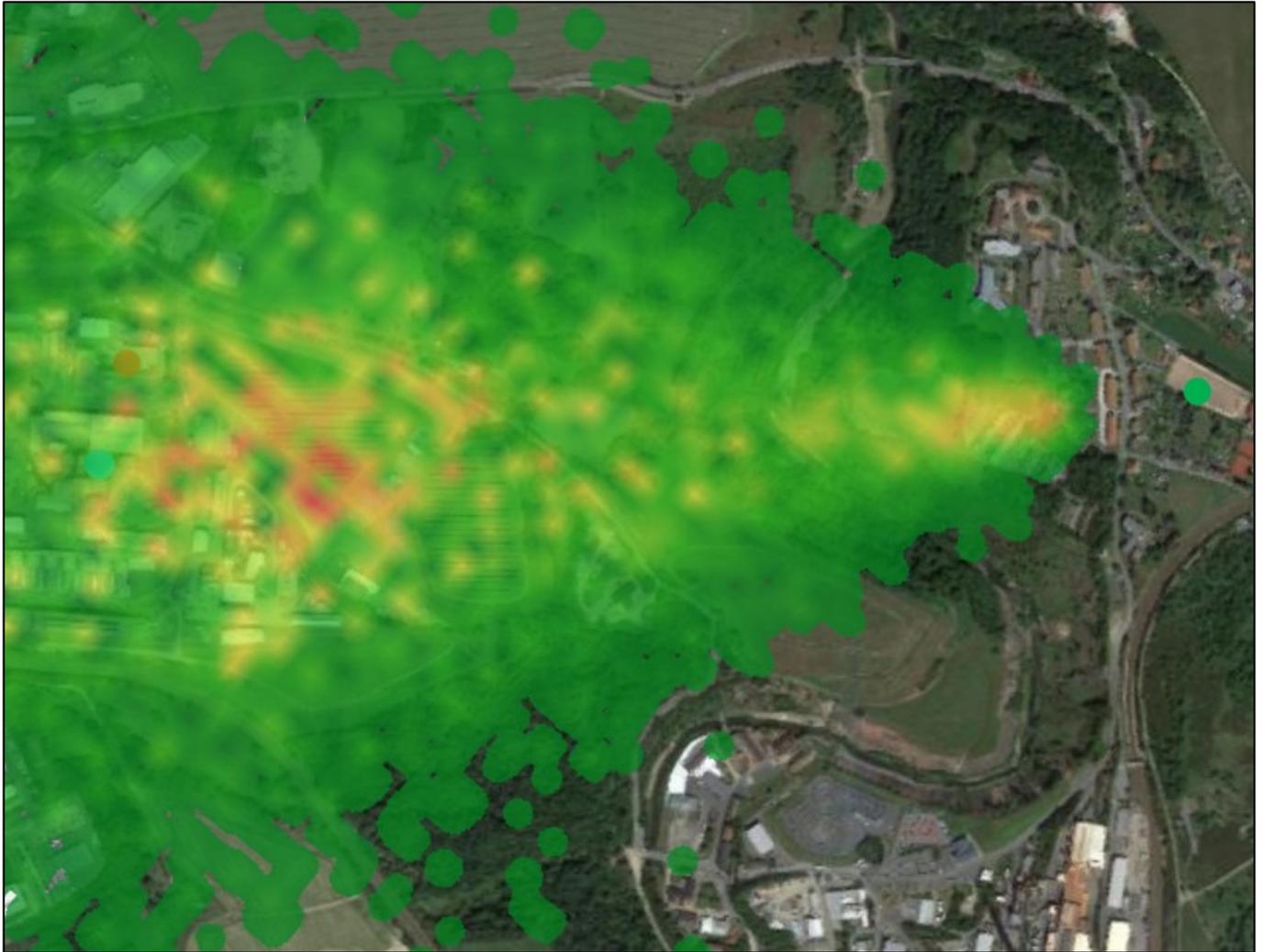


Abbildung 4: Beispiel Freiberg-Neuhilbersdorf für eine Rückrechnung mit Lagrange-Trajektorien

4.3 Beispiel 3: Mittweida-Lauenhain (2018-2019)

Bei einer versuchten Auswertung der für Mittweida-Lauenhain 2018 bis 2019 erfassten Messwerte hat sich ergeben, dass die zeitliche Auflösung von Konzentrationsmessungen und meteorologischen Messungen (10 Minuten) zu grob ist, um eine vollumfängliche Auswertung mit der Lagrange-Rückrechnung durchzuführen.

Dennoch wurde versucht, das Verfahren zumindest prinzipiell abzuarbeiten und zu Ergebnissen zu kommen. Abbildung 5 zeigt kartografisch das Gebiet zwischen dem untersuchten Gewerbegebiet in Mittweida und am nordöstlichen Bildrand die Wohnbebauung von Lauenhain. Überlagert ist halbtransparent das Ergebnis der Lagrange-Rückrechnung für ein Geruchsmuster, das einer Quelle im Gewerbegebiet zugeordnet werden kann. Die grob anmutende räumliche Auflösung der Wahrscheinlichkeitswolke ergibt sich aus der Rasterung in Gitterzellen, um die Lagrange-Partikel auszählen zu können. Feinere Auflösungen waren aufgrund der damaligen Messkonzeption, besonders der zehnmütigen Zeitauflösung, hier nicht zu erreichen. Weiterhin wurde an meteorologischen Parametern nur Windgeschwindigkeit und Windrichtung gemessen, nicht jedoch die Obukhov-Länge als Parameter für atmosphärische Schichtung und Turbulenz. Dies ist aber für eine präzise Rückrechnung unabdingbar.

Anhand dieses Beispiels ist gezeigt, dass die Lagrange-Rückrechnung prinzipiell funktioniert. Allerdings ist aufgrund der groben räumlichen Auflösung der Wahrscheinlichkeitswolke keine genaue Zuordnung zu einer Einzelquelle möglich. Es ergibt sich also für dieses Messprojekt leider kein zusätzlicher Erkenntnisgewinn.

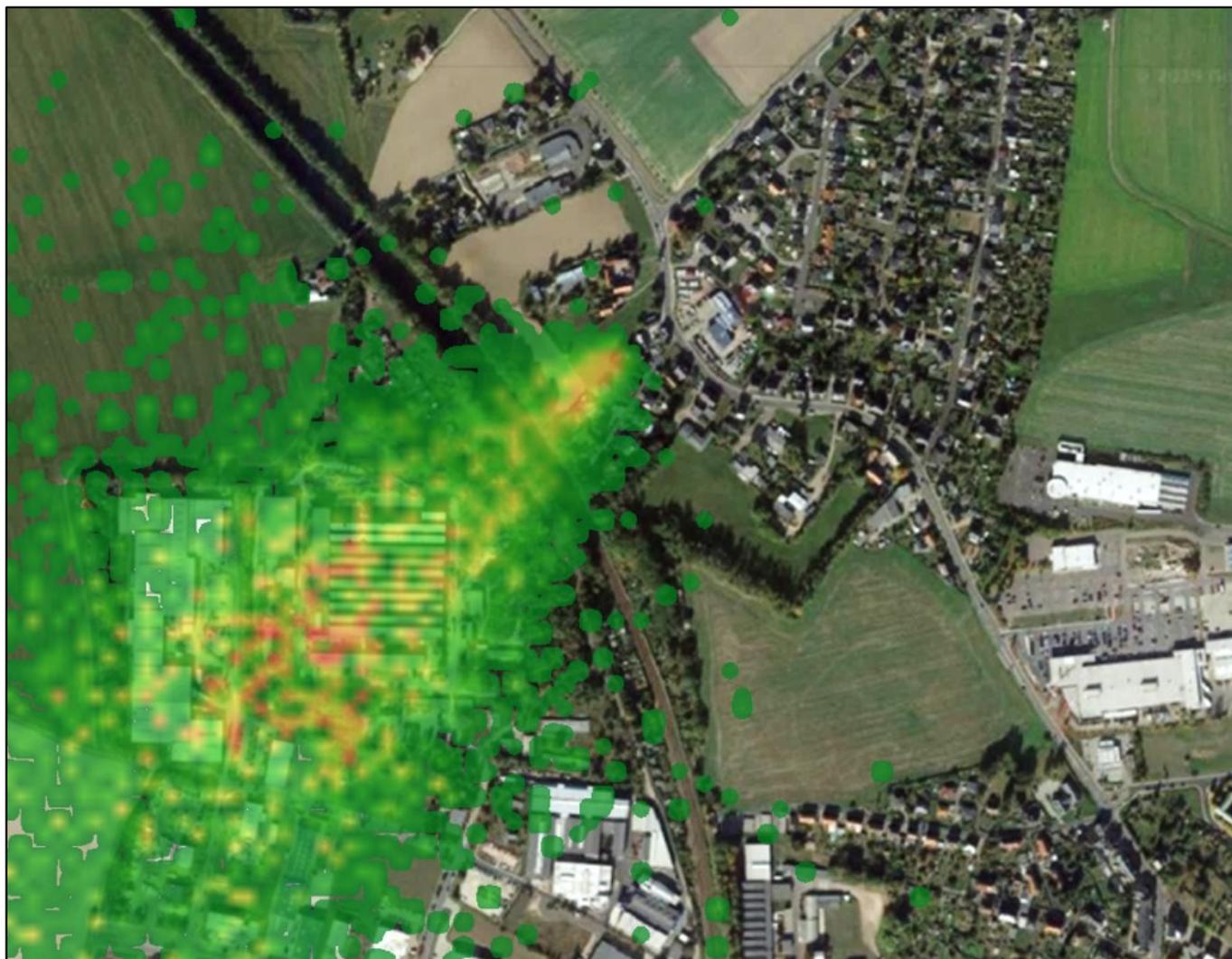


Abbildung 5: Beispiel Mittweida-Lauenhain für eine Rückrechnung mit Lagrange-Trajektorien

4.4 Beispiel 4: Großhartmannsdorf (2021-2022)

Neben der versuchten erneuten Auswertung der Messwerte aus zurückliegenden Projekten war vorgesehen, ein zeitgleich zum vorliegenden Forschungsprojekt geplantes Messprojekt am Standort Großhartmannsdorf so durchzuführen, dass Messwertaufnahme, Modellierung und Rückrechnung bereits als eine komplette Beispielimplementation des vorgestellten Algorithmus dienen können.

Leider kam es im Landratsamt Mittelsachsen, auch im Zusammenhang mit der Covid19-Situation, bei der Planung von Messung, Aufstellort und Einbeziehung von Anwohnern zur Protokollierung von Geruchswahrnehmungen zu Verzögerungen, so dass ein rechtzeitiger Beginn der dreimonatig vorgesehenen Messung nicht mehr möglich war. Die Messperiode wurde daraufhin auf das Jahr 2022 verschoben.

Da inzwischen die Erkenntnisse zu den Voraussetzungen für eine erfolgreiche Anwendung der Lagrange-Rückrechnung gewonnen wurden, kann für dieses Beispielprojekt von vornherein eine Auslegung der kompletten Messung auf die Lagrange Rückrechnung erfolgen. Eine Auswertung dazu wird im Jahr 2022 nach Abschluss der Messungen geschehen.

5 Zusammenfassung

Das Forschungsprojekt sollte den Weg ebnen hin zu einem Routineverfahren, mit dem künftig am Landesamt durch Kombination innovativer Technologien besonders schwierig zu handhabende Beschwerdesituationen bei Geruchsbelästigungen und unbekanntem Verursacher bearbeitet werden können. Dieses Ziel wurde erreicht. Ausgehend von theoretischen Betrachtungen zu einem völlig neuen Ansatz bei Verfahren zur Rückrechnung konnte ein Verfahren erarbeitet werden, das unter Praxisbedingungen zur Quellcharakterisierung (Lage und Emissionsstärke) eingesetzt werden kann.

Die dabei zu erfüllenden Spezifikationen bei der Messwertaufnahme und der Modellierung konnten herausgearbeitet und festgeschrieben werden.

Dabei ergaben sich viele Synergieeffekte mit den bereits am Landesamt durchgeführten Forschungsprojekten zur prognostischen Modellierung von steilem Gelände und thermischen Ausgleichsströmungen (Kaltluftabflüsse). Vorangegangene Projekte zur Geruchserfassung und zur Ermittlung von Verursachern konnten erneut aufgegriffen werden, jedoch erwies sich die seinerzeit erhobene Datenbasis an Messwerten als nicht ausreichend genug, um wesentlich neue Erkenntnisse zu erlangen.

Zum Abschluss des Forschungsprojektes lassen sich die folgenden Thesen formulieren:

- Das neuartige Lagrange-Verfahren zur Rückrechnung auf Quellen von Gerüchen und anderen Schadstoffen konnte ausgehend von theoretischen Betrachtungen weiterentwickelt werden hin zu einem routinemäßig einsetzbaren Verfahren.
- Damit steht dem Landesamt ein Verfahren zur Verfügung, mit dem komplizierte Beschwerdesituationen bei Geruchsbelastungen aufgeklärt und Verursacher gefunden werden können.
- Erstmals kann über eine Rückrechnung nicht nur die Emissionsstärke, sondern auch die Lage einer Quelle ausgerechnet werden.
- Es ergaben sich zahlreiche Synergieeffekte zu vorangegangenen Forschungs- und Messprojekten am Landesamt. Damit werden bislang erlangte Ergebnisse weitergeführt und einem neuen Nutzen zugeführt.
- Die bisherigen Ergebnisse von Messprojekten am Landesamt konnten reproduziert werden. Damit haben sich frühere Untersuchungen bestätigt und das neue Verfahren konnte validiert werden.
- Die Spezifikationen für die Messwertaufnahme und die Modellierung konnten herausgearbeitet und festgeschrieben werden. Für künftige Messprojekte stehen diese zur Verfügung, um das neuartige Lagrange-Verfahren dann zur Rückrechnung einzusetzen.
- Insbesondere eine Beschwerdesituation in Großhartmannsdorf (Landkreis Mittelsachsen) soll nach Abschluss der Messungen als Referenzprojekt für das Verfahren dienen.
- Die Lagrange-Rückrechnung wird objektive und belastbare Aussagen zu Verursachern von Geruchsbeschwerden liefern können. Mit den damit erlangten Daten wird im Untersuchungsgebiet eine flächendeckende Vorhersage von Geruchsbelastungen möglich sein.
- Das Verfahren zur Rückrechnung erfordert einen verhältnismäßig hohen Rechenaufwand, der sich aber derzeit bereits mit handelsüblicher PC-Technik bearbeiten lässt.
- Zur Umsetzung des Verfahrens kommen neueste Erkenntnisse aus den einschlägigen Regelwerken zur Anwendung, insbesondere aus der neuen TA Luft mit ihren Anhängen 2 und 7 sowie aus jüngst erarbeiteten VDI-Richtlinien zur Windfeldmodellierung und Ausbreitungsrechnung.

Schrifttum

- [1] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit, Erste Allgemeine Verwaltungsvorschrift zum Bundes–Immissionsschutzgesetz (Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft – TA Luft), 2021.
- [2] Ingenieurbüro Janicke GbR Gesellschaft für Umweltphysik, „AUSTAL,“ [Online]. Available: <http://www.austal2000.de/de/home.html>. [Zugriff am 30 11 2021].
- [3] Ingenieurbüro Janicke GbR Gesellschaft für Umweltphysik, „LASAT,“ [Online]. Available: <http://janicke.de/de/lasat.html>. [Zugriff am 30 11 2011].
- [4] R. PETRICH, „Quellanalyse durch Rückrechnung mittels Lagrange-Trajektorien,“ *Gefahrstoffe - Reinhaltung der Luft*, pp. 287-290, 7/8 2019.
- [5] Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie, „Kaltluftabflüsse bei Immissionsprognosen Schriftenreihe Heft 27/2012,“ Dresden, Mai 2012.
- [6] D. ÖTTL, „Documentation of the prognostic mesoscale model GRAMM (Graz Mesoscale Model) Vs. 17.1,“ Amt der Steiermärkischen Landesregierung, Graz, 2017.
- [7] „METRAS-PCL,“ Universität Hamburg, 28 September 2018. [Online]. Available: <https://www.mi.uni-hamburg.de/en/arbeitsgruppen/memi/modelle/metras-pcl.html>. [Zugriff am 10. Mai 2019].
- [8] R. A. PIELKE, *Mesoscale Meteorological Modeling*, Third Edition, Amsterdam: Elsevier Inc., 2013.
- [9] Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN - Normenausschuss KRdL, VDI-Richtlinie 3783 Blatt 7 - Evaluateirung prognostischer Windfeldmodelle, Berlin: Beuth Verlag GmbH, 2017.
- [10] Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN - Normenausschuss KRdL, VDI-Richtlinie 3783 Blatt 16 (Prognostische mesoskalige Windfeldmodelle) Entwurf, Berlin: Beuth Verlag GmbH, 2013.
- [11] A. ZENGER, *Atmosphärische Ausbreitungsmodellierung - Grundlagen und Praxis*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1998.

Herausgeber:

Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie
Pillnitzer Platz 3, 01326 Dresden

Telefon: + 49 351 2612-0; Telefax: + 49 351 2612-1099

E-Mail: lfulg@smekul.sachsen.de

www.smul.sachsen.de/lfulg

Das LfULG ist eine nachgeordnete Behörde des Sächsischen Staatsministeriums für Energie, Klimaschutz, Umwelt und Landwirtschaft.

Diese Veröffentlichung wird finanziert mit Steuermitteln auf Grundlage des von den Abgeordneten des Sächsischen Landtags beschlossenen Haushalts.

Autor:

Ralf Petrich

IfU GmbH Privates Institut für Analytik

An der Autobahn 7, 09669 Frankenberg/Sa.

Telefon: + 49 37206 8929-40; Telefax: + 49 37206 8929-99

E-Mail: ralf.petrich@ifu-analytik.de

Grafik Titelblatt:

Ralf Petrich, Google Earth

Redaktion:

Peter Fleischer

Abteilung 5/Referat 52

Pillnitzer Platz 3, 01326 Dresden

Telefon: + 49 351 2612-5202; Telefax: + 49 351 2612-5099

E-Mail: Peter.Fleischer@smekul.sachsen.de

Fotos:

Ralf Petrich

Auflage:

1. Auflage

Redaktionsschluss:

31.12.2011

ISSN:

1867-2868

Hinweis:

Die Broschüre steht nicht als Printmedium zur Verfügung, kann aber als PDF-Datei unter <http://www.smul.sachsen.de/lfulg/6447.htm> heruntergeladen werden.

Verteilerhinweis

Diese Informationsschrift wird von der Sächsischen Staatsregierung im Rahmen ihrer verfassungsmäßigen Verpflichtung zur Information der Öffentlichkeit herausgegeben. Sie darf weder von Parteien noch von deren Kandidaten oder Helfern im Zeitraum von sechs Monaten vor einer Wahl zum Zwecke der Wahlwerbung verwendet werden. Dies gilt für alle Wahlen.

Missbräuchlich ist insbesondere die Verteilung auf Wahlveranstaltungen, an Informationsständen der Parteien sowie das Einlegen, Aufdrucken oder Aufkleben parteipolitischer Informationen oder Werbemittel. Untersagt ist auch die Weitergabe an Dritte zur Verwendung bei der Wahlwerbung. Auch ohne zeitlichen Bezug zu einer bevorstehenden Wahl darf die vorliegende Druckschrift nicht so verwendet werden, dass dies als Parteinahme des Herausgebers zugunsten einzelner politischer Gruppen verstanden werden könnte.

Diese Beschränkungen gelten unabhängig vom Vertriebsweg, also unabhängig davon, auf welchem Wege und in welcher Anzahl diese Informationsschrift dem Empfänger zugegangen ist. Erlaubt ist jedoch den Parteien, diese Informationsschrift zur Unterrichtung ihrer Mitglieder zu verwenden.

*Täglich für
ein gutes Leben.*

www.lfulg.sachsen.de