

**Entwicklung und Validierung eines Ausbreitungsmodells für
Aerosole und Untersuchungen zu deren Koagulation als
potentieller Einflußquelle**

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von

Philipp Lodomez

aus

Bonn

Bonn 2010

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
Erscheinungsjahr: 2010

1. Gutachter: PD Dr. Bernd Diekmann
 2. Gutachter: Prof. Dr. Norbert Wermes
- Tag der Promotion: 24.08.2010

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	9
1 Grundlagen	13
1.1 Aerosole	13
1.2 Partikelgrößenverteilungen	14
1.3 Definition des Äquivalentdurchmessers von Aerosolpartikeln	16
2 Theorie der Ausbreitungssimulation	17
2.1 Einleitung	17
2.2 Übersicht über bestehende Ausbreitungsmodelle	18
2.2.1 Schadstofftransportmodelle	18
2.2.2 statische numerische Modelle zur Windfeldberechnung	20
2.3 STAR3D	23
2.3.1 Direkte numerische Simulation	23
2.3.2 Navier-Stokes-Gleichungen	23
2.3.3 NaSt3DGP	27
2.3.4 Behandlung der Partikel im Ausbreitungsmodell	29
2.3.5 Simulation des Ausbreitungsgeschehens	34
2.3.6 Implementierung von STAR3D	35
3 Theorie der physikalischen Effekte	37
3.1 Einleitung	37
3.2 Sedimentation von Aerosolen	37
3.3 Deposition von Aerosolen	39
3.4 Koagulation von Aerosolen	42
3.4.1 Definition der Knudsenzahl	42
3.4.2 Populationsbilanzgleichung	43
3.4.3 Koagulation durch Brownsche Diffusion	44
3.4.4 Koagulation durch Sedimentation	47
3.4.5 Koagulation durch turbulente Diffusion	48
3.4.6 Einfluss von elektromagnetischen Kräften	52
3.4.7 Zusammenfassung der Koagulationseffekte	56
3.5 Erste grundlegende Prüfungen der STAR3D-Software	58
3.5.1 Untersuchung des Diffusionsverhaltens der Aerosolpartikel innerhalb der Ausbreitungssimulation	59

3.5.2	Untersuchung des Sedimentationsverhaltens der Aerosolpartikel innerhalb der Ausbreitungssimulation	61
4	Aerosolversuchskammer	65
4.1	Aerosolspektrometer	65
4.2	Klimadatensensoren	68
4.3	Staubdispergiereinheit	69
5	Ergebnisse der Untersuchungen zur Koagulation	71
5.1	Einleitung	71
5.2	Untersuchte Aerosole	71
5.3	Verfahren zur Bestimmung des Koagulationskoeffizienten	74
5.4	Ergebnisse der Klimadatensensoren	76
5.5	Koagulationskoeffizienten	79
5.5.1	Bestimmung der Koagulationskoeffizienten unter turbulenten Bedingungen	79
5.5.2	Bewertung der Ergebnisse unter turbulenten Bedingungen	84
5.5.3	Bestimmung der Koagulationskoeffizienten unter stationären Bedingungen	85
5.6	Depositionskoeffizienten	85
5.7	Bewertung der Ergebnisse	87
6	Validierung von STAR3D	89
6.1	Erste Freiluftmessung	89
6.1.1	Versuchsaufbau	89
6.1.2	Ergebnisse der ersten Freiluftmessung	94
6.2	Zweite Freiluftmessung	102
6.2.1	Verbesserungen des Messaufbaus im Vergleich zur ersten Feldmessung	102
6.2.2	Ergebnisse der zweiten Feldmessung	103
6.2.3	Fazit der zweiten Feldmessung	110
7	Zusammenfassung und Ausblick	117
7.1	Zusammenfassung	117
7.2	Ausblick auf Weiterentwicklungen von STAR3D	118
A	Zusammenhang mittlere Verschiebung Diffusionskonstante	119
B	Hintergrundkonzentration an Aerosolpartikeln während der Freiluftmessungen	121
C	Wiener-Prozess	123
D	Screenshots von STAR3D	125
E	Größenfraktionsanteile am Koagulationskoeffizienten	127
F	Beispiele für Kurvenanpassungen	131

INHALTSVERZEICHNIS

7

Literaturverzeichnis

134

Einleitung

Den Gesundheitsgefahren durch die Feinstaubbelastung kommt in der öffentlichen Diskussion eine immer größere Bedeutung zu. Herkunft von Feinstäuben können zum Einen natürliche Quellen wie z.B. Vulkanausbrüche oder die Aufwirbelung von Böden sein, zum Anderen können Feinstäube auch aus anthropogenen Quellen stammen. Unter letzteren sind in Deutschland der Verkehrsbereich und die Energiewirtschaft die Hauptemittenten, aber auch landwirtschaftliche Anlagen liefern einen nicht zu vernachlässigenden Anteil an der vom Menschen freigesetzten Feinstaubmenge [1].

Aufgrund der Gesundheitsgefahren, die von Feinstäuben ausgehen, hat der Gesetzgeber Grenzwerte für die Emission und Immission von Feinstäuben festgesetzt, die in der Technischen Anleitung zur Reinhaltung der Luft (TA Luft) [2] definiert werden. Bei Überschreitung der Grenzwerte unterliegen die Emittenten einer Genehmigungspflicht. In den Genehmigungsverfahren kommt es immer häufiger zum Einsatz von numerischen Ausbreitungsmodellen, mit denen es möglich ist, bereits in der Planungsphase die Zusatzbelastung durch luftgetragene Schadstoffe für die Anwohner abzuschätzen.

Ein solches Modell, NaSt3D, wurde am Physikalischen Institut der Universität Bonn in Zusammenarbeit mit dem Institut für Landtechnik der Universität Bonn für die Simulation der Ausbreitung von Gerüchen im Rahmen einer Promotion entwickelt [3]. Es basierte auf der numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen bei gleichzeitiger Beschreibung der Bewegung der Schadstoffpartikel durch ein Lagrangemodell. Dieses Modell wurde im Anschluss mit Hilfe eines Tracergases (SF_6) erfolgreich validiert [4], ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 0.1 dargestellt.

Aufbauend auf diesen Arbeiten wurde im Rahmen des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Projekts „Transmission realer Staubpartikel aus Tierställen“ die oben beschriebene Ausbreitungssimulation weiterentwickelt. Hauptziel war es dabei, das Modell hinsichtlich der Ausbreitung von Tierstäuben zu erweitern. Bei der Transmission von Stäuben müssen physikalische Effekte wie die Sedimentation, die Deposition, Resuspension (Wiederaufwirbelung) und Koagulation berücksichtigt werden. Diese Effekte spielten bei Geruchsmolekülen nur eine untergeordnete Rolle. Die Sedimentation der Partikel wurde bereits in [5] eingehend untersucht, die Einflüsse der Deposition und Resuspension werden in [6] beschrieben. Die Frage, was geschieht, wenn zwei Partikel während der Transmission zusammenstoßen, ist bisher nicht in der Arbeitsgruppe untersucht worden. Daher sollte sie im ersten Teil dieser Arbeit beantwortet werden. Die Partikel können aneinander haften bleiben und einen neuen Partikel formen. Dieser Vorgang wird als Koagulation oder Agglomeration bezeichnet, je nachdem, welche Gestalt das Partikel

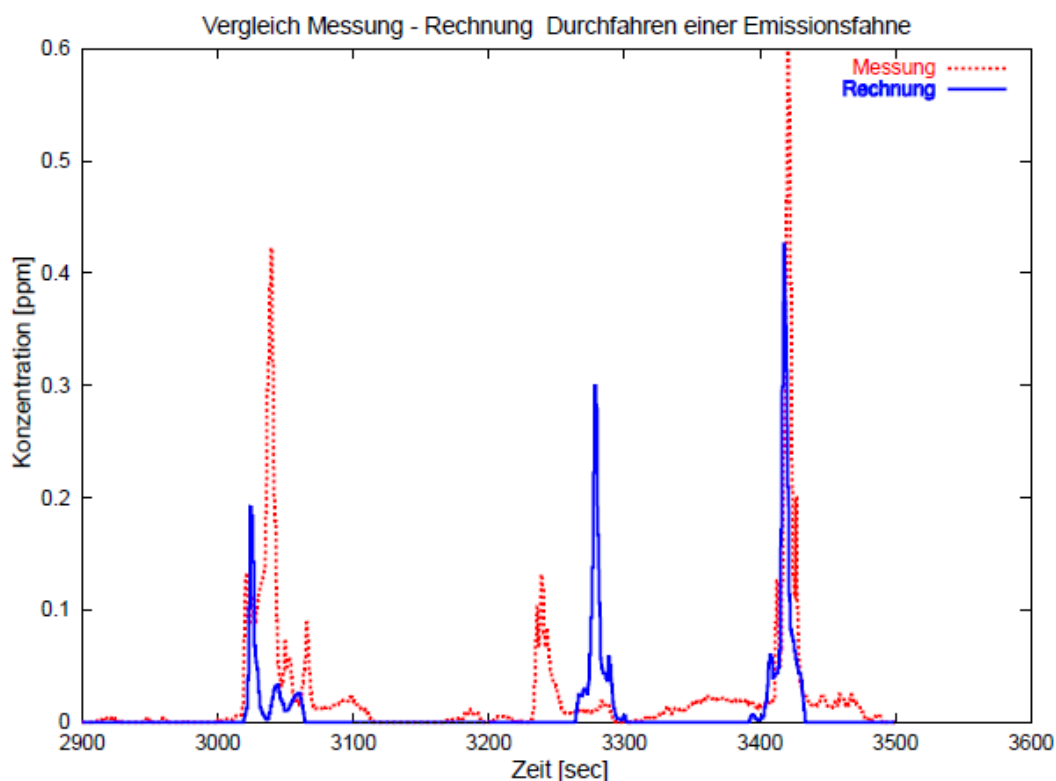


Abbildung 0.1: Ergebnisse der Validierung des Geruchsausbreitungsmodells NaSt3D [3]

nach der Fusion hat. Bei der Koagulation geht man davon aus, dass die beiden primären Partikel sphärisch sind und während des Zusammenhaftens miteinander zerfließen und somit wiederum einen sphärischen Partikel bilden. Bei der Agglomeration hingegen geht man davon aus, dass sich aus den zu Beginn sphärischen Partikeln Ketten aus Partikeln bilden. Dieser Prozess ist hauptsächlich im freien Molekularbereich (Partikelgrößen von einigen 10 bis 100 Nanometern) bedeutsam [7]. Da in dieser Arbeit aber nur Partikel in der Größenordnung von einigen Mikrometern untersucht werden, ist dieser Prozess nur von untergeordneter Bedeutung und es wurde nur die Koagulation näher betrachtet.

Mit Hilfe einer im Institut für Landtechnik aufgebauten Aerosolversuchskammer war es möglich, die Größenordnung des Einflusses der Koagulation auf das Ausbreitungsgeschehen abzuschätzen. Es zeigte sich, dass eine Berücksichtigung der Koagulation bei der Simulation des Ausbreitungsgeschehens im Freiluftbereich aufgrund der geringen Partikelanzahlkonzentrationen nicht notwendig ist. Bei deutlich höheren Partikelanzahlkonzentrationen, wie sie zum Beispiel im Innenraum von Stallgebäuden vorherrschen, ist eine Vernachlässigung dieses Effektes allerdings nicht mehr möglich.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurde eine Ausbreitungssimulation für Stäube entwickelt. Bei dem Programm STAR3D (**S**imulated **T**ransmission of **A**erosols in **3** dimensions) handelt es sich um vollständige Neuentwicklung, die im Anschluss in zwei Freilandmessungen

erfolgreich validiert werden konnte.

Das Modell erlaubt in einer zukünftigen Fortentwicklung die Berücksichtigung der Koagulation der Aerosolpartikel, so dass es mit einigen Modifikationen auch zur Simulation des Strömungsgeschehens in geschlossenen Stallgebäuden eingesetzt werden kann.

In Abbildung 0.2 sind nochmals die auf die Ausbreitung von Aerosolen wirkenden Einflüsse dargestellt, die grün markierten Teilbereiche wurden im Rahmen dieser Arbeit untersucht.

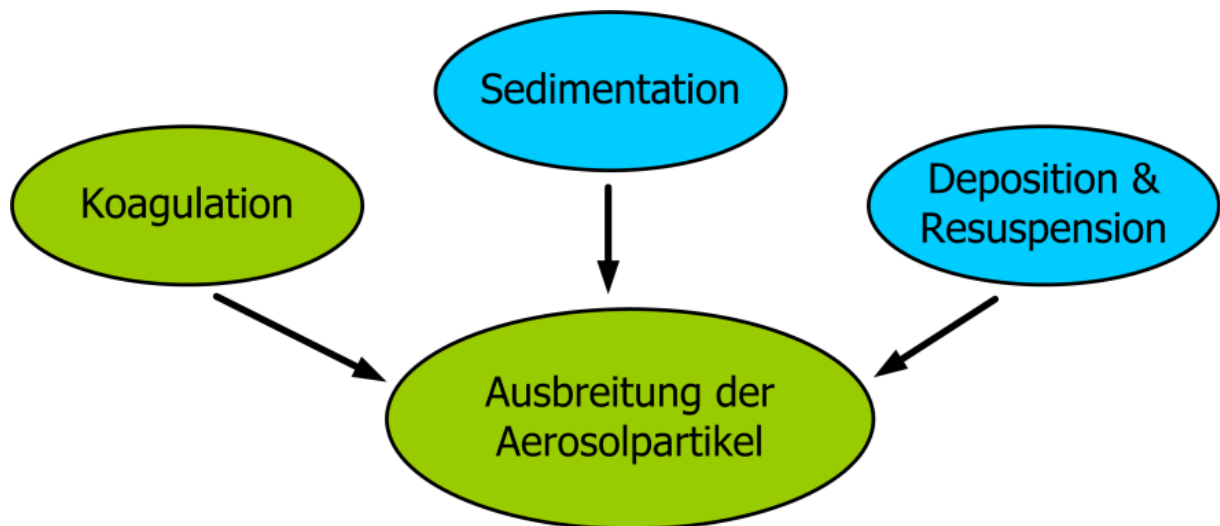


Abbildung 0.2: Einflüsse auf das Ausbreitungsgeschehen von Aerosolen

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in sieben Kapitel:

- Im ersten Kapitel werden einige Grundlagen der Aerosolphysik vorgestellt.
- Das zweite Kapitel beschreibt die verschiedenen Ansätze, die bei der Ausbreitungsmodellierung verfolgt werden. Darauf basierend wird anschließend das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Ausbreitungsmodell STAR3D erläutert.
- Im dritten Kapitel werden die physikalischen Effekte, die die Transmission der Aerosolpartikel beeinflussen, dargestellt. Dabei handelt es sich um die Sedimentation, Deposition und Koagulation der Partikel. Abschließend werden in diesem Kapitel die Ergebnisse erster Evaluierungen von STAR3D in Bezug auf die Sedimentation und Diffusion der Aerosolpartikel diskutiert.
- Die neu aufgebaute Aerosolkammer wird im vierten Kapitel vorgestellt.
- Im sechsten Kapitel werden die Resultate der Untersuchungen zur Koagulation von Aerosolen im Kontinuumsbereich dargestellt. Weiter wird eine Abschätzung des Einflusses der Koagulation auf das Transmissionsverhalten im Freilandbereich durchgeführt.

- Im fünften Kapitel werden die Ergebnisse zweier Freiluftmessungen zur erfolgreichen Validierung von STAR3D vorgestellt.
- Das letzte Kapitel beinhaltet eine Zusammenfassung und es wird ein Ausblick auf Möglichkeiten der Weiterentwicklung von STAR3D gegeben.

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Aerosole

Der Begriff Aerosol bezeichnet die Dispersion¹ von flüssigen oder festen Partikeln in einem gasförmigen Medium. Bei dem Medium handelt es sich üblicherweise um Luft, die darin gelösten Partikel haben meist eine Größe zwischen einigen Nanometern und einigen hundert Mikrometern. Um die Aerosolpartikel zu klassifizieren, teilt man sie in verschiedene Gruppen ein, die sich durch den aerodynamischen Durchmesser² voneinander unterscheiden.

Eine mögliche Größenklassifizierung der Aerosolpartikel richtet sich nach dem Eindringverhalten der Partikel in den menschlichen Atemtrakt [5]:

- einatembarer Staub - Anteil, der durch Mund und Nase eingeatmet wird,
- thorakaler Staub - Anteil, der über den Kehlkopf hinaus bis in die Lunge vordringt,
- tracheobronchaler Staub - Anteil, der über den Kehlkopf aber nicht bis in die nicht-cilierten Luftwege vordringt,
- alveolengängiger Staub - Anteil, der bis in die nichtcilierten Luftwege vordringt.

In Abbildung 1.1 ist das Eindringverhalten der Partikel graphisch veranschaulicht.

Eine gebräuchliche, technische Definition der Partikelgrößenfraktion bildet das Abscheideverhalten der oberen Atemwege des menschlichen Körpers nach. Hierzu wird in der

¹Hier wird unter Dispersion nicht der physikalische Begriff der Abhängigkeit der Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Welle von der Wellenlänge verstanden, sondern die chemische Bedeutung. Sie beschreibt ein heterogenes Gemisch aus mindestens zwei verschiedenen Stoffen, die sich nicht ineinander lösen.

²zur Definition des aerodynamischen Durchmessers siehe Abschnitt 1.3

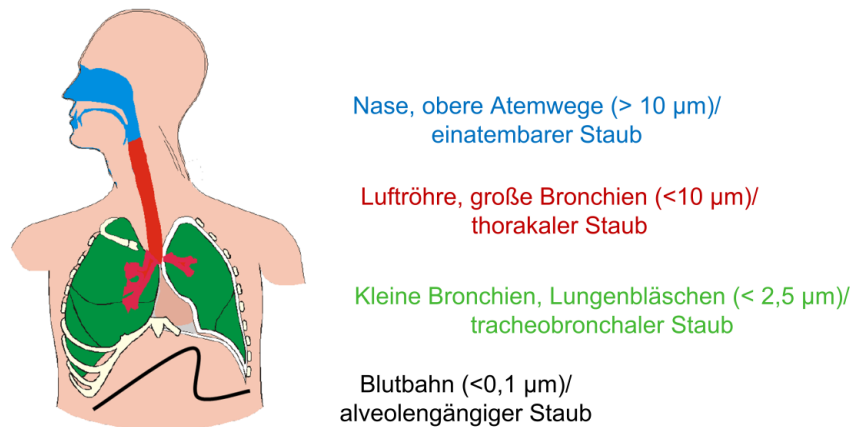


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung des Atemtraktes [8]

Richtlinie DIN-EN 481 [9] eine Abscheidekurve definiert. Diese entspricht nicht einer Stufenfunktion, so dass alle Partikel die kleiner als eine Grenze sind, berücksichtigt werden und alle größeren Partikel keine Berücksichtigung finden, sondern sie hat einen *s*-förmigen Verlauf. Die PM_{10}^3 definierende Kurve erreicht bei ungefähr $10 \mu\text{m}$ ihren 50 Prozent-Wert. Partikel mit einem aerodynamischen Durchmesser von weniger als $1 \mu\text{m}$ werden vollständig berücksichtigt. Der Anteil der einbezogenen Partikel sinkt mit zunehmenden aerodynamischen Durchmesser ab. Partikel, die einen Durchmesser größer als $15 \mu\text{m}$ haben, werden nicht einbezogen.

Analog wird eine zweite Trennkurve definiert, die ihren 50 Prozent-Punkt bei ungefähr $2,5 \mu\text{m}$ erreicht, die dieser Bedingung folgende Staubfraktion wird als $\text{PM}_{2,5}$ bezeichnet [9, 10].

Die in der Öffentlichkeit häufig diskutierte *Nanopartikel* haben einen Durchmesser von 1 bis 100 Nanometern. Ihr Durchmesser liegt damit weit jenseits des Durchmessers der in dieser Arbeit untersuchten Partikel, die einen Durchmesser in der Größenordnung von einigen Mikrometern haben.

1.2 Partikelgrößenverteilungen

In der Natur kommen monodisperse Aerosole, d. h. Aerosole, in denen alle Partikel die gleiche Größe haben, nicht vor. Natürliche Aerosole sind polydispers, d. h. es kommen Partikel aller Größen vor. Häufig ist man daran interessiert, Informationen über die Häufigkeitsverteilung der einzelnen Partikelgrößen innerhalb eines Aerosols zu erhalten⁴. Messgeräte geben meist nur Auskunft darüber, wieviele Partikel, die größer als eine untere Schranke d_u und kleiner als eine obere Schranke d_o sind, gezählt wurden. Diese Intervalle werden üblicherweise Größenklassen genannt. Ist das Messgerät in der Lage, die Partikelanzahl in

³für engl. particulate matter

⁴Unter der Größe des Partikels soll im Folgenden der Durchmesser des Partikels verstanden werden

mehreren aneinander angrenzenden Größenklassen zu bestimmen, ergeben sich Informationen über die Partikelgrößenverteilung des Aerosols. Da die Breiten der Kanäle $d_o - d_u$ nicht zwingend für alle Kanäle gleich sein müssen, wird die Partikelanzahl innerhalb des Kanals auf die Breite $d_o - d_u$ oder auch auf den Logarithmus der Breite $\log(d_o/d_u)$ des Kanals normiert. Die Größenverteilungen von natürlichen Aerosolen lassen sich in der Regel durch eine oder durch die Summe mehrerer logarithmischer Normalverteilungen [11, 12] beschreiben:

$$n(d_p) = \frac{N}{\sqrt{2\pi} \log \sigma_g} \cdot e\left(-\frac{(\log d_p - \log d_g)^2}{2 \cdot (\log \sigma_g)^2}\right) \quad (d_p > 0) \quad [1/m^3] \quad (1.1)$$

In Gleichung (1.1) bezeichnen d_p den Partikeldurchmesser, N die Gesamtpartikelanzahlkonzentration, σ_g die dimensionslose geometrische Standardabweichung der Verteilung und d_g den geometrischen Mittelwert des Durchmessers. Ein Beispiel für eine solche Partikelgrößenverteilung ist in Abbildung 1.2 gezeigt. Als Werte für die Parameter wurden $d_g = 0,6 \mu m$, $\sigma_g = 2,0$ und $N = 100 \times 10^6 / m^3$ angesetzt, wie sie für Tierstäube typisch sind (siehe auch Abbildung 6.2).

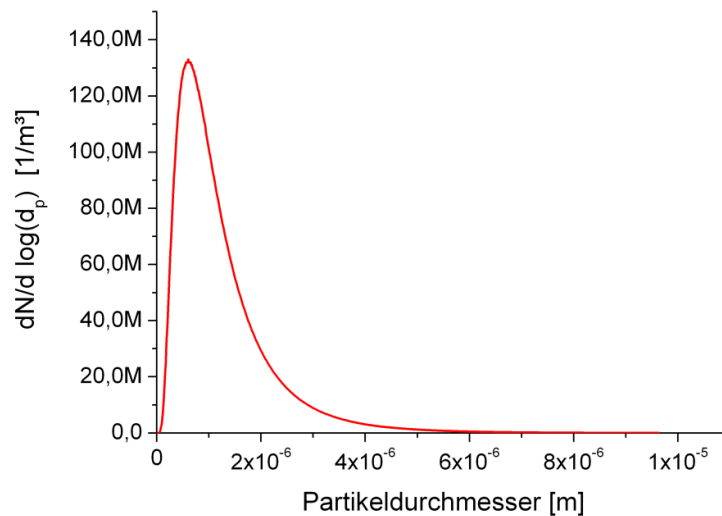


Abbildung 1.2: Beispiel für eine Partikelgrößenverteilung gemäß einer Log-Normalverteilung (1.1) mit den Parametern $N = 100 \times 10^6 m^{-3}$, $\sigma_g = 2$ und $d_g = 0,6 \mu m$

1.3 Definition des Äquivalentdurchmessers von Aerosolpartikeln

Bei der Betrachtung von nichtsphärischen Partikeln stellt sich die Frage, wie man den Durchmesser von Aerosolpartikeln definieren kann. Hierfür gibt es mehrere Ansätze, die den Durchmesser des unregelmäßig geformten Aerosolpartikels mit einer Kugel, die die gleiche Sedimentationsgeschwindigkeit besitzt, in ein Verhältnis setzen. Der volumenäquivalente Durchmesser d_e ist der Durchmesser einer Kugel, die das gleiche Volumen wie der untersuchte Partikel hat. Ein weiterer dieser Durchmesser wird aerodynamischer Durchmesser d_A genannt und bezeichnet den Durchmesser, den eine Kugel mit der Einheitsdichte von $\rho_0 = 1 \text{ g/cm}^3$ bzw. $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$ besitzt und die die gleiche Sedimentationsgeschwindigkeit wie der betrachtete unregelmäßig geformte Partikel hat.

Der Stokes-Durchmesser d_s bezeichnet den Durchmesser einer Kugel, die die gleiche Dichte und Sedimentationsgeschwindigkeit wie der untersuchte Partikel hat. In Abbildung 1.3 sind die drei Definitionen des volumenäquivalenten Durchmessers d_e , des aerodynamischen Durchmessers d_A und des Stokesdurchmessers d_s nebeneinander dargestellt.

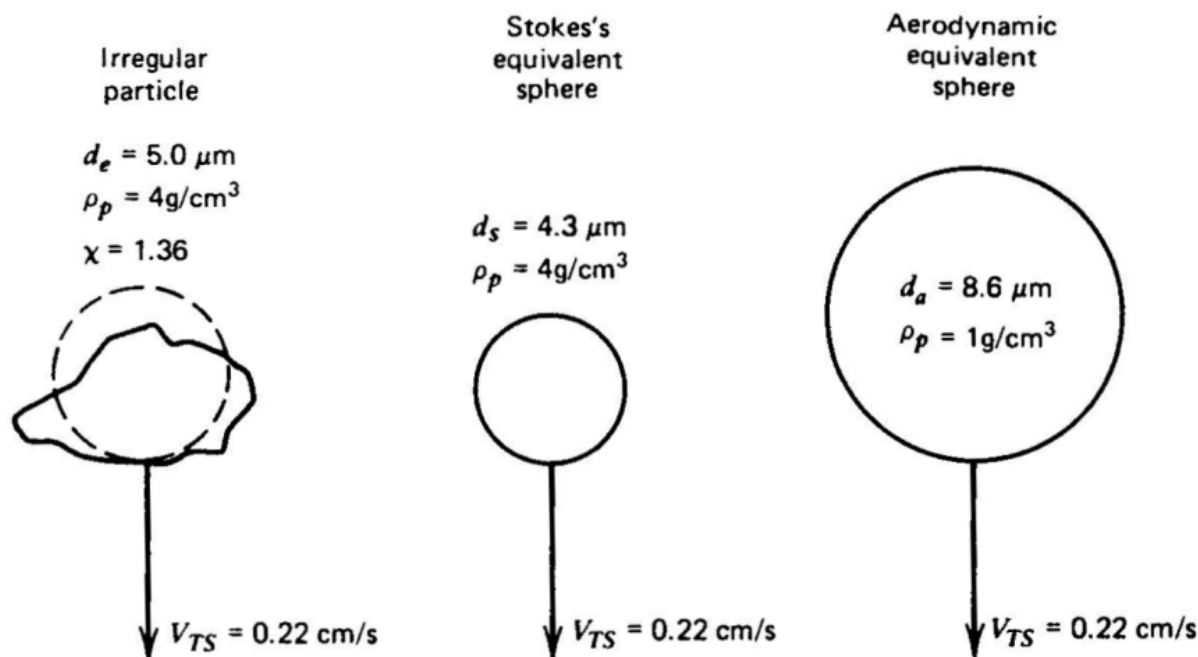


Abbildung 1.3: Vergleich der Definitionen der drei Äquivalentdurchmesser [12]

Kapitel 2

Theorie der Ausbreitungssimulation

2.1 Einleitung

Die Ausbreitungssimulation gliedert sich im Allgemeinen in zwei Teile, im ersten Teil wird das der Ausbreitung der Schadstoffe oder -gase zu Grunde liegende Windfeld ermittelt und im zweiten Teil wird die Bewegung der Schadstoffe oder -gase¹ berechnet. Für beide Teilbereiche gibt es verschiedene Ansätze, wie diese Schritte durchgeführt werden können. Der Transport der Schadstoffe kann mit Hilfe dreier Verfahren simuliert werden:

- Gauß-Fahnenmodelle
- Eulermodelle
- Lagrangemodelle

Für den Bereich der Windfeldsimulation können im Wesentlichen drei Verfahrensweisen unterschieden werden:

- direkte Nutzung des gemessenen Windfeldes
- Berechnung eines modifizierten Windfeldes aus den gemessenen Daten durch statische numerische Modelle
- Berechnung eines modifizierten Windfeldes aus den gemessenen Daten durch direkte numerische Simulation.

Im folgenden Abschnitt soll eine Übersicht über die bereits bestehenden Möglichkeiten der Ausbreitungsmodellierung gegeben werden, bevor in Abschnitt 2.3 das im Rahmen dieser

¹im Folgenden zusammenfassend als Schadstoffe bezeichnet

Arbeit entwickelte Ausbreitungsmodell STAR3D näher erläutert wird. Allen Verfahren zur Windfeldberechnung ist gemein, dass sie das Gebiet, innerhalb dessen die Ausbreitungssimulation erfolgen soll, durch ein Gitter in einzelne Zellen einteilen. Auf den Mittelpunkten dieser Zellen werden dann die gewünschten physikalischen Größen (Windgeschwindigkeiten und -richtungen, Druck, Schadstoffkonzentrationen, etc.) berechnet.

2.2 Übersicht über bestehende Ausbreitungsmodelle

2.2.1 Schadstofftransportmodelle

2.2.1.1 Gauß-Fahnenmodelle

Bei dem sogenannten Gauß-Fahnenmodell handelt es sich um ein seit Jahrzehnten in der atmosphärischen Ausbreitungsmodellierung verwendetes Verfahren zur Immissionsprognostik². Es basiert auf der Diffusionsgleichung für die Schadstoffkonzentration C

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \dot{Q}. \quad (2.1)$$

Die Gleichung (2.1) lässt sich für den Fall eines homogenen Windfeldes sowie zeitlich und räumlich konstanter Diffusionskoeffizienten D_i in alle drei Raumrichtungen bei einfachen Randbedingungen (zur Zeit $t = 0$ werde am Ort (x_0, y_0, H) die Schadstoffmenge Q freigesetzt) durch

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{(4\pi t)^3 D_x D_y D_z}} \cdot \exp\left(-\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4D_x t} + \frac{(y-y_0)^2}{4D_y t} + \frac{(z-H)^2}{4D_z t}\right]\right) \quad (2.2)$$

lösen [13]. Die Gleichung (2.2) beschreibt die Ausbreitung eines Schadstoff-“Puffs“³ [13] und wird daher auch als Gauß-Puff-Modell bezeichnet. Lässt man die Bewegung der Wolke z.B. mit der Windgeschwindigkeit u_h in x -Richtung zu und überlagert viele dieser Gauß-Puffs, so erhält man das Gauß-Fahnenmodell. Die Konzentrationsverteilung wird hierbei durch

$$C(x, y, z) = \frac{\dot{Q}}{2\pi u_h \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (2.3)$$

beschrieben. \dot{Q} bezeichnet den Emissionsmassenstrom, u_h die Windgeschwindigkeit in Richtung der x -Achse sowie σ_y und σ_z Ausbreitungsparameter, die von den meteorologischen Randbedingungen abhängen. Eine mögliche Parametrisierung kann durch $\sigma_y =$

²Unter Emissionen werden in dieser Arbeit die aus einer bekannten Quelle freigesetzten Schadstoffe oder Tracerpartikel verstanden. Als Immissionen werden die im untersuchten Bereich abgelagerten Schadstoffe bzw. Tracerpartikel bezeichnet.

³Unter einem Puff wird eine deltapulsförmige Freisetzung eines Schadstoffes aus einer Quelle verstanden.

$F \cdot x^f$ und $\sigma_z = G \cdot x^g$ erfolgen [14]. F , G , f und g hängen von der jeweiligen Ausbreitungs-klasse ab und können Tabellen entnommen werden⁴ [3]. Abbildung 2.1 zeigt ein Beispiel für die mit Hilfe des Gauß-Fahnenmodells ermittelte Konzentrationsverteilung.

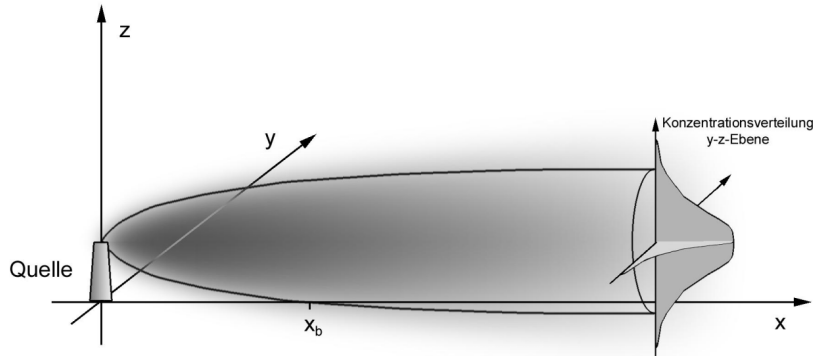


Abbildung 2.1: Konzentrationsverteilung des Gauß-Fahnenmodells [3]

2.2.1.2 Eulermodelle

Bei Eulermodellen werden die Schadstoffe als Gas im Gas betrachtet. Dementsprechend muss die Diffusionsgleichung (2.1) um einen Anteil erweitert werden, der den Transport des Schadstoffes mit dem Geschwindigkeitsfeld beschreibt. Der Schadstofffluss F pro Zeit und Fläche ist dann durch $F = c \cdot \vec{v}$ gegeben, wobei c die Konzentration und \vec{v} das Geschwindigkeitsfeld beschreibt. Die Konzentrationsänderung an einem festen Ort ist dann durch

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla F = -\nabla(c\vec{v}) = -(c \cdot \nabla \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla c) \quad (2.4)$$

gegeben. Mit der Bedingung $\nabla \vec{v} = 0$ aus der Kontinuitätsgleichung für das Windfeld (siehe auch Abschnitt 2.3.2) folgt dann unter Berücksichtigung der Diffusion die Advektions-Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + Q \quad (2.5)$$

Die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors (v_x, v_y, v_z) bezeichnen das Windgeschwindigkeitsfeld am Ort (x, y, z) . Die anderen Bezeichnungen sind wie in Abschnitt 2.2.1.1 gewählt. Eulermodelle berechnen die Lösung der Gleichung (2.5) numerisch auf einem Gitter⁵, welches über das Ausbreitungsvolumen gelegt wird und liefern daher nur Informationen über die Schadstoffkonzentration auf den Gitterpunkten. Das dem Eulermodell zu

⁴Die Ausbreitungsparameter können der TA Luft [2] entnommen werden. Sie wurden durch Tracer-gasmessungen an hohen Schornsteinen ermittelt [15].

⁵Eulermodelle werden deshalb in der Literatur auch als Euler-Gitter-Modelle bezeichnet.

Grunde liegende Windfeldmodell muss zur Ausbreitungssimulation neben dem Windfeld auch Informationen über die ortsabhängigen Diffusionskonstanten D_i ($i = x, y, z$) liefern. Nachteilig beim Eulermodell wirkt sich die Diskretisierung durch das Gitter aus, da für eine hohe Ortsauflösung der Konzentrationsverteilung ein feinmaschiges Gitter gewählt werden muss. Dies wirkt sich erheblich auf die benötigte Rechenzeit aus. Des Weiteren können Eulermodelle nicht zur Ausbreitungssimulation von Stäuben verwendet werden, da die Partikeleigenschaften wie z.B. die Sedimentation der Partikel nicht berücksichtigt werden können.

2.2.1.3 Lagrangemodelle

Lagrangemodelle nutzen zur Simulation der Schadstoffausbreitung die Berechnung der Bahnen von Partikeln⁶. Dieses Verfahren umgeht die Diskretisierungsproblematik des Eulermodells bei der Berechnung der Schadstoffkonzentrationen und kann auch Partikeleigenschaften berücksichtigen. Dieses Modell wurde daher auch in STAR3D verwendet. Eine detaillierte Beschreibung dessen erfolgt in Abschnitt 2.3.4.

2.2.2 statische numerische Modelle zur Windfeldberechnung

Das in Abschnitt 2.2.1.1 beschriebene Gauß-Fahnenmodell eignet sich nur zur Ausbreitungssimulation im ebenen und wenig strukturierten Gelände. In diesem einfachen Fall kann das gemessene Windfeld direkt zur Simulation der Schadstoffausbreitung verwendet werden. Falls diese Voraussetzungen nicht gegeben sind, muss der eigentlichen Ausbreitungssimulation eine Berechnung des Windfeldes innerhalb des Simulationsgebietes vorangestellt werden [13]. Im Anschluss daran kann durch ein Euler- oder Lagrange-Partikelmodell die Immissionsprognostik durchgeführt werden.

Zur Berechnung des Windfeldes werden im Wesentlichen zwei Verfahren unterschieden, die im Folgenden vorgestellt werden.

2.2.2.1 diagnostische Windfeldmodelle

Diagnostische Windfeldmodelle beruhen auf der Berechnung eines massekonsistenten⁷ Windfeldes aus einem vorgegebenen Windfeld. Hierbei wird das gegebene Windfeld so modifiziert, dass sich eine divergenzfreie Strömung ergibt. Dazu minimiert man das Integral

$$\int \alpha_h^2 (v_x - v_{x0})^2 + \alpha_h^2 (v_y - v_{y0})^2 + \alpha_v^2 (v_z - v_{z0})^2 = \min! \quad (2.6)$$

⁶Manchmal auch als Lagrange-Partikel-Modell bezeichnet.

⁷d.h. das Windfeld muss divergenzfrei sein

unter Erfüllung der Nebenbedingung

$$\nabla \vec{u} = 0. \quad (2.7)$$

Hier bezeichnet (v_{x0}, v_{y0}, v_{z0}) das Ausgangswindfeld, (v_x, v_y, v_z) das resultierende Windfeld und α_v, α_h den vertikalen bzw. horizontalen Gewichtsfaktor. In Abbildung 2.2 ist ein Beispiel für die Modifizierung des Windfeldes dargestellt. In Abbildung 2.2a) ist das gemessene Windfeld eingezeichnet, in b) eine Vergrößerung des interessanten Bereiches. In die Zellen am Hindernis fließt mehr Fluid ein als durch das Hindernis wieder ausfließen kann. Daher müssen die Windvektoren nach oben „verbogen“ werden, um die Divergenzfreiheit zu erhalten. Das resultierende Windfeld ist in Abbildung 2.2c) gezeigt. Um eine möglichst

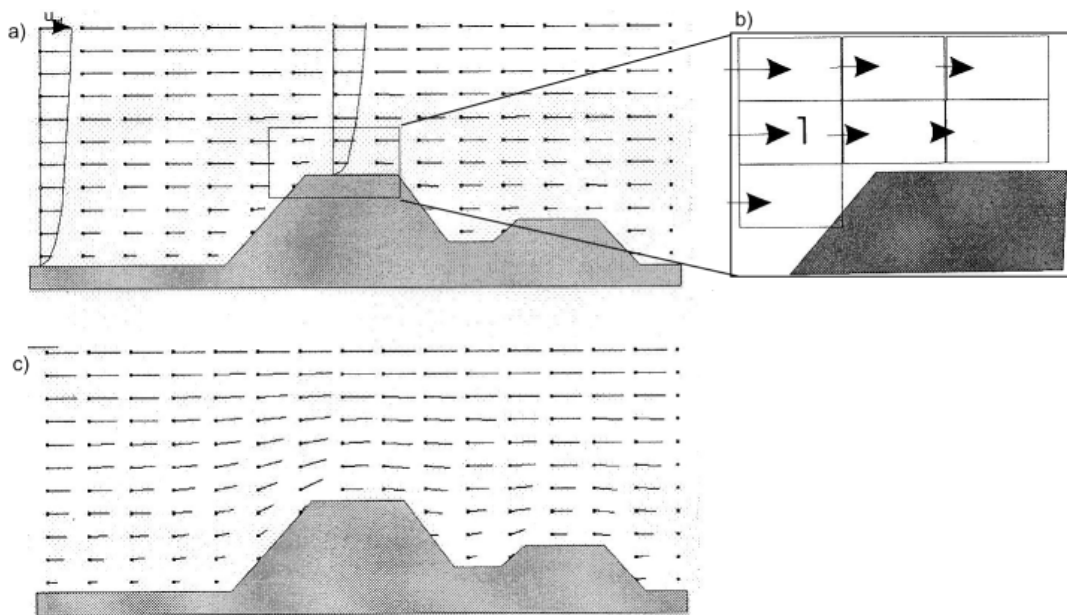


Abbildung 2.2: Beispiel für die Berechnung des massenkonsistenten Windfeldes nach Gleichung (2.6). In a) ist das gemessene Feld gezeigt, in b) ein vergrößerter Ausschnitt, in c) das massenkonsistente Windfeld (Abbildung modifiziert nach [13]).

hohe Realitätsnähe des berechneten Windfeldes zu erlangen, sollten sich möglichst viele Messstellen zur Ermittlung der Winddaten im Rechengebiet befinden [16]. Die Nutzung von diagnostischen Modellen hat den Vorteil, dass die Berechnung des Windfeldes zeitökonomisch möglich ist [13] und daher die Windfelder für eine Vielzahl von Situationen sehr schnell ermittelt werden können. Nachteilig wirkt sich aus, dass als Bedingung an das berechnete Windfeld nur die Divergenzfreiheit gefordert wird. Dies schließt die Nutzung des Verfahrens in stark gegliedertem Gelände aus, da hier die alleinige Forderung der Divergenzfreiheit nicht zu konsistenten Windfeldern führt. Ein weiterer Nachteil der diagnostischen Modelle besteht darin, dass sie nur Informationen über die Windgeschwindigkeiten und -richtungen liefern. Die Transportmodelle wie z.B. das Eulermodell benötigen aber auch Angaben über die Diffusionskoeffizienten, die sich aus den Turbulenzen des Windfeldes ableiten lassen. Daher müssen in diagnostischen Modellen der Windfeldberechnung Turbulenzmodelle nachgeschaltet werden, die diese Koeffizienten bestimmen.

2.2.2.2 prognostische Windfeldmodelle

Prognostische Windfeldmodelle basieren auf der Verwendung der dynamischen Grundgleichungen der atmosphärischen Strömungsmechanik. Diese umfassen neben der aus der Kontinuitätsgleichung abgeleiteten Masseerhaltung auch die Impulserhaltung. Weiter lassen sich mit Hilfe des Energieerhaltungssatzes thermische Effekte berücksichtigen. Daher liefern diese Modelle neben der mittleren Windgeschwindigkeit auch Turbulenzgrößen wie die Diffusionskoeffizienten. Da diese gleichzeitig, d.h. nicht nacheinander wie in diagnostischen Modellen, berechnet werden, ist die Konsistenz von Windfeld und Turbulenzfeld gegeben.

Innerhalb der Gruppe der prognostischen Modelle unterscheidet man zwischen hydrostatischen und nicht-hydrostatischen Modellen. Hydrostatische Verfahren vereinfachen die vertikalen Bewegungsgleichungen sehr stark [17], was in komplexen Orographien zu Schwierigkeiten führen kann. Nicht-hydrostatische Modelle nehmen diese Vereinfachungen nicht vor und lösen die vollständigen Strömungsgleichungen. Dies führt allerdings zu deutlich längeren Rechenzeiten, so dass meist nur Einzelfälle einer Immissionsprognose unterzogen werden können.

In Abbildung 2.3 ist der Ablauf der Ausbreitungsmodellierung mit den bisher vorgestell-

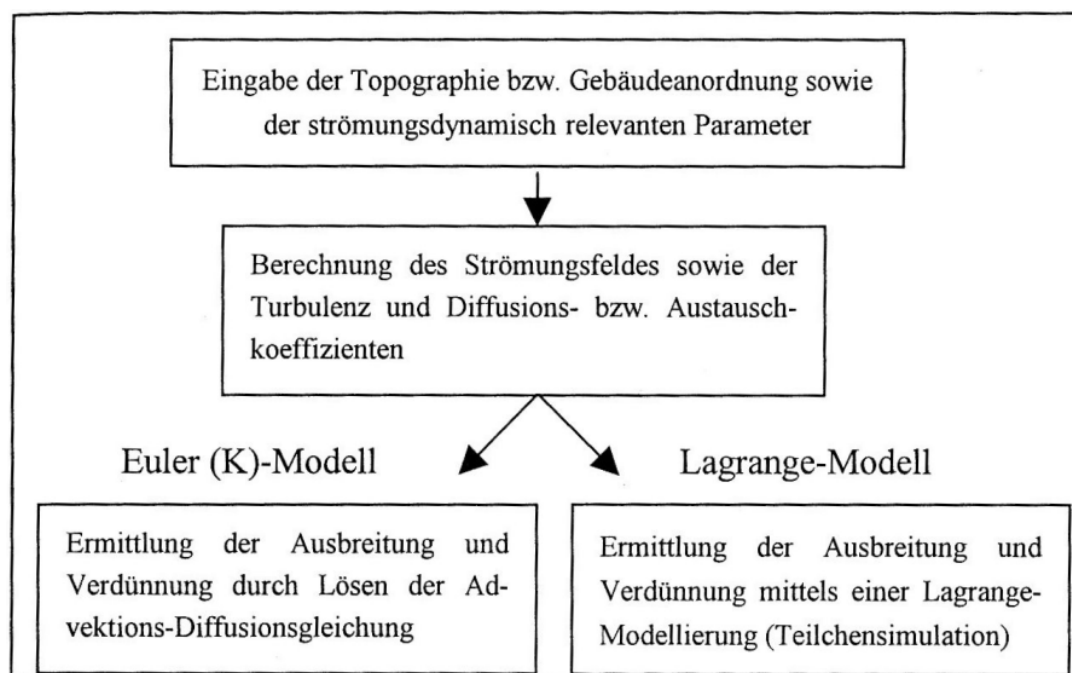


Abbildung 2.3: Ablauf der Ausbreitungsmodellierung mit den bisher vorgestellten Modellen [13]

ten Modellen dargestellt.

2.3 STAR3D

2.3.1 Direkte numerische Simulation

Die Direkte Numerische Simulation (DNS) bezeichnet die numerische Lösung der nicht-stationären, d. h. zeitabhängigen, Navier-Stokes-Gleichungen. Hierbei werden die Navier-Stokes-Gleichungen nur näherungsweise gelöst, da keine allgemeine analytische Lösung existiert. Die DNS hat gegenüber den sonst üblichen Turbulenzmodellen den Vorteil, dass auch kleinskalige Verwirbelungen (solange sie größer als die doppelte Zellweite des Rechengitters, auf denen die Navier-Stokes-Gleichungen gelöst werden (s. Abschnitt 2.3.2)) berücksichtigt werden können. In gewisser Weise kann die DNS zur Gruppe der diagnostischen Windfeldmodelle gezählt werden, da sie die strömungsmechanischen Grundgleichungen löst.

Daher wurde für die Berechnung des Windfeldes des im Folgenden vorgestellten Ausbreitungsmodells die DNS verwendet. In Abschnitt 2.3.2 werden zunächst die Navier-Stokes-Gleichungen dargestellt, bevor in Abschnitt 2.3.3 das verwendete Verfahren zur Berechnung der numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben wird.

2.3.2 Navier-Stokes-Gleichungen

Die Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben die Strömung eines newtonschen Fluids und können daher als die Grundgleichungen der Strömungsmechanik bezeichnet werden. Sie leiten sich aus der Erhaltung der Masse des Fluids und des Impulses her.

Erhaltung der Masse

Die Masse M eines Fluidvolumens V ist durch

$$M = \int_V \rho(\vec{x}, t) dV \quad (2.8)$$

gegeben. ρ bezeichnet die Dichte. Da die Masse als Erhaltungsgröße angesehen werden kann, ergibt sich mit dem Transporttheorem⁸ [18]

$$\frac{d}{dt} \int_V f(\vec{x}, t) d\vec{x} = \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} f + \operatorname{div}(f\vec{u}) \right] d\vec{x} \quad (2.9)$$

der Zusammenhang

$$0 = \frac{dM}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho(\vec{x}, t) dV = \int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\vec{u}) \right] dV. \quad (2.10)$$

⁸Bei f handelt sich um eine differenzierbare, skalare Funktion und $\vec{u}(\vec{x}, t) = \partial/\partial t \vec{\Phi}(\vec{c}, t)$ beschreibt die zeitliche Änderung des Gebietes $\vec{\Phi}$, innerhalb dessen die Partikelpositionen \vec{c} liegen.

Für das Argument des letzten Integrals in Gleichung (2.10) muss folglich gelten:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \vec{u} + \vec{u} \operatorname{grad} \rho = 0. \quad (2.11)$$

In der weiteren Betrachtung soll vorausgesetzt werden, dass es sich um ein inkompressibles Fluid handelt, die Dichte also räumlich und zeitlich konstant ist. Dies ist gerechtfertigt, solange die Geschwindigkeiten des Fluids im Bereich von einigen Metern pro Sekunde liegen, wie sie bei Windströmungen üblicherweise auftreten [3]. Daraus folgt, dass die Beziehungen $\partial \rho / \partial t = 0$ bzw. $\operatorname{grad} \rho = 0$ gelten. Die Massenerhaltung führt damit auf

$$\operatorname{div} \vec{u} = 0, \quad (2.12)$$

d.h. das Geschwindigkeitsfeld des Fluids muss divergenzfrei sein.

Erhaltung des Impulses

Die Impulsänderung entspricht nach Newton der Summe aller auf das Fluidpaket wirkenden Kräfte

$$d\vec{F} = dm \frac{d\vec{u}}{dt} = \rho dV \frac{d\vec{u}}{dt} \quad (2.13)$$

oder komponentenweise

$$dF_i = \rho dV \frac{du_i}{dt} = \rho dV \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) u_i \right]. \quad (2.14)$$

Durch Einsetzen von

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} - u_i \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.15)$$

und

$$\rho (\vec{u} \cdot \nabla) u_i = \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}) - u_i \operatorname{div}(\rho \vec{u}) \quad (2.16)$$

in Gleichung (2.14) folgt

$$\frac{dF_i}{dV} = \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} - u_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}) - u_i \operatorname{div}(\rho \vec{u}). \quad (2.17)$$

Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung $\partial \rho / \partial t + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0$ vereinfacht sich (2.17) zu

$$\frac{dF_i}{dV} = \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u_i \vec{u}). \quad (2.18)$$

Durch Einführung der spezifischen Kraft⁹

$$\vec{f} = \frac{d\vec{F}}{dm} \quad (2.19)$$

⁹Kraft pro Masse

wird (2.18) zu

$$\frac{dF_i}{dV} = f_i \frac{dm}{dV} = \rho f_i = \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \text{div}(\rho u_i \vec{u}). \quad (2.20)$$

Die Annahme, dass es sich um ein inkompressibles Fluid handelt, führt zu folgendem Zusammenhang

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \vec{f}. \quad (2.21)$$

Im nächsten Schritt werden die auf das Fluidpaket wirkenden Kräfte \vec{f} untersucht. Diese setzen sich aus drei Teilen zusammen.

Druckkraft

Der Druck p , der von außen auf das Fluidpaket mit Volumen V und Oberfläche ∂V wirkt, ist durch

$$- \int_{\partial V} p \vec{n} dA = - \int_V \nabla p dV \quad (2.22)$$

gegeben. Die Gleichheit in (2.22) folgt aus dem Satz von Gauß. Auf jedes Fluidvolumen dV wirkt damit die Druckkraft $dF_p = -dV \nabla p$. Die spezifische Druckkraft ist somit

$$\vec{f}_p = \frac{d\vec{F}_p}{dm} = - \frac{dV}{dm} \nabla p = - \frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (2.23)$$

Falls die Druckkraft die einzige wirkende Kraft ist, so ergeben sich aus (2.20) und (2.23) die Eulergleichungen

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = - \frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (2.24)$$

Diese beschreiben die Strömung von idealen, reibungsfreien und inkompressiblen Fluiden.

Innere Reibungskräfte

Die irreversiblen Reibungskräfte innerhalb des Fluids können durch den zähen Spannungstensor σ beschrieben werden. Auf ein Volumenelement V des Fluids wirkt dann die Kraft

$$\int_{\partial V} \sigma \vec{n} dA = \int_V \text{div} \sigma dV. \quad (2.25)$$

Die Kraft auf ein infinitesimales Volumenelement dV beträgt demnach $\text{div} \sigma dV$. Die spezifische innere Kraft ergibt sich aus

$$\vec{f}_i = \frac{1}{\rho} \text{div} \sigma. \quad (2.26)$$

Der Spannungstensor σ kann unter Verwendung der Stokesschen Postulate¹⁰ für Newtonsche Flüssigkeiten¹¹ als¹²

$$\sigma = 2\eta\epsilon + \left(\xi - \frac{2}{3}\eta\right)\text{div}\vec{u} \text{ Id} \quad (2.27)$$

geschrieben werden [18]. ϵ bezeichnet den Deformationstensor

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.28)$$

η und ξ werden 1. und 2. Zähigkeitskoeffizient genannt. Der zweite Summand in Gleichung (2.27) fällt weg, da für inkompressible Fluide $\text{div}\vec{u} = 0$ gilt. Die spezifische innere Kraft (2.26) lässt sich dann komponentenweise als

$$\left(\frac{1}{\rho} \text{div}\sigma \right)_i = \frac{\eta}{\rho} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.29)$$

schreiben. Fasst man $\eta/\rho = \nu$ zur kinematischen Viskosität zusammen, so gilt¹³

$$\left(\frac{1}{\rho} \text{div}\sigma \right)_i = \nu \left(\sum_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j}}_{=\text{div}\vec{u}=0} \right) = \nu \Delta u_i. \quad (2.30)$$

Äußere Kräfte

Spezifische äußere Kräfte können sich aus der Gravitationskraft und elektromagnetischen Kräften zusammensetzen. Sie werden im Folgenden als \vec{f}_a bezeichnet.

Setzt man (2.30) und \vec{f}_a in (2.21) ein, so ergeben sich die Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{u} + (\vec{u} \text{ grad})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u} - \frac{1}{\rho} \nabla p = \vec{f}_a \quad (2.31)$$

und

$$\text{div}\vec{u} = 0. \quad (2.32)$$

¹⁰Das Stokessche Postulat besagt, dass der Vorfaktor des letzten Summanden in Gleichung (2.27) $2/3\mu$ beträgt.

¹¹Unter einer Newtonschen Flüssigkeit versteht man ein Fluid, dessen Scherspannung τ proportional zur Schergeschwindigkeit du/dy ist. Diese Annahme gilt zum Beispiel für Wasser oder Luft.

¹²Id bezeichnet die Einheitsmatrix.

¹³unter Verwendung des Satzes von Schwarz

2.3.3 NaSt3DGP

Die Navier-Stokes-Gleichungen (2.31) besitzen keine allgemeingültige analytische Lösung. Daher ist man für die Lösung der Gleichungen auf numerische Verfahren angewiesen, die die Lösung der Gleichungen näherungsweise berechnen. Ein solches Verfahren wurde am Institut für Numerische Simulation der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn unter der Bezeichnung NaSt3DGP entwickelt [18]. NaSt3DGP wurde bereits in [3] im Rahmen der Ausbreitungssimulation von Gerüchen zur Berechnung des Windfeldes eingesetzt. Daher wird auch von STAR3D auf NaSt3DGP zurückgegriffen. Das von NaSt3DGP zur numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen verwendete Verfahren wird in diesem Abschnitt beschrieben.

Zur numerischen Lösung wird sowohl eine Diskretisierung der Zeit als auch des Ortes durchgeführt.

Zeitdiskretisierung

Der Zeitpunkt t_n kann als $t_n = t_0 + n \cdot \Delta t$ geschrieben werden. Δt bezeichnet die Zeitschrittweite. So kann die zeitliche Ableitung als

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \approx \frac{\vec{u}_{n+1} - \vec{u}_n}{\Delta t} \quad (2.33)$$

geschrieben werden. Dabei bezeichnet \vec{u}_{n+1} die Geschwindigkeit zur Zeit t_{n+1} und \vec{u}_n die Geschwindigkeit zur Zeit t_n . Die numerische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen erfolgt in zwei Schritten:

Zu Beginn wird unter Vernachlässigung des Druckgradienten $\frac{1}{\rho} \nabla p$ aus Gleichung (2.31) ein Schätzwgeschwindigkeitsfeld \vec{u}^* für die Zeit t_{n+1} berechnet

$$\vec{u}^* = \vec{u}_n + \Delta t \left(\vec{f} - \vec{u}_n \cdot \nabla \vec{u}_n + \nu \Delta \vec{u}_n \right). \quad (2.34)$$

Dieses Feld \vec{u}^* erfüllt allerdings noch nicht die in Gleichung (2.32) geforderte Divergenzfreiheit. Dieses die Divergenzfreiheit erfüllende Feld \vec{u}_{n+1} lässt sich aber durch Lösen des Gleichungssystems

$$\frac{\vec{u}_{n+1} - \vec{u}^*}{\Delta t} = \frac{1}{\rho} \nabla p_{n+1} = 0 \quad (2.35)$$

und

$$\nabla \vec{u}_{n+1} = 0 \quad (2.36)$$

ermitteln. Hierzu bildet man in Gleichung (2.35) die Divergenz und nutzt anschließend Gleichung (2.36)

$$\frac{1}{\Delta t} \underbrace{\nabla \vec{u}_{n+1}}_{=0} - \nabla \frac{\vec{u}^*}{\Delta t} + \Delta p_{n+1} = 0. \quad (2.37)$$

Ortsdiskretisierung

Im nächsten Schritt müssen in den Gleichungen (2.34) und (2.37) die Ortsableitungen diskretisiert werden. Hierzu werden im Folgenden die in [19] eingeführten Bezeichnungen der Gitterpositionen verwendet. Es sollte beachtet werden, dass NaSt3DGP das Geschwindigkeitsfeld und das Druckfeld auf zwei gegeneinander um eine halbe Maschenweite verschobenen Gittern¹⁴ berechnet. Dieses Vorgehen erhöht die Stabilität der numerischen Lösung [19]. Ein Beispiel der Bezeichnungsweise ist in Abbildung 2.4 für ein zweidimensionales

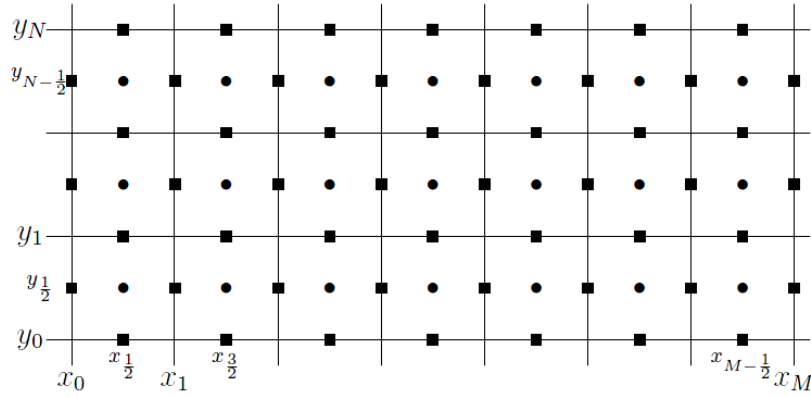


Abbildung 2.4: Bezeichnung der Gitterpositionen in NaSt3DGP [19]

Gitter dargestellt. Für die dritte Komponente des Gitters gilt eine analoge Bezeichnungsweise. Weiter sollen die Positionen, an denen das Windgeschwindigkeitsfeld $\vec{u} = (u, v, w)$ und der Druck p sowie ihre Ableitungen ausgewertet werden, durch folgende Konvention bezeichnet werden

- $u_{i,j,k}$ an Position $(x_i, y_{j+1/2}, z_{k+1/2})$
- $v_{i,j,k}$ an Position $(x_{i+1/2}, y_j, z_{k+1/2})$
- $w_{i,j,k}$ an Position $(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}, z_k)$
- $p_{i,j,k}$ an Position $(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}, z_{k+1/2})$.

Folgende Bezeichnungsweise soll für die Differenzenbildung zur Diskretisierung der Ortsableitungen¹⁵ gelten

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1} \text{ und } \Delta x_{i+1/2} = \frac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}{2}. \quad (2.38)$$

¹⁴engl. staggered grid

¹⁵analoges soll für die Ortsableitungen nach y und z gelten

Die zweiten Ableitungen nach dem Ort können dann durch

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right]_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}} \left[\frac{u_{i+1,j,k} - u_{i,j,k}}{\Delta x_i} - \frac{u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k}}{\Delta x_{i-1}} \right] \quad (2.39)$$

und

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right]_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta y_i} \left[\frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{\Delta y_{i+1/2}} - \frac{u_{i,j,k} - u_{i,j-1,k}}{\Delta y_{i-1/2}} \right] \quad (2.40)$$

approximiert werden. Für die zweiten Ortsableitungen der anderen Komponenten gelten die analogen Zusammenhänge.

Die Ortsableitungen der Poissongleichung (2.37) können durch

$$\left[\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right]_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta y_i} \left[\frac{p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}}{\Delta x_{i+1/2}} - \frac{p_{i,j,k} - p_{i-1,j,k}}{\Delta x_{i-1/2}} \right] \quad (2.41)$$

diskretisiert werden. Zu beachten ist, dass in dieser Gleichung die Ableitung nach x gezeigt wird, die Ableitungen nach y und z erfolgen analog. Durch die Diskretisierung von $[\nabla \vec{u}^* / \Delta t]_{i,j,k}$ ergibt sich aus der Poissongleichung (2.37) ein Gleichungssystem, das in Matrixform $A \cdot \vec{u} = \vec{b}$ geschrieben werden kann. Die Matrix A ist dabei nur schwach besetzt, kann aber bei Nutzung eines feinmaschigen Gitters¹⁶ sehr groß werden. Daher wird die Matrixgleichung nicht exakt gelöst, sondern durch ein numerisches Verfahren approximiert. Die verschiedenen von NaSt3DGP unterstützten Näherungsverfahren werden in [19, 20] beschrieben. Bei den in Kapitel 6 vorgestellten Simulationen wurde das voreingestellte BiCGStab-Verfahren verwendet.

2.3.4 Behandlung der Partikel im Ausbreitungsmodell

Nachdem mit der vorgestellten Software NaSt3DGP das Fluidfeld berechnet wurde, werden in einem nächsten Schritt die Partikelbahnen der Aerosolpartikel berechnet. Diese Aufteilung der Ausbreitungssimulation in zwei Teile ist solange gerechtfertigt, wie die Bewegung der Aerosolpartikel keinen Einfluss auf das Fluid hat [21]. Es gibt also nur eine monodirektionale Kopplung der Partikelbewegung an das Gas, während die Bewegung der Gasmoleküle von den Aerosolpartikeln nicht beeinflusst wird. Bei den im Ausbreitungsmodell untersuchten Konzentrationen der Aerosole ist diese Annahme gerechtfertigt [21].

2.3.4.1 Interpolation der Windgeschwindigkeit am Partikelort

NaSt3DGP löst die Navier-Stokes-Gleichungen wie in Abschnitt 2.3.3 beschrieben auf einem diskreten Gitter und gibt die Windgeschwindigkeiten nur auf diesen Gitterpunkten

¹⁶in Kapitel 6 wird ein Gitter mit $220 \times 220 \times 40 = 1936000$ Zellen verwendet, dies führt zu einer (1936000×1936000) Matrix

aus. Da die Positionen der Aerosolpartikel aber kontinuierlich sind, muss die Windgeschwindigkeit \vec{w} am Ort des Partikels interpoliert werden, falls die Position nicht zufällig auf einem Gitterpunkt liegt. Hierzu wird die trilineare Interpolation verwendet, d. h. die Windgeschwindigkeit am Partikelort wird aus den Windgeschwindigkeiten der acht umliegenden Gitterpunkte berechnet. Dazu werden die umgebenden Gitterpunkte wie in Abbildung 2.5 gezeigt durchnummeriert. Der Windgeschwindigkeitsvektor wird als

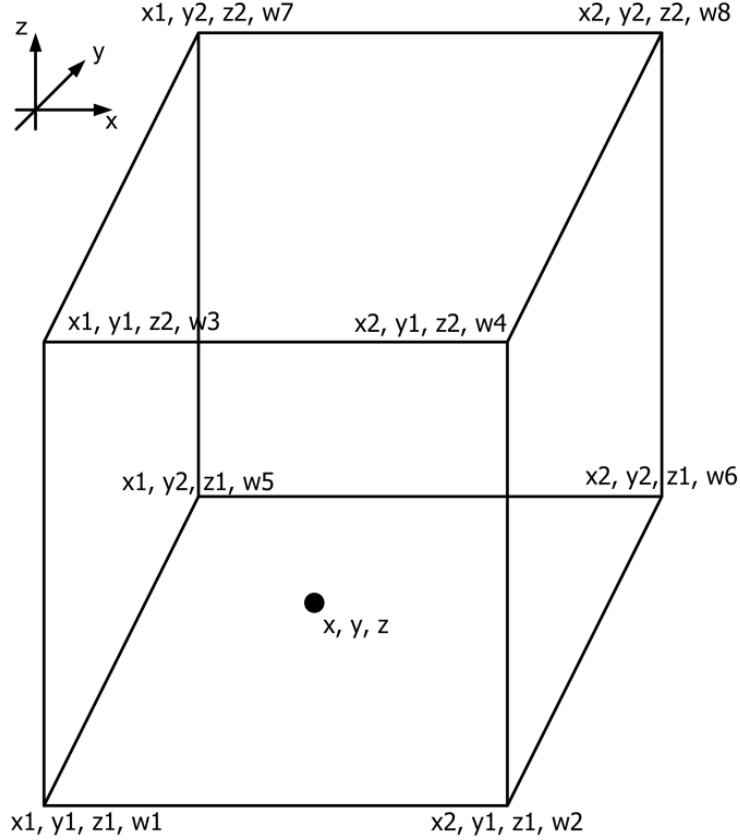


Abbildung 2.5: Bezeichnung der Gitterpunkte zur trilinearen Interpolation

$$\vec{w} = \begin{pmatrix} w_x \\ w_y \\ w_z \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

geschrieben. Weiter sei δ die Gitterweite des Rechengitters von NaSt3DGP. Dann wird die erste Komponente des Windgeschwindigkeitsvektors durch

$$\begin{aligned} w_x = & \frac{1}{\delta^3} [(x_2 - x)(z_2 - z)(y_2 - y)v_{x1} + (x - x_1)(z_2 - z)(y_2 - y)v_{x2} \\ & + (x_2 - x)(z - z_1)(y_2 - y)v_{x3} + (x - x_1)(z - z_1)(y_2 - y)v_{x4} \\ & + (x_2 - x)(z_2 - z)(y - y_1)v_{x5} + (x - x_1)(z_2 - z)(y - y_1)v_{x6} \\ & + (x_2 - x)(z - z_1)(y - y_1)v_{x7} + (x - x_1)(z - z_1)(y - y_1)v_{x8}] \end{aligned} \quad (2.43)$$

berechnet. Die beiden weiteren Komponenten w_y und w_z werden entsprechend interpoliert, indem in Gleichung (2.43) v_{xi} durch v_{yi} bzw. v_{zi} ersetzt wird. Diese Windgeschwindigkeiten werden dann in Gleichung (2.55) und (2.56) zur Partikelbahnberechnung eingesetzt.

2.3.4.2 Langevin-Gleichung

Um die Bahnen der Aerosolpartikel zu berechnen, wird die Langevin-Gleichung verwendet. Diese beschreibt die Bewegung der Partikel unter dem Einfluss von äußeren Kräften, die zum Teil auch stochastischer Natur sein können [22].

Die Langevin-Gleichung in ihrer allgemeinen Form ist nach [23],[21] und [24] durch

$$m_p \cdot \dot{\vec{v}}_p = f (\vec{v}_p - \vec{w}) + \sum \vec{F}_{ext} + \sum \vec{F}_{i,j} + \vec{F}_B \quad (2.44)$$

gegeben. Hierbei bezeichnet m_p die Masse des Aerosolpartikels, \vec{v}_p die Geschwindigkeit des Partikels, \vec{w} die Windgeschwindigkeit am Ort des Partikels, \vec{F}_{ext} externe auf das Partikel wirkende Kräfte, $\vec{F}_{i,j}$ zwischen den Partikeln i und j wirkende Interpartikelkräfte und \vec{F}_B die zufällige durch die Brownsche Molekularbewegung verursachte Kraft, die als $\vec{F}_B = m_p \cdot \vec{a}_{St}$ ausgedrückt werden kann [23]. Der Faktor f beschreibt die Reibung der Aerosolpartikel in der Luft und ist durch

$$f = \frac{3\pi\nu d_p}{C_C} \quad (2.45)$$

gegeben. ν beschreibt die Viskosität der Luft, d_p den Durchmesser des Partikels und C_C den Cunningham-Korrekturfaktor (siehe Abschnitt 3.2). Als äußere Kräfte werden in der Ausbreitungssimulation STAR3D bisher die Gravitationskraft

$$\vec{F}_G = m_p \cdot \vec{g} \quad (2.46)$$

und die Saffman-Lift-Force berücksichtigt. Die Saffman-Lift-Force beschreibt den Effekt, dass es durch die Eigenrotation von Partikeln, die durch Geschwindigkeitsgradienten innerhalb des Windfeldes hervorgerufen wird, zu Druckunterschieden auf der Oberfläche des Partikels kommt [25]. Auf der Seite des Partikels mit einer höheren Windgeschwindigkeit ist der Druck geringer als auf der Seite mit der geringeren Windgeschwindigkeit. Dies führt zu einer Kraft auf den Partikel, die durch [26, 27]

$$\vec{F}_{SLF} = 1,61 \cdot d_p^2 \nu \sqrt{\frac{\nu \rho_p}{|\vec{\omega}_c|}} (\vec{w} - \vec{v}_p \times \vec{\omega}_c) \quad (2.47)$$

mit

$$\vec{\omega}_c = \nabla \times \vec{w} \quad (2.48)$$

beschrieben wird. Zwischen den Partikeln wirkende Kräfte $\vec{F}_{i,j}$ werden bisher nicht einbezogen. Hier könnten aber falls notwendig Coloumb- oder van-der-Waals-Kräfte zwischen den Partikeln Berücksichtigung finden. Unter der Annahme, dass $\vec{F}_{i,j}$ und \vec{F}_{ext} während

eines Zeitintervalls Δt konstant sind, kann Gleichung (2.44) über dieses Intervall integriert werden, so dass nach [23] und [28] gilt:

$$\begin{aligned} \vec{v}(t + \Delta t) &= \vec{v}(t) \cdot e^{-\beta\Delta t} - \left(\frac{\sum \vec{F}_{ext} + \sum \vec{F}_{i,j}}{\beta m} + \vec{w} \right) (1 - e^{-\beta t}) \\ &= e^{-\beta\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} e^{\beta\tau} \vec{A}(\tau) d\tau \equiv \vec{V} \end{aligned} \quad (2.49)$$

und

$$\begin{aligned} \vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \frac{\vec{v}}{\beta} (1 - e^{-\beta\Delta t}) \\ &- \left(\frac{\sum \vec{F}_{ext} + \sum \vec{F}_{i,j}}{\beta m} + \vec{w} \right) \left(\Delta t - \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta\Delta t}) \right) \\ &= \int_t^{t+\Delta t} e^{-\beta t} \left(\int_0^\tau e^{\beta\xi} \vec{A}(\xi) d\xi \right) d\tau = \frac{1}{\beta} \int_t^{t+\Delta t} (1 - e^{\beta(t+\Delta t-\tau)}) \vec{A}(\tau) d\tau \equiv \vec{R}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Hierbei ist β durch

$$\beta = \frac{f}{m_p} = \frac{18\nu}{\rho_p d_p^2 C_C} [\beta] = \frac{1}{s} \quad (2.51)$$

gegeben. Die rechte Seite von Gleichung (2.50) kann durch partielle Integration des mittleren Integrals in Gleichung (2.50) erhalten werden [23]. Dann bezeichnen \vec{V} und \vec{R} die stochastischen Anteile an der Partikelgeschwindigkeit bzw. an der Partikelposition [23]. Nach [22] folgen \vec{V} und \vec{R} bivarianten Gaußverteilungen, sie können also als

$$\vec{V} = \sqrt{G} \cdot \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

und

$$\vec{R} = \sqrt{I - \frac{H^2}{G}} \cdot \begin{pmatrix} Y_4 \\ Y_5 \\ Y_6 \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

geschrieben werden. Y_1 bis Y_6 sind unabhängig gaußverteilte Zufallszahlen mit einem Mittelwert von 0 und einer Varianz von 1. Die Faktoren G , H und I beschreiben hierbei den mittleren quadrierten Wert von \vec{V} bzw. \vec{R} und das mittlere Skalarprodukt von \vec{V} und \vec{R} [23, 28].

$$\begin{pmatrix} G \\ H \\ I \end{pmatrix} = \frac{k_B T}{m_p} \cdot \begin{pmatrix} 1 - e^{-2\beta\Delta t} \\ \beta^{-1} (1 - e^{-\beta\Delta t})^2 \\ \beta^{-2} (2\beta\Delta t - 3 - 4e^{-\beta\Delta t} - e^{-2\beta\Delta t}) \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

Damit können die neuen Positionen und Geschwindigkeiten der Aerosolpartikel iterativ aus dem jeweiligen vorherigen Wert berechnet werden:

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t)e^{-\beta\Delta t} + \left(\frac{\sum \vec{F}_{ext} + \sum \vec{F}_{i,j}}{\beta m} + \vec{w} \right) (1 - e^{-\beta t}) + \vec{V} \quad (2.55)$$

und

$$\begin{aligned} \vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) &+ \frac{\vec{v}(t)}{\beta} (1 - e^{-\beta\Delta t}) \\ &+ \left(\frac{\sum \vec{F}_{ext} + \sum \vec{F}_{i,j}}{\beta m} + \vec{w} \right) \left(\Delta t - \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta\Delta t}) \right) + \vec{R} \end{aligned} \quad (2.56)$$

2.3.4.3 Berücksichtigung von Hindernissen im Simulationsvolumen

Während der Partikelbahnberechnung kann es geschehen, dass Aerosolpartikel in für sie „verbotene Bereiche“ eindringen können. Unter „verbotenen Bereichen“ werden hier Hindernisse (Gebäude, Abluftkamine, Bäume, etc.) innerhalb des Simulationsvolumens verstanden, die für die Aerosolpartikel undurchdringlich sind. Diese sollen im Folgenden verallgemeinert als Objekte bezeichnet werden.

Um das Eindringen von Partikeln in Objekte zu erkennen, wird nach jeder Verschiebung der Partikel ihre neue Position überprüft. Dazu wird um jedes Objekt innerhalb des Simulationsvolumens eine dieses einhüllende Kugel gelegt. Im Folgenden wird kontrolliert, ob das Partikel innerhalb der Kugel liegt. Ist dies der Fall, so ist eine detailliertere Prüfung notwendig. Hierzu wird für alle das Objekt beschreibenden Oberflächen (z. B. für ein Gebäude die vier Wände und zwei Dachflächen) der normierte Normalenvektor $\vec{n}_{i,0}$ gebildet und die Bedingung

$$\vec{r} \cdot \vec{n}_{i,0} > d_i \quad (2.57)$$

geprüft. Hierbei bezeichnet \vec{r} den Ortsvektor des Partikels, $\vec{n}_{i,0}$ den Normalenvektor und d den Abstand vom Nullpunkt der i -ten Oberfläche. Wenn die Bedingung (2.57) für alle Oberflächen erfüllt ist, so befindet sich das Partikel innerhalb des Objektes. Dann wird der Schnittpunkt der Partikelbahn mit der dem Partikel am nächsten liegenden Oberfläche berechnet und das Partikel auf diesen Punkt „verschoben“. Abschließend wird das Partikel als an der Oberfläche anhaftend markiert.

Zu Beginn jeden Zeitschritts in der Simulation wird für jedes Partikel überprüft, ob es als anhaftend markiert ist. Falls dies der Fall ist, so wird es mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit wieder freigesetzt. Die Wahrscheinlichkeiten für die Freisetzung wurden für verschiedene Oberflächenmaterialien zuvor experimentell ermittelt [6].

Es sollte an dieser Stelle noch erwähnt werden, dass bei der Berechnung des Windfeldes durch NaSt3DGP alle innerhalb des Simulationsvolumens befindlichen Objekte wegen der Gitterstruktur aus Würfeln aufgebaut sein müssen. Diese Einschränkung ist bei der sich anschließenden Berechnung der Partikelbahnen nicht mehr notwendig, da durch das in diesem Abschnitt beschriebene Verfahren auch Oberflächen, die nicht entlang der Gitternetzlinien laufen, berücksichtigt werden können.

2.3.5 Simulation des Ausbreitungsgeschehens

In diesem Abschnitt wird anhand von Abbildung 2.6 beschrieben, wie die Erstellung einer Ausbreitungssimulation abläuft. Im ersten Schritt wird das Simulationsvolumen definiert.

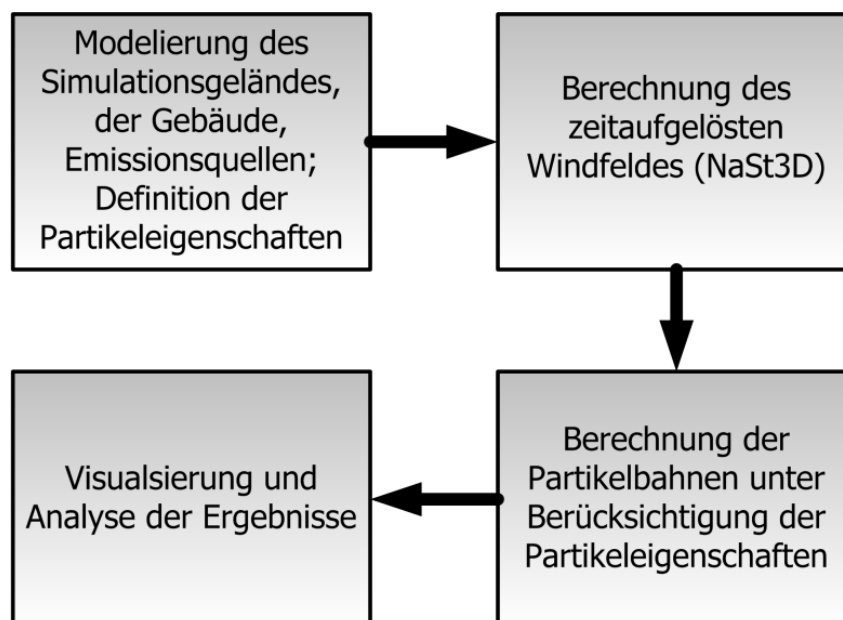


Abbildung 2.6: Flussdiagramm des Ablaufs einer Ausbreitungssimulation mit STAR3D

Hierzu werden die Maße des Simulationsgebietes sowie die Weite des Gitters, auf dem NaSt3DGP später das Windfeld berechnet, festgelegt. Des Weiteren werden die Gebäude mit eventuell vorhandenen Emissionsquellen (Abluftkaminen) sowie Bäume im Gelände platziert. Die Eigenschaften des Aerosols (Dichte, Form) sowie der Oberflächen der Objekte im Simulationsgebiet werden angegeben. Die Einströmbedingungen des Windfeldes und die Quellstärken der Abluftkamine werden definiert. Ebenso werden die zu simulierende Gesamtzeit und die Zeitschrittweite Δt festgesetzt.

Im nächsten Schritt wird dann durch NaSt3DGP das Windfeld berechnet. Dieser Teilschritt ist der zeitaufwändigste und kann je nach zu simulierender Zeitspanne und Komplexität des Geschehens auf einem Arbeitsplatz-PC zwischen einigen Stunden und einigen Wochen dauern.

Im Anschluss daran werden die Trajektorien der aus den Emissionsquellen freigesetzten Aerosolpartikel berechnet. Hierbei finden die zuvor definierten physikalischen Eigenschaften Berücksichtigung. Dieser Teil der Rechnungen benötigt nur einen Bruchteil der zur Berechnung des Windfeldes notwendigen Zeit. Die Berechnung ist in den meisten Fällen innerhalb von einigen Stunden abgeschlossen.

Im letzten Schritt können dann die Ergebnisse einer Auswertung zugeführt werden. Es ist möglich, Windfeld- und Aerosolpartikelverteilung in Diagrammen darzustellen, die auf dem Boden des Simulationsgebietes deponierte Partikelanzahl zu ermitteln, Zeitreihen der in Teilvolumen des Simulationsvolumens befindlichen Partikelanzahl zu erstellen und

die Bewegung der Aerosolpartikel in Animationsequenzen darzustellen. Diese Funktionen ermöglichen es, die von der Ausbreitungssimulation vorhergesagten Ergebnisse mit den durch Freiluftmessungen gewonnenen Resultaten zu vergleichen. Die Ergebnisse zweier solcher Validierungsmessungen werden in Kapitel 6 vorgestellt.

2.3.6 Implementierung von STAR3D

Die Software STAR3D wurde in C++ unter dem Betriebssystem Windows XP programmiert. Sie basiert auf einem objektorientierten Aufbau, so dass einzelne Programmpakete falls notwendig einfach bearbeitet oder ausgetauscht werden konnten. Mehrere graphische Bedienoberflächen erlaubten die Steuerung der Simulation und die Einstellung der Simulationsparameter. Mit Hilfe einer dieser Oberflächen ist es möglich, die zu NaSt3DGP gehörenden Programme *navsetup* und *navcalc* zu steuern. Diese liegen als ausführbare Dateien vor und werden von STAR3D mit den Parametersätzen zur Berechnung des Windfeldes gestartet.

In Abbildung 2.7 ist der strukturelle Aufbau der Software gezeigt. In gelber Farbe sind die Bedienoberflächen dargestellt, in grün die Steuer- und Berechnungsklassen und in rot die externen Programme. Mit STAR3D ist es zusätzlich möglich, die Simulationsprogramme AUSTAL2000 [29] und BAGEG [30] zu steuern.

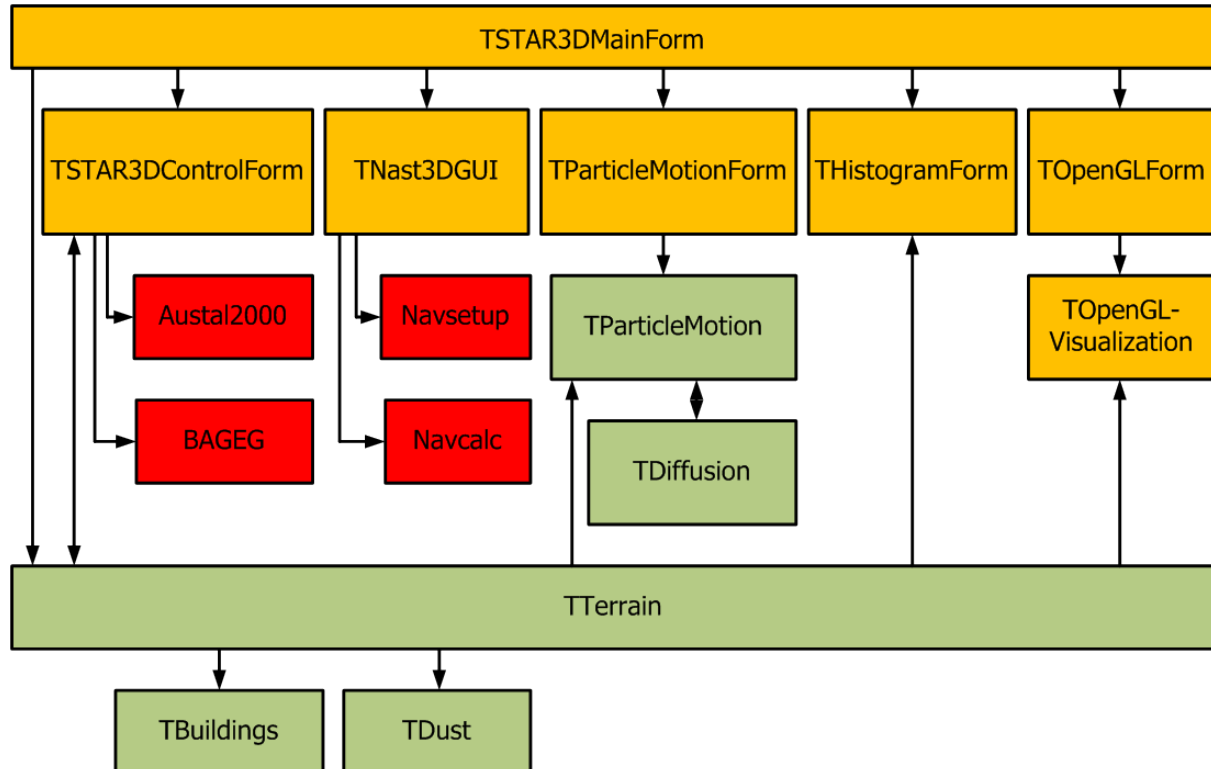


Abbildung 2.7: Struktur der Software STAR3D

Kapitel 3

Theorie der Sedimentation, Deposition und Koagulation von Aerosolpartikeln

3.1 Einleitung

Die Transmission der Aerosolpartikel wird von verschiedenen Effekten beeinflusst. Während der Bewegung sedimentieren die Partikel durch die Gravitationskraft, beim Berühren von Oberflächen kommt es zur Deposition der Partikel und wenn sich die Aerosolpartikel untereinander berühren, kann es zur Koagulation, d.h. zum Zusammenhaften der Partikel, kommen.

Im ersten Abschnitt wird der die Sedimentationsgeschwindigkeit beschreibende Zusammenhang hergeleitet, bevor darauf folgend auf die Deposition der Partikel eingegangen wird. Die Deposition spielt bei den in Kapitel 5 beschriebenen Untersuchungen zur Koagulation in einer geschlossenen Kammer eine nicht vernachlässigbare Rolle.

Daran anschließend wird die theoretische Beschreibung der Koagulation von Aerosolpartikeln vorgestellt. Es werden die Mechanismen, die zur Koagulation der Partikel führen, hergeleitet und der Einfluss von elektromagnetischen Kräften berücksichtigt.

Abschließend werden erste Evaluierungen der in Kapitel 2 beschriebenen Ausbreitungssimulation STAR3D diskutiert.

3.2 Sedimentation von Aerosolen

Nach dem Stokesschen Gesetz ist die Reibungskraft, die auf eine Kugel mit dem Durchmesser d und der Geschwindigkeit \vec{v} wirkt, bei geringen Geschwindigkeiten durch

$$\vec{F}_D = 3\pi\nu\vec{v}d \quad (3.1)$$

gegeben (ν sei die Viskosität des Gases). Damit lässt sich die Geschwindigkeit, mit der die Aerosolpartikel im Gleichgewichtszustand sedimentieren, aus der betragsmäßigen Gleichsetzung der Kraft $F = m \cdot a = m \cdot \dot{v}$ mit der Summe aus der Stokesschen Reibungskraft und der um die Auftriebskraft verringerten durch die Gravitation auf das Partikel wirkenden Kraft ermitteln (ρ_p sei die Partikeldichte, m_p die Masse des Partikel, ρ_g die Dichte des Gases):

$$F = F_G + F_D \quad (3.2)$$

oder

$$m_p \cdot \dot{v} = \frac{(\rho_p - \rho_g)\pi d^3 g}{6} - 3\pi\nu v d. \quad (3.3)$$

Durch Lösen der Differentialgleichung (3.3) erhält man nach [31] die Sedimentationsgeschwindigkeit v_{TS} ¹ im Gleichgewichtszustand:

$$v_{TS} = \frac{\rho_p d^2 g}{18\nu} \quad (3.4)$$

In Gleichung (3.4) wurde die Näherung $\rho_p - \rho_g \approx \rho_p$ genutzt, die für typische Dichten von Aerosolpartiken in der Größenordnung von 1000 kg/m^3 gerechtfertigt erscheint. Eine Grundannahme des Stokesschen Gesetzes besagt, dass die Relativgeschwindigkeit des Gases zu der Kugel, die es umströmt, verschwindet. Diese Voraussetzung ist für kleine Aerosolpartikel (ungefähr $< 1 \mu\text{m}$) nicht mehr erfüllt. Hier „rutschen“ die Aerosolpartikel durch das Gas [12]. Dieses Verhalten kann in Gleichung (3.1) durch die Einführung eines Korrekturfaktors, der sogenannten Cunningham-Slip-Korrektur C_C , berücksichtigt werden

$$F_D = \frac{3\pi\nu v d}{C_C}. \quad (3.5)$$

Damit ergibt sich für die Sedimentationsgeschwindigkeit

$$v_{TS} = \frac{\rho_p d^2 g C_C}{18\nu}. \quad (3.6)$$

Die Cunningham-Slip-Korrektur kann aus empirischen Untersuchungen durch folgende Formel parametrisiert werden (λ bezeichnet die mittlere freie Weglänge der Gasmoleküle) [12, 32]:

$$C_C = 1 + \frac{\lambda}{d} \left[2,34 + 1,05 \cdot \exp\left(-0,39 \cdot \frac{d}{\lambda}\right) \right]. \quad (3.7)$$

Die vorgenannten Gleichungen für die Reibungskraft und die Sedimentationsgeschwindigkeit gelten nur für sphärische Aerosolpartikel. Da Aerosolpartikel im Allgemeinen nicht kugelförmig sind, muss der Einfluss der Nichtsphärizität auf das Sedimentationsverhalten

¹für engl. terminal settling velocity

Berücksichtigung finden. Dies geschieht üblicherweise, indem der dynamischen Formfaktor χ eingeführt wird. Dieser ist als das Verhältnis der Stokesreibung des nichtsphärischen Partikels zu der Reibung eines volumenäquivalenten Partikels definiert:

$$\chi = \frac{F_D}{3\pi\nu v d_e}. \quad (3.8)$$

Mit dieser Definition kann die Sedimentationsgeschwindigkeit eines nichtsphärischen Partikels als

$$v_{TS} = \frac{\rho_p d^2 g C_C}{18\nu\chi} \quad (3.9)$$

beschrieben werden. Der dynamische Formfaktor muss im Allgemeinen experimentell aus Sedimentationsversuchen ermittelt werden [33, 34, 35]. Eine analytische Formel zur Berechnung des Formfaktors aus den grundlegenden Partikeleigenschaften (Umfang, Durchmesser etc.) ist bisher nur für Spezialfälle wie z.B. ellipsenförmige Partikel verfügbar [36].

3.3 Deposition von Aerosolen

Die Partikelanzahlkonzentration² eines Aerosols ist nicht konstant, sondern ändert sich mit der Zeit. Befindet sich das Aerosol in einer geschlossenen Kammer, so gibt es vier Mechanismen, die zu einer Veränderung der Größenverteilung führen:

- Koagulation, diese wird in Abschnitt 3.4 behandelt,
- Resuspension, d. h. die Wiederaufwirbelung, der Aerosolpartikel, diese wurde in einem separaten Projekt untersucht [6],
- Sedimentation der Aerosolpartikel,
- Diffusion der Partikel zu den Wänden und Ablagerung der Partikel auf den Wänden der Kammer.

In diesem Abschnitt wird der dritte und der vierte Mechanismus diskutiert, die zusammenfassend als Deposition der Aerosolpartikel bezeichnet werden. In vielen hauptsächlich älteren Veröffentlichungen wird der Depositionskoeffizient β , der die pro Zeiteinheit auf den Wänden und am Boden abgelagerte Partikelanzahl angibt, durch den einfachen Zusammenhang

$$\beta = \frac{v_{TS}}{h} + \frac{S \cdot D}{V \cdot \sigma} \quad (3.10)$$

beschrieben. In Gleichung (3.10) bezeichnet v_{TS} die Sedimentationsgeschwindigkeit der Partikel, h die Höhe, S die Oberfläche und V das Volumen der Kammer. D bezeichnet

²unter der Partikelanzahlkonzentration versteht man die Anzahl der Partikel je Volumeneinheit, [$1/m^3$]

den Brownschen Diffusionskoeffizienten und σ die Dicke der Diffusionsgrenzschicht³ an den Wänden der Kammer [37]. In neueren Veröffentlichungen wie z.B. [38, 39] wird allerdings nachgewiesen, dass es sich bei Gleichung (3.10) nur um eine Näherungslösung handelt. Diese ist für den Spezialfall, dass die „stopping distance“⁴ der Partikel größer als die Dicke der Diffusionsgrenzschicht ist, gültig. Stattdessen muss für eine rechteckige Kammer der Zusammenhang

$$\beta = \frac{y \sin\left(\frac{\pi}{y}\right) \cdot (k_e D^{y-1})^{1/y} \cdot A_s}{\pi A_t H} + \frac{v_{TS}}{H} \coth\left(\frac{\pi \cdot v_{TS}}{2y \sin(\pi/y) (k_e D^{y-1})^{1/y}}\right) \quad (3.11)$$

verwendet werden [39]. Diese Gleichung lässt sich aus der Berechnung der Konzentrationsverteilung der Partikel innerhalb der Grenzschicht zu den Wänden der Kammer ableiten. Dabei geht man davon aus, dass die Konzentrationsverteilung c im Kern der Kammer homogen und konstant ist $c = c_0$ und innerhalb der Grenzschicht zu den Wänden hin auf $c = 0$ abfällt. Dann wird die Konzentrationsverteilung durch folgende Differentialgleichung beschrieben [38]:

$$\nabla [(D + D_t)\nabla c] - v_{TS}\vec{k}\nabla c = 0 \quad (3.12)$$

In Gleichung (3.12) bezeichnet \vec{k} den Normalenvektor in vertikaler Richtung und D_t den turbulenten Diffusionskoeffizienten. In [38] wird Gleichung (3.12) gelöst und für den Depositionskoeffizienten ergibt sich die in (3.11) dargestellte Lösung. In Gleichung (3.11) wurde für den turbulenten Diffusionskoeffizienten die Beziehung $D_t = k_e \cdot x^y$ verwendet. Dabei bezeichnet k_e das turbulente Diffusionsvermögen, x den Abstand von der Wand und y einen konstanten Faktor, der zwischen 2 und 3 liegt und in der Literatur häufig gleich dem Wert 2 gesetzt wird [40, 41, 42]. Des Weiteren bezeichnen A_s die Fläche der Seitenwände der Kammer, A_t die Fläche der horizontalen Wände der Kammer, H die Höhe der Kammer und D den Brownschen Diffusionskoeffizienten

$$D = \frac{k_B \cdot T \cdot C_C}{6\pi\nu r}. \quad (3.13)$$

k_B sei die Boltzmannkonstante, T die absolute Temperatur und r der Radius des Aerosolpartikels. Die Sedimentationsgeschwindigkeit v_{TS} kann gemäß Gleichung (3.9) berechnet werden. In Abbildung 3.1 ist der Verlauf des Depositionskoeffizienten bei sich änderndem Partikelradius für drei verschiedene Werte von k_e gezeigt. Weiter ist der Verlauf des Depositionskoeffizienten nach Gleichung (3.10) eingezeichnet. Die Parameter S und V wurden aus den Abmaßen der in Kapitel 4 vorgestellten Versuchskammer abgeleitet, die Dicke der Diffusionsgrenzschicht wurde nach [43] zu $\sigma = 100 \mu m$ abgeschätzt.

³die Diffusionsgrenzschicht bezeichnet die Schicht vor den Wänden der Kammer, innerhalb derer die Partikelanzahlkonzentration von der Konzentration im homogen durchmischten Kammerinneren auf nahezu null in unmittelbarer Nähe der Wand sinkt

⁴unter der „stopping distance“ versteht man die Strecke, die ein Aerosolpartikel mit der Anfangsgeschwindigkeit v_0 in ruhender Luft benötigt, um vollständig abgebremst zu werden, wenn nur die Reibungskraft wirkt

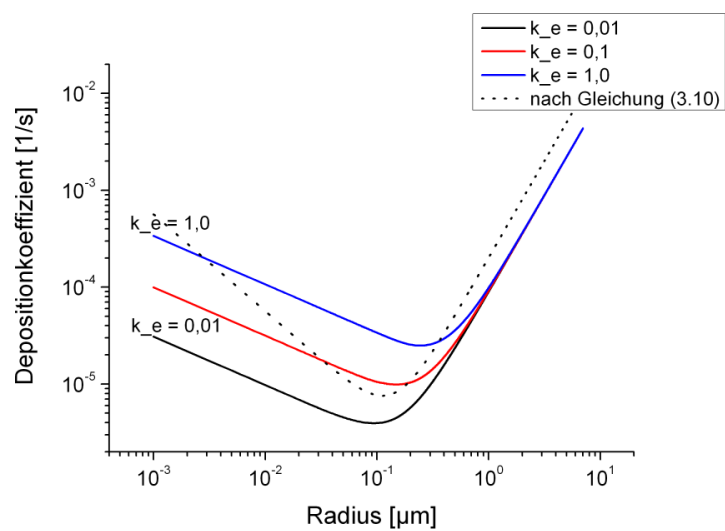


Abbildung 3.1: Verlauf des Depositionskoeffizienten nach Gleichung (3.11) für verschiedene Werte von k_e , zusätzlich ist auch noch der Verlauf des Depositionskoeffizienten nach Gleich (3.10) eingezeichnet.

3.4 Koagulation von Aerosolen

Wenn Aerosolpartikel sich bewegen, führt dies zwangsläufig zu Zusammenstößen zwischen den Partikeln. Die Bewegung der Aerosolpartikel kann im Wesentlichen drei Gründe haben [44]:

- Die thermische Bewegung der Aerosolpartikel durch Stöße mit den Gasmolekülen des umgebenden Fluids (Diffusion, s. Abschnitt 3.4.3)
- Die Sedimentationsbewegung der Aerosolpartikel durch die Gravitationskraft
- Die turbulente Bewegung der Aerosolpartikel durch Turbulenzen innerhalb des Fluids

Wenn die Aerosolpartikel zusammenstoßen, kann es zum Zusammenhaften der Partikel kommen und es entsteht ein neues Aerosolpartikel. Dieser Vorgang wird als Koagulation oder Agglomeration bezeichnet, je nachdem, welche Gestalt das Partikel nach der Fusion hat. Die Agglomeration ist hauptsächlich im freien Molekularbereich bedeutsam [7]. Da in dieser Arbeit aber nur Partikel in der Größenordnung von einigen Mikrometern untersucht werden, ist dieser Prozess nur von untergeordneter Bedeutung und im Folgenden wird nur die Theorie der Koagulation vorgestellt.

3.4.1 Definition der Knudsenzahl

Im Bereich der Aerosolphysik ist es üblich, die Größe von Aerosolpartikeln durch die Knudsenzahl Kn zu beschreiben. Von Kn hängt es ab, mit welchem Ansatz in Abschnitt 3.4.3 die Koagulation durch Brownsche Bewegung hergeleitet werden muss. Die Knudsenzahl ist definiert als das Verhältnis λ/r_{part} , bei dem λ die mittlere freie Weglänge der Moleküle des Fluids und r_{part} den Radius des Aerosolpartikels bezeichnet. Man unterscheidet drei Größenbereiche, die durch folgende Klassifizierung gekennzeichnet sind:

- $Kn \ll 1$ Kontinuumsbereich
- $Kn \approx 1$ Übergangsbereich
- $Kn \gg 1$ freier molekularer Bereich

Befindet sich die Größe des Aerosolpartikels im freien molekularen Bereich, so muss der Koagulationskoeffizient aus der kinetischen Gastheorie hergeleitet werden. Im Falle einer Größe im Kontinuumsbereich kann ein Ansatz aus der Diffusionstheorie gewählt werden. Unter Standardbedingungen ($p = 1013 \text{ hPa}$, $T = 293 \text{ K}$) beträgt die mittlere freie Weglänge der Moleküle der Luft $\lambda = 66 \text{ nm}$, d.h. die in dieser Arbeit untersuchten Aerosolpartikel befinden sich bei einem Durchmesser von 2 bis 25 μm im Kontinuumsbereich ($Kn \approx 0,000015 - 0,005$). Daher wird in Abschnitt 3.4.3 das Verfahren zur Bestimmung der Koagulationsrate für Partikel im Kontinuumsbereich angewendet.

3.4.2 Populationsbilanzgleichung

Die Partikelgrößenverteilung eines Aerosolgemisches ändert sich mit der Zeit durch diverse Effekte. Zum einen kommt es zu Stößen zwischen den Partikeln, so dass die Partikel aneinander haften können und es damit zu einer Veränderung der Größenverteilung (Abnahme der Anzahl kleiner Partikel, Zunahme der Anzahl großer Partikel) kommt. Weitere die Größenverteilung beeinflussende Effekte sind die Sedimentation der Partikel und die Diffusion der Partikel und deren Abscheidung an den Oberflächen. Diese beiden Effekte wurden bereits in Kapitel 1 behandelt. Die Anzahl N_{ij} der Stöße von Partikeln mit den Volumina⁵ v_i und v_j pro Zeit- und Volumeneinheit ist durch

$$N_{ij} = K(v_i, v_j) \cdot n_i \cdot n_j \quad (3.14)$$

gegeben. Dabei bezeichnet $K(v_i, v_j)$ ⁶ die Kollisionsrate von Partikeln mit den als Argument angegebenen Volumina und n_i bzw. n_j die jeweilige Partikelanzahlkonzentration. Die soeben eingeführte Kollisionsrate hängt von den beiden Partikelgrößen sowie den Eigenschaften des Fluids wie Temperatur und Viskosität ab. Wenn die Partikelgrößenverteilung durch ein diskretes Größenspektrum beschrieben werden kann, so ist die Zunahme von Partikeln in der Größenklasse k , die durch das Zusammenhaften von Partikeln aus den Klassen i und j erfolgt, durch

$$\frac{1}{2} \sum_{i+j=k} N_{ij} \quad (3.15)$$

gegeben. Hierbei bedeutet der Index $i + j = k$, dass die Summe über alle Kombinationen, die die Bedingung $v_i + v_j = v_k$ erfüllen, laufen soll. Der Faktor $1/2$ berücksichtigt, dass in der Summe sonst alle Kollisionen doppelt gezahlt würden. Die Abnahme der Partikelanzahl in der Klasse k wird durch

$$\sum_{i=1}^{\infty} N_{ik} \quad (3.16)$$

beschrieben. Damit ergibt sich für die Änderung der Partikelanzahlkonzentration in der Größenklasse k die Gleichung

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} N_{ij} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\infty} N_{ik} \quad (3.17)$$

oder durch Einsetzen von (3.14)

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K(v_i, v_j) n_i n_j - n_k \sum_{i=1}^{\infty} K(v_i, v_j) n_i. \quad (3.18)$$

⁵In diesem Kapitel werden, wie in der Literatur üblich, abweichend von der Notation in Kapitel 1 mit v_i und v_j die Volumina und nicht die Geschwindigkeiten der Partikel bezeichnet.

⁶In der Dimension des Koagulationskoeffizienten K [m^3/s] bezieht sich das Volumen m^3 auf das Volumen des Fluids und nicht auf das Volumen des koagulierenden Materials.

Der Übergang zu infinitesimal kleinen Größenklassen liefert dann die integrale Form der Populationsbilanzgleichung [7, 45]:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^v du K(u, v-u) n(u, t) n(v-u, t) - n(v, t) \int_0^\infty du K(u, v) n(u, t). \quad (3.19)$$

Hier bezeichnen v und u die Volumina der Partikel.

3.4.3 Koagulation durch Brownsche Diffusion

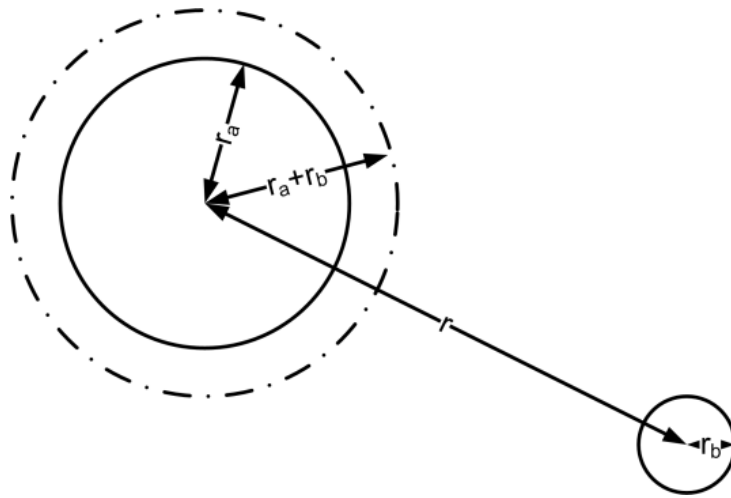


Abbildung 3.2: Skizze zur Herleitung von Gleichung (3.21)

Um die durch die Brownsche Bewegung der Aerosolpartikel verursachte Koagulationsrate $K(u, v)$ zu berechnen, platziert man ein Testpartikel b mit Radius r_b im Zentrum des Systems und untersucht die Rate, mit der die anderen Partikel mit Radius r_a auf diesen Partikel zu diffundieren. Da der Vorgang räumlich isotrop ist, bietet es sich an, in Polarkoordinaten zu rechnen und den Ursprung des Koordinatensystems in den Mittelpunkt von b zu legen (siehe Abbildung 3.2). Die Diffusionsgleichung (A.1) kann dann in Kugelkoordinaten als

$$\frac{\partial}{\partial t} n(r, t) = D_{ab} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} n(r, t) + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} n(r, t) \right) \quad (3.20)$$

geschrieben werden. Die Randbedingungen gestalten sich wie folgt:

- $n(a+b) = 0$ bei $r = r_a + r_b$, da die Partikel sich nicht gegenseitig durchdringen können
- $n = n_\infty$ bei $r = \infty$, d. h. die Partikelverteilung, die sich weit entfernt vom Testpartikel befindet, ist ungestört.

Mit diesen Randbedingungen ist die Lösung von Gleichung (3.20) bekannt und durch

$$n(r, t) = n_\infty \cdot \left[1 - \frac{r_a + r_b}{r} + \frac{r_a + r_b}{r} \cdot \operatorname{erf} \left(\frac{r - r_a - r_b}{\sqrt{\pi D t}} \right) \right] \quad (3.21)$$

gegeben. Hier bezeichnet $\operatorname{erf}(z)$ die Fehlerfunktion⁷:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^z \exp(-y^2) dy \quad (3.22)$$

Befindet sich das Partikel b nicht in Ruhe, sondern in Bewegung, so muss die relative Diffusionskonstante D_{ab} verwendet werden. Diese berechnet sich wie folgt (siehe auch Anhang A):

$$D_{ab} = \frac{\overline{(r_a - r_b)^2}}{6 \cdot t}. \quad (3.23)$$

Mit

$$\overline{(r_a - r_b)^2} = \overline{r_a^2} + \overline{r_b^2} - 2 \cdot \overline{r_a \cdot r_b} \quad (3.24)$$

und $\overline{r_a \cdot r_b} = 0$, weil die Bewegungen der beiden Partikel unkorreliert sind, ergibt sich schließlich mit (A.10)

$$D_{ab} = \frac{\overline{r_a^2} + \overline{r_b^2}}{6 \cdot t} = \frac{kT}{6\pi\nu} \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right). \quad (3.25)$$

Der Nettopartikelfluss⁸ J auf das Testpartikel b , bei dem es zu einem Zusammenhaften der Partikel kommt, wird durch

$$J = 4\pi(r_a + r_b)^2 \cdot D_{ab} \cdot \left. \frac{\partial n}{\partial r} \right|_{r=r_a+r_b} = 4\pi(r_a + r_b) \cdot D_{ab} \cdot n_\infty \left(1 + \frac{r_a + r_b}{\sqrt{\pi D_{ab} t}} \right) \quad (3.26)$$

beschrieben. Für hinreichend große Zeiten $t \gg (r_a + r_b)^2 / (\pi D_{ab})$ wird der Fluss annähernd konstant und kann durch

$$J \approx 4\pi D_{ab} (r_a + r_b) n_\infty \quad (3.27)$$

approximiert werden. Die Koagulationsrate K ist dann gegeben als der Quotient aus Fluss und Konzentration

$$K = \frac{J}{n_\infty} = 4\pi D_{ab} (r_a + r_b) = \frac{2kT}{3\nu} \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right) (r_a + r_b). \quad (3.28)$$

Wenn man die Radien durch die Volumina v und u der Partikel ersetzt, so ergibt sich die in der Literatur häufig verwendete Form:

$$K = \frac{2kT}{3\nu} \left(\frac{1}{u^{1/3}} + \frac{1}{v^{1/3}} \right) (v^{1/3} + u^{1/3}). \quad (3.29)$$

⁷engl. error function

⁸Der Partikelfluss J hat die Dimension $[J] = 1/(m^2 \cdot s)$.

Der Vollständigkeit halber sei auch noch die Koagulationsrate angegeben, die sich im freien Molekularbereich ($Kn \gg 1$) durch Betrachtungen aus der kinetischen Gastheorie ergibt [7]:

$$K = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6kT}{\rho_p}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{u} + \frac{1}{v}\right)^{1/2} (v^{1/3} + u^{1/3})^2. \quad (3.30)$$

In Abbildung 3.3 ist der Verlauf des Koagulationskoeffizienten nach Gleichung (3.29) und

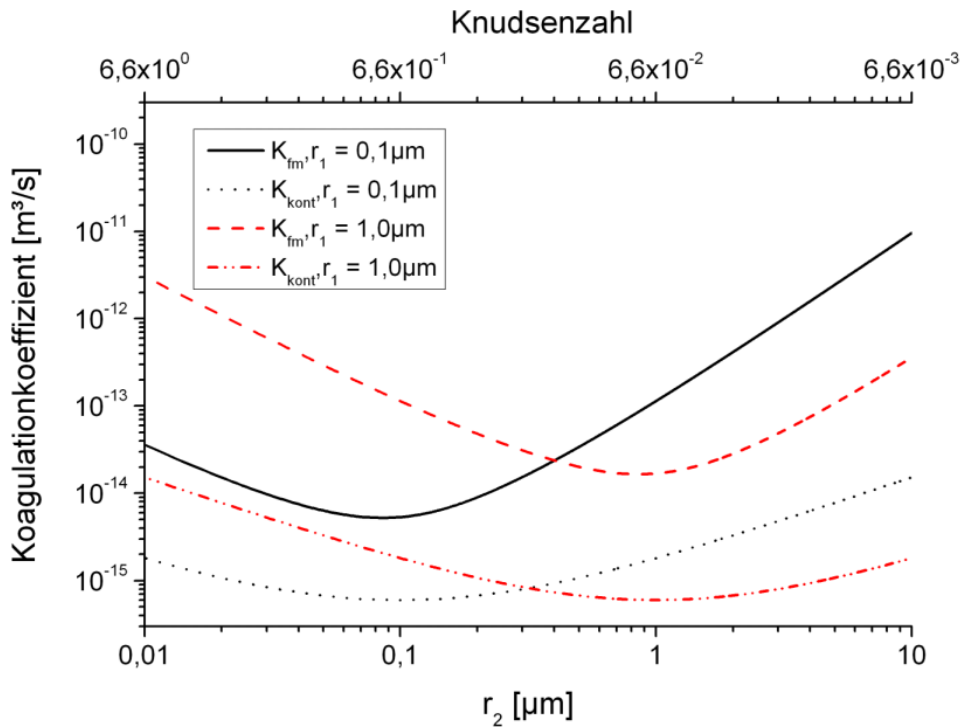


Abbildung 3.3: Verlauf des Koagulationskoeffizienten nach Gleichung (3.29) und Gleichung (3.30). Gezeigt ist jeweils die Rate für die Koagulation mit Partikeln mit einem Radius von $0,1 \mu\text{m}$ und $1 \mu\text{m}$.

Gleichung (3.30) gezeigt. In schwarz sind die Verläufe für die Koagulation mit einem Partikel des Radius $0,1 \mu\text{m}$ gezeigt, in rot die Verläufe für einen Stoßpartner mit dem Radius $1 \mu\text{m}$. Es ist erkennbar, dass die Koeffizienten, berechnet nach Gleichung (3.29), deutlich kleiner sind, daher würde mit dieser Gleichung der Koagulationskoeffizient im freien Molekularbereich unterschätzt, während mit Gleichung (3.30) der Koagulationskoeffizient im Kontinuumsbereich überschätzt würde.

Die Koagulationsrate im Übergangsbereich kann durch verschiedene Verfahren aus der Interpolation der Koagulationsrate im freien Molekularbereich und im Kontinuumsbereich ermittelt werden. Für eine Beschreibung der verschiedenen Verfahren sei auf [46, 47] verwiesen.

In Abbildung 3.4 ist der Verlauf der durch Brownsche Bewegung verursachten Koagulationsrate im Kontinuumsbereich dargestellt. Für verschiedene Partikelradien r_1 und r_2 ist die Koagulationsrate K für eine Temperatur von 293 K und eine Viskosität von $18\ \mu\text{Pa}$ aufgetragen. Man erkennt, dass die Koagulationsrate stark ansteigt, wenn einer der beiden Partikel groß ist und der Koagulationspartner klein ist. Für etwa gleich große Partikel erreicht die Koagulationsrate ein Minimum, das heißt, es kommt bevorzugt zu einer Koagulation zwischen großen und kleinen Partikeln.

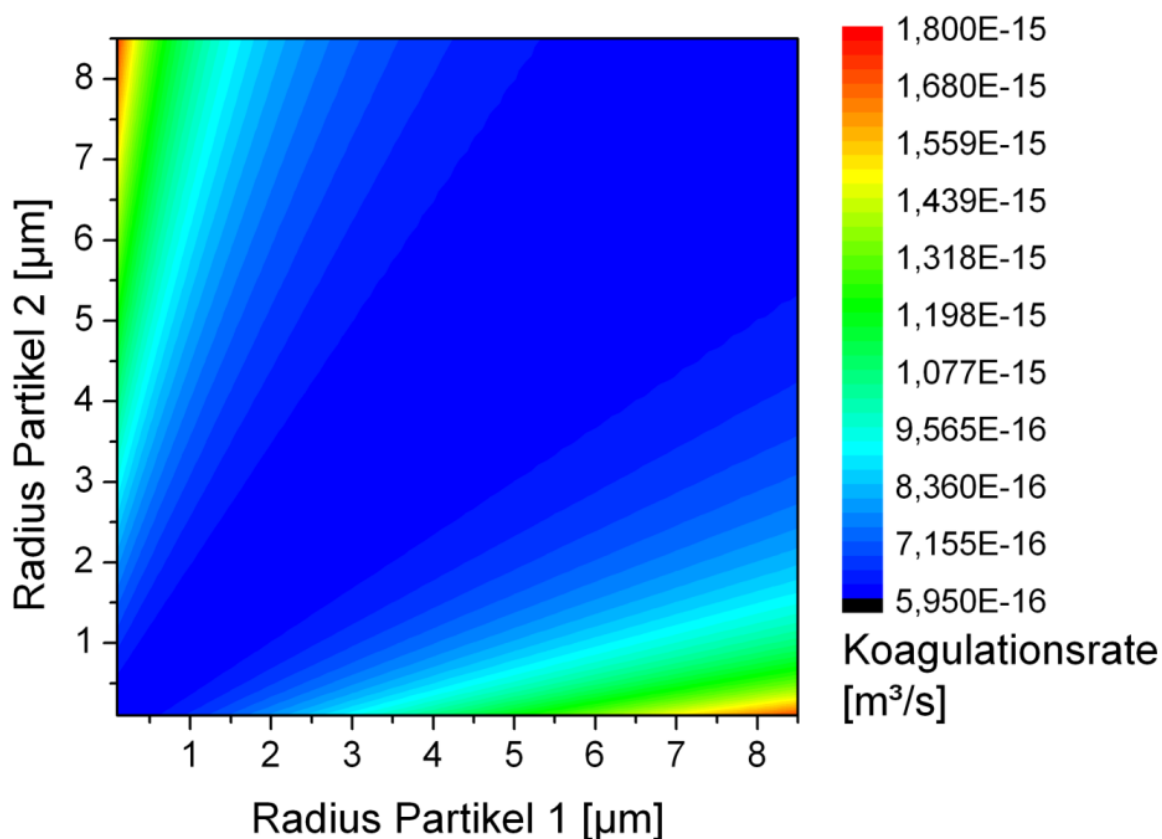


Abbildung 3.4: Verlauf der Koagulationsrate durch Brownsche Diffusion für verschiedene Partikelradien

3.4.4 Koagulation durch Sedimentation

Verschieden große Partikel sedimentieren unter Annahme gleicher Dichte mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Dies kann zu Stößen zwischen den Partikeln führen, wenn größere Partikel kleinere Partikel einholen. Dabei können Partikel zusammenhaften und koagulieren. Wenn nun ein spärliches Partikel a mit Radius r_a und Geschwindigkeit \vec{v}_a durch eine Wolke von Partikeln b mit Radius r_b und Geschwindigkeit \vec{v}_b fällt, so ergibt sich der

Fluss J als das Produkt aus effektiver Stoßfläche, relativer Geschwindigkeit der Partikel untereinander und Konzentration der Partikel b n_∞ :

$$J = \pi(r_a + r_b)^2 |\vec{v}_a - \vec{v}_b| n_\infty \quad (3.31)$$

Die Koagulationsrate $K = J/n_\infty$ ist damit

$$K = \pi(r_a + r_b)^2 |\vec{v}_a - \vec{v}_b|. \quad (3.32)$$

Mit der Sedimentationsgeschwindigkeit

$$v_{sed} = \frac{2 \cdot \rho \cdot g \cdot C_c \cdot r^2}{9 \cdot \nu} = \frac{\rho d^2 g C_c}{18 \nu}, \quad (3.33)$$

wobei C_c die Cunningham-Slipkorrektur bezeichnet (siehe Abschnitt 3.2), ergibt sich für die Koagulationsrate

$$K = \pi (r_a + r_b)^2 \frac{2\rho g}{9\nu} \left| r_a^2 \cdot C_a - r_b^2 \cdot C_b \right|. \quad (3.34)$$

Bezogen auf die Partikelvolumina v und u kann die Gleichung zu

$$K = \frac{\rho g}{6\nu} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} (v^{2/3} + u^{2/3}) \left| v^{2/3} C_v - u^{2/3} C_u \right| \quad (3.35)$$

umformuliert werden. C_u und C_v sind die auf das Partikelvolumen bezogenen Cunningham-Slipkorrekturen.

3.4.5 Koagulation durch turbulente Diffusion

Die Koagulation von Aerosolpartikeln findet fast immer in turbulenten Umgebungen (z. B. Rohrströmungen) statt. Die durch diese Turbulenzen hervorgerufene Koagulation bezeichnet man als Koagulation durch turbulente Diffusion oder kurz als turbulente Koagulation. Sie ist nur teilweise erforscht und die theoretische Beschreibung ist bisher nur in Ansätzen und dementsprechend nur mit einem großen Fehler behaftet möglich. Dieser liegt in der Größenordnung eines Faktors zehn [7]. Man unterscheidet zwischen der turbulenten Scherkoagulation⁹, die durch die unterschiedlichen Fluidgeschwindigkeiten innerhalb eines Wirbels verursacht wird, und der turbulenten Trägheitskoagulation, die durch die Tatsache, dass die Aerosolpartikeln auf Grund ihrer Trägheit den Strömungslinien des Fluids nicht folgen, generiert wird.

3.4.5.1 Kolgomorow Mikroskala

Die meisten theoretischen Beschreibungen der turbulenten Koagulation basieren auf der Energie-Kaskaden-Hypothese. Diese besagt, dass die Energie von großen Wirbeln auf

⁹entspricht dem englischen Wert *shear*

kleine Wirbel übertragen wird. In den großen Wirbeln ist der Energieverlust durch Energiedissipation¹⁰ auf Grund der viskosen Reibung des Fluids gering. Am kleinskaligen Ende des Energieübertrags wird die in den Wirbeln vorhandene Energie in thermische Energie umgewandelt. Die geordnete Bewegung der Wirbel geht verloren, d. h. es kommt zur Energiedissipation. Die Längenskala, auf der dies geschieht, entspricht dem Durchmesser der Wirbel. Sie wird in der Energie-Kaskaden-Hypothese durch die Kolmogorow-Mikroskala λ_k ¹¹ beschrieben. Diese ist durch

$$\lambda_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon_d} \right)^{1/4} \quad [m] \quad (3.36)$$

definiert. Hierbei bezeichnet ν die kinematische Viskosität des Fluids und ϵ_d die Energiedissipationsrate des Fluids, d. h. die Energiedissipation pro Masseneinheit des Fluids¹². In der Atmosphäre liegt λ_k in der Größenordnung von 100-1000 μm , d. h. sie ist deutlich größer als der Durchmesser der Aerosolpartikel (im Mikrometerbereich). Für die verwendete Aerosolversuchskammer kann die Energiedissipationsrate durch die in [48] und [38] angegebene Näherungsformel

$$\epsilon_d = \frac{7,9 \cdot N_S^3 D_T^5}{T_T T_B H} \quad [m^2/s^3], \quad (3.37)$$

bei der N_S die Drehgeschwindigkeit des Rotors (siehe auch Kapitel 4), D_T den Durchmesser des Rotors, T_T und T_B die Seitenlängen der Kammer und H Höhe der Kammer angibt, zu $29,77 \text{ m}^2/s^3$ abgeschätzt werden. Eine weitere Annahme, die der hier vorgestellten Beschreibung der turbulenten Koagulation zu Grunde liegt, ist die, dass die Mikrowirbel isotrop im Raum verteilt sind. Eine letzte Bedingung, die erfüllt sein muss, damit es zu turbulenter Koagulation kommt, ist eine hinreichend große Aerosolkonzentration. Der mittlere Abstand zwischen den Partikeln sollte ungefähr der Kolmogorow Mikroskala entsprechen.

Um die Koagulationsraten durch Scherkräfte und Trägheit berechnen zu können, führt man einige Hilfsgrößen ein, die wie folgt definiert sind. Als erstes definiert man die dimensionslose Partikelrelaxationszeit θ

$$\theta = \frac{\tau}{T_L} \quad (3.38)$$

mit

$$\tau = \frac{(2\rho_p + \rho_f) \cdot r^2 \cdot C_C}{9\nu}. \quad (3.39)$$

In Gleichung (3.39) bezeichnen ρ_p und ρ_f die Dichte des Partikels bzw. des Fluids, r den Radius des Partikels, C_C die Cunningham-Slip-Korrektur (s. Abschnitt 3.2) und ν

¹⁰Als Energiedissipation bezeichnet man einen Vorgang, bei dem die Energie einer makroskopisch gerichteten Bewegung in eine ungeordnete Bewegung übergeht, ein Beispiel hierfür ist eine gedämpfte Schwingung.

¹¹Die Einheit der Kolmogorow-Mikroskala ergibt sich aus der Dimension der kinematischen Viskosität $[\nu] = \text{m}^2/\text{s}$ und der Energiedissipationsrate $[\epsilon_d] = \text{m}^2/\text{s}^3$ zu $[\lambda_k] = \text{m}$

¹²Durch den Bezug der Energiedissipationsrate auf eine Masseneinheit des Fluids hat ϵ_d die Dimension $J/(s \cdot \text{kg}) = \text{m}^2/\text{s}^3$

die Viskosität des Fluids. In Gleichung (3.38) bezeichnet T_L die Lagrangezeitskala $T_L = 0,4 \cdot v_f^2 / \epsilon_d$, bei der v_f die mittlere Fluidgeschwindigkeit beschreibt [49].

Als weitere Größe wird in [50] die Spektrumkonstante γ eingeführt

$$\gamma = 0,183 \cdot \frac{v_f^2}{\sqrt{\epsilon_d \cdot \nu}}. \quad (3.40)$$

Der Massenkoeffizient b wird durch

$$b = \frac{3\rho_f}{2\rho_p + \rho_f} \quad (3.41)$$

definiert [49]. Für die meisten Aerosole mit einer Dichte von 1000-3000 kg/m^3 ist dieser Koeffizient sehr klein.

3.4.5.2 Turbulente Koagulation durch Scherkräfte

Mit den vorgenannten Definitionen lässt sich der Koagulationskoeffizient für die Koagulation durch Scherkräfte zu

$$K = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (r_a + r_b)^2 \cdot \sqrt{0,238 \cdot b \cdot v_f^2 \left[\frac{v_a^2}{v_f^2} \frac{\theta_a}{C_{C,a}} + \frac{v_b^2}{v_f^2} \frac{\theta_b}{C_{C,b}} + 2\sqrt{\frac{\theta_a \cdot \theta_b}{C_{C,a} C_{C,b}} \frac{\overline{v_a v_b}}{v_f^2}} \right]} \quad (3.42)$$

bestimmen [49, 50, 51]. In Gleichung (3.42) stehen die Indices a und b für die beiden koagulierenden Partikel. Weiter können die Abschätzungen

$$\frac{v_i^1}{v_f^2} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{1 + b^2 \theta_i}{1 + \theta_i} - \frac{1 + b^2 \gamma \theta_i}{\gamma(1 + \gamma \theta_i)} \right) \quad (3.43)$$

und

$$\frac{\overline{v_a v_b}}{v_f^2} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left[\frac{(\theta_a + \theta_b + 2\theta_a \theta_b) + b(\theta_a - \theta_b)^2 + b^2(\theta_a^2 \theta_b + \theta_a \theta_b^2 + 2\theta_a \theta_b)}{(\theta_a + \theta_b)(1 + \theta_a)(1 + \theta_b)} - \frac{(\theta_a + \theta_b + 2\gamma \theta_a \theta_b) + b\gamma(\theta_a - \theta_b)^2 + b^2\gamma(\gamma \theta_a^2 \theta_b + \gamma \theta_a \theta_b^2 + 2\theta_a \theta_b)}{\gamma(\theta_a + \theta_b)(1 + \gamma \theta_a)(1 + \gamma \theta_b)} \right] \quad (3.44)$$

in Gleichung (3.42) verwendet werden [49, 50, 51]. Damit ergibt sich für die Koagulationsrate K ein Verlauf, wie er in Abbildung 3.5 dargestellt ist.

3.4.5.3 Turbulente Koagulation durch Partikelträgheit

Für die turbulente Koagulation durch die Partikelträgheit ergibt sich nach [49, 50, 51, 52] der komplexe Zusammenhang

$$K = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (r_a + r_b)^2 \cdot \left[3(1-b)^2 v_f^2 \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{(\theta_a + \theta_b)^2 - 4\theta_a\theta_b \sqrt{\frac{1+\theta_a+\theta_b}{(1+\theta_a)(1+\theta_b)}}}{\theta_a + \theta_b} \times \left[\frac{1}{(1+\theta_a)(1+\theta_b)} - \frac{1}{(1+\gamma\theta_a)(1+\gamma\theta_b)} \right] \right]^{(1/2)}. \quad (3.45)$$

In Abbildung 3.5 ist die Koagulationsrate für die durch Scherkräfte und Trägheitskräfte verursachte Koagulation für einen Partikel mit einem Radius von $1 \mu\text{m}$ dargestellt. Das Minimum bei $r_2 = 1 \mu\text{m}$ resultiert daher, dass die Partikel in diesem Fall gleich groß sind und ihre Trägheit bei gleicher Dichte identisch ist. Daher können diese Partikel nicht durch diesen Effekt koagulieren, da sie sich gleich schnell in der Strömung bewegen.

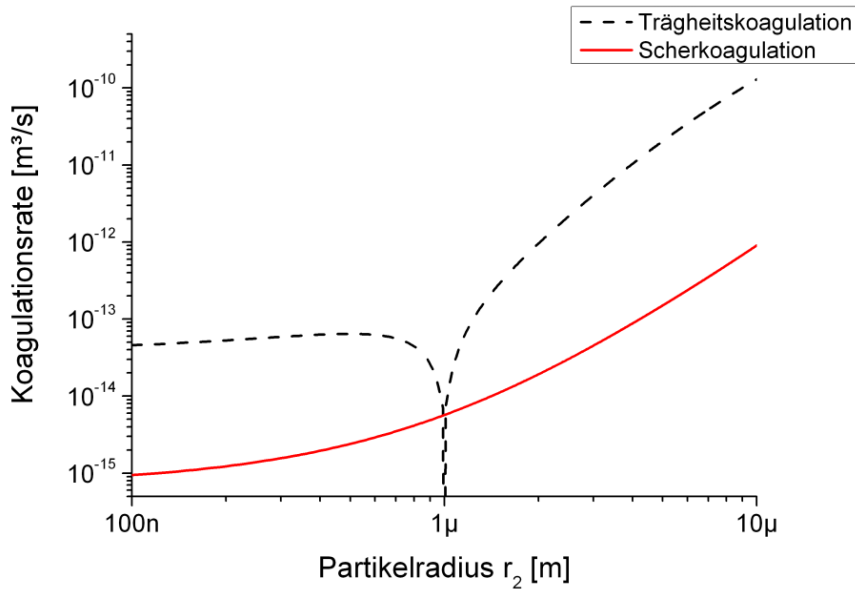


Abbildung 3.5: Verlauf der Koagulationskoeffizienten für die turbulente Koagulation durch Scherkräfte und Partikelträgheit für ein Partikel mit einem Radius von $1\ \mu\text{m}$. Die weiteren Parameter der Gleichungen (3.42) und (3.45) wurden auf folgende Werte gesetzt: $\epsilon_d = 10\ \text{m}^2/\text{s}^3$, $\nu = 18\ \mu\text{Pa} \cdot \text{s}$, $\rho_p = 2740\ \text{kg}/\text{m}^3$, $v_f = 0,3\ \text{m}/\text{s}$

3.4.6 Einfluss von elektromagnetischen Kräften

Die Koagulationsrate zwischen Partikeln kann sich ändern, wenn van-der-Waals-Kräfte oder Coloumbkräfte zwischen den Partikeln wirken. So kann es zu einer Verstärkung oder Abschwächung der Koagulationsrate kommen, je nachdem, ob die Partikel gleich oder entgegengesetzt geladen sind [53]. Um diese Kräfte in der Koagulationsrate zu berücksichtigen, wurde von Friedlander [7] der im Folgenden beschriebene Weg vorgeschlagen. Man geht, wie schon zur Berechnung der durch Brownsche Diffusion verursachten Koagulationsrate, vom differentiellen Fluss J^{13} der Partikel a auf die Oberfläche des Partikel b aus:

$$J(r) = -D \frac{\partial n}{\partial r} - \frac{1}{f} \frac{d\Phi(r)}{dr} n. \quad (3.46)$$

Dabei bezeichnet $\frac{d\Phi(r)}{dr}$ das Potential der Kraft zwischen den Partikeln und f den Reibungskoeffizienten. Der Partikelfluss über jede konzentrische Schale um Partikel a mit dem Radius r ist im Gleichgewichtszustand konstant. Dies bedeutet für den integralen Fluss F^{14}

$$4\pi r^2 J = const = -4\pi D r^2 \left(\frac{dn}{dr} - \frac{n}{kT} \frac{d\Phi}{dr} \right) = -F. \quad (3.47)$$

Für konstantes F kann diese Differentialgleichung gelöst werden, so dass nach [7] und [54] gilt:

$$F = \frac{4\pi D n_\infty (r_a + r_b)}{(r_a + r_b) \int_{r_a+r_b}^{\infty} (\exp(\Phi(x)/kT)/x^2) dx} = \frac{4\pi D n_\infty (r_a + r_b)}{W}. \quad (3.48)$$

Durch Vergleich mit Gleichung (3.27) kann der Einfluss der Kräfte auf die Koagulationsrate durch den Abschwächungs- bzw. Verstärkungsfaktor $1/W$

$$\frac{1}{W} = \frac{1}{(r_a + r_b) \int_{r_a+r_b}^{\infty} (\exp(\Phi(x)/kT)/x^2) dx} \quad (3.49)$$

beschrieben werden.

3.4.6.1 Van-der-Waals-Kraft

Im Falle zweier runder Partikel mit den Radien r_i und r_j kann die potentielle Energie¹⁵ Φ zwischen ihnen nach [54, 55] durch

$$\Phi = -\frac{A}{6} \left(\frac{2r_i r_j}{r^2 - (r_i + r_j)^2} + \frac{2r_i r_j}{r^2 - (r_i - r_j)^2} + \ln \frac{r^2 - (r_i + r_j)^2}{r^2 - (r_i - r_j)^2} \right) \quad (3.50)$$

beschrieben werden. A bezeichnet die Hamakerkonstante, und r den Abstand der Partikel zueinander [55]. Dann hat der Korrekturfaktor W^{-1} für zwei gleich große Partikel

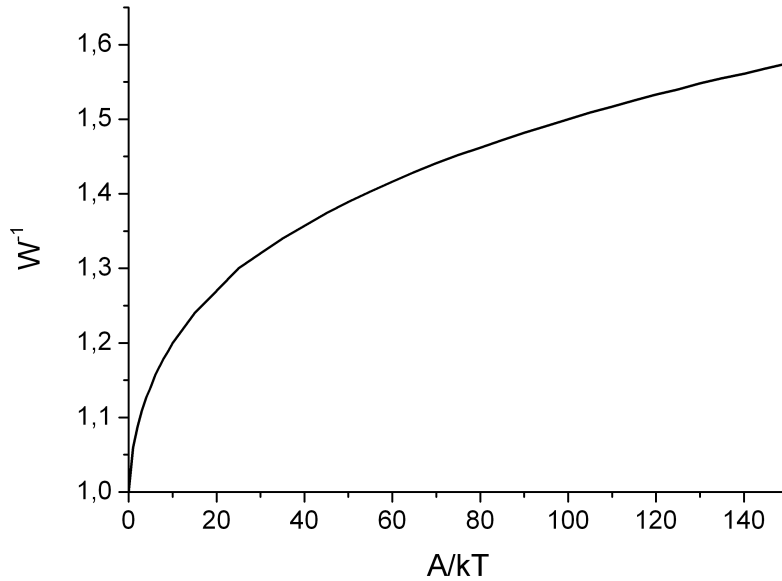


Abbildung 3.6: Verlauf des Korrekturfaktors W^{-1} für verschiedene Hamakerkonstanten A

($r_i = r_j$) den in Abbildung 3.6 gezeigten Verlauf. Für Kalziumkarbonat mit einer Hamakerkonstante von $A = 10,1 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ [56] ergibt sich damit bei Raumtemperatur ($T = 298 \text{ K}$) aus Abbildung 3.6 eine Verstärkung der Koagulationsrate von ca. 30 %.

3.4.6.2 Coloumbkraft

Im Falle geladener Aerosolpartikel kann das Potential zwischen ihnen durch

$$\Phi = \frac{z_i z_j e^2}{\epsilon r} \quad [\text{V}] \quad (3.51)$$

beschrieben werden. Dabei beziehen z_i und z_j die Ladungen der beiden Partikel in Einheiten der Elementarladung und ϵ die Dielektrizitätskonstante des Mediums Luft. Der Korrekturfaktor W kann damit zu

$$W = \frac{1}{y} (\exp y - 1) \quad (3.52)$$

berechnet werden [7]. Hierbei ist y der dimensionslose Parameter

$$y = \frac{z_i z_j e^2}{\epsilon k T (r_i + r_j)}. \quad (3.53)$$

¹³Der differentielle Fluss hat die Einheit $\text{m}^2/\text{s} \cdot \text{m}^{-3} \cdot 1/\text{m} = 1/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$.

¹⁴Der integrale Fluss hat die Einheit $1/\text{s}$.

¹⁵mit der Einheit *Joule*

In Abbildung 3.7 ist der Verlauf des Korrekturfaktors W^{-1} für verschiedene Parametersätze der Partikeleigenschaften dargestellt. Es wird jeweils die Ladung z_2 des zweiten Partikels variiert. Zum Einen ist der Verlauf für zwei gleich große Partikel ($1 \mu m$) gezeigt, bei dem ein Partikel mit einer Elementarladung aufgeladen ist. Wenn die Ladung des zweiten Partikels negativ ist, so kommt es zu attraktiven Kräften zwischen den beiden Partikeln und die Koagulationsrate nimmt stark zu (bis zu 350 Prozent, wenn zweite Partikel zehnfach positiv geladen ist). Im Falle gleichnamiger Ladungen auf beiden Partikeln kommt zu einer elektrischen Abstoßung der Partikel und damit zu einer Verringerung der Koagulationsrate. Wenn der Radius der gleich großen Partikel zunimmt, so sinkt der Einfluss der durch die Ladungen auf den Partikeln verursachten Coloumbkräfte auf die Koagulationsrate bei sonst unveränderten Parametern. In Abbildung 3.8 ist der Einfluss

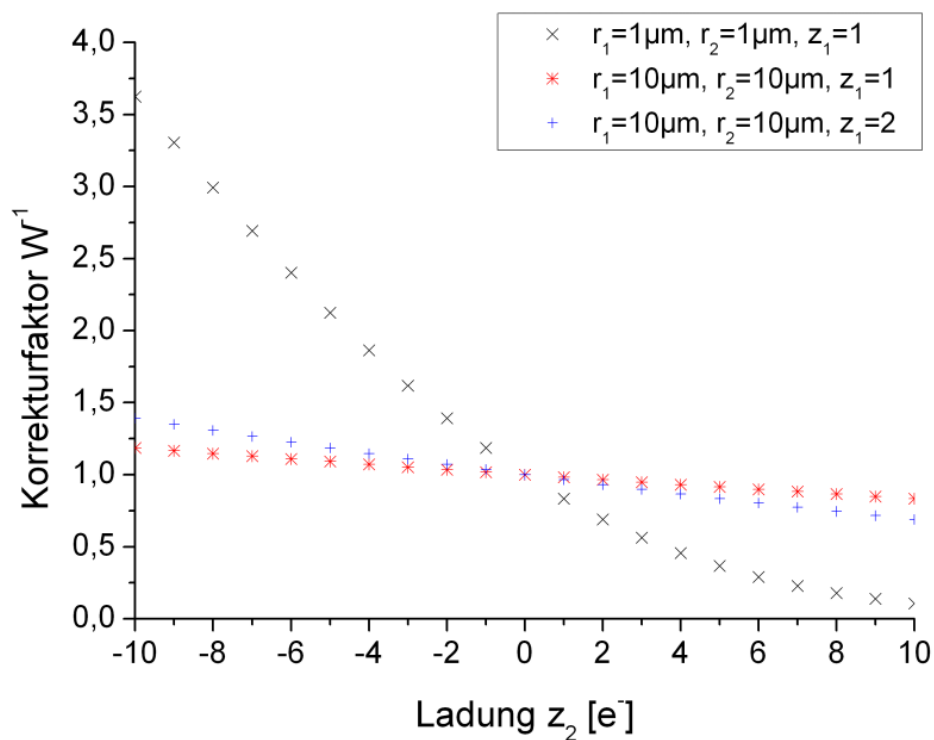


Abbildung 3.7: Verlauf des Korrekturfaktors W^{-1} für verschiedene Ladungen z_2 auf dem zweiten Aerosolpartikel bei unterschiedlichen Parametern r_1 , r_2 und z_1 nach Gleichung (3.52)

der Coloumbkraft auf den Koagulationskoeffizienten für verschiedene Partikelradien dargestellt. Es sind jeweils der Fall, dass beide Aerosolpartikel keine Ladung tragen sowie der Fall, dass ein Partikel einfach positiv und das andere Partikel einfach negativ geladen ist, betrachtet. Der Radius des Stosspartners ist einmal auf $r_1 = 1 \mu m$ und einmal auf $r_1 = 10 \mu m$ gesetzt. Die Koagulationsrate wurde nach der Formel für den Kontinuumsbereich (Gleichung (3.29)) berechnet, um die Coloumbkräfte zu berücksichtigen, wurde

die Korrektur (3.52) verwendet. Man erkennt, dass für $r_1 = 10\mu\text{m}$ der Einfluss vernachlässigbar ist und für $r_1 = 1\mu\text{m}$ bei $r_2 = 0,2\mu\text{m}$ ungefähr 25 Prozent beträgt und mit zunehmenden Partikelradius r_2 weiter abfällt.

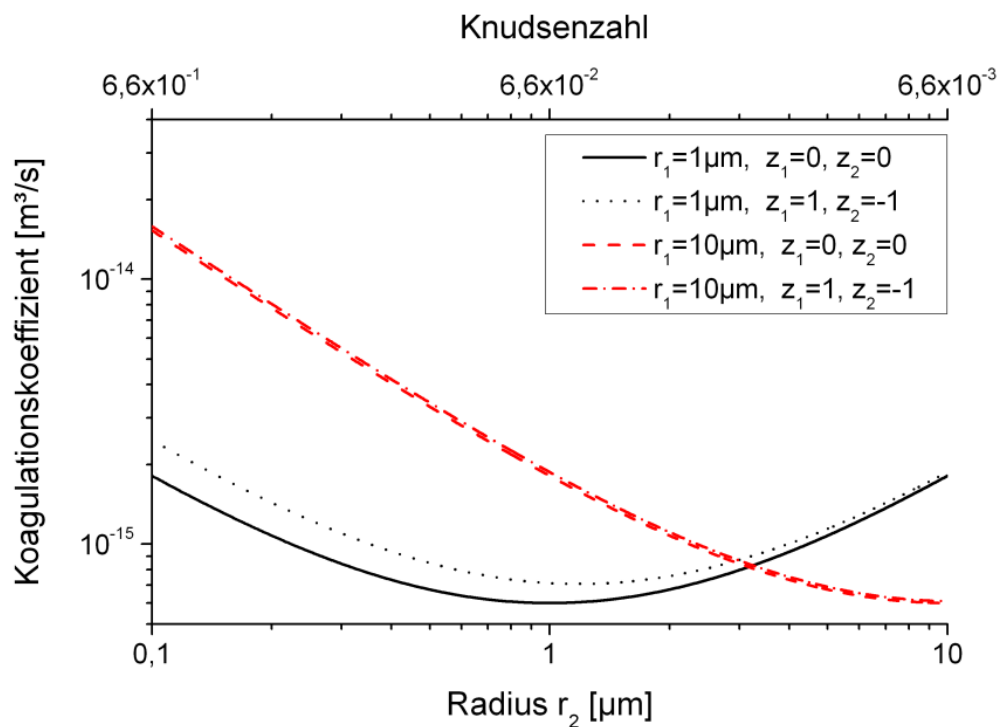


Abbildung 3.8: Einfluss der Coloumbkraft gemäß (3.52) auf die Koagulationsrate nach Gleichung (3.29) im Kontinuumsbereich

3.4.7 Zusammenfassung der Koagulationseffekte

In Abbildung 3.9 ist der Verlauf der durch die in diesem Abschnitt beschriebenen Effekte verursachten Koagulationsraten bei verschiedenen Partikelgrößen gezeigt. Es ist jeweils die Koagulationsrate eines Aerosolpartikels mit einem Durchmesser von $1\mu\text{m}$ mit einem zweiten Aerosolpartikel der angegebenen Größe dargestellt. Die Brownsche Koagulationsrate ist für Stoßpartner mit einem Durchmesser von bis zu ca. $3\mu\text{m}$ dominant. Die dargestellten Energiedissipationsraten ϵ_d von $5\text{ cm}^2/\text{s}^3$ und $1000\text{ cm}^2/\text{s}^3$ entsprechen denen der offenen Atmosphäre in einer Höhe von einem Meter ($\epsilon_d = 1000\text{ cm}^2/\text{s}^3$) und 100 Metern ($\epsilon_d = 5\text{ cm}^2/\text{s}^3$) [57]. Dies ergibt sich aus der Annahme, dass sich die Luft unterhalb der Grenzschicht¹⁶ turbulent bewegt ($\epsilon_d = 1000\text{ cm}^2/\text{s}^3$) und oberhalb der Grenzschicht laminare Strömungen vorherrschen ($\epsilon_d = 5\text{ cm}^2/\text{s}^3$).

Zusammenfassend ergibt sich aus den hier vorgestellten theoretischen Vorüberlegungen, dass unter den Bedingungen, die in der in Kapitel 4 vorgestellten Aerosolversuchskammer vorherrschen, die turbulente Koagulation den dominierenden Einfluss im untersuchten Partikelgrößenbereich ausmachen sollte. Ebenso kann der Einfluss der Coloumbkraft auf die Koagulation bei nicht oder nur schwach geladenen Partikeln im betrachteten Größenbereich vernachlässigt werden.

¹⁶Die Grenzschicht befindet sich in einer Höhe von ca. 100 m über dem Meeresspiegel.

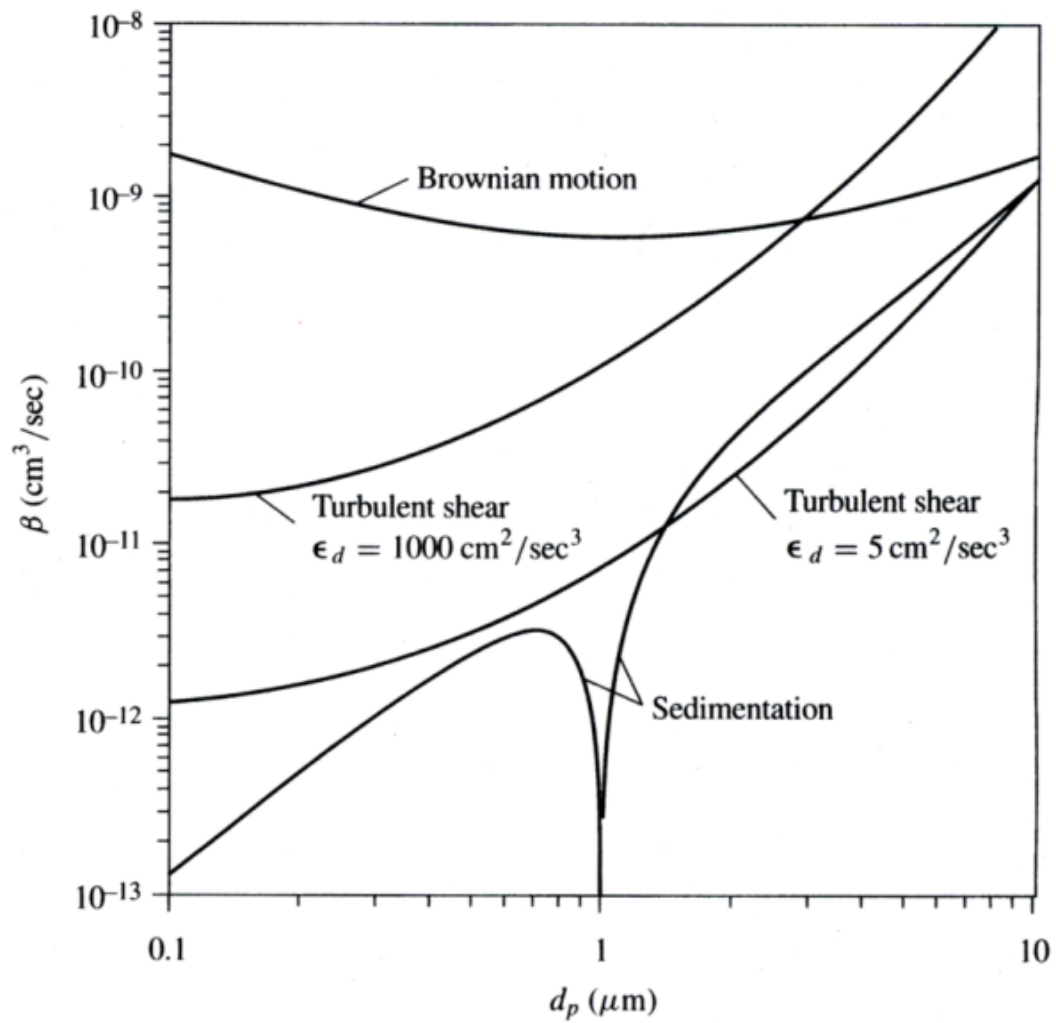


Abbildung 3.9: Zusammenfassung der Koagulationsraten auf Grund der verschiedenen Effekte [7]

3.5 Erste grundlegende Prüfungen der STAR3D-Software

Um die Software STAR3D zu evaluieren, wurde ein zweistufiges Verfahren gewählt. In einem ersten Schritt wurden die von STAR3D ermittelten Ergebnisse für einfache Test-szenarien mit den aus theoretischen Überlegungen abgeschätzten Ergebnissen verglichen. Hierzu wurde das Verhalten von STAR3D im Hinblick auf die Berücksichtigung der physikalischen Effekte Diffusion und Sedimentation der Aerosolpartikel untersucht. Die Ergebnisse dieser Betrachtungen werden in diesem Abschnitt vorgestellt.

Im zweiten Schritt wurden zwei Freiluftmessungen durchgeführt, um die von STAR3D vorhergesagten Immissionswerte an Monitorpunkten mit den von einem Messsystem (APMS, [58]) an diesen Stellen ermittelten Werten zu vergleichen. Die Ergebnisse dieser Messungen werden in Kapitel 6 vorgestellt.

Um erste Plausibilitätsprüfungen an STAR3D durchzuführen, wurde das folgende Szenario entworfen:

Es wurde ein $100m \times 100m \times 40m$ großes Testvolumen generiert, in dem am linken Rand ein Stallgebäude mit einem Abluftkamin als Emissionsquelle positioniert wurde (siehe Abbildung 3.10). Um die oben genannten Effekte Diffusion und Sedimentation zu untersuchen, sollten Einflüsse des sich ändernden Windfeldes ausgeschlossen werden. Daher wurde im gesamten Simulationsvolumen die Windgeschwindigkeit auf 1 m/s in Richtung der x -Achse gesetzt. Damit ist es möglich, für jedes Partikel aus der Position in x -Richtung die Zeit, die seit der Emission aus dem Abluftkamin vergangen ist, zu bestimmen. Während der Plausibilitätsprüfungen wurde in jedem Zeitschritt eine feste Anzahl an „Testpartikeln“ emittiert. Diese lag je nach untersuchtem Szenario zwischen 5000 und 20000 Partikeln.

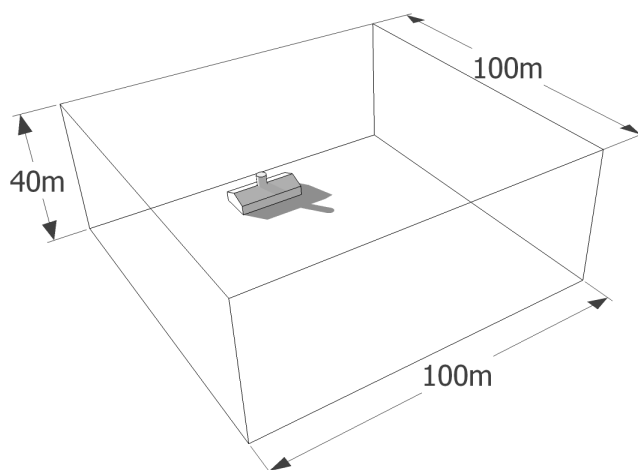


Abbildung 3.10: schematische 3D-Darstellung des Simulationsvolumen

3.5.1 Untersuchung des Diffusionsverhaltens der Aerosolpartikel innerhalb der Ausbreitungssimulation

Um das Verhalten der Testpartikel bezüglich der Diffusion zu untersuchen, wurden für einen Zeitraum von 300 Sekunden jede Sekunde 15000 Partikel aus der Emissionsquelle freigesetzt (bei einer angenommenen Temperatur von $T = 293\text{ K}$). Alle Partikel hatten die gleiche Größe ($2,5\ \mu\text{m}$ Durchmesser), so dass der Einfluss des Partikeldurchmessers auf die Diffusion keine Rolle spielt. Hiernach wurden die Häufigkeiten der Testpartikel in der (horizontalen) $x - y$ -Ebene in einem zweidimensionalen Histogramm eingetragen. Das Ergebnis in Abbildung 3.11 zeigt die Aufweitung der Partikelwolke durch die Diffusion. Um die Aufweitung der Partikelwolke weiter zu untersuchen und die Breite mit

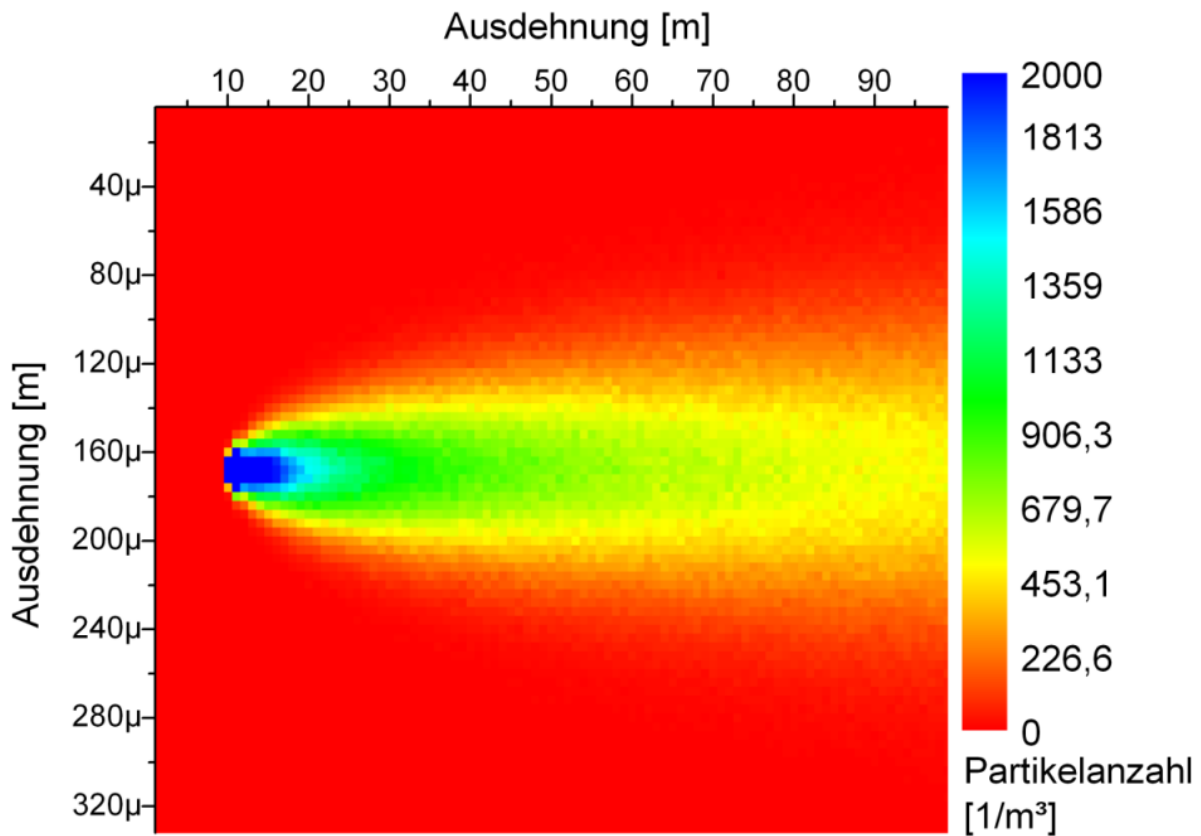


Abbildung 3.11: Verteilung der durch die Diffusion in y -Richtung aufgeweiteten Partikelwolke

den theoretisch erwarteten Werten zu vergleichen, wurde die Breite der Wolke an verschiedenen Stellen ermittelt. Da das zu Grunde liegende Windfeld durch eine konstante Windgeschwindigkeit von 1 m/s in Richtung der x -Achse gegeben ist, entspricht die in x -Richtung zurückgelegte Strecke der Zeit, die seit der Freisetzung aus der Emissionsquelle vergangen ist. Daher kann die Strecke direkt in eine Zeit umgerechnet werden. Das Ergebnis dieser Betrachtung ist in Abbildung 3.12 zu sehen. Sie zeigt die Normalverteilung der

Partikelanzahl zu den unterschiedlichen Zeitpunkten, wobei die Breite σ der Verteilung mit der Zeit zunimmt. Die Breiten der Verteilungen wurden für die verschiedenen Zeiten

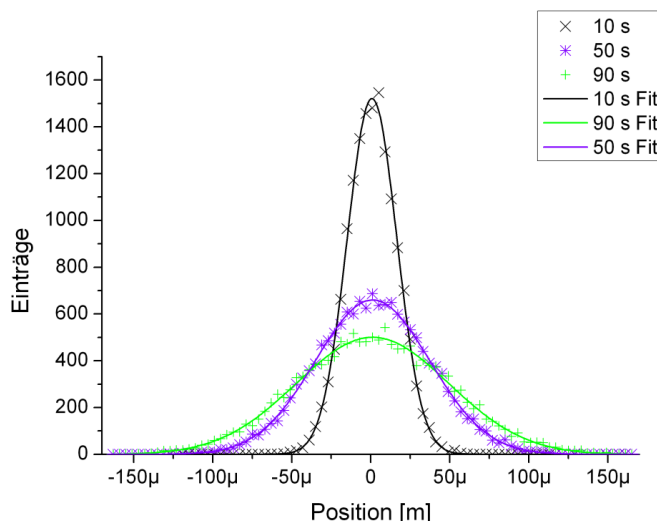


Abbildung 3.12: Durch Diffusion verursachte Verteilung der Partikel zu verschiedenen Zeiten

durch die Anpassung einer Normalverteilung an die Messwerte ermittelt. Die Ergebnisse zeigt Abbildung 3.13. An den Verlauf der Kurve in Abbildung 3.13 wurde eine Funktion der Form

$$f(x) = \alpha \cdot x^p \quad (3.54)$$

angepasst. Die Parameter der Funktion ergaben sich zu

- $\alpha = 4,88 \cdot 10^{-6} \pm 9,26 \cdot 10^{-8} \text{ m}$
- $p = 0,51 \pm 0,01$.

Die beiden Parameter entsprechen den theoretisch erwarteten Werten (siehe auch Anhang C). Der Parameter $p = 0,51$ entspricht der Zunahme der Breite mit \sqrt{x} wie er von der Theorie des Gaußschen Random Walk vorhergesagt wird [59]. Der zweite Parameter α entspricht der Summe der Schrittlängen Z_i bis zum Zeitpunkt t des Gaußschen Random Walk $\sum Z_i$ [59].

Die Verbreiterung der Partikelwolke beträgt nur einige hundert Mikrometer und mag vernachlässigbar erscheinen. In der Arbeitsgruppe wird jedoch zur Zeit in einem weiteren Projekt die turbulente Diffusion untersucht [60]. Die bei der turbulenten Diffusion erwarteten Diffusionskoeffizienten D_{turb} liegen um einige Größenordnungen über denen der Brownschen Diffusion [12], so dass die Einbeziehung des turbulenten Diffusionskoeffizienten einen Einfluss der Diffusion auf das Ausbreitungsgeschehen erwarten läßt.

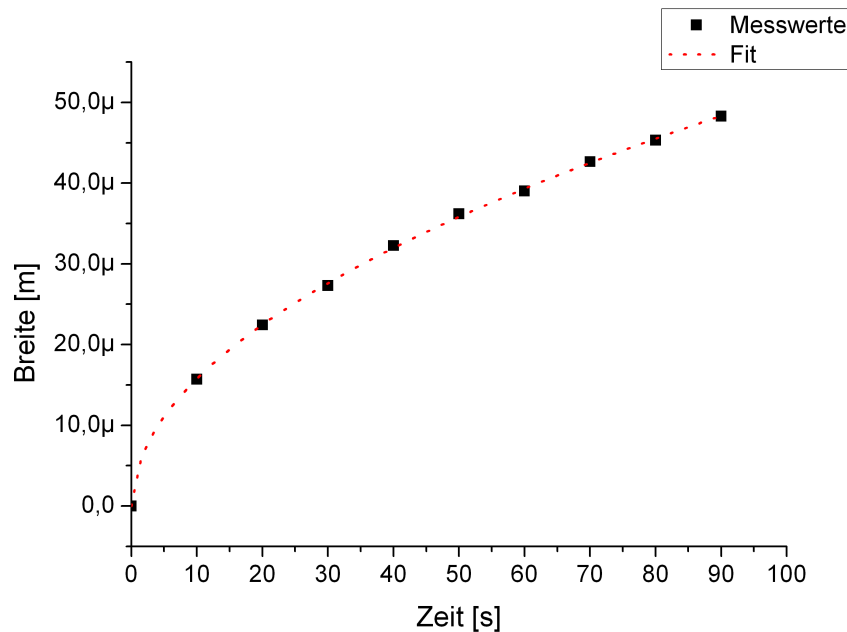


Abbildung 3.13: Zunahme der Breite der Partikelwolke mit der Zeit

3.5.2 Untersuchung des Sedimentationsverhaltens der Aerosolpartikel innerhalb der Ausbreitungssimulation

In einer weiteren Untersuchung wurde das Verhalten von STAR3D in Bezug auf die Sedimentation der Aerosolpartikel betrachtet. Hierfür wurden 20000 Partikel aus der bereits beschriebenen Emissionsquelle freigesetzt, die gleichmäßig auf alle Größenfraktionen, die den Größenfraktionen des Grimm Aerosolspektrometers entsprachen, verteilt waren. Nach einer simulierten Zeitspanne von 300 Sekunden wurde die Verteilung der Partikel in einer vertikalen Ebene (hier die $x - z$ -Ebene) untersucht. Die Verteilung der Partikel in dieser Ebene ist in Abbildung 3.14 zu sehen. Deutlich erkennbar sind die Bahnen der Partikel der einzelnen Größenklassen, die verschieden schnell sedimentieren. In Abbildung 3.15(a) ist die Verteilung der Partikel nach einer in x -Richtung zurückgelegten Strecke von 90 m zu sehen. Da die Windgeschwindigkeit in x -Richtung auf 1 m/s fest eingestellt wurde, entspricht dies der Partikelverteilung nach 90 s. Die Partikel der einzelnen Größenklassen sind verschieden weit abgesunken, je größer die Partikel sind, desto schneller sind sie sedimentiert.

$$v_{TS} = \rho \frac{g C_C d^2}{18\nu} \quad (3.55)$$

In Abbildung 3.15(b) ist ein Vergleich der durch die Simulation gegebenen Sedimentationsstrecken mit den durch die Theorie nach Gleichung (3.55) gegebenen Strecken zu sehen. Hierbei ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den von der Simulation und den von der Theorie vorhergesagten Werten. STAR3D lieferte sowohl hinsichtlich der Diffusion als auch der Sedimentation Ergebnisse, die sehr gut mit den aus theoretischen

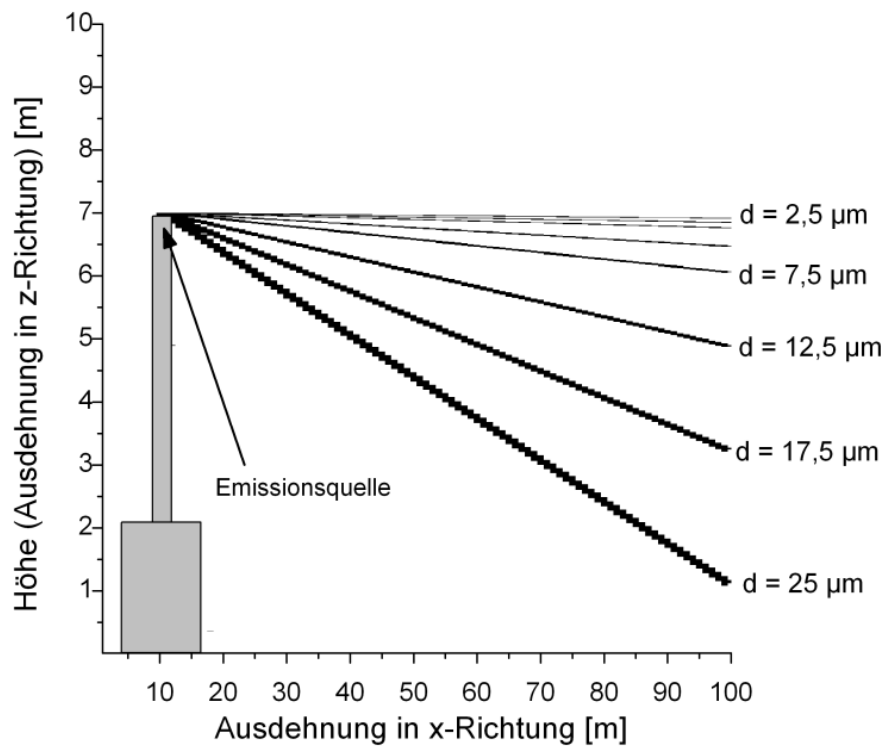
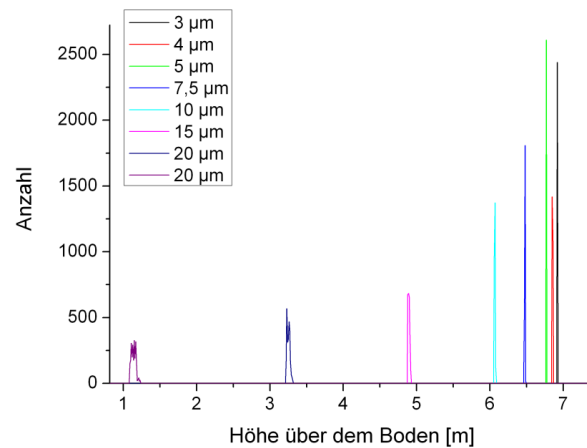
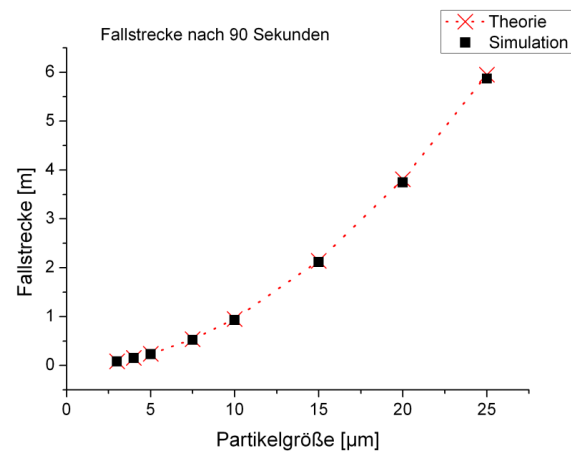


Abbildung 3.14: Schnitt in der $x - z$ -Ebene durch Verteilung der Partikel innerhalb des Simulationsvolumens. Erkennbar sind die Bahnen der verschieden großen und damit schweren Partikelklassen.

schen Überlegungen hergeleiteten Vorhersagen übereinstimmen. Daher wurden im nächsten Schritt Freilandversuche durchgeführt, um STAR3D unter realen Bedingungen weiter zu evaluieren. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden in Kapitel 6 vorgestellt.



(a) Verteilung der Fallstrecken der Partikel der einzelnen Größenklassen



(b) Vergleich zwischen den Ergebnissen der Simulation und den theoretisch erwarteten Werten in Bezug auf die Sedimentation

Abbildung 3.15: Ergebnisse der Untersuchungen zum Sedimentationsverhalten der Partikel innerhalb der Simulation STAR3D

Kapitel 4

Aerosolversuchskammer

Um das Koagulationsverhalten von Aerosolen untersuchen zu können, wurde am Institut für Landtechnik eine Aerosolversuchskammer aufgebaut. Eine schematische Darstellung des Aufbaus ist in Abbildung 4.1 zu sehen. Die Kammer besteht aus verzinkten Stahlelementen, wie sie in der Ablufttechnik eingesetzt werden. Die Höhe der Kammer beträgt 4,30 Meter und die Grundfläche hat die Maße 1,40 Meter \times 0,70 Meter.

Die Versuchskammer ist mit einer Einrichtung zur Freisetzung des zu untersuchenden Aerosols, einem Aerosolspektrometer, der Möglichkeit die relative Luftfeuchte innerhalb der Kammer zu erhöhen sowie mit Sensoren zur Erfassung der Temperatur und der relativen Luftfeuchte ausgestattet. Weiter befindet sich am Boden der Kammer ein Ventilator, der eine homogene Durchmischung des Aerosols ermöglicht, nachdem die Probe in die Kammer eindosiert wurde. Der Ventilator hat einen Durchmesser von 30 cm und kann mit drei verschiedenen Umdrehungsgeschwindigkeiten betrieben werden: 2200, 2400, 2600 U/min. Er wurde bei allen Versuchen mit der geringsten Umdrehungsgeschwindigkeit von 2200 U/min betrieben. Aerosolspektrometer, Klimasensoren und die Aerosolfreisetzungseinrichtung werden in den folgenden Abschnitten detaillierter vorgestellt.

4.1 Aerosolspektrometer

Um die Partikelanzahlkonzentration innerhalb der Versuchskammer zeitaufgelöst messen zu können, kommt ein Aerosolspektrometer zum Einsatz. Dabei handelt es sich um ein Streulichtspektrometer der Firma Grimm Aerosol Technik mit der Typenbezeichnung 1.108. Es gehört zur Klasse der optischen Partikelzähler (OPC¹) und basiert auf der Auswertung des an einem Aerosolpartikel gestreuten Lichtes. Hierzu wird ein konstanter Volumenstrom der Probenluft von 1,2 l/min durch das Gerät gesaugt [61] und in der Messkammer aerodynamisch zu einem Aerosolstrahl fokussiert. Darauf folgend werden die im Luftstrom enthaltenen einzelnen Partikel mit einer Laserdiode (Wellenlänge $\lambda = 780$

¹engl. optical particle counter

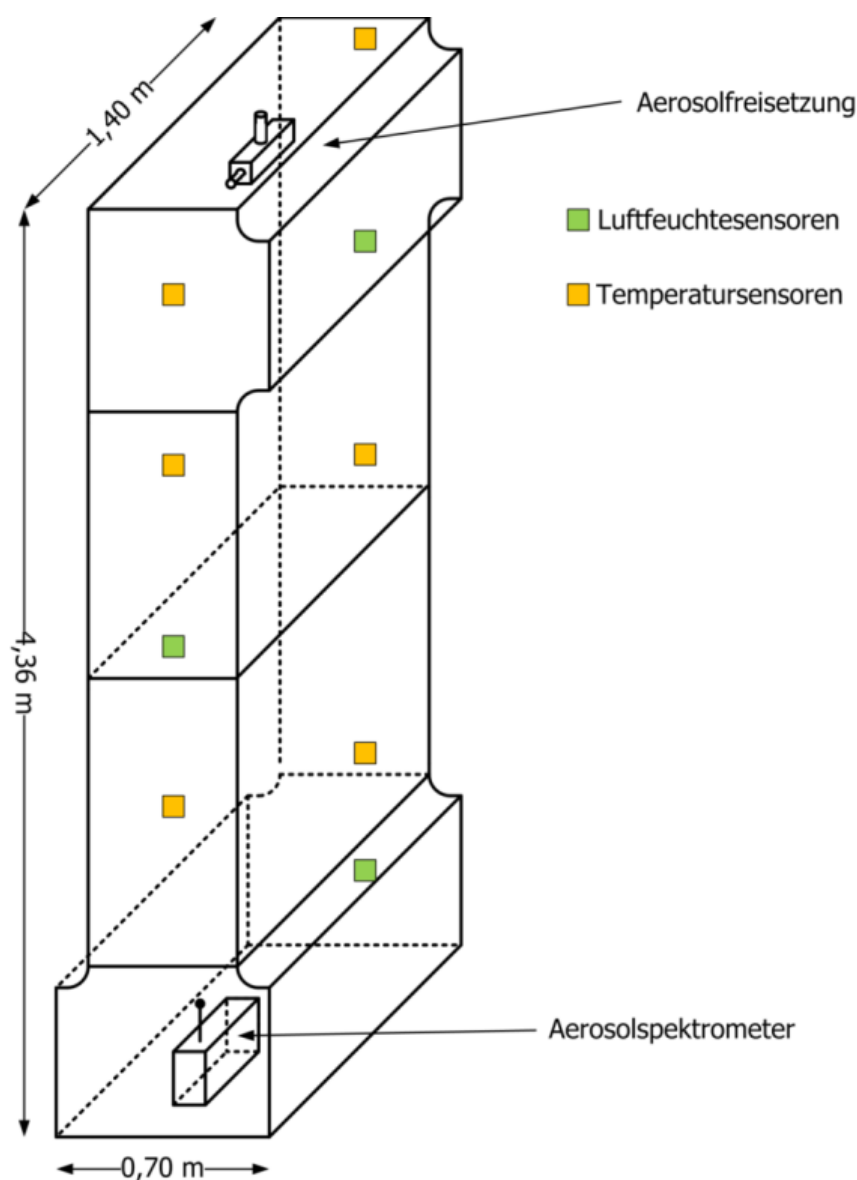


Abbildung 4.1: Schematische Zeichnung der Aerosolversuchskammer

nm, $P_{max} = 40$ mW) beleuchtet und das unter einem Winkel von 90° gestreute Licht wird mit Hilfe eines Parabolspiegels mit einem Öffnungswinkel von 120° auf eine Photodiode gebündelt (siehe Abbildung 4.2)[61, 62]. Das elektrische Signal der Photodiode wird anschließend verstärkt und mit Hilfe eines Vielkanalanalysators klassifiziert. Abhängig von der Stärke des Signals kann durch die Einteilung in Größenklassen mit Hilfe einer Kalibrierkurve auf den Durchmesser des streuenden Aerosolpartikels geschlossen werden [62]. Ein Beispiel für solch eine Kalibrierkurve ist in Abbildung 4.3 gezeigt. Im Bereich von Partikeln mit einem Durchmesser von ungefähr $1 \mu\text{m}$ kann es zu Schwierigkeiten bei der Zuordnung zwischen Signal und Partikelgröße kommen, da die Kalibrierkurve hier nicht monoton ist (durchgezogene Linie in Abbildung 4.3) [62]. Durch die Nutzung des über

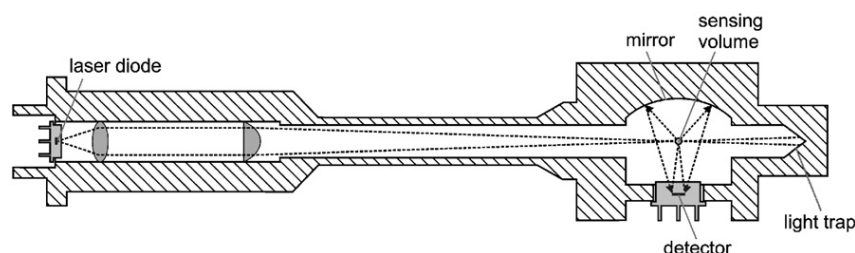


Abbildung 4.2: Skizze eines Schnittes durch die Aerosolkammer des Grimm Aerosolspektrometers. Der Aerosolstrahl wird senkrecht zu der gezeigten Schnittebene durch die Messkammer geführt. [5]

einen weiten Winkelbereich gestreuten Lichtes kann dieser Effekt deutlich abgeschwächt werden (gestrichelte Kurve), so dass eine Größenklassifizierung möglich ist.

Tabelle 4.1: Kanalgrenzen der Größenkanäle des Grimm Aerosolspektrometers 1.108

Nr.	Größe in μm	Nr.	Größe in μm	Nr.	Größe in μm
1	0,3 - 0,4	6	1,0 - 1,6	11	5,0 - 7,5
2	0,4 - 0,5	7	1,6 - 2,0	12	7,5 - 10,0
3	0,5 - 0,65	8	2,0 - 3,0	13	10,0 - 15,0
4	0,65 - 0,8	9	3,0 - 4,0	14	15,0 - 20,0
5	0,8 - 1,0	10	4,0 - 5,0	15	>20,0

Das Grimm Aerosolspektrometer 1.108 kann in zwei verschiedenen Modi betrieben werden. Im ersten Modus werden die Partikelgrößen in 15 Kanälen zwischen $0,3 \mu\text{m}$ und größer $20 \mu\text{m}$ klassifiziert; beim zweiten Modus werden die sieben kleinsten Größenkanäle abgeschaltet. Die Einteilung der Größenkanäle ist Tabelle 4.1 zu entnehmen. Das Aerosolspektrometer wird mit Hilfe von monodispersen Latexpartikeln kalibriert. Dabei wird mit Schwellwerten von 50 % gearbeitet. Dies bedeutet, dass ein $3 \mu\text{m}$ großes Partikel die gleiche Wahrscheinlichkeit hat, in den Größenkanal $2\text{-}3 \mu\text{m}$ eingeordnet zu werden, wie in den Kanal $3\text{-}4 \mu\text{m}$ [5].

Ein weiterer Unterschied zwischen den beiden Modi betrifft die maximale Frequenz, mit der die Partikelgrößenverteilungen ermittelt werden können. Im ersten Modus ist die maximale Frequenz, mit der die Größenverteilung ermittelt werden kann, ein sechssekündlicher Rhythmus, im zweiten Modus können die Partikelgrößenverteilungen sekundlich ermittelt werden. Damit ergibt sich zusammenfassend für die beiden Modi:

- Modus 1: 15 Größenkanäle zwischen $0,3$ und $20,0 \mu\text{m}$, maximale Messrate $1/6 \text{ Hz}$
- Modus 2: 8 Größenkanäle zwischen $2,0$ und $20,0 \mu\text{m}$, maximale Messrate 1 Hz

Die maximale vom Gerät erfassbare Partikelanzahlkonzentration beträgt 2×10^6 Partikel/Liter. Bei höheren Aerosolkonzentrationen kommt es zu nicht mehr vernachlässigbaren

Koinzidenzverlusten [62].

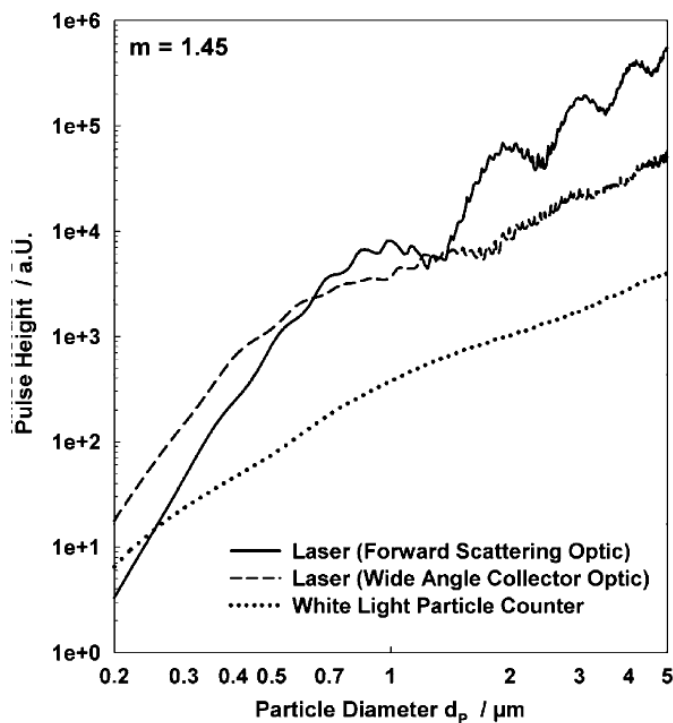


Abbildung 4.3: Kalibrierkurve des Photodetektorsignals in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers [62]. Die Kurve für weißes Licht ist zusätzlich dargestellt, da in [62] verschiedene optische Partikelzähler untersucht wurden.

4.2 Klimadatensensoren

Während der Messungen in der Aerosolversuchskammer wurden die klimatischen Parameter kontinuierlich erfasst. Hierzu zählen die Temperatur, die relative Luftfeuchte und der Luftdruck. Das Messsystem besteht aus einzelnen Messsensoren, ein Mikrokontroller übernimmt die Kommunikation sowohl mit den Sensoren als auch über eine USB-Verbindung mit dem Messrechner. Insgesamt stehen sechs Temperatursensoren, drei Sensoren zur Messung der relativen Luftfeuchte und ein Luftdruckmesser zu Verfügung. Bei den Temperatursensoren handelt es sich um ICs vom Typ DS1621 des Herstellers Maxim. Diese wandeln die gemessene Temperatur direkt in eine digitale Information um, die über eine I2C²-Schnittstelle an den Mikrokontroller übertragen wird. Der Sensor kann in einem Temperaturbereich von -55°C bis $+125^{\circ}\text{C}$ betrieben werden und arbeitet im Normalbetriebsmodus mit einer Auflösung von $\pm 0,5^{\circ}\text{C}$. In einem hochauflösenden Modus kann die Genauigkeit bei der Temperaturmessung auf $\pm 1/16^{\circ}\text{C} = 0,0625^{\circ}\text{C}$ erhöht werden.

²I2C = Inter-Integrated Circuit

Zur Messung der relativen Luftfeuchte wurden Sensoren vom Typ SHT11 der Firma Sensirion eingesetzt. Diese übertragen die gemessene relative Luftfeuchte als digitale Information über einen Zweidrahtbus an den Mikrokontroller. Die Genauigkeit der Luftfeuchtemessung beträgt $\pm 3,0$ % rH. Der Sensor SHT11 bietet neben der Möglichkeit, die Luftfeuchte zu messen, auch die Fähigkeit, die Temperatur zu ermitteln. Hierbei beträgt die Genauigkeit $\pm 0,4$ °C in einem Temperaturbereich von -40 °C bis +124 °C [63]. Die Möglichkeit der Temperaturmessung wurde ebenfalls genutzt, so dass sich die Anzahl der Temperatursensoren auf neun erhöhte.

Zur Messung des Luftdrucks wurde ein Sensor vom Typ MPXA6115A des Herstellers Freescale Semiconductor verwendet. Dieser liefert eine zum Luftdruck proportionale Signalspannung, die mit Hilfe des im Mikrokontroller vorhandenen ADC³ in ein Digitalsignal umgewandelt wurde. Die Genauigkeit des Sensors wird im Datenblatt mit $\pm 1,5$ % angegeben [64].

Die Temperatur- und Luftfeuchtesensoren sind an den Schmalseiten der Versuchskammer im Abstand von 50 cm auf verschiedenen Höhen positioniert, um die Verteilung innerhalb der Kammer zu messen und Inhomogenitäten zu erkennen. In Höhen von 1,5 m, 3,0 m sowie 4,0 m befinden sich Temperatursensoren und auf einer Höhe von 2,5 Metern ein Luftfeuchtesensor. An der anderen Schmalseite sind die Temperatursensoren auf Höhen von 1,0 m, 2,5 m und 4,3 m und die Luftfeuchtesensoren in Höhen von 0,5 und 3,5 Metern angebracht. Der Luftdrucksensor ist außerhalb der Versuchskammer in der Nähe des Mikrokontrollers montiert, da hier von einem konstanten Wert innerhalb des Versuchsraumes ausgegangen werden konnte.

4.3 Staubdispergiereinheit

Die zu untersuchenden Aerosole liegen als Pulver vor und müssen vor der Untersuchung in der Versuchskammer dispergiert werden. Zur Freisetzung des Aerosols wird daher eine auf dem Venturi-Effekt beruhende Düse verwendet, im Folgenden Venturi-Düse genannt. Diese besteht aus einem glattwandigen Rohrstück, dessen Innenradius sich z.B. durch zwei gegeneinander gerichtete Konen verengt. Fließt durch das Rohr ein Gas, so ist an der Engstelle der Staudruck innerhalb des Rohres maximal und der statische Druck minimal. Die Fließgeschwindigkeit des Gases ist an der Engstelle auf Grund der Bernoulli-Gleichung maximal. Wird an dieser Stelle nun eine Aerosolprobe zugeführt (siehe Abbildung 4.4), so wird diese durch den herrschenden Unterdruck angesogen. Durch die Geschwindigkeitsgradienten der Gasströmung im sich aufweitenden Teil des Rohres kommt es zu Scherkräften auf die Aerosolagglomerate, so dass diese „auseinandergerissen“ werden. Das dispergierte Aerosol wird aus der Venturi-Düse ausgestoßen und in die Versuchskammer injiziert.

³Analog Digital Converter

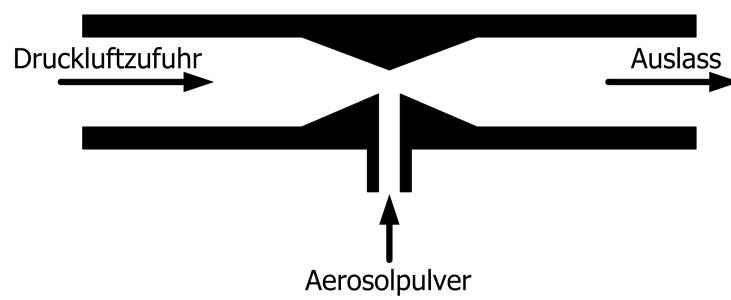


Abbildung 4.4: Schemazeichnung einer Venturi-Düse

Kapitel 5

Ergebnisse der Untersuchungen zur Koagulation

5.1 Einleitung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Untersuchungen zur Partikelkoagulation dargestellt. Zunächst werden die betrachteten Aerosole vorgestellt. Im Anschluß wird das zur Auswertung der Messergebnisse gewählte Verfahren beschrieben. Es folgt die exemplarische Diskussion der Ergebnisse der Klimamessungen innerhalb der Versuchskammer, bevor die Ergebnisse der Bestimmung der Koagulationskoeffizienten unter verschiedenen Rahmenbedingungen vorgestellt werden. Diese werden mit den theoretisch erwarteten Ergebnissen verglichen. Abschließend wird eine Abschätzung, ob die Berücksichtigung der Koagulation bei der Ausbreitungssimulation im Freilandbereich notwendig ist, gegeben.

5.2 Untersuchte Aerosole

Das Koagulationsverhalten wurde an fünf verschiedenen Stäuben untersucht. Dabei handelte sich um Ulmer Weiss, Ceroxid, Arizonastaub, den zur Validierung der Ausbreitungssimulation verwendeten Tracerstaub und um eine Staubprobe aus der Mastschweinehaltung, die im Folgenden vorgestellt werden

- Ulmer Weiss ist der Name eines hochreinen Kalksteins, der im oberen Weissjura in Blaubeuren bei Ulm abgebaut wird. Es besteht zu 99,2 % aus $CaCO_3$, zu 0,4 % aus $MgCO_3$, zu 0,035 % aus Fe_2O_3 , zu 0,1 % aus Al_2O_3 und zu 0,25 % aus Silikaten [65]. Ulmer Weiss findet vor allem Verwendung als Pigment in Wandfarben. Aufgrund seiner hohen Reinheit wird es auch in der Lebensmittelindustrie verwendet, z. B. als Backzusatzstoff oder als Trennmittel. Die Dichte von Ulmer Weiss beträgt 2700

kg/m^3 .

Das in dieser Arbeit verwendete Ulmer Weiss lag in Pulverform vor (Ulmer Weiss XM der Firma Eduard Merkle GmbH & Co.KG). Dabei waren 99,9 % der Partikel kleiner $40 \mu m$ [65]. Der mittlere Partikeldurchmesser beträgt $5 \mu m$. In Abbildung 5.1 ist die Korngrößenverteilung des untersuchten Ulmer Weiss XM zu sehen. Ulmer

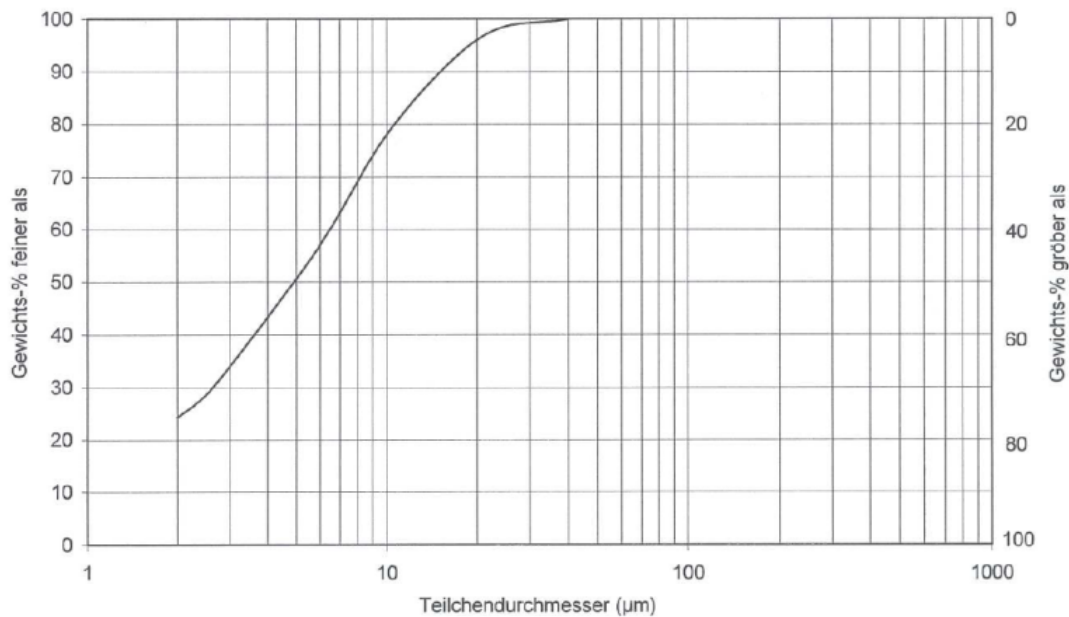


Abbildung 5.1: Korngrößenverteilung von Ulmer Weiss XM [65]

Weiss wurde als Testaerosol gewählt, da es kostengünstig erhältlich ist und auf Grund seiner Partikelgrößenverteilung mit einem Maximum im Bereich von einigen Mikrometern mit der Größenverteilung von Tierstäuben vergleichbar ist. Auch im Rahmen anderer wissenschaftlicher Untersuchungen [66] wurde Ulmer Weiss bereits als Teststaub eingesetzt.

- Ceroxid, CeO_2 , ist ein weißes Pulver, welches in der optischen Industrie zur Politur von Gläsern verwendet wird. Die mittlere Korngröße beträgt $1-2 \mu m$ und liegt damit im Bereich der vom Aerosolspektrometer erfassbaren Größe. Die Dichte von Ceroxid beträgt $7,132 kg/m^3$ [67] und ist damit ungefähr 2,5 mal größer als die von Ulmer Weiss. Ceroxid wurde als zweites Testaerosol gewählt, um den Einfluss der Dichte auf das Koagulationsverhalten zu untersuchen.
- Bei Arizonastaub handelt es sich um einen genormten Prüfstaub zur Bewertung von Luftfiltersystemen und zur Dichtigkeitsprüfung von Gehäusen. Er wird meist synthetisch hergestellt und besteht nach der Norm SAE J726 zu 65-76 % aus SiO_2 , zu 11-17 % aus Al_2O_3 , zu 2,5-5,0 % aus Fe_2O_3 , zu 2-4 % aus Na_2O , zu 3-6 % aus CaO und aus weiteren Oxiden mit einem Anteil der kleiner als 0,5 % ist [68]. Aus den Anteilen der einzelnen Fraktionen lässt sich die mittlere Dichte von Arizonastaub

zu 2796 kg/m^3 berechnen. Aus [68] ergibt sich für die Größenverteilung der Partikel des feingesiebten Arizonastaubes:

- $39 \pm 2 \%$ des Staubes liegen im Größenintervall $0\text{-}5 \mu\text{m}$,
 - $18 \pm 3 \%$ liegen zwischen $5\text{-}10 \mu\text{m}$,
 - $16 \pm 3 \%$ liegen zwischen $10\text{-}20 \mu\text{m}$,
 - $18 \pm 3 \%$ liegen zwischen $20\text{-}40 \mu\text{m}$,
 - $9 \pm 3 \%$ liegen zwischen $40\text{-}80 \mu\text{m}$.
- Der untersuchte Tracerstaub wurde bereits in Abschnitt 6.1.1.3 vorgestellt. Seine Dichte beträgt 2740 kg/m^3 . Er wurde in den Koagulationsversuchen betrachtet, um den Einfluss der Koagulation auf die in Kapitel 6 beschriebenen Validierungsmessungen abschätzen zu können.
 - Bei dem Staub aus einer landwirtschaftlichen Anlage handelte es sich um eine Probe aus der Mastschweinehaltung. Die Schweine wurden auf Spaltenboden ohne Einstreu gehalten. Staub aus der gleichen Quelle wurde bereits in [69] auf sein Sedimentationsverhalten hin untersucht. In diesem Zusammenhang wurde auch die größenklassenabhängige Dichte des Staubes ermittelt. Unter der Annahme eines konstanten Formfaktors von $\chi = 1$ [69] ergaben sich für die Dichten der Staubpartikel der einzelnen Größenklassen die in Tabelle 5.1 zusammengefassten Werte. Ein Erklärungsansatz für die größenklassenabhängige Dichte geht davon aus, dass die kleineren Partikel hauptsächlich anorganischen Ursprungs sind (Betonabrieb im Stall, etc.) und deshalb eine größere Dichte haben, während die großen Partikel organischen Ursprungs sind [69].

Tabelle 5.1: größenklassenabhängige Dichte des Staubes aus der Mastschweinehaltung nach [69]

Größenfraktion [μm]	Dichte [kg/m^3]
2,0 - 3,0	3840
3,0 - 4,0	1980
4,0 - 5,0	1730
5,0 - 7,5	1620
7,5 - 10,0	1740
10,0 - 15,0	1390
15,0 - 20,0	1210
> 20,0	1860

5.3 Verfahren zur Bestimmung des Koagulationskoeffizienten

In diesem Abschnitt wird das Verfahren zur Bestimmung der Koagulationskoeffizienten beschrieben. Ziel der Messungen ist es, den Koagulationskoeffizienten für verschiedene Aerosole zu messen. Hierzu wird zur Zeit $t = 0$ das zu untersuchende Aerosol mit der in Abschnitt 4.3 beschriebenen Dispergiereinheit in die Aerosolkammer¹ injiziert. Danach wird die zeitabhängige Partikelanzahlkonzentration größenklassenspezifisch im sechssekündlichen Rhythmus mit dem Aerosolspektrometer gemessen. Die Gesamtpartikelanzahlkonzentration N ändert sich wie in Abschnitt 3.3 und Abschnitt 3.4 dargestellt durch die Deposition und Koagulation der Partikel. Dieses Verhalten kann durch die Differentialgleichung [70]

$$\frac{dN}{dt} = -\beta \cdot N - K \cdot N^2 \quad (5.1)$$

beschrieben werden. β bezeichnet den Depositionskoeffizienten und K den Koagulationskoeffizienten. Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (5.1) berücksichtigt die Abnahme der Partikelanzahl durch Ablagerungen an den Wänden, der zweite Term stammt aus der Abnahme der Partikelanzahl durch Koagulation. Unter der Voraussetzung, dass β und K positiv und über die Zeit konstant sind, kann die Differentialgleichung (5.1) gelöst werden und es ergibt sich [71]:

$$N(t) = \frac{N_0 \cdot \beta}{(N_0 \cdot K + \beta) \exp(\beta t) - N_0 \cdot t} \quad (5.2)$$

In Gleichung (5.2) ist N_0 die Partikelanzahlkonzentration zur Zeit $t = 0$.

In [48] und [72] wird nachgewiesen, dass der Depositionskoeffizient β positiv und über die Zeit konstant ist, daher ist die erste Voraussetzung zur Lösung von Gleichung (5.1) erfüllt. Da die untersuchten Aerosole polydispers sind, setzt sich der in Gleichung (5.1) verwendete Koagulationskoeffizient aus den Koagulationskoeffizienten der Stöße zwischen Partikeln der einzelnen Größenklassen zusammen. Er kann durch die gewichtete Mittelwertbildung dargestellt werden als

$$K = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k K_{ij} f_i f_j. \quad (5.3)$$

In Gleichung (5.3) bezeichnet k die Anzahl der betrachteten Größenklassen, K_{ij} den Koagulationskoeffizienten für Partikel aus den Klassen i und j , und f_i und f_j den Anteil der Partikel der Klassen i und j an der Gesamtpartikelanzahlkonzentration. Da die Anteile der einzelnen Größenklassen an der Gesamtpartikelanzahlkonzentration zeitabhängig sind, ist die Zeitunabhängigkeit des Koagulationskoeffizienten im Allgemeinen nicht gegeben. In [70] und [73] wird jedoch gezeigt, dass die Annahme eines konstanten Koagulationskoeffizienten gerechtfertigt ist, solange der untersuchte Zeitraum nicht zu groß gewählt

¹beschrieben in Kapitel 4

5.3. VERFAHREN ZUR BESTIMMUNG DES KOAGULATIONSKOEFFIZIENTEN 75

wird. Der ermittelte Koagulationskoeffizient beschreibt dann allerdings nicht mehr eine Eigenschaft des Aerosols alleine, sondern hängt von der Partikelgrößenverteilung des untersuchten Aerosolgemisches ab [70].

In Abbildung 5.2 ist der Verlauf der relativen Anteile der einzelnen Größenfraktionen an

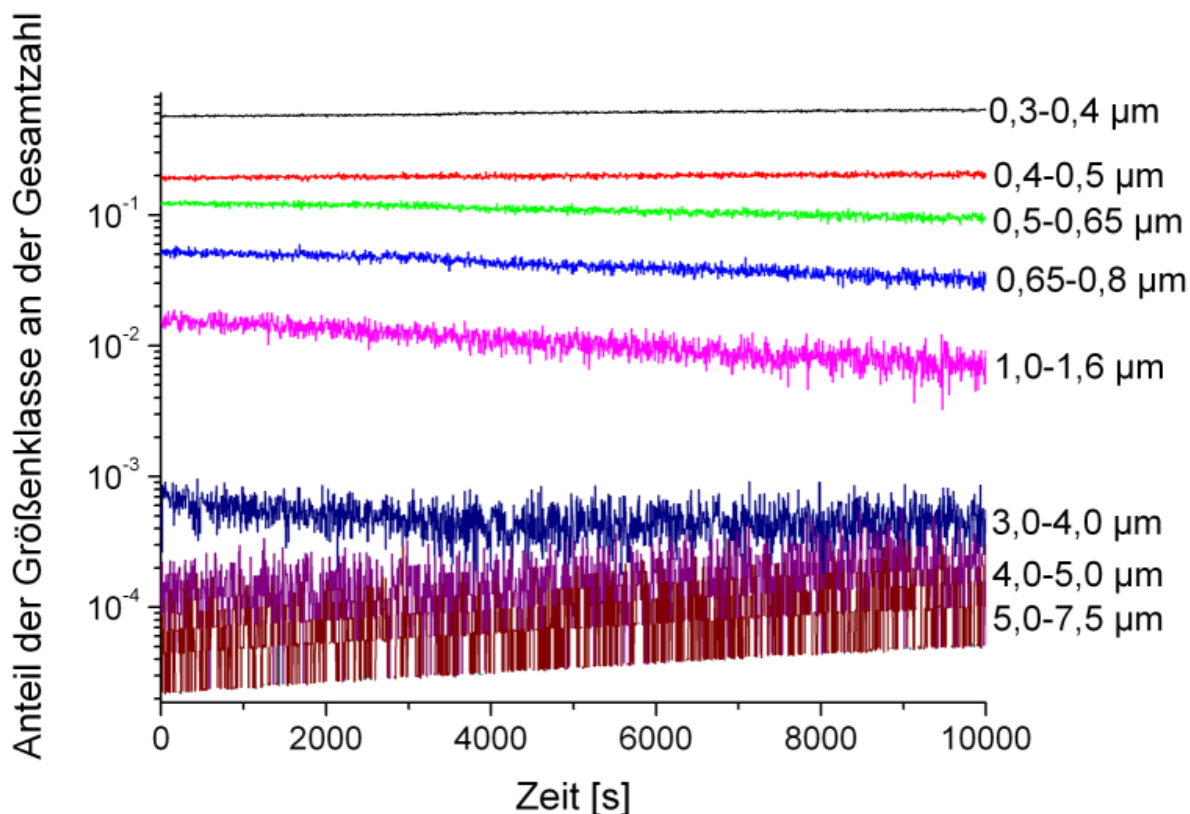


Abbildung 5.2: Verlauf der relativen Anteile der einzelnen Größenfraktionen an der Gesamtpartikelanzahl für Ulmer Weiss. Es sind nicht alle Größenfraktionen dargestellt, um die Übersichtlichkeit zu erhalten.

der Gesamtpartikelanzahl exemplarisch für Ulmer Weiss dargestellt. Dargestellt ist das Zeitintervall, in dem später auch die Kurvenanpassung durchgeführt wurde. Der Anteil der kleinsten Größenfraktion $0,3\text{-}0,4\ \mu\text{m}$ steigt während dieser Zeit von ungefähr 50 Prozent auf 55 Prozent. Auch die Anteile der anderen Größenfraktionen bleiben innerhalb eines Intervalls von maximal 15 Prozent konstant. Diese geringen Abweichungen rechtfertigen die Annahme einer gleichbleibenden Partikelgrößenverteilung bei der Bestimmung des Koagulationskoeffizienten. Damit ändern sich die absoluten Partikelzahlen in den einzelnen Größenklassen während des ersten Zeitintervalls, aber die relative Partikelanzahlverteilung der einzelnen Größenklassen bleibt in den oben beschriebenen Grenzen konstant. Die Parameter β und K wurden bestimmt, indem an den gemessenen zeitlichen Verlauf der Gesamtpartikelanzahlkonzentration eine Kurve mit dem funktionalen Zusammenhang (5.2) angepasst wurde. Die Ergebnisse der Untersuchungen werden in Abschnitt 5.5 vorgestellt.

5.4 Ergebnisse der Klimadatensensoren

In diesem Abschnitt sollen exemplarisch die Daten der Klimadatensensoren ausgewertet werden. In Tabelle 5.2 sind die Positionen der insgesamt neun Sensoren in der Versuchskammer aufgelistet. Es ist jeweils die Höhe der Position des Sensors über dem Boden und die Seite, an der er sich (links oder rechts) befindet, angegeben. Die DS1621 Sensoren messen ausschließlich die Temperatur, die SHT11 Sensoren ermitteln sowohl die Luftfeuchte als auch die Temperatur. Abbildung 5.3 zeigt den Verlauf der Temperatur während ei-

Tabelle 5.2: *Positionen der einzelnen Sensoren in der Versuchskammer*

Bezeichnung	Höhe [m]	Position
DS1621 1	4,0	links
DS1621 2	3,0	links
DS1621 3	1,5	links
DS1621 4	4,3	rechts
DS1621 5	2,5	rechts
DS1621 6	1,0	rechts
SHT11 1	3,5	rechts
SHT11 2	0,5	rechts
SHT11 3	2,5	links

ner Messung. Durch den in der Kammer befindlichen Ventilator wurde die Luft innerhalb des Versuchsraumes kontinuierlich verwirbelt. Daher konnte sich kein Temperaturgradient einstellen. Die Temperatur an den Orten aller Messsensoren stimmte innerhalb des Messfehlers von $\pm 0,5$ °C überein. In Abbildung 5.4 ist der Verlauf der relativen Luftfeuchte an den drei Messpositionen gezeigt. Auch hier ist kein signifikanter Unterschied der gemessenen Werte zu erkennen, solange der Ventilator eingeschaltet ist. Die relative Luftfeuchte stimmt innerhalb eines Intervalls von ± 2 % rH an allen Positionen überein. Des Weiteren wurden die Messwerte der Sensoren bei abgeschaltetem Ventilator in der Aerosolkammer untersucht. In Abbildung 5.5 ist der Verlauf der Temperatur dargestellt. Man erkennt eine Schichtung von unterschiedlich warmen Luftmassen innerhalb der Kammer, am oberen Rand der Kammer ist die Temperatur (Sensoren DS1621 1 und DS1621 4) am Höchsten, am unteren Rand der Kammer ist sie am Niedrigsten (DS1621 6). Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Kammer unisoliert ist und sich in einem thermischen Gleichgewicht mit der Luft ausserhalb der Versuchskammer befindet. Die warme Luft in der Halle steigt auf, es kommt zur Bildung eines Temperaturgradienten. Für die Verteilung der relativen Luftfeuchten innerhalb der Kammer konnte kein Anstieg der Luftfeuchte mit der Höhe innerhalb der Kammer ermittelt werden (siehe Abbildung 5.6).

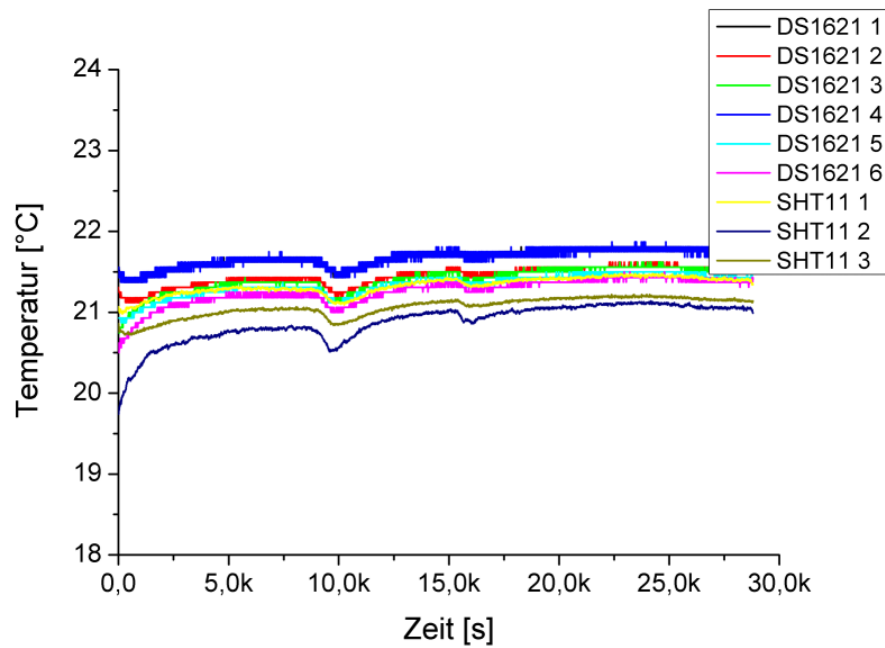


Abbildung 5.3: Temperaturverlauf mit der Zeit bei eingeschaltetem Ventilator

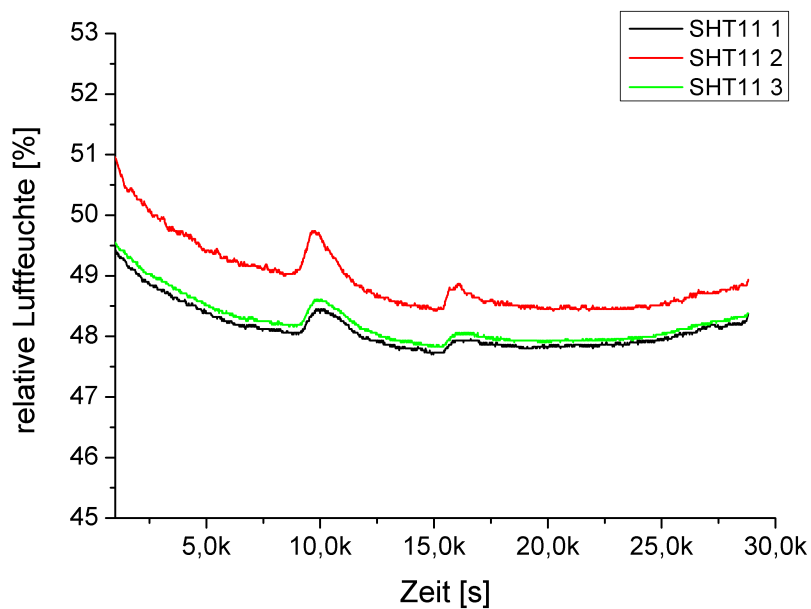


Abbildung 5.4: Verlauf der relativen Luftfeuchte mit der Zeit bei eingeschaltetem Ventilator

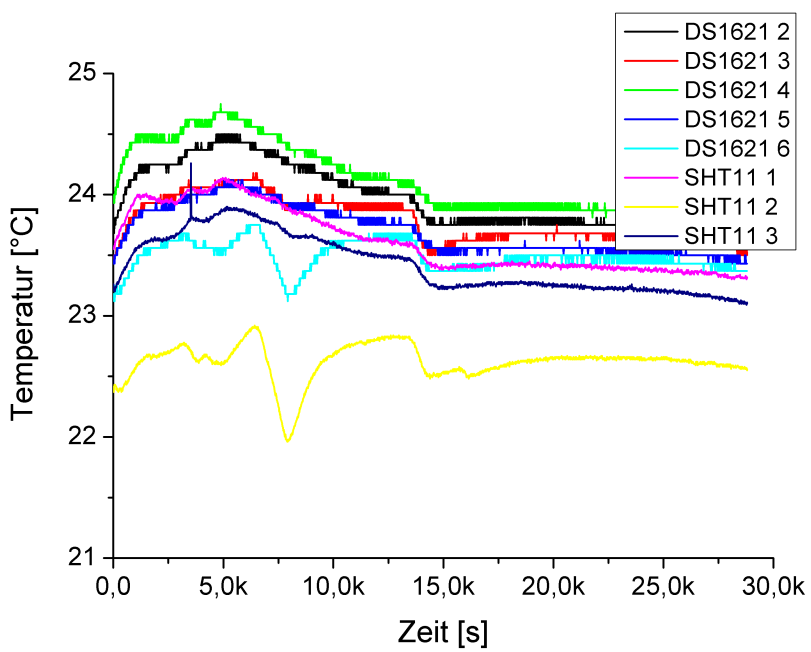


Abbildung 5.5: Temperaturverlauf mit der Zeit bei ausgeschaltetem Ventilator

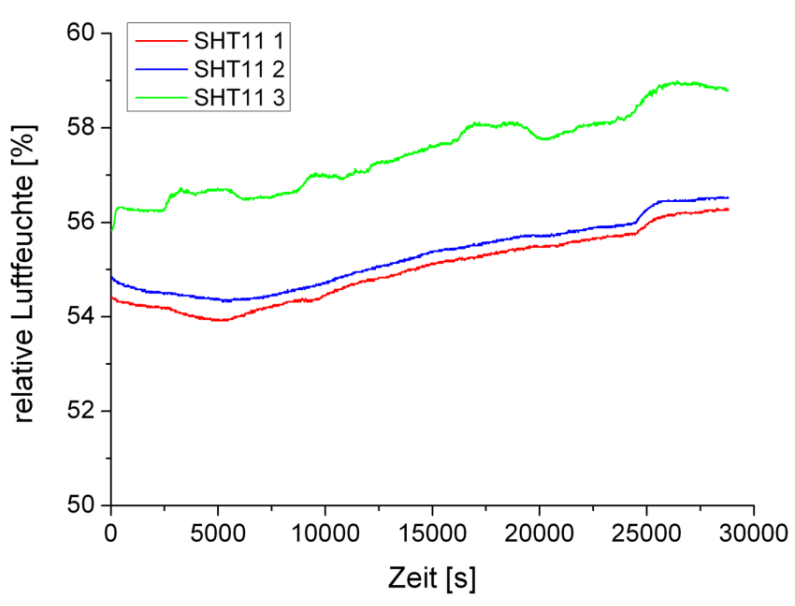


Abbildung 5.6: Verlauf der relativen Luftfeuchte mit der Zeit bei ausgeschaltetem Ventilator

5.5 Koagulationskoeffizienten

Die Koagulationskoeffizienten wurden für die verschiedenen Stäube unter zwei Voraussetzungen ermittelt. Zum Einen wurden die Messungen bei während der ganzen Messzeit eingeschaltetem Ventilator durchgeführt, zum Anderen wurde der Ventilator nur zu Beginn der Messung für fünf Minuten eingeschaltet. Dadurch wurde das eidosierte Aerosol gleichmäßig in der ganzen Kammer verteilt. Die eidosierte Aerosolmenge betrug bei allen Messungen ungefähr 150 mg. Die Messungen fanden bei einer Temperatur von 20-22 °C und einer relativen Luftfeuchte von 50-60 % statt.

5.5.1 Bestimmung der Koagulationskoeffizienten unter turbulenten Bedingungen

Ulmer Weiss

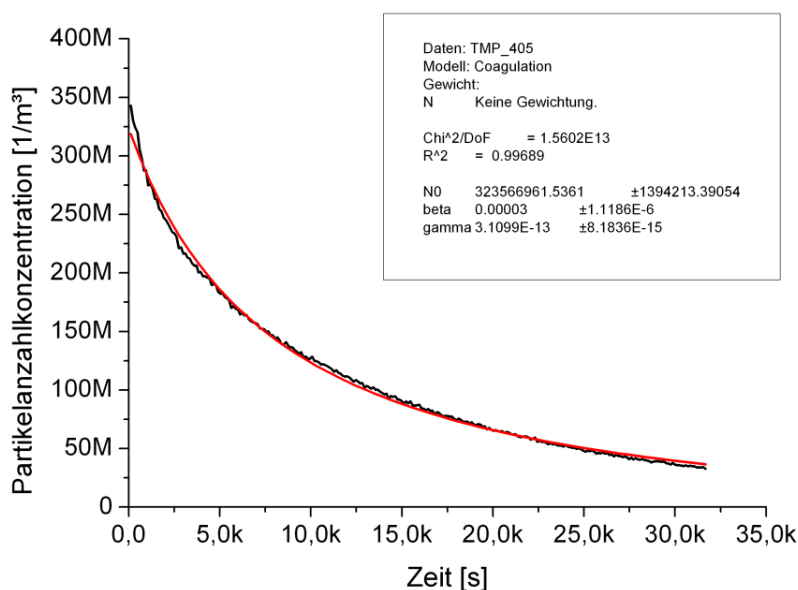


Abbildung 5.7: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Ulmer Weiss

In Abbildung 5.7 ist der zeitliche Verlauf der Partikelanzahlkonzentration für Ulmer Weiss dargestellt. Aufgetragen ist die Gesamtpartikelanzahlkonzentration gegen die Zeit bei eingeschaltetem Ventilator. Die Drehzahl betrug 2200 U/min. Zu erkennen ist der exponentielle Abfall der Gesamtpartikelanzahlkonzentration wie er von Gleichung (5.2) vorhergesagt wird. Aus wiederholten Messungen und Kurvenanpassungen an die Werte der ersten 10000 Sekunden der Messungen wurden die Parameter aus Gleichung (5.2) gewonnen. Die

Kurvenanpassung wurde in diesem Intervall durchgeführt, um eine konstante Partikelgrößenverteilung entsprechend Abschnitt 5.3 zu gewährleisten. Im Mittel ergaben sich dabei für Ulmer Weiss die folgenden Werte:

- $N_0 = (3,28 \cdot 10^8 \pm 2,64 \cdot 10^7) m^{-3}$
- $K = (3,21 \cdot 10^{-13} \pm 0,20 \cdot 10^{-13}) m^3/s$
- $\beta = (3,76 \cdot 10^{-5} \pm 7,16 \cdot 10^{-6}) 1/s$

Im nächsten Schritt werden diese Ergebnisse mit den Vorhersagen aus den theoretischen Überlegungen gemäß Kapitel 3 verglichen. Hierzu wurde der Mittelwert der Anteile der einzelnen Größenklassen an der Gesamtpartikelanzahl während der ersten 10000 Sekunden der Aufzeichnung gebildet. Diese Werte werden benötigt, um den theoretisch erwarteten Wert nach Gleichung (5.3) bestimmen zu können. Die Ergebnisse der Mittelwertbildung sind in Tabelle 5.3 zusammengefasst. Der Partikeldurchmesser wurde gleich dem Mittelwert der jeweiligen Größenklasse des Aerosolspektrometers gesetzt.

Tabelle 5.3: Anteil der einzelnen Größenfraktionen an der Gesamtpartikelanzahl für Ulmer Weiss

Partikeldurchmesser [μm]	Anteil
0,35	0,2901
0,45	0,2250
0,575	0,1313
0,725	0,0716
0,9	0,0806
1,3	0,0232
1,8	0,0483
2,5	0,0592
3,5	0,0286
4,5	0,0189
6,25	0,0154
8,75	0,0055
12,5	0,0022
17,5	0,0002
25	3,02E-05

Des Weiteren werden für die Berechnung des theoretischen Wertes nach Gleichung (3.42) noch die Energiedissipationsrate ϵ_d und die mittlere Windgeschwindigkeit v_f benötigt. ϵ_d wurde in Abschnitt 3.4.5.1 zu $29,77 m^2/s^3$ abgeschätzt, die mittlere Windgeschwindigkeit innerhalb der Versuchskammer wurde mit Hilfe eines Hitzedrahtanemometers durch die Mittelung der Werte an verschiedenen Positionen zu $(0,23 \pm 0,12) m/s$ bestimmt.

Der theoretisch erwartete Koagulationskoeffizient wurde durch Addition der durch die

Brownsche Koagulation K_{Brown} , der durch die turbulente Scherkoagulation K_{Shear} und der durch die Partikelträgheit $K_{acceleration}$ verursachten Koagulationskoeffizienten berechnet:

$$K_{total} = K_{Brown} + K_{shear} + K_{acceleration} \quad (5.4)$$

Hier ergibt sich mit den angesetzten Parametern ein Wert von $K_{total} = 3,07 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3/\text{s}$.

Ceroxid

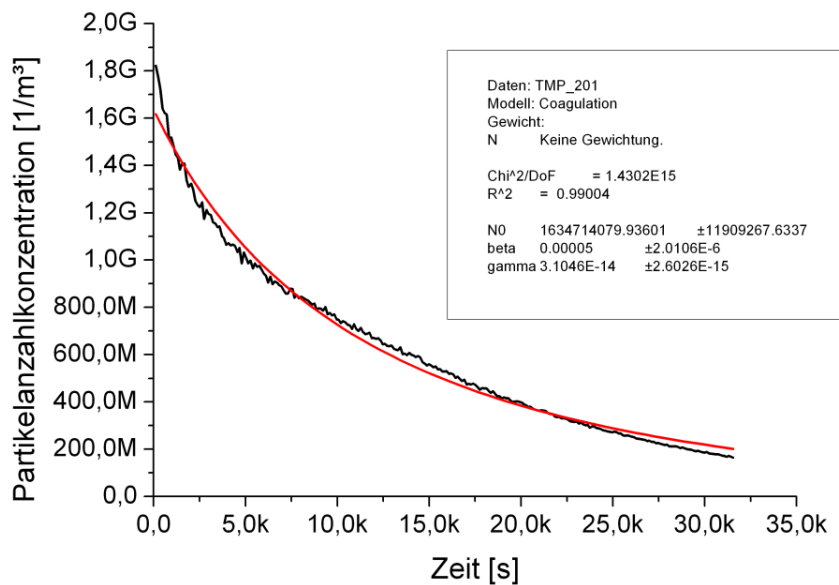


Abbildung 5.8: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Ceroxid

In Abbildung 5.8 ist die Konzentrationskurve für Ceroxid zu sehen. Sie folgt wieder wie von der Theorie vorhergesagt einem exponentiellen Abfall. Aus der Kurvenanpassung ergeben sich die Parameter

- $N_0 = (2,15 \cdot 10^9 \pm 7,28 \cdot 10^8) \text{ m}^{-3}$
- $K = (3,12 \cdot 10^{-13} \pm 1,69 \cdot 10^{-16}) \text{ m}^3/\text{s}$
- $\beta = (4,30 \cdot 10^{-5} \pm 5,71 \cdot 10^{-6}) \text{ 1/s}$.

Die zur Berechnung eines theoretischen Vergleichswertes notwendige Partikelgrößenverteilung kann Tabelle E.1 entnommen werden. Mit dieser kann wie im vorherigen Abschnitt beschrieben der erwartete Koagulationskoeffizient zu $K_{total} = 2,36 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3/\text{s}$ berechnet werden.

Arizonastaub

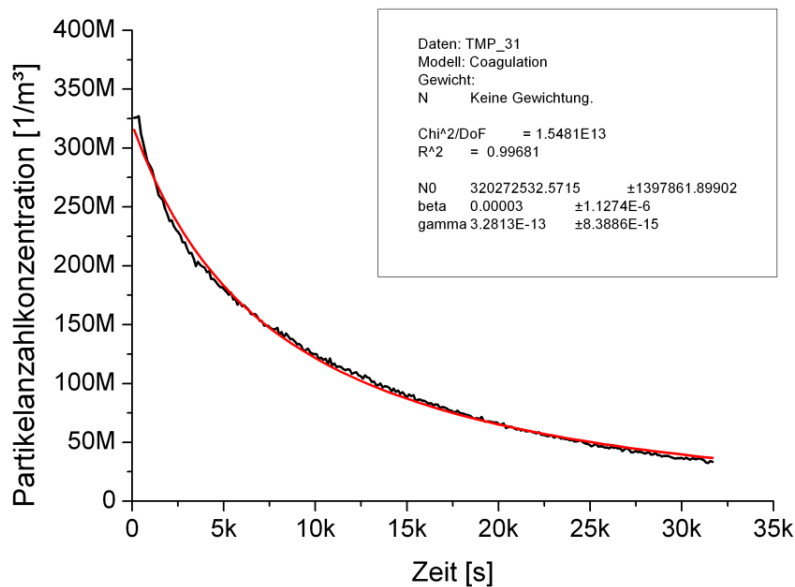


Abbildung 5.9: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Arizonastaub

Abbildung 5.9 zeigt das Ergebnis einer Kurvenanpassung an die Messkurve von Arizonastaub. Aus den Kurvenanpassungen ergeben sich die folgenden Fitparameter:

- $N_0 = (3,38 \cdot 10^8 \pm 5,56 \cdot 10^7) m^{-3}$
- $K = (3,05 \cdot 10^{-13} \pm 6,48 \cdot 10^{-14}) m^3/s$
- $\beta = (3,25 \cdot 10^{-5} \pm 2,67 \cdot 10^{-6}) 1/s$.

Mit Hilfe der in Tabelle E.2 zu findenden Größenverteilung lässt sich der erwartete Koagulationskoeffizient zu $K_{total} = 3,13 \cdot 10^{-13} m^3/s$ berechnen.

Tracerstaub

In Abbildung 5.10 ist der zeitliche Verlauf der Partikelanzahlkonzentration für den bei den Validierungsmessungen verwendeten Tracerstaub dargestellt. Die Kurvenanpassung lieferte für die Anfangskonzentration, den Koagulationskoeffizienten und den Depositionskoeffizienten folgende Werte:

- $N_0 = (3,79 \cdot 10^8 \pm 6,02 \cdot 10^7) m^{-3}$

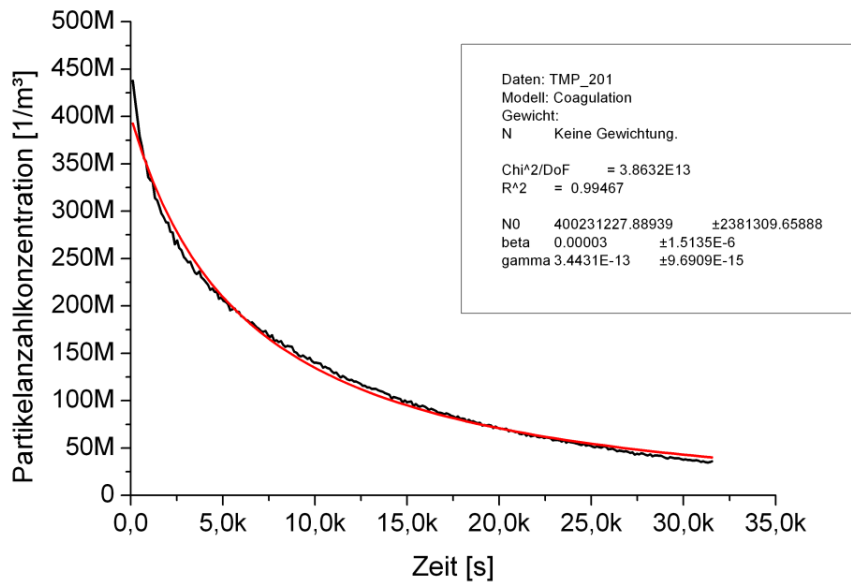


Abbildung 5.10: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Tracerstaub

- $K = (3,68 \cdot 10^{-13} \pm 1,06 \cdot 10^{-13}) \text{ m}^3/\text{s}$
- $\beta = (3,25 \cdot 10^{-5} \pm 5,30 \cdot 10^{-6}) \text{ 1/s}$.

Der berechnete theoretische Wert ergibt sich aus der in Tabelle E.3 angegebenen Größenverteilung zu $K_{total} = 2,80 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3/\text{s}$.

Staub aus der Tierhaltung

Abbildung 5.11 zeigt den Verlauf der Partikelanzahlkonzentration für den untersuchten Tierstaub aus der Mastschweinehaltung. Auch hier konnten die Fitparameter aus den Kurvenanpassungen extrahiert werden:

- $N_0 = (3,94 \cdot 10^8 \pm 1,97 \cdot 10^8) \text{ m}^{-3}$
- $K = (1,72 \cdot 10^{-13} \pm 1,19 \cdot 10^{-13}) \text{ m}^3/\text{s}$
- $\beta = (4,24 \cdot 10^{-5} \pm 0,44 \cdot 10^{-5}) \text{ 1/s}$.

Bei der Berechnung des theoretischen Vergleichswertes musste beachtet werden, dass nach [69] die Dichte der Partikel größenabhängig ist. Daher wurden die in Tabelle 5.1 ange-

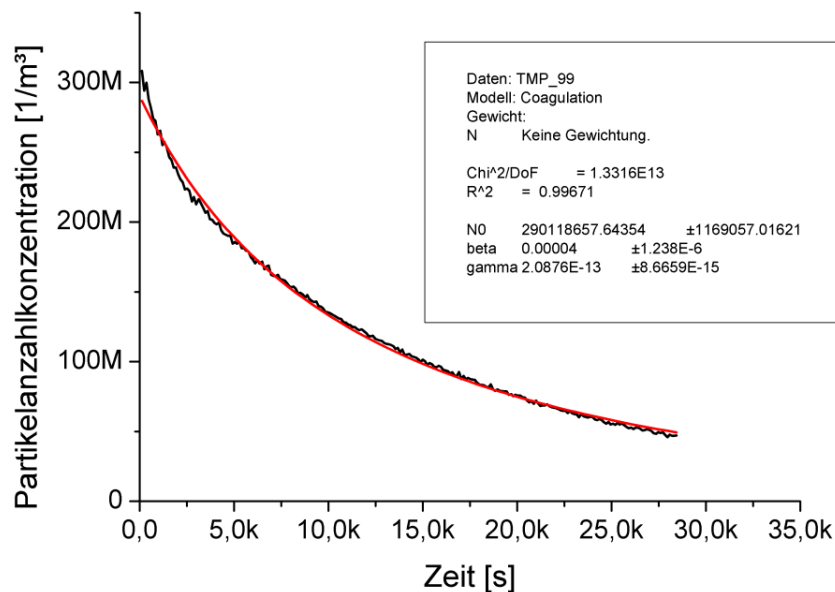


Abbildung 5.11: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Tierstaub aus der Schweinehaltung

gebenen Werte für die Dichte und die in Tabelle E.4 zusammengefasste Partikelgrößenverteilung zur Ermittlung des Vergleichswertes herangezogen. Es ergab sich ein Wert von $K_{total} = 1,28 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3/\text{s}$.

5.5.2 Bewertung der Ergebnisse unter turbulenten Bedingungen

Die Ergebnisse aus den Kurvenanpassungen stimmen bei Ulmer Weiss und Arizonastaub sehr gut mit den theoretischen Vorhersagen aus Kapitel 3 überein. Die Abweichung zwischen Experiment und Theorie beträgt 5 Prozent und 3 Prozent für Ulmer Weiss bzw. Arizonastaub. Bei Ceroxid, Tracerstaub und Schweinestaub ergeben sich größere Unterschiede zwischen den experimentellen und den theoretischen Werten. Sie stimmen aber immer noch innerhalb des Fehlers des experimentellen Wertes überein.

Bei der Bestimmung der theoretischen Werte zeigte sich, dass diese sehr sensitiv auf die zu Grunde gelegte Partikelgrößenverteilung reagieren. Im untersuchten Partikelradienintervall von ca. $0,2 \mu\text{m}$ bis ca. $10 \mu\text{m}$ steigt der durch turbulente Scherkoagulation verursachte Koagulationskoeffizient von ungefähr $1 \times 10^{-15} \text{ m}^3/\text{s}$ auf $5 \times 10^{-13} \text{ m}^3/\text{s}$, der durch die Partikelträgheit verursachte Koeffizient erhöht sich von $5 \times 10^{-14} \text{ m}^3/\text{s}$ auf $7 \times 10^{-11} \text{ m}^3/\text{s}$. Daher führt eine geringe Erhöhung des Anteils an größeren Partikeln bereits zu einer deutlichen Erhöhung des gemittelten Koagulationskoeffizienten.

5.5.3 Bestimmung der Koagulationskoeffizienten unter stationären Bedingungen

Um den Einfluss der turbulenten Bewegung in der Kammer abschätzen zu können, wurden weitere Messungen bei ausgeschaltetem Ventilator durchgeführt. Hierzu wurden wieder Kurvenanpassungen an die ermittelten Messkurven durchgeführt, Beispiele hierfür sind in Anhang F zu finden. Die Ergebnisse für die einzelnen Staubarten sind in Tabelle 5.4 zusammengefasst. Die Werte für die Koagulationskoeffizienten der einzelnen Staubarten

Tabelle 5.4: Fitparameter der Kurvenanpassungen unter ruhigen Bedingungen

Staubart	N_0 [$1/m^3$]	K [m^3/s]	β [$1/s$]
Ulmer Weiss	$(4,77 \pm 2,79) \times 10^8$	$(1,42 \pm 0,33) \times 10^{-13}$	$(2,40 \pm 3,30) \times 10^{-5}$
Ceroxid	$(1,83 \pm 0,56) \times 10^9$	$(0,48 \pm 0,16) \times 10^{-13}$	$(2,58 \pm 4,79) \times 10^{-5}$
Arizonastaub	$(3,03 \pm 1,57) \times 10^8$	$(1,32 \pm 0,24) \times 10^{-13}$	$(1,15 \pm 0,44) \times 10^{-5}$
Tracerstaub	$(1,70 \pm 0,52) \times 10^8$	$(3,51 \pm 0,50) \times 10^{-13}$	$(1,15 \pm 0,61) \times 10^{-5}$
Schweinstaub	$(3,40 \pm 2,33) \times 10^8$	$(0,76 \pm 0,08) \times 10^{-13}$	$(1,43 \pm 0,93) \times 10^{-5}$

liegen außer bei Tracerstaub unter denen, die unter turbulenten Bedingungen ermittelt wurden. Sie sind auf Werte, die maximal der Hälfte des unter turbulenten Bedingungen ermittelten Wertes entsprechen, gefallen. Aus der Theorie lässt sich die Erwartung ableiten, dass die Koagulationskoeffizienten auf einen Wert in der Größenordnung von $10^{-15} m^3/s$ abfallen sollten, da nur noch die Brownsche Koagulation zum Koagulationskoeffizienten beiträgt.

Die gemessenen höheren Werte sind unter der Annahme erklärbar, dass es in der Versuchskammer Bereiche unterschiedlicher Temperatur gibt. Diese können durch unterschiedlich warme Wände verursacht sein, da die Kammer nicht von der Umgebung isoliert war. Die unterschiedlich warmen Wände lassen sich durch die Ausrichtung der Kammer erklären. Die eine Seite der Kammer befand sich direkt an der Wand der Halle, während die andere Seite dem Sonnenlicht ausgesetzt war. Dies führt zu einer ungleichmäßigen Erwärmung der Wände und damit können Luftströmungen innerhalb der Kammer induziert werden. Bereits eine mittlere Windgeschwindigkeit von $v_f = 0,1 m/s$ bei einer Energiedissipationsrate von $\epsilon_d = 2 m^2/s^3$ führt für Ulmer Weiss zu einem erwarteten Koagulationskoeffizienten von $K_{total} = 1,22 \cdot 10^{-13} m^3/s$. Diese geringen Windgeschwindigkeiten sind mit dem verwendeten Hitzedrahtanemometer nicht messbar, hier liegt die untere Messschwelle bei ungefähr $0,1 m/s$, so dass dieser Erklärungsansatz im Rahmen dieser Arbeit nicht überprüft werden konnte.

5.6 Depositionskoeffizienten

Mit dem in Abschnitt 5.3 beschriebenen Verfahren lassen sich die Depositionskoeffizienten β auch größenklassenabhängig bestimmen, wenn an den zeitlichen Verlauf der Partikelanzahlkonzentration der einzelnen Größenfraktionen eine Funktion gemäß Gleichung

(5.2) angepasst wird. In Abbildung 5.12 ist der zeitliche Verlauf für einige Größenklassen von Ulmer Weiss exemplarisch dargestellt. An die einzelnen Kurven wurden für die verschiedenen Stäube Verläufe angepasst. Die Resultate werden in Abbildung 5.13 gezeigt.

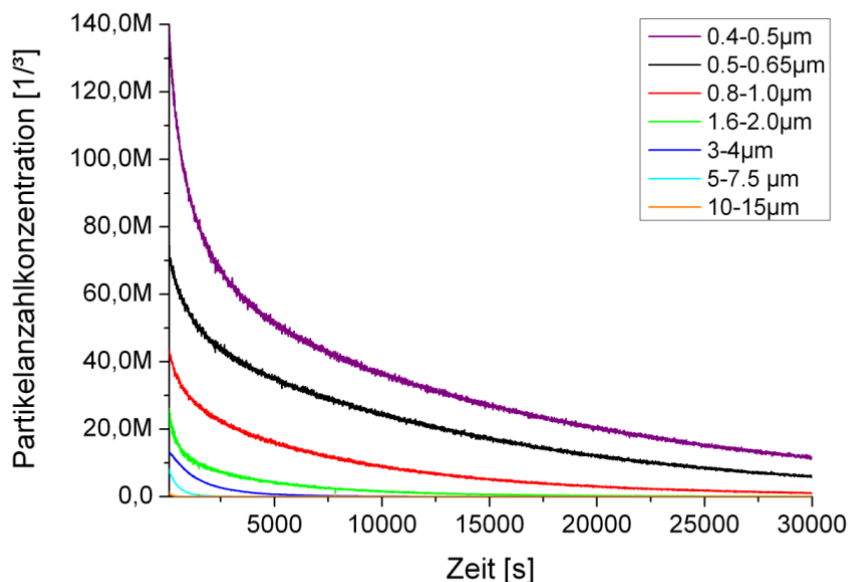


Abbildung 5.12: Größenklassenabhängige Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Ulmer Weiss. Um die Übersichtlichkeit zu erhalten, sind nicht alle Größenklassen dargestellt.

Aufgetragen ist in doppeltlogarithmischer Darstellung der Depositionskoeffizient β in Abhängigkeit des Partikelradius. Zum Vergleich ist auch der erwartete Kurvenverlauf nach Gleichung (3.11) für den Stoff mit höchster und geringster Dichte (Ceroxid und Ulmer Weiss) eingetragen. Für die übrigen Parameter in Gleichung (3.11) wurden die folgenden Werte gewählt:

- $y = 2$
- $k_e = 5,71/s$
- Temperatur $T = 295K$
- Viskosität $\nu = 18\mu Pa \cdot s$
- Dichte $\rho = 2740kg/m^3$ (Dichte von Ulmer Weiss) bzw. Dichte $\rho = 7100kg/m^3$ (Dichte von Ceroxid)
- $g = 9,81m/s^2$

Die Oberfläche und Höhe wurden aus den Abmaßen der Aerosolkammer berechnet, k_e wurde nach [38] gemäß der Gleichung $k_e = 0,4 \cdot \sqrt{2\epsilon_d/(10\nu)}$ berechnet. Die ermittelten

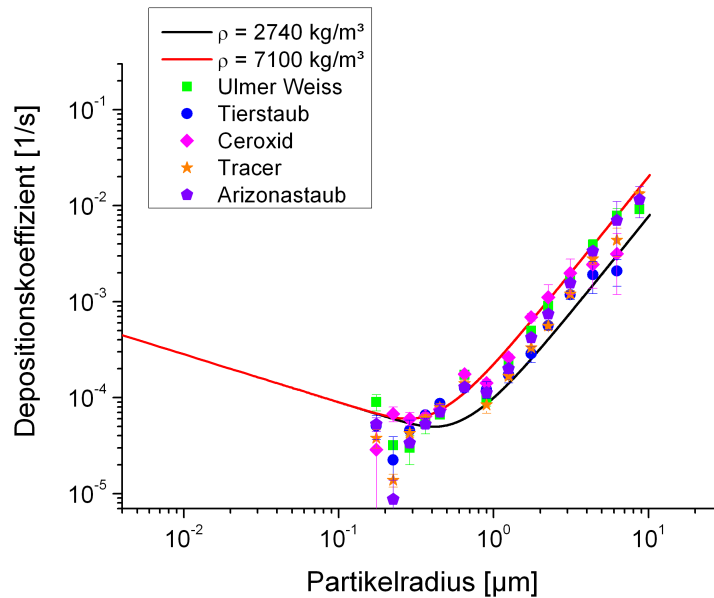


Abbildung 5.13: Depositionskoeffizient gegen den Partikelradius für die verschiedenen untersuchten Aerosole

Depositionskoeffizienten folgen dem theoretisch erwarteten Verlauf. Mit größer werdendem Radius steigen die gemessenen Depositionskoeffizienten beginnend mit einem Radius von ungefähr $0,5 \mu m$ an. Partikel mit Radien kleiner als 300 nm können bedingt durch den Messbereich des Aerosolspektrometers nicht nachgewiesen werden, daher konnte der Anstieg des Depositionskoeffizienten zu kleineren Partikelradien hin nicht untersucht werden. Insgesamt bestätigen die Ergebnisse, dass das gewählte Verfahren geeignet ist, die gesuchten Parameter zu bestimmen.

5.7 Bewertung der Ergebnisse

Es wurde gezeigt, dass mit der aufgebauten Aerosolversuchskammer die Koagulationskoeffizienten bestimmt werden können. Allerdings ist es nur möglich, den nach Gleichung (5.3) gemittelten Koagulationskoeffizienten für jede Staubart zu bestimmen. Eine Aufschlüsselung nach der Partikelgröße ist nicht möglich. Mit den ermittelten Koagulationskoeffizienten kann aber abgeschätzt werden, ob eine Implementierung des Koagulationseffektes in die Ausbreitungssimulation im Freiland außerhalb des Stallsystemes notwendig ist. Aus Tabelle 6.1 kann entnommen werden, dass während der zweiten Feldmessung im Mittel $133 \cdot 10^6$ Partikel/s emittiert wurden. Mit einem Volumenstrom (der gleich dem

Produkt aus Auslassfläche des Kamins und Abluftgeschwindigkeit ist) von $4,4 \text{ m}^3/\text{s}$ ergibt sich damit eine mittlere Partikelanzahlkonzentration von ungefähr 30 Millionen Partikel/ m^3 . Kommt es anschließend zu einer Verdünnung des Aerosols in der Außenluft von einem Faktor 100, so reduziert sich die mittlere Partikelanzahlkonzentration auf 300000 Partikel/ m^3 . Damit kann die Zahl der Stöße pro Volumen- und Zeiteinheit nach Gleichung (3.14) zu $300000/\text{m}^3 \times 300000/\text{m}^3 \times 3,5 \cdot 10^{-13} \text{m}^3/\text{s} = 0,003 \text{ Stöße}/(\text{m}^3 \text{ s})$ abgeschätzt werden. Diese Anzahl an Stößen ist so gering, dass eine Vernachlässigung der Koagulation bei der Ausbreitungssimulation gerechtfertigt erscheint. Zum Vergleich kommt es in der Aerosolversuchskammer bei einer anfänglichen Gesamtpartikelanzahlkonzentration von $3,28 \cdot 10^8 \text{ Partikel}/\text{m}^3$ zu $3,28 \cdot 10^8/\text{m}^3 \times 3,28 \cdot 10^8/\text{m}^3 \times 3,21 \cdot 10^{-13} \text{m}^3/\text{s} = 32000 \text{ Stöße}/(\text{m}^3 \text{ s})$. Im Falle einer Erweiterung des Ausbreitungsmodells STAR3D auf den Stallinnenraum kann daher bei Partikelanzahlkonzentrationen in der Größenordnung von einigen $100 \cdot 10^6 \text{ Partikel}/\text{m}^3$ eine Vernachlässigung der Koagulation nicht mehr begründet werden.

Aus diesem Grund wird die Koagulation bisher nicht in STAR3D berücksichtigt, ein möglicher Ansatz, die Koagulation während des Transmissionsgeschehens zu implementieren, wird in [74] vorgestellt und beruht auf der *direct simulation Monte Carlo method (DSMC)*. Dabei wird das Simulationsvolumen in Zellen eingeteilt und nur Zusammenstöße innerhalb der einzelnen Zellen werden betrachtet. Es wird über alle Zellen des Simulationsvolumens iteriert und in jeder Zelle wird ein zufälliges Paar von Partikeln ausgewählt, welches koagulieren soll. Anschliessend wird eine Wartezeit, die bis zur nächsten Koagulation in der Zelle vergehen soll, zufällig aus den Koagulationskoeffizienten der Partikel ermittelt. Ist die Summe aller Wartezeiten größer als die vorab eingestellte Zeitschrittweite der Simulation, so wird die Restzeit gespeichert und als Startzeit des nächsten Zeitschrittes in der Zelle verwendet und der Algorithmus wandert zur nächsten Zelle [75].

Die ermittelten größenklassengemittelten Koagulationskoeffizienten können in diesem Verfahren nicht verwendet werden, da die Wartezeiten von der Größenklasse bzw. von den jeweiligen Koagulationskoeffizienten der zusammenhaftenden Partikel abhängen. Hier ist es notwendig, die Koagulationskoeffizienten größenklassenspezifisch zu kennen. Um diese zu bestimmen, müssen die Ausgangsaerosole monodisperse sein. Die zur Verfügung stehenden Aerosole waren jedoch alle polydispers. Zur Weiterentwicklung des Versuchsaufbaus bietet es sich an, durch eine vorgeschaltete Größenselektion aus dem zu untersuchenden Aerosol ein monodisperses Gemisch zu machen. Ein Kaskadenimpaktor bietet die Möglichkeit, das zu untersuchende Aerosol vorab in seine Größenklassen aufzutrennen. Diese Verbesserungen sollen im Rahmen eines Nachfolgeprojektes, welches die Simulation der Aerosolkonzentrationen im Innenraum von Stallanlagen ermöglichen soll, integriert werden.

Kapitel 6

Validierung von STAR3D in Freilandmessungen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse von zwei Freilandmessungen zur Validierung von STAR3D vorgestellt. In Abschnitt 3.5 wurde gezeigt, dass STAR3D bezüglich der Sedimentation und Diffusion der Aerosolpartikel die erwarteten Ergebnisse liefert. Daher konnte STAR3D im nächsten Schritt zur Immissionsprognose in Freilandmessungen eingesetzt werden.

6.1 Erste Freiluftmessung

Um die Ausbreitungssimulation STAR3D zu evaluieren, wurde eine Freilandmessung durchgeführt. Ziel der Messung war es, die von STAR3D vorhergesagte deponierte Stoffmenge mit der durch ein Aerosoltracerverfahren detektierten Staubmenge zu vergleichen. Als Aerosoltracerverfahren wurde das ebenfalls in der Arbeitsgruppe entwickelte APMS [58] verwendet. Im folgenden Abschnitt soll der genutzte Versuchsaufbau einschließlich eines kurzen Überblicks über das APMS beschrieben werden.

6.1.1 Versuchsaufbau

Die erste Freiluftmessung fand am 29. September 2008 auf dem Versuchsgut Dikopshof der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn statt. Dieser Ort erlaubte es, sich frei und ungehindert im Gelände zu bewegen und die Position der Emissionsquelle und der Depositionsorte den herrschenden Windverhältnissen optimal anzupassen. Am Messtag betrug die Außentemperatur zur Messzeit 14,5 °C bei einer relativen Luftfeuchte von 67% und einem Luftdruck von 1028 mbar.

6.1.1.1 Versuchsgelände



Abbildung 6.1: Luftbildaufnahme des Versuchsgutes Dickopshof mit eingezeichneter Anordnung des Versuchsaufbaus

In Abbildung 6.1 ist eine Luftbildaufnahme des Versuchsgutes Dickopshof zu sehen. In der rechten unteren Ecke sind die Hofgebäude erkennbar. Am rechten Rand des Bildes ist die Wetterstation sichtbar. Der gezeigte Ausschnitt stellt den bei der Evaluierungsmessung nutzbaren Teil der Versuchsfelder dar. Da zum Zeitpunkt der Messung Wind aus nordwestlicher Richtung vorherrschte, wurde die Emissionsquelle (in Abbildung 6.1 als Kamin bezeichnet) in der nordwestlichen Ecke des Versuchsgeländes positioniert. In südöstlicher Richtung von der Emissionsquelle aus wurden die Messstellen zur Ermittlung der deponierten Partikelanzahl fächerartig aufgestellt. Hierbei befanden sich vier Messstellen auf dem Hauptstrahl. Diese hatten jeweils einen Abstand von 50 Metern zueinander. Auf den beiden Nebenstrahlen befanden sich jeweils 3 Messstellen, deren Abstand zueinander ebenfalls 50 Meter betrug. Der Öffnungswinkel zwischen zwei benachbarten Messstrahlen betrug $17,7^\circ$. Alle anderen Abstände der Messstellen zueinander sind in Abbildung 6.3(b) angegeben. Zur Aufzeichnung der Wetterdaten wurde die auf dem Versuchsgut befindliche stationäre Wetterstation genutzt. Diese liefert in minütlichem Abstand die aktuelle Windrichtung und Windgeschwindigkeit in einer Höhe von 2 Metern über dem Boden [76].

6.1.1.2 Depositionsstellen

Um die Tracerpartikel mit dem im nächsten Abschnitt vorgestellten APMS nachweisen zu können, müssen sie mit geeigneten Messstellen gesammelt werden. Bei den hier vorgestellten Freiluftversuchen wurden die Tracerpartikel auf polysinbeschichteten Objektträgern gesammelt [77]. Dabei handelt es sich um Objektträger mit den Maßen 75 mm x 25 mm, die mit einer Beschichtung versehen sind, an der die Aerosolpartikel sowohl elektrostatisch als auch chemisch gebunden werden. An jedem Messpunkt befand sich in einer Höhe von 50 cm eine auf einem Ständer befindliche Halterung, die jeweils zwei Objektträger aufnehmen konnte. Die Objektträger waren zusätzlich von einem Windschutz umgeben, der das Wiederaufwirbeln von bereits deponierten Aerosolpartikeln verhinderte.

6.1.1.3 APMS und Tracerstaub

Bei den im Folgenden vorgestellten Freiluftmessungen wurde der Tracerstaub BHA Visolite von General Electrics genutzt. Dieser basiert auf Calciumcarbonatpulver, welches mit einem Farbstoff markiert wurde. Dieser Farbstoff besitzt eine Anregungswellenlänge von 390-400 nm und emittiert Fluoreszenzlicht mit einer Wellenlänge von 590-650 nm. In Abbildung 6.2 ist zu sehen, dass die Partikelgrößenverteilung dieses Tracerstaubes in etwa der Größenverteilung eines typischen aus einer landwirtschaftlichen Anlage emittierten Staubes entspricht. Angegeben sind Partikelanzahlverteilungen von Visolite-Tracerstaub und einem Tierstaub. Dabei wurde die Anzahlverteilung des Tracerstaubes mit einem APS¹ sowie mit einem optischen Partikelzähler (OPC) ermittelt. Da keine relevanten Kreuzempfindlichkeiten bekannt sind [58], ist der gewählte Tracerstaub geeignet, um das Ausbreitungsgeschehen aus einer landwirtschaftlichen Anlage zu validieren.

Die Abkürzung APMS bezeichnet das **Aerosol Particle Measurement System**. Hierbei handelt es sich um ein Messsystem zur Untersuchung von an Oberflächen anhaftenden Aerosolpartikeln [77]. Dieses basiert auf einer in drei Dimensionen über einer Oberfläche positionierbaren Optik, so dass die auf der Oberfläche haftenden Partikel abgebildet werden. Zur Beleuchtung können zwei verschiedene Lichtquellen eingesetzt werden. Dabei handelt es sich zum einen um eine Weisslicht-LED. Mit dieser werden alle an der Oberfläche haftenden Partikel sichtbar gemacht. In einem zweiten Schritt kann die Oberfläche mit einer UV-LED beleuchtet werden. Bei Verwendung eines geeigneten Tracerstaubes kann dessen Fluoreszenz angeregt werden, so dass nur die Tracerstaubpartikel detektiert werden [77]. Die gewonnenen Abbildungen werden zwischengespeichert und einer sich anschließenden Auswertung zugeführt.

Diese basiert auf der frei verfügbaren Grafikbibliothek OpenCV [78] und gliedert sich im Wesentlichen in vier Schritte:

Nach einer Vorprozessierung der Bilder, während derer die Bilder, auf denen sich Tracerpartikel befinden, selektiert werden, findet eine Segmentierung der Bilder statt. Im nächsten Schritt werden die zusammenhängenden Gebiete als Partikel erkannt und deren Äquivalentfläche und -radius wird berechnet [77]. Abschließend wird eine nach Größen-

¹engl.: aerodynamic particle sizer,

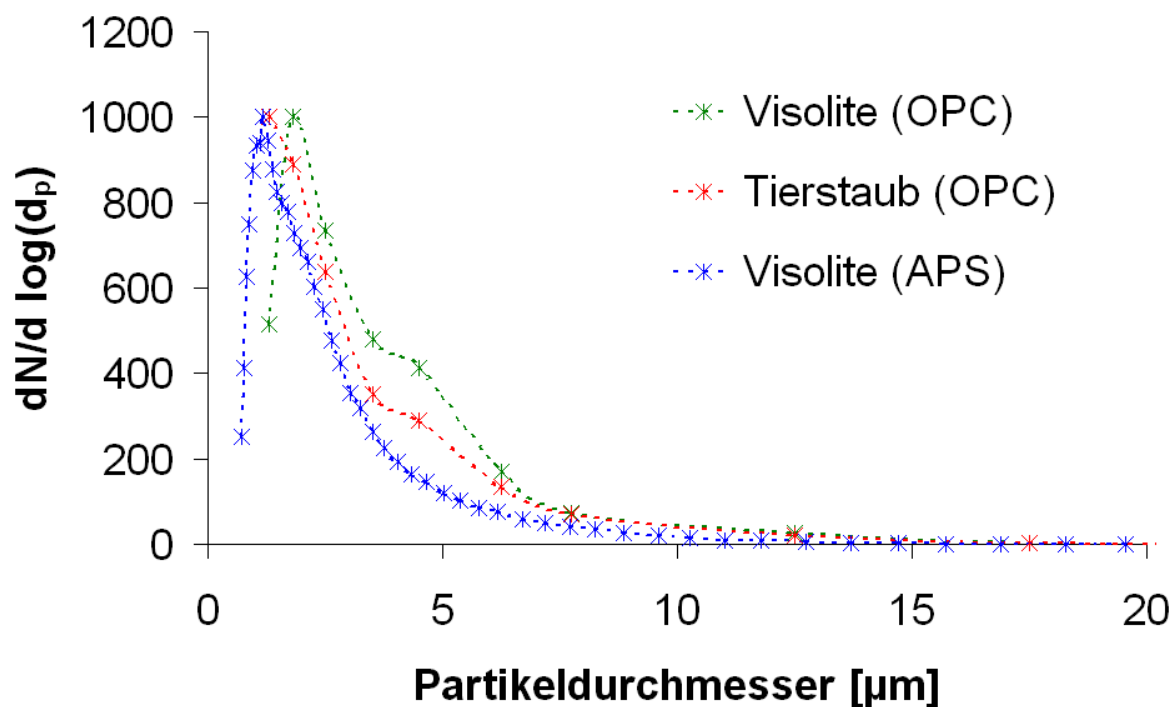


Abbildung 6.2: Vergleich des Tracerstaubes mit einem typischen landwirtschaftlichen Staub [58]

klassen aufgeschlüsselte Partikelanzahlverteilung der auf dem Objektträger befindlichen Tracerpartikel erstellt. Diese Verteilung kann im Anschluss mit den von der Ausbreitungssimulation vorhergesagten Werten verglichen werden. Eine detaillierte Beschreibung des APMS kann unter [58] gefunden werden.

6.1.1.4 Emissionsquelle

Um die Aerosolpartikel freizusetzen, wurde ein mobiler Abluftkamin konstruiert. Dieser bestand aus Abluftrohren mit einem Innendurchmesser von 90 cm und einer Gesamtlänge von 5 Metern, die senkrecht auf einem Anhänger montiert waren. Zusammen mit der Anhängerhöhe von 1,5 Metern ergibt sich somit eine Höhe des Emissionspunktes von 6,5 Metern über dem Boden. Zur Erzeugung eines Abluftstromes befand sich innerhalb des Abluftkamines ein Axialventilator, der einen kontinuierlichen Luftstrom mit einer Luftgeschwindigkeit von 10 m/s erzeugte. Die Abluftgeschwindigkeit wurde mit Hilfe eines innerhalb des Abluftrohres befindlichen Messventilators ermittelt. Der Tracerstaub wurde manuell in den Abluftkamin eingebracht. Der Partikelstrom wurde durch ein am oberen Auslass des Abluftkamines befindliches Aerosolspektrometer des Modells 1.108 der Firma Grimm sekundärgrößenfraktioniert aufgezeichnet. Hierdurch ist es möglich, für die nachfolgende Simulation des Ausbreitungsgeschehens den Emissionspartikelstrom zu

berechnen.

6.1.1.5 Simulation

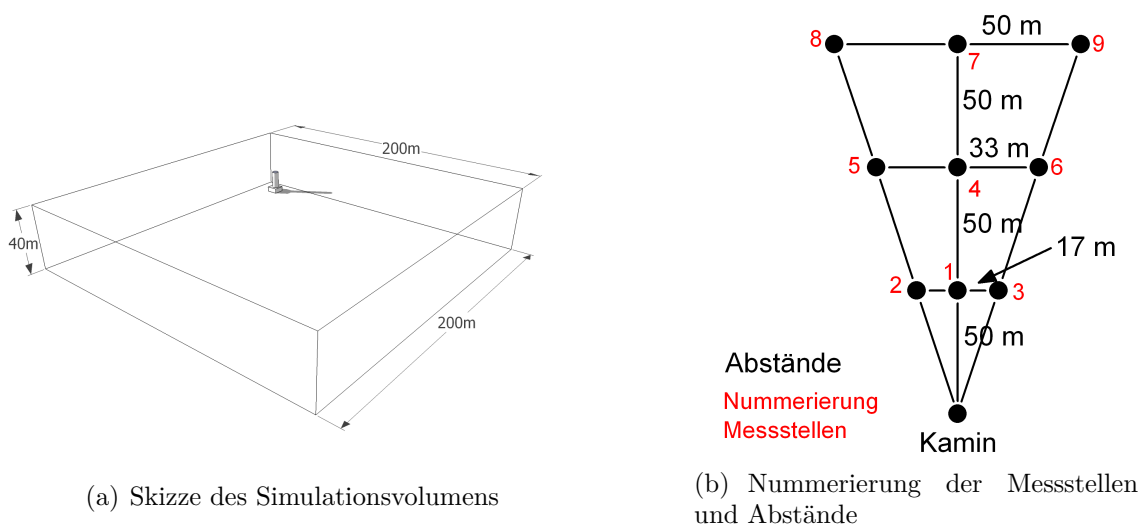


Abbildung 6.3: Simulationsvolumen und Nummerierung der Messstellen

Im Anschluss an die Messung wurde das Ausbreitungsgeschehen mit STAR3D simuliert. Hierzu wurde zur Berechnung des Windfeldes ein $200\text{ m} \times 200\text{ m} \times 40\text{ m}$ großes Volumen definiert und die Gitterweite von einem Meter vorgegeben. Dementsprechend wurde das Strömungsfeld auf insgesamt 1,6 Millionen Zellen berechnet. Innerhalb des Simulationsvolumens wurde der Abluftkamin als einziges Hindernis platziert (siehe Abbildung 6.3(a)). Da während der Messung der Wind aus nordwestlicher Richtung wehte, wurden auf der „nördlichen“ und „westlichen“ Begrenzung des Simulationsvolumens die Einströmbedingungen des Fluids durch das zum jeweiligen Zeitpunkt herrschende Windfeld definiert. Hierbei trat die Schwierigkeit auf, dass die Wetterstation das Windfeld nur im 60 Sekundentakt aufzeichnen konnte, die Ausbreitungssimulation STAR3D aber sekundliche Werte benötigt. Um diese Bedingung zu erfüllen, wurde das einströmende Windfeld jeweils für 60 Sekunden als konstant, dem gemessenen Wert entsprechend angenommen.

Nach der Berechnung der Windfelder wurde im nächsten Schritt die Bewegung der Traceraerosolpartikel simuliert. Hierzu wurden Aerosolpartikel am Ort der Emissionsquelle freigesetzt und ihre Bahnen berechnet. Abbildung 6.4 zeigt, dass die Anzahl der pro Zeitschritt der Simulation freizusetzenden Partikel in den verschiedenen Größenklassen sehr unterschiedlich ist. Daher konnten nicht die Trajektorien aller Aerosolpartikel berechnet werden, da dies den Rahmen des im Computersystem zu Verfügung stehenden Speicherplatzes überschritten hätte. Stattdessen konnten nur für einen vorab festgelegten Bruchteil der Partikel jeder Größenklasse die Bahnen berechnet werden. Dieses Vorgehen ist bei der Nutzung von Lagrangemodellen üblich und wird z.B. auch von AUSTAL2000 eingesetzt [29]. Dieser „Untersetzungsfaktor“ wurde für jede Größenklasse individuell festgelegt. Er wurde so gewählt, dass der Mittelwert der in der Größenklasse pro Zeitschritt emittier-

ten Partikelanzahl in allen Größenklassen annähernd gleich groß ist und dass genügend Speicherplatz für die während der gesamten simulierten Zeitspanne zu speichernden Partikeldata zur Verfügung steht.

6.1.2 Ergebnisse der ersten Freiluftmessung

6.1.2.1 Emissionsstrom

In Abbildung 6.4 ist die mit dem Aerosolspektrometer Grimm Modell 1.108 gemessene zeitaufgelöste Partikelverteilung am Austritt der Emissionsquelle zu sehen. Dargestellt ist die in jeder Größenfraktion pro Sekunde emittierte Partikelanzahl in Abhängigkeit von der Zeit. Hierfür wurde die vom Aerosolspektrometer ermittelte Partikelanzahl (Partikelanzahl je 1,2 Liter Probenluft) mit Hilfe der gemessenen Abluftgeschwindigkeit (10 m/s) und dem bekannten Kamindurchmesser (90 cm) in die pro Sekunde emittierte Partikelanzahl umgerechnet. Die vom Aerosolspektrometer gemessene Partikelzahl setzt sich aus der Anzahl der emittierten Tracerpartikel sowie der Anzahl der Hintergrundpartikel zusammen, da das Aerosolspektrometer nicht zwischen den beiden „Partikeltypen“ unterscheiden kann. Um den Einfluss der Hintergrundpartikel auf das Messergebnis des im Kamin befindlichen Aerosolspektrometers abschätzen zu können, wurde ein weiteres Aerosolspektrometer auf der windabgewandeten Seite des Versuchsgeländes positioniert. Als Hintergrundkonzentration ergab sich im Mittel eine Gesamtpartikelanzahl (Summe aller Größenklassen) von (399186 ± 11684) Partikel/s (siehe Anhang B). Diese geringe Partikelanzahl kann gegen die emittierte Partikelanzahl, die in der Größenordnung von einigen Milliarden Partikel/s lag, vernachlässigt werden. Eine Korrektur der im Kamin gemessenen, emittierten Gesamtpartikelanzahl um die Hintergrundanzahl wurde deshalb nicht durchgeführt.

Deutlich zu erkennen sind die Zeitpunkte, an denen die Person, welche den Tracerstaub in den Luftstrom eindostert, wechselt (nach ca. 500, 1800 und 3300 Sekunden). Durch diese unterschiedlich starke Beschickung des Abluftstromes ist der Emissionspartikelstrom sehr variabel. Dies macht ebenfalls Tabelle 6.1 deutlich. Für jede Partikelfraktion sind der Minimal- und Maximalwert der Partikelanzahl sowie der Mittelwert und die Standardabweichung angegeben. Die emittierte Partikelanzahl schwankt zwischen 25 Mrd. und 0 Partikeln. Diese große Schwankungsbreite führt bei der Simulation des Ausbreitungsgeschehens zu Schwierigkeiten, da die Untersetzungsfaktoren sehr groß gewählt werden mussten. In Tabelle 6.2 sind die für die einzelnen Größenklassen, die im Folgenden als Größenklassen 1 - 8 bezeichnet werden, zusammengefasst. Die entsprechenden Untersetzungsfaktoren schwankten zwischen einer Million und 10000.

6.1.2.2 Windfeld

In Abbildung 6.5(a) und 6.5(b) sind die Verteilungen von Windgeschwindigkeit und Windrichtung während des Messzeitraumes von einer Stunde dargestellt. Da die Wetterstation

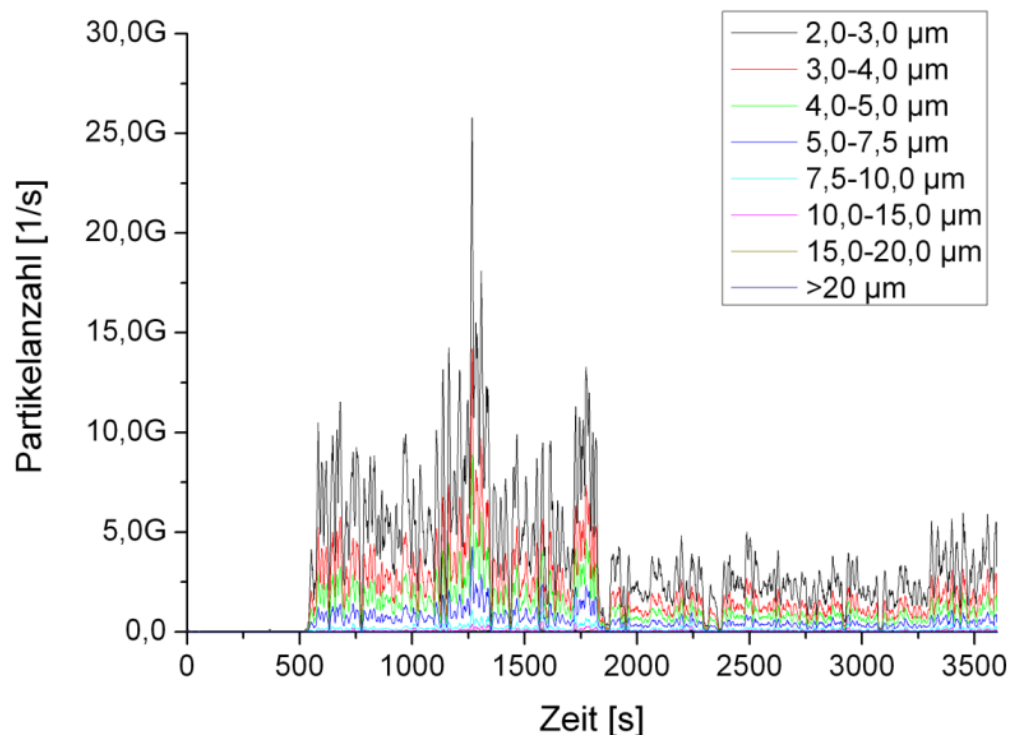


Abbildung 6.4: Mit dem Aerosolspektrometer gemessene Partikelverteilung am Austritt der Emissionsquelle

wie in Abschnitt 6.1.1 beschrieben nur minütlich Informationen zu Windgeschwindigkeit und -richtung lieferte, bestehen beide Histogramme aus 60 Einträgen. Die mittlere Windgeschwindigkeit betrug $(4,52 \pm 0,45)$ m/s und die Hauptwindrichtung war west-nordwest. Die Wetterstation lieferte keine Informationen über die vertikale Windgeschwindigkeit (Fallwinde), so dass diese in der Simulation auf 0 m/s gesetzt wurde.

6.1.2.3 prognostizierte Immission

Im Anschluss an die Feldmessung wurde das Ausbreitungsgeschehen mit Hilfe der Software STAR3D simuliert. In Abbildung 6.6 ist die von STAR3D prognostizierte, auf dem Boden des Simulationsvolumens deponierte Partikelanzahl dargestellt. Aufgetragen ist die je Quadratmeter erwartete Gesamtpartikelanzahl (Summe aller Größenklassen). Hierbei wurde die in jeder Größenklasse erwartete Partikelanzahl bereits mit dem jeweiligen, größenklassenspezifischen Umsetzungs faktor multipliziert, um einen Vergleich mit der mit dem APMS gemessenen Partikelanzahl zu ermöglichen. Eingezeichnet sind weiterhin die Emissionsquelle sowie die Lage der neun Messstellen. Klar erkennbar ist, dass sich die Tracerpartikelwolke in östlicher Richtung bewegte, da die immittierten Partikel in dieser

Tabelle 6.1: Statistische Auswertung der Partikelanzahl am Austrittsort (erste Feldmessung)

Größenklasse	Minimum $\times 10^6$	Maximum $\times 10^6$	Mittelwert $\times 10^6$	Standardabw. $\times 10^6$
2,0-3,0 μm	0	25787	3461	3111
3,0-4,0 μm	0	14211	1792	1623
4,0-5,0 μm	0	8882	1097	991
5,0-7,5 μm	0	4283	525	475
7,5-10,0 μm	0	1102	141	136
10,0-15,0 μm	0	503	53	60
15,0-20,0 μm	0	163	14	18
>20,0 μm	0	106	7	10

Tabelle 6.2: Untersetzungsfaktoren der einzelnen Größenklassen bei der ersten Feldmessung

Größenklasse	Durchmesser	Untersetzung
1	2,0-3,0 μm	1000000
2	3,0-4,0 μm	1000000
3	4,0-5,0 μm	100000
4	5,0-7,5 μm	100000
5	7,5-10,0 μm	100000
6	10,0-15,0 μm	10000
7	15,0-20,0 μm	10000
8	>20,0 μm	10000

Richtung abgelagert sind. Die beiden oberen Messstrahlen liegen innerhalb des Bereiches, in dem die meisten Partikel deponiert wurden, während der dritte Messstrahl (Messstellen 3, 6 und 9) ausserhalb des Depositionsgebietes liegt. Die maximal je Quadratmeter immittierte Partikelanzahl liegt bei 19,1 Millionen Partikeln, die minimale Partikelanzahl beträgt an den Rändern des Simulationsgebietes null Partikel. Um den Fehler auf die durch die Ausbreitungssimulation prognostizierten Immissionswerte zu ermitteln, wurde der zweite Teil der Simulation des Ausbreitungsgeschehens (Berechnung der Partikeltrajektorien) mit den jeweils gleichen Parametern zwölfmal durchgeführt. Eine mehrfache Berechnung des Windfeldes wurde nicht durchgeführt, da dieser Teil der Simulation schon in [3] ausgiebig untersucht worden war. Weiterhin hätte eine mehrfache Berechnung des Windfeldes den zeitlichen Rahmen gesprengt, da sie jeweils ungefähr drei Monate in Anspruch genommen hätte.

Aus den so gewonnen Depositionsverteilungen wurde für jede Zelle der Depositionsfläche der Mittelwert und die Standardabweichung für die aus den einzelnen Größenklassen deponierten Partikel berechnet. Der Fehler wurde dann mittels

$$\Delta N_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^8 (\Delta N_{ijk} \cdot U_k)^2} \quad (6.1)$$

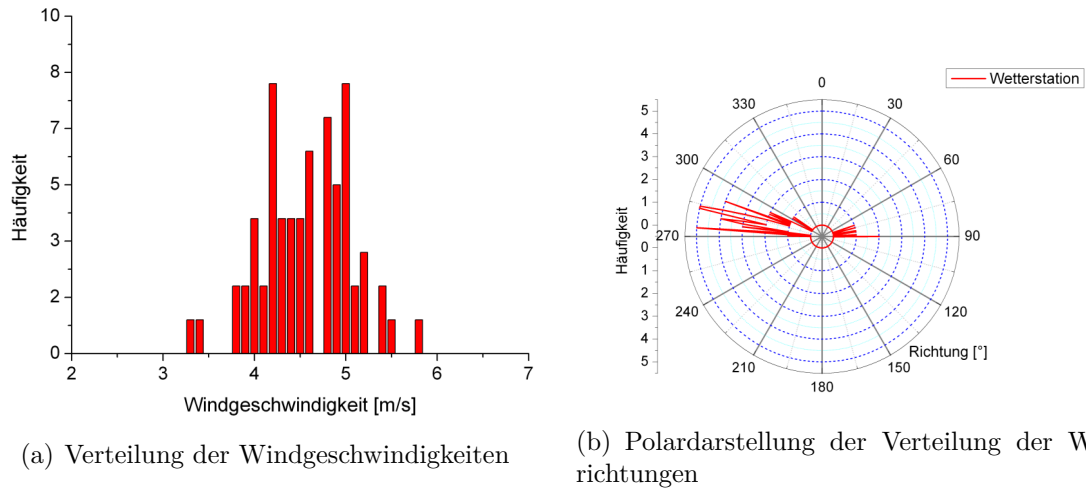


Abbildung 6.5: Windverteilung bei der ersten Feldmessung im September

berechnet. Dabei bezeichnet ΔN_{ij} den Fehler auf die Partikelanzahl in der Zelle mit dem Spaltenindex i und dem Zeilenindex j und ΔN_{ijk} den Fehler auf die Partikelanzahl in der Größenklasse k in Zelle i, j und U_k das Untersetzungsverhältnis für die k -te Größenklasse. In Abbildung 6.7(a) und 6.7(b) ist der Fehler der von STAR3D vorhergesagten Partikelimmission zu sehen. Der absolute Fehler ist in Abbildung 6.7(a) dargestellt, während Abbildung 6.7(b) den relativen Fehler, bezogen auf die in der jeweiligen Zelle deponierte Partikelanzahl, zeigt. Der relative Fehler steigt zu den Rändern des Gebietes, in dem die Partikeldeposition vorhergesagt wird, deutlich an. Dieser Effekt wird dadurch erklärt, dass die deponierte Partikelanzahl an den Rändern geringer wird und damit der relative Fehler zunimmt. An den Rändern des Simulationsgebietes (in Abbildung 6.7(b) rot dargestellt) sind keine deponierten Partikel von der Ausbreitungssimulation vorhergesagt worden. Daher wurde hier der relative Fehler auf den Wert null gesetzt. Der relative Fehler liegt in Regionen mit großer Partikeldeposition in der Größenordnung von 20 % bis 30 % und steigt in den Bereichen mit geringerer Partikeldeposition auf 80-100 % an.

6.1.2.4 Vergleich der prognostizierten mit der gemessenen Partikelimmission

Um eine Aussage über die Zuverlässigkeit der durch STAR3D gemachten Prognosen machen zu können, wurde an den Orten der Messstellen die mit dem APMS gemessenen Partikelzahlen mit den von STAR3D vorhergesagten Werten verglichen. Das Ergebnis dieses Vergleichs ist in Abbildung 6.8 dargestellt. Für alle neun Messstellen ist die jeweils gemessene und vorhergesagte Partikelanzahl als Balkendiagramm aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass die von STAR3D prognostizierten Werte systematisch deutlich höher liegen als die vom APMS ermittelten Werte. Um diesen Effekt weiter zu untersuchen, wurde für alle Messstellen das Verhältnis aus prognostiziertem und gemessenen Immissionswert gebildet. Die Werte sind in Tabelle 6.3 dargestellt. Das Verhältnis liegt für alle Messstellen mit Ausnahme von Messstelle 3 zwischen den Werten 5 und 7. Dieses Er-

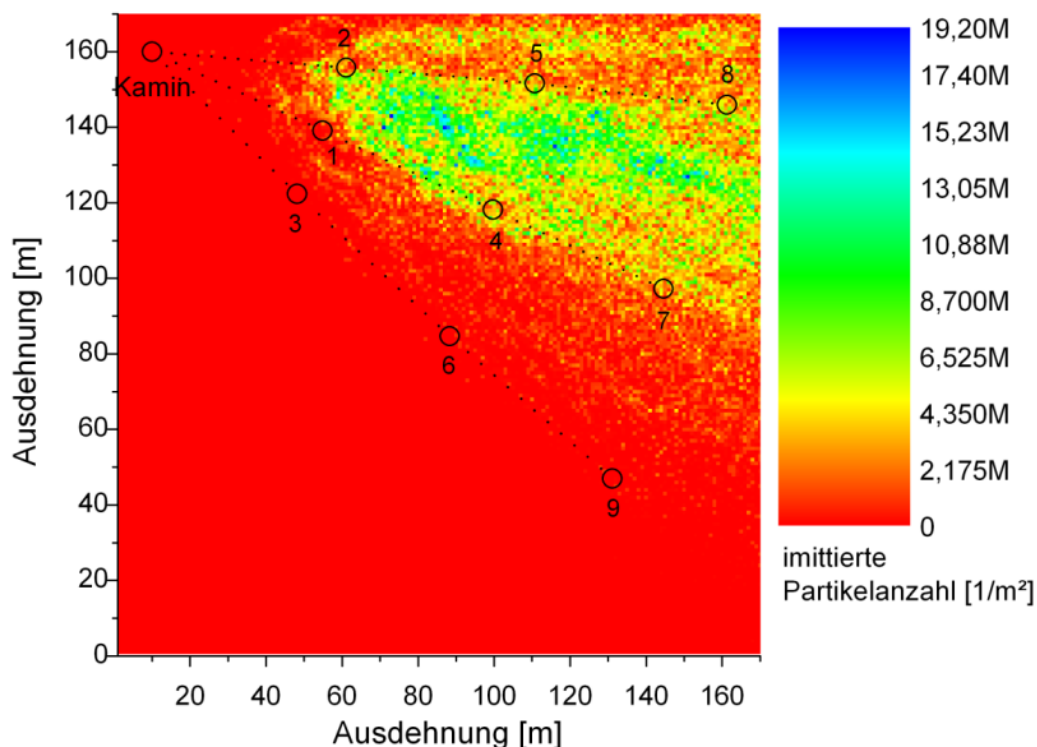


Abbildung 6.6: Partikelimmission, wie sie von der Ausbreitungssimulation STAR3D prognostiziert wurde

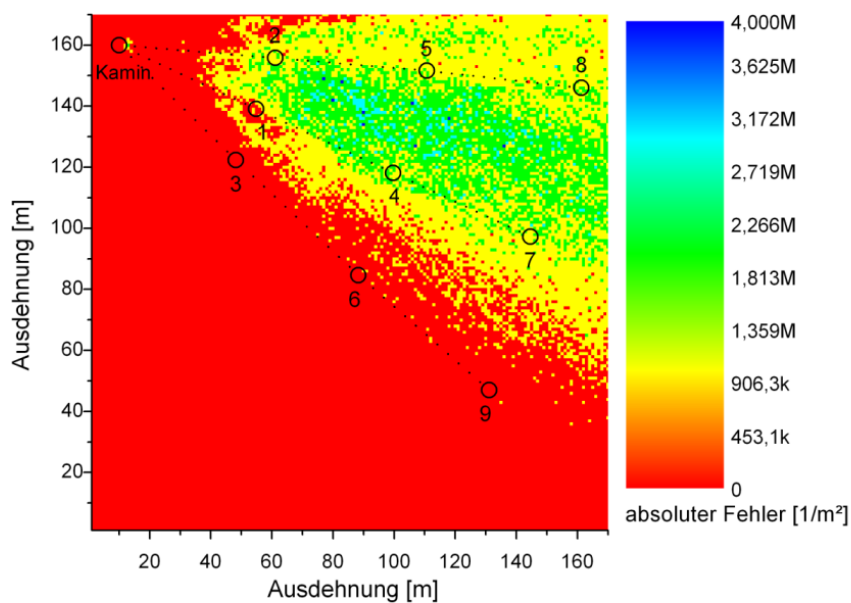
gebnis legt die Vermutung nahe, dass es sich um einen systematischen Fehler handelt. In Abbildung 6.9 sind die Ergebnisse für die Messstellen nochmals dargestellt, wobei die Ergebnisse aus der Simulation mit dem mittleren Verhältnis Simulation/Messung von 5,8 herunterskaliert wurden. Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Mess- und Simulationsergebnis mit Ausnahme der bereits erwähnten Messstelle 3.

6.1.2.5 Fazit der ersten Feldmessung

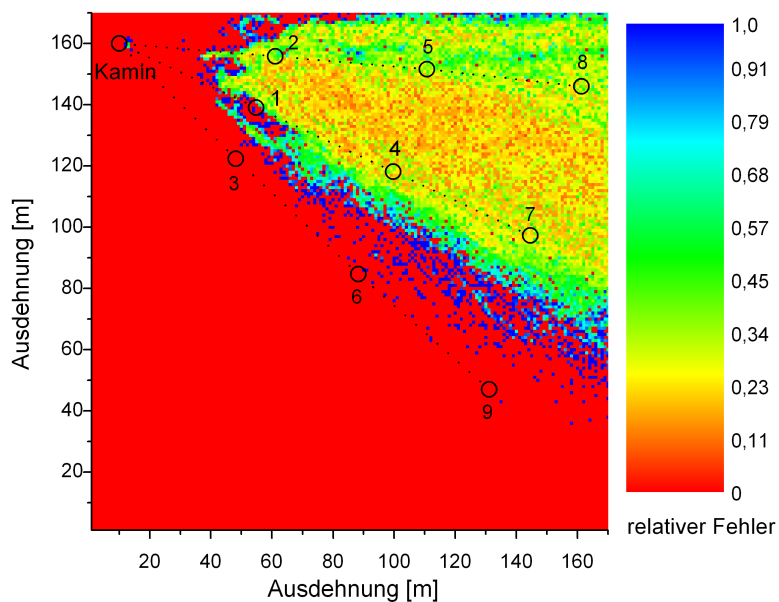
Aus der ersten Feldmessung lässt sich ableiten, dass es eine Übereinstimmung in der Verteilung der deponierten Aerosolpartikel zwischen STAR3D und dem Experiment gibt. Die absoluten Werte der imitierten Partikel an den einzelnen Messstellen weichen allerdings im Mittel um einen Faktor 5,8 voneinander ab. Da es sich hierbei um einen systematischen Fehler zu handeln scheint, wurde eine zweite Feldmessung durchgeführt. Bei dieser wurden einige bei der ersten Feldmessung identifizierte Schwachstellen im Messaufbau beseitigt (siehe hierzu auch Kapitel 6.2.1), so dass eine bessere Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation zu erwarten ist.

Tabelle 6.3: Verhältnis der von der Simulation prognostizierten Werte mit den mit dem APMS gemessenen Werten

Messstelle	Verhältnis
1	6,28
2	6,70
3	2,58
4	5,45
5	5,91
6	6,27
7	5,69
8	6,48
9	7,00



(a) absoluter Fehler der ersten Feldmessung



(b) relativer Fehler (bezogen auf die in der Zelle desponierte Gesamtpartikelanzahl) der ersten Feldmessung

Abbildung 6.7: Fehler auf der von der Ausbreitungssimulation vorhergesagten deponierten Partikelanzahl

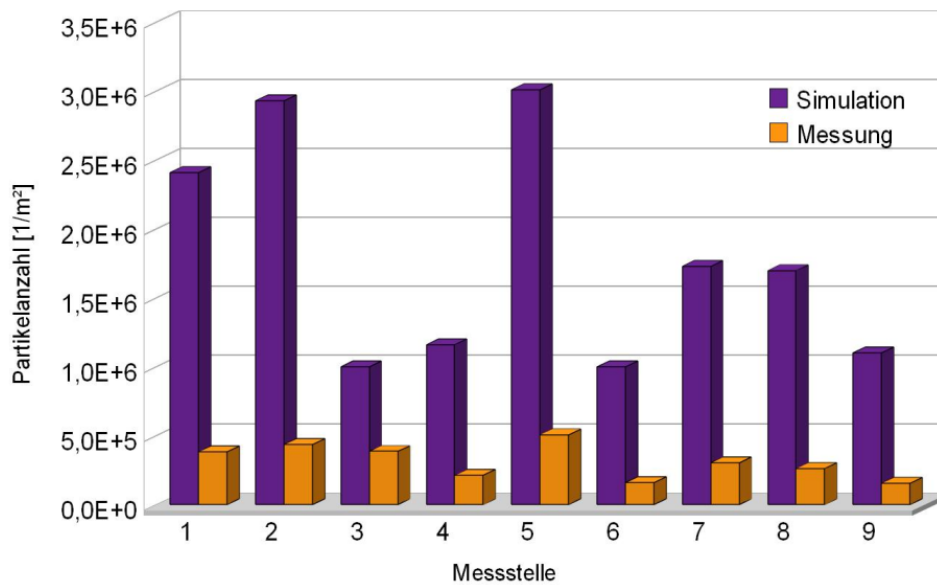


Abbildung 6.8: Vergleich der in den Messstellen deponierten Partikelanzahl mit der von STAR3D prognostizierten Partikelanzahl

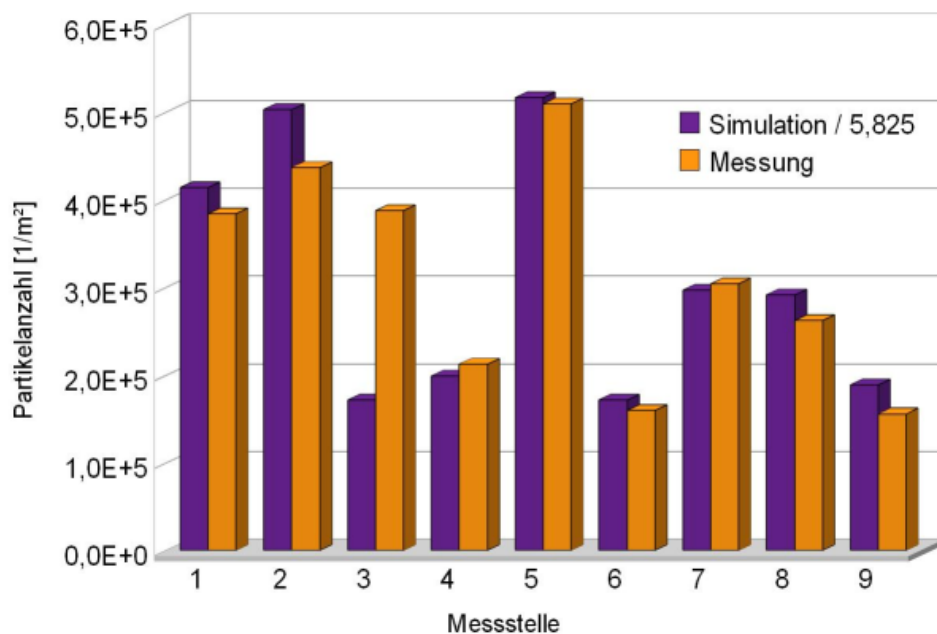


Abbildung 6.9: Vergleich der gemessenen Werte mit den durch 5,8 geteilten Werten von STAR3D (für Erläuterungen siehe Text)

6.2 Zweite Freiluftmessung

Um die oben beschriebenen Abweichungen der ersten Feldmessung abzustellen, fand am 18. Februar 2009 eine zweite Feldmessung statt. Die Messung wurde wieder auf dem Versuchsgut Dikopshof der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität durchgeführt. Die klimatischen Parameter waren durch die folgenden Werte gegeben:

- Außentemperatur 0,6 °C
- relative Luftfeuchte 48 %
- Luftdruck 1028 mbar

Da an diesem Tag der Wind aus südöstlicher Richtung wehte, wurde die Versuchsanordnung wie in Abbildung 6.10 gezeigt angeordnet. Es wurden drei Messstrahlen abgesteckt, auf denen sich die Depositionsmessstellen in einem Abstand von 50 m untereinander befanden. Der Öffnungswinkel zwischen den Messstrahlen betrug 11,3°. Als Emissionsquelle wurde der in Abschnitt 6.1.1 beschriebene Abluftkamin verwendet. Die Messzeit betrug wie bei der ersten Messung 60 Minuten.

6.2.1 Verbesserungen des Messaufbaus im Vergleich zur ersten Feldmessung

Zur Aufzeichnung der Wetterdaten fand bei der zweiten Messung nicht die stationäre Wetterstation Verwendung, sondern zwei Ultraschallanemometer (USA) der Marke METEK USA-1. Diese Geräte haben gegenüber der Wetterstation zwei entscheidende Vorteile. Zum einen kann mit ihnen die Windrichtung und -geschwindigkeit im sekundlichen Rhythmus aufgezeichnet werden. Zum anderen messen die Geräte auch die vertikale Komponente des Windfeldes, so dass Fallwinde berücksichtigt werden können. Die Ultraschallanemometer wurden an den in Abbildung 6.10 mit USA 1 und USA 2 gekennzeichneten Positionen auf einem Ständer in einer Höhe von 3 Metern aufgestellt. Die erste Position befand sich in unmittelbarer Nähe des Abluftkamins. Um Einflüsse des Kamins auf die Windfeldaufzeichnung auszuschliessen, wurde das zweite Ultraschallanemometer im freien Feld platziert. Durch Vergleich der von beiden Geräten gemessenen Werte können eventuelle Einflüsse des Abluftkamins erkannt werden.

Eine weitere Verbesserung gegenüber der ersten Feldmessung betraf die Anzahl der im Feld positionierten Messtellen. Diese wurde von 9 auf 12 Messstellen erhöht. Es befanden sich also auf jedem Messstrahl 4 Messtellen (s. Abb. 6.10).

Weiterhin wurde das Verfahren der Eindosierung des Tracerstaubes in den Abluftstrom optimiert. Statt des in der ersten Messung verwendeten manuellen Verfahrens wurde ein halbautomatisches Verfahren zur Eindosierung eingesetzt. Nur noch die Befüllung dieses halbautomatischen Dispergierers erfolgte manuell. Weitere Optimierungen betrafen das



Abbildung 6.10: Versuchsaufbau während der zweiten Feldmessung

APMS. Hier wurden einige Veränderungen im Auswertungsverfahren vorgenommen, die in [58] detailliert beschrieben werden.

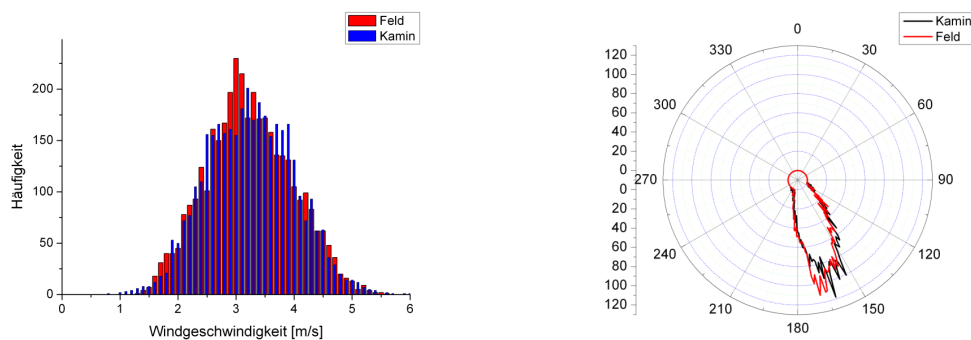
6.2.2 Ergebnisse der zweiten Feldmessung

6.2.2.1 Windfeld

In Abbildung 6.11(a) sind die Verteilungen der Windgeschwindigkeiten an den beiden Standorten dargestellt. Die mittlere Windgeschwindigkeit betrug am Standort von USA 1 ($3,20 \pm 0,75$) m/s und am Standort von USA 2 ($3,18 \pm 0,74$) m/s, sie stimmen innerhalb ihrer Fehlergrenzen überein.

Die Windgeschwindigkeit war bei der zweiten Messung im Vergleich zur ersten Messung ($4,52 \pm 0,45$ m/s) deutlich geringer. In Abbildung 6.11(b) sind Polardiagramme

der Windrichtungsverteilungen an den beiden Messstellen (Abluftkamin und freies Feld) zu sehen. In jedem Diagramm sind die 3600 Messwerte, die von dem jeweiligen Ultraschallanemometer gemessen wurden, eingetragen. Da sowohl die Windverteilung als auch die Windgeschwindigkeit an beiden Standorten näherungsweise gleich sind, wurde für die sich anschließende Simulation des Ausbreitungsvorganges das von USA 1 (neben dem Abluftkamin) gemessene Windfeld zur Beschreibung des einfließenden Fluidfeldes verwendet.



(a) Verteilung der Windgeschwindigkeiten

(b) Verteilung der Windrichtungen an den beiden Messstellen

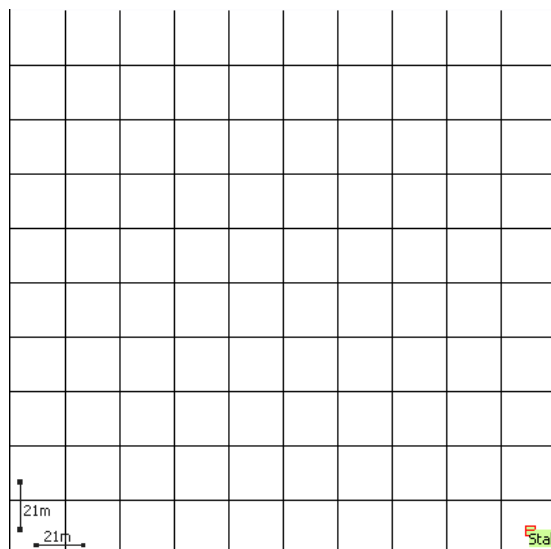
Abbildung 6.11: Verteilungen der Windgeschwindigkeiten und -richtungen

6.2.2.2 Emissionsstrom

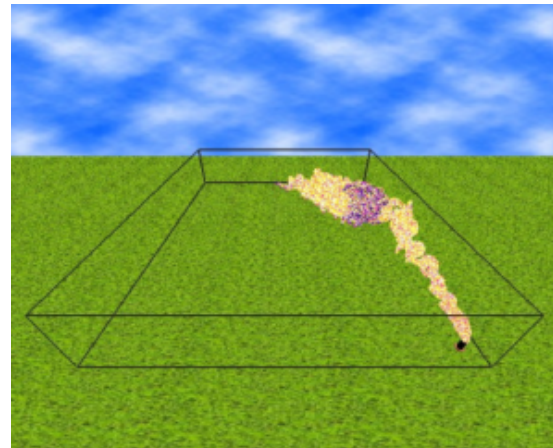
Der Emissionspartikelstrom wurde wie in Abschnitt 6.1.2 dargestellt mit einem Aerosolspektrometer erfasst. In Abbildung 6.13 ist der zeitliche Verlauf der in jeder Sekunde in jeder Größenklasse emittierten Partikelanzahl dargestellt. Im Vergleich zum Verlauf der Messkurven der ersten Messung sind einige Veränderungen erkennbar: die maximal emittierte Partikelanzahl je Sekunde ist deutlich geringer. Sie liegt bei Vernachlässigung einiger Spitzen bei 150 Millionen Partikeln (zum Vergleich 1. Messung: 10 Mrd.). Es fällt weiter auf, dass die emittierte Partikelanzahl mit der Zeit tendenziell ansteigt. Dies ist durch die Tatsache zu erklären, dass im Gegensatz zur ersten Feldmessung, bei der vor Beginn der eigentlichen Messung einige Kalibrierungsmessungen stattgefunden haben, diesmal keine „Vorabmessungen“ stattgefunden haben. Bei der zweiten Messung kam es zu Beginn zur Ablagerung von Tracerpartikeln an den Innenwänden des Abluftkamins, bis diese ihr Aufnahmevermögen ausgeschöpft hatten und eine Sättigung eintrat (nach ca. 1500 Sekunden). Es wurden während der Messzeit von einer Stunde 478 Mrd. Tracerpartikel emittiert, dies entspricht einer Masse von ungefähr 50 g.

In Tabelle 6.4 sind die statistischen Daten der aus dem Abluftkamin emittierten Partikelanzahl zusammengefasst. Die maximale in einer Größenklasse emittierte Partikelanzahl betrug nur noch 330 Millionen Partikel, daher konnten die in Abschnitt 6.1.2 beschriebenen „Untersetzungsfaktoren“ bei der zweiten Feldmessung deutlich kleiner gewählt werden. Sie sind aus Tabelle 6.5 zu entnehmen. Die Emissionsquelle ist wie in Abbildung

6.12(a) dargestellt in der unteren, rechten Ecke positioniert. Die Geschwindigkeit des Luftstromes aus dem Abluftkamin betrug während der Messung 5,97 m/s. Dieser Wert wurde auch zur Berechnung des Windfeldes verwendet.



(a) Darstellung des von STAR3D zur Simulation des zweiten Feldversuches verwendeten Geländes



(b) Darstellung der Partikelverteilung innerhalb des Simulationsvolumens zu einem frei gewählten Zeitpunkt

Abbildung 6.12: Darstellung des Simulationsvolumens und der Partikelverteilung innerhalb des Simulationsvolumens

Tabelle 6.4: Statistische Auswertung der Partikelanzahl am Austrittsort (zweite Feldmessung)

Größe	Minimum $\times 10^3$	Maximum $\times 10^3$	Mittelwert $\times 10^3$	Standardabw. $\times 10^3$
2,0-3,0 μm	1025	330337	70583	46503
3,0-4,0	670	168573	31737	21961
4,0-5,0	345	100610	18292	12915
5,0-7,5	245	71403	12467	9199
7,5-10,0	10	11180	1984	1609
10,0-15,0	0	3490	397	451
15,0-20,0	0	1435	52	161
>20,0	0	1150	33	107

6.2.2.3 prognostizierte Immissionen

Im Anschluss an die zweite Feldmessung wurde das Ausbreitungsgeschehen mit STAR3D simuliert, um einen Vergleich zwischen den Ergebnissen der Feldmessung und den von STAR3D prognostizierten Immissionswerten zu ermöglichen. Da sich diesmal auf allen

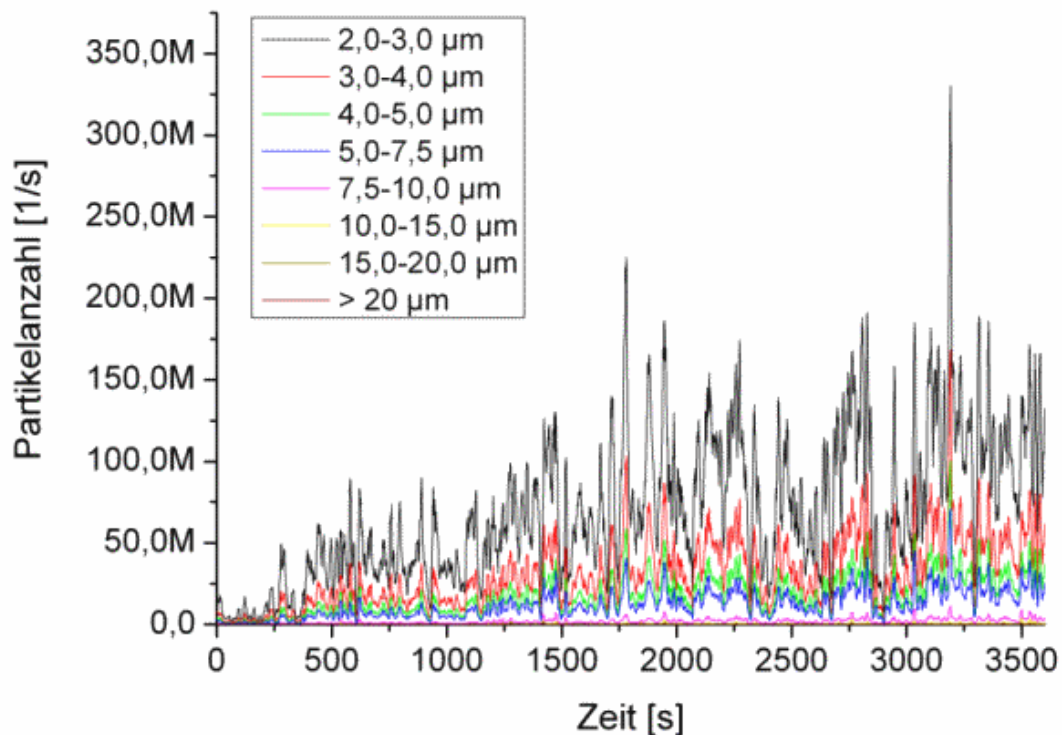


Abbildung 6.13: Mit dem Aerosolspektrometer gemessene Partikelverteilung an der Austrittsöffnung der Emissionsquelle

drei Messtrahlen vier Depositionsmessstellen befanden, wurde das zu simulierende Volumen entsprechend vergrößert. Es wurde ein $220\text{ m} \times 220\text{ m} \times 40\text{ m}$ umfassendes Volumen mit einer Gitterweite von 1 m zur Simulation des Ausbreitungsgeschehens herangezogen. Die Einströmbedingung des Fluids in das Simulationsvolumen hinein werden durch die von USA 1 gemessenen Winddaten beschrieben.

Tabelle 6.5: Untersetzungsfaktoren der einzelnen Größenklassen bei der 2. Feldmessung

Größenklasse	Durchmesser	Untersetzung
1	2,0-3,0 μm	20000
2	3,0-4,0 μm	10000
3	4,0-5,0 μm	10000
4	5,0-7,5 μm	10000
5	7,5-10,0 μm	1000
6	10,0-15,0 μm	500
7	15,0-20,0 μm	100
8	>20,0 μm	100

In Abbildung 6.14 ist die von STAR3D prognostizierte Partikelimmission aufgetragen. Dargestellt ist die pro Quadratmeter errechnete Summe der Partikelzahlen aller Größenklassen. Hierbei wurden wie Abschnitt 6.1.2 dargestellt die größenklassenspezifischen Umsetzungs-faktoren bereits berücksichtigt. Im Unterschied zur ersten Feldmessung liegen nun alle drei Messstrahlen innerhalb des Depositionsgebietes. Weiterhin ergibt sich nun eine maximale pro Quadratmeter deponierte Gesamtpartikelanzahl von 2,17 Millionen (zum Vergleich: 19,3 Mill. bei der 1. Messung). Diese deutliche Abnahme der prognostizierten Partikeldeposition lässt sich durch die erheblich kleineren Umsetzungs-faktoren erklären: Während bei der Simulation der ersten Feldmessung die Deposition eines Partikels aus der kleinsten Partikelfraktion innerhalb der Ausbreitungssimulation bereits durch den großen Umsetzungs-faktor von einer Million zu der Annahme führte, dass eine Million Partikel immittiert wurden, so führt bei der zweiten Feldmessung der selbe Vorgang zu der Annahme, dass 20000 Partikel deponiert wurden. Die gesamte im Simulationsgebiet von der Ausbreitungssimulation vorhergesagte Anzahl an deponierten Partikeln beträgt $9,87 \pm 0,01$ Mrd. Tracerpartikel, d.h. aus dem Emissionspartikelstrom deponieren ungefähr 2 % der Partikel innerhalb des Simulationsgebietes.

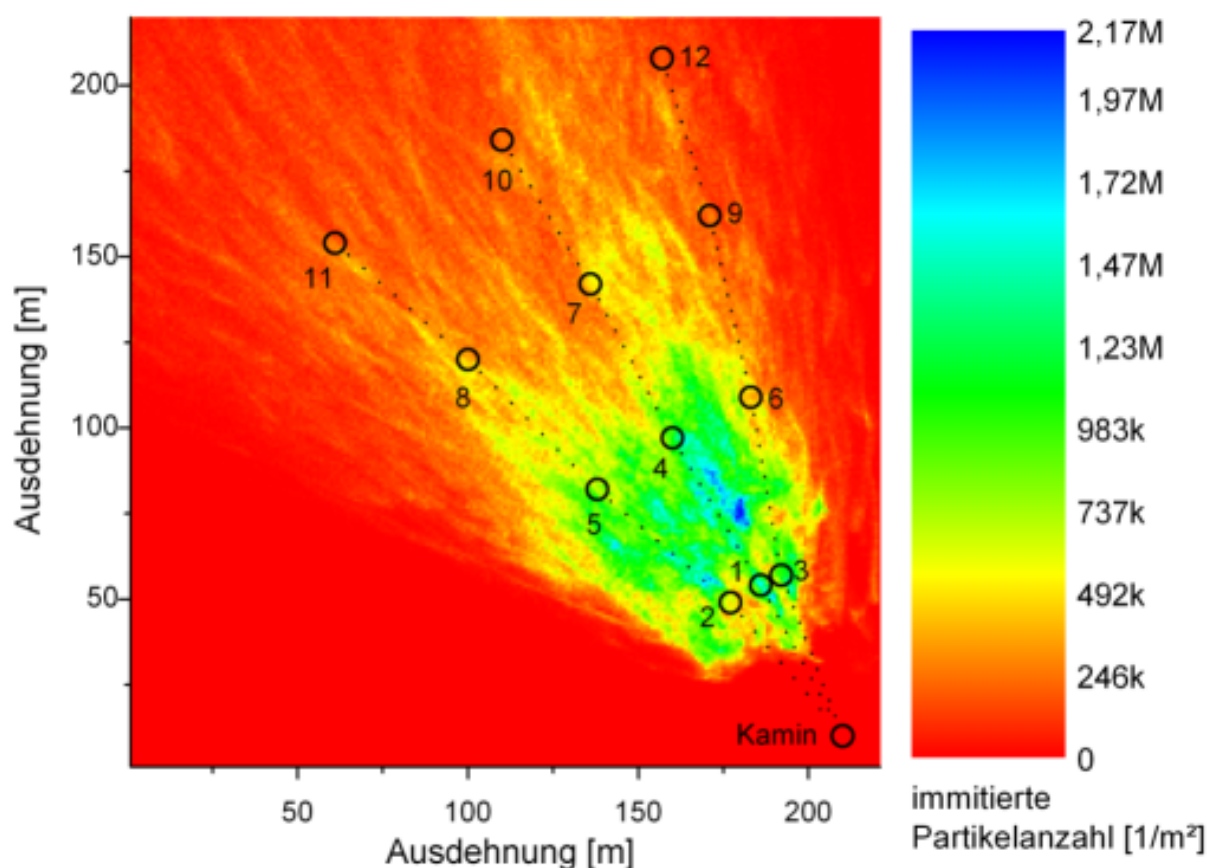


Abbildung 6.14: von STAR3D prognostizierte Partikeldeposition je Quadratmeter für die zweite Feldmessung

Die Ergebnisse der Fehlerabschätzung mit dem in Abschnitt 6.1.2 beschriebenen Verfahren sind in den Abbildungen 6.15(a) und 6.15(b) zu sehen. In Abbildung 6.15(a) ist die mit Hilfe von (6.1) berechnete Verteilung der absoluten Fehler auf die deponierte Partikelanzahl zu sehen, in Abbildung 6.15(b) ist die Verteilung der relativen Fehler, bezogen auf die in der jeweiligen Zelle deponierte Gesamtpartikelanzahl, dargestellt. Erkennbar ist, dass der relative Fehler zu Rändern des Gebietes, in dem die Partikeldeposition vorhergesagt wird, deutlich ansteigt. Dieser Effekt ist dadurch zu erklären, dass die deponierte Partikelanzahl an den Rändern geringer wird und damit der relative Fehler zunimmt. An den Rändern des Simulationsgebietes (in Abbildung 6.15(b) rot dargestellt) sind keine deponierten Partikel von der Ausbreitungssimulation vorhergesagt worden, daher wurde hier ein relativer Fehler von null angenommen.

Der relative Fehler liegt in Regionen mit großer Partikeldeposition in der Größenordnung von 20 % bis 30 % und steigt in den Bereichen mit geringerer Partikeldeposition auf 50-60 % an. Er ist damit an den Rändern des Depositionsgebietes kleiner als bei der ersten Freiluftmessung, bei der der Fehler in diesem Bereich noch 80 - 100 % betrug.

6.2.2.4 Vergleich der prognostizierten mit der gemessenen Partikelimmission

In diesem Abschnitt erfolgt der Vergleich zwischen der vom APMS gemessenen und der von der Ausbreitungssimulation vorhergesagten deponierten Partikelanzahl an den zwölf Messstellen. Hierzu wurde die gemessene mit der vorhergesagten Gesamtpartikelanzahl verglichen. Die Ergebnisse für die einzelnen Messstellen sind in Abbildung 6.17 dargestellt. An den meisten Messstellen ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation. Nur die Messstellen 1, 3 und 5 zeigen Abweichungen auf. An Messstelle 1 ist die gemessene Partikeldeposition ungefähr ein Drittel höher als die von der Ausbreitungssimulation vorhergesagte Partikeldeposition. An den Messstellen 3 und 5 zeigt sich ein umgekehrtes Bild, hier ist der von der Simulation vorhergesagte Wert für die Partikeldeposition 2 bis 3 mal höher als der vom APMS ermittelte Wert. Eine Ursache für die an diesen Messstellen aufgetretenen Abweichungen konnte bisher nicht gefunden werden. Die Abweichung zwischen Mess- und Simulationswert betrug über alle Messstellen gemittelt 27 %.

6.2.2.5 Beurteilung der Validierungsmessung

Ein in der Beurteilung von Ausbreitungssimulationen häufig verwendeter Parameter ist der „normalised mean square error“ (NMSE)², da er vom Datensatz der Messstellen unabhängig ist [79, 80]. Er ist definiert als

$$NMSE = \frac{\overline{(c_{obs} - c_{calc})^2}}{\overline{c_{obs}} \cdot \overline{c_{calc}}}. \quad (6.2)$$

²dt. in etwa: normalisierter mittlerer quadratischer Fehler

c_{obs} bezeichnet den aus der Messung ermittelten Wert und c_{calc} den mit Hilfe der Simulation gewonnenen Wert. Je näher der $NMSE$ an null liegt, desto besser stimmen Messung und Simulation überein. Für die zweite Feldmessung ergibt sich hier ein Wert von 0,16. Zum Vergleich sei der $NSME$ von AUSTAL2000, der mit Hilfe des sogenannten Indianapolis-Datensatzes [81] gewonnen wurde, angegeben: dieser betrug 2,6 [82].

6.2.2.6 Vergleich der mit STAR3D gewonnenen Ergebnisse mit anderen Ausbreitungssimulationsprogrammen

Um einen Vergleich des Ausbreitungsmodells STAR3D mit anderen Modellen zu ermöglichen, wurde die Ausbreitungsrechnung mit zwei weiteren Programmen durchgeführt. Hierbei handelte es sich zum einen um AUSTAL2000 und zum anderen um BAGEG. AUSTAL2000 basiert auf einem Lagrangepartikelmodell und berechnet sein Windfeld diagnostisch mit einem nachgeschalteten Turbulenzmodell. Es erfüllt die in der TA Luft geforderten gesetzlichen Bestimmungen zur Ausbreitungssimulation. Bei BAGEG³ handelt es sich um das Gauß-Fahnenmodell zur Berechnung der Geruchsimmission [30, 83]. Die Ergebnisse der einzelnen Rechnungen sind in Abbildung 6.18 dargestellt. Da die einzelnen Programme mit verschiedenen Quelltypen arbeiten (STAR3D erwartet die Partikelanzahl als Eingabeparameter, AUSTAL2000 die emittierte Masse und BAGEG die Geruchsstundenzahl), wurden die Ergebnisse der verschiedenen Rechnungen in Abbildung 6.18 auf den in der jeweiligen Ausbreitungssimulation ermittelten Maximalwert normiert.

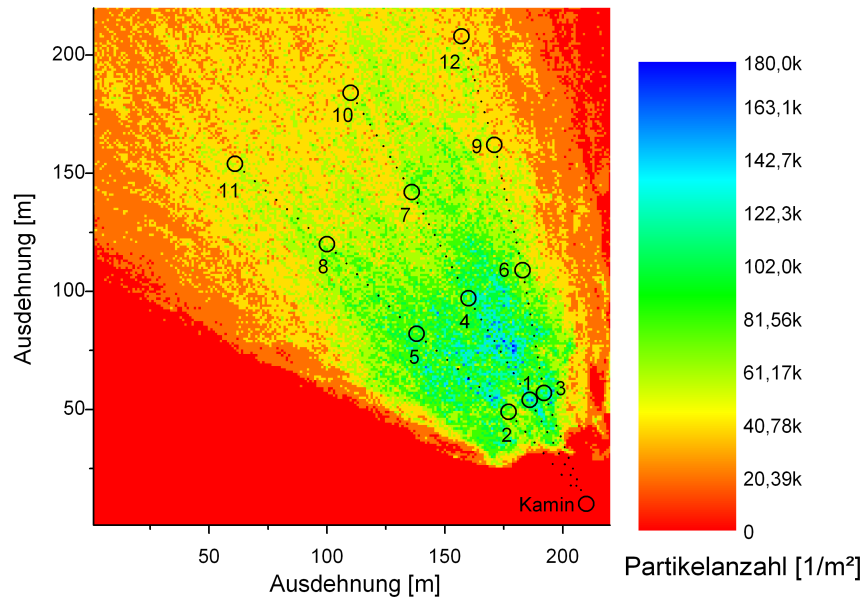
Abbildung 6.18(a) zeigt das Ergebnis der Rechnung mit STAR3D, Abbildung 6.18(b) das Ergebnis mit AUSTAL2000. Dabei wurde das gemessene variable Windfeld als Grundlage der Berechnungen verwendet. Abbildung 6.18(c) zeigt wieder die Ergebnisse mit AUSTAL2000, hier wurde allerdings der Eingabeparameter Windfeld durch die mittlere Windgeschwindigkeit und -richtung während des Messzeitraumes ersetzt. In Abbildung 6.18(d) ist das Ergebnis der Rechnung mit BAGEG gezeigt. In allen vier Abbildungen kennzeichnet der schwarze Punkt die Position der Emissionsquelle. Die Schadstoffwolke schlägt bei allen vier Ausbreitungsmodellen wie erwartet in nordwestlicher Richtung nieder. Bei den drei Vergleichsrechnungen befindet sich das Maximum der Immission weiter entfernt von der Quelle als bei STAR3D. Dies mag bei AUSTAL2000 daran liegen, dass für alle Partikel eine konstante größenunabhängige Sedimentationsgeschwindigkeit angenommen wird, die kleiner als die von STAR3D genutzten experimentell ermittelten Daten aus [5] ist. BAGEG nutzt ein Gauß-Fahnenmodell. Hier wird der Aufsetzpunkt der Fahne durch die Ausbreitungsparameter entscheidend bestimmt. Weiter entsteht der Eindruck, dass bei der Simulation mit STAR3D weniger Partikel deponiert werden, da die maximale deponierte Partikelanzahl nur auf einer sehr kleinen Fläche erreicht wird. Zum Vergleich ist in Abbildung 6.19 nochmals das Ergebnis von STAR3D mit einer geänderten Farbskalierung zu sehen. Hier wurde das Maximum der Skala auf $1,37 \cdot 10^6$ Partikel gesetzt.

³Begehungskalibrierte Ausbreitungssimulation für Geruchsstoffe

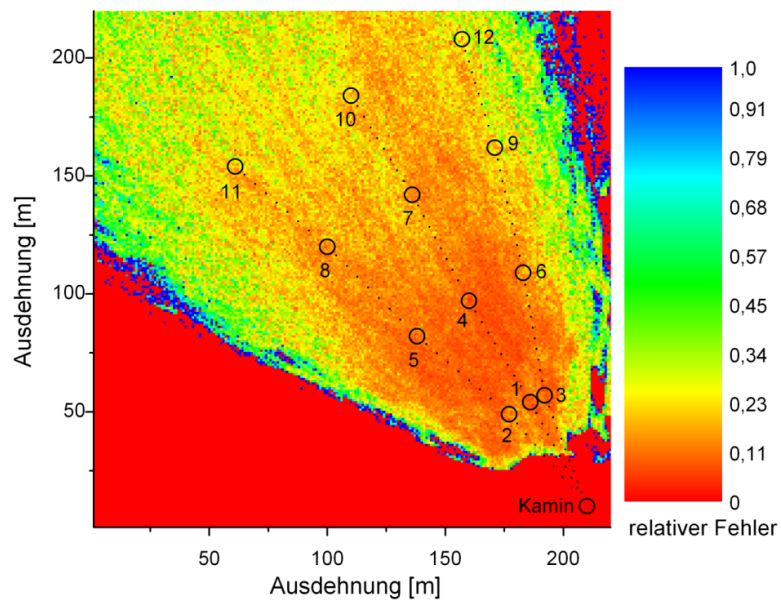
6.2.3 Fazit der zweiten Feldmessung

Die zweite Feldmessung wurde durchgeführt, um STAR3D unter optimierten Randbedingungen zu evaluieren. Hierfür wurde das Windfeld, welches als Eingabeparameter der Simulation STAR3D benötigt wird, dreidimensional erfasst und in sekundlichem Rhythmus aufgezeichnet. Des Weiteren wurde die Eindosierung des Tracerstaubes in den Emissionsstrom hinein verbessert, so dass die Untersetzungsverhältnisse der einzelnen Größenfraktionen kleiner gewählt werden konnten. Die Anzahl der Messstellen innerhalb des Simulationsgebietes wurde von 9 auf 12 erhöht.

Diese Verbesserungen führten dazu, dass die mittlere Abweichung zwischen den Ergebnissen der Messung und den von STAR3D vorhergesagten Werten statt eines Faktors 5,8 nun nur noch 27 % betrug. Daher ist der Schluß gerechtfertigt, dass eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung erzielt wurde.



(a) absoluter Fehler



(b) relativer Fehler (bezogen auf die in der Zelle desponierte Gesamtpartikelanzahl)

Abbildung 6.15: Fehler auf der von der Ausbreitungssimulation vorhergesagten deponierten Partikelanzahl

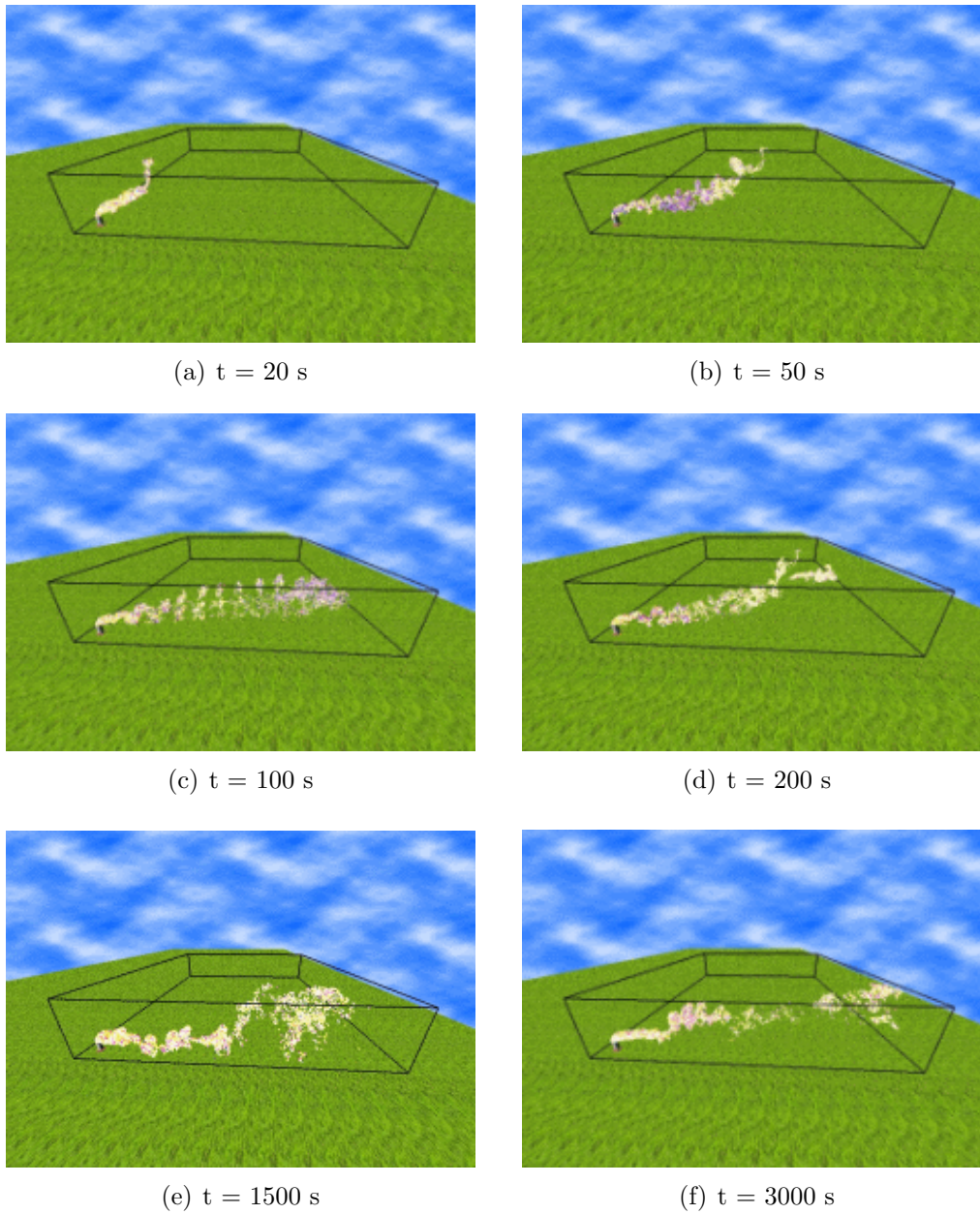


Abbildung 6.16: Verteilung der Aerosolwolke in der Ausbreitungssimulation zu verschiedenen Zeitpunkten

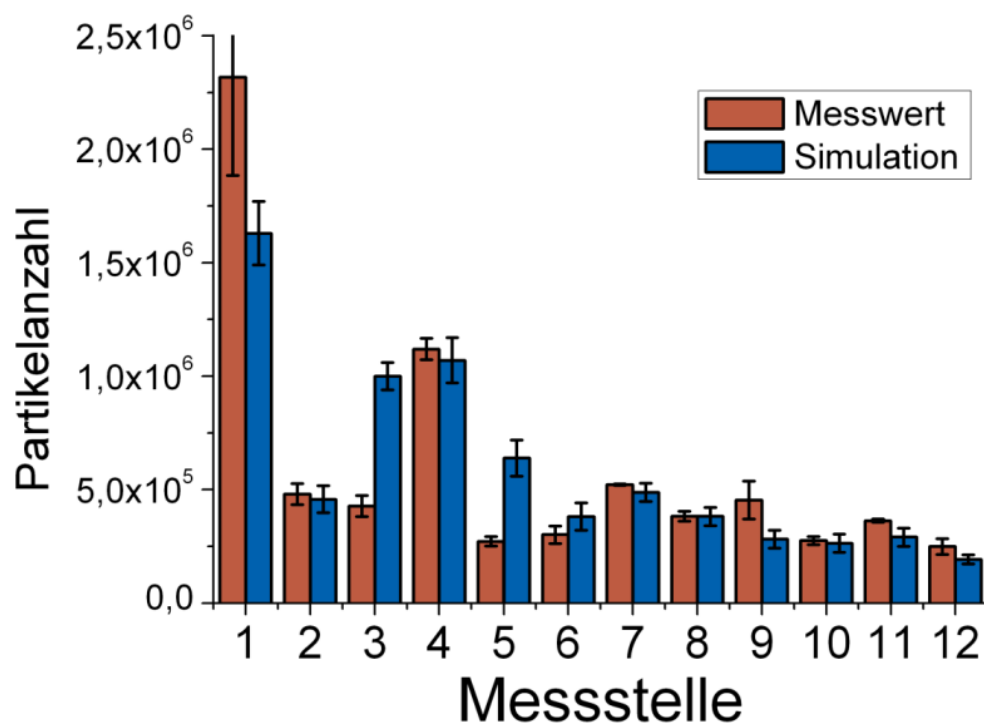


Abbildung 6.17: Vergleich der vom APMS gemessenen mit der von STAR3D vorhergesagten deponierten Gesamtpartikelanzahl an den einzelnen Messstellen für die zweite Feldmessung

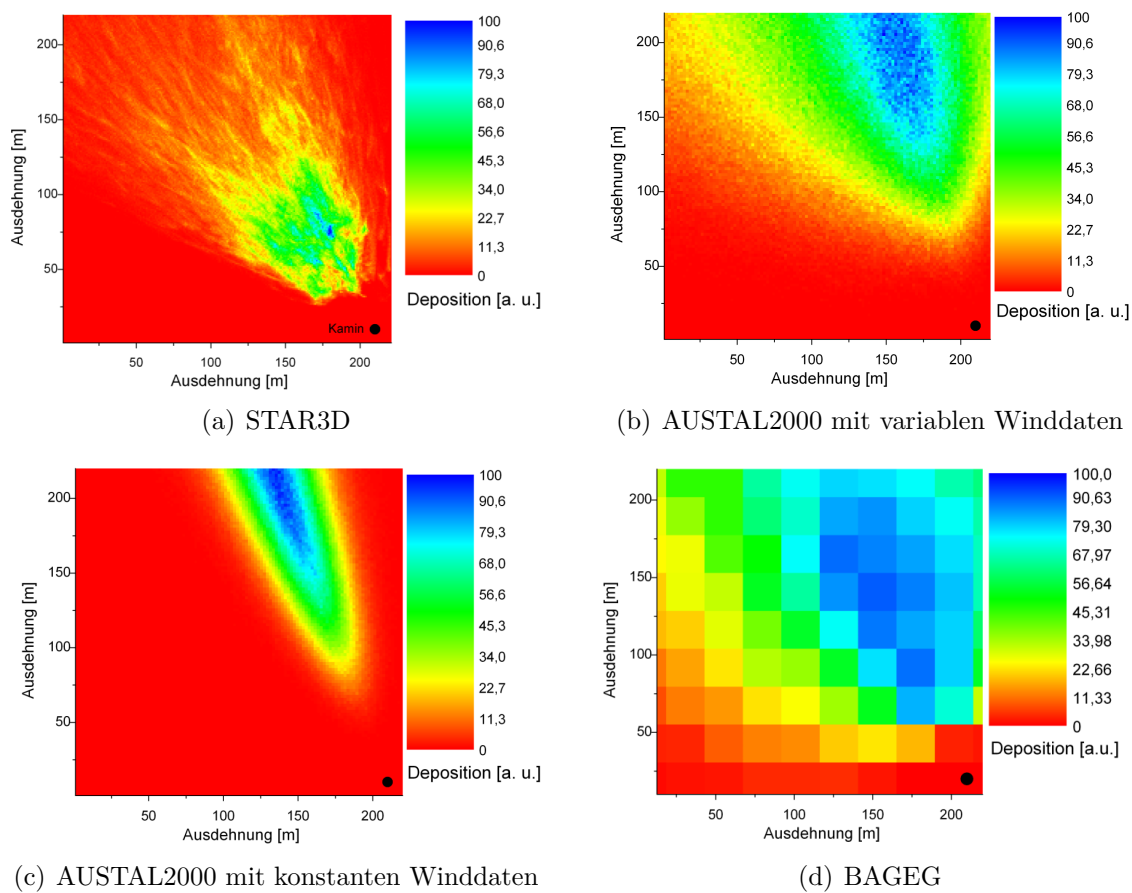


Abbildung 6.18: Ergebnisse der Vergleichrechnungen mit verschiedenen Ausbreitungsmodellen. Nähere Erläuterungen finden sich im Text.

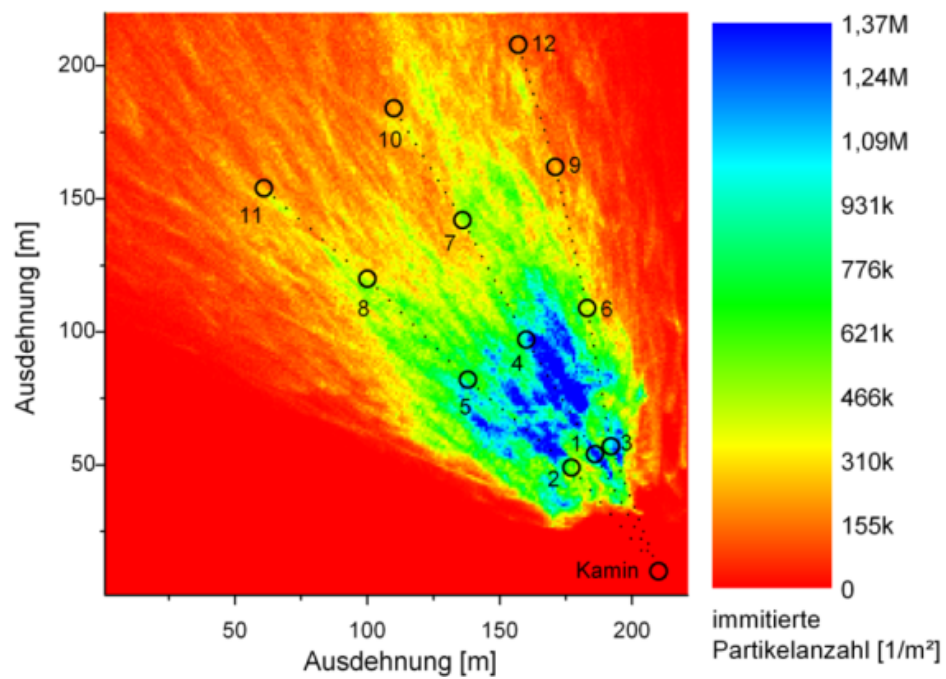


Abbildung 6.19: von STAR3D berechnete deponierte Partikelanzahl bei geänderter Farbskala

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

7.1 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in zwei Teile. Im ersten Teil wurde der Einfluss der Koagulation auf die Transmission von Aerosolen aus landwirtschaftlichen Anlagen im Freilandbereich untersucht. Im zweiten Teil wurden die Ergebnisse der Evaluierung von STAR3D vorgestellt.

Bei STAR3D handelt es sich um eine neu entwickelte Ausbreitungssimulation. Sie greift auf die Erfahrungen zurück, die mit Hilfe der Software NaSt3D bei der Ausbreitung von Gerüchen gewonnen wurden. In STAR3D wurde die Berechnung des Windfeldes, die weiterhin mit Hilfe der am Institut für Numerische Simulation der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn entwickelten Software NaSt3DGP erfolgt, von der Berechnung der Partikelbahnen getrennt. Die Bewegung der Partikel im Windfeld wird durch die Langevingleichung beschrieben.

Um den Einfluss der Koagulation auf das Ausbreitungsgeschehen abschätzen zu können, wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Versuchsanordnung zur Untersuchung des Koagulationsverhaltens von Stäuben aufgebaut. Diese besteht aus einer Kammer mit einem Volumen von $4,2 \text{ m}^3$, in die das zu untersuchende Aerosol dispergiert wird. Anschließend wird die Partikelanzahlkonzentration mit einem Aerosolspektrometer zeitaufgelöst gemessen. Aus der abklingenden Partikelanzahlkonzentration kann der Koagulationskoeffizient extrahiert werden. Es wurden verschiedene Aerosole untersucht, dabei handelte es sich um Ulmer Weiss, Ceroxid, Arizonastaub, den auch zur Validierung der Ausbreitungssimulation eingesetzten Tracerstaub und einen Tierstaub aus der Mastschweinehaltung. Für alle Teststäube stimmte der gemessene Koagulationskoeffizient mit dem aus theoretischen Überlegungen abgeleiteten Wert überein. Die im Freiluftbereich zu erwartende Anzahl an Zusammenstößen liegt aufgrund der hier vorherrschenden geringen Partikelanzahlkonzentrationen im Bereich von 10^{-3} Stößen/ $(\text{m}^3 \cdot \text{s})$. Daher wurde auf eine Implementierung der Koagulation in STAR3D verzichtet.

Das entwickelte Modell wurde in einigen einfachen Testszenarien evaluiert, indem die Ergebnisse von STAR3D mit den aus theoretischen Überlegungen abgeleiteten Ergebnis-

sen verglichen wurden. Dabei ergab sich eine gute Übereinstimmung, so dass im zweiten Schritt eine Validierung von STAR3D in Freilandversuchen erfolgen konnte. Hierzu wurde in zwei Feldversuchen die aus einer Emissionsquelle freigesetzte, deponierte Partikelanzahl mit einem Messsystem [58] ermittelt und mit den Vorhersagen von STAR3D verglichen. Im ersten Feldversuch ergab sich eine gute Übereinstimmung in der Verteilung der Partikelanzahl innerhalb des Testgeländes, jedoch wichen die absoluten Werte stark voneinander ab. Aus diesem Grund wurden einige Optimierungen am Messverfahren vorgenommen. In der zweiten Validierungsmessung konnte eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation erzielt werden. Die mittlere Abweichung zwischen den beiden vorgenannten Werten betrug nur noch 24 Prozent.

7.2 Ausblick auf Weiterentwicklungen von STAR3D

In weiteren Untersuchungen ist es notwendig, das Koagulationsverhalten weiterer Tierstäube, wie z.B. aus der Legehennenhaltung und der Rinderhaltung zu ermitteln. Damit ist es möglich, einen vollen Parametersatz aller Tierstäube zu erhalten. Diese Ergebnisse können auch im Verlauf des Nachfolgeprojektes „Verteilung von emissionsrelevanten Stoffen in Stallinnenräumen“ verwendet werden.

Die bisherige Validierung der Ausbreitungssimulation erfolgte in wenig strukturiertem Gelände. Hier ist es sicherlich notwendig, weitere Validierungen in strukturiertem Gelände, in dem sich z. B. auch Stallgebäude und Ähnliches befinden, vorzunehmen. Des Weiteren ist die Integration von halbdurchlässigen Hindernissen, wie z.B. Hecken und Bäumen, vorgesehen. Erste Ansätze, wie dies geschehen könnte, sind z.B in [84] zu finden. Wünschenswert ist es, die derzeit noch sehr umfangreichen Rechenzeiten, die bei den Validierungsmessungen im Bereich von einigen Monaten lagen, zu reduzieren. Dafür bietet sich eine Parallelisierung der Berechnungen an.

Weiterhin ist es geplant, in dem oben genannten Folgeprojekt das Ausbreitungsgeschehen innerhalb der Stallgebäude zu simulieren, um das Verhalten der Emissionsquellen besser verstehen zu können. Hierzu soll STAR3D zu SICAR3D (Simulated indoor concentration of aerosols in 3 dimensions) weiterentwickelt werden. Dabei ist es notwendig, die Simulation der Koagulation wegen der höheren zu erwartenden Partikelkonzentrationen im Stallinnenraum in die Ausbreitungsrechnung zu integrieren. Ansätze hierfür lassen sich in [74] und [75] finden. Dieser Schritt lässt sich damit als Abschluss einer dreiteiligen Entwicklung auffassen. Zu Beginn wurde das Koagulationsverhalten untersucht, danach wurde die Ausbreitungssimulation STAR3D entwickelt und abschließend wird die Koagulation in die erweiterte Ausbreitungssimulation integriert.

Anhang A

Herleitung des Zusammenhangs zwischen mittlerer Verschiebung und Diffusionskonstante

Die durch die Brownsche Bewegung der Aerosolpartikel verursachte Diffusion kann durch eine Gleichung der Form [45]

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}, t) = D \cdot \nabla^2 n(\vec{r}, t) \quad (\text{A.1})$$

oder ausgeschrieben

$$\frac{\partial}{\partial t} n(x, y, z, t) = D \cdot \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] n(x, y, z, t) \quad (\text{A.2})$$

beschrieben werden. Dabei bezeichnet $n(\vec{r}, t)$ die Partikelkonzentration am Ort \vec{r} zur Zeit t und D die Diffusionskonstante. Da die Gesamtpartikelanzahl erhalten bleibt, gilt bei einer Integration über den gesamten Raum

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz n(x, y, z, t) = \text{konstant.} \quad (\text{A.3})$$

Multipliziert man nun nacheinander Gleichung (A.2) mit x^2 , y^2 und z^2 und integriert über den gesamten Raum (jeweils von $-\infty$ bis ∞ für x , y und z), so erhält man unter Beachtung von Gleichung (A.3) die folgenden drei Gleichungen (die Integrationsgrenzen sind der Übersichtlichkeit halber nicht angegeben):

$$\frac{d}{dt} \int dx \int dy \int dz x^2 n(x, y, z, t) = 2D \int dx \int dy \int dz n(x, y, z, t) \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{d}{dt} \int dx \int dy \int dz y^2 n(x, y, z, t) = 2D \int dx \int dy \int dz n(x, y, z, t) \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{d}{dt} \int dx \int dy \int dz z^2 n(x, y, z, t) = 2D \int dx \int dy \int dz n(x, y, z, t) \quad (\text{A.6})$$

Addiert man diese drei Gleichungen und nutzt die Beziehung

$$\overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2} = \overline{r^2} = \frac{\int dx \int dy \int dz (x^2 + y^2 + z^2) n(x, y, z, t)}{\int dx \int dy \int dz n(x, y, z, t)} \quad (\text{A.7})$$

aus, so erhält man

$$\overline{r^2} = 6Dt. \quad (\text{A.8})$$

Zusammen mit der von Einstein gefundenen Beziehung [85]

$$\overline{r^2} = B \cdot k \cdot t = \frac{kT}{\pi\nu r_a} \cdot t, \quad (\text{A.9})$$

wobei B die Beweglichkeit des Partikels (entspricht der Geschwindigkeit pro Einheitskraft [45]) und r_a den Radius des Partikels bezeichnet, ergibt sich durch Vergleich von (A.8) und (A.9) der Zusammenhang:

$$D = \frac{kT}{6\pi\nu r_a}. \quad (\text{A.10})$$

Anhang B

Hintergrundkonzentration an Aerosolpartikeln während der Freiluftmessungen

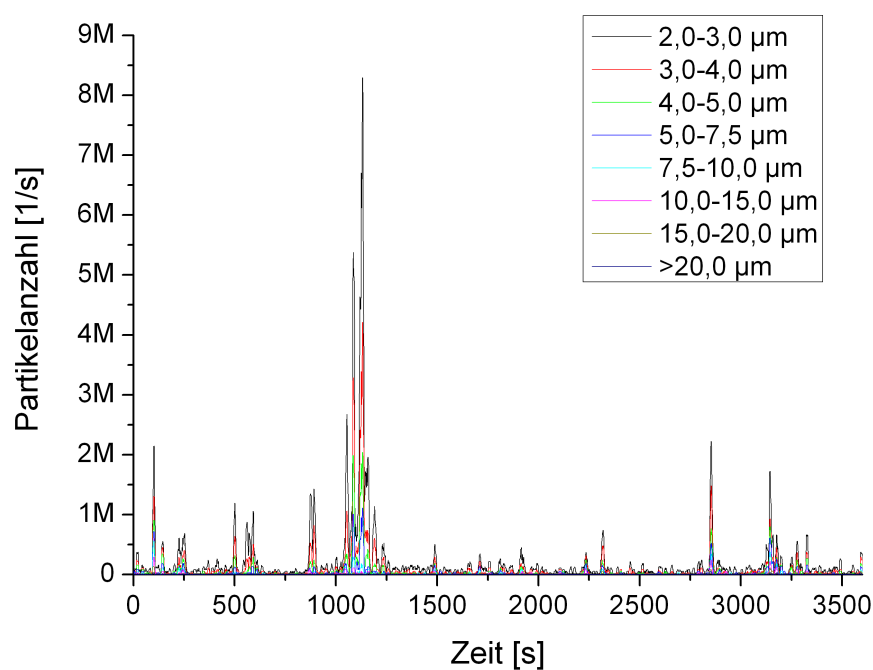


Abbildung B.1: Mit dem Aerosolspektrometer gemessene Hintergrundkonzentration an Aerosolpartikeln während der ersten Feldmessung im September

Anhang C

Wiener-Prozess

Der Gaußsche Random Walk, der den Diffusionsprozess in Gleichung (2.50) beschreibt, kann auch als Wiener-Prozess¹ aufgefasst werden. Ein Wiener-Prozess ist nach [86, 87] eine Familie von Zufallsvariablen $\{W_t, t \in \mathbb{R}_+\}$, die

1. $W_0 = 0$,
2. Für alle $0 \leq s < t$ ist $W_t - W_s \propto N(0, t - s)$, wobei $N(0, t - s)$ eine Normalverteilung mit Mittelwert 0 und Standardabweichung $t - s$ bezeichnet,
3. Für alle nichtüberlappenden Paare von Zeitintervallen $0 \leq s < t \leq s' < t'$ sind $W_t - W_s$ und $W_{t'} - W_{s'}$ unabhängig

erfüllen. Er wird in der Finanzmathematik häufig zur Beschreibung der Entwicklung von Aktienkursen angewandt.

Eine Erweiterung des Wiener-Prozesses ist der Wiener-Prozess mit Drift μ und Volatilität σ . Er ergibt sich aus dem Standard-Wiener-Prozess indem für ein Zeitintervall $t - s = 1$ die Standardabweichung der Volatilität entspricht und der Prozess mit einem Wachstum der Geschwindigkeit μ überlagert wird [86]. Dann muss die zweite Bedingung durch „Für alle $0 \leq s < t$ ist $W_t - W_s \propto N(\mu(t - s), \sigma^2(t - s))$ “ ersetzt werden.

In Abbildung C.1 ist die Entwicklung der Dichte W_t mit der Zeit dargestellt. Die „Breite“ der Verteilung nimmt mit $\sigma\sqrt{t}$ zu, während das Maximum sich mit $\mu \cdot t$ bewegt. In Gleichung (2.50) gilt $\mu = 0$, so dass die Dichtekurven nicht wie in Abbildung C.1 „laufen“, sondern stationär um 0 verteilt sind.

¹benannt nach Norbert Wiener (1894-1964)

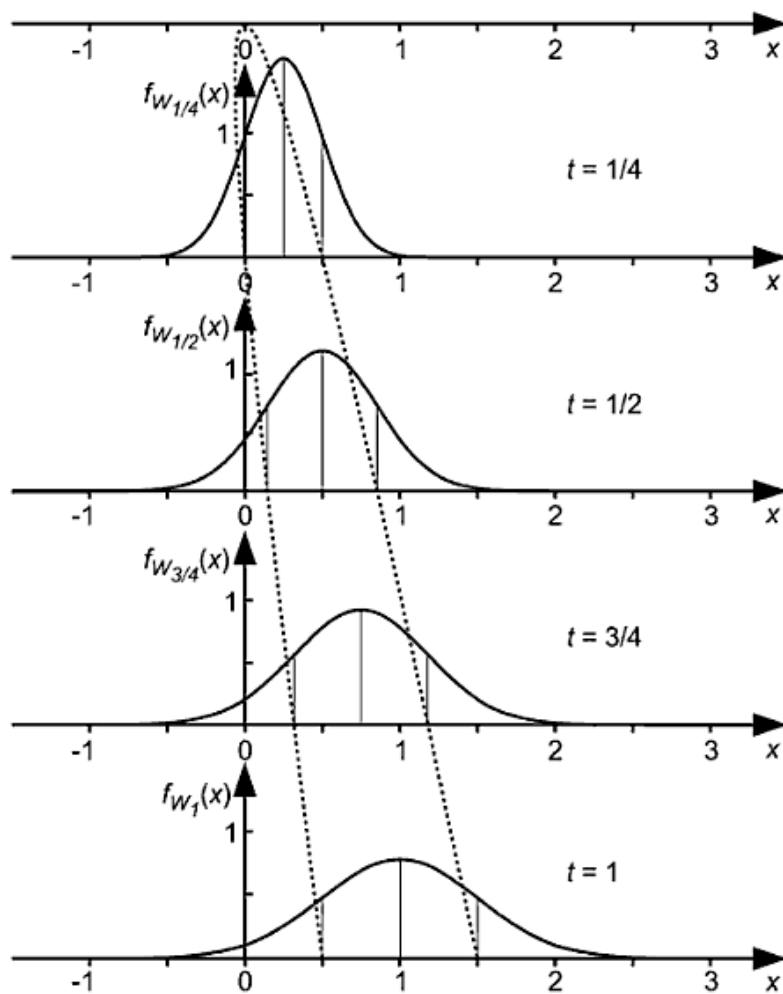
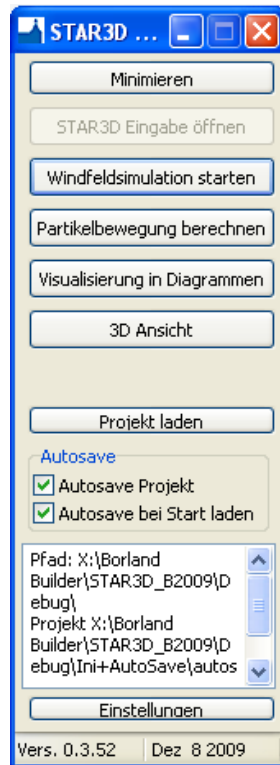


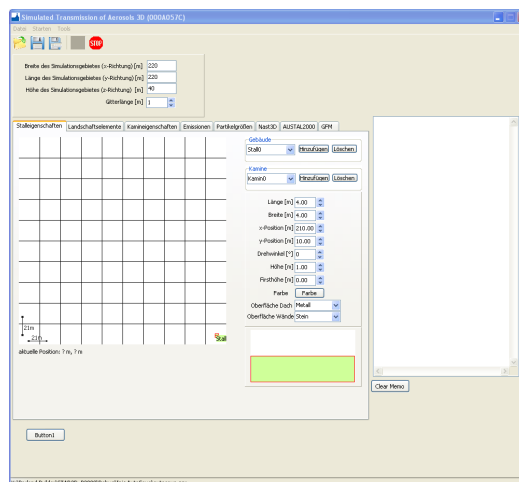
Abbildung C.1: Entwicklung der Dichte von W_t eines Wiener Prozesses mit den Parametern $\mu = 1$ und $\sigma = 1/2$ nach [86]

Anhang D

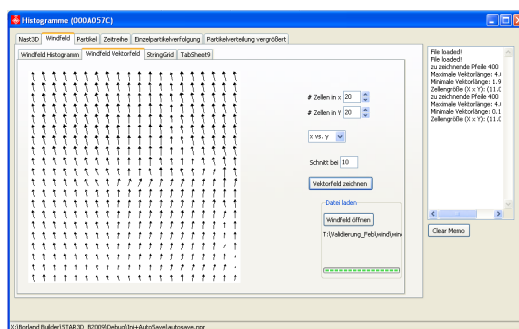
Screenshots von STAR3D



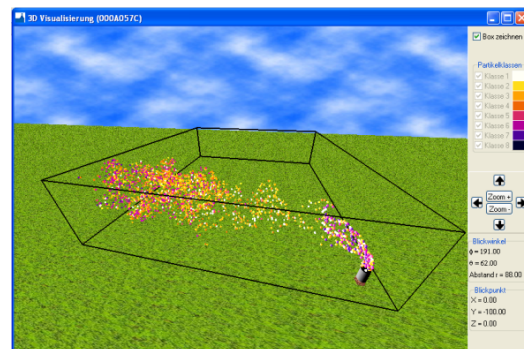
(a) Hauptfenster



(b) Eingabefenster der Parameter



(c) Diagrammausgabe der Ergebnisse



(d) 3D-Darstellung mit OpenGL

Abbildung D.1: Screenshots der Bedienoberfläche von STAR3D

Anhang E

Anteile der Größenfraktionen bei der Bestimmung der Koagulationskoeffizienten

Tabelle E.1: Anteil der einzelnen Größenfraktionen an der Gesamtpartikelanzahl für Ceroxid

Partikeldurchmesser [μm]	Anteil
0,35	0,5104
0,45	0,1820
0,575	0,0839
0,725	0,0629
0,9	0,0806
1,3	0,0140
1,8	0,0216
2,5	0,0257
3,5	0,0097
4,5	0,0050
6,25	0,0030
8,75	0,0007
12,5	0,0014
17,5	7,11E-07
25	8,64E-07

Tabelle E.2: Anteil der einzelnen Größenfraktionen an der Gesamtpartikelanzahl für Arizonastaub

Partikeldurchmesser [μm]	Anteil
0,35	0,3253
0,45	0,2038
0,575	0,1384
0,725	0,0780
0,9	0,0850
1,3	0,0366
1,8	0,0372
2,5	0,0475
3,5	0,0221
4,5	0,0128
6,25	0,0089
8,75	0,0029
12,5	0,0013
17,5	0,0002
25	7,22E-05

Tabelle E.3: Anteil der einzelnen Größenfraktionen an der Gesamtpartikelanzahl für Tracerstaub

Partikeldurchmesser [μm]	Anteil
0,35	0,4376
0,45	0,2060
0,575	0,1327
0,725	0,0689
0,9	0,0602
1,3	0,0198
1,8	0,0227
2,5	0,0261
3,5	0,0103
4,5	0,0068
6,25	0,0065
8,75	0,0019
12,5	0,0010
17,5	0,0006
25	5,41E-05

Tabelle E.4: Anteil der einzelnen Größenfraktionen an der Gesamtpartikelanzahl für Schweinestaub

Partikeldurchmesser [μm]	Anteil
0,35	0,4566
0,45	0,1675
0,575	0,1275
0,725	0,0645
0,9	0,0587
1,3	0,0340
1,8	0,0215
2,5	0,0318
3,5	0,0165
4,5	0,0103
6,25	0,0076
8,75	0,0023
12,5	0,0010
17,5	0,0002
25	7,57E-05

Anhang F

Beispiele für die Kurvenanpassungen an die Messkurven unter ruhigen Bedingungen

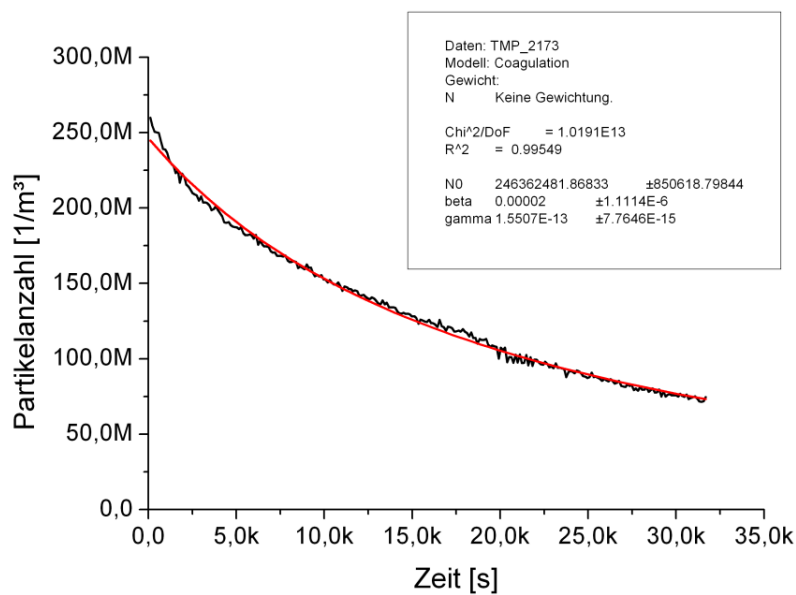


Abbildung F.1: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Ulmer Weiss bei ausgeschaltetem Ventilator

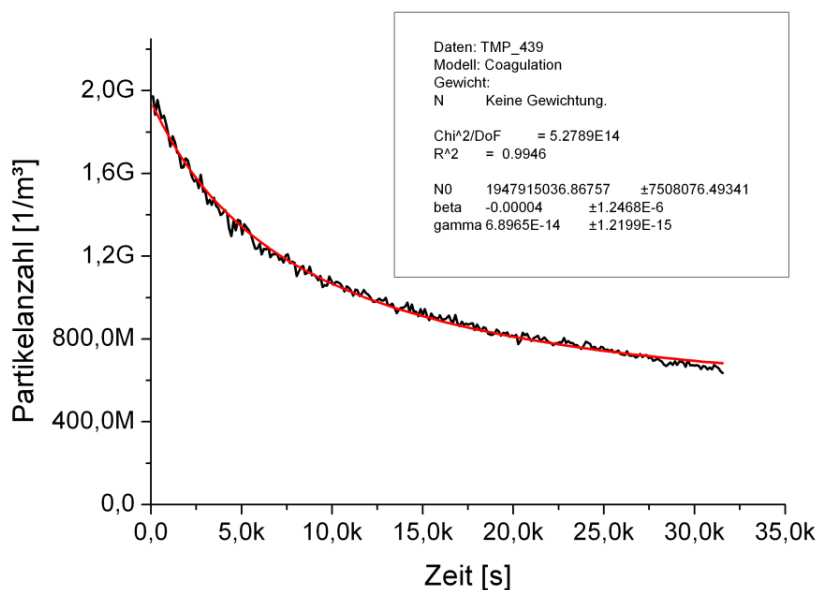


Abbildung F.2: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Ceroxid bei ausgeschaltetem Ventilator

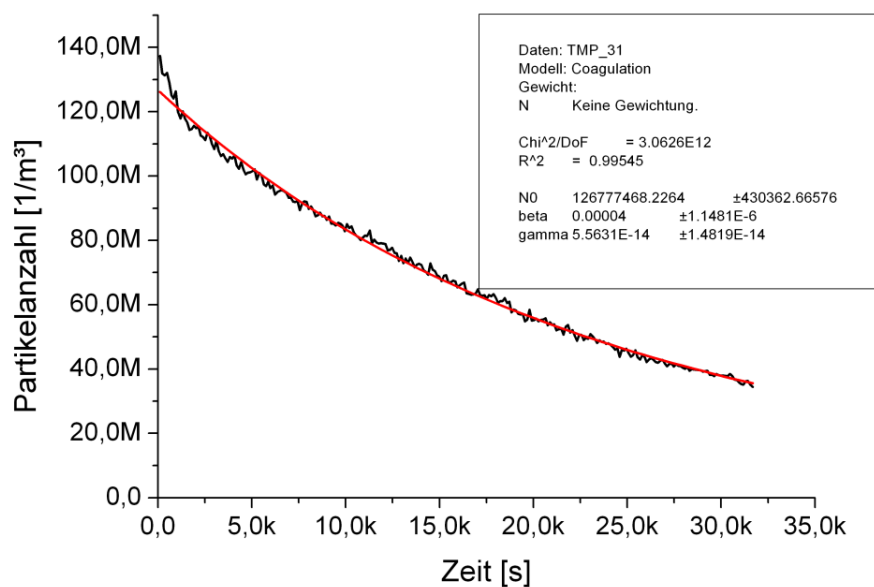


Abbildung F.3: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Arizonastaub bei ausgeschaltetem Ventilator

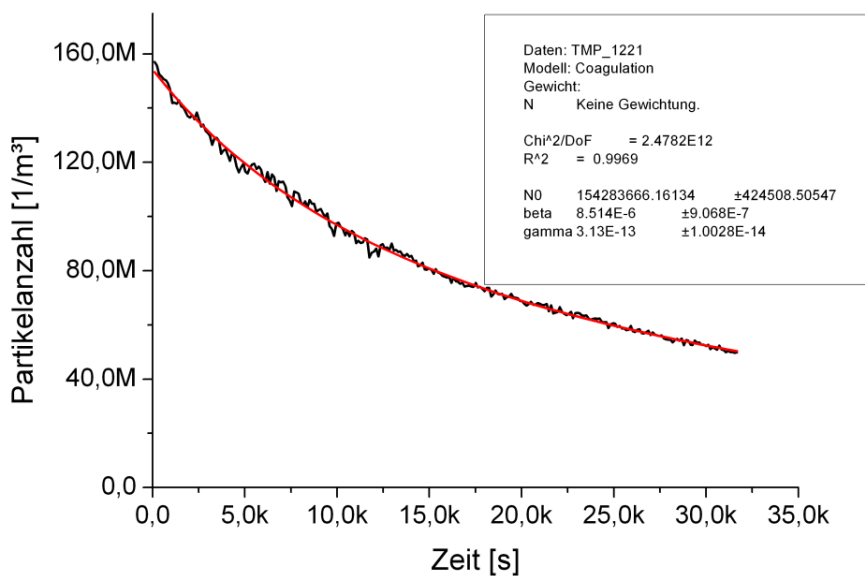


Abbildung F.4: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Tracerstaub bei ausgeschaltetem Ventilator

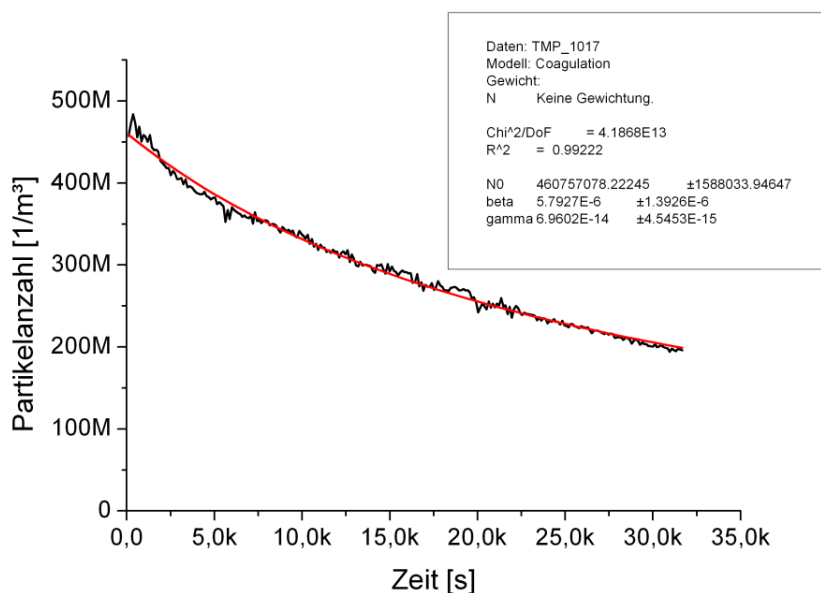


Abbildung F.5: Partikelanzahlkonzentration aufgetragen gegen die Zeit für Staub aus der Mastschweinehaltung bei ausgeschaltetem Ventilator

Literaturverzeichnis

- [1] UMWELTBUNDESAMT: *Entwicklung der Luftqualität in Deutschland*. Oktober 2009
- [2] *Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft - TA Luft*. Version: 01 2010. <http://www.bmu.de/files/pdfs/allgemein/application/pdf/taluft.pdf>. Online
- [3] WALLENFANG, O.: *Erstellung eines numerischen Modells zur zeitaufgelösten Prognose luftgetragener Gasausbreitung und deren experimentelle Verifikation*, Universität Bonn, Diss., 2002
- [4] WITTKOWSKI, M.: *Experimentelle Verifikation von zeitaufgelösten atmosphärischen Ausbreitungsmodellen mittels Tracergasmessetechnik*, Universität Bonn, Diplomarbeit, 2000
- [5] SCHMITT-PAUKSZTAT, G.: *Verfahren zur Bestimmung der Sedimentationsgeschwindigkeit von Stäuben und Festlegung partikelspezifischer Parameter für deren Ausbreitungssimulation*, Universität Bonn, Diss., 2006
- [6] HENSELER, J. ; ROSENTHAL, E. ; LODOMEZ, P. ; HARTMANN, J. ; DIEKMANN, B. ; BÜSCHER, W.: Eigenschaften von Partikeln aus landwirtschaftlichen Anlagen - Resuspension. In: *Landtechnik* 3 (2009), S. 198–201
- [7] FRIEDLANDER, S. K.: *Smoke, Dust, and Haze - Fundamentals of Aerosol Dynamics*. Oxford University Press, 2000
- [8] KRUG, N: *Gesundheitsgefahren durch ultrafeine Partikel*. <http://www.igf-bbg.de/>
- [9] *DIN-EN 481 - Arbeitsplatzatmosphäre - Festlegung der Teilchengrößenverteilung zur Messung luftgetragener Partikel*
- [10] *Particulate Matter (PM10)*. <http://www.epa.gov>
- [11] REIST, P. C.: *Aerosol Science and Technology*. McGraw-Hill, 1993
- [12] HINDS, W. C.: *Aerosol Technology - Properties, Behaviour, and Measurement of Airborne Particles*. John Wiley and Sons, 1999
- [13] ZENGER, A. ; SPRINGER (Hrsg.): *Atmosphärische Ausbreitungsmodellierung - Grundlagen und Praxis*. Springer, 1998

- [14] LUNG, T. ; MÜLLER, H.-J. ; GLÄSER, M. ; MÖLLER, B.: Messung und Modellierung von Konzentrationen im Naturmaßstab. In: *Agrartechnische Forschung* 8 (2002), S. 5–15
- [15] WALLENFANG, O.: *Vergleichende Analyse verschiedener Methoden zur Prognose der Geruchsausbreitung emissionsrelevanter Anlagen*, Universität Bonn, Diplomarbeit, 1998
- [16] SEIBEL, C. ; MASSMEYER, K.: Berechnung von Windfeldern über Nordrhein-Westfalen mit einem massenkonsistenten Windfeldmodell. In: *Staub - Reinhaltung der Luft* 55 (1995), S. 205–210
- [17] ZENGER, A.: *Unterschiedliche Verfahren zur Prognose atmosphärischer Immissionen im Rahmen von Umweltverträglichkeitsprüfungen - Methoden, Möglichkeiten und Grenzen*. 1996
- [18] GRIEBEL, M. ; DORNSEIFER, T. ; NEUNHOEFFER, T.: *Numerical Simulation in Fluid Dynamics, a Practical Introduction*. SIAM, Philadelphia, 1998
- [19] GRIEBEL, M. ; CROCE, R. ; ENGEL, M.: *NaSt3DGP - A Parallel 3D Navier-Stokes-Solver User's Guide*. 2002
- [20] CROCE, R.: *Ein paralleler, dreidimensionaler Navier-Stokes-Löser für inkompressible Zweiphasenströmungen mit Oberflächenspannung, Hindernissen und dynamischen Kontaktflächen*, Universität Bonn, Diplomarbeit, 2002
- [21] AKBAR, M.K. ; RAHMAN, M. ; GHIAASIAAN, S.M.: Particle transport in a small square enclosure in laminar natural convection. In: *Journal of Aerosol Science* 40 (2009), S. 747–761
- [22] ERMAK, D. L. ; BUCHHOLZ, H.: Numerical integration of the langevin equation: Monte Carlo simulation. In: *Journal of Computational Physics* 35 (1980), S. 169
- [23] GUTSCH, A. ; PRATSINIS, S. E. ; LÖFFLER, F.: Agglomerate structure and growth rate by trajectory calculations of monomer-cluster collisions. In: *Journal of Aerosol Science* 26 (1995), S. 187–199
- [24] SONG, D.K. ; CHANG, H. ; KIM, S.S. ; OKUYAMA, K.: Numerical Evaluation of the Transfer Function of a Low Pressure DMA by Using the Langevin Dynamic Equation. In: *Aerosol Science and Technology* 39 (2005), S. 701–712
- [25] TSUJI, Y. ; CROWE, C. T. ; SOMMERFELD, M.: *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. Crc Pr Inc, 1997
- [26] SAFFMAN, P. G.: The lift on a small sphere in a slow shear flow. In: *Journal of Fluid Mechanics* 22 (1965), S. 385–400
- [27] SAFFMAN, P. G.: Corrigendum to the lift on a small sphere in a slow shear flow. In: *Journal of Fluid Mechanics* 31 (1968), S. 624

- [28] HEINE, M. C. ; PRATSINIS, S. E.: Brownian Coagulation at High Concentration. In: *Langmuir* 23 (2007), S. 9882–9890
- [29] JANICKE, Ingenieurbüro: *AUSTAL2000 - Programmbeschreibung zu Version 2.4*. Version: 01 2009. http://www.austal2000.de/data/2009-02-03/austal2000_de.pdf. Programmbeschreibung
- [30] LUNG, T.: *Handbuch BAGEG Version 1.1*. Ingenieurbüro Dipl.-Phys. T. Lung, 1998
- [31] ROSENTHAL, E.: *Aufbau und Optimierung eines Messsystems zur Bestimmung der Sedimentationsgeschwindigkeit von Aerosolpartikeln unter Berücksichtigung klimatischer Rahmenbedingungen*, Universität Bonn, Diplomarbeit, 2006
- [32] ALLEN, M. D. ; RAABE, O. G.: Re-evaluation of millikan's oil drop data for the motion of small particles in air. In: *Journal of Aerosol Science* 13 (1982), S. 537–547
- [33] KOTRAPPA, P.: Shape factors for quartz aerosol in respirable size range. In: *Journal of Aerosol Science* 2 (1971), S. 353–358
- [34] ALLEN, M.D. ; MOSS, O.R. ; BRIANT, J.K.: Dynamic shape factors for LMFBR mixed-oxide fuel aggregates. In: *Journal of Aerosol Science* 10 (1979), S. 43–48
- [35] COLBECK, I.: Dynamic shape factors of fractal clusters of carbonaceous smoke. In: *Journal of Aerosol Science* 21 (1990), S. S43–S46
- [36] DAVIES, C.N.: Particle-fluid interaction. In: *Journal of Aerosol Science* 10 (1979), S. 477–513
- [37] FUCHS, N. A.: *The Mechanics of Aerosols*. Pergamon Press, 1964
- [38] CRUMP, L. G. ; SEINFELD, J. H.: Turbulent Deposition and Gravitational Sedimentation of an aerosol in a vessel of arbitrary shape. In: *Journal of Aerosol Science* 12 (1981), S. 405–415
- [39] PARK, S. H. ; KIM, H. O. ; HAN, Y. T. ; KWON, S. B. ; LEE, K. W.: Wall Loss Rate of Polydispersed Aerosols. In: *Aerosol Science and Technology* 35 (2001), S. 710–717
- [40] MCMURRY, P. H. ; RADER, D. J.: Aerosol Wall Losses in Electrically Charged Chambers. In: *Aerosol Science and Technology* 4 (1985), S. 249–268
- [41] CRUMP, J. G. ; FLAGAN, R. C. ; SEINFELD, J. H.: Particle Wall Loss Rates in Vessels. In: *Aerosol Science and Technology* 2 (1983), S. 303–309
- [42] CHEN, B. T. ; YEH, H. C. ; CHENG, Y. S.: Evaluation of an Environmental Reaction Chamber. In: *Aerosol Science and Technology* 17 (1992), S. 9–24
- [43] NOMURA, Y.: *Turbulent particle deposition in a rectangular chamber: The study of effect of particle size and ventilation regimes*, Clarkson University, Diss., 1996
- [44] BUNZ, H.: Coagulation Workshop. In: *Journal of Aerosol Science* 21 (1990), S. 139–153

- [45] WILLIAMS, M. M. R. ; LOYALKA, S. K.: *Aerosol Science Theory and Practice*. Pergamon Press, 1991
- [46] PARK, S. H. ; LEE, K. W. ; OTTO, E. ; FISSAN, H.: The log-normal size distribution theory of brownian aerosol coagulation for the entire particle size range: Part I - Analytical solution using the harmonic mean coagulation kernel. In: *Journal of Aerosol Science* 30 (1998), S. 3–16
- [47] OTTO, E. ; FISSAN, H. ; PARK, S. H. ; LEE, K. W.: The log-normal size distribution theory of brownian aerosol coagulation for the entire particle size range: Part II - Analytical solution using Dahneke's coagulation kernel. In: *Journal of Aerosol Science* 30 (1998), S. 17–34
- [48] OKUYAMA, K. ; KOUSAKA, Y. ; YOSHINORI, K. ; YOSHIDA, T.: Turbulent Coagulation of Aerosols in a stirred Tank. In: *Journal of Chemical Engineering of Japan* 9 (1976), S. 142 – 147
- [49] KRUIS, F. E. ; KUSTERS, K. A.: The Collision Rate of Particles in Turbulent Media. In: *Journal of Aerosol Science* 27 (1996), S. S263–S264
- [50] KRUIS, F. E. ; KUSTERS, K. A.: The Collision Rate of Particles in Turbulent Flow. In: *Chemical Engineering Communications* 158 (1997), S. 201–230
- [51] CELADA, A. T. ; SALCID, A.: A mean field model for brownian and turbulent coagulation of polydispersed aerosols. In: *Revista Mexicana De Física* 51 (2005), S. 379–386
- [52] ERNST, F. O. ; PRATSINIS, S. E.: Self-preservation and gelation during turbulence-induced coagulation. In: *Journal of Aerosol Science* 37 (2006), S. 123–142
- [53] GLASGOW, L. A.: *Changes in Aerosol Particle Size and Number by Coagulation: A Review*. Department of Chemical Engineering, Kansas State University, Manhattan, KS 66506-5102, December 2002
- [54] ALAM, M. K.: The Effect of van der Waals and Viscous Forces on Aerosol Coagulation. In: *Aerosol Science and Technology* 6 (1987), S. 41 – 52
- [55] HAMAKER, H. C.: The London - van der Waals Attraction between spherical particles. In: *Physica* 4 (1937), S. 1058–1072
- [56] AHMADI, G.: *Particle transport, deposition and removal*. http://web2.clarkson.edu/projects/crcd/me437/downloads/5_vanderWaals.pdf. Version: 2004
- [57] LUMLEY, J. L. ; PANOFSKY, H. A.: *The structure of Atmospheric Turbulence*. Interscience, New York, 1964
- [58] ROSENTHAL, E.: *Verfahren zur Validierung von Feinstaubausbreitungssimulationen durch Einbringung fluoreszierender Tracerpartikel*, Universität Bonn, Diss., 2010

- [59] BORODIN, A. N. ; SALMINEN, P.: *Handbook of Brownian Motion - Facts and Formulae*. Birkhäuser, 2002
- [60] HARTMANN, J.: *in Vorbereitung*, Universität Bonn, Diplomarbeit, 2010
- [61] CO. KG, Grimm Aerosol Technik G.: *Partikel- und Staubbmessgeräte Serie 1.100*. Version: 2004. <http://www.grimm-aerosol.com>
- [62] HEIM, M. ; MULLINS, B. ; UMHAUER, H. ; KASPER, G.: Performance evaluation of three optical particle counters with an efficient “multimodal“ calibration method. In: *Journal of Aerosol Science* 39 (2008), S. 1019 – 1031
- [63] *Sensirion SHT11*. http://www.sensirion.com/de/01_humidity_sensors/02_humidity_sensor_sht11.htm. Datenblatt
- [64] *Freescale Semiconductor MPXA6115A*. <http://www.freescale.com>. Datenblatt
- [65] GMBH, Eduard M.: *Ulmer Weiss XM*. Datenblatt, 03 2005
- [66] REZNIK, G. ; SCHMIDT, E.: Abscheidung von Feinstaub an Pflanzen bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten. In: *Chemie Ingenieur Technik - CIT* 80 (2008), S. 1849 – 1853
- [67] *GESTIS-Stoffdatenbank*. online. <http://biade.itrust.de/biade/lpext.dll?f=templates&fn=main-h.htm>. Version: 12 2009
- [68] *Arizonastaub*. Version: 12 2009. http://www.ksl-staubtechnik.de/datenblaetter/pruef_test/arizona_dt.pdf. Datenblatt
- [69] SCHMITT-PAUKSZTAT, G.: *Verfahren zur Bestimmung der Sedimentationsgeschwindigkeit von Stäuben und Festlegung partikelspezifischer Parameter für deren Ausbreitungssimulation*, Universität Bonn, VDI-MEG 435, Diss., März 2006
- [70] KIM, D. S. ; PARK, S. H. ; SONG, Y. M. ; KIM, D. H. ; LEE, K. W.: Brownian coagulation of polydisperse aerosols in the transition regime. In: *Aerosol Science and Technology* 34 (2003), S. 859–868
- [71] SCHNELL, M. ; CHEUNG, C. S. ; LEUNG, C. W.: Investigation on the coagulation and deposition of combustion particles in an enclosed chamber with and without stirring. In: *Journal of Aerosol Science* 37 (2006), S. 1581–1595
- [72] JAMRISKA, M. ; MORAWSKA, L.: Quantitative assessment of the effect of surface deposition and coagulation on the dynamics of submicrometer particles indoors. In: *Aerosol Science and Technology*, 37 (2003), S. 425–436
- [73] PARK, S. H. ; XIANG, R. ; LEE, K.W.: Brownian coagulation of fractal agglomerates: Analytical solution using the log-normal size distribution assumption. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 231 (2000), S. 129–135

- [74] KRUIS, F. E. ; MAISLES, A. ; FISSAN, H.: Direct Simulation Monte Carlo Method for Particle Coagulation and Aggregation. In: *AIChE Journal* 46 (2000), S. 1735–1742
- [75] GARCIA, A. L.: A MONTE CARLO SIMULATION OF COAGULATION. In: *Physica A* 143 (1986), S. 535–546
- [76] HENSELER, J.: *private Kommunikation*
- [77] ROSENTHAL, E. ; LODOMEZ, P. ; HENSELER, J. ; HARTMANN, J. ; BÜSCHER, W. ; DIEKKMANN, B.: Validierung eines dynamischen Ausbreitungsmodells für Stäube aus landwirtschaftlichen Anlagen. In: *Landtechnik* 2/2009 (2009), S. 98 – 101
- [78] BRADSKI, G. ; KAEHLER, A.: *OpenCV*. O'Reilly, 2008
- [79] ASTM: Standard guide for statistic evaluation of atmospheric dispersion model performance / American Society for Testing and Materials. 2000. – Forschungsbericht
- [80] IRWIN, J. ; CARRUTHERS, D. ; PAUMIER, J. ; STOCKER, J.: Application of ASTM D6589 to evaluate dispersion model performance to simulate average centerline concentration values. In: *Proceedings of the 8th Int. Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, 2002
- [81] *Documentation of the Lagrangian Particle Model GRAL (Graz Lagrangian Model) Vs. 6.8*. 8010 Graz, Landhausgasse 7, 2008. (Bericht Nr. LU-10-08)
- [82] OETTL, D.: *Evaluierung der Ausbreitungsmodelle AIR.LAG, LASAT und AUSTAL 2000 für die Schadstoffausbreitung von Punktquellen mit thermischer Überhöhung*. – Unpublished Report Nr. FVT-28/06/Öt V&U 05/05/6300 vom 24.4.2006
- [83] KRAUSE, K. H. ; LUNG, T.: Immissionsprognostik von Geruchsstoffeinträgen im Rahmen von Genehmigungsverfahren. In: *Staub-Reinhaltung der Luft* 53 (1993)
- [84] TIWARY, A. ; MORVAN, H. P. ; COLLS, J. J.: Modelling the size-dependent collection efficiency of hedgerows for ambient aerosols. In: *Journal of Aerosol Science* 37 (2005), S. 990–1015
- [85] EINSTEIN, A.: *Investigation on the Theory of the Brownian Movement*. Dover, New York, 1956
- [86] BUNGARTZ, H.-J. ; ZIMMER, S. ; BUCHHOLZ, M. ; PFLÜGER, D.: *Modellbildung und Simulation: Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer Verlag, 2009
- [87] HASSLER, U.: *Stochastische Integration und Zeitreihenmodellierung: Eine Einführung mit Anwendungen aus Finanzierung und Ökonometrie (Statistik Und Ihre Anwendungen)*. Springer, 2007

Danksagung

Zum Abschluss meiner Arbeit möchte ich mich bei

PD Dr. Bernd Diekmann für die Ermöglichung und engagierte Betreuung dieser Doktorarbeit,

Prof. Dr. Norbert Wermes für die Betreuung meiner Diplomarbeit und die Übernahme des Korreferendariats bei dieser Doktorarbeit,

Prof. Dr. Wolfgang Büscher und den Mitarbeitern seiner Arbeitsgruppe für die freundliche Aufnahme in der Arbeitsgruppe am Institut für Landtechnik,

Eberhard Rosenthal für die erfolgreiche Zusammenarbeit im gemeinsamen Projekt, die lustigen Kaffeepausen und die Freundschaft seit Beginn des Studiums,

Dr. Torsten Haas und den übrigen Mitgliedern der Arbeitsgruppe „Energie- und Umweltphysik“ für die Antworten bei allen physikalischen und nicht-physikalischen Fragen,

Den Mitarbeitern der Werkstatt des Instituts für Landtechnik für die Hilfe bei der Konstruktion und dem Aufbau der Versuchsanordnung,

Marcus Schürings für das Korrekturlesen der Arbeit und die Freundschaft bereits seit Schulzeiten,

Andrea Dahmen für das Korrekturlesen der Arbeit und

meinen Eltern, meinen Geschwistern und meiner Patentante für die Unterstützung während des gesamten Studiums

bedanken.