



Fraunhofer Institut
Atmosphärische
Umweltforschung

Schriftenreihe

Martina Stockhause

Bestimmung von Emissionsraten diffuser Quellen
mit Hilfe inverser Modellierung

Herausgeber: Prof. Dr. Wolfgang Seiler
Fraunhofer-Institut Atmosphärische Umweltforschung
Kreuzeckbahnstr. 19, 82467 Garmisch-Partenkirchen
Garmisch-Partenkirchen, 2000

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Stockhause, Martina:

Bestimmung von Emissionsraten diffuser Quellen mit Hilfe
inverser Modellierung / Martina Stockhause.

- Als Ms. gedr. - Aachen : Shaker, 2000

(Schriftenreihe des Fraunhofer-Instituts Atmosphärische Umweltforschung;
Bd. 2000,65)

Zugl.: Hamburg, Univ., Diss., 2000

ISBN 3-8265-7202-5

Copyright Shaker Verlag 2000

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen
oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungs-
anlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Als Manuskript gedruckt. Printed in Germany.

ISBN 3-8265-7202-5

ISSN 1436-1094

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Abstract

A flexible and accurate method for the determination of emission rates of diffuse sources, i.e. sources with highly variable emissions in time and esp. in space, is presented: the *inverse method*. Emissions of such area or volume sources, which are of great importance for immission studies, cannot be measured directly. The inverse method consists of limited concentration measurements and a model which is the inverse of a normal dispersion model. In this work the measurements are realized by line averaging optical data (FTIR spectroscopy, DOAS) about 100 m in lee of the source under consideration. The dispersion model used is the Lagrangian particle model IBJparticle, which satisfies the German VDI guideline for particle models (VDI 3945/3, 1998), and the inversion is done by single value decomposition (SVD) to form IPAM (Inverse Particle Dispersion Model). The dispersion model is driven by wind and turbulence fields calculated by the Eulerian model MISKAM (Eichhorn, 1996). Extensive investigations have been carried out about the conditions under which the inverse method is applicable. It is found that inverse simulations are sensitive to measurement configuration and in turn can assist in the determination of optimal measurement configurations. Finally, two applications are presented: First a study of the simple case of the dispersion of a tracer gas from a four point area source in homogeneous and flat terrain which serves as a validation of the inverse model under real atmospheric conditions. The achieved accuracy in the emission rate is $\pm 7.6\%$. Secondly, the emission of benzene from a *filling station* is investigated. This serves as a complex diffuse volume source. The emission rate of benzene is determined by IPAM and to quantify the unknown inaccuracy inherent in this emission rate a simultaneous release of the tracer gas N_2O is done. The result of the inverse model for the emission of N_2O has a deviation from the release rate of about $\pm 23\%$.

Kurzfassung

Eine flexible Methode zur Bestimmung von Emissionsraten der unterschiedlichsten diffusen Quellen, d.h. Quellen mit zeitlich und v.a. örtlich stark variierenden Emissionen, die an der Quelle nicht direkt erfassbar sind, wird vorgestellt: die *inverse Methode*. Die Kenntnis dieser Emissionen ist für Luftqualitätsuntersuchungen und zur Prognose von zu erwartenden Immissionsbelastungen erforderlich. Bei der inversen Methode werden einzelne Konzentrationsmessungen in Lee einer Quelle durchgeführt. Diese dienen einem invertierten, mikroskaligen, physikalischen, numerischen Dispersionsmodell zusammen mit meteorologischen Feldern als Eingangsdaten zur Bestimmung der gesuchten Emissionsrate. Es werden Tests des inversen Modells beschrieben, sowie daraus Vorschriften zur Meßkonfiguration abgeleitet. Abschließend wird beispielhaft gezeigt, wie die diffusen Benzolemissionen einer Tankstelle erfolgreich bestimmt werden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Verbleib von Stoffen in der Umwelt	1
1.2	Bedeutung von Quellstärken	3
1.3	Gliederung der vorliegenden Arbeit	5
2	Invertierung von Dispersionsmodellen	7
2.1	Direkte Methoden	9
2.1.1	Invertierung von Gauß-Modellen	9
2.1.2	Backward-Lagrangemodelle	10
2.1.3	Neuronale Netzwerkmodelle	11
2.2	Adaptive Invertierungsmethoden	12
2.2.1	Single Value Decomposition	14
2.2.2	Kalman Filter Technik	15
2.2.3	Variationsanalyse	18
3	Verwendete Dispersionsmodelle	23
3.1	Dispersion	23
3.2	Modelle	26
3.2.1	Gauß-Modell PAL	27
3.2.2	Lagrange-Partikelmodell IBJparticle	31
3.2.3	Euler-Modell MISKAM	38
4	Inverses Modell IPAM	43
4.1	Modellsystem MISKAM-IBJparticle	43
4.1.1	Schnittstelle MISKAM-IBJparticle	46
4.1.2	Bewertung der Windprofile aus MISKAM	47
4.2	Invertierung von IBJparticle — IPAM	54

Inhaltsverzeichnis

4.2.1	Vorbereitungen	56
4.2.2	Methode	59
4.3	Test von IPAM	62
4.3.1	Testfall	64
4.3.2	Sensitivität der Invertierung	66
4.3.3	Veränderter Testfall	69
5	Anwendungsbeispiele	73
5.1	Inverse Methode	73
5.1.1	Aufbau	74
5.1.2	FTIR-Spektroskopie	76
5.1.3	Mini-SODAR	79
5.1.4	Bewertung der inversen Methode	81
5.2	Kontrollierte Freisetzung	83
5.3	Dispersive Quelle	87
6	Zusammenfassung/Ausblick	97
	Symbolverzeichnis	101
	Abbildungsverzeichnis	104
	Tabellenverzeichnis	106
	Literaturverzeichnis	107
	Danksagung	115