

VEREIN  
DEUTSCHER  
INGENIEURE

Umweltmeteorologie  
Atmosphärische Ausbreitungsmodelle  
Partikelmodell  
Environmental meteorology  
Atmospheric dispersion models  
Particle model

VDI 3945  
Blatt 3 / Part 3

Ausg. deutsch/englisch  
Issue German/English

*Der Entwurf dieser Richtlinie wurde mit Ankündigung im Bundesanzeiger einem öffentlichen Einspruchsverfahren unterworfen.*

*Die deutsche Version dieser Richtlinie ist verbindlich.*

*The draft of this standard has been subject to public scrutiny after announcement in the Bundesanzeiger (Federal Gazette).*

*The German version of this standard shall be taken as authoritative. No guarantee can be given with respect to the English translation.*

Inhalt	Seite
Vorbemerkung.....	2
Einleitung.....	2
<b>1 Anwendungsbereich.....</b>	<b>5</b>
<b>2 Begriffe.....</b>	<b>6</b>
<b>3 Formelzeichen.....</b>	<b>11</b>
<b>4 Modellbeschreibung.....</b>	<b>13</b>
4.1 Konzept.....	13
4.2 Transport.....	14
4.3 Deposition und Umwandlungen.....	17
4.4 Berechnung der Konzentration.....	18
<b>5 Eingabedaten.....</b>	<b>19</b>
5.1 Rechengitter.....	20
5.2 Meteorologische Daten.....	21
5.3 Stoffdaten.....	22
5.4 Quelldaten.....	23
5.5 Auswertegitter.....	24
<b>6 Ergebnisse.....</b>	<b>24</b>
6.1 Konzentration und Dosis.....	26
6.2 Deposition.....	27
6.3 Ursachen- und Wirkungsanalysen.....	28
6.4 Mittlere Geruchsstoffausbreitung.....	28
6.5 Strahlenexposition ( $\gamma$ -Submersion).....	29
<b>7 Genauigkeit.....</b>	<b>30</b>
<b>8 Konformität zur Richtlinie.....</b>	<b>32</b>
<b>Anhang A Markovprozess.....</b>	<b>34</b>
<b>Anhang B Statistische Signifikanz.....</b>	<b>36</b>
B1 Fester Stichprobenumfang.....	39
B2 Variabler Stichprobenumfang.....	40
<b>Anhang C Fahnenüberhöhung.....</b>	<b>42</b>
<b>Anhang D Verifikationstests.....</b>	<b>44</b>
D1 Homogenitätstest.....	44
D2 Deposition.....	46
D3 Taylor-Theorem.....	50
D4 Berljand-Lösung.....	51
D5 Abgasfahnenüberhöhung.....	54
D6 Dreidimensionales Windfeld.....	55
Schrifttum.....	57
Benennungsindex englisch – deutsch.....	59

Contents	Page
Preliminary note.....	2
Introduction.....	2
<b>1 Scope.....</b>	<b>5</b>
<b>2 Terms and definitions.....</b>	<b>6</b>
<b>3 Symbols.....</b>	<b>11</b>
<b>4 Model description.....</b>	<b>13</b>
4.1 Concept.....	13
4.2 Transport.....	14
4.3 Deposition and transformation processes.....	17
4.4 Calculation of concentration.....	18
<b>5 Input data.....</b>	<b>19</b>
5.1 Computational grid.....	20
5.2 Meteorological data.....	21
5.3 Physical and chemical data.....	22
5.4 Source data.....	23
5.5 Sampling grid.....	24
<b>6 Model outputs.....</b>	<b>24</b>
6.1 Concentration and dose.....	26
6.2 Deposition.....	27
6.3 Source-receptor analyses.....	28
6.4 Mean odour dispersion.....	28
6.5 Radiation exposure ( $\gamma$ -radiation).....	29
<b>7 Accuracy.....</b>	<b>30</b>
<b>8 Conformance with standard.....</b>	<b>32</b>
<b>Annex A Markov process.....</b>	<b>34</b>
<b>Annex B Statistical significance.....</b>	<b>36</b>
B1 Fixed sample size.....	39
B2 Variable sample size.....	40
<b>Annex C Plume rise.....</b>	<b>42</b>
<b>Annex D Verification tests.....</b>	<b>44</b>
D1 Homogeneity test.....	44
D2 Deposition.....	46
D3 Taylor theorem.....	50
D4 Berlyand equation.....	51
D5 Plume rise.....	54
D6 Three-dimensional wind field.....	55
Bibliography.....	57
Term index English – German.....	59

VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) – Normenausschuss  
Fachbereich Umweltmeteorologie

VDI-Handbuch Reinhaltung der Luft, Band 1b: Umweltmeteorologie

## Vorbemerkung

Der Inhalt dieser Richtlinie ist entstanden unter Beachtung der Vorgaben und Empfehlungen der Richtlinie VDI 1000.

Alle Rechte, insbesondere die des Nachdrucks, der Fotokopie, der elektronischen Verwendung und der Übersetzung, jeweils auszugsweise oder vollständig, sind vorbehalten.

Die Nutzung dieser Richtlinie ist unter Wahrung des Urheberrechts und unter Beachtung der Lizenzbedingungen ([www.vdi.de/richtlinien](http://www.vdi.de/richtlinien)), die in den VDI-Merkblättern geregelt sind, möglich.

Allen, die ehrenamtlich an der Erarbeitung dieser Richtlinie mitgewirkt haben, sei gedankt.

Eine Liste der aktuell verfügbaren Blätter dieser Richtlinienreihe ist im Internet abrufbar unter [www.vdi.de/3945](http://www.vdi.de/3945).

## Einleitung

Spurenstoffe in der Atmosphäre können Belastungen und Schädigungen von Menschen, Tieren und Pflanzen (bei toxischen Stoffen) und von Gegenständen (bei aggressiven Stoffen) bewirken. Hierbei interessieren Langzeitbelastungen, vorwiegend durch Emissionen aus Industriebetrieben oder infolge des Straßenverkehrs, und episodische Belastungen bei störfall- oder unfallbedingten Freisetzungen oder bei besonderen Wetterbedingungen.

Zur Bestimmung der Konzentration von Spurenstoffen in der Atmosphäre und ihrer Ablagerung auf Oberflächen dienen:

- Messungen
- physikalische Modelle
- mathematische Modelle
  - gaußsche Modelle
  - eulersche Modelle
  - lagrangesche Modelle

In dieser Richtlinie wird die numerische Berechnung der Ausbreitung von Spurenstoffen mit einem lagrangeschen Partikelmodell beschrieben [14 bis 19]. Hierbei werden punktförmige Partikel, die einen Spurenstoff repräsentieren, auf ihrem Weg durch die Atmosphäre verfolgt. Die Partikel bewegen sich mit der mittleren Strömung und werden dabei zusätzlich dem Einfluss der Turbulenz ausgesetzt. Die Wirkung der Turbulenz wird modelliert, indem bei jedem Partikel zu der mittleren Bewegung eine weitere zufällige Bewegung addiert wird. Diese wird aus einem Markowprozess gewonnen, hängt von der Turbulenzintensität ab und ist für alle Partikel verschieden. Die Konzentrationsverteilung wird durch Auszählen der Partikel in vorgegebenen

## Preliminary note

The content of this standard has been developed in strict accordance with the requirements and recommendations of the standard VDI 1000.

All rights are reserved, including those of reprinting, reproduction (photocopying, micro copying), storage in data processing systems and translation, either of the full text or of extracts.

The use of this standard without infringement of copyright is permitted subject to the licensing conditions ([www.vdi.de/richtlinien](http://www.vdi.de/richtlinien)) specified in the VDI Notices.

We wish to express our gratitude to all honorary contributors to this standard.

A catalogue of all available parts of this series of standards can be accessed on the Internet at [www.vdi.de/3945](http://www.vdi.de/3945).

## Introduction

Trace species in the atmosphere may affect and damage human health, animals and vegetation (when toxic) and human property (when aggressive). Of particular interest are the long-term impacts originating predominantly from trace species emitted by industrial plants or vehicle traffic as well as episodic impacts due to accidental releases of trace species or in specific meteorological conditions.

Tools available for determining the concentration of trace species in the atmosphere and their deposition on surfaces include:

- measurement
- physical models
- mathematical models
  - Gaussian models
  - Eulerian models
  - Lagrangian models

This standard deals with the numerical calculation of trace species dispersion using a Lagrangian particle model [14 to 19]. This model tracks point-like particles representing a trace species on their path through the atmosphere. The particles travel with the mean wind and are additionally subjected to the influence of turbulence. The effect of the turbulence is modelled by adding an additional random velocity to the mean motion for each particle. This random velocity, which is derived from a Markov process, is a function of the turbulence intensity and is different for each particle. The concentration distribution is determined by counting the particles in given sampling volumes and expressed as mean values over the volume elements and time intervals.

Auszählvolumina als Mittelwerte über Volumenelemente und Zeitabschnitte bestimmt.

Dieser Ansatz unterscheidet sich grundsätzlich von den meisten sonst gebräuchlichen Modellierungsverfahren. Diese beruhen entweder auf einer physikalischen Modellierung der Ausbreitungsvorgänge im Windkanal oder auf der rechnerischen Lösung der Advektions-Diffusions-Gleichung.

Die Simulation von Diffusionsvorgängen im Windkanal [1] bietet den Vorteil, dass die Schadstoffausbreitung bei sehr komplexen Gebäude- oder Hinderniskonfigurationen untersucht werden kann. Es gibt jedoch Einschränkungen hinsichtlich von Phänomenen, bei denen die Einhaltung von Reynoldszahlen, eine thermische Schichtung oder Windscherung wichtig sind. Zudem sind Windkanaluntersuchungen mit einem relativ großen experimentellen Aufwand verbunden. Chemische Umwandlungen während des Ausbreitungsprozesses können hierbei nicht behandelt werden.

Während bei der physikalischen Modellierung im Windkanal auch das Wind- und das Turbulenzfeld mitmodelliert werden, müssen diese bei den mathematischen Modellen explizit vorgegeben werden. Hierzu ist ein mathematisches Modell der atmosphärischen Grenzschicht erforderlich [2 bis 5]<sup>1)</sup>.

Das einfachste Modell zur Berechnung der Schadstoffausbreitung ist das gaußsche Fahnenmodell [6]. Es lehnt sich an eine geschlossene Lösung der stationären Advektions-Diffusions-Gleichung an. Die benötigten Parameter wurden aus Ausbreitungsexperimenten bestimmt. Die vertikale Änderung der Windgeschwindigkeit wird mit einem einfachen Potenzansatz berücksichtigt. Man benötigt hierzu lediglich einen Windwert in einer Höhe. Das gaußsche Fahnenmodell ist nur bei stationären Verhältnissen einsetzbar, während die anderen Modelle auch instationäre Vorgänge beschreiben können.

Das Gauß-Wolken-Modell<sup>2)</sup> [7] basiert auf einer einfachen Lösung der zeitabhängigen Advektions-Diffusions-Gleichung. Die Ausbreitung eines Spurenstoffs wird in Form einer Freisetzung einzelner Wolken berechnet. Diese dehnen sich unter dem Einfluss der Turbulenz aus und bewegen sich mit dem mittleren Wind. Der mittlere Wind und die Emissionen können zeitlich variabel sein. In einem homogenen Windfeld und bei stationären Bedingungen sind die Ergebnisse des Gauß-Wolken-Modells und Fahnenmodells nahezu identisch. Die Berücksichtigung chemischer Umwandlungen beschränkt sich auf einfache Prozesse erster Ordnung.

This approach differs fundamentally from the majority of the established modelling techniques which are founded either on a physical model of the dispersion processes in the wind tunnel, or on the computed solution of the advection-diffusion equation.

The simulation of diffusion processes in the wind tunnel [1] has the advantage that it allows pollutant dispersion investigations of highly complex building and obstacle configurations. However, this method has its limitations when it comes to phenomena where compliance with Reynolds numbers, thermal stratification or wind shear is relevant. Besides, wind tunnel studies require a relatively elaborate experimental setup. Chemical transformations occurring during the dispersion process cannot be considered.

While physical wind tunnel models can incorporate the wind and turbulence fields in the simulation, the latter have to be explicitly specified for mathematical models. This requires a mathematical model of the atmospheric boundary layer [2 to 5]<sup>1)</sup>.

The simplest model for pollutant dispersion simulations is the Gaussian plume model [6] which is based on an analytical solution of the steady-state advection-diffusion equation. The required parameters have been derived from dispersion experiments. The vertical change in the wind velocity is taken into account by a simple power law. All that is needed for this purpose is a wind value at a given height. The Gaussian plume model is only applicable to steady-state conditions while the other models can also describe time-varying processes.

The Gaussian puff model<sup>2)</sup> [7] is based on a simple solution of the time-varying advection-diffusion equation. The dispersion of a trace species is modelled in the form of a release of individual puffs. These expand under the influence of the turbulence and travel with the mean wind. The mean wind and the emissions may vary over time. In a homogeneous wind field and in steady-state conditions, the Gaussian puff and plume models yield virtually identical results. The consideration of chemical transformations is restricted to simple first-order processes. Both Gaussian models can take into account dry and wet deposition in parameterized form.

<sup>1)</sup> Entsprechende Richtlinien sind in der Richtlinienreihe VDI 3783 in Vorbereitung. / Standards on these models are currently in preparation within the series of standards VDI 3783.

<sup>2)</sup> Auch anschaulich gaußsches Puff-Modell genannt. / Also referred to as a Gaussian puff trajectory model.

Trockene und nasse Deposition können in beiden Gaußmodellen in parametrisierter Form berücksichtigt werden.

Im eulerschen Gittermodell wird die Advektions-Diffusions-Gleichung numerisch mit einem Differenzenverfahren gelöst<sup>3)</sup>. Der Vorteil dieses Modelltyps liegt in der Flexibilität, mit der Inhomogenitäten der Strömung und der Turbulenz in Raum und Zeit berücksichtigt werden können. Der Nachteil liegt in der Schwierigkeit, die Advektion korrekt zu behandeln<sup>4)</sup>. Auch werden Punkt- und Flächenquellen über Gitterzellen verschmiert und komplexe Hindernisstrukturen können meist nur vereinfacht im Modell nachgebildet werden. Die Berücksichtigung chemischer Umwandlungen höherer Ordnung ist möglich. Nasse und trockene Deposition können physikalisch realistischer beschrieben werden als in einem Gaußmodell.

Das lagrangesche Partikelmodell, wie es in dieser Richtlinie beschrieben wird, zeichnet sich dadurch aus, dass es im Modellkonzept weitgehend die natürlichen Vorgänge bei der turbulenten Diffusion nachahmt. Aufgrund der Methode tritt keine numerische Diffusion auf. Das Verfahren liefert immer nicht negative Massendichten und ist massenerhaltend. Die Methode lässt beliebige Quellgeometrien bei beliebigem Zeitverhalten einer räumlich variablen Quelle zu. Es können die Sedimentation von schwerem Staub, die Resuspension sowie physikalische und chemische Umwandlungsprozesse erster Ordnung beschrieben werden. Komplexe Geometrien von Hindernissen können berücksichtigt werden. Das lagrangesche Partikelmodell kann für Modellierungsgebiete mit einer Ausdehnung von 20 m bis zu mehreren 100 km und für Problemzeiten von zehn Minuten bis zu mehreren Jahren eingesetzt werden, abhängig davon, auf welcher räumlichen und zeitlichen Skala die meteorologischen Eingabefelder bereitgestellt werden.

Als meteorologische Eingangsgrößen werden auf bestimmte Zeitabschnitte bezogene Felder der mittleren Windkomponenten, der Windfluktuationen und der Diffusionskoeffizienten benötigt, die man mit meteorologischen Vorschaltmodellen bestimmen kann [2 bis 5]. Bei zeitabhängigen Rechnungen müssen diese Größen als zeitliche Folge von Feldern zur Verfügung stehen. Weiterhin werden Emissionsdaten und gegebenenfalls Geländedaten und ein Hinderniskataster benötigt. Im Ergebnis erhält man eine zeitliche Folge der räumlichen Verteilung

In the Eulerian grid model, the advection-diffusion equation is solved numerically using a finite difference technique<sup>3)</sup>. The virtue of this model type lies in its flexibility to process flow and turbulence inhomogeneities over space and time. This model has, however, its drawbacks with regard to the correct treatment of advection<sup>4)</sup>. Moreover, point and area sources may be blurred over the grid cells, and complex obstacle configurations can normally only be treated in simplified form. Higher-order chemical transformation processes can be accommodated. The physical description of wet and dry deposition is more realistic than that in a Gaussian model.

The main advantages of the Lagrangian particle model, presented in this standard, are that the model concept largely reflects the natural phenomena involved in turbulent diffusion and the method eliminates numerical diffusion. The method always yields non-negative mass densities and is mass-conserving. It can be applied to any source geometry desired for any temporal behaviour of a spatially variable source. The sedimentation of heavy dust, its resuspension as well as physical and linear chemical transformation processes can be accommodated. Complex obstacle geometries can likewise be accounted for. Depending on the spatial and temporal scale at which the meteorological input fields are provided, the Lagrangian particle model can be used for modelling regions ranging from 20 m to several 100 km and over time intervals of ten minutes up to several years.

Required meteorological input information includes the fields (defined for certain time intervals) of the mean wind components, the wind fluctuations and the diffusion coefficients which can be generated by meteorological pre-processors [2 to 5]. For time-dependent calculations, these input parameters must be made available as a time series of fields. Furthermore, emission data and, depending on the specific case, terrain data and a land use inventory will be required. The model output is a time sequence of the spatial distribution of the concentration of the

<sup>3)</sup> Zu diesem Modelltyp ist ein Blatt der Richtlinienreihe VDI 3945 in Vorbereitung. / This model type is dealt with in a part of the series of standards VDI 3945 currently in preparation.

<sup>4)</sup> Je nach Verfahren können numerische Diffusion, Massendefekte oder negative Massendichten auftreten. / Depending on the method, numerical diffusion, mass deficits or negative mass densities may occur.

der Konzentration des emittierten Stoffs, seiner Umwandlungsprodukte und der abgelagerten Menge.

Die Genauigkeit des Ergebnisses ist u. a. beschränkt durch den Stichprobenfehler beim Auszählen der Partikel im Rezeptorvolumen. Der Stichprobenfehler kann durch die Erhöhung der Partikelzahl gesenkt werden, allerdings wird dadurch auch die benötigte Rechenzeit höher. Schwergaseffekte werden im Rahmen dieser Richtlinie nicht berücksichtigt.

## 1 Anwendungsbereich

Diese Richtlinie beschreibt ein numerisches Modell, mit dem man die Ausbreitung von Spurenstoffen in der Atmosphäre simulieren und ihre Konzentrationen berechnen kann<sup>5)</sup>. Für die Anwendung benötigt man das mittlere Windfeld, Turbulenzgrößen, Emissionsdaten und gegebenenfalls weitere, anwendungsspezifische Eingabedaten. Für die Gewinnung dieser Eingabedaten sind in der Regel vorgeschaltete Modelle notwendig, die nicht Gegenstand dieser Richtlinie sind. Ebenso werden für die Berechnung von Wirkungen, wie Geruchswahrnehmungen oder radioaktive Belastungen, nachgeschaltete Modelle benötigt.

Die Spurenstoffe können als Gas oder als Aerosol vorliegen. Simuliert werden die Trajektorien einer großen Anzahl von Gas- und/oder Aerosolpartikel, die unabhängig voneinander mit der turbulenten Strömung verlagert werden. Die Ausbreitung kann in freiem Gelände, im Bereich von topografischen Strukturen oder von Hindernissen, wie Gebäude, Industrieanlagen, Wälle, Brücken, Bäume und Wälder erfolgen, wobei die Einflüsse der Hindernisse auf Wind- und Turbulenzfeld durch das Vorschaltmodell richtig beschrieben werden müssen. Chemische Umwandlungen, Sedimentation, Ablagerung am Boden und an der Vegetation, Aufwirbelung vom Boden, Auswaschen durch den Niederschlag, Filtration durch poröse Hindernisse und Auftriebseffekte können berücksichtigt werden.

Die räumliche Struktur und das Zeitverhalten der Quelle(n) können beliebig sein. Die Gebietsgröße reicht von einigen Dekametern (Gebäudekomplexe) bis zu mehreren hundert Kilometern (Landschaften) mit einer Auflösung zwischen einem Meter und einigen Kilometern. Die Zeitskala für typische Anwendungen reicht von ca. zehn Minuten bis zu einigen Tagen, es können aber auch klimatologische Fragestellungen über entsprechend längere Zeiträume behandelt werden.

emitted species, its transformation products and the amount deposited.

Factors affecting the accuracy of the result include the sampling error associated with the particle count in the receptor volume. The sampling error can be reduced by increasing the number of particles, although at the expense of a longer computation time. Heavy gas effects are not considered within the scope of this standard.

## 1 Scope

This standard describes a numerical model for simulating the dispersion and calculating the concentrations of trace species in the atmosphere<sup>5)</sup>. Data required for the model include the mean wind field, turbulence parameters, emission data and, depending on the specific case, further application-specific input data. These input data normally have to be obtained from pre-processors which are not the subject of this standard. In the same way, post-processor models are required for calculating effects such as odour perception, for instance, or radioactive radiation doses.

The trace species may be present in gaseous or aerosol form. The model simulates the trajectories of a large number of gaseous and/or aerosol particles which are transported independently of each other by the turbulent flow. Terrain regimes like open terrain, topographical structures or obstacles such as buildings, industrial plants, embankments, bridges, trees and forests can be accounted for in the dispersion calculation, provided that the impacts of such obstacles on the wind and turbulence fields are correctly described by the pre-processor. Chemical transformation processes, sedimentation, deposition on the ground and the vegetation, resuspension into the atmosphere, washout by precipitation, filtering through porous obstacles and buoyancy effects can be accommodated.

The spatial structure and the temporal behaviour of the source(s) can be selected at discretion. The model region investigated may reach from several tens of metres (building complexes) to several hundred kilometres (regions) with resolutions between one metre and several kilometres. The time scale for typical applications ranges from about ten minutes to several days, the treatment of climatological problems over longer time spans also being possible.

<sup>5)</sup> Ein Computerprogramm zu diesem Modell, mit dem auch die im Anhang D aufgeführten Beispiele gerechnet sind, ist im Internet unter <https://www.vdi.de/partikelmodell> kostenlos erhältlich. / A computer program for this model, which has also been used to compute the examples given in Annex D, is available free of charge on the Internet at <https://www.vdi.de/partikelmodell>.

Das Rechenergebnis ist das dreidimensionale Konzentrationsfeld und die zweidimensionale Verteilung der Deposition, gegebenenfalls mit ihren zeitlichen Veränderungen. Man kann es im Zusammenhang mit aktuellen, diagnostischen oder planerischen Fragestellungen verwenden. Typische Einsatzgebiete sind:

- Ausbreitungsrechnung für genehmigungsbedürftige Anlagen in strukturiertem Gelände, im Bereich von Hindernissen und bei windschwachen Wetterlagen
- Berechnung der Gebiete mit Grenzwertüberschreitungen für die Sicherheitsanalyse bei chemischen und kerntechnischen Anlagen
- Vorhersage der belasteten Gebiete bei einem Störfall mit Freisetzung von schädlichen Gasen oder Aerosolen für Feuerwehr und Katastrophenschutz
- Grundlage für die Berechnung von Geruchsbelästigungen
- Bestimmung der Ausbreitung aus diffusen Quellen wie Kläranlagen, Deponien, Altlasten, Kompostieranlagen, Massentierhaltungen und chemischen Anlagen
- Umweltverträglichkeitsprüfungen

The model outputs are the three-dimensional concentration field and the two-dimensional distribution of the deposition, if applicable together with their respective temporal variation. The model lends itself to the solution of current, diagnostic or planning problems. Typical applications include:

- dispersion calculations within the scope of permitting applications for industrial plants in complex terrain, in the area of obstacles and during meteorological conditions with low wind speed
- prediction of regions where the limit values will be exceeded within the scope of safety analyses for chemical and nuclear plants
- prediction of affected areas in the case of accidents involving the release of hazardous gases or aerosols for fire services and emergency response
- basis for the estimation of odour nuisance
- determination of pollutant dispersion from fugitive sources such as waste water treatment plants, landfills, contaminated sites, composting plants, factory farming and chemical plants
- environmental compatibility analyses