

Anweisung zum Programm

STOER

V 2.23, Juli 1994

Rechnungen zur VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1

G. Manier

R. Röckle

Meteorologisches Institut der
Technischen Hochschule Darmstadt:

Hochschulstraße 1
6100 Darmstadt

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Programmweiterentwicklung	2
3	Voraussetzungen	3
4	Anwendung des Störfallprogramms STOER auf dem PC	4
4.1	Installation des Programms	4
4.2	Eingabe der Parameter	4
4.2.1	Interaktive Eingabe der Parameter	4
4.2.2	Eingabe der Parameter über eine Datei	6
5	Beschreibung der Parameter	10
6	Fehlermeldungen	23
6.1	Hinweise bei falschen interaktiven Eingaben	23
6.2	Fehlermeldungen beim Einlesen der Datei STOER.INI	25
7	Beschreibung der Ausgabe und Beispiele	28
8	Änderungen des Quellcodes für andere Compiler	34
9	Grafik	35
9.1	Grafik auf dem Bildschirm	35
9.2	Grafik auf dem Drucker	36
10	Schlußbemerkung	37

1 Einleitung

Das Programm STOER ist die Umsetzung der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 in ein einfach anzuwendendes Rechenprogramm. Abhängig von meteorologischen Parametern (Windgeschwindigkeit und thermische Schichtung), lokalen Variablen (Bodenrauigkeit und Bebauungshöhe) und den Quellparametern (Abmessungen der Quelle, Höhe der Quelle, Emissionsstärke und zeitlicher Verlauf der Emission) können an einem beliebigen Aufpunkt Dosis, Maximalkonzentration und Konzentrationsverlauf berechnet werden. Die Eingabedaten und die Ergebnisse der Berechnung können ausgedruckt oder in eine Datei geleitet werden.

Die vorliegende Version 2.00 des Programms ist in der Lage Konzentrationsberechnungen im Fernfeld für schwere Gase durchzuführen. Zudem können jetzt auch Konzentrationen neben der Fahnenachse bestimmt werden.

Voraussetzung für die Benutzung des Programms ist, neben der erforderlichen Hardware, die genaue Kenntnis der VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1 und Blatt 2. Die hier vorliegende Beschreibung kann die Richtlinie nicht ersetzen. Sie dient hauptsächlich der Beschreibung der Ein- und Ausgabevariablen des Programms.

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß mit dem Programm STOER keine unteren Zünddistanzen berechnet werden können. Derartige Rechnungen sind mit dem Programm VDISF2 (zur Richtlinie VDI 3783 Blatt 2) durchzuführen. Dieses Programm ist ebenfalls über den VDI/RdL zu beziehen.

2 Programmweiterentwicklung

Das Programm STOER V1.00 war keine grundlegende Weiterentwicklung des ursprünglich verwendeten Störfallprogramms SF.FOR. die Eingabe der Daten wurde jedoch beträchtlich erleichtert und die Datenausgabe übersichtlicher. Weiterhin wurde das gesamte Programm überarbeitet und in FORTRAN 77 kodiert.

Das Unterprogramm KONZ wurde in das Unterprogramm EMISSI eingegliedert und die Unterprogramme UP1 und UP2 zusammengefaßt. Die Error-Function (ERF) wurde neu kodiert. Dieser Programmteil wird mit größerer Genauigkeit und schneller als in der ursprünglichen Version ausgeführt. Die Berechnung der Beaufschlagungszeiten wurde überarbeitet und ist genauer und im Mittel auch etwas schneller, vor allem bei Fällen mit großer Emissionsdauer oder geringer Aufpunktsentfernung. Die Abbruchkriterien bei der iterativen Berechnung der Immissionskonzentration wurden umgestellt, so daß zahlreiche Fälle, die seither auf größeren Rechnern behandelt werden mußten, jetzt auch auf dem PC ausführbar sind. Die Berechnung der Maximalkonzentration erfolgt unabhängig von der Anzahl der vorgegebenen Immissionsstützstellen. Dadurch wird die Maximalkonzentration nahezu exakt bestimmt.

Einige weitere Optionen wurden in das Programm aufgenommen. Mit dem Programm STOER ist es möglich, eine spezielle Ausbreitungssituation vorzugeben und die Berechnungen nur für diese Bedingungen durchzuführen. Ferner können die Zeiten, zu denen Konzentrationen an einem bestimmten Aufpunkt berechnet werden sollen, jetzt explizit vorgegeben werden. Dadurch ist es möglich, auch bei stark variierenden Emissionsverläufen (z.B. kurzzeitig große Emission, dann längere Zeit kleine Emission) den Konzentrationsverlauf im Bereich des Maximums höher aufzulösen, ohne in den Bereichen mit nahezu konstanter Immission zu viele Stützstellen berechnen zu müssen.

Unterschiede zwischen STOER V1.00 und STOER V2.00

Mit Version 2.00 ist es jetzt auch möglich Konzentrationsberechnungen für Quelledistanzen zu machen, bei denen die Konzentration schwerer Gase unter 1 Vol% der Quellkonzentration abgesunken ist. Dazu wurde sowohl der Ein- als auch der Ausgabeteil des Programms überarbeitet und erweitert. Vor allem wurde die interaktive Eingabe geändert. Die Eingabeparameter wurden verschiedenen Sachgruppen zugeteilt, die jeweils auf einer Bildschirmseite abgefragt werden. Die Kontrolle und Korrektur der Eingaben erfolgt nach jeweils einer Bildschirmseite und nicht wie bisher nach Eingabe aller Daten. Für dichteneutrale und leichte Gase hat sich der Programmablauf nicht geändert. Bei schweren Gasen wird zunächst die Art der Freisetzung, der Abstand und die Konzentration am Kopplungspunkt und der erste Aufpunkt, für den im Fernfeld gerechnet werden darf, bestimmt. Dabei wird eine mittlere und eine ungünstigste Ausbreitungssituation berücksichtigt.

Weitere Änderungen sind:

- Konzentrationsberechnungen für Aufpunkte neben der Fahnenachse ($YA \neq 0$) sind möglich.
- Die Eingabeparameter werden nicht mehr in die Ergebnisdatei ausgegeben, wenn sich nur der Aufpunkt geändert hat.

Anmerkung für Weiterentwicklungen

Die Definition der ungünstigsten Ausbreitungssituation bei Blatt 2 ist nicht konsistent mit der von Blatt 1. Bei Freisetzung großer Mengen eines schweren Gases ergeben sich recht große charakteristische Geschwindigkeiten. Bei Blatt 1 wird nun aber mit einer mittleren Geschwindigkeit von 1 m s^{-1} weitergerechnet, was keine realistische Annahme darstellt. In solchen Fällen müßte iterativ, wie dies bei Überhöhungen auch geschieht, eine ungünstigste Geschwindigkeit, die sowohl für die Schwergasphase wie auch für die dichteneutrale Phase gilt, ermittelt werden.

Unbefriedigend ist auch die Interpolation der Konzentrationen zwischen Kopplungspunkt und erstem Aufpunkt bei der Freisetzung schwerer Gase, da hier weder über noch neben der Fahnenachse Konzentrationsberechnungen möglich sind.

3 Voraussetzungen

Die EXE-Dateien wurden mit dem Microsoft FORTRAN 4.00A Compiler übersetzt und mit dem Linker (3.55) gebunden. Die Voraussetzungen für die Ausführung dieser EXE-Dateien auf einem PC sind:

- PC/XT/AT oder kompatibler Rechner mit dem Betriebssystem PC- bzw. MS-DOS ab Version 2.11.
- ca. 120 KByte freies RAM.
- Der ANSI-Treiber sollte geladen sein. Dazu ist in der Datei CONFIG.SYS die Zeile
DEVICE=ANSI.SYS
einzubauen. Ohne diesen Treiber kann mit dem Programm zwar gerechnet werden, die Bildschirmsteuerung funktioniert jedoch nicht. Das bedeutet, daß z.B. der Bildschirm nicht gelöscht wird, sondern die Zeichenkette "[2J" auf dem Bildschirm erscheint.
- Ein Coprozessor (80x87) ist zwar nicht erforderlich, er beschleunigt die Ausführung aber erheblich.
- Für das beigefügte Grafikprogramm STEGA ist eine EGA-Karte und ein dafür geeigneter Bildschirm (Mindestauflösung 640x350 Pixel) nötig. Für Rechnungen mit dem Programm STOER ist die Bildschirmdkarte ohne Bedeutung.
- Sollen mit dem Programm EGACOPY Grafikausdrucke vom Bildschirm gemacht werden, so wird ein NEC- oder EPSON-kompatibler 24-Nadeldrucker benötigt.

Soll der Quellcode des Programms mit anderen Compilern übersetzt werden, um z.B. auf Großrechenanlagen ein ausführbares Programm zu erzeugen, so sind einige Compiler-Eigenheiten zu berücksichtigen. Diese sind in Abschnitt 8 aufgeführt.

Sollen größere Änderungen am Quellcode vorgenommen werden, wovon allerdings abgeraten wird, so kann man sich an der stichwortartigen, meist abschnittswisen Kommentierung des Programms orientieren. Die Bedeutung der verwendeten Variablen ist jeweils im Kopf des Hauptprogramms bzw. der Unterprogramme beschrieben. Zudem wurden die wesentlichen Variablen- und Unterprogrammnamen weitestgehend aus der alten FORTRAN IV-Version SF.FOR übernommen, wo deren Bedeutung ebenfalls beschrieben ist.

4 Anwendung des Störfallprogramms STOER auf dem PC

4.1 Installation des Programms

Die Installation des Programms auf der Festplatte ist sinnvoll, aber kein Muß. Näheres dazu findet sich in der Datei READ.ME auf der Diskette. Es wird empfohlen diese Datei und auch die .DOC-Dateien auszudrucken und zu lesen, bevor man mit den Programmen arbeitet. Es wird hier besonders darauf hingewiesen, daß sich die beiden Dateien GASE.DAT und VERSATZ.DAT im richtigen Ordner befinden, da sonst für schwere Gase nicht gerechnet werden kann.

4.2 Eingabe der Parameter

Prinzipiell können zwei Arten der Eingabe unterschieden werden.

1. Die interaktive Eingabe — hier erscheinen alle Fragen am Bildschirm und sind vom Benutzer über die Tastatur zu beantworten.
2. Die Eingabe über eine spezielle Datei (Batcheingabe) — hier muß vom Benutzer eine Datei erstellt werden, in der alle zur Berechnung notwendigen Parameter aufgeführt sind.

Fallen häufig ähnliche Konstellationen von Eingabedaten an, oder sollen mehrere Fallberechnungen gemacht werden, die den Rechner über einen längeren Zeitraum in Beschlag nehmen (z.B. über Nacht), so ist die Batcheingabe vorzuziehen. Zur Berechnung einfacher Fälle eignet sich, dank der schnellen Eingabe und Kontrolle der Daten, die interaktive Form.

4.2.1 Interaktive Eingabe der Parameter

Nach Aufruf des Programms erscheint eine Bildschirmseite mit Programmnamen, Versionsnummer und Einsatzgebiet des Programms. Nach Betätigen der RETURN-Taste erscheint die zweite Bildschirmseite mit einer kurzen Erklärung der interaktiven Eingabemodi des Programms.

Auf den nachfolgenden Bildschirmseiten werden dann die verschiedenen Parameter, die zur Berechnung der Konzentrationen erforderlich sind, abgefragt. Jede Bildschirmseite hat eine doppelt eingerahmte Überschrift. Es folgen zum Teil Erläuterungen und danach die Fragen, die nach dem folgenden Schema aufgebaut sind:

Frage?	Vorgabe	Anforderungszeichen
--------	---------	---------------------

Die Frage kann eine Zeichenkette anfordern (z.B. einen Dateinamen) oder eine oder mehrere Zahlen. Auch Entscheidungsfragen, die mit Ja bzw. Nein beantwortet werden müssen, kommen vor.

Die Vorgabe enthält denjenigen Wert, der übernommen wird, sofern auf die Frage nur mit der RETURN-Taste geantwortet wird, also keine Angabe erfolgt.

Das Anforderungszeichen ist ein >. Hier wird eine Eingabe über die Tastatur erwartet.

Mögliche Eingaben sind:

- Je nach Fragestellung ist die Angabe einer Zahl, Zeichenkette oder J für Ja bzw. N für Nein erforderlich. Die Eingabe muß mit der RETURN-Taste abgeschlossen werden.
⇒ Liegt die angegebene Zahl innerhalb des Wertebereichs, so wird sie übernommen. Ansonsten wird eine erneute Eingabe angefordert.
- nur die RETURN-Taste wird betätigt
⇒ die Vorgabe wird übernommen.
- Eingabe von ^Z (CTRL und Z)
⇒ Es erscheint die Frage ob weitere Berechnungen gewünscht sind. Wenn ja, dann kann erneut das Menü durchgegangen werden.
- Eingabe von ^C (CTRL und C)
⇒ das Programm wird abgebrochen und in die DOS-Ebene gesprungen. Da dabei eine eventuell angelegte Ergebnisdatei nicht geschlossen wird, kann diese Datei danach nicht oder nur unvollständig gelesen werden.

Sind zwei Anforderungszeichen » vorhanden, so werden zwei Zahlenwerte als Eingabe erwartet. Diese sind durch ein Komma zu trennen. Sollen beide Vorgaben übernommen werden, so reicht es, die RETURN-Taste zu betätigen. Um sich Schreibarbeit zu sparen, wenn eine der Vorgaben übernommen werden soll, kann man, wie im folgenden Beispiel erläutert, vorgehen.

Die Frage:

Frage nach 2 Zahlen 111 , 222 »

Die Eingabe:

,333 übernimmt 111 als erste Zahl (Vorgabe) und als zweite Zahl die eingegebene 333.

123, übernimmt als erste Zahl die eingegebene 123 und für die zweite Zahl die Vorgabe 222.

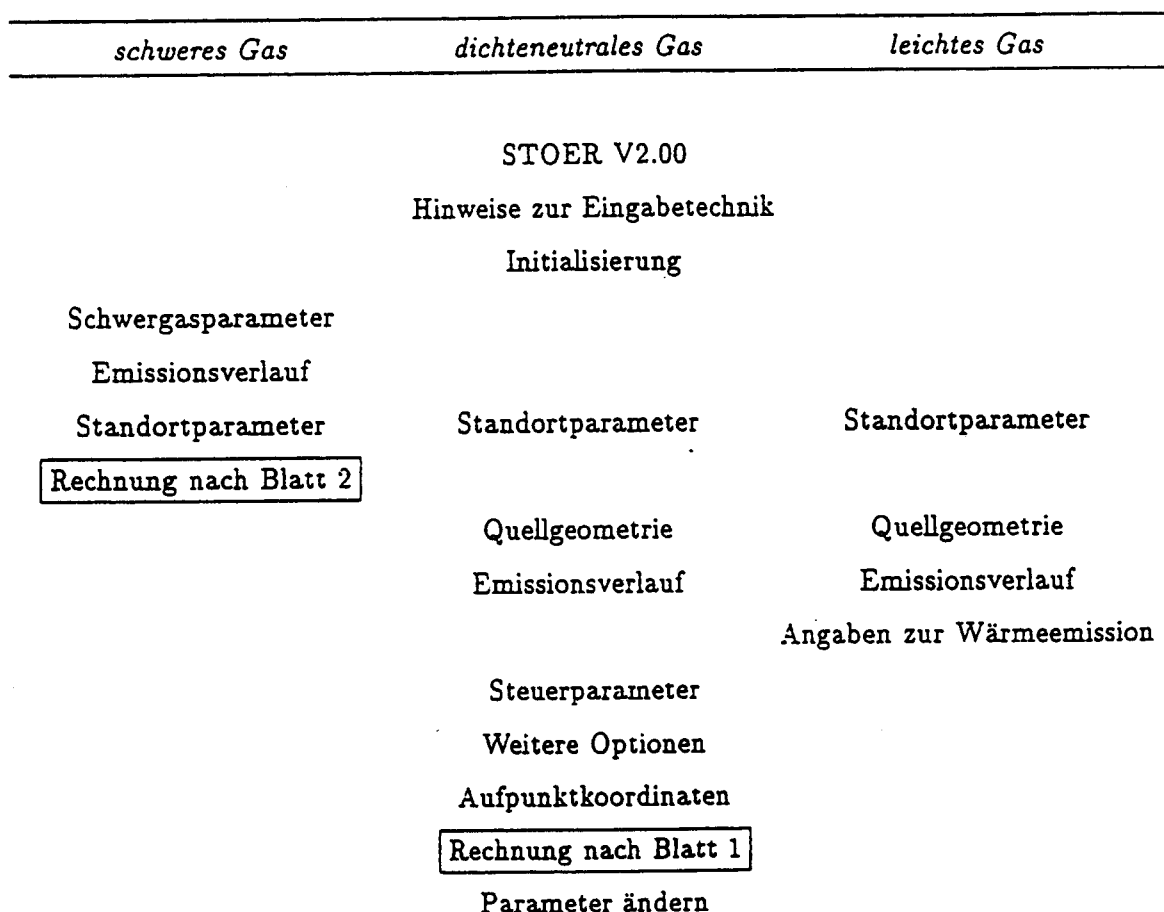
Auf der ersten Bildschirmseite (Initialisierung) müssen die Fragen nach der Überschrift, zum Abspeichern der Ergebnisse und zur Gasart beantwortet werden. Abhängig von der eingegebenen Gasart folgen verschiedene Abfragebildschirmseiten. Die eingegebenen Werte werden, nachdem eine Seite bearbeitet ist, angezeigt und gefragt, ob diese Angaben korrekt sind. Ist dies der Fall, kann mit RETURN auf die nächste Bildschirmseite weitergegangen werden. Sollen noch Änderungen auf dieser Seite vorgenommen werden, so ist N und RETURN einzugeben, worauf die Seite nochmals abgefragt wird.

Ist das Emissionsszenario vollständig eingegeben, müssen noch Angaben zur Immission gemacht werden, z.B. ob Konzentrationsverlauf, Dosis oder Maximalkonzentration berechnet werden soll. Anschließend wird nach den Koordinaten (XA, YA und ZA) des Aufpunkts gefragt, für den die Berechnungen gemacht werden sollen. Sind diese eingegeben, wird mit den entsprechenden Berechnungen begonnen und die Ergebnisse auf den Bildschirm und

gegebenenfalls in eine Datei (bzw. auf den Drucker) geschrieben. Ist der gesamte Fall berechnet und ausgegeben worden, so können mit den eingestellten Parametern Rechnungen für weitere Aufpunkte durchgeführt werden. Sollen keine weiteren Aufpunkte untersucht werden, ist es möglich an verschiedene Stellen des Eingabemenüs zurückzuspringen. Hier können einzelne oder mehrere Variablen (z.B. die Quellstärke, die Windgeschwindigkeit, usw.) geändert und eine neue Rechnung gestartet werden.

Bei schweren Gasen erfolgt nach Eingabe der Schwergasparameter, des Emissionsverlaufs und der Standortparameter die Berechnung der Schwergasphase nach Blatt 2. Wird der gerechnete Fall als Schwergasausbreitung eingestuft, so erhält man als Ergebnis die Werte (Lage der virtuellen Punktquelle, Konzentration am Kopplungspunkt und Emissionsverlauf) um mit Blatt 1 weiterzurechnen. Stellt das Programm fest, daß dieser Fall keine ausgeprägte Schwergasphase besitzt, so wird ab der eigentlichen Quelle mit Blatt 1 gerechnet. Dazu sind noch Angaben zur Quellgeometrie und dem Emissionsverlauf zu machen.

Das folgende Flußdiagramm soll diese Punkte veranschaulichen.



4.2.2 Eingabe der Parameter über eine Datei

Die Syntax zur Beschreibung eines Falles hat sich gegenüber der bisherigen Version 1.00 nicht geändert. Es wurden lediglich sieben neue Kennungen zur Definition der Schwergas-

parameter aufgenommen. Diese Kennungen sind mit den im Programm VDISF2 benutzten identisch.

Wie bisher muß eine Datei erstellt werden, die den Parametern Werte zuweist. Die Zeilen dieser Datei sind einfachen Regeln unterworfen, die es ermöglichen, die Eingabedatei umfangreich zu dokumentieren und zu strukturieren.

Syntax:

Für jede Eingabegröße existiert eine 2 Zeichen lange Kennung (z.B. QS für die Quellstärke), die am Zeilenanfang (Spalte 1 und 2) stehen muß. Die Kennung kann klein oder groß geschrieben werden. Danach können Erläuterungen oder ähnliches stehen. Mindestens 11 Zeichen vor dem Zeilenende muß ein Gleichheitszeichen (=), gefolgt von einer Zahl (bzw. Text), stehen.

Leerzeilen werden ignoriert.

Das Ausrufezeichen ! dient zur Kennzeichnung einer Kommentarzeile. Es kann am Zeilenanfang oder in der Zeile, aber hinter der Zahl stehen.

Beispiele:

! das ist eine Kommentarzeile

QS = 848 ! auch hier kann Kommentar stehen

Nicht interpretierbare Zeilen (falsche Kennung, fehlendes Gleichheitszeichen, usw.) werden zusammen mit einer Fehlermeldung ausgegeben. Auch wenn die Zahl nicht im vorgegebenen Wertebereich liegt, erfolgt eine Fehlermeldung mit Angabe des Wertebereichs.

Die Kennungen, deren Bedeutung und die Einschränkungen sind in nachstehender Tabelle aufgeführt:

Kennung	Beschreibung	Wertebereich
Schwergasparameter		
NU	Nummer des Gases	1 - 30
ST	Stoffname (bei Sondergas)	max. 30 Zeichen
SI	Siedepunkt (bei Sondergas)	°C
RH	Normdichte (bei Sondergas)	kg m ⁻³
PR	Prozeßtemperatur	°C
FO	Form der Freisetzung	1 - 4
AU	Ausbreitungsgebiet	1 - 9

Kennung	Beschreibung	Wertebereich
Steuerparameter		
TI	Titel (Überschrift in Ergebnisdatei)	max. 70 Zeichen
DA	Ergebnisdateinamen	max. 30 Zeichen
NS	Anzahl der Stützstellen zur Konzentrationsberechnung	1 oder 3 - 100
NZ	Berechnung verschiedener Immissionsdaten	0 - 3
XA	Aufpunktcoordinate in x-Richtung	≥ 1 m
YA	Aufpunktcoordinate in y-Richtung	
ZA	Aufpunktcoordinate in z-Richtung	≥ 0 m
MW	nur mit vorgegebener Windgeschwindigkeit und der für MW angegebenen Ausbreitungsklasse rechnen (neg. Werte = ohne Inversionseinfluß)	-3 - +3
T0	erste Immissionsstützstelle	≥ 0 s
DT	Abstand zu weiteren Stützstellen	> 0 s
TS	Vorgabe eines Zeitpunkts zu dem die Immission berechnet werden soll	≥ 0 s
INfo	Bildschirmausgabesteuerung	0 - 2
REset	alle Eingabevariablen werden in den Ausgangszustand zurückgesetzt	
GO	Programmausführung starten (BATCH)	
ENd	Ende der Eingabedatei	
Standortparameter		
UM	Mittlere Windgeschwindigkeit in m/s	1 - 10 m s ⁻¹
HM	Bebauungshöhe in m	0 - 9999 m
IZ	Rauhigkeitsklasse	1 - 5
Quellgeometrie		
XQ	Quellabmessungen in x-Richtung	< 1000 m
YQ	Quellabmessungen in y-Richtung	< 1000 m
ZQ	Quellabmessungen in z-Richtung	< 1000 m
HQ	Quellhöhe in m	< 1000 m
Emissionsparameter		
NQ	Anzahl der Emissionsabschnitte	1 - 20
TQ	Zeit nach Emissionsbeginn in sec	> 0 s
QS	Quellstärke	
QH	Wärmeemission (mindestens in einem Emissionsabschnitt)	> 6 MW
VS	Volumenstrom	> 0 m ³ s ⁻¹
TT	Schadstofftemperatur	> 10°C
RO	Schadstoffdichte	> 0 kg m ⁻³

Hat die Datei den Namen STOER.INI und befindet sich im aktuellen Verzeichnis, so wird diese vom Programm gelesen und deren Werte übernommen. Zwei Möglichkeiten können unterschieden werden.

1. Interaktive Kontrolle und Rechnen mit vorgegebenen Daten aus der Eingabedatei.

Endet die Datei mit der Kennung END, so dienen die eingelesenen Werte als Voreinstellung und können noch verändert werden, bevor die Berechnung stattfindet. Enthält die Eingabedatei syntaktische Fehler oder Unstimmigkeiten so wird ein Hinweis ausgegeben. Um in diesen Fällen die Kontrolle zu haben mit welchen Parametern das Programm rechnet, ist diese Möglichkeit vorzuziehen.

2. Ausführen von Berechnungen ohne interaktive Kontrolle.

Auch hier werden die Daten von der Datei STOER.INI gelesen. Befindet sich die Kennung GO an einer Stelle in der Datei, so wird mit den davor eingelesenen Daten gerechnet, ohne daß eine Änderung oder Kontrolle am Bildschirm möglich ist. Nach dem GO-Befehl können weitere Kommandos folgen. So ist es z.B. möglich mehrere Aufpunkte zu untersuchen ohne für jeden Aufpunkt eine neue Batch-Datei zu erstellen. Wenn mit einer Eingabedatei mehrere verschiedene Fälle untersucht werden sollen, empfiehlt es sich hinter dem GO-Befehl, vor den Daten des nächsten Falles das Kommando REset einzubauen. Dadurch werden alle Eingabevariablen in den Ausgangszustand zurückgesetzt.

Starten des Störfallprogramms mit einer .INI-Datei

Der Name der BATCH-Dateien kann frei gewählt werden. Vor dem Aufruf des Störfallprogramms muß diese Datei jedoch in STOER.INI umbenannt oder auf eine Datei diesen Namens kopiert werden. Es empfiehlt sich das Kopieren, da dann die Originaldatei erhalten bleibt. Dies läßt sich leicht mit einer MS-DOS-Batchdatei bewerkstelligen. Die Datei ST.BAT (ebenfalls auf Diskette) könnte folgendermaßen aussehen:

```
copy %1 stoer.ini
stoer
```

Jetzt genügt der Aufruf `ST BSP1.INI` um das Störfallprogramm mit den Daten der Eingabedatei BSP1.INI zu starten.

5 Beschreibung der Parameter

Das Programm benötigt Informationen über die Standortparameter, meteorologische Parameter, Quellparameter und Programmsteuerungsparameter. In diesem Abschnitt werden diese Parameter kurz erläutert. Die interaktive Frage ist mit (I) und die äquivalente Kennung im Batch mit (B) gekennzeichnet.

Initialisierung		
Titel: ...	Leerzeile	(I)
Titel= ...	Leerzeile	(B)

Titel kennzeichnet die Überschrift, die in der Ergebnisdatei als Kopf ausgegeben wird. Es können maximal 70 Zeichen eingegeben werden.

sollen die Ergebnisse abgespeichert werden ?	Nein	(I)
--	------	-----

Diese Frage bezieht sich auf das Abspeichern der Eingabegrößen und der Ergebnisse in einer Datei. Wird die Frage mit N(ein) beantwortet, werden die Ergebnisse nur auf dem Bildschirm angezeigt. Laufen die Ergebnisse am Bildschirm zu schnell durch, kann die Anzeige mit der PAUSE-Taste (auch NoScroll je nach Tastatur) oder durch gleichzeitiges Drücken von STRG (auch CTRL) und S angehalten werden. Weiter geht es dann durch Betätigen einer beliebigen Taste oder mit der Tastenkombination STRG und Q.

Wird die Frage mit J(a) beantwortet, muß eine weitere Frage beantwortet werden.

Dateiname:	PRN	(I)
Datei=		(B)

Es muß ein gültiger Dateiname angegeben werden. Als Vorgabe erscheint PRN. Wird diese Vorgabe übernommen, so werden Eingabedaten und Ergebnisse direkt auf dem Drucker ausgegeben. Dieser muß natürlich angeschlossen und betriebsbereit sein. Wird ein Dateiname angegeben, so muß er den MS-DOS-Konventionen genügen:

LAUFWERK:\PFAD\DATEINAME.TYP

Diese Datei kann dann nach normalem Beenden der Rechnungen am Bildschirm aufgelistet, ausgedruckt, editiert oder von anderen Programmen gelesen werden.

Vorsicht: Wird der Name einer bereits existierenden Datei angegeben, so wird diese Datei überschrieben. Dabei erfolgt keine Warnung!

Beispiele:

C:\STOER\ERGEBNIS\FALL007.LST erzeugt die Datei FALL007.LST auf dem Laufwerk c: im Verzeichnis \STOER\ERGEBNIS und schreibt die Ergebnisse in diese Datei.

BRAND.DAT erzeugt auf dem aktuellen Laufwerk und im momentanen Verzeichnis die Datei BRAND.DAT.

in der Batch-Datei:

DA=PRN ! Ergebnisse werden direkt ausgedruckt.

Datei=c:\erg\fallxy.erg ! im Verzeichnis ERG des Laufwerks c: wird die Datei FALLXY.ERG angelegt.

Welche Gasart wird freigesetzt: 0 - schweres Gas mit Schwergasphase nach Blatt 2 1 - dichteneutrales Gas 2 - leichtes Gas, bei dem ein Auftrieb zu berücksichtigen ist	2	(I)
---	---	-----

Diese Abfrage stellt nur den Abfrageweg ein. Ob der angegebene Fall dann als Schwergasfall oder als Überhöhungsfall gerechnet wird, entscheidet das Programm anhand der Kriterien, die in den Richtlinien spezifiziert sind.

Schwergasparameter

Nummer des Gases	0	(I)
NU=...	0	(B)

Bei der Gasauswahl können 30 Stoffe, bei denen Siedepunkt und Normdichte vordefiniert sind, ausgewählt werden (Tabelle 4 der Richtlinie Blatt 2, Seite 41). Diese Daten werden der Datei GASE.DAT entnommen, die bei Schwergasfällen eingelesen wird.

Es ist möglich bis zu 10 weitere Stoffe, die häufig verwendet werden, in dieser Datei aufzunehmen. Die Stoffnamen, Siedepunkte und Normdichten sind unter Einhaltung des vorgegebenen Formats an die Einträge der Datei anzuhängen. Die Reihenfolge der ersten 30 Einträge darf nicht verändert werden.

Bei selten verwendeten Gasen lohnt sich die Eintragung in diese Datei nicht. Man wählt in diesem Fall die Stoffnummer 0. Daraufhin werden die benötigten Parameter interaktiv abgefragt.

Sondergasspezifikation

Name des Gases:	Sondergas	(I)
ST=...	Sondergas	(B)

Der Name des freigesetzten Stoffes (max. 24 Zeichen) ist einzugeben.

Siedepunkt	0°C	(I)
SI=...	0°C	(B)

Der Siedepunkt des Sondergases wird für die Berechnung der anfänglichen Gasdichte bei unter Druck verflüssigten Gasen benötigt. Bei Freisetzung gasförmiger oder drucklos verflüssigter Gase ist die Prozeßtemperatur maximal gleich der Siedetemperatur des Stoffes, so daß der Siedepunkt hier als Obergrenze benötigt wird.

Normdichte (0°C, 1013 hPa)	0 kg/m ³	(I)
RH=...	0 kg/m ³	(B)

Hier ist die Dichte des freigesetzten Gases bei einem Luftdruck von 1013 hPa und einer Temperatur von 0°C anzugeben.

In welcher Form wird das Gas freigesetzt?		
--	--	--

Freisetzungsfom	1	(I)
1 = gasförmig		
2 = drucklos verflüssigt		
3 = unter Druck verflüssigt		
4 = unter Druck verflüssigtes NH ₃ ...		
FO=...	1	(B)

Die Freisetzungsfom bestimmt die Dichte des Gases an der Quelle. (siehe Blatt 2, Absatz 3.1 und Tabelle 1 auf der gleichen Seite).

Ausbreitungsgebiet		
---------------------------	--	--

Kennung des Gebiets	1	(I)
1 = ebenes Gelände ohne Hindernisse		
2 = hohe windparallele Wand		
3 = hohe windparallele Schlucht		
4 = Schutzzaun in Lee fern		
5 = Schutzzaun in Lee nah		
6 = Schutzzaun in Luv nah		
7 = Schutzzaun in Luv fern		
8 = Schutzring nah		
9 = Schutzring fern		
AU=...	1	(B)

Bis jetzt sind diese 9 Ausbreitungsgebiete im Windkanal untersucht worden, wobei die Werte für Quellversatz und Kopplungszeit ermittelt wurden. Für die Gebiete 1-5 sind diese Werte in Tabelle 2 und 3 der Richtlinie Blatt 2 angegeben. Die Daten für die Gebiete 6-9 wurden aus dem Programm VDISF2 extrahiert. Diese Angaben sind in der Datei VERSATZ.DAT zusammengefaßt. Diese Datei ist, sofern weitere Untersuchungen an anderen Ausbreitungsgebieten vorgenommen werden und die Ergebnisse vorliegen, jederzeit erweiterbar. Da das Programm STOER diese Datei auswertet, werden dann auch neu aufgenommene Gebiete zur Wahl angeboten.

Standortparameter		
--------------------------	--	--

mittlere Windgeschwindigkeit:	1 ms ⁻¹	(I)
UM=...	1 ms ⁻¹	(B)

Hier ist die mittlere Windgeschwindigkeit in Anemometerhöhe (10 m) anzugeben. Diese kennzeichnet neben der Stabilität die mittlere Ausbreitungssituation. Mit dieser Geschwindigkeit in Anemometerhöhe wird ein Schichtmittelwert zwischen Boden und effektiver Quellhöhe (jedoch mindestens 10 m und höchstens 200 m) durch Integration der Potenzprofilgleichung ermittelt. Dieser Schichtmittelwert dient dann als Transportgeschwindigkeit in den Berechnungen.

Da die verwendeten Streuungen nur für ganzzahlige Werte der Windgeschwindigkeit zwi-

schen 1 ms^{-1} und 10 ms^{-1} tabelliert sind, wird empfohlen nur mit ganzzahligen Geschwindigkeiten zu rechnen, da sonst je nach Auf- oder Abrundung der Geschwindigkeit zu niedrige oder zu hohe Streuungen verwendet werden.

Bebauungshöhe:	0 m	(I)
HM=...	0 m	(B)

Die Bebauungshöhe hat lediglich Einfluß auf die Höhe der Inversion, denn die Inversionshöhe bestimmt sich aus dem Maximalwert von effektiver Quellhöhe, Aufpunktshöhe, Bebauungshöhe oder 20 m. Bebauungshöhen kleiner als 20 m, bzw. kleiner als die Quellhöhe sind folglich ohne Bedeutung. Setzt man sehr große (unrealistische) Bebauungshöhen ein ($>100 \text{ m}$), so macht sich der Einfluß der Inversion in den Konzentrationsberechnungen, zumindest für Aufpunkte in Bodennähe, kaum noch bemerkbar.

Rauhigkeitsklasse:	3 ($z_o=0.5 \text{ m}$)	(I)
IZ=...	3	(B)

Die Rauhigkeitsklasse beschreibt die Bodenrauhigkeit, wobei 1 einer Rauhigkeit von $z_o=2 \text{ cm}$ (sehr glatter Untergrund) und 5 einer Rauhigkeit von $z_o=1.2 \text{ m}$ (sehr rauher Untergrund) entspricht. Nähere Angaben findet man in Tabelle 1 der Richtlinie Blatt 1.

Quellgeometrie

Quelldimensionen: XQ, YQ, ZQ	0 m	(I)
XQ=...	0 m	(B)
YQ=...	0 m	(B)
ZQ=...	0 m	(B)

Länge (in x-Richtung), Breite (in y-Richtung) und vertikale Erstreckung (in z-Richtung) der Quelle sind anzugeben, sofern es sich nicht um eine Punktquelle handelt. Ausdehnungen der Quelle in eine der Richtungen, die kleiner als 1 m sind, werden ignoriert, d.h. eine Flächenquelle mit $XQ=10 \text{ m}$ und $ZQ=0.8 \text{ m}$ wird wie eine Linienquelle der Länge $XQ=10 \text{ m}$ und $ZQ=0 \text{ m}$ behandelt! Die Angabe der Quellstärke muß in diesem Fall entsprechend der Linienquelle spezifiziert werden, also in $[\text{gm}^{-1}\text{s}^{-1}]$ erfolgen und nicht wie bei der Flächenquelle in $[\text{gm}^{-2}\text{s}^{-1}]$.

Vorsicht: Es wird keine Fehlermeldung bei Angaben $<1 \text{ m}$ ausgegeben!

Quellhöhe:	$\text{MAX}(z_o, ZQ)$	(I)
HQ=...	$\text{MAX}(z_o, ZQ)$	(B)

Hier ist die Quellhöhe bei Punktquellen, bzw. die Höhe der Oberkante von Linien-, Flächen- oder Volumenquellen anzugeben. Diese muß mindestens so hoch sein wie die vorgegebene Bodenrauhigkeit. Wird sie geringer angegeben, so wird sie automatisch auf den Wert von z_o gesetzt.

Emissionsverlauf		
Emissionsabschnitte [1- 20]:	1	(I)
NQ=...	1	(B)

Prinzipiell lassen sich 3 Arten des Emissionsverlaufs angeben. Diese werden durch die Anzahl der Emissionsabschnitte und die Dauer der Emission gekennzeichnet.

- spontan - 1 Emissionsabschnitt mit höchstens 1 s Dauer.
- kontinuierlich - 1 Emissionsabschnitt mit mindestens 2 s Dauer.
- variabel - Maximal 20 Abschnitte beliebiger Dauer.

Wird ein Emissionsabschnitt angegeben (spontane oder kontinuierliche Freisetzung), so werden zwei Fragen nach Emissionsdauer und Quellstärke gestellt. Bei mehreren Emissionsabschnitten ist die Zeit nach Emissionsbeginn und die Quellstärke paarweise einzugeben.

Emissionsdauer:	1 s	(I)
TQ=...	1 s	(B)

Ist nur ein Emissionsabschnitt vorhanden, so ist die Gesamtdauer der Emission anzugeben. Werte ≤ 1 s kennzeichnen eine spontane Emission, d.h. eine explosionsartige Freisetzung.

Bei langen Emissionszeiten stellt sich, abhängig von der Entfernung des Aufpunkts, sehr schnell ein konstanter Immissionspegel ein. Da die Rechenzeit sehr stark von diesem Zeitraum abhängt, ist hier die explizite Vorgabe von Zeiten, zu denen die Konzentration bestimmt werden soll, von Vorteil. Dazu ist zunächst mit wenigen Stützstellen der ungefähre Konzentrationsverlauf sowie der Beginn und das Ende der Beaufschlagung zu bestimmen. In den Bereichen mit starker Zunahme bzw. Abnahme der Konzentration kann durch Vorgabe der Zeiten eine höhere Auflösung erreicht werden, ohne daß im Bereich des Plateaus mit hoher zeitlicher Auflösung gerechnet werden muß.

Durch Aufteilung der Emission in mehrere Abschnitte ist es möglich, einen zeitlichen Verlauf der Emission vorzugeben. Die Intervalle können unterschiedlich lang sein, jedoch ist die minimale Auflösung auf 1 Sekunde begrenzt. Sollte die vorgesehene Anzahl von 20 Abschnitten nicht ausreichen, so ist im Quellcode in allen Zeilen mit PARAMETER (nemi=20) die Anzahl zu erhöhen und das Programm neu zu compilieren.

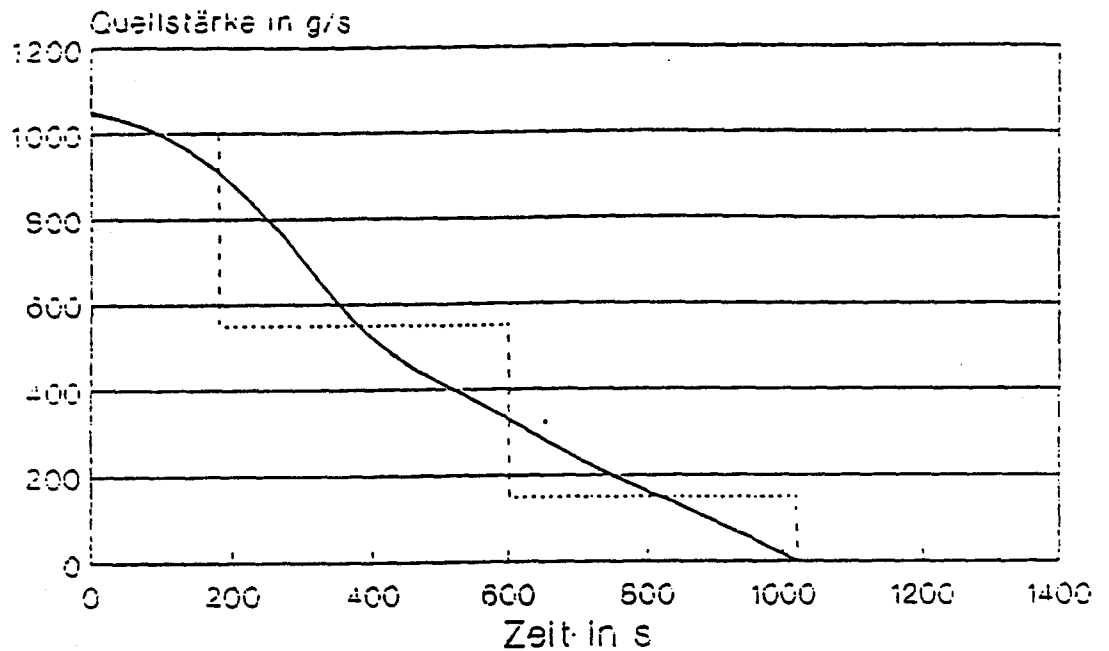
Im Fall der Schwergasausbreitung werden spontane Freisetzungen auch so behandelt. Bei kontinuierlicher oder variabler Freisetzungsform entscheidet das Programm, ob dieser Fall als spontan oder kontinuierlich einzustufen ist.

Zeit nach Emissionsbeginn		(I)
TQ=...		(B)

Wird mehr als ein Emissionsabschnitt gewählt, so sind Zeiten mit konstanter Emission anzugeben. Hat man den Emissionsverlauf in einem Quellstärke-Zeit-Diagramm vorliegen, so ist die Kurve zunächst durch eine Treppenfunktion möglichst genau zu approximieren. Der Fehler sollte unter 10 % liegen (Richtlinie Seite 7). Die hier gefragten Zeiten sind jeweils am „Treppende“ abzulesen. Die Höhe der „Stufe“ gibt die dazugehörige Quellstärke an.

Es ist darauf zu achten, daß die Zeiten der Stützstellen in aufsteigender Reihenfolge eingegeben werden.

Beispielskizze:



Hypothetischer Emissionsverlauf einer Punktquelle. Die durchgezogene Linie stellt den wahren Verlauf dar, die gestrichelte Linie die approximierte Treppenfunktion.

Die Vorgabe dieses Emissionsverlaufs in einer Batch-Datei sollte wie folgt aussehen:

```

NQ=3      ! 3 Emissionsabschnitte

TQ=180    ! erster Abschnitt dauert 3 Minuten
QS=1000   ! mit einer Quellstaerke von 1000 g/s

TQ=600    ! zweiter Abschnitt dauert 7 Minuten (10 Min.-3 Min.)
QS=550    ! mit einer Quellstaerke von 550 g/s

TQ=1020   ! der dritte Abschnitt dauert ebenfalls 7 Minuten
QS=150    ! mit einer Quellstaerke von 150 g/s
    
```

Quellstärke:	1 g s^{-1}	(I)
QS=...	1 g s^{-1}	(B)

Ist nur ein Emissionsabschnitt vorhanden, reicht die Angabe einer Quellstärke. Ansonsten ist für jeden Abschnitt konstanter Emission die Quellstärke anzugeben.

Die Dimension der Quellstärke richtet sich nach der Art der Quelle. Bei einer Punktquelle muß die Angabe in $[\text{g s}^{-1}]$, bei einer Linienquelle in $[\text{g m}^{-1} \text{s}^{-1}]$, bei einer Flächenquelle in $[\text{g m}^{-2} \text{s}^{-1}]$ und bei einer Volumenquelle in $[\text{g m}^{-3} \text{s}^{-1}]$ erfolgen.

Freigesetzte Masse ohne Lachenanteil	1 g	(I)
QS=...	1 g s ⁻¹	(B)

Im Schwergasfall wird bei spontaner Freisetzung die Frage nach der emittierten Masse gestellt. Verdampft nur ein Teil des freigesetzten Stoffes sofort und der Rest bildet eine Lache, so ist der Lachenanteil nicht zu berücksichtigen. Dies gilt auch für die übrigen Freisetzungsarten.

Überhöhungsparameter

Wurde als Gasart die 3 gewählt, so sind auf dieser Seite Angaben zur Wärmeemission zu machen. Die Wärmeemission auf verschiedene Arten spezifiziert werden. Zum einen kann sie direkt angegeben werden, zum andern läßt sie sich aus Volumenstrom und Schadstofftemperatur oder aus Volumenstrom und Schadstoffdichte bestimmen.

Es folgen mehrere Fragen zur Wärmeemission. Es ist zu entscheiden wie die Wärmeemission angegeben wird und eventuell ein zeitlicher Verlauf vorzugeben. Im Batch lauten die Kennungen wie folgt:

QH=... kennzeichnet die Wärmeemission	0 MW	(B)
VS=... kennzeichnet den Volumenstrom	m ³ s ⁻¹	(B)
TT=... kennzeichnet die Schadstofftemperatur	°C	(B)
RO=... kennzeichnet die Schadstoffdichte	kg m ⁻³	(B)

Wenn die Wärmeemission nicht direkt angegeben wurde, wird sie aus den anderen Daten ermittelt. Die Wärmeemission muß mindestens in einem Emissionsabschnitt mehr als 6 MW betragen. Bei kleineren Wärmeemissionen wird die Überhöhung nicht berücksichtigt.

Ist die Wärmeemission kleiner als 6 MW und erfolgt die Emission vertikal nach oben gerichtet (z.B. aus einem Kamin), so ist es zulässig auch mit einer Wärmeemission unter 6 MW zu rechnen. Dazu sind die Zeilen PARAMETER (QHMIN=6.) im Hauptprogramm STOER und im Unterprogramm PAREIN zu ändern. Ferner sind die Formatanweisungen, die die Angabe 6 MW enthalten, abzuwandeln. Anschließend ist das Programm neu zu compilieren.

Es ist aber zu beachten, daß damit gemachte Rechnungen nicht mehr der Richtlinie entsprechen.

Steuerparameter

Konzentrationsberechnung an NS Stützstellen	10	(I)
NS=...	10	(B)

Hier ist die Anzahl der Zeitpunkte gefragt, zu denen am Aufpunkt die Konzentration bestimmt werden soll. Je mehr Emissionsabschnitte mit unterschiedlicher Länge vorgegeben werden, desto größer sollte die Anzahl der Stützstellen sein, damit der Konzentrationsverlauf hinreichend erfaßt werden kann.

Soll der Konzentrationsverlauf bestimmt werden und man will feststellen, ob die zeitliche Auflösung genügend groß ist, so bestimmt man am besten die Maximalkonzentration und vergleicht sie mit dem größten Wert des Konzentrationsverlaufs. Ist das Maximum des Konzentrationsverlaufs wesentlich kleiner als die Maximalkonzentration, so muß die Zahl der Stützstellen erhöht, oder die Zeiten zu denen gerechnet werden soll vorgegeben werden (siehe „weitere Optionen“).

Sollte die vorgesehene Anzahl von 100 Stützstellen nicht ausreichen, ist im Quellcode in allen Zeilen mit PARAMETER (NIMI=100) die Anzahl zu erhöhen und das Programm neu zu compilieren.

Die Zahl der Stützstellen muß bei der Berechnung der Dosis, der Maximalkonzentration und des Konzentrationsverlaufes mindestens 3 betragen. Für Dosisabschätzungen reichen 3 Stützstellen in der Regel nicht aus. Bei 3 Stützstellen kann auch noch nicht von einem aussagekräftigen Konzentrationsverlauf gesprochen werden. Bei diesen Untersuchungen empfiehlt es sich wenigstens 10 Stützstellen zu wählen, bei der Vorgabe von Emissionsverläufen noch mehr.

Zur Berechnung der Maximalkonzentration reicht es in der Regel aus mit 3 Stützstellen zu arbeiten, da das Maximum durch weitere Schachtelung bestimmt wird. Die Suche der Maximalkonzentration durch Schachtelung wird entweder abgebrochen, wenn die Eintrittszeit auf 1 Sekunde genau bestimmt, oder die Konzentration auf 1 % genau ermittelt wurde. Im letzteren Fall ist die Angabe der Eintrittszeit nicht auf die Sekunde genau, sondern dient nur zur Abschätzung der ungefähren Eintrittszeit des Maximums. Ist der Parameter INfo auf einen Wert >0 gesetzt, so kann die Schachtelung am Bildschirm verfolgt werden.

Sollte ein Emissionsverlauf vorgegeben werden, bei dem zwei oder mehr Maxima zu erwarten sind, wobei ungeklärt ist, welches das absolute Maximum ist, so sind wesentlich mehr als 3 Stützstellen anzugeben. In diesen Fällen ist dann auch der Konzentrationsverlauf zu Rate zu ziehen, um zu sehen, ob das richtige Maximum ermittelt wurde.

Als eine Erweiterung der Anwendung wurde die Möglichkeit aufgenommen, nur eine Stützstelle anzugeben. In diesem Fall kann natürlich keine Dosis oder Maximalkonzentration bestimmt werden, sondern nur die Konzentration zu einem vorgegebenen Zeitpunkt. Dieser Zeitpunkt muß auf die nachfolgende Frage eingegeben werden. Eine denkbare Anwendung wäre z.B. die Ermittlung von räumlichen (in x- und z-Richtung) Konzentrationsverteilungen. Dazu ist für den gleichen Zeitpunkt an mehreren Aufpunkten zu rechnen. Bei der Berechnung von Vertikalprofilen ist darauf zu achten, daß die Aufpunkte unterhalb der Inversion liegen. Diese liegt in 20 m Höhe bzw. in Quellhöhe, wenn diese größer als 20 m ist. Bei Fällen mit Überhöhung steigt die Inversion mit zunehmendem Abstand zur Quelle an. Hier muß die Höhe der Inversion durch eine Konzentrationsberechnung am Aufpunkt ermittelt werden. Die Inversionshöhe am Aufpunkt wird dabei ausgegeben.

Beispiel anhand einer Batchanwendung:

```
TITEL=horizontales Konzentrationsprofil
UM=...   ! Eingabe der meteorologischen Parameter
QS=...   ! und der Quellparameter
...
! kein NZ und kein NS angeben, sondern nur einen Zeitpunkt
TS=600   ! der Zeitpunkt soll 10 Minuten nach Emissionsbeginn sein
!
XA=100   ! der erste Aufpunkt soll bei 100m am Boden liegen
ZA=0
GO       ! Konzentration berechnen
XA=200   ! zweiter Aufpunkt bei 200m ebenfalls bei ZA=0
GO       ! rechnen
XA=300   ! usw.
GO
...
```

Untersuchung	(0) aller Immissionsdaten (1) der Dosis (2) der Maximalkonzentration (3) des Konzentrationsverlaufes	0	(I)
.NZ=...		0	(B)

Hier wird entschieden, was aus den zuvor angegebenen Daten berechnet werden soll. Wird 0 angegeben, so werden Konzentrationsverlauf, Maximalkonzentration und Dosis bestimmt. Beim Konzentrationsverlauf und bei der Dosisberechnung wird der Verlauf der Immission am Aufpunkt zwischen Anfang und Ende der Beaufschlagungszeit an NS-Stützstellen bestimmt. Zur Bestimmung der Dosis wird dann der Konzentrationsverlauf über die Zeit integriert. Bei der Bestimmung der Maximalkonzentration erfolgt eine genauere Untersuchung des Verlaufs um das, im Konzentrationsverlauf gefundene, Maximum. Die Maximalkonzentration ist gefunden, wenn die zeitliche Auflösung 1 s beträgt oder die Konzentration auf 1 % genau bestimmt ist.

Der höchste Informationsgehalt wird, ohne wesentlich größeren Rechenzeitaufwand, mit der Angabe von 0 erzielt. Ist nur die Maximalkonzentration von Interesse, so wird man mit der Wahl von 2 am schnellsten bedient, da sich in diesem Fall die Bestimmung der Beaufschlagungszeiten verkürzt.

Aufpunktkoordinaten			
Aufpunktkoordinaten	XA	100 m	(I)
	YA	0 m	(I)
	ZA	0 m	(I)
XA=...		100 m	(B)
YA=...		0 m	(B)
ZA=...		0 m	(B)

XA stellt die Entfernung des Aufpunkts von der Leeseite der Quelle, YA die Entfernung des Aufpunkts von der Fahnenachse und ZA die Höhe des Aufpunkts über Grund dar. Dies ist auch bei der Kopplung im Fall schwerer Gase so, d.h. die Aufpunktkoordinaten beziehen sich immer auf den Ursprung (Lage der Quelle) und nicht auf den Kopplungspunkt (Lage der virtuellen Quelle). Nachfolgende Abbildung soll das verdeutlichen.

Koordinaten:

Alle Angaben erfolgen im Absolutsystem



Die Rechnung erfolgt im Relativsystem



Im Schwergasfall wird am Kopplungspunkt XK eine virtuelle Punktquelle angenommen. Liegt der gewünschte Aufpunkt XA zwischen XK und $XR = 5 \cdot XK$, so wird für den Aufpunkt XR gerechnet und anschließend auf den Aufpunkt XA interpoliert (Blatt 2, Seite 14). In diesem Fall können nur Konzentrationen für Aufpunkte am Boden und auf der Fahnenachse ($ZA=0$ und $YA=0$) berechnet werden. Die Berechnung des Immissionsverlaufs wird dabei nicht auf dem Bildschirm angezeigt.

Bei dichteneutralen und leichten Gasen kann auch für Aufpunktsentfernungen <100 m gerechnet werden. Nach der Richtlinie VDI 3783 Blatt 1 sind jedoch nur Aufpunktsentfernungen über 100 m sinnvoll, da dafür die Streuungen bekannt sind. Die VDI-Arbeitsgruppe „Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen“ ist jedoch der Meinung, daß die Interpolation der Streuungen nach Gleichung 14 der Richtlinie eine vernünftige Möglichkeit zur Konzentrationsberechnung im Bereich unter 100 m darstellt.

Ab Programmversion 2.00 können Konzentrationen auch für neben der Fahnenachse liegende Aufpunkte berechnet werden. Dabei ist zu beachten, daß die ungünstigste Ausbreitungssituation für einen Aufpunkt neben der Fahnenachse von der ungünstigsten Ausbreitungssituation für einen Aufpunkt auf der Achse stark abweichen kann. Für weit von der Achse entfernte Aufpunkte ist häufig die labile Schichtung am ungünstigsten, während auf der Achse häufig die stabile Ausbreitungssituation die größten Konzentrationen liefert. Auch die Eintrittszeiten der Konzentrationsmaxima auf der Achse und daneben können sich deutlich unterscheiden. Um hier vergleichbare Werte zu berechnen sollte die Ausbreitungssituation und der Zeitpunkt für die Konzentrationsberechnung explizit vorgegeben werden.

Bei der Vorgabe sehr großer Aufpunktsentfernungen von der Achse (YA) in Bezug auf die Aufpunktsentfernung vom Lee der Quelle (XA), kann es vorkommen, daß die Beaufschlagungszeiten nicht richtig berechnet werden und dadurch keine Konzentrationsberechnung erfolgt.

Beispiel: Spontane Emission einer Punktquelle und Aufpunkt bei $XA=100$ m und $YA=400$ m führen zu einem falschen Beaufschlagungszeitraum von ca. 3 s. Zu berücksichtigen wären aber mehrere Minuten. In solchen Fällen ist es ratsam die Zeitpunkte, zu denen eine Konzentrationsberechnung erfolgen soll, vorzugeben, z.B. über eine Startzeit (T_0) und ein Intervall (DT).

In der Praxis spielen solche Kombinationen normalerweise jedoch keine Rolle.

weitere Optionen einstellen	Nein	(I)
-----------------------------	------	-----

Wird diese Frage mit Ja beantwortet, so können auf der folgenden Bildschirmseite spezielle Vorgaben gemacht werden. Eine bestimmte Ausbreitungssituation kann ausgewählt, oder der zeitliche Verlauf der Immissionsstützstellen vorgegeben werden.

weitere Optionen		
soll nur eine bestimmte Ausbreitungssituation gerechnet werden?	0	(I)
MW=...	0	(B)

Wird 0 gewählt, erfolgt die Berechnung gemäß der Richtlinie, also für die mittlere Ausbreitungssituation (indifferente Schichtung ohne Inversion bei der vorgegebenen Windgeschwindigkeit) und die ungünstigen Ausbreitungssituationen (alle 3 Schichtungen mit Inversion bei

einer Geschwindigkeit von 1 m s^{-1} ; bei Berücksichtigung eines thermischen Auftriebs zusätzlich bei höheren Geschwindigkeiten).

Die Ausbreitungsklasse kann aber auch explizit vorgegeben werden. Dabei stellen die Ziffern 1,2 und 3 die entsprechende Ausbreitungssituation stabil, indifferent und labil dar. Diese Angabe bewirkt, daß nur für die vorgegebene Ausbreitungssituation (Rechnung mit der mittleren Windgeschwindigkeit bei der angegebenen Ausbreitungsklasse) gerechnet wird. Die ungünstigen Fälle werden nicht berechnet.

soll mit Inversion gerechnet werden?	Nein	(I)
MW=...	0	(B)

Wird bei der vorangegangenen Frage eine Ausbreitungssituation (1-3) ausgewählt, so kann man noch festlegen, ob diese mit oder ohne Inversionseinfluß gerechnet werden soll.

Im Batch kann dies mit dem Vorzeichen von MW gesteuert werden. Negatives MW bedeutet dann ohne Inversionseinfluß und positives MW mit Inversion.

Vorgabe der Immissionsstützstellen	0	(I)
0- Berechnung über Beaufschlagungszeiten		
1- Vorgabe der Startzeit und des Zeitschritts		
2- Vorgabe einzelner Zeiten		

Die Immissionsstützstellen können vorgegeben werden. Dazu wurden zwei Möglichkeiten implementiert:

1.) Vorgabe einer Startzeit (erste Stützstelle) und eines gleichbleibenden Abstandes zu den folgenden Stützstellen. Wird z.B. eine Anfangszeit von 0 s und ein Zeitschritt von 60 s vorgegeben, so wird beginnend mit der Zeit Null die Konzentration am Aufpunkt zu jeder Minute (alle 60 s) berechnet, bis entweder 100 Stützstellen berechnet wurden, oder die Konzentration auf 1 % der Summe der Konzentrationen abgeklungen ist. (Letzteres bedeutet, daß weitere Konzentrationsberechnungen weniger als 1 % zu der bis dahin ermittelten Dosis beitragen würden.)

In der Batchdatei kann die Startzeit und der Zeitschritt über die Kennungen

T0=...	0 s	(B)
DT=...	60 s	(B)

eingegeben werden.

2.) Vorgabe einzelner Zeiten. Interaktiv werden NS Zeitpunkte eingelesen. Diese können beliebig angegeben werden. Das Programm sortiert die Zeiten anschließend in aufsteigender Folge.

TS=...	0 s	(B)
--------	-----	-----

Im Batch muß NS nicht angegeben werden. Hier hängt die Anzahl der Stützpunkte von der Anzahl der Zeilen mit TS-Kennung ab. Es müssen allerdings mindestens 3 TS-Aufrufe erfolgen, wenn die Dosis oder Maximalkonzentration berechnet werden soll.

Bei der Vorgabe der Immissionsstützstellen ist aber ganz besonders darauf zu achten, daß im Falle der Dosisberechnung und auch bei der Bestimmung der Maximalkonzentration

hinreichend viele Stützstellen vorhanden sind. Diese müssen wenigstens vom Beginn der Beaufschlagung bis zum Ende der Beaufschlagung reichen, da sonst zumindest bei der Dosisberechnung Fehler entstehen.

INfo=...	1	(B)
----------	---	-----

Dieser Parameter läßt sich nur über die Datei STOER.INI setzen. INfo steuert den Informationsgehalt der Bildschirmausgabe:

INfo=0 gibt nur die Ergebnisse auf dem Bildschirm aus,

INfo=1 (Voreinstellung) gibt einige Zwischenergebnisse wie Beaufschlagungszeit, Höhe der Inversion, ... sowie den Konzentrationsverlauf unmittelbar nach der Berechnung aus,

INfo=2 entspricht INfo=1, jedoch mit einer Statuszeile auf deren Inhalt nicht näher eingegangen werden soll. Nur soviel, je höher die zwischen Punkten angezeigte Ziffer, desto länger dauert der momentane Rechenschritt. Dies ist vor allem für diejenigen gedacht, die ihren PC mit Volumenquellen und langen Emissionsabschnitten füttern (lange Rechenzeiten bis zu mehreren Stunden sind möglich) und wenigstens sehen wollen, daß der PC auch wirklich arbeitet.

REset		(B)
-------	--	-----

Dieses Kommando stellt den Ausgangszustand aller Parameter wieder her, entspricht also einem Neustart des Programms. Das ist zum Beispiel nötig, wenn in einer Batch-Datei zwei völlig unterschiedliche Probleme gerechnet werden sollen, und keine der Größen des ersten Falles für den zweiten übernommen werden. Der RESET-Befehl entspricht also einem Neustart des Programms.

Voreingestellt sind hier:

TI - Leerzeile)
 DA - PRN (Drucker)
 UM - $1. \text{ m s}^{-1}$
 IZ - 3 ($z_0=0.5 \text{ m}$)
 HM - 0. m
 XQ - 0. m
 YQ - 0. m
 ZQ - 0. m
 HQ - 0. m
 NQ - 1 (Emissionsstützstellen)
 TQ - 1. s
 QS - $1. \text{ g s}^{-1}$
 NS - 10 (Immissionsstützstellen)
 NZ - 0 (alle Immissionsdaten berechnen)
 XA - 100. m
 YA - 0. m
 ZA - 0. m
 MW - 0 (mittlere und ungünstige Ausbreitungssituation rechnen)
 IN - 1 normales Informationsangebot am Bildschirm

- .. - dichteneutrales Gas
- .. - keine weiteren Optionen berücksichtigen

GO		(B)
----	--	-----

Nach dem Batchkommando GO wird eine Berechnung mit den zuvor spezifizierten Werten vorgenommen. Danach wird weiter in der Eingabedatei gelesen, so daß mehrere Fälle hintereinander gerechnet werden können.

ENd		(B)
-----	--	-----

Das logische Ende der Datei kann mit END gekennzeichnet werden. Nachfolgende Zeilen in der Datei werden nicht mehr bearbeitet. Wurde zuvor ein oder mehrere GO-Befehle ausgeführt, wird das Programm beendet. War kein GO-Befehl in der Datei, wird in den interaktiven Mode verzweigt, wo die Einstellung der Vorgaben entsprechend den Angaben in der Datei erfolgt.

Wird beim Einlesen das physikalische Ende der Datei erreicht, so wird wie nach einem END-Befehl verfahren.

6 Fehlermeldungen

Bei Eingabefehlern können verschiedene Fehlermeldungen in Form von Hinweisen auftreten. Diese sind bei der interaktiven Eingabe durch Ausrufungszeichen (!!) gekennzeichnet. Fehler bei der Bearbeitung der Eingabedatei werden mit der Kennung „PAREIN-i-“ ausgegeben. Natürlich können nicht alle erdenklichen Fehlermöglichkeiten abgefangen werden. Hier hat der Benutzer Sorge zu tragen, daß die Eingaben in sinnvoller Weise geschehen. Andere als die unten angeführten Fehlermeldungen, z.B. Systemmeldungen wie Division durch Null oder ähnliches, können Folge von fehlerhaften Eingaben oder Programmierfehlern sein. Um letztere zu beseitigen ist es sehr wichtig, daß vom Benutzer, der solche Probleme aufdeckt, eine Mitteilung an die für das Programm verantwortliche Stelle erfolgt.

6.1 Hinweise bei falschen interaktiven Eingaben

!! falsche Eingabe !! >

Eine Zahl wurde angefordert, aber die Eingabe bestand aus einem Text, der nicht als FORTRAN-spezifische Zahl interpretiert werden konnte.

Korrektur: Zahl erneut eingeben.

!! nur Werte von ... bis ... möglich !! >

Die angegebene Zahl ist nicht innerhalb der vorgegebenen Grenzen. Die Rauigkeitsklasse kann z.B. nur Werte von 1-5 annehmen.

Korrektur: Eine Zahl die innerhalb der Grenzen liegt eingeben.

!! nur Werte < oder = nnn zulässig !! >

!! nur Werte > oder = iii zulässig !! >

Die angegebene Zahl war zu klein bzw. zu groß.

Korrektur: Eine Zahl eingeben die die Forderung erfüllt.

!! Quellhöhe muß mindestens gleich der Höhe der Oberkante der Quelle sein !!

Besitzt die Quelle eine vertikale Ausdehnung ZQ, so muß die Quellhöhe mindestens die gleiche Höhe haben.

Korrektur: Nach diesem Hinweis wird zur Abfrage der Quelldimensionen verzweigt. Hier kann entweder die vertikale Ausdehnung der Quelle geändert, oder in der darauffolgenden Frage die Quellhöhe auf ZQ gesetzt werden.

!! Zeit nach Emissionsbeginn muß größer als 0s sein !!

Ein Emissionsintervall der Dauer 0s macht keinen Sinn.

Korrektur: Das kleinste Intervall beträgt 1s.

!! Zeitangaben müssen aufsteigend sortiert sein !!

Die Zeiten nach Emissionsbeginn der einzelnen Emissionsabschnitte sind nicht in der richtigen Reihenfolge eingegeben worden.

Korrektur: Die Zeiten nach Emissionsbeginn sind in aufsteigender Reihenfolge anzugeben.

!! falsche Wärmeemission = eee MW ?

Die Eingabe der Schadstoffdichte, der Schadstofftemperatur oder des Volumenstroms ist fehlerhaft (z.B. zu hohe Dichte oder Temperatur kleiner als 10°C). Dies führt zu einer negativen Wärmeemission.

Korrektur: Eingabe überprüfen (Dimensionen beachten).

!! max. Wärmeemission kleiner als 6 MW

Die angegebene oder berechnete Wärmeemission ist in allen Emissionsabschnitten kleiner als 6 MW. Dies ist nach der Richtlinie die Untergrenze zur Berücksichtigung einer Überhöhung.

Korrektur: Wärmeemission größer als 6 MW einsetzen oder ohne Überhöhung rechnen. Sollen auch kleinere Wärmeemissionen berücksichtigt werden, so ist Seite 16 zu beachten.

!! nur eine oder mindestens 3 Stützstellen !!

Warum wollen sie ausgerechnet mit zwei Stützstellen rechnen? Das ist bislang nicht vorgesehen.

Korrektur: Bei Eingabe einer 1 wird die Konzentration zu einer bestimmten Zeit berechnet. Bei 3 oder mehr Stützstellen kann gewählt werden, welche Art der Berechnung durchzuführen ist (Konzentrationsverlauf, Maximalkonzentration oder Dosis).

!! Bei der angegebenen Windgeschwindigkeit tritt diese Schichtung nicht mehr auf. MW auf 2 gesetzt !

Bei Windgeschwindigkeiten über 6 m s^{-1} tritt keine stabile Schichtung mehr auf, bei Geschwindigkeiten über 7 m s^{-1} auch keine labile Schichtung mehr. (siehe Fußnote 7, Richtlinie Seite 9)

Korrektur: Das Programm wählt automatisch die indifferente (MW=2) Schichtung.

!! Berechnungen für Aufpunkte mit Quellentfernungen unter 100 m oder Aufpunkte neben der Fahnenachse (YA<>0) entsprechen nicht der Richtlinie 3783 Blatt 1

Die in der Richtlinie verwendeten Streuungen gelten strenggenommen nur für Entfernungen größer als 100 m. Bei Aufpunkten unter 100 m wird die Streuung zwischen 100 m und der Quelle interpoliert. Dies kann besonders in Quellnähe zu Fehlern führen. Die Berechnung von Aufpunkten neben der Fahnenachse ist in der Richtlinie ebenfalls nicht vorgesehen.

Korrektur: keine

!! DateiDAT weder im aktuellen noch im Verzeichnis C:\STOER\ gefunden.

Stellt das Programm fest, daß mit schweren Gasen gerechnet werden soll, versucht es die beiden Dateien GASE.DAT und VERSATZ.DAT einzulesen. Dazu wird zunächst im aktuellen Verzeichnis gesucht. Werden die Dateien hier nicht gefunden, so wird im Verzeichnis C:\STOER gesucht. Sind die Dateien auch dort nicht vorhanden, bzw. existiert dieses Verzeichnis nicht, so werden die obigen Fehlermeldungen ausgegeben. *Korrektur:* Verzeichnis C:\STOER anlegen und die Dateien dorthin kopieren oder die Dateien ins aktuelle Verzeichnis kopieren. Weitere Möglichkeiten sind die Änderung

des Verzeichnisnamens im Unterprogramm READSG und Neuübersetzung, oder die Angabe eines Suchpfades mittels des DOS APPEND-Befehls (siehe DOS-Handbuch).

- !! Ammoniak breitet sich nur dann als schweres Gas aus, wenn es unter Druck verflüssigt freigesetzt wird (Option 4). In allen anderen Fällen können Ammoniakstörfälle direkt mit der Richtlinie VDI 3783-Blatt 1-berechnet werden.
- Ammoniak verhält sich nur dann als schweres Gas, wenn es unter Druck verflüssigt freigesetzt wird. Erst die sich bildende Aerosolwolke ist schwerer als die umgebende Luft (Blatt 2, Abschnitt 4.1, Fallgruppe d).
- Korrektur:* Auf die folgende Frage mit 4 antworten, ansonsten wird die Meldung
- !! Dieser Fall wird nach Blatt 1 gerechnet.
ausgegeben und das freigesetzte Gas als dichteneutral angenommen.
- !! Die anfängliche Gasdichte ρ_{00} liegt unter 1.392 kg/m^3 .
- Die Eigendynamik von Gasen mit einer anfänglichen Dichte ρ_0 unter 1.392 kg m^{-3} ist zu gering, so daß keine definierte Schwergasphase vorhanden ist.
- !! Das anfängliche Quellvolumen V_0 ist kleiner oder gleich 0.1 m^3 .
- Bei spontaner Freisetzung muß das Quellvolumen V_0 größer als 0.1 m^3 sein, sonst sind die Schwergaseffekte zu vernachlässigen.
- !! Der Quellvolumenstrom $V_0\text{-PUNKT}$ beträgt weniger als $0.001 \text{ m}^3/\text{s}$.
- Bei kontinuierlicher Freisetzung muß der Quellvolumenstrom \dot{V}_0 größer als $0.001 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ sein, sonst sind die Schwergaseffekte zu vernachlässigen.
- !! Die Schwergaseffekte sind vernachlässigbar.
Die Rechnung erfolgt nach VDI 3783 Blatt 1.
- Dieser Hinweis wird nach jeder der 3 obigen Meldungen ausgegeben. Diese Kriterien sind in Blatt 2, Abschnitt 2 und Anhang 6 beschrieben.
- Korrektur:* Korrekturen sind keine erforderlich. Das Programm rechnet automatisch für ein dichteneutrales Gas weiter.

6.2 Fehlermeldungen und Hinweise beim Einlesen der Datei STOER.INI

Treten während des Einlesens Fehler auf oder stellt sich nach dem Einlesen heraus, daß z.B. die Wärmeemission zu klein ist, so werden verschiedene Fehlermeldungen auf dem Bildschirm angezeigt. Endet die Eingabedatei mit END, so hält die Bildschirmausgabe an. Die Meldungen können in aller Ruhe gelesen werden. Nach Betätigen der RETURN-Taste wird dann fortgefahren und man kann die Fehler interaktiv verbessern. Endet die Eingabedatei allerdings mit dem Kommando GO so erscheinen zwar auch die Fehlermeldungen auf dem Bildschirm, die Berechnung wird aber dann, ohne daß Korrekturen möglich sind, fortgesetzt. Das bedeutet, daß mit zum Teil anderen Parametern gerechnet wird als dies gedacht war.

Beispiel: Sie geben $UU=3$ an, weil sie mit 3 m s^{-1} rechnen wollen. Endet die Eingabedatei mit END können sie feststellen, daß UU keine gültige Kennung ist und die Eingabe ignoriert

wurde. Beim anschließenden Durchgehen des Menüs läßt sich dann die richtige Geschwindigkeit einsetzen. Im Falle eines GO-Kommandos am Ende der Datei wird die Rechnung mit 1 m s^{-1} durchgeführt.

Empfehlung: Eingabedateien, die ohne interaktive Kontrolle ausgeführt werden sollen, zunächst ohne GO verwenden um die Syntax und die Einhaltung der Wertebereiche zu prüfen. Tritt dabei kein Fehler auf, so kann der GO-Befehl eingebaut werden und das Störfallprogramm gestartet werden (um z.B. über Nacht auch wirklich das zu rechnen was man wollte).

PAREIN -I-Datei STOER.INI geöffnet

Hinweis, daß eine Eingabedatei STOER.INI gefunden wurde.

PAREIN -F-Zeile nicht interpretierbar ?

Die Zeile enthält in den ersten beiden Spalten keine gültige Kennung, oder es fehlt ein Gleichheitszeichen, oder auf das Gleichheitszeichen folgt keine gültige Zahl (im FORTRAN-Sinne).

Korrektur: Datei editieren. Syntax korrigieren.

PAREIN -I-Variablen zurückgesetzt

Hinweis, daß sämtliche Parameter zurückgesetzt wurden.

PAREIN -W-RESET ignoriert !

Das Kommando REset wurde ignoriert, da es nicht das erste Kommando nach einem GO-Befehl war.

Korrektur: REset muß das erste Kommando nach einem GO-Befehl sein.

PAREIN -F-Zeile > < ignoriert

Zahl xxx nicht im richtigen Wertebereich (iii - nnn)

Die angegebene Zahl war außerhalb des Wertebereichs dieses Parameters. Zum Beispiel führt die Zeile IZO=6 zu dieser Fehlermeldung, da die Rauigkeitsklasse maximal 5 sein kann. Diese Zeile wird dann behandelt, als sei sie nicht vorhanden, d.h. IZO bleibt auf dem voreingestellten Wert 3.

Korrektur: Wertebereiche der Parameter bei der Erstellung von Eingabedateien beachten.

PAREIN -F-mehr als NQ Daten für kk

Es wurden mehr Daten für die Größe kk angegeben, als es die Anzahl der Emissionsabschnitte angibt. Dies ist z.B. der Fall, wenn 3 Emissionsabschnitte angegeben sind (NQ=3), aber 4 Quellstärken oder Wärmeemissionen angegeben werden.

Korrektur: Entweder ist die Anzahl der Emissionsabschnitte falsch angegeben, oder eine Kennung wurde zu oft verwendet.

PAREIN -I-nur eine oder mindestens 3 Stützstellen angeben

NS=2 geht nicht. Siehe Seite 24.

PAREIN -F-Zeitangaben müssen aufsteigend sortiert sein

Die Zeilen mit TQ-Kennung (Zeiten nach Emissionsbeginn) sind nicht geordnet. Vielleicht wurde die Zeit nach Emissionsbeginn mit der Emissionsdauer verwechselt. Das

Programm bricht ab, da in diesem Fall keine Berechnungen möglich sind.

Korrektur: Die Reihenfolge der Stützstellen überprüfen und in der Eingabedatei ändern. Zwischen zwei Stützstellen muß mindestens 1 Sekunde liegen.

PAREIN -I-Wärmeemission nicht berücksichtigt (< 6 MW)

Ist die eingelesene oder berechnete Wärmeemission kleiner als 6 MW, so wird ohne Überhöhung gerechnet.

Korrektur: Werte so ändern, daß sich mehr als 6 MW Wärmeemission ergeben oder ohne Wärmeemission rechnen oder das Programm ändern.

PAREIN -F-inkompatible Angaben: Schweres Gas und Überhöhung

Es wurde sowohl einer oder mehrere Parameter, die zur Überhöhungsberechnung dienen (QH, VS, TT, RO) als auch Angaben zur Schwergasberechnung (NU, SI, RH, FO, PR, AU) gemacht. Das Programm kann hier nicht entscheiden und bricht ab.

Korrektur: Die überflüssigen Parameter in der Datei STOER.INI entfernen und Programm neu starten.

7 Beschreibung der Ausgabe und Beispiele

Die Ausgabe in die Datei oder auf den Drucker enthält alle Eingangsgrößen mit Dimensionsangabe. Die Zahl der ausgegebenen Nachkommastellen wurde zwecks der Übersichtlichkeit gering gehalten. Die Eingabe der Größen kann aber mehr Stellen nach dem Komma enthalten (z.B. bei Angabe von $QS=1.2345678$ wird mit diesem Wert gerechnet, die Ausgabe zeigt aber nur 1.235 an). Die Ausbreitungssituation wird durch Ausbreitungsklasse, Inversionshöhe und Windgeschwindigkeit gekennzeichnet. Alle angegebenen Zeiten beziehen sich auf den Emissionsbeginn. Die Konzentrationen werden in $[mg\ m^{-3}]$ und die Dosis in $[mg\ s\ m^{-3}]$ angegeben.

Einzelheiten lassen sich am besten anhand eines Beispiels beschreiben. Dazu wurde ein Fall mit Punktquelle am Boden und 300 s Emissionszeit gewählt. Die Eingabedatei BSP1.INI könnte folgendermaßen aussehen:

```
! Beispiel 1
! =====
! Die Ergebnisse sollen in die Datei BSP1.LST geschrieben werden
Datei=BSP1.LST
! Dieser Text soll im Ergebnisausdruck als Kennzeichnung stehen
Titel=Beispiel 1: Rechnung mit 300 s Emissionsdauer

UM (mittl. Geschw. in m/s)   = 4.
TQ (Emissionsdauer in s)    = 300.

NS = 6      ! Berechnung an 6 Stuetzstellen

! Lage des Aufpunkts
XA=200.
ZA= 2.

go ! startet die Rechnung ohne interaktive Kontrolle
END ! Ende der Eingabedatei
```

Es werden hier nur Angaben zu denjenigen Parametern gemacht, die von der Initialisierung (siehe RESET-Kommando Seite 21) abweichen, d.h. die Quellparameter (Punktquelle am Boden, Quellstärke $1\ g\ s^{-1}$, ein Emissionsabschnitt, keine Überhöhung) und die Standortparameter (mittlere Bebauungshöhe 0 und Bodenrauigkeitsklasse 3) werden übernommen. Da nicht angegeben wurde was berechnet werden soll, wird $NZ=0$ angenommen und alle Immissionsdaten bestimmt.

Auf einem 10 Mhz AT ohne Coprozessor benötigt die gesamte Rechnung 1:45 Minuten. Ein Coprozessor beschleunigt die Berechnung dieses Beispiels um den Faktor sieben (gemessen auf einem 4.77 MHz XT).

Die Ausgabe in der Datei BSP1.LST läßt sich zunächst in 4 Blöcke gliedern:

Block 1

Im ersten Block werden die zur Berechnung verwendeten Größen aufgelistet.

Beispiel 1: Rechnung mit 300 s Emissionsdauer

* Eingabeparameter *

Standortparameter:

Rauhigkeitsklasse 3 Z0 = .50 m
mittlere Bebauungshöhe .0 m

Quellparameter der Punktquelle:

Quellabmessungen XQ = .0 m
YQ = .0 m
ZQ = .0 m
Quellhöhe .5 m

Emissionsdauer 300. s
Quellstärke 1.000 g/s

* Berechnung aller Immissionsdaten *

Aufpunktkoordinaten: XA= 200. m ; YA= 0. m ; ZA= 2. m

In der ersten Zeile wird zunächst der Programmname und die Version ausgegeben. Dahinter steht das Datum an dem dieser Fall gerechnet wurde.

Danach folgt die Aufzählung aller den Standort und die Quelle charakterisierender Parameter. Eingerahmt wird die Art der Berechnung dargestellt. In diesem Fall sollten alle Immissionsdaten bestimmt werden und zwar für den darunter aufgeführten Aufpunkt.

Block 2

----- mittlere Ausbreitungssituation -----
Ausbreitungsklasse 2 Schichtung: indifferent
keine Inversion
Windgeschwindigkeit in Anemometerhöhe 4.0 m/s
Transportgeschwindigkeit 3.1 m/s

Zeit (s)	Konzentration (mg/m**3)
41.0	.236E-02
117.0	.276E-01
193.0	.283E-01
269.0	.284E-01
345.0	.238E-01
421.0	.623E-03

höchste Konzentration .2837E-01 mg/m**3
nach 314. s

Dosis 8.441 mg*s/m**3

Da keine spezielle Ausbreitungssituation vorgegeben wurde, erfolgt die Berechnung mit der mittleren Ausbreitungssituation. Diese ist gekennzeichnet durch indifferente Schichtung,

keine Inversion, 4 m s^{-1} in Anemometerhöhe und einer effektiven Transportgeschwindigkeit von 3.1 m s^{-1} (Schichtmittel der Windgeschwindigkeit zwischen Boden und 10 m nach Gleichung (10) der Richtlinie).

Anschließend wird der Konzentrationsverlauf ausgegeben. Zeit ist dabei die Zeit nach Emissionsbeginn in Sekunden. Die Konzentration am Aufpunkt zu den einzelnen Zeiten ist in mg m^{-3} angegeben. Die höchste Konzentration wird nach ca. 314 s mit 0.0284 mg m^{-3} erreicht. Die Dosis ergibt sich zu 8.4 mg s m^{-3} .

Block 3

 Ausbreitungsklasse 1 Schichtung: stabil
 mit Inversion in einer Höhe von 20.0 m
 Transportgeschwindigkeit 1.0 m/s

Zeit (s)	Konzentration (mg/m^{**3})
153.0	.323E-01
237.0	.426
321.0	.521
405.0	.528
489.0	.327
573.0	.330E-01

höchste Konzentration .5276 mg/m^{**3}
 nach 405. s

Dosis 156.9 mg*s/m^{**3}

 Ausbreitungsklasse 2 Schichtung: indifferent
 mit Inversion in einer Höhe von 20.0 m
 Transportgeschwindigkeit 1.0 m/s

Zeit (s)	Konzentration (mg/m^{**3})
140.0	.264E-01
240.0	.257
340.0	.332
440.0	.320
540.0	.923E-01
640.0	.177E-01

höchste Konzentration .3432 mg/m^{**3}
 nach 404. s

Dosis 104.6 mg*s/m^{**3}

 Ausbreitungsklasse 3 Schichtung: labil
 mit Inversion in einer Höhe von 20.0 m
 Transportgeschwindigkeit 1.0 m/s

Zeit (s)	Konzentration (mg/m^{**3})
116.0	.974E-02
238.0	.173
360.0	.232
482.0	.143
604.0	.367E-01
726.0	.113E-01

höchste Konzentration .2372 mg/m^{**3}

	nach	393. s
Dosis	73.91	mg*s/m**3

Nach der mittleren Ausbreitungssituation erfolgen die Berechnungen mit einer Transportgeschwindigkeit von 1 m s^{-1} und einer Inversion in 20 m Höhe für die drei Schichtungen. Das Ausgabeformat der Ergebnisse für jede Stabilitätsklasse entspricht dem bei der mittleren Ausbreitungssituation besprochenen.

Block 4

```

----- ungünstigste Ausbreitungssituation -----
Ausbreitungsklasse 1 Schichtung: stabil
mit Inversion in einer Höhe von 20.0 m
Transportgeschwindigkeit 1.0 m/s

Maximaldosis 156.9 mg*s/m**3

-----
----- ungünstigste Ausbreitungssituation -----
Ausbreitungsklasse 1 Schichtung: stabil
mit Inversion in einer Höhe von 20.0 m
Transportgeschwindigkeit 1.0 m/s

Maximalkonzentration .5276 mg/m**3
nach 405. s
-----

```

Abschließend wird die ungünstigste Ausbreitungssituation bezüglich der Dosis und der Maximalkonzentration ausgegeben. Hier werden neben der maximalen Dosis bzw. Maximalkonzentration auch noch einmal die Ausbreitungsbedingungen, die zu diesen Maxima führen, aufgelistet.

Wird eine mittlere Ausbreitungssituation vorgegeben, so wird nur Block 1 und 2 ausgegeben. Bei Fällen in denen eine Überhöhung zu berücksichtigen ist, wird Block 3 sehr groß, da dann für Geschwindigkeiten von 1 ms^{-1} bis 10 ms^{-1} gerechnet wird.

Wird statt aller Immissionsdaten (NZ=0) nur eine Information (Konzentrationsverlauf, Maximalkonzentration oder Dosis) gewünscht, so verkürzen sich die Blöcke 2-4 entsprechend.

Weitere Beispiele sind als Initialisierungsdateien auf der Diskette vorhanden. Auch die entsprechenden Ergebnisdateien (BSPi.LST) sind beigelegt.

BSP2.INI ist ein Beispiel mit Vorgabe eines Emissionsverlaufes und der Immissionsstützstellen. Bei einer ausgewählten Ausbreitungssituation (indifferente Schichtung ohne Inversionseinfluß) soll für 2 Aufpunkte der Konzentrationsverlauf berechnet werden.

Rechnet man diesen Fall z.B. mit 10 Stützstellen, die sich aus der Beaufschlagungszeit errechnen und bestimmt zusätzlich die maximale Konzentration, so stellt man fest daß der maximale Wert im Konzentrationsverlauf um eine Zehnerpotenz tiefer liegt als der berechnete Maximalwert. Ferner stellt man fest, daß sich ab einer bestimmten Zeit am Konzentrationsverlauf nicht mehr viel ändert, d.h. ein stationärer Zustand eintritt. Würde man nun

wesentlich mehr Stützstellen wählen um den Verlauf im Bereich der Maximalkonzentration besser aufzulösen, so würde auch im Bereich mit stationärem Konzentrationsverlauf sehr hoch zeitlich aufgelöst, was unnötig ist. In diesem Fall ist es also sinnvoll die Stützstellen vorzugeben und zwar mit einer hohen zeitlichen Auflösung im Bereich des Maximums und entsprechend geringer Auflösung im Bereich mit nur unwesentlichen Konzentrationsänderungen.

BSP3.INI berechnet die Konzentrationen im Fernfeld einer Volumenquelle, die mit einem erheblichen thermischen Auftrieb emittiert. Die sich ergebenden Inversionshöhen haben in diesem Fall faktisch keine Auswirkung mehr auf Konzentrationen in Bodennähe. Konzentrationen in Bodennähe werden in diesen Fällen nur bei sehr großen mittleren Windgeschwindigkeiten berechnet.

(Die Angaben der Inversionshöhe bzw. der effektiven Quellhöhe in der Ausgabe beziehen sich auf die Entfernung des Aufpunkts. Bei anderen Aufpunktsentfernungen können folglich bei sonst identischen Bedingungen (Wärmeemission, Windgeschwindigkeit) andere Werte für diese Höhen angegeben sein.)

Die Gesamtdauer der Emission wurde mit 15 Minuten angesetzt. Man sieht, daß sich auch hier sehr schnell ein stationärer Zustand am Aufpunkt einstellt. Die Berechnung von 10 Stützstellen ist bei diesem einfachen Emissionsverlauf also nicht nötig.

In Bezug auf die Rechenzeit ist dies einer der ungünstigsten Fälle:

- Die relativ lange Emissionsdauer führt zu einer Aufspaltung der Emission in viele Einzelpuffs.
- Bei einer Volumenquelle muß über die Quellabmessungen integriert werden, was zahlreiche Aufrufe der Errorfunction zur Folge hat.
- Bei Berücksichtigung einer Überhöhung muß abhängig von der Reisezeit jedes Puffs dessen effektive Quellhöhe und seine effektive Transportgeschwindigkeit berechnet werden.

Auf einem 10 MHz AT ohne Coprozessor muß man auf das Ergebnis dieses Beispiels 1:45 Stunden warten. Auf einer VAX 8530 sind immerhin noch 105 Sekunden CPU-Zeit nötig.

BSP4.INI – BSP6.INI sind Beispiele von Eingabedateien für Schwergasfälle wie sie im Anhang B2 –Toxische Gase– der Richtlinie Blatt 2 geschildert werden. Die dort abgedruckten Ergebnisse lassen sich so bequem nachrechnen, und es wird empfohlen diese Beispiele nachzuvollziehen.

Bei Rechnungen mit schweren Gasen unterscheidet sich die Ausgabe der Ergebnis in folgenden Punkten:

- Zusätzliche Eingabeparameter wie Gasart, Freisetzungsform, Prozeßtemperatur und Ausbreitungsgebiet werden ausgegeben.
- An die Ausgabe der Eingabeparameter schließt das Ergebnis der Schwergasausbreitung an. Es beinhaltet die insgesamt freigesetzte Masse, die berechnete Freisetzungsart

(spontan oder kontinuierlich), die charakteristische Länge (L_{ci} bei spontaner Freisetzung und L_{cc} bei kontinuierlicher Freisetzung) und die charakteristische Geschwindigkeit (U_c).

Es folgt die Gaskonzentration am Kopplungsort und die Entfernung des Kopplungsorts von der Quelle für den mittleren und den ungünstigsten Fall. Bei spontaner Freisetzung wird zudem die Zeit nach Emissionsbeginn angegeben, zu der die Kopplung erfolgt.

Das letzte Resultat der Schwergasausbreitung ist die Lage des ersten Aufpunkts für den nach Blatt 1 gerechnet werden kann. Diese Angabe erfolgt in m ab der realen Quelle und nicht, wie in Blatt 2 angegeben, ab dem Kopplungspunkt.

Werden Aufpunkte angegeben, die zwischen Kopplungsort und erstem Aufpunkt liegen, so erfolgt nach Ausgabe der Aufpunktkoordinaten der Zusatz, daß für diesen Aufpunkt interpoliert werden muß. Das heißt, das Programm rechnet zunächst für den als ersten Aufpunkt angegebenen Punkt die Konzentrationen aus und interpoliert anschließend nach der in Blatt 2 vorgeschlagenen Formel auf den spezifizierten Aufpunkt. Die Zeiten nach Emissionsbeginn werden linear zwischen Kopplungspunkt und erstem Aufpunkt interpoliert.

Liegt der gewählte Aufpunkt noch vor dem Kopplungspunkt, so wird ausgegeben, daß die Konzentration über 1 % der Anfangskonzentration beträgt. Weiter Aussagen können mit diesem Programm nicht getroffen werden. Bei zündfähigen Gasen kann hier mit dem Programm VDISF2 gegebenenfalls die untere Zünddistanz ermittelt werden.

- Das Ausgabeprotokoll für Konzentrationsverlauf, Maximalkonzentration bzw. Dosis unterscheidet sich nicht von dem bereits für dichteneutrale Gase beschriebenen. Es ist aber zu beachten, daß Zeitangaben bei kontinuierlicher Freisetzung strenggenommen nicht möglich sind, da die Zeit nach Emissionsbeginn, zu der gekoppelt wird, nicht bekannt ist. Die angegebenen Zeiten beruhen auf der Annahme, daß der Zeitpunkt der Kopplung der gleiche wie bei spontaner Freisetzung ist. Dies ist mit Sicherheit nicht ganz richtig, in der Praxis (d.h. bei Genehmigungsverfahren) spielt die Zeit, zu der eine Immission eintritt, aber keine Rolle.

Anmerkungen:

Im Gegensatz zum Programm VDISF2 haben die Massenangaben in g statt in kg zu erfolgen. Die Ortsangaben (z.B. XA) beziehen sich immer auf den Nullpunkt (Leeseite der Quelle) und nicht auf den Kopplungspunkt. Die Zeitangaben beziehen sich auf den Emissionsbeginn ($t=0$).

Ferner gibt es Unterschiede bei der Eingabe von Emissionsverläufen. Blatt 2 fordert eine erste Stützstelle zur Zeit $t=0$. Die zweite Stützstelle soll dann bei $t=1$ s liegen (siehe Abschnitt 4.3, Blatt 2). Diese Restriktionen entfallen beim Programm STOER. Es ist allerdings darauf zu achten, daß im Bereich maximaler Emission die Zeitabschnitte sehr klein gewählt werden, so daß der größte momentan auftretende Volumenstrom gut getroffen wird, da dieser Wert als Bestimmungsgröße bei kontinuierlicher Freisetzung eingeht.

Des weiteren sollte die zeitliche Integration des Emissionsverlaufs die insgesamt freigesetzte Masse ergeben, da dieser Wert als Bestimmungsgröße bei spontaner Freisetzung eingeht.

8 Änderungen des Quellcodes für andere Compiler

Soll das Programm STOER auf anderen Rechnersystemen eingesetzt werden, so sind im Quellcode eventuell folgende Änderungen vorzunehmen, damit der jeweilige Compiler das Programm richtig übersetzen kann:

- '\ ' bewirkt bei MS-FORTRAN, daß kein Zeilenvorschub am Zeilenende einer Bildschirmausgabe erfolgt.

In allen Formatangaben muß dieses Zeichen durch ein für den Compiler spezifisches Zeichen ersetzt werden (siehe dazu Handbücher der jeweiligen Compiler unter Formatsteuerzeichen). Ist kein Zeichen dafür vorgesehen, so ist der '\ ' zu entfernen.

- Das Unterprogramm CLS löscht den PC-Bildschirm, sofern der ANSI-Treiber geladen ist (siehe ANSI-Steuerzeichen des Treibers ANSYS).

Auf anderen Rechnersystemen durch ein entsprechendes Unterprogramm ersetzen, das den Bildschirm löscht.

- Das Unterprogramm WAIT und die Funktion LCORR positionieren den Cursor in Zeile 24 und geben eine Meldung aus.

Die Positioniersequenz (ANSI-Steuerzeichen) sind gegebenenfalls zu ersetzen.

- Das Unterprogramm CUP gibt in der letzten Zeile eine Statusmeldung aus und setzt die aktuelle Cursorposition eine Zeile zurück (siehe ANSI-Steuerzeichen).

Läßt sich diese Escape-Sequenz nicht ersetzen, so sind das Unterprogramm CUP und dessen Aufrufe zu streichen. Der Parameter INFO=2 wird dann bedeutungslos.

- Das Unterprogramm GETDAT ermittelt das Systemdatum (MS-FORTRAN).

Bei anderen Compilern existiert in der Regel eine äquivalente Funktion, die den aktuellen Tag, den Monat und das Jahr bereitstellt.

- Umlaute in den Formatanweisungen stellen für PC's keine größeren Probleme dar, werden aber auf den meisten Großrechnern nicht unterstützt.

Hier hilft nur die Umlaute zu ersetzen (ä - ae, ...).

- Die Grafikzeichen (8-Bit-ASCII-Code) wie horizontale (-, =) und vertikale (|, ||) Balken sowie die Ecken, die bei den Seitenüberschriften verwendet werden, sind auf Rechnern, die diese Zeichen nicht unterstützen, abzuwandeln.

- Die Verzeichnisangabe C:STOERim Unterprogramm READSG ist auf einen für das System gültigen Namen abzuändern.

- Kleinschreibung von Kommandos und Text in Formatanweisungen sind für manche Compiler ein Problem.

Hier hilft nur die Umwandlung aller Kleinbuchstaben in Großbuchstaben.

- Auf Rechnern, die statt des ASCII-Codes den EBCDIC-Code verwenden (z.B. IBM-Großrechner) funktioniert das Umwandeln von Klein- in Großschreibung beim Einlesen der Kennungen im Unterprogramm PAREIN nicht.

Die Zeilen

IF (I.GT.90) I=I-32 sind durch die Zeilen
IF (I.LT.170) I=I+64 zu ersetzen.

- Bei Compilern, die ein virtuelles Speichermanagement unterstützen (z.B. unter UNIX) muß dafür Sorge getragen werden, daß die lokalen Variablen nach Verlassen der Unterprogramme nicht überschrieben werden (/SAVE-Option beim Übersetzen).

9 Grafik

9.1 Grafik auf dem Bildschirm

Auf vielfachen Wunsch wurde ein recht einfach gehaltenes Grafikprogramm mit auf die Diskette übernommen. Da eine Unterstützung aller auf dem Markt befindlicher Bildschirmadapter und Auflösungen nur schwer möglich ist, wurde ein, zumindest im professionellen Bereich verbreiteter Grafikmodus verwendet. Es handelt sich um den EGA-Modus, der eine Darstellung von 640·350 Pixel in 16 Farben auf entsprechenden Bildschirmen erlaubt.

Das Programm STEGA wurde in Turbo-Basic (tm) geschrieben, um vielen Benutzern die Möglichkeit zu geben, bei Bedarf einfache Änderungen oder Anpassungen vorzunehmen.

STEGA liest eine mit dem Programm STOER erzeugte Ergebnisdatei ein, gibt die Eingabeparameter auf dem Bildschirm aus und stellt auf einen Tastendruck 4 Konzentrationsverläufe grafisch dar.

Dadurch wird eine schnelle Beurteilung der Konzentrationsverläufe möglich.

- Sind z.B. die Konzentrationsverläufe noch sehr eckig, so war die Anzahl der Stützstellen bei der Konzentrationsberechnung zu gering.
- Da der Konzentrationsverlauf für Ausbreitungsklasse andersfarbig dargestellt wird, können die Unterschiede, die auf der thermischen Stabilität beruhen, schnell erfaßt werden.

Mit dem Aufruf `STEGA dateiname/option` wird das Programm gestartet. Das Kommando `STEGA BSP1.LST` liest die Daten der Datei BSP1.LST ein und listet die Eingabedaten dieses Falles am Bildschirm auf. Durch Drücken einer Taste erscheint die Grafik auf dem Schirm (oder eine Fehlermeldung, wenn keine EGA-Karte vorhanden ist). Durch Betätigen einer beliebigen Taste kommt man auf die DOS-Ebene zurück bzw. erhält die Ergebnisse weiterer Berechnungen dargestellt.

Dies ist erst mit der vorliegenden Version R.4 möglich, die gegenüber der Version R.3 etwas erweitert wurde.

9.2 Grafik auf dem Drucker

Wer ein Hardcopy-Programm für EGA-Darstellungen besitzt, kann damit die Grafik vom Bildschirm auf den Drucker kopieren. Entsprechende Utilities oder Tools sind auf dem Markt erhältlich. Diese unterstützen unterschiedliche Grafikauflösungen und Drucker.

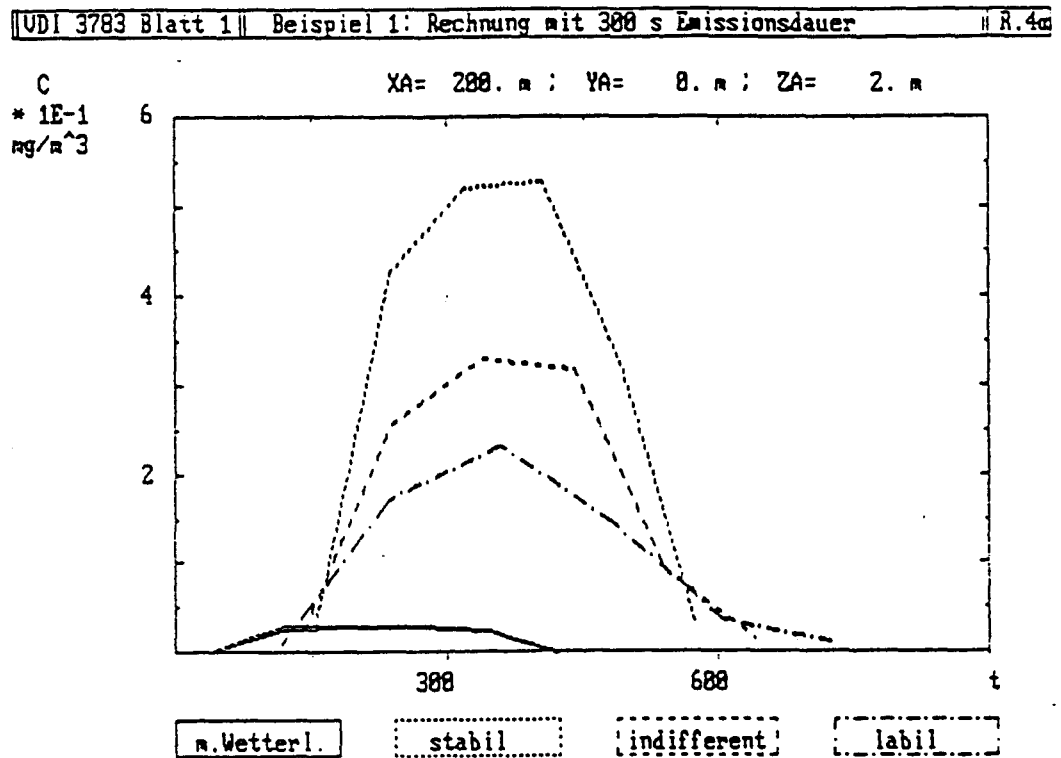
Wer einen NEC- oder EPSON-kompatiblen 24-Nadeldrucker besitzt, kann auch mit dem auf der Diskette enthaltenen EGACOPY-Programm die Konzentrationsverläufe auf dem Drucker ausgeben. Eine Bedienungsanleitung dieses Programms ist in der Datei EGACOPY.DOC enthalten.

Zur Ausgabe von Konzentrationsverläufen in Zusammenhang mit dem Programm STEGA ist folgendes zu beachten:

- Bevor STEGA aufgerufen wird, ist das Programm EGACOPY aufzurufen. Dieses installiert einen Treiber für EGA-Grafik auf einem 24-Nadeldrucker. Die korrekte Installation kann überprüft werden, indem EGACOPY ein zweites Mal aufgerufen wird. Dann müssen die wählbaren Optionen auf dem Bildschirm ausgegeben werden.
- Das Programm STEGA sollte in der Form
STEGA Laufwerk:\Pfad\Dateiname/B
aufgerufen werden, wenn die Grafik auf dem Drucker ausgegeben werden soll. Die Angabe von Laufwerk und Pfad kann entfallen, wenn die Datei, in der die Ergebnisse abgespeichert sind, im aktuellen Verzeichnis abgelegt ist. Die Angabe /B bewirkt eine Schwarz-Weiß-Darstellung der Kurven auf dem Bildschirm.
- Soll die auf dem Schirm angezeigte Grafik ausgedruckt werden, ist zunächst die PrtScrn-Taste zu drücken. Daraufhin sollte noch kein Ausdruck erfolgen, denn das installierte Treiberprogramm wartet nun noch auf die Eingabe von Optionen. Zum Beispiel kann der Vergrößerungsfaktor in x- oder y-Richtung eingegeben werden. Es erfolgt keine Ausgabe der eingetippten Zeichen auf dem Bildschirm! Zum Starten des Ausdrucks im Grafikmode muß abschließend eine der Tasten H oder Q betätigt werden. Wird statt dessen RETURN gedrückt, so erfolgt zwar auch ein Ausdruck, aber im Textmode, d.h. es wird nur die Beschriftung ausgedruckt.

Die Qualität der Grafiken reicht nicht an Plotterausgaben heran, ist aber durchaus brauchbar. Die folgende Abbildung wurde mit EGACOPY erzeugt. Die Konzentrationsverläufe basieren auf den Daten der Datei BSP1.LST. Der Ausdruck erfolgte im Hochformat, ohne daß die Maßstabsfaktoren X und Y geändert wurden, also in der Standardeinstellung X2Y3N.

Abb. 1: Hardcopyausdruck der Konzentrationsverläufe für das Beispiel BSP1.LST auf NEC P7.



10 Schlußbemerkung

Alle Benutzer sind dazu aufgefordert, auftretende Probleme, Fehler in den Programmen und Anregungen dem VDI bzw. der VDI-Arbeitsgruppe „Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen“ zukommen zu lassen, da nur so eine effiziente Weiterentwicklung möglich ist. Bis endgültig geklärt ist, wer die Softwarepflege und Beratung übernimmt, stehe ich für Fragen und Verbesserungsvorschläge, die in erster Linie die Programme betreffen sollten, zur Verfügung.

Dr. R. Röckle
(Anschrift bis 31.12.1990)
Institut für Meteorologie
TH Darmstadt
Hochschulstraße 1
6100 Darmstadt
Telefon 0 61 51 / 16 26 70
Bitnet: XBR1D485@DDATHD21



Anmerkungen zur Weiterentwicklung des Programms STOER zur VDI 3783 Blatt 1

Dr. Rainer Röckle
IMA - Richter & Röckle
Eisenbahnstr. 43

Tel. 07 61 / 2 02 16 61
Fax 07 61 / 2 02 16 71

79098 Freiburg

Das Programm STOER berechnet Immissionsverläufe, Maximalkonzentrationen oder Dosen (Integral über den Immissionsverlauf) an vorzugebenden Aufpunkten für schwere, dichteneutrale und leichte (heiße) Gase bei kontinuierlicher, spontaner oder zeitlich variabler Freisetzung.

Die Version V2.00 ist die derzeit offiziell vom VDI vertriebene Version des Rechenprogramms zur Richtlinie VDI 3782 Blatt 1.

Einige aufmerksame Benutzer haben in dieser Version Programmfehler entdeckt, die lokalisiert und behoben werden konnten. Hier sind vor allem Probleme bei der Batchsteuerung zu nennen. Einige Variable wurden bei aufeinanderfolgenden Berechnungen nicht zurückgesetzt, z.B. wenn verschiedene Aufpunktsentfernungen in einer Steuer-Datei angegeben waren, wurde nur für die erste Berechnung mit der angegebenen mittleren Windgeschwindigkeit gerechnet, für die restlichen Berechnungen mit einer mittleren Windgeschwindigkeit von 1m/s.

Ferner wurde Blatt 2 durch einige weitere Ausbreitungsgebiete ergänzt. Diese werden in der inoffiziellen Version bereits berücksichtigt.

Das Programm wurde auch um die Berechnung der unteren Zünddistanzen erweitert. Diese Erweiterung entspricht jedoch noch nicht der in Blatt 2 beschriebenen Berechnung der freigesetzten Masse, so daß hier eine Anpassung erfolgen muß. Bei Blatt 1 erfolgt die Berechnung aus Zeiträumen mit konstanter Emission, während bei Blatt 2 die Berechnung aus den Kurvenstützpunkten des Emissionsverlaufs erfolgt.

Die wesentlichen Weiterentwicklungen oder Änderungen sind in der folgenden Aufzählung kurz beschrieben:

- | | |
|-----------------|--|
| V2.10 16-Apr-91 | Programm wurde um die Berechnung der unteren Zünddistanz erweitert (Abweichungen zu Blatt 2 beachten!) |
| V2.11 14-Aug-91 | Die mittlere Windgeschwindigkeit bleibt jetzt auch bei Batchsteuerung erhalten. |
| V2.12 24-Apr-92 | Abfrage nach LOG(0.) im Unterprogramm EMZEIT geändert |
| V2.20 27-Okt-93 | Das LAHEY-Unterprogramm NBLANK wurde eingebaut. Es ersetzt das Unterprogramm LAEN, das zur Ermittlung der Zeichenanzahl in einem String diente.
Kleinere Umstellungen in der Steuerung und mehr Kommentare im Quellcode. |
| V2.21 08-Dez-93 | Bei Angabe von Schwergasparametern ist die Quellstärke Q in g/s anzugeben. Wenn die Quelle eine Ausdehnung in x-, y- oder z-Richtung hat und das Unterprogramm SGPHAS keine Schwergasereffekte diagnostiziert (z.B. wenn die freigesetzte Masse zu gering ist), dann wird die Quellstärke entsprechend der Quellausdehnung umgerechnet ($Q=Q / (XQ * YQ * ZQ)$). |

Die Angaben in den Eingabedateien VERSATZ.DAT und ZÜNDIST.DAT sowie die entsprechenden Dimensionierungen im Programm wurden auf 21 Gebiete ausgedehnt.

- V2.22 16-Dez-93 Die Datumsangabe im Dateikopf war bei Übersetzung mit dem LAHEY-Compiler falsch und wurde korrigiert.
- V2.23 02-Feb-94 Die Prozeßtemperaturabfrage wird nicht mehr auf die Siedepunkttemperatur begrenzt.

Die Programmentwicklung fand bislang überwiegend im Rahmen von Anwenderanfragen statt. Da das Benutzerhandbuch noch nicht ergänzt und einige Tests noch nicht durchgeführt wurden, kann die Version noch nicht offiziell weitergegeben werden. Für die Tests, die Anpassung der Massenberechnung an Blatt 2 und die Ergänzung des Handbuches ist ein nicht geringer Zeitraum (~1 Woche) zu veranschlagen. Die Programmpflege ohne Aufwandschädigung ist bei der TÜV Energie und Umwelt GmbH (oder auch privat) nur in beschränktem Umfang möglich. Ferner scheinen mir einige Haftungsfragen (z.B. Produkthaftung) nicht eindeutig geklärt zu sein. Die angedachte Übernahme des Programmverkaufs und der Programmpflege durch den Beuth-Verlag, die hier Lösungen versprochen hätte, kam nicht zustande.

Für die Mitglieder der AG kann eine Diskette mit der neuesten Version zur Verfügung gestellt werden (Dr. Brünger). Dabei ist die Beschreibung auf den folgenden Seiten zu beachten.

Kurzbeschreibung zur vorliegenden Diskette

Diese Diskette enthält das Programmpaket zur Störfallrichtlinie VDI 3783 in der Version 2.23.

== Inhalt der Diskette ==

ST223.FOR	Quellcode (FORTRAN 77 für MS-FORTRAN und LAHEY-Compiler)
ST223MS.EXE	ausführbares Programm für Rechner ohne Coprozessor
ST223MSC.EXE	ausführbares Programm für Rechner mit Coprozessor (80x87)
ST223LH.EXE	ausführbares Programm für Rechner mit Coprozessor (80x87) und min. 2 MByte RAM (32-Bit Version)
ST.BAT	STOER.EXE mit Eingabedatei starten
GASE.DAT	Stoffspezifikationen für Rechnungen nach Blatt 2
VERSATZ.DAT	Raum- und Zeitversatz des Kopplungspunkts bei Rechnungen mit schweren Gasen
ZÜNDIST.DAT	untere Zünddistanzen
BSPY.INI	Beispiel einer Batcheingabedatei (.INI) mit YA<0
BSPY.TST	entsprechende Ergebnisdatei
BSP1.INI	weitere Batcheingabedatei
BSP1.TST	und entsprechende Ergebnisdatei
...	
BSP6.INI	Die Beispiele 3 bis 6 sind Rechnungen mit toxischen Gasen
BSP6.TST	wie sie im Anhang von Blatt 2 aufgeführt sind
BSPS1.INI	Beispiele für schwere Gase (aus Anhang B Blatt2)
BSPS1.TST	
...	
BSPS5.INI	
BSPS5.TST	

== Installation auf Festplatte und Test ==

(Annahme: Die Installationsdiskette befindet sich in Laufwerk A., das aktuelle Laufwerk ist C: und das Verzeichnis in das kopiert werden soll, sei \STOER)

```
C:
C:\
MD STOER
CD STOER
```

- 1) ST.BAT kopieren
COPY A:ST.BAT C:
- 2) Wenn ein Coprozessor (80X87) vorhanden ist, dann sollte eine der beiden Coprozessor-Versionen kopiert werden.
COPY A:ST223???.EXE C:STOER.EXE
- 3) Die Dateien GASE.DAT, VERSATZ.DAT und ZÜNDIST.DAT werden für Schwergasrechnungen benötigt und müssen kopiert werden.
COPY A:*.DAT C:

- 4) Ausprobieren:
Die Beispielinitialisierungsdatei kopieren und ausführen
COPY A:BSPI.INI C:

Starten des Programms mit den Beispieldaten
ST BSP1.INI

Der Beispielfall müßte dann ohne Probleme gerechnet werden. Dabei wird eine Datei namens BSP1.LST erzeugt. Diese kann mit dem DOS-Kommando FC mit der Originalergebnisdatei BSP1.TST verglichen werden:

```
FC BSP1.LST BSP1.TST
```

Eigentlich sollte FC außer dem Datum in der Kopfzeile keine Unterschiede melden. Es kann allerdings vorkommen, daß aufgrund der etwas höheren Rechengenauigkeit der Coprozessorversion minimale Abweichungen auftreten.

- 5) Ausdrucken:
Mit PRINT BSP1.LST können die Ergebnisdateien ausgedruckt werden.

== Anmerkungen ==

- Ein Handbuch das die Erweiterungen beschreibt, liegt noch nicht vor. Diese Version ist jedoch abwärtskompatibel zur Version 2.00.
- Die Dateien ST221ms?.EXE wurden mit dem Microsoft FORTRAN Optimizing Compiler V5.10 übersetzt und dem MS-Linker 5.15 gebunden. Die Datei ST221lh.EXE wurde mit dem 32-bit-LAHEY-Compiler übersetzt und enthält den Phar-Lap-Dos-Extender. Wer neuere Compiler besitzt, sollte den Quellcode nochmals übersetzen.
- In dieser Version wurden die neuen Gebiete (jetzt 21) für die Schwergasberechnung aufgenommen.
- Abweichend zur Richtlinie 3783 Blatt 2 wird der Emissionsverlauf wie in Blatt 1 beschrieben, vorgegeben. Das heißt, daß Emissionsintervalle konstanter Emission vorgegeben werden und nicht Stützpunkte des Emissionsverlaufs. Bei Vorgabe von Emissionsverläufen können deshalb Unterschiede zu der entsprechenden Berechnung nach Blatt 2 (Programm VDISF234) auftreten. Da diese Version nicht offiziell ist, sollte in diesen Fällen mit VDISF234 gerechnet werden!
- Die Angaben des Massenstromes sind in [g/s] (und nicht in [kg/s] wie in Blatt 2) zu machen.
- Abweichungen der Ergebnisse zwischen den Compilerversionen sollten nicht auftreten. Beobachtet wurde allerdings, daß die LAHEY-Version zum Teil mit .INI-Dateien, die TAB's hinter dem Gleichheitszeichen (=) enthalten, nicht zurecht kommt und folglich mit anderen Startwerten operiert.
!!! Die Auflistung der Eingabedaten in der Ergebnisdatei sollte sowieso immer geprüft werden !!!
- Ein weiterer Fall mit einer Abweichung ergibt sich bei Rechnung mit heißen Gasen, wenn beim LAHEY V5.11 der Schalter /n4 gesetzt ist. Wird /4 (Optimierung für 486) gesetzt, tritt der Fehler nicht auf.
- Fehler oder Unstimmigkeiten sind mir bitte mittels FAX oder via Diskette mitzuteilen.