



Bundesamt  
für Strahlenschutz

## **Ressortforschungsberichte zum Strahlenschutz**

Integration des atmosphärischen Ausbreitungsmodells  
FLEXPART in RODOS zur Erweiterung der Möglichkeiten der  
inversen Modellierung zur Quellort- und  
Quelltermbestimmung auf der Grundlage von Messdaten

### **Vorhaben 3619S62500**

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

W. Raskob  
C. Staudt

Das Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz,  
nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) und im Auftrag des Bundesamtes  
für Strahlenschutz (BfS) durchgeführt.

Dieser Band enthält einen Ergebnisbericht eines vom Bundesamt für Strahlenschutz im Rahmen der Ressortforschung des BMUV (Ressortforschungsplan) in Auftrag gegebenen Untersuchungsvorhabens. Verantwortlich für den Inhalt sind allein die Autoren. Das BfS übernimmt keine Gewähr für die Richtigkeit, die Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere darf dieser Bericht nur mit seiner Zustimmung ganz oder teilweise vervielfältigt werden.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der des BfS übereinstimmen.

## **Impressum**

Bundesamt für Strahlenschutz  
Postfach 10 01 49  
38201 Salzgitter

Tel.: +49 30 18333-0

Fax: +49 30 18333-1885

E-Mail: [ePost@bfs.de](mailto:ePost@bfs.de)

De-Mail: [epost@bfs.de-mail.de](mailto:epost@bfs.de-mail.de)

[www.bfs.de](http://www.bfs.de)

BfS-RESFOR-188/22

Bitte beziehen Sie sich beim Zitieren dieses Dokumentes immer auf folgende URN:

urn:nbn:de:0221-2022021531228

Salzgitter, Februar 2022

<b>1</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Einleitung.....</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Kurzcharakterisierung von FLEXPART.....</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>Durchführung des Projekts .....</b>	<b>5</b>
<b>4.1</b>	<b>AP1: Definition der benötigten Schnittstellen zwischen dem Entscheidungshilfesystem RODOS und dem atmosphärischen Ausbreitungsmodell FLEXPART .....</b>	<b>6</b>
<b>4.2</b>	<b>AP 2: Integration von FLEXPART in RODOS .....</b>	<b>7</b>
<b>4.2.1</b>	<b>AP 2.1: Implementierungen in FLEXPART</b>	<b>7</b>
<b>4.2.2</b>	<b>AP 2.2: Implementierungen in RODOS</b>	<b>8</b>
<b>4.2.3</b>	<b>AP 2.3: Installation von FLEXPART als „Stand-Alone“ Software</b>	<b>10</b>
<b>4.2.4</b>	<b>AP 2.4: Integration von FLEXPART in RODOS für den operativen Betrieb</b>	<b>11</b>
<b>4.3</b>	<b>AP 3: Qualitätssicherung und Nachweis der Anwendbarkeit des integrierten Ausbreitungsmodells .....</b>	<b>11</b>
<b>4.4</b>	<b>AP 4: Erstellung eines Handbuchs zur Nutzung des integrierten Modells sowie Erarbeitung von entsprechenden Schulungsunterlagen .....</b>	<b>12</b>
<b>4.5</b>	<b>AP 5: Durchführung einer Schulung der Mitarbeiter der RODOS-Zentrale beim BfS zur Anwendung des integrierten Modells .....</b>	<b>12</b>
<b>5</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>14</b>

# 1 Zusammenfassung

Im Rahmen des Vorhabens „Integration des atmosphärischen Ausbreitungsmodells FLEXPART in RODOS zur Erweiterung der Möglichkeiten der inversen Modellierung zur Quellort- und Quelltermbestimmung auf der Grundlage von Messdaten“ wurde das atmosphärische Transport- und Ausbreitungsmodell FLEXPART in das Entscheidungshilfesystem RODOS/JRODOS integriert. Die Arbeiten beinhalteten die Erstellung einer einheitlichen Datenbasis für FLEXPART, die Ankopplung an die meteorologischen Prognosedaten des Deutschen Wetterdienstes sowie die Entwicklung einer graphischen Benutzeroberfläche für FLEXPART als Teil des JRODOS Systems. Eine direkte Integration von FLEXPART war wegen der GNU Lizenz nicht möglich. Deshalb wurde eine Methode entwickelt, die es erlaubt, dass der Nutzer die Anwendung selbstständig integriert. Da FLEXPART nur Aktivitätskonzentrationen aber keine Dosen berechnet, wurden spezielle Module entwickelt, die Dosis-Information bereitstellen, wie alle anderen atmosphärische Transport- und Ausbreitungsmodelle in JRODOS auch. Weiterhin wurde FLEXPART mit dem Nahrungskettenmodul FDMT von JRODOS gekoppelt. Nach Absprache mit dem Auftraggeber wurde ein spezielles Modul zur Abschätzung der Auswirkung einer Nuklearexplosion integriert.

Ein Schwerpunkt der Arbeiten befasste sich mit Test und der Dokumentation der Änderungen in FLEXPART und JRODOS. Es wurden spezielle Tests entwickelt, um sicherzustellen, dass die gemachten Anpassungen in FLEXPART keine Auswirkung auf die Qualität der Ergebnisse haben. Es wurden Testprozeduren und Use Cases definiert, um die operationelle Funktionalität der integrierten FLEXPART Version zu verifizieren. Ein eintägiger Trainingskurs stelle dem Auftraggeber neuen Funktionalitäten vor. Insgesamt sieben technische Berichte wurden erstellt, die die durchgeführten Arbeiten ausführlich dokumentieren.

Zum Abschluss des Projekts ist FLEXPART so in JRODOS integriert, dass inverse Modellierungen, also Vorwärts- und Rückwärtsrechnungen zur Bestimmung von Quellorten, wie vom Auftraggeber gefordert, möglich sind.

## 2 Einleitung

Ziel des Vorhabens ist die Installation von FLEXPART 10.4 sowohl als „Stand-alone“ Programm beim Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) als auch seine Integration in JRODOS (RODOS in der Sprechweise des BfS). Beide Realisationen sollen sowohl die normale als auch die „inverse“ Nutzung von FLEXPART erlauben.

Aufgrund der sehr technischen Aufgabestellung wurde mit dem Auftraggeber vereinbart, dass dieser Endbericht hauptsächlich den Ablauf des Projekts beschreibt, die wissenschaftlich/technischen Ergebnisse aber in gesonderten Berichten zur Verfügung gestellt werden. Die folgenden eigenständigen Berichte wurden erstellt

- Beschreibung der graphischen Benutzeroberfläche in JRODOS für die Eingabe der Laufparameter für FLEXPART
- Beschreibung der Anpassung der Basisdaten für FLEXPART – die Landnutzungsdaten
- Beschreibung der Änderungen an den wichtigsten FLEXPART FORTRAN Routinen
- Beschreibung der durchgeführten Tests und Beschreibung bestimmter Use Cases zum Selbststudium
- Benutzerhandbuch für den JRODOS Operateur
- Dokumentation des Trainingskurses

Im Laufe des Projekts wurde mit dem Auftraggeber vereinbart, dass auch das für LASAT entwickelte Nuklear Modul in FLEXPART integriert werden soll. Deshalb wurde diese Aufgabe auch in AP2 durchgeführt und dokumentiert

- Dokumentation des Nuklear Modules

### 3 Kurzcharakterisierung von FLEXPART

Das Modell FLEXPART (FLEXible PARTicle) ist ein quelloffenes, multiskaliges Lagrangesches Partikelausbreitungsmodell (LPDM), das den Transport und die turbulente Vermischung von Gasen und Aerosolen in der Atmosphäre simulieren kann und dabei auch Verlustprozesse wie trockene und nasse Deposition, radioaktiven Zerfall und chemische Reaktionen erster Ordnung mit dem Hydroxylradikal berücksichtigt. FLEXPART kann auf eine mehr als zwanzigjährige Geschichte zurückblicken und wird von einem aktiven Netzwerk von Entwicklern ständig weiterentwickelt, die regelmäßig zusätzliche Komponenten und Verbesserungen einbringen. Derzeit sind alle Modellentwicklungen und -aktualisierungen sowie der Code unter <https://flexpart.eu/> (letzter Zugriff: 01. Juli 2021) verfügbar, und die beiden Hauptpapiere (Stohl *et al.* 2005) und das neuere (Pisso *et al.* 2019) sind als Leitfaden und Referenzmodell dokumente zu verwenden. Die aktuellste stabile Version, Version 10.4, wurde für die Integration in das JRODOS-System verwendet.

FLEXPART ist ein flexibles Modell, das Vorwärts- und Rückwärtssimulationen unter Ausnutzung der selbstadjunkten Natur von LPDMs ermöglicht. Im Vorwärtsmodus können die berechneten Partikel von einer oder mehreren Punkt-, Linien-, Flächen- oder Volumenquellen freigesetzt werden, die als Ausgabe die kombinierten oder getrennten (pro Quelle) Ergebnisse als durchschnittliche Konzentrationen oder Mischungsverhältnisse in einem regelmäßigen Breiten- und Längengradgitter mit den vertikalen Schichten mit konstantem Abstand (d. h. z. B. nicht druckbasiert) über dem Bodenniveau liefern. Im Rückwärtsmodus entspricht der Ort, an dem die Partikel freigesetzt werden, dem tatsächlichen Messort. Sowohl im Vorwärts- als auch im Rückwärtsmodus werden lineare oder linearisierte Verlustprozesse angewendet. Im Rückwärtsmodus ist die Ausgabe (siehe Einzelheiten zu allen potenziellen Einheiten in Tabelle 11 des Referenzpapiers *Pisso et al.* 2019) als die so genannte Quelle-Empfänger-Sensitivität (SRS) zu betrachten (Seibert & Frank, 2004; Wotawa *et al.* 2003), die sich auf die Verweilzeit der Partikel in den Ausgangsgitterzellen bezieht. Während FLEXPART über andere Betriebsarten verfügt (z. B. Domain-Filling), konzentriert sich dieses Dokument auf die Aspekte, die mit den JRODOS-Anwendungen zusammenhängen.

### 4 Durchführung des Projekts

Das Vorhaben wurde in fünf Arbeitspakete untergliedert

- AP 1: Definition der benötigten Schnittstellen zwischen dem Entscheidungshilfesystem RODOS und dem atmosphärischen Ausbreitungsmodell FLEXPART
- AP 2: Integration von FLEXPART in RODOS
  - AP 2.1: Implementierungen in FLEXPART
  - AP 2.2: Implementierungen in RODOS
  - AP 2.3: Installation von FLEXPART als „Stand-Alone“ Software
  - AP 2.4: Integration von FLEXPART in RODOS für den operativen Betrieb
- AP 3: Qualitätssicherung und Nachweis der Anwendbarkeit des integrierten Ausbreitungsmodells
- AP 4: Erstellung eines Handbuchs zur Nutzung des integrierten Modells sowie Erarbeitung von entsprechenden Schulungsunterlagen
- AP 5: Durchführung einer Schulung der Mitarbeiter der RODOS-Zentrale beim BfS zur Anwendung des integrierten Modells

Parallel zu den einzelnen Arbeitsschritten und der Installation von Zwischenversionen der angepassten Software, wurden Arbeitstreffen durchgeführt. Aufgrund der Corona Situation wurden alle Treffen on-line durchgeführt.

- Kick-off: Dienstag, 28. Januar 2020
- Treffen 2: Mittwoch, 03. Juni 2020
- Treffen 3: Donnerstag, 03. Dezember 2020
- Treffen 4: Dienstag, 16. März 2021
- Treffen 5: Dienstag, 15. Juni 2021

Alle Treffen wurden dokumentiert und die sowohl die Vorträge als auch die Protokolle an den Auftraggeber geschickt. Zwischen den 5 offiziellen Treffen wurden Testergebnisse ausgetauscht und auftretende Fragen geklärt. Dies wurde nicht formal dokumentiert.

Der Trainingskurs wurde am 27.07.2021 ebenfalls online durchgeführt. Insgesamt nahmen 10 Personen des Bundesamts für Strahlenschutz (BfS) daran teil.

Ein wichtiger Aspekt war die Optimierung des Programmcodes von FLEXPART und der Einleseroutinen der Wetterdateien. Diese wurden im Rahmen der vorhandenen Ressourcen durchgeführt. Tests im operationellen Betrieb werden zeigen, ob dort noch weiterer Handlungsbedarf besteht.

#### **4.1 AP1: Definition der benötigten Schnittstellen zwischen dem Entscheidungshilfesystem RODOS und dem atmosphärischen Ausbreitungsmodell FLEXPART**

In AP1 werden die Hintergrund- und Wetterdaten bereitgestellt. FLEXPART benötigt – anders als alle anderen JRODOS Ausbreitungsmodelle Information über die Topographie. Diese wird aus den jeweils verwendeten Wetter Prognosemodellen genommen. Folgerichtig wurde die Topographie aus den ICON Wetterdaten des DWD übernommen. Dazu mussten keine Änderungen vorgenommen werden.

Die Landnutzung des originalen FLEXPART liegt in einer Auflösung von etwa 0,25 Grad vor. In diesem Vorhaben wurde diese durch die Information aus den beiden Datensätzen CORINE (für Europa) und Copernicus Global Landservice (für die Welt) ausgetauscht. Die Konvertierung ist in (Raskob *et al.* 2021b) beschrieben. Das Gitter wurde auf 20 x 20 Kilometer festgelegt. Wenn der Auftraggeber noch detailliertere Auflösungen benötigt, werden diese nachgeliefert. Die Methodik der Originaldaten mit den prozentualen Anteilen der Landnutzung in einer Fläche wurde übernommen. Die Rauigkeiten werden aus den konvertierten Landnutzungsdaten in FLEXPART direkt ermittelt. Weitere Änderungen in der Methodik die FLEXPART benutzt wurden nicht implementiert.

Um die DWD Daten in FLEXPART nutzen zu können musste der Katalog der zu übergebenden Daten erweitert werden. Die vom DWD übermittelten Wetterdaten werden vom BfS prozessiert. Die notwendige Software wurde von KIT in Zusammenarbeit mit dem BfS erstellt und parallelisiert. Die notwendigen Anpassungen innerhalb von FLEXPART sind in (Raskob *et al.* 2021c) beschrieben.

Ziel des APs war ebenfalls, die notwendigen Schnittstellen zwischen JRODOS und FLEXPART zu definieren. Zu diesem Zweck hat der Auftragnehmer zwei interne Berichte erstellt, die an den Auftraggeber verschickt wurden. Der erste Bericht in Deutsch beschreibt die Eingabedaten, während der zweite Bericht in Englisch die Ergebnisse des Ausbreitungsmoduls LSMC und das Interface zu den nachfolgenden Modulen beschreibt. Beide Berichte bildeten die Basis für die Arbeiten in AP2. Der Bericht über die Eingabedaten von FLEXPART wurde dann genutzt um das Interface zwischen der JRODOS GUI von FLEXPART und den Parametern der FLEXPART Steuerdateien zu dokumentieren (Raskob *et al.* 2021a). Denn trotz graphischer Oberfläche wird FLEXPART – wie in der Standalone Version auch – mit den originären Steuerdateien gestartet.

Mit der Bereitstellung der Basisdaten und der beiden Berichte wurde AP1 abgeschlossen.

## 4.2 AP 2: Integration von FLEXPART in RODOS

Wurden in AP1 die Schnittstellen definiert, wurde in AP2 deren Umsetzung und Anpassung von FLEXPART für die Integration in JRODOS durchgeführt. Die geänderte Datenbasis (Landnutzung und ICON Wetterdaten) nutzen sowohl die neue Standalone als auch die in JRODOS integrierte Version, beide sind identisch (das gleiche Executable), nur ihre Ansteuerung ist unterschiedlich.

Die Arbeiten in AP2 betrafen Anpassungen und Installation der Standalone Version am BfS sowie die Integration von FLEXPART in JRODOS und deren Integration am BfS.

### 4.2.1 AP 2.1: Implementierungen in FLEXPART

In AP2.1 wurde die neue Landnutzung erstellt, die notwendigen Modifikationen in FLEXPART für die Nutzung der DWD-ICON Daten durchgeführt und die Optimierung der Rechenzeit begonnen.

FLEXPART benötigt 13 Landnutzungstypen denen eine bestimmte Rauigkeit ( $z_0$ ) zugeordnet wird. In Diskussion mit dem Auftraggeber wurden die Copernicus Global Landservice (CGLS) Daten mit 23 Landbedeckungstypen und einer Auflösung von 100m CGLS\_LC100 (Buchhorn *et al.* 2019) und die CORINE (Kosztra *et al.* 2019) Landnutzungsdaten für Europa mit 43 Landnutzungstypen genutzt. Die unterschiedlichen Klassifikationen der beiden Datensätze wurden auf die 13 Klassen der FLEXPART Implementation reduziert. Eine Beschreibung des Vorgehens ist in (Raskob *et al.* 2021b) zu finden. Die neue Landnutzungsdatei kann mit beiden Versionen von FLEXPART genutzt werden.

Um die DWD ICON Dateien in FLEXPART nutzen zu können, waren zwei Arbeitsschritte notwendig. Der erste Schritt beinhaltet eine Vor-Prozessierung der vom DWD gelieferten Dateien. Es wurde vereinbart, dass dieser Schritt außerhalb von FLEXPART und durch das BfS durchgeführt wird. Der Präprozessor entpackt die ICON Daten und de-akkumuliert die Niederschlagsinformation. Dieser Präprozessor wurde federführend von BfS zusammen mit dem Auftragnehmer entwickelt. Der Auftragnehmer hat parallel dazu eine Rechenzeitoptimierung entwickelt und implementiert. Trotz der Optimierung ist die Rechenzeit zum Einlesen der ICON Dateien lang. Hier besteht im Nachgang noch Handlungsbedarf.

Die Optimierung wurde als hybride Lösung mit OpenMP und MPI durchgeführt. Zu Beginn der Arbeiten, hat der Auftragnehmer eine OpenMP Optimierung implementiert. Der Hauptgrund war die optimierte Nutzung aller Dateien. Bei einer MPI Optimierung benötigt ein Prozess die Information über alle Daten, was sich auf etwa 9 GB summiert. Allerdings hat sich gezeigt, dass die Ergebnisse einer MPI Optimierung deutlich besser sind als mit OpenMP. Basierend auf einer FLEXPART Version, die schon für MPI vorbereitet war, hat der Auftraggeber eine Optimierung entwickelt, die den Code deutlich schneller also ohne Optimierung ausführt. Das Problem der Datennutzung wurde durch die Einführung von Shared Memory Zugriffen gelöst. Eine zusätzliche Optimierung kann durch eine spezielle Behandlung der einkommenden Wetterdaten erreicht werden. Erste Tests mit unkomprimierten ICON Dateien haben eine deutlich bessere Performance gezeigt. Somit könnte das BfS die Dateien nach Erhalt automatisch entpacken und die entpackten Daten – die allerdings einen deutlich größeren Speicherplatz belegen – dann für die Rechnung benutzen.

Zurzeit tritt beim BfS ein Problem bei der Nutzung von mehreren Prozessoren auf. Hier skaliert die Optimierung nicht linear, sondern die Rechenzeit wird teilweise sogar verlängert. Diese spezielle Hardware Konfiguration konnte beim Auftragnehmer nicht reproduziert werden. Trotzdem reicht die Optimierung aus, die wichtigsten Rechnungen im Rahmen der Reaktionszeit von 30 Minuten durchzuführen. Komplexe Rechnungen, wie die Bestimmung eines unbekanntes Quellorts, sind nicht an die 30 Minuten Grenze gebunden. Im Rahmen des existierenden Wartungsvertrages mit KIT, wird der Auftragnehmer die Optimierung weiter untersuchen.

Abschließend wurden die FLEXPART FORTRAN Routinen mit allen Änderungen kompiliert und in ein neues Executable überführt. Dieses ausführbare Programm ist in beiden, der Standalone und der integrierten FLEXPART Version identisch.

#### 4.2.2 AP 2.2: Implementationen in RODOS

In AP2.2 wurden alle Arbeiten durchgeführt um FLEXPART in JRODOS zu integrieren. Allerdings ist FLEXPART kein direkter Bestandteil des JRODOS Systems, da die Benutzungslizenz von FLEXPART das untersagt. Deshalb wird das FLEXPART in einer eigenständigen Installation ausgeliefert, die der Nutzer dann mit JRODOS verbindet.

AP2.2 wurde in mehrere Unterarbeitspakete untergliedert

- Entwicklung der graphischen Benutzeroberfläche
- Konvertierung der Benutzereingabe in die Start Dateien von FLEXPART
- Entwicklung von Rechenprogrammen, um fehlende Ergebnisse zu berechnen und anzuzeigen
- Entwicklung der Steuersoftware und eines ausführbaren Moduls von FLEXPART

FLEXPART kann sowohl im Vorwärts- als auch im Rückwärtsmodus gestartet werden. Bei einer Vorwärtsrechnung werden typischerweise Konzentrationen und Dosen wie bei anderen Ausbreitungsmodellen auch berechnet. Im Rückwärtsmodus wird dagegen eine sogenannte Source Receptor Matrix ausgegeben, die Wahrscheinlichkeiten über einen unbekanntem Freisetzungsort enthält. Basis einer Rückwärtsrechnung sind verfügbare Messungen. Wird der Messort als Startpunkt einer Rückwärtsrechnung benutzt, wird eine Source Receptor Matrix ausgegeben. Diese beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass eine Freisetzung von einem bestimmten Freisetzungsort stattgefunden haben könnte. Diese Information kann – unter Benutzung von weiteren Algorithmen genutzt werden, um mögliche Freisetzungsorte zu identifizieren. Es wurde mit dem Auftraggeber vereinbart, dass dies aber außerhalb von FLEXPART geschehen soll und vom Auftraggeber realisiert wird. Dahingehend wurde die Funktionalität von FLEXPART im Rückwärtsmodus auf die graphische Ausgabe dieser Matrix beschränkt. Die numerischen Inhalte der Matrix werden aber ebenfalls weggeschrieben und die Ergebnisse sind als zusätzlicher Eintrag im Ergebnisbaum abrufbar.

#### Graphische Benutzeroberfläche

Ziel der Arbeiten an der graphischen Benutzeroberfläche (GUI) für die Eingabe von Information durch den Benutzer war es, die GUI von FLEXPART ähnlich wie die der anderen Ausbreitungsmodelle von JRODOS zu gestalten. Ein fast gleiches „look and feel“ vereinfacht die Nutzung und verringert den Trainingsaufwand. Dies wurde realisiert, indem RODOS-Lite, die jetzige Benutzeroberfläche in JRODOS, als eigenständige GUI für FLEXPART angepasst wurde. Die fünf Haupteingabe Bereiche – Anlage, Quellterm, Wetter, Lauf und Zusammenfassung – wurden übernommen und mit den für FLEXPART spezifischen Anforderungen ausgestaltet. Die GUI ist in dem Benutzerhandbuch für FLEXPART (STAUDT & TRYBUSHNYI, 2021a) dokumentiert. Speziell für FLEXPART wurde die Funktionalitäten „Rückwärtsrechnung“ und „Nuklearexplosion“ in den Anlagen Tab aufgenommen.

#### Start Dateien von FLEXPART

FLEXPART liest seine Eingabedaten aus Datensätzen, die ASCII formatiert sind. Diese Methode sollte auch für die in JRODOS integrierte Version beibehalten werden. Deshalb mussten alle durch den Benutzer möglichen Eingaben in Inhalte der folgenden Dateien umgesetzt werden. Die Dateien, die mit einem „\*“ versehen sind wurden nicht modifiziert

- AGECLASSES\*                      Definitionen der Altersklassen
- COMMAND                            Wichtigste Steuerparameter
- OUTGRID                            Definition des Ausgabegitters
- OUTGRID\_NEST\*                    Ausgabegitter-Definition für ein verschachteltes Gitter
- RECEPTORS\*                    Positionen für bestimmte Ausgabepunkte

- RELEASES                      Angabe der Quellen (Vorwärtslauf) oder Rezeptoren (Rückwärtslauf)
- SPECIES                      Verzeichnis mit Dateien mit Definitionen physikalischer und chemischer Parameter der einzelnen Spezies, die in RELEASES definiert sind
- IGBP\_int1.dat                Landnutzung
- surfdata.t\*                  Rauigkeitslänge, Blattflächenindex für verschiedene Landnutzungen
- surfdepo.t\*                  Saisonale Oberflächenwiderstände für verschiedene Landnutzungen
- OH\_variables.bin\*          OH Feld

Details der Anpassungen sind in (Raskob *et al.* 2021a) beschrieben. Hier werden kurz die wichtigsten Ergebnisse diskutiert. Die Datei „COMMAND“ enthält die wichtigsten Steuergrößen und wird teilweise über die GUI und das JRODOS Betriebssystem gefüllt. Die Datei OUTGRID wird über Information aus dem GUI Tab „Lauf“ befüllt. Die Datei „RELEASES“ wird hauptsächlich über den Quellterm TAB befüllt. Die Datei „SPECIES“ charakterisiert jedes freigesetzte Nuklid. Alle 144 Nuklide von JRODOS wurden in die FLEXPART Spezies-Liste übertragen. Daraus resultierten 157 verschiedene SPECIES Dateien mit der Nummerierung von SPECIES\_001 bis SPECIES\_157. Die Landnutzungsdatei „IGBP\_int1.dat“ wurde mit den neuen Landnutzungsdaten gefüllt.

Um die Information aus der Eingabe dem JRODOS System bekannt zu machen, wurde ein Parser entwickelt, der die Information eins-zu-eins abbildet. Teile des Parsers sind auch in (Raskob *et al.* 2021a) dokumentiert. Der Parser ist der FLEXPART GUI nachgeschaltet und stellt ein eigenständiges Programm dar.

### **Entwicklung von Rechenprogrammen, um fehlende Ergebnisse zu berechnen und anzuzeigen**

FLEXPART berechnet nur Aktivitätskonzentrationen, keine Dosen oder Dosisraten. Deshalb mussten Ergebnisse, die wichtig für die Entscheidungsfindung sind, in JRODOS hinzugefügt werden. Dies beinhaltet die folgenden Ergebnisse und methodischen Ansätze

- Berechnung der Inhalationsdosis (Anpassung der Methodik der jetzigen JRODOS atmosphärischen Ausbreitungsmodelle) unter Nutzung der JRODOS Dosiskonversionsdatenbank und Atemrate
- Berechnung der Fahngammadosis (Anpassung der Methodik der jetzigen JRODOS atmosphärischen Ausbreitungsmodelle) unter Nutzung der JRODOS Dosiskonversionsdatenbank
- Berechnung der Bodengammadosis (Anpassung der Methodik der jetzigen JRODOS atmosphärischen Ausbreitungsmodelle) unter Nutzung der JRODOS Dosiskonversionsdatenbank
- Berechnung der Ortsdosisleistung (Anpassung der Methodik der jetzigen JRODOS atmosphärischen Ausbreitungsmodelle) unter Nutzung der JRODOS Dosiskonversionsdatenbank
- Berechnung der Fahnenankunftszeit (nachgeschaltetes Modul, dass aus Konzentrationen und Dosen die Fahnenankunftszeit berechnet)
- Berechnung der Zeit, zu der die Fahne das Gebiet verlässt (nachgeschaltetes Modul, dass aus Konzentrationen und Dosen das Verlassen des Gebietes berechnet)
- Darstellung des Niederschlags- und des bodennahen Windfelds
- Darstellung der Source Receptor Matrix bei Rückwärtsrechnungen
- Integration eines Nuklearexplosionen Moduls

Ziel dieser Arbeiten war die Nutzung der existierenden Datenbanken, wie z.B. die Dosisfaktoren Datenbank, und Methoden, die schon für andere Ausbreitungsmodelle in JRODOS genutzt wurden. Dies konnte für die oben aufgeführten Punkte realisiert werden. Allerdings mussten die neue und die alte Dosisfaktoren Datenbank implementiert werden. Der Grund war, dass FLEXPART keine Mutter-Tochter Beziehung berücksichtigt. Da die aktuelle Dosisfaktoren Datenbank dies beinhaltet, musste die vorherige für die Ausbreitung in der Atmosphäre angewendet werden. In der alten Dosisfaktoren Datenbank sind Mutter und Tochter Nuklid in einem Dosisfaktor zusammengeführt; in der aktuellen nicht. Sobald FLEXPART den Mutter-Tochter Zerfall für die wichtigsten Radionuklide beherrscht, kann dies wieder zurückgebaut werden. Die Implementierung des Mutter-Tochter Zerfalls war aber nicht Gegenstand des Forschungsauftrags.

Weiterhin musste ein Interface für den Datenaustausch mit dem Nahrungskettenmodell FDMT entwickelt und implementiert werden. Hier wurden ebenfalls die existierenden Ansätze für die Anbindung der in JRODOS integrierten Ausbreitungsmodelle an FDMT genutzt. Speziell wurden der atmosphärische Widerstand und das Wetter behandelt. Sowohl atmosphärischer Widerstand als auch Wetterinformation wird nicht von FLEXPART ausgegeben, sondern nur intern genutzt. Deshalb wurden spezielle Software entwickelt, die beide Informationen aus FLEXPART extrahiert und in das FDMT Interface integriert. Damit wurde die gewünschte Modellkette FLEXPART -DEPOM - FDMT wie gefordert implementiert.

Wird FLEXPART im Rückwärtsmodus gestartet, wird eine Source Receptor Matrix berechnet und visualisiert. Diese beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass eine Freisetzung von einem bestimmten Punkt stattgefunden hat. Werden mehrere Messorte eingegeben, wird für jeden eine solche Matrix visualisiert und zusätzlich eine Überlagerung aller Ergebnisse angezeigt. Hierbei wird für jeden Punkt abgefragt, ob die Source Receptor Matrix dort zu einem bestimmten Zeitpunkt einen Eintrag hinterlassen hat. Wenn ja wird diesem Gitterpunkt und diesem Zeitpunkt eine „1“ zugeordnet. Dies wird für alle Gitterpunkte, Zeitschritte und Matrizen durchgeführt. Das Ergebnis wird dann als Wahrscheinlichkeit visualisiert.

Im Laufe des Projekts wurde mit dem Auftraggeber diskutiert, dass das für LASAT entwickelte Module für Nuklearexplosionen besser in FLEXPART passt. FLEXPART beschreibt die gesamte Grenzschicht, während LASAT nur die unteren 1-2 Kilometer abdeckt. Nuklearexplosionen können aber bis zu 10-12 Kilometer hoch reichen. Die für LASAT entwickelte Methodik wurde in FLEXPART integriert. Die Arbeiten sind in (Schichtel, Raskob & Trybushnyi 2021) dokumentiert. Wie vom Auftraggeber gewünscht wurden auch spezielle Ergebnisdarstellungen der Dosisfelder nach 6 und 24 Stunden realisiert.

### **Entwicklung der Steuersoftware und eines ausführbaren Moduls von FLEXPART**

Analog zu den anderen Ausbreitungsmodulen in JRODOS wurde eine entsprechende Steuersoftware für FLEXPART entwickelt. Damit verhält sich FLEXPART wie jedes andere Ausbreitungsmodul. Es kann gestartet und gestoppt werden, Ergebnisse können angezeigt und Animationen gestartet werden. Weiterhin ist es möglich Modellketten z.B. mit FDMT zu bilden. Im Gegensatz zu den anderen Ausbreitungsmodellen wurde auf ein Interface mit EMERSIM, dem Modul für frühe Schutz- und Gegenmaßnahmen, verzichtet. Gründe dafür war die angedachte Nutzung von FLEXPART für großräumige Ausbreitungsrechnungen sowie in der inversen Modellierung. Bei beiden Anwendungsfällen ist eine Kopplung zu EMERSIM nicht notwendig.

#### **4.2.3 AP 2.3: Installation von FLEXPART als „Stand-Alone“ Software**

Im Lauf des Projekts wurden mehrere Prototypen bei dem Auftraggeber installiert. Diese Prototypen der Standalone Version wurden dazu genutzt, um den Status der Optimierung und die Operationalität der Basisdaten – Landnutzung und ICON Wetterdaten – zu testen. Kommentare und Testergebnisse des BfS flossen dann in den nächsten Prototyp ein. Eine finale Version wurde vor dem Trainingskurs bereitgestellt und nach Vorschrift beim BfS installiert.

#### 4.2.4 AP 2.4: Integration von FLEXPART in RODOS für den operativen Betrieb

Parallel zu der Standalone Version von FLEXPART – es wurde das gleiche Executable genutzt – wurden auch Prototypen der integrierten Version zum Testen bereitgestellt. Hier lag der Schwerpunkt ebenfalls auf der Rechenzeit aber auch auf den notwendigen Funktionalitäten. Insgesamt wurden drei Prototypen sowie weitere Testversionen zur Verfügung gestellt.

Da FLEXPART aufgrund der GNU Lizenz kein Bestandteil von JRODOS bei der Auslieferung sein darf, muss der Endnutzer das Modul selbständig in JRODOS integrieren. Hierzu wurde eine Anleitung entwickelt, die in (Staudt und Trybushnyi, 2021a) dokumentiert ist. Eine finale Version wurde vor dem Trainingskurs bereitgestellt und nach Vorschrift beim BfS installiert.

#### 4.3 AP 3: Qualitätssicherung und Nachweis der Anwendbarkeit des integrierten Ausbreitungsmodells

AP 3 dient zur Qualitätssicherung der entwickelten Software. Dazu wurden spezielle Tests entwickelt und mit den jeweiligen Prototypen und der finalen Version durchgeführt. Die Tests sind im Detail in (Staudt *et al.* 2021a) beschrieben. Die Tests kann man in drei Klassen unterteilen

- Test der wichtigsten Änderungen von FLEXPART wie die Nutzung der DWD-ICON Wetterdaten
- Funktionstests um sicherzustellen, dass die vom Benutzer eingegebenen Parameter richtig übergeben werden und die graphischen Ergebnisse den erwarteten Modellergebnissen entsprechen
- Dokumentation der vom BfS definierten Use Cases

Um die Nutzung der ICON Wetterdaten des DWD zu verifizieren, wurden sogenannte Durchmischungstests durchgeführt. FLEXPART bietet einen speziellen Modus an, der unter idealen Randbedingungen eine vollständige Durchmischung der freigesetzten Partikel simuliert. In ersten Tests wurde festgestellt, dass die Information der Vertikalgeschwindigkeit aus den ICON Dateien nicht richtig in FLEXPART übernommen wurde. Nach Rücksprache mit dem DWD wurde das Problem gelöst und die Tests in (Staudt *et al.* 2021a) zeigen eine befriedigende Performance im Vergleich zu den ECMWF Wetterdaten, die FLEXPART standardmäßig benutzt.

Um die Ergebnisse zu verbessern wurde die Turbulente Kinetische Energie (TKE) in die Turbulenzparametrisierung mit eingebunden. Allerdings waren diese Tests nicht in allen Punkten befriedigend. Deshalb wurde entschieden, die aktuelle Version für den operationellen Betrieb zu nutzen und die Integration der TKE zu einem späteren Zeitpunkt noch weiter zu untersuchen.

Funktionstests wurden durchgeführt, um zu verifizieren, dass die vom Benutzer eingegebenen Daten auch für die Rechnungen genutzt wurden. Dazu wurden einfache Szenarien entwickelt, die einzelne Parameter der Eingabegruppen Standort, Quellterm, Wetter und Lauf enthielten. Diese Tests wurden in der Test-Datenbank des Auftraggebers dokumentiert und sind in (Staudt *et al.* 2021a) beschrieben. Diese einfachen Szenarien dienten ebenfalls dazu die erwarteten Ergebnisse visuell zu verifizieren. Die dort erkannten Probleme wurden behoben und erneut getestet, bis der Test fehlerfrei durchlief. Ein Ergebnis der Tests war auch die Anpassung der Ausgabe für die bodennahe Schicht, die für die Ausgabe der Konzentrationen genutzt wird. Anfangs wurde nur die unterste Schicht von 0-10m genutzt. Nachdem aber Lücken auftraten, wurde nach Rücksprache mit den FLEXPART Modellentwicklern entschieden, alle Schichten bis 50m Höhe in einer Ausgabe zu bündeln. Aufgrund der guten Durchmischung bei größeren Entfernungen wird damit eine bessere Statistik erreicht und somit die Qualität der Ergebnisse erhöht.

Das BfS hat 6 Test Szenarien entwickelt, die auch in (Staudt *et al.* 2021a) dokumentiert sind

- Szenario 1: Unfall in einem deutschen Kernkraftwerk (reduzierter FKA)
- Szenario 2: Unfall in einem Kernkraftwerk im grenznahen Ausland (reduzierter FKA)

- Szenario 3: Unfall in einem Kernkraftwerk im übrigen Europa (reduzierter FKA)
- Szenario 4: Quelltermbestimmung bei bekanntem Freisetzungsort (mehrfache Vorwärtsrechnungen)
- Szenario 5: Quellortbestimmung (mehrfache Rückwärtsrechnungen)
- Szenario 6: Nuklearexplosion

Diese sechs Szenarien oder decken die Nutzung von FLEXPART durch das BfS ab und demonstrieren die Funktionalität des in JRODOS integrierten FLEXPARTs für die operationelle Nutzung in Deutschland.

#### **4.4 AP 4: Erstellung eines Handbuchs zur Nutzung des integrierten Modells sowie Erarbeitung von entsprechenden Schulungsunterlagen**

In AP4 wurde ein Handbuch für die Anwendung von FLEXPART in JRODOS erstellt. Es beinhaltet die Grundzüge der Installation von FLEXPART in das JRODOS System, alle Elemente der graphischen Benutzeroberfläche sowie all Eingabeparameter, die der Operateur ändern kann (Staudt *et al.*, 2021).

Wie in Kapitel 4.2.1 angeführt, wurden die Basisdaten für die Nutzung von FLEXPART beim BfS angepasst. Dies wurde ebenfalls dokumentiert (Raskob *et al.* 2021b).

Im Rahmen der oben beschriebenen Anpassungen von FLEXPART wurden die folgenden beiden Dokumente erstellt

- Beschreibung der Eingabeparameter (Raskob *et al.* 2021a)
- Änderungen innerhalb von FLEXPART (Raskob *et al.* 2021c)

Im Rahmen der durchgeführten Tests wurden die BfS Use Cases speziell dokumentiert, sodass sie auch als Selbsttrainingsmaterial genutzt werden können (Staudt *et al.* 2021a)

In AP4 wurden auch die Schulungsmaterialien erstellt, die dann in dem Trainingskurs – AP5 – durchgeführt wurden. Die Trainingsmaterialien wie Folien, Beispieleingaben und Ergebnisse, wurden im Nachgang an den Auftraggeber geschickt und sind weiterhin am KIT verfügbar.

#### **4.5 AP 5: Durchführung einer Schulung der Mitarbeiter der RODOS-Zentrale beim BfS zur Anwendung des integrierten Modells**

Der in AP4 geplante Trainingskurs wurde am 27.07.2021 durchgeführt (Raskob *et al.* 2021d). Zehn Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des BfS nahmen an dem Kurs teil. Die folgenden Themen wurden im Kurs behandelt

- Allgemeine Einführung in FLEXPART
- Training mit der Standalone Version von FLEXPART
- Einführung in die in JRODOS integrierte Version von FLEXPART
- Training mit der integrierten Version
- Freies Training der Teilnehmer\*innen
- Vergleich mit anderen in JRODOS integrierten Ausbreitungsmodelle
- Abschlussdiskussion

Das Feedback der Teilnehmer\*innen war durchweg positiv und alle Trainingsziele konnten erreicht werden. Mit Hilfe der erstellten Trainingsunterlagen, kann der Kurs jederzeit wieder durchgeführt werden – sollte es einen Bedarf dazu geben. Die Use Cases, die als Selbsttrainingsmaterial entwickelt wurden, können ebenfalls zum Training genutzt werden.



## 5 Literaturverzeichnis

- [1] M. Buchhorn, B Smets, L. Bertels, M. Lesiv, NE. Tsendbazar, L.Li (2019) PRODUCT USER MANUAL, Copernicus Global Land Operations, "Vegetation and Energy", "CGLOPS-1", Framework Service Contract N° 199494 (JRC), download from [https://land.copernicus.eu/global/sites/cgls.vito.be/files/products/CGLOPS1\\_PUM\\_LC100m-V2.0\\_I2.20.pdf](https://land.copernicus.eu/global/sites/cgls.vito.be/files/products/CGLOPS1_PUM_LC100m-V2.0_I2.20.pdf)
- [2] B. Kosztra, G. Büttner, G. Hazeu, S. Arnold (2019) Updated CLC illustrated nomenclature guidelines, Service Contract No 3436/R0-Copernicus/EEA.57441 Task 3, D3.1 – Part 1. Download from [https://land.copernicus.eu/user-corner/technical-library/corine-land-cover-nomenclature-guidelines/docs/pdf/CLC2018\\_Nomenclature\\_illustrated\\_guide\\_20190510.pdf](https://land.copernicus.eu/user-corner/technical-library/corine-land-cover-nomenclature-guidelines/docs/pdf/CLC2018_Nomenclature_illustrated_guide_20190510.pdf)
- [3] W. Raskob, C. Haller, S. Mickel, C. Staudt, D. Trybushnyi (2021a) Dokumentation der Eingabedaten über die JRODOS GUI
- [4] W. Raskob, C. Haller, C. Staudt, D. Trybushnyi, D. Arnold, J. Brioude (2021b) Beschreibung der Anpassung der Basisdaten für FLEXPART – die Landnutzungsdaten
- [5] W. Raskob, C. Haller, C. Staudt, D. Trybushnyi, D. Arnold, J. Brioude (2021c) Dokumentation der Änderungen in den FLEXPART FORTRAN Routinen
- [6] W. Raskob, C. Haller, C. Staudt, D. Trybushnyi, D. Arnold, J. Brioude (2021d) Dokumentation des durchgeführten Trainingskurses
- [7] T. Schichtel, W. Raskob, D. Trybushnyi (2021) Dokumentation des Nuklearmoduls
- [8] Seibert, P. and Frank, A.: Source-receptor matrix calculation with a Lagrangian particle dispersion model in backward mode, *Atmos. Chem. Phys.*, 4, 51–63, <https://doi.org/10.5194/acp-4-51-2004>, 2004
- [9] C. Staudt, C. Haller, W. Raskob, D. Trybushnyi, D. Arnold, J. Brioude (2021a) Test von FLEXPART
- [10] C. Staudt, D. Trybushnyi (2021b) Benutzerhandbuch für die graphische Oberfläche von FLEXPART in JRODOS
- [11] Stohl, A., Forster, C., Eckhardt, S., Spichtinger, N., Huntrieser, H., Heland, J., Schlager, H., Wilhelm, S., Arnold, F., and Cooper, O.: A backward modeling study of intercontinental pollution transport using aircraft measurements, *J. Geophys. Res.*, 108, 4370, <https://doi.org/10.1029/2002JD002862>, 2003
- [12] Stohl, A., Forster, C., Frank, A., Seibert, P., and Wotawa, G.: Technical note: The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2, *Atmos. Chem. Phys.*, 5, 2461–2474, <https://doi.org/10.5194/acp-5-2461-2005>, 2005.
- [13] Wotawa, G., DeGeer, L.-E., Denier, P., Kalinowski, M., Toivonen, H., D'Amours, R., Desiato, F., Issartel, J.-P., Langer, M., Seibert, P., Frank, A., Sloan, C., and Yamazawa, H.: Atmospheric transport modelling in support of CTBT verification – overview and basic concepts, *Atmos. Environ.*, 37, 2529–2537, 2003.