AeroCoV-Abschätzung des COVID-19-Infektionsrisikos in repräsentativen Patientenzimmern auf Basis einer Ausbreitungssimulation von SARS-CoV-2-Bio-Aerosolen mit dem GRS-Code COCOSYS

GRS - 632

Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

AeroCoV-Abschätzung des COVID-19-Infektionsrisikos in repräsentativen Patientenzimmern auf Basis einer Ausbreitungssimulation von SARS-CoV-2-Bio-Aerosolen mit dem GRS-Code COCOSYS

Carsten Köllein
Siegfried Arndt
Holger Nowack

Januar 2021

Anmerkung:

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

GRS - 632
ISBN 978-3-949088-21-6

Deskriptoren

Aerosol, COCOSYS, Expositionsszenario, Filterwirkung, Infektionsrisikoabschätzung, Maske, Patientenzimmer, SARS-CoV-2, Virus

Kurzfassung

Bei der gegenwärtigen COVID-19-Pandemie gelten virenhaltige, luftgetragene Aerosole als wichtiger Übertragungsweg, insbesondere in unzureichend belüfteten Räumen. Um das diesbezügliche Infektionsrisiko fundiert abschätzen und zielgenaue Handlungsempfehlungen ableiten zu können, müssen das Aerosolverhalten sowie repräsentative Umgebungsbedingungen detailliert und realitätsnah berücksichtigt werden.

Im Rahmen des Projektes AeroCov wurde untersucht, inwieweit das von der GRS für die Analyse von Stör- und Unfällen in Containments von Kernkraftwerken entwickelte und validierte Simulationsprogramm COCOSYS ohne weitere Anpassungen zur Ausbreitungsanalyse von SARS-CoV-2-Aerosolen verwendet werden kann. Mit COCOSYS können neben Transportprozessen (z. B. Diffusion, Absetzung und Aufwirbelung, Gasströmung) auch Zustandsänderungen (z. B. Wachstum durch Zusammenstoß, Verdampfung) und Rückhalteprozesse von Aerosolen, z. B. durch Filter, abgebildet und berechnet werden.

In einer umfangreichen Literaturstudie wurden zunächst die für eine konkrete Simulation notwendigen personenbezogenen Kenngrößen, wie Atemvolumen, Aktivitätsmuster der Person, Aerosolfreisetzung, -aufnahme und -ablagerung ermittelt sowie ein geeignetes Infektionsrisiko-Modell identifiziert (Wells-Riley-Modell).

Anschließend zeigte eine erste Verifizierungsrechnung, dass eine vereinfachte Abschätzung aus der Literatur zum zeitlichen Verlauf des Infektionsrisikos in einem Raum (Apothekenbeispiel) mit COCOSYS gut reproduziert werden kann. Den Berechnungen zufolge sinkt das Infektionsrisiko in dem Raum nach Verlassen der infizierten Person nur allmählich, insbesondere bei geringer Lüftung/Luftwechselrate. Der Abfall reduziert sich zusätzlich, wenn in COCOSYS die Verdampfung der Aerosolpartikel (und damit ein realistisches Sedimentationsverhalten) berücksichtigt wird.

Nachfolgend wurde mit COCOSYS in einem ersten umfassenden Anwendungsfall das potenzielle Infektionsrisiko in einem repräsentativen Zimmer einer Kranken- bzw. Pflegeeinrichtung berechnet. Dabei wurde eine im Zimmer lebende infizierte Person und typische Arbeitsabläufe einer (eintretenden) Pflegekraft unterstellt. Diese Simulation berücksichtigt außer den baulichen und lüftungstechnischen Gegebenheiten auch die zeitliche Änderung des Aerosol-Spektrums in Abhängigkeit von äußeren Randbedingungen, wie z. B. Luftwechselzahl, Lufttemperatur und -feuchtigkeit.

Die verwendete COCOSYS-Modellierung umfasst neben dem Patientenzimmer und zwei Umgebungszonen (äußere Atmosphäre bzw. angrenzender Flur) auch das Volumen des Rachens und der Lungen beider Personen.

Unter den getroffenen Annahmen zeigen die Simulationsergebnisse, dass das Infektionsrisiko für eine Pflegekraft beim Betreten des Zimmers nach der Nachtruhe im Bereich von etwa 30 % liegt, wenn infolge unzureichender Lüftung die Konzentration der Bio-Aerosole über die Nacht in der Raumluft ansteigt. Das Risiko verringert sich drei Stunden später auf 7,5 % (mit Alltagsmaske auf 5 %), insofern das das Fenster nach der Nachtruhe gekippt wird (Luftwechselrate 0,88 pro Stunde). Die anschließende vollständige Öffnung des Fensters lässt das Infektionsrisiko nach kurzer Zeit auf einen Wert von ca. 1 % absinken (ohne Maske). Anders als bei einer FFP2-Maske ist die Wirksamkeit der simulierten Alltagsmaske begrenzt, da die Filterwirkung für Aerosole über alle relevanten Aerosolgrößenklassen unzureichend ist.

Da COCOSYS keinen zeitlichen Zerfall von Viren berücksichtigt, wurde dieser Vorgang in der Apothekenrechnung durch eine zusätzliche Luftwechselrate dargestellt. Ohne diese Korrektur wird das berechnete Infektionsrisiko in der aktuellen COCOSYS-Version tendenziell überschätzt. Weitere Untersuchungen zeigten, dass sich auch geringe Luftwechselraten und insbesondere Strömungsverbindungen („Durchlüften“) deutlich auf die Ergebnisse auswirken.

Insgesamt legen die Ergebnisse des AeroCoV-Vorhabens nahe, dass mit COCOSYS plausible potenzielle Infektionsrisiken durch virenhaltige, luftgetragene Aerosole ermittelt werden können. Insbesondere kann das Zusammenwirken mehrerer Faktoren wie die Atmungsaktivität, Speicherung virenhaltiger Aerosole in der Raumluft, räumliche Randbedingungen, veränderliche Temperatur und Luftfeuchte, der Einfluss von Luftwechsel und Filtersystemen (Masken) detailliert und über eine hinreichende Zeitdauer untersucht werden. Damit unterscheidet sich der COCOSYS-Ansatz deutlich von vereinfachten analytischen Ansätzen sowie CFD-Berechnungen, auf deren Basis kaum wissenschaftlich begründete Handlungsempfehlungen abgeleitet werden können.

Aufbauend auf dem AeroCoV-Vorhaben können in nachfolgenden Arbeiten Szenarien mit mehreren Räumen und komplexeren Interaktionen zwischen Personen (einschließlich verschiedener Aktivitäten) untersucht werden. Insbesondere an Orten mit wohldefinierten/getakteten Abläufen (Schulen, Kindertagesstätten, ÖPNV, Einzelhandel, industrielle Produktionsstätten etc.) erscheint eine Abschätzung des Infektionsrisikos und die

Ableitung konkreter Handlungsempfehlungen anhand von COCOSYS-Simulationen als möglich und sinnvoll. In Vorbereitung dieser komplexeren Anwendungen muss zunächst in COCOSYS die Zerfallszeit von Viren in der Luft berücksichtigt und Annahmen bzgl. der Speichelzusammensetzung und der zeitlichen Partikelgrößenänderungen überprüft werden.

Für die Untersuchung der Ausbreitungspfade von Bio-Aerosolen in der Raumluft besteht keine Restriktion in Bezug auf den betrachteten Virus-Typ. Der hier gewählte Ansatz offeriert somit die Möglichkeit, die gewonnenen Erkenntnisse auch auf bevorstehende Ausbreitungsverläufe von pathogenen Bio-Aerosolen bzw. Mutationen des SARS-Cov-2-Virus zu übertragen und Handlungsabläufe und Hygienemaßnahmen für die Zukunft zu optimieren.

Abstract

In the current COVID-19 pandemic, airborne aerosols containing viruses are considered to be an important transmission route, especially in inadequately ventilated rooms. In order to assess the risk of infection and to derive specific recommendations for actions, the aerosol behavior and representative environmental conditions must be considered in detail and realistically.

Within the scope of the AeroCoV project, it was investigated to what extent the COCOSYS simulation program can be used for the dispersion analysis of SARS-CoV-2 aerosols without further adaptations. COCOSYS has been developed and validated by the GRS for the analysis of incidents and accidents in containments of nuclear power plants. It can be used to model and calculate not only transport processes (e.g., diffusion, settling and swirling) but also changes of state (e.g., growth by collision, evaporation) and retention processes of aerosols, e.g., by filters.

In an extensive literature study, the personal parameters necessary for a specific simulation, such as breathing volume, activity pattern of the person, aerosol release, absorption and deposition, were first determined and a suitable infection risk model was identified (Wells-Riley model).

Subsequently, a first verifying calculation showed that COCOSYS can adequately reproduce a simplified estimate from the literature on the time course of the infection risk in a room (pharmacy example). According to the calculations, the risk of infection in the room only decreases gradually after the infected person leaves, especially if the ventilation/air exchange rate is low. The decrease is further reduced if the evaporation of the aerosol particles (and thus a realistic sedimentation behavior) is also considered in COCOSYS.

Afterwards, COCOSYS was applied in a first comprehensive use case to calculate the potential risk of infection in a representative room of a hospital or care facility. In this use case an infected person living in the room and the typical work processes of an (incoming) nurse were assumed. In addition to the structural and ventilation conditions, this simulation also takes into account the temporal change of the aerosol spectrum as a function of external boundary conditions, such as air temperature and humidity.

The used COCOSYS model includes the patient room and two surrounding zones (outer atmosphere and adjacent corridor, respectively) as well as the volume of the pharynx and the lungs of both persons.

Based on the assumptions made, the simulation results show that the risk of infection for a nurse entering the room after a night's rest is in the range of about 30 % due to an increase of the concentration of bio-aerosols in the room air overnight as a result of insufficient ventilation. The risk decreases to 7.5 % three hours later (5 % with everyday mask) if the window is tilted after the night's rest (air exchange rate 0.88 per hour). The subsequent complete opening of the window allows the risk of infection to drop to a value of approx. 1 % after a short time (without mask). In contrast to an FFP2 mask, the effectiveness of the simulated everyday mask is limited since the filtering effect is insufficient for aerosols below 100 nm.

Since COCOSYS does not consider a temporal decay of viruses, this process was represented by an additional air exchange rate. Without this correction, the calculated risk of infection tends to be overestimated in the current COCOSYS version. Further investigations showed that even low air exchange rates (leakage) and especially flow connections ("airing through") have a significant effect on the results.

Overall, the results of the AeroCoV project suggest that COCOSYS can be used to determine plausible potential infection risks from airborne aerosols containing viruses. In particular, the interaction of several factors such as respiratory activity, storage of virus-containing aerosols in indoor air, spatial boundary conditions, variable temperature and humidity, the influence of air changes and filter systems (masks) can be investigated in detail and over a significant period of time. This clearly distinguishes the COCOSYS approach from simplified analytical approaches as well as CFD calculations, which can hardly be used as a basis for scientifically justified recommendations.

Further studies can investigate scenarios with multiple spaces and more complex interactions between people (including different activities), by further developing the AeroCoV project.

An estimation of the risk of infection and the derivation of concrete recommendations for action based on COCOSYS simulations especially in places with well-defined/timed processes (schools, day-care centers, public transport, retail, industrial production sites, etc.), seems possible and useful. In preparation for these more complex applications, the

decay time of viruses in the air must first be taken into account in COCOSYS, and assumptions regarding saliva composition and changes in particle size over time must be verified.

For the investigation of the dispersion pathways of bio-aerosols in indoor air, there is no restriction with respect to the type of virus considered. The approach chosen here thus offers the possibility of transferring the gained knowledge to upcoming propagation paths of pathogenic bio-aerosols or mutations of the SARS-Cov-2 virus and optimizing action procedures and hygiene measures for the future.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung und Zielsetzung 1

2 Das GRS-Rechenprogramm COCOSYS 5

2.1 Charakterisierung von COCOSYS 5

2.2 Grundsätzliche Anwendbarkeit von COCOSYS zur Simulation von virenhaltigen Bio-Aerosolen 7

3 Grundlegende physikalische Eigenschaften von Aerosolen 9

3.1 Aerosol-Charakterisierung 9

3.2 Aerosol-Dynamik 10

4 Ermittlung der Virus-spezifischen und physiologischen Randbedingung 19

4.1 Corona-Virus SARS-CoV-2 19

4.1.1 Infektionsort 22

4.1.2 Phasen und Verlauf der Erkrankung 23

4.2 Atmung 25

4.2.1 Abschätzung des Atemvolumens und Sauerstoffverbrauch 25

4.2.2 Abschätzung des Wasserverlustes bei Atmung 25

4.2.3 Abschätzung der Körperoberfläche für Ablagerungsprozesse 27

4.3 Freisetzung und Aufnahme von Bio-Aerosolen 27

4.3.1 Mechanismen der Partikelbildung in der Atemluft 27

4.3.2 Größenverteilung der ausgeatmeten Partikel 28

4.3.3 Lipidhülle und der Einfluss der relativen Feuchtigkeit auf die Überlebensfähigkeit von Viren 29

4.3.4 Zerfall und Ablagerung auf Oberflächen 34

5 Infektionsrisiko-Modell ... 37
5.1 Abschätzung der Quantenemissionsrate ... 37
5.2 Das Infektionsrisiko Modell ... 46
5.2.1 Grenzwertbetrachtung ... 47
5.2.2 Vereinfachende Annahmen ... 48
5.2.3 Infektionsrisiko $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{T})$ ... 48

6 COCOSYS-Verifizierungsrechnung anhand eines Apotheken-Szenarios ... 51
6.1 Anfangsdaten und Übertragung nach COCOSYS ... 54
6.2 Reproduktion der Ergebnisse ... 57
6.2.1 Simulation ohne COCOSYS-Strukturen ... 57
6.2.2 Simulation mit COCOSYS-Strukturen ... 60
6.2.3 Vergleich des Partikelspektrums ... 64
6.3 Diskussion der Verifikationsrechnung ... 67

7 COCOSYS-Simulationen für ein repräsentatives Patientenzimmer ... 69
7.1 Luftwechsel durch Fenster ... 69
7.2 Bestimmung der Umgebungswerte ... 75
7.3 Beschreibung des COCOSYS-Datensatzes ... 78
7.4 Aerosoldaten ... 83
7.4.1 Modell einer Alltagsmaske ... 85
7.5 Ausgangsszenario ... 87
7.5.1 Ergebnisse ... 89
7.6 Parameterstudie ... 96
7.6.1 Einfluss der Luftfeuchte bei vorhandenen Salzen im Speichel ... 98
7.7 Diskussion der COCOSYS-Simulationen ... 100

8 Ableitung zukünftiger Arbeiten 103

9 Zusammenfassung 105

Literaturverzeichnis 109

Abbildungsverzeichnis 123

Tabellenverzeichnis 127

A Anhänge 129

A.1 Atmung 129

A.2 Partikelgrößen bei Atmung, Husten, Niesen und Sprechen 132

A.3 Die Partikelaggregation und die Schleimeigenschaften 134

A.4 Abschätzung der Anzahl an RNA-Kopien (Virionen) in sphärischen Aerosolen 137

A.5 Log-Normalfunktion 140

A.6 Größenverhältnisse respiratorischer Pathogenen 142

A.7 Luftgetragene respiratorische Pathogene 144

A.8 Übersicht Partikel-Durchmesserbereich 146

A.9 Gewöhnlicher Tages- und Arbeitsablauf in einer Pflegeeinrichtung 148

1 Einleitung und Zielsetzung

COVID-19 ist eine neu auftretende virale Atemwegserkrankung, die erstmals im Dezember 2019 in Wuhan, China, identifiziert wurde. Die Krankheit wird durch das Coronavirus SARS-CoV-2 verursacht, das mit den Viren verwandt ist, die SARS und MERS verursachen. Obwohl die Fallsterblichkeitsrate bei COVID-19 weit niedriger ist als bei SARS und MERS, kommt es aufgrund der sich derzeit relativ unkontrolliert und pandemieartig über den Globus ausbreitenden COVID-19-Erkrankungen zu einer hohen Anzahl von Todesfällen /SCR 20/. Weltweit sind ca. 2,2 Millionen Menschen an und mit COVID-19 verstorben; mehr als 100 Millionen Menschen wurden nachweislich mit dem neuen Coronavirus infiziert (Stand: Ende Januar 2021) /WHO 21/.

Bei der gegenwärtigen COVID-19-Pandemie gelten die Aerosol- und Tröpfcheninfektion als Hauptübertragungswege, wobei der Übergang beider Formen fließend ist /ZHA 20/. Tröpfchen sinken in Abhängigkeit von ihrer Größe und Masse zu Boden. Je kleiner die Tröpfchen, desto länger verbleiben sie in der Luft und können sich in der Umgebung ausbreiten und Infektionen verursachen. Weiter gibt es Hinweise darauf, dass nur ein geringer Anteil (< 10 %) der weltweit gemeldeten SARS-CoV-2-Infektionen im Freien auftreten /BUL 20/. Daher ist die Untersuchung von virenhaltigen Aerosolen in der Raumluft von Gebäuden und die Abschätzung des Infektionsrisikos von besonderem Interesse. Insbesondere ist ein genaueres Verständnis des Ausbreitungsverhaltens der Aerosole bei typischen Innenraum-Szenarien notwendig, um Handlungs- und Schutzempfehlungen ableiten zu können, die dem Infektionsrisiko angemessen sind.

Gegenwärtige Untersuchungen zur Aerosolausbreitung basieren in der Regel auf vereinfachten, d. h. parametrisierten Berechnungsansätzen, in denen die physikalischen Vorgänge (z. B. Diffusion, thermische Effekte, verändertes Schwebeverhalten durch Partikelverkleinerung) nicht im Detail abgebildet werden. Dies gilt insbesondere für Apps und Online-Rechner, bei denen aus einer Reihe von Eingabedaten (z. B. Raumgröße, Anzahl der Personen, Dauer der Begegnung, Aktivität, Verwendung von Masken) ein Infektionsrisiko ermittelt wird. Auch die vom RKI herausgegebene Corona-Warn-App /BUN 20/ berechnet das Infektionsrisiko auf Basis von pauschalen Kriterien (hinreichend nahe und andauernde Begegnung mit einer infizierten Person bzw. Bluetooth-Kontakt zwischen den Smartphones).

Dass virenhaltige Aerosole für eine gewisse Zeit in der Luft verbleiben und somit Übertragungen auch ohne direkte Begegnung stattfinden können, wird bei den erwähnten

Ansätzen nicht oder nur auf vereinfachte Weise berücksichtigt. In wissenschaftlich fundierten Analysen müssen neben der Luftbewegung (Luftzug, Konvektion) auch die zeitlich veränderlichen Eigenschaften des Aerosolgrößenspektrums simuliert werden.

Als Deutschlands zentrale Fachorganisation auf dem Gebiet der nuklearen Sicherheit und Entsorgung befasst sich die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH u. a. mit der Entwicklung von Methoden und Analysewerkzeugen zur Sicherheitsbewertung. Eines dieser Werkzeuge ist das in der GRS entwickelte und validierte Programmsystem AC², dessen System-Code COCOSYS (Containment Code System) für die umfangreiche Simulation von Stör- und Unfallabläufen in Containments von Leichtwasserreaktoren verwendet wird. In diesen Simulationen wird insbesondere auch das Aerosolverhalten detailliert berücksichtigt, da es sich wesentlich auf Stör- und Unfallszenarien und die Freisetzung radioaktiver Stoffe aus dem Containment bzw. dem Reaktorgebäude (sogenannte Quellterm-Analysen) auswirkt. Dabei beinhaltet das simulierte Aerosolverhalten neben Transportprozessen (z. B. Diffusion, Absetzung und Aufwirbelung) auch Zustandsänderungen (z. B. Wachstum durch Zusammenstoß, Verdampfung) und Rückhalteprozesse z. B. durch Filter.

Die GRS ist mit Ausbruch der COVID-19-Pandemie der Frage nachgegangen, inwiefern COCOSYS ohne weitere Programmanpassungen zur Ausbreitungsanalyse von virenhaltigen Aerosolen eingesetzt und zu einer Abschätzung des Infektionsrisikos in einem repräsentativen Innenraum-Szenario beitragen kann.

Zunächst wurden die für eine solche Analyse notwendigen Eingangsgrößen und Modellannahmen in einer umfangreichen Literaturstudie identifiziert und bestimmt. Dabei wurden neben Aerosol-spezifischen Eigenschaften (siehe Kapitel 3) insbesondere auch medizinisch-virologische Daten und Zusammenhänge erfasst (siehe Kapitel 4). Weiterhin wurde ein Infektionsrisiko-Modell (siehe Kapitel 5) identifiziert, mit dem das Infektionsrisiko aus einer gegebenen Aerosolkonzentration berechnet werden kann (Wells-Riley-Modell).

Anschließend erfolgte eine erste COCOSYS-Verifizierungsrechnung anhand von Daten eines italienisch-australischen Forscherteams, das das Infektionsrisiko in einer Apotheke analytisch abgeschätzt hat (siehe Kapitel 6). In den betrachteten Szenarien wird jeweils das Infektionsrisiko untersucht, das mit dem Betreten der Apotheke verbunden ist, nachdem eine infizierte Person die Apotheke bereits verlassen hat.

Da Infektionen in Kranken- und Pflegeeinrichtungen aufgrund der vulnerablen Personengruppen von besonderer Bedeutung sind, wurde mit COCOSYS in einem ersten umfassenden Anwendungsfall ein repräsentatives Patientenzimmer in einer Kranken- und Pflegeeinrichtung näher untersucht (siehe Kapitel 7). Bei dieser Simulation wurde angenommen, dass die im Patientenzimmer lebende Person mit dem Virus infiziert ist und eine zweite Person (Pflegekraft) dieses Zimmer betritt.

In der COCOSYS-Modellierung wurden insgesamt sieben Modellzonen unterschieden. Diese umfassen neben dem Patientenzimmer und zwei Umgebungszonen (Atmosphäre bzw. angrenzender Flur) jeweils zwei Modellzonen für beide Personen (Rachen und Lunge). Beim Aerosolverhalten wurden neben Absetzungs-, Diffusions-, Kondensations- und Verdampfungsvorgängen auch der Einfluss des Salzgehalts in den freigesetzten Aerosolen berücksichtigt. Die räumlichen Gegebenheiten des Zimmers, Lüftungs- und Umgebungsbedingungen (Außentemperatur, Windlast) und das Verhalten beider Personen gemäß eines typischen Tagesverlaufs in einer solchen Einrichtung sind ebenfalls in die Simulation eingeflossen.

Abschließend wurde auch die Wirksamkeit verschiedener Maßnahmen zur Infektionsvermeidung (z. B. Lüftung, Atemschutzmasken) sowie der Einfluss zentraler Eingabe- und Modellparamater im Rahmen einer Parameterstudie untersucht.

2 Das GRS-Rechenprogramm COCOSYS

2.1 Charakterisierung von COCOSYS

Die GRS entwickelt und validiert Rechenprogramme, mit denen der Betrieb, der anomale Betrieb sowie Stör- und Unfallabläufe in kerntechnischen Anlagen simuliert werden können. In begrenztem Umfang sind diese Programme ebenfalls für Anwendungen im nichtnuklearen Bereich (z. B. für die Auslegung von Sonnenkollektoranlagen, den Transport von Gas durch Pipelines bzw. die Radonverteilung an Arbeitsplätzen) zum Einsatz gekommen. Eines dieser in der GRS entwickelten Programme ist das Codesystem AC² /LER 19/, /WAN 20b/, dessen Bestandteil COCOSYS für die detaillierte Analyse von Phänomenen und Prozessen im Sicherheitsbehälter (Containment) einer kerntechnischen Anlage angewendet wird /ARN 20b/.

Grundsätzlich erfordert die Anwendung des Programms COCOSYS die Erstellung eines Modells (sprich die Unterteilung des zu simulierenden Bereiches in nulldimensionale Zonen oder sogenannte Kontrollvolumen). Der Zustand in einer Zone wird durch gemittelte Zustandsgrößen beschrieben („lumped parameter“-Ansatz). Somit bestimmt die Anzahl und Größe der Rechenzonen auch die räumliche Auflösung der Ergebnisse. Im Gebäude vorhandene Wände, Böden, Decken und Einbauten lassen sich durch entsprechende Strukturobjekte abbilden.

In COCOSYS-Simulationen wird insbesondere auch das Aerosolverhalten berücksichtigt, da es sich wesentlich auf die Freisetzung radioaktiver Stoffe aus dem Containment bzw. dem Reaktorgebäude (den sogenannten Quelltermen) auswirkt. Der Transport luftgetragener Aerosole zwischen den Zonen erfolgt in COCOSYS über zu definierende Atmosphärenverbindungen. Diese simulieren die Strömungen aufgrund von Druckunterschieden zwischen den Zonen oder die sich bei temperaturbedingten Dichteunterschieden ausbildenden freien Konvektionen. Eine andere Transportmöglichkeit für die Aerosole ist die Zwangskonvektion durch Lüftungssysteme. Ferner wird in COCOSYS das Aerosolwachstum in der Atmosphäre (durch Zusammenstöße und Dampfkondensation) oder das Schrumpfen durch Verdampfung von Wasser von den Aerosolpartikeln als auch Aerosolablagerungsprozesse auf Oberflächen sowie in Filtern berücksichtigt. COCOSYS kann somit für Abschätzungen über die Anreicherung von kritischen Aerosolkonzentrationen innerhalb einer Zone, bei gleichzeitig geringem Rechenzeitbedarf angewendet werden.

Weiterführende Information zu COCOSYS sind unter https://www.grs.de/content/cocosys zu finden (u. a. eine Programm-Kurzbeschreibung).

COCOSYS wurde anhand von Versuchsdaten aus repräsentativen kerntechnischen Experimenten in unterschiedlichen Skalierungen umfangreich validiert. Dies ist die Voraussetzung für die Anwendbarkeit von COCOSYS zur Beantwortung sicherheitstechnisch relevanter Fragestellungen. Ein Überblick über den Validierungsstatus von COCOSYS gibt der Regressionstest-Bericht /ARN 20a/ bzw. das Assessment Manual /KLH 13/.

Das klassische Aerosolexperiment ist der VANAM-M3-Versuch am Battelle Modell-Containment, der Gegenstand des Internationalen Standardproblems ISP-37 war, an dem die GRS im Rahmen der Code-Validierung erfolgreich teilnahm /FIR 96/. Weiterhin zu nennen ist das FPT1-Experiment an der PHEBUS Integralversuchsanlage in Cadarache (ISP-46). Die GRS-Rechnungen sind in /ALL 07/ dokumentiert. Von besonderem Interesse bzgl. der Simulation von Bio-Aerosolen sind die Versuche an der KAEVER-Anlage bei Battelle, Deutschland (u. a. ISP-44). In einer 1-Raum-Geometrie wurde dort auch der Einfluss der Luftfeuchte auf die Kondensation und Verdampfung verschiedener Aerosole und letztendlich deren Ablagerung untersucht /FIR 02/.

Die ursprünglichen Validierungsrechnungen werden im Rahmen der Regressionstest-Prozedur von COCOSYS für jede neu freigegebene Version wiederholt, so dass die Gültigkeit dieser Validierung ständig besteht /ARN 20a/.

Für die vorliegenden Arbeiten wird das neu strukturierte Modul NewAFP verwendet, das sich im Vergleich zum ursprünglichen AFP durch eine Harmonisierung der Modelle für Aerosole, Iod-Chemie und Isotope auszeichnet. Daneben ist eine Vereinheitlichung von Geometriedaten mit dem Thermohydraulikmodul THY erzielt worden. Eine erste Version von NewAFP soll mit dem nächsten AC²-2021-Release freigegeben werden, wobei dieses Modul bereits von externen Partnern angewendet wird.

Durch die noch laufende Entwicklung von NewAFP ist die Validierung aktuell nicht so weit fortgeschritten wie für das ursprüngliche AFP. Mit Bezug zu Aerosolexperimenten haben Rechnungen zu PHEBUS FPT1 /REI 19/, Experimente zum Aerosolabwaschen (AW-3, AW-4) /FRE 19/ als auch zur Silberaerosol-Wechselwirkung mit gasförmigem Iod (Iod-26, AW-3) /KLH 17/ in der THAI-Anlage bei Becker Technologies, Eschborn, die korrekte Anwendbarkeit der Aerosolmodelle gezeigt, inklusive der notwendigen Modelle zur Ablagerung und Verdampfung von Wassertröpfchen.

2.2 Grundsätzliche Anwendbarkeit von COCOSYS zur Simulation von virenhaltigen Bio-Aerosolen

COCOSYS empfiehlt sich für die Abbildung der Transportprozesse von Bio-Aerosolen, da aus seiner breiten Anwendung für Containments von Kernkraftwerken Modelle vorliegen, die auch für die Bio-Aerosolausbreitung in Gebäuden, wie z. B. Kranken- und Pflegeinrichtungen übertragbar sind. Dies sind Modelle für

- Konvektionsströmungen durch Verbindungen (Türen, Fenster) und Zwangskonvektion durch technische Systeme (Lüftungssysteme) mit entsprechenden Steuermöglichkeiten,
- Gas- und Temperaturschichtungen,
- dem Wärmetransport an und innerhalb von Strukturen sowie von Wärmequellen (Heizung),
- Aerosolverhalten wie Ablagerung auf Oberflächen, Agglomeration, Volumenkondensation und Verdunstung von wasserhaltigen Aerosolen mit entsprechender Änderung des Größenspektrums,
- Aerosolrückhaltung durch Filter (z. B. Masken) und
- orts- und zeitabhängige Einspeisung und Aufnahme von Bio-Aerosolen durch beteiligte Personen.

Von spezieller Relevanz für die Simulation von SARS-CoV-2 Bio-Aerosolen ist die Berücksichtigung der Verdampfungsprozesse wasserhaltiger Aerosoltropfen, wodurch sich das Partikelspektrum im zeitlichen Verlauf in Richtung kleinerer Durchmesser verschiebt. Diese Verdampfungsprozesse können von COCOSYS simuliert werden. Ablagerungsvorgänge von eingeatmeten Aerosolen in der Lunge von Personen werden durch Risikofunktion nach Abschnitt 5.2 beschrieben.

Die Anwendung von COCOSYS zur Simulation von Aerosolbelastungen in verschiedenen Räumen erscheint möglich, insbesondere wenn Zwangslüftungen mit gut definierten Randbedingungen vorliegen. Dies umfasst auch Aussagen zur Auslegung von Lüftungsanlagen. Ohne Zwangslüftung bilden sich in geschlossenen Räumen nur geringe Konvektionsströmungen aus, die von Druckunterschieden im Pascal-Bereich, durch äußere Windlasten oder Heizungen in den jeweiligen Räumen bestimmt werden. Für die 3D-Auflösung der Aerosolausbreitung innerhalb von Räumen inklusive der Verfolgung von

Flugbahnen und Partikelgeschwindigkeiten sind CFD-Programme (Computational Fluid Dynamics) erforderlich.

Die ausgeatmeten Tröpfchen liegen gemessen an der Massenkonzentration in einem um Größenordnungen niedrigeren Bereich als in den Containment-Anwendungen von COCOSYS. Trotzdem hat sich der Code auch in diesem Bereich als stabil herausgestellt. Anders sieht es aus bei der Simulation der Bio-Aerosolkomponente, deren Massenkonzentration nochmal mehrere Größenordnungen geringer ist als die der Speicheltröpfchen. Das hier betrachtete SARS-CoV-2-Virus hat eine Masse von etwa $10^{-18}\,[kg]$ (siehe Abschnitt 6.1), was die untere Grenze für in COCOSYS abbildbarer Aerosolmassen ist. Da bereits einige Dutzend Virionen eine Infektion hervorrufen können, liegt die zu betrachtende Bio-Aerosolmasse auch in dieser Größenordnung. Daher wird die simulierte Viruskomponente als Tracer- oder Indikatorgröße berechnet, die anzeigt, wie sich einzelne Virionen in den Räumen verteilen.

Für die Anwendung des neu strukturierten Moduls NewAFP zur Ausbreitungssimulation von SARS-CoV-2-Viren liegt noch keine spezifische Validierung für Bio-Aerosole vor, da die hierfür notwendigen und abdeckenden Messdaten z. Z. noch nicht hinreichend verfügbar sind. Die Literaturrecherche hat allerdings bereits verwertbare Informationen erbracht, die in die COCOSYS-Simulationen eingeflossen sind. Damit war bereits eine erste Verifizierung von COCOSYS möglich (siehe Kapitel 6).

Unabhängig davon wird weiterhin nach relevanten Versuchen und Messdaten zur Größenverteilung, zu Aerosolkonzentrationsverläufen in Räumen, zu Aerosolquellstärken von infizierten Personen und zur Ablagerung von Aerosolen in der Lunge recherchiert. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass COCOSYS und im Besonderen die Aerosolmodelle des neuen Hauptmoduls NewAFP für die Simulation von SARS-CoV-2-Viren grundsätzlich geeignet sind.

3 Grundlegende physikalische Eigenschaften von Aerosolen

Die in diesem und nachfolgenden Kapitel dargestellten Informationen sind das wesentliche Ergebnis aus der Literaturstudie zum Umfeld von SARS-CoV-2. Sie bilden die Grundlage, um für die in Kapitel 6 durchgeführten COCOSYS-Simulationen die erforderlichen Randbedingungen bereitstellen zu können. Weiterführende Hintergrundinformationen, die bei der Erarbeitung der Randbedingungen nur partiell Verwendung fanden, sind im Anhang A.1 zusammengetragen und stellen für fortführende Untersuchungen eine notwendige Ergänzung dar.

In den folgenden Abschnitten werden die grundlegenden, physikalischen Eigenschaften von Aerosolen kurz beschrieben. Diese haben einen wesentlichen Einfluss auf deren Dynamik (Sinkgeschwindigkeit, Kondensation und Verdampfung, Deposition auf Oberflächen, Koagulation, relative Luftfeuchtigkeit) und bestimmen damit die Überlebens- und Halbwertzeit der SARS-CoV-2-haltigen Bio-Aerosole in der Raumluft /MOR 06/. Die Bedeutung der relativen Luftfeuchtigkeit und Lufttemperatur auf die lipidhaltige Hülle des SARS-CoV-2-Virus wird im Abschnitt 4.3 gesondert diskutiert.

3.1 Aerosol-Charakterisierung

Aerosole sind definiert als Suspensionen von flüssigen oder festen Partikeln in einem Gas. Der Begriff Partikel oder partikulärer Stoff wird entweder für feste oder flüssige Partikel im Aerosol verwendet. Wenn das Aerosolpartikel flüssig ist, wird auch der Begriff Tropfen oder Tröpfchen verwendet. Aerosole können sowohl natürlichen als auch künstlichen Ursprungs sein. Hier relevant sind die Bio-Aerosole, das sind Aerosole biologischen Ursprungs, wie Viren, Bakterien, Sporen, Pollen und Pilze /HOL 11/. Für einen Größenvergleich von Bio-Aerosolen ist eine Darstellung der Partikelgrößenbereiche im Anhang A.8 gegeben. Bei der Ausbreitung von Viren und Bakterien sind diese oftmals in dem Speichel infizierter Personen enthalten und können in freigesetzten Aerosoltröpfchen transportiert werden.

Im medizinischen Bereich wird zwischen Tröpfchen- und Aerosolübertragung unterschieden. Eine scharfe Abgrenzung gibt es auf der aerosolphysikalischen Seite aber nicht. Bei der Tröpfcheninfektion werden freigesetzte Speicheltröpfchen in einem direkten Luftstrom beim Atmen oder Sprechen auf eine andere Person übertragen. Diese Tröpfchen können im Vergleich zu luftgetragenen Aerosolpartikeln groß sein und sedimentieren daher schnell in der nahen Umgebung der infizierten Person aus. Aus solchen

Überlegungen resultieren Abstandsregeln, die zur Vermeidung von Infektionen eingehalten werden sollten. Bei der Aerosolinfektion werden hingegen kleinere Partikel betrachtet, die nach dem Ausscheiden lange luftgetragen bleiben und sich in der Raumluft verteilen. Solche Partikel können auch nach längerer Zeit und bei größerem Abstand noch infektiös wirken, wenn sie durch eine andere Person eingeatmet werden.

Das Verhalten von Aerosolen wird weitgehend durch deren Partikelgröße charakterisiert, die von etwa $0.001\ [\mu m]$ bis über $100\ [\mu m]$ im Durchmesser reicht. Aerosolpartikel werden normalerweise nach Anzahl oder Massen-, Volumen oder Oberflächenkonzentration gemessen. Bei kugelförmigen Partikeln mit bekannter Dichte ist es einfach, zwischen Masse-, Anzahl-, Volumen- und Oberflächenkonzentrationen umzurechnen. Die meisten Aerosole sind polydispers, d. h. sie enthalten Partikel unterschiedlicher Größe, so dass für ihre Charakterisierung eine Log-Normalverteilung verwendet wird (siehe Anhang A.5).

3.2 Aerosol-Dynamik

Sinkgeschwindigkeit: Wenn ein Partikel in die Luft freigesetzt wird, erreicht es schnell seine endgültige Sinkgeschwindigkeit, V_{TS}. Hier ist die Widerstandskraft, die von der Luft auf das sich bewegende Teilchen ausgeübt wird, gleich der entgegengesetzten Schwerkraft. Die finale Sinkgeschwindigkeit für ein kugelförmiges Teilchen in ruhender Luft und bei einer Reynolds-Zahl (Re) < 0,1 kann dann mit Hilfe des Stokes'schen Gesetzes in Gleichung 3.1 beschrieben werden /HIN 82/,

$$V_{TS} = \frac{\rho_p \, d_p^2 \, g \, C_C}{18 \, \eta} \qquad 3.1$$

wobei η die absolute Luftviskosität, g die Schwerkraft, ρ_p die Partikelmaterialdichte, d_p der Partikeldurchmesser und C_C der entsprechende Gleitreibungs-Korrekturfaktor nach Cunningham ist. Der Gleitreibungs-Korrekturfaktor C_C nach Cunningham wird verwendet, um Nicht-Kontinuums-Effekte bei der Berechnung des Luftwiderstands kleiner Partikel zu berücksichtigen, und sollte für Partikel < 1 $[\mu m]$ angewendet werden /HIN 82/, /HOL 11/.

Die Relaxationszeit, τ_p, ist die Zeit, die ein in ruhender Luft freigesetztes Partikel benötigt, um seine finale Sinkgeschwindigkeit zu erreichen. Wenn die einzige äußere Kraft,

die auf das Teilchen wirkt, die Schwerkraft ist, ist τ_p als das Verhältnis der finalen Sinkgeschwindigkeit zur Erdbeschleunigung definiert.

$$\tau_p = \frac{V_{TS}}{g} \qquad 3.2$$

Kondensation und Verdampfung: Aerosole sind Zweiphasensysteme, die sowohl Partikel (fest oder flüssig) als auch das Gas, in dem die Partikel suspendiert sind, enthalten. Die wichtigsten Stoffaustauschprozesse zwischen der Gasphase und der Partikelphase sind Kondensation und Verdampfung. Während der Kondensation wird ein Partikel größer, da es mehr Flüssigkeit ansammelt. Wenn Flüssigkeit von einem Partikel verdampft, wird es schrumpfen. Kondensation und Verdampfung beeinflussen nur die Eigenschaften der einzelnen Partikel, wie Masse oder Größe. Solange das Partikel nicht vollständig durch Verdampfung entfernt oder in eine Größe überführt wird, die nicht in die Betrachtung einbezogen wird, ändert sich die Anzahl der Partikel nicht. **Partikelwachstum durch Kondensation** erfordert normalerweise einen übersättigten Dampf. Die Supersaturierung kann durch Abkühlung eines Dampfes erzeugt werden und ist abhängig vom tatsächlichen Partialdruck[1] P und Sättigungsdampfdruck[2] P_S. Wenn der Partialdruck eines Dampfes gleich seinem Sättigungsdampfdruck ist, befindet sich das System im Gleichgewicht. Das bedeutet, dass die Verdampfungsrate von der Oberfläche gleich der Kondensationsrate an der Oberfläche ist. Das Sättigungsverhältnis S_R ist definiert als das Verhältnis zwischen P und P_S, d. h. $S_R = P/P_S$. Dies bedeutet, dass der Dampf bei $S_R < 1$ ungesättigt und bei $S_R > 1$ übersättigt ist. Bei $S_R = 1$ ist der Dampf gesättigt. Das für das Gleichgewicht in einem reinen Flüssigkeitstropfen erforderliche Sättigungsverhältnis ist durch die Kelvin-Gleichung 3.3 gegeben, wobei σ, M und ρ die Oberflächenspannung, das Molekulargewicht und die Dichte der Flüssigkeit sind und d_k der Tropfendurchmesser, der bei dem gegebenen Sättigungsverhältnis, d. h. dem Kelvin-Durchmesser, weder wächst noch verdampft. T ist die Temperatur des Systems und R die Gaskonstante.

$$S_R = \frac{P}{P_S} = \exp\left(\frac{4\,\sigma\,M}{\rho\,R\,T\,d_k}\right) \qquad 3.3$$

[1] Der Partialdruck P entspricht dem Teildruck einer Gas- oder Dampfkomponente in einem Gasgemisch.

[2] P_S ist eine Eigenschaft eines festen oder flüssigen Materials, die den Druck beschreibt, der erforderlich ist, um einen Dampf bei einer bestimmten Temperatur im Gleichgewicht mit dem kondensierten Dampf zu halten.

Für jeden Tropfendurchmesser gibt es ein Sättigungsverhältnis, bei dem sich der Tropfen im Gleichgewicht befindet. Wenn das Verhältnis zu klein ist, verdampft der Tropfen. Ist das Verhältnis zu groß, wächst der Tropfen.

Wenn die betrachtete Flüssigkeitsoberfläche wie bei Tropfen gekrümmt ist, ist der zur Aufrechterhaltung des Gleichgewichts erforderliche Partialdruck größer als bei einer ebenen Oberfläche. Folglich ist es für Moleküle leichter, von einer Tropfenoberfläche zu verdampfen, als von einer ebenen Oberfläche. Dies wird als **Kelvin-Effekt** bezeichnet und ist für Partikel mit einem Durchmesser von weniger als 0,1 [μm] von Bedeutung /HOL 11/.

Eine Implikation des Kelvin-Effekts ist, dass kleine Partikel der reinen Flüssigkeit bei der Sättigung (S_R = 1) instabil sind und verdampfen. Zur Aufrechterhaltung des Gleichgewichts ist eine übersättigte Umgebung erforderlich.

Die Abb. 3.1 zeigt Veränderungen des Reinwassertropfendurchmessers als Folge der Verdunstung, die für drei verschiedene Ausgangstropfengrößen (1, 10 und 100 [μm]) und für verschiedene Bedingungen der relativen Luftfeuchtigkeit anhand des Stokes'schen Gesetzes berechnet wurden. Es ist zu erkennen, dass Tropfen mit Größen in der Größenordnung von 1 [μm] innerhalb weniger Millisekunden verdampfen, selbst unter den Bedingungen hoher relativer Luftfeuchtigkeit (RH). Tropfen in der Größenordnung von 10 [μm] existieren bis zu einigen Zehntelsekunden, während sehr große Tropfen mit einem Durchmesser von 100 [μm] bis zu einer Minute überleben. Aus Tab. 3.1 und Abb. 3.1 ist ersichtlich, dass sich kleinere Tropfen sehr langsam absetzen und daher vor dem Absetzen verdampfen, während größere Tropfen sich schnell absetzen und in dieser Zeit nur geringfügig verdampfen. Im Allgemeinen verdampfen unter atmosphärischen Standardbedingungen Tropfen, die kleiner als 100 [μm] sind, bevor sie den Boden erreichen. Der verdampfte Tropfenrückstand würde jedoch über längere Zeiträume in der Luft in Resuspension bleiben. Die Bildung von Tropfenrückständen, ihre Größe und Zusammensetzung hängen von der Zusammensetzung der ursprünglichen Tropfen ab. Dies wird in Abb. 3.1 veranschaulicht, in der die Veränderung der Größe der Tropfen einer Kochsalzlösung von 0,86 % (NaCl - ähnlich der Lösung im menschlichen Speichel) dargestellt ist /MOR 06/.

Tab. 3.1 Tropfenfallzeit als Funktion der Größe /MOR 06/

Tropfendurchmesser $[\mu m]$	Fallzeit [s] aus Höhe 1 [m]
1000	0.3
100	3
10	300
1	30.000

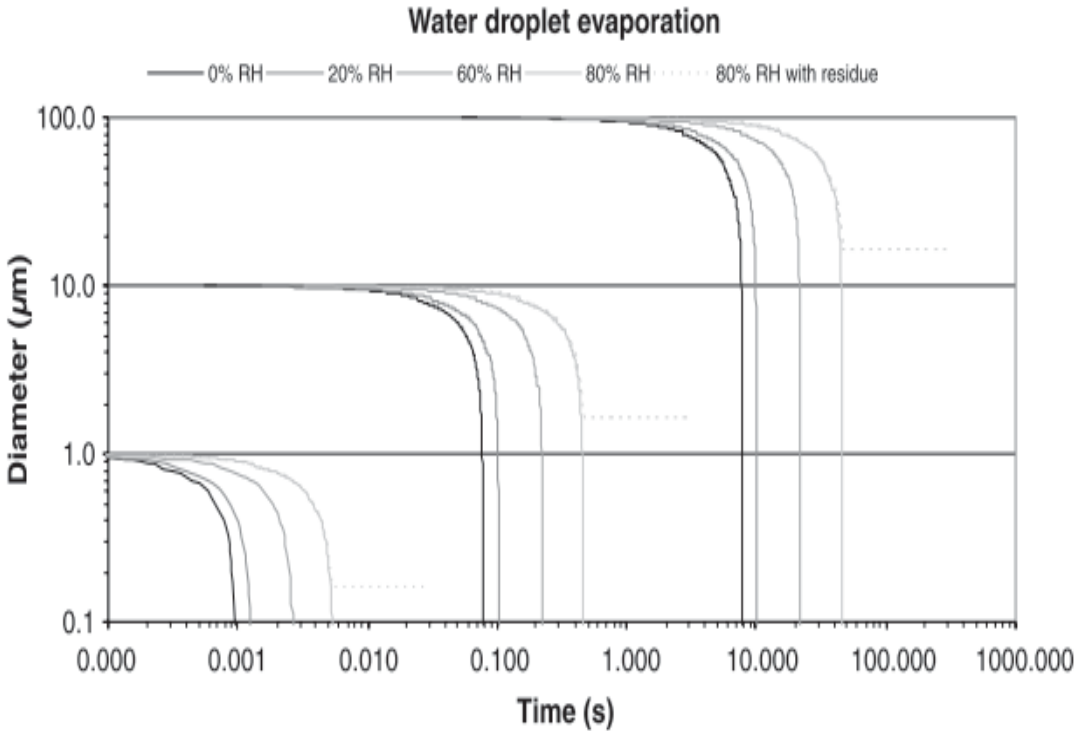


Abb. 3.1 Änderungen des Wassertropfendurchmessers als Folge der Verdunstung

Änderungen des Reinwassertropfendurchmessers als Folge der Verdunstung, berechnet für drei verschiedene Ausgangstropfengrößen (1, 10 und 100 $[\mu m]$) und für verschiedene Bedingungen der relativen Luftfeuchtigkeit (RH). Die gebrochenen Kurven zeigen die Größe der trockenen Tropfenkerne für Tropfen, die eine 0,86 %ige NaCl-Lösungen enthielten /MOR 06/

Tenside[3] und Schleim

Virustropfen entstehen in den Atemwegen durch Oberflächenscherung und Filmbruch (vgl. Abschnitt 4.3.1) /BAK 19/. Die Tropfen enthalten demzufolge Tenside und Schleim aus den Atemwegen (siehe Tab. 3.2). Sowohl Tenside als auch Schleim aus den Atemwegen können den Austrocknungsprozess der Tropfen beeinflussen und sich somit auch auf die Aerosol-Dynamik auswirken. Einerseits kann sich somit die Lebensdauer der Viren durch die beim Husten freigesetzten Tenside verlängern. Andererseits wurde beobachtet, dass die Tenside, die an der Luft-Flüssigkeits-Grenzfläche der Atemflüssigkeitstropfen angereichert sind, die Verdunstung je nach relativer Luftfeuchtigkeit um den Faktor $2 - 10$ verlangsamen und daher die Aufenthaltsdauer der Tropfen in der Luft beeinflussen /XIE 07/. Schleim hat darüber hinaus eine besondere Bedeutung für die Virulenz, da die Proteine und Tenside im Schleim die Viren im Inneren eines Tropfens schützen und ihre Lebensfähigkeit verlängern können, auch nachdem das Wasser größtenteils verdunstet ist (vgl. Anhang A.3) /MIK 04/, /VEJ 18/, /VUO 20/.

Tab. 3.2 Hauptbestandteile von Schleimarten /NIC 05/

Spezies	Molares Gewicht [g]	Konzentration [mol/m³]
$\boldsymbol{Na^+}$	23	91 ± 8
$\boldsymbol{K^+}$	39.1	60 ± 11
$\boldsymbol{Cl^-}$	35.5	102 ± 17
Laktat	89	44 ± 17
Glyzerin	(keine Angabe)	76 ± 18

Deposition: Die Ablagerung von Aerosolpartikeln auf Oberflächen erfolgt hauptsächlich durch Sedimentation, Diffusion, Impaktion oder durch Abscheidung (Interzeption). Diese Prozesse sind in Abb. 3.2 dargestellt[4].

[3] Die wesentliche Eigenschaft dieser Moleküle ist durch die Tendenz zur Segregation an der Wasser-Luft-Grenzfläche und der daraus resultierenden Erniedrigung der Oberflächenspannung (lat. tensus: gespannt) im Vergleich zum reinen Wasser gekennzeichnet /TUC 20/.

[4] Weitere Ablagerungsmechanismen sind elektrostatische Anziehung, Thermophorese, Diffusiophorese und Photophorese, auf die hier jedoch nicht eingegangen wird.

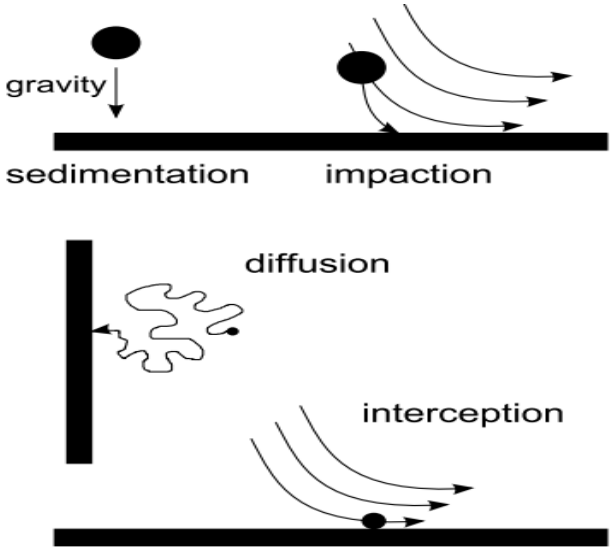


Abb. 3.2 Partikel Depositionsmechanismus /HOL 11/

Sedimentation bedeutet, dass ein Aerosolpartikel aufgrund der Schwerkraft herabfällt. Sie ist der vorherrschende Ablagerungsmechanismus für Partikel mit einem Durchmesser von mehr als etwa 0,5 $[\mu m]$.

Eine Darstellung der Verdampfungs- bzw. Sedimentationszeit von Wassertropfen in Abhängigkeit von der jeweiligen Tropfengrößen und der relativen Feuchtigkeit (RH) ist durch Abb. 3.3 gegeben. Die dimensionslose Größe St bezeichnet hierbei die Stokes-Zahl, die ein Maß für Massenträgheit eines Partikels in einem Fluid beschreibt. Im Fall einer stagnierenden Umgebungsluft $St \ll 1$ folgen die Partikel den Gasströmungslinien vollständig /HIN 82/.

Für die von Vuorinen et al. /VUO 20/ untersuchten Aerosole mit einem Anfangsdurchmesser d von $1\ [\mu] \leq d \leq 200\ [\mu m]$ wurde angenommen, dass diese frei in ruhender Luft innerhalb der kinematischen Zeitskala τ_p aus einer Höhe h = 1,625 $[m]$ gemäß der Bewegungsgleichung unter Schwerkraft fallen. Dies deutet darauf hin, dass sich z. B. Feststoffpartikel ($\rho = 1000\ [kg/m^3]$) mit einer Größe von 10 $[\mu m]$ in etwa acht Minuten auf dem Boden absetzen würden, während die entsprechende Zeit für 20 µm-Aerosol-Partikel etwa zwei Minuten betragen würde.

Daher ist die Aerosol-Tropfengröße wesentlich für die Unterscheidung zwischen einem **luftgetragenen Aerosol**, das in der Luft schweben und eingeatmet werden kann, und einem fallenden**, ballistischen Aerosol**, das innerhalb von Sekunden auf den Boden oder auf Oberflächen trifft. Durch turbulente Strömungen ist ein Transport der Aerosolpartikel nach oben möglich, wodurch diese über einen längeren Zeitraum luftgetragen bleiben können. Verglichen wurde bei dieser Simulation (i) reines Wasser mit (ii) Wasser mit 3 w-% nichtflüchtiger Substanz mit einer durchschnittlichen Molmasse von $50\ [g/mol]$. Das Modell berücksichtigt die zeitliche Variation der Aerosoltemperatur zusammen mit der dynamischen Variation des Aerosolradius aufgrund der Verdunstung (RH ≤ 100 %) oder der Absorption von Feuchtigkeit im Falle hoher relativer Feuchtigkeit in Gegenwart nicht flüchtiger Stoffe.

Bei Fokussierung auf typische Innenraumbedingungen RH ≤ 50 % zeigt Abb. 3.3, dass die Verdampfungszeit für Wassertropfen (Aerosole) der Größe d_k < 80 $[\mu m]$ unterhalb ihrer Sedimentationszeit liegt. Daher verschwinden sie, bevor sie den Boden erreichen, während die größeren Aerosole d_k ≤ 80 $[\mu m]$ den Boden erreichen, bevor die Verdunstung abgeschlossen ist, jeweils unter der Voraussetzung, dass die Umgebungsströmung stagniert.

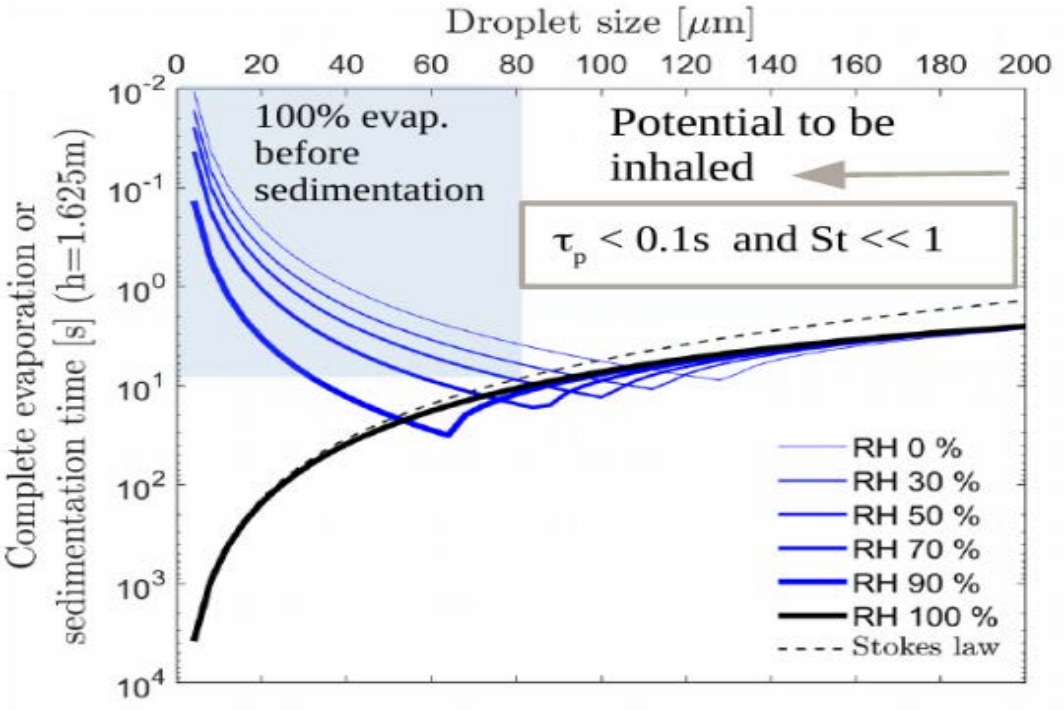


Abb. 3.3 1D-Simulationen an verdampfenden Tropfen unter der Annahme stagnierender Umgebungsluft. a) Verdampfungszeit, d. h. Wells-Kurve, für Wasser /VUO 20/, /XIE 07/

Die Abb. 3.4 zeigt, dass bei nicht flüchtigem Inhalt alle Aerosole unter 50 [μm] mindestens drei Minuten lang in der Luft verbleiben. Die endgültige Gleichgewichtsfeuchte in den erzeugten Aerosolen hängt somit von der relativen Feuchte (RH) ab. Dies kann einen Einfluss auf die Lebensfähigkeit der Krankheitserreger in verdampfenden Aerosolen mit nichtflüchtigem Gehalt haben (vgl. Abschnitt 4.3.3).

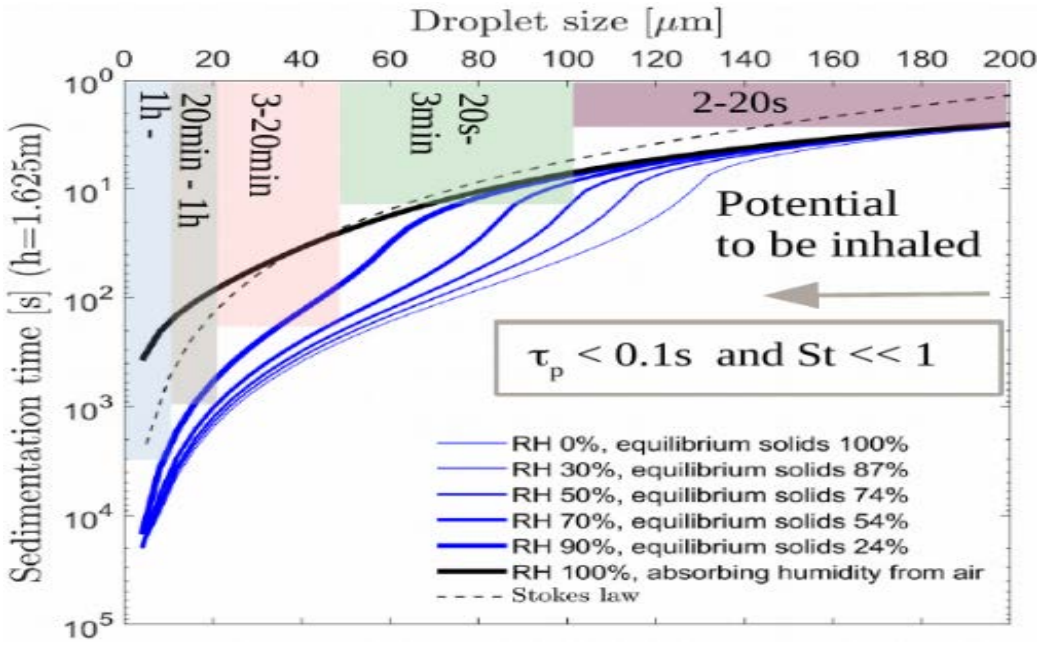


Abb. 3.4 Sedimentationszeit von Wassertropfen mit nicht flüchtigem Inhalt

Die schattierten Bereiche geben den Sedimentationszeitbereich an. Alle Tropfen im betrachteten Bereich von unter 200 [μm] verbleiben in der Luft und können somit eingeatmet werden können Dies gilt insbesondere für Tropfen unter 100 [μm] /VUO 20/.

Die **Diffusion** ist ein primärer Transportmechanismus für Partikel kleiner als 0,1 [μm]. Sie ist das Ergebnis einer zufälligen Bewegung von Partikeln, wenn sie mit Gasmolekülen kollidieren, d. h. der Brownschen Bewegung folgen. Gasmoleküle, die eine Brownsche Bewegung erfahren, prallen normalerweise ab, wenn sie auf eine Oberfläche treffen, aber Aerosolpartikel haften daran und werden abgelagert.

Ein Aufprall erfolgt, wenn ein Hindernis in einen Partikelstrom eingeführt wird. Das Hindernis stört den Gasstrom und zwingt ihn zu einer Richtungsänderung. Kleine Partikel sind in der Lage, der neuen Strömungsrichtung zu folgen, während große Partikel aufgrund ihrer größeren Trägheit nicht in der Lage sind, ihre Richtung zu ändern und somit auf dem Hindernis auftreffen. Das Abfangen findet statt, wenn Partikel, die ursprünglich den Stromlinien einer Luftströmung folgen, sich innerhalb eines Partikelradius von der Oberfläche eines Hindernisses befinden, das in die Strömung eingebracht wurde. Der Rand des Partikels kollidiert mit dem Hindernis und schlägt aufgrund seiner endlichen Größe auf.

Agglomeration tritt auf, wenn Partikel miteinander kollidieren und aneinanderhaften und dabei neue und größere Partikel bilden. Folglich wird die Gesamtzahl der Partikel reduziert, während die Masse erhalten bleibt.

Die **thermische Agglomeration** beschreibt den Prozess, bei dem die relative Bewegung zwischen den Partikeln auf die Brownsche Bewegung zurückzuführen ist. In ihrer zufälligen Bewegung können die Partikel in Abhängigkeit von der Anzahlkonzentration der Partikel zahlreiche Kollisionen miteinander erfahren. Dieser Prozess ist spontan und für Aerosole allgegenwärtig. Die **kinematische Agglomeration** wird durch andere externe Kräfte als die Brownsche Diffusion angetrieben, beispielsweise durch die Schwerkraft. Hier setzen sich Partikel unterschiedlicher Größe mit unterschiedlicher Geschwindigkeit ab, wodurch eine Relativbewegung zwischen ihnen entsteht. Dies führt zu Kollision und Koagulation /HOL 11/.

4 Ermittlung der Virus-spezifischen und physiologischen Randbedingung

In den nachfolgenden Abschnitten sind wesentliche Eigenschaften, die zur Modellierung von SARS-CoV-2 Bio-Aerosolen in COCOSYS benötigt werden, zusammengetragen. Es wird u. a. auf die primären Infektionsorte und Phasen der Erkrankung eingegangen, um ein Bild vom zeitlichen Verlauf der Erkrankung, der korrelierten Virus-Reproduktion, der krankheitsbedingten Atemfrequenzänderung und der phasenabhängigen Zusammensetzung der Bio-Aerosoltropfen zeichnen zu können. Ein weiterer Schwerpunkt liegt auf der Beschreibung der menschlichen Atmung und der hiermit in Verbindung stehenden Flüssigkeitsverluste als ein wesentliches Element der Bio-Aerosol-Partikelbildung und -freisetzung. Zusätzlich werden spezifische Eigenschaften, wie z. B. die Lipidhülle des SARS-CoV-2 diskutiert, die einen Einfluss auf die virale Halbwertzeit, d. h. den Zerfall der freigesetzten Bio-Aerosole haben. Ergänzend ist im Anhang A.3 eine Beschreibung zur Partikelaggregation und zu Schleimeigenschaften enthalten, die einen Hinweis auf das mögliche Verhalten und die Konzentration von SARS-CoV-2-Virion im untersuchten Bio-Aerosol gibt.

4.1 Corona-Virus SARS-CoV-2

Allgemein sind Viren interzelluläre, obligate Parasiten unterschiedlicher Form und Struktur mit genetischem Material (DNA oder RNA), die aus einem Proteinmantel oder einer Hülle zum Schutz des genetischen Materials bestehen. Es ist bekannt, dass sie im helikalen, ikosaedrischen, viralen Kern oder in asymmetrischen Konformationen existieren. Coronaviren (CoVs), die zur Familie der Coronaviridae gehören, sind eine große Gruppe von Viren, von denen in erster Linie bekannt ist, dass sie bei Menschen, Säugetieren, Fischen und Vögeln Atemwegs-, Darm-, neurologische und Lebererkrankungen unterschiedlichen Schweregrades verursachen. Eines der charakteristischen Merkmale dieser RNA-Viren ist das Vorhandensein nelken-, hantel- oder birnenförmiger stacheliger Vorsprünge, die wie eine Krone aussehen[5]. Coronaviren haben im Allgemeinen eine fast kugelförmige Struktur und sind mäßig pleomorph[6].

[5] Das Wort "Corona" lat. für "Krone" oder "Halo".

[6] pleomorph [von *pleo- , griech. morphē= Gestalt; Subst. Pleomorphismus], polymorph,
1) Bezeichnung für in verschiedenen und/oder unregelmäßigen Formen auftretende Mikroorganismen und für Pilze, wenn sie im Lebenszyklus verschiedene Sporentypen ausbilden /PLE 20/.

Es gibt vier wichtige Strukturproteine, die mit dem Virus assoziiert sind, nämlich das Hüllprote (E), das Spikeprotein (S), das Nukleokapsidprotein (N) und das Membranprotein (M) (siehe Abb. 4.1) /KEZ 20/, /KAN 20/.

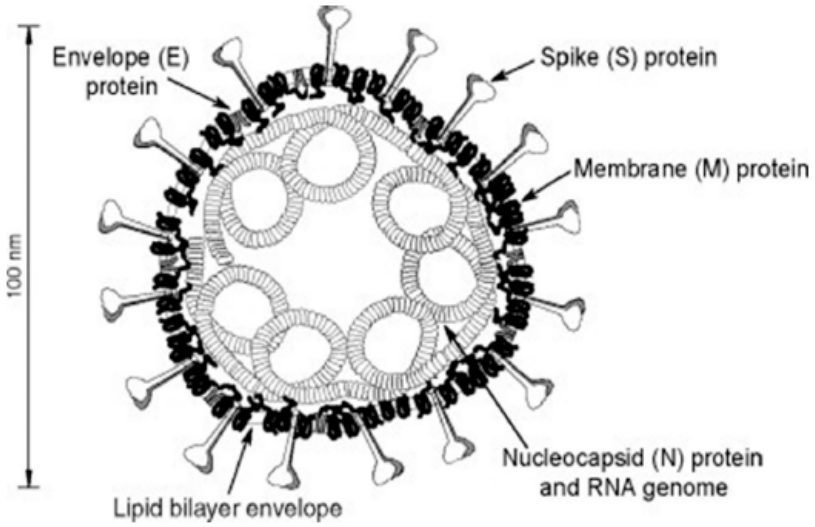


Abb. 4.1 Schematische Darstellung des Corona-Virus mit Darstellung der Strukturproteinkomponenten /KAN 20/

Die lipidumhüllten RNA-Viren bilden Virionen mit einem Durchmesser von 80 - 140 $[nm]$, deren einzelsträngiges RNA-Genom positiver Polarität rund 30 Kilobasen-Länge umfasst, wobei Coronaviren über das größte bekannte Genom aller RNA-Viren verfügen /RKI 20a/.

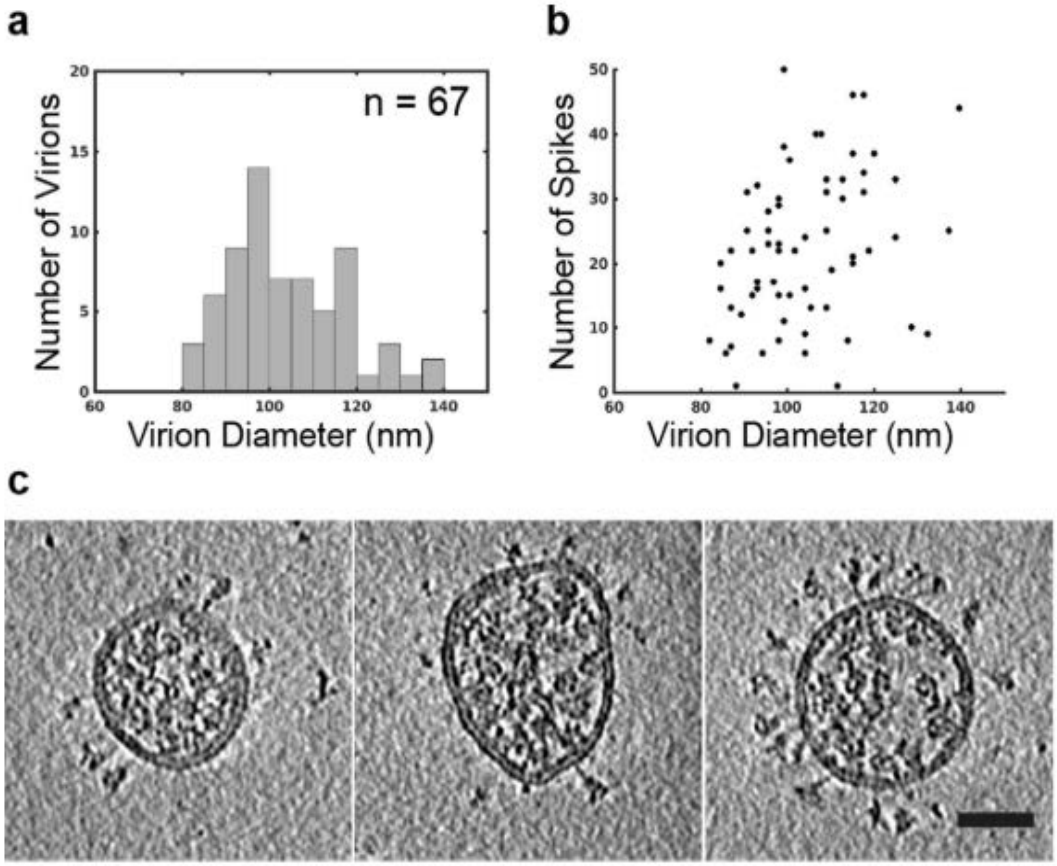


Abb. 4.2 Morphologie von SARS-CoV-2-Virionen, die aus infizierten Zellen freigesetzt werden /KEZ 20/

(A) Histogramm der Virionen-Durchmesser. Mittelwert und Standardabweichung für Durchmesser sind 104 ± 13 $[nm]$ (n = 67)
(B) Streudiagramm der Anzahl der Spikes, die pro Virion während der Subtomogramm-Mittelung gegen den Virionen-Durchmesser für dieselben Virionen identifiziert wurden, die in den zentralen Schnitten des Panels A dargestellt werden.
(C) Zentrale Schnitte durch repräsentative Viren. Skalenbalken 50 $[nm]$

Replikation

Da Viren über keinen eigenen Stoffwechsel verfügen, müssen sie in eine Zelle eindringen, um sich dort vermehren zu können. Zum Eindringen in die Zelle muss das Virus einen Rezeptor (ACE2, TMPRSS2, Abs. 4.1.1) auf der Zellwand vorfinden, an den es andocken kann. In der Zelle wird das Erbgut in das Genom der Zelle integriert und die Zelle gezwungen, neue Viren zu replizieren. Die fertigen Viren verlassen dann die Zelle, um weitere Zellen zu infizieren /SCW 20/. Die Replikation des Coronavirus wird somit durch die Bindung von Viruspartikeln an die Rezeptoren der Zellen (AEC2 und TMPRSS2) eingeleitet, wodurch die Translation des viralen Genoms im Zytoplasma und die Synthese membrangebundener Proteine weiter gelenkt wird. Das neuartige Corona-

virus SARS-CoV-2 kann aufgrund der Fähigkeit zur homologen Rekombination[7] relativ leicht ihr Wirtsspektrum erweitern und die Artengrenze überspringen /KAN 20/,/RKI 20c/.

4.1.1 Infektionsort

Mazucanti et al. berichten /MAZ 20/, /SEG 20/, /SUN 20/, dass das Angiotensin-konvertierende Enzym 2 (ACE2) und die Transmembranserin-Protease 2 (TMPRSS2) die wichtigsten Zell-Eintrittsproteine für das schwere akute respiratorische Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) sind und eine entscheidende Rolle bei der Auslösung der Coronavirus-Krankheit 2019 (COVID-19) spielen.

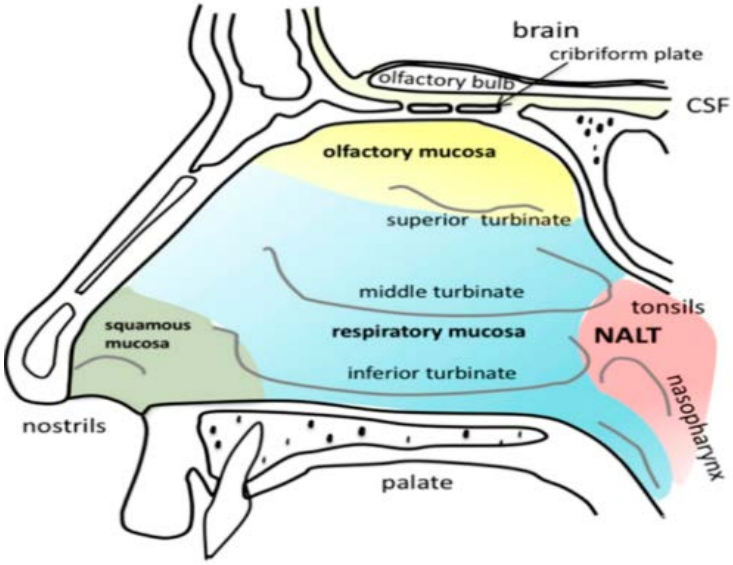


Abb. 4.3 Diagramm der menschlichen Nasenhöhle mit blau und gelb gekennzeichneten Atem[8]- und Riechschleimhaut[9]-Bereichen /BUT 20/

In den Untersuchungen von Saheb et al. /SAH 20/ konnte eine differenzierte Ausprägung von ACE2 und TMPRSS2 in den Atemwegen von Nase und Bronchien in Abhängigkeit von Alter und Krankheitsstatus nachgewiesen werden, wobei bei Kindern eine signifikant geringere Ausprägung der COVID-19-Rezeptoren in den oberen und unteren Atemwegen (Nasen- und Bronchien) festgestellt wurde. Darüber hinaus zeigte sich, dass die Expression von ACE2 und TMPRSS2 in den Atemwegen bei Rauchern im Vergleich zu

[7] Form der genetischen Rekombination, bei der Teile zwischen homologen DNA-Sequenzen ausgetauscht werden /HOM 20/.

[8] respiratory mucosa - Atemschleimhaut

[9] olfactory mucosa - Riechschleimhaut

Nichtrauchern und bei Patienten mit chronisch obstruktiver Lungenerkrankung (COPD) im Vergleich zu gesunden Probanden signifikant hochreguliert war /SAH 20/, /SMC 20/, /ZIE 20/. Das heißt, es ist von einer besonders hohen Anzahl an Rezeptoren auszugehen.

Infektion über die Augen

Die bisherige Sichtung der Literatur zeigt, dass sowohl ACE2 als auch TMPRSS2 im Auge exprimiert werden, wenn auch teilweise sehr schwach. Eine Infektion des Auges erscheint daher möglich. Weitergehende Untersuchungen zum genauen Infektionsgeschehen am Auge sowie die Ursache der unterschiedlichen Expressionsfunde in den verschiedenen Proben/Publikationen sind dringend notwendig. Nichtdestotrotz sind entsprechende Schutzmaßnahmen sowohl für das medizinische Personal als auch für die Patienten notwendig /SCN 20/.

4.1.2 Phasen und Verlauf der Erkrankung

Der zeitliche Verlauf und die Prognose der akuten respiratorischen Insuffizienz im Laufe der Erkrankung kann in drei Phasen unterteilt werden /PFE 20a/.

Phase I: Frühe Infektion

Die Einschleusung des SARS-CoV-2 erfolgt über das ACE2, das in der Schleimhaut der Nase, des Rachens, der Lunge und des Dünndarms in unterschiedlicher Dichte vorhanden ist. Die klinischen Symptome sind Geschmacksstörungen, Halsschmerzen, Husten und seltener Durchfall. Des Weiteren werden durch das RKI folgende COVID-19-Symptome aufgeführt: Fieber (> 37,8 [$°C$], oral), Kurzatmigkeit, Halsschmerzen, Schnupfen, Muskel- und Gelenkschmerzen, verstopfte Nase, Kopfschmerzen, Übelkeit/Erbrechen, Durchfall, Appetitlosigkeit, Gewichtsverlust, Konjunktivitis, Hautausschlag, Apathie, Somnolenz, Störung des Geruchs- und/oder des Geschmackssinns und Sauerstoffsättigung (< 95 %) und erhöhte Atemfrequenz (> 25/min) /RKI 05/, /RKI 20b/.

Phase II: Pulmonale Erkrankung

Der Virusnachweis im Rachen ist in den ersten Tagen der Erkrankung hoch, die pulmonale Erkrankung beginnt jedoch erst mit der Replikation in der Lunge und kennzeichnet den Beginn der viralen Pneumonie. Klinisch kommen Luftnot und Husten hinzu. Der Schweregrad der Erkrankung in Phase II lässt sich in Abhängigkeit eines möglichen Sauerstoffmangels im Blut in die Phase IIa (ohne (Hypoxämie) und Phase IIb (mit Hypoxämie) nochmals unterteilen.

Phase III: Hyperinflammatorische[10] Erkrankung

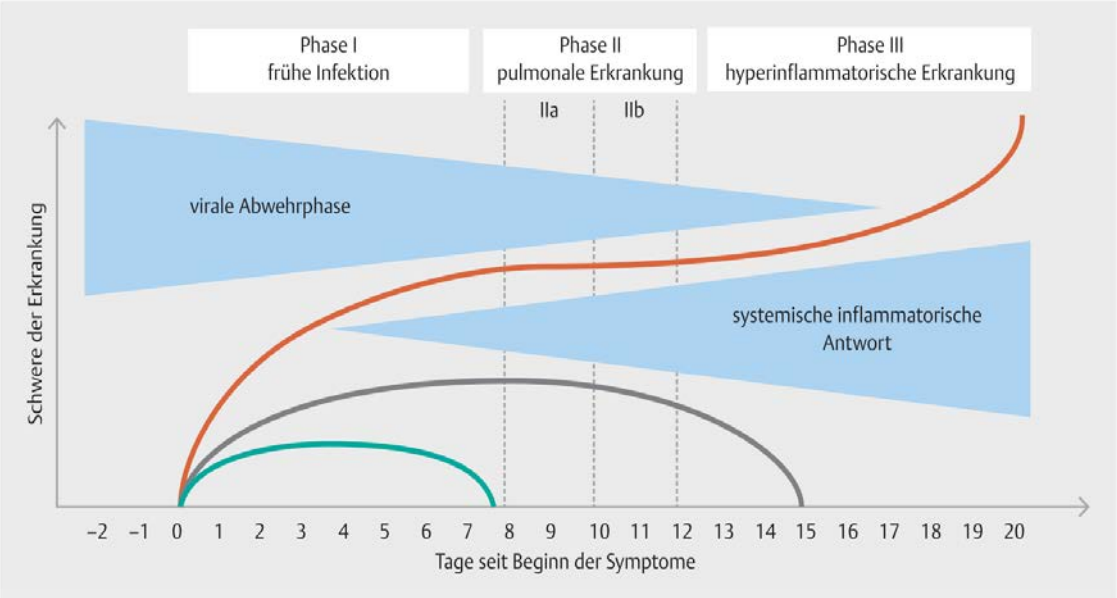


Abb. 4.4 Bedeutung der viralen Abwehr und der systemischen inflammatorischen Antwort für die Klinik von Patienten mit COVID-19 /PFE 20b/

Klinische Verläufe von COVID-19 (leicht: grün; schwer: grau; kritisch: rot) werden im zeitlichen Verlauf dargestellt.

Bei unzureichender Entwicklung einer humoralen Immunantwort und damit unzureichender Inaktivierung und Elimination von SARS-CoV-2 kommt es zu der hyperinflammatorischen Phase III mit dem gehäuften Auftreten von Organversagen und insbesondere der Möglichkeit eines weiteren Lungenschadens in Form eines ARDS[11]. Die Entwicklung eines ARDS ist weitgehend unabhängig von dem schädigenden Virus und kann sowohl

[10] hochentzündlich

[11] ARDS: akutes respiratorisches Distress-Syndrom (Lungenversagen)

bei Pneumonien als auch Einzel- oder Mehrorganschädigungen außerhalb der Lunge vorkommen /PFE 20b/.

4.2 Atmung

Für die Abschätzung der Freisetzungsvorgänge von Bio-Aerosolen werden nachfolgend die personen- und aktivitätsabhängigen Kennwerte erarbeitet, die in der COCOSYS-Simulation verwendet werden. Zur Beschreibung des simulierten Tracer-Gases CO_2, der luftfeuchtigkeitsbeeinflussenden Wasserverluste über die Atmung und der Körperoberfläche betrachteter Personen, die nachfolgend zur Bestimmung der Ablagerungsflächen der Bio-Aerosole in COCOSYS verwendet wird, werden die notwendigen Eingangsgrößen diskutiert.

4.2.1 Abschätzung des Atemvolumens und Sauerstoffverbrauch

Bei einem normalen Atemzug wird die Kapazität der Lunge nur zu einem sehr geringen Teil genutzt. Obwohl sie beim Erwachsenen ein Gesamtfassungsvermögen von $5-6\ [L]$ besitzt, wird bei jedem Atemzug nur ein Luftvolumen von etwa $0{,}5\ [L]$ ein- und ausgeatmet. Bei einer Atemfrequenz von etwa 17-mal pro Minute beträgt das resultierende Atemvolumen $17\ [min^{-1}] \times 0{,}5\ [L]\ = 8{,}5\ [L/min]$ ($12440\ [L]$ am Tag). In Tab. A 1 und Tab. A 2 im Anhang sind durchschnittliche, alters- und aktivitätsabhängige Werte für Atemfrequenz, Atemvolumen hinterlegt, die für die Modellierung von personenspezifischen Eigenschaften in COCOSYS verwendet werden. Da der Atmungsvorgang (Sauerstoff-Aufnahme/Kohlendioxid-Abgabe) in COCOSYS zur Berücksichtigung von Tracer-Gasen (O_2, CO_2) modelliert wird, wird die personenabhängige Zusammensetzung der In- und Expirationsluft (siehe Tab. A 3 im Anhang) zusätzlich betrachtet. Hierbei wird davon ausgegangen, dass der Sauerstoffgehalt der Luft bei ca. 20,9 % liegt, jedoch nur ein Teil des eingeatmeten Sauerstoffs in den Körper gelangt. Die ausgeatmete Luft enthält hiernach immer noch 15,1 % Sauerstoff. Das heißt, von den $8{,}5\ [L]$ pro Minute eingeatmeter Luft sind etwa 5 % Sauerstoff, der vom Körper aufgenommen wird (siehe Tab. A 4 und Tab. A 5 im Anhang).

4.2.2 Abschätzung des Wasserverlustes bei Atmung

Die Luftwege haben eine wichtige Funktion bei der Konditionierung der Atemgase. Hierunter versteht man die Befeuchtung, Erwärmung und Reinigung der Atemluft. Auf dem Weg in die Lungenperipherie gibt die Schleimhaut der Atemwege so viel Wasser und

Wärme an die Inspirationsluft ab, dass diese in den Alveolen körperwarm und wasserdampfgesättigt ist (isothermischer Sättigungszustand). Diese Klimatisierung der Atemluft erfolgt vorwiegend in den oberen Luftwegen, also in Nase und Nasopharynx. Die Befeuchtungs- und Erwärmungsleistung der unteren Luftwege ist demgegenüber nur gering (siehe Abb. 4.5) /RAT 10/.

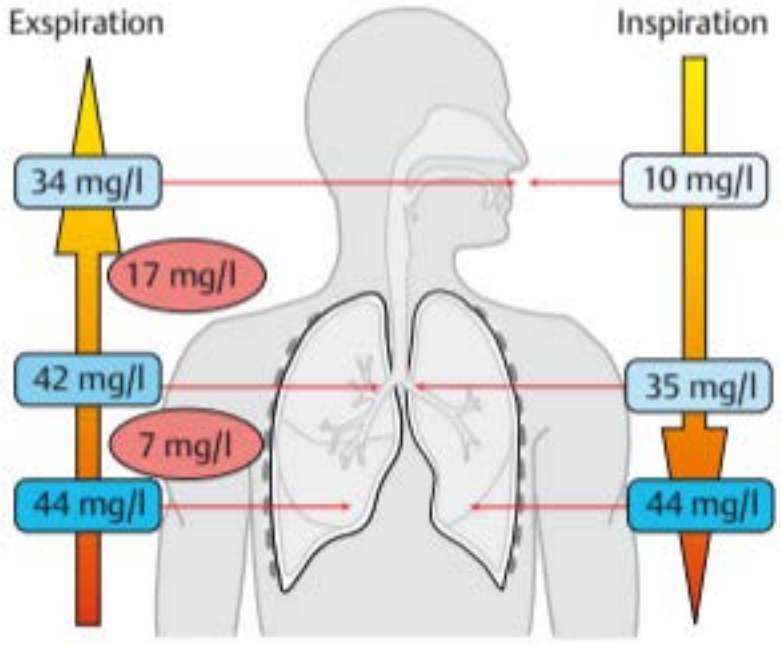


Abb. 4.5 Klimatisierung der Atemluft bei Nasenatmung in Ruhe

Angegeben ist der Wassergehalt der Atemluft während der In- und Exspiration bei Atmung von Raumluft (Temperatur 22 $[°C]$, Wassergehalt 10 $[mg/L]$). In der Lungenperipherie enthält die Atemluft bei Körpertemperatur 44 $[mg]$ Wasser pro Liter Atemluft: isothermischer Sättigungszustand. Mit dem Wassergehalt der Atemluft verändert sich auch die Atemgastemperatur (Farbverlauf von Gelb nach Rot). Die Netto-Wasserbilanz zeigt, dass mit 17 $[mg]$ $[H_2O/L]$ Atemluft der überwiegende Teil der Wasserverluste durch Verdunstung aus Nase und Nasopharynx stammt und nur ca. 7 $[mg]$ $[H_2O/L]$ aus den unteren Luftwegen distal der Bifurkation. Bei Mundatmung erhöhen sich die Wasserverluste aus den unteren Luftwegen um wenige mg $[H_2O/L]$ /THI 20/.

Während der Exspiration verläuft der Wasser- und Wärmeaustausch in entgegengesetzter Richtung. Da sich die Schleimhäute aufgrund der Verdunstungsvorgänge während der Inspiration abgekühlt haben, kommt es nun zur Kondensation von Feuchtigkeit auf der Schleimhaut, wobei ein Teil der inspiratorisch an die Atemluft abgegebenen Feuchtigkeit und Wärme zurückgewonnen wird. Die atmungsbedingten Wasser- und Wärmeverluste werden dadurch reduziert. Aufgrund des vergleichsweise hohen Temperaturgradienten ist auch dieser Vorgang im Bereich der Nasenhöhle am effektivsten. Im

Durchschnitt verliert ein erwachsener Mensch in Ruhe bei Atmung von Raumluft ca. $250 - 375\,[mL]$ Wasser pro Tag. Bei maximaler körperlicher Betätigung und hohen Atemvolumina können sich die Wasserverluste beträchtlich erhöhen /KOR 06/.

4.2.3 Abschätzung der Körperoberfläche für Ablagerungsprozesse

Für die rechnerische Bestimmung der Körperoberfläche aus der Körpergröße $Ht\,[cm]$ und dem Körpergewicht $KGW\,[kg]$ wird die in der Literatur angegebene Gleichung 4.4 verwendet.

$$A_{Körper} = 0.00718 \cdot (KGW^{0.425} \cdot Ht^{0.725})\,[m^2] \tag{4.4}$$

Der Kopf hat einen Flächenanteil an der Gesamtoberfläche $A_{Körper}$ von ca. 7 – 10 % /KOR 06/. Die Berechnung der Körperoberfläche wird in Kapitel 7 als COCOSYS-Eingangsgröße für die Bestimmung der Bio-Aerosol-Ablagerungen auf der Oberbekleidung und dem Kopf der betrachteten Personen verwendet.

4.3 Freisetzung und Aufnahme von Bio-Aerosolen

Die Produktion infektiöser respiratorischer Partikel ist abhängig von der Art und Häufigkeit der Atemwegsaktivität, der Art und dem Ort der Infektion und der Erregerbelastung. Darüber hinaus beeinflussen die relative Feuchtigkeit, die Partikelaggregation und die Schleimeigenschaften die Größe der ausgestoßenen Partikel und die anschließende Übertragung.

4.3.1 Mechanismen der Partikelbildung in der Atemluft

Hohe Luftgeschwindigkeiten in den Atemwegen, die z. B. mit Niesen und Husten verbunden sind, erzeugen nachweislich eine hohe Anzahl von Partikeln. Während dieser Arten von Aktivitäten verursachen Turbulenzen und dynamische Kompression der Atemwege ein Vibrieren und Schwingen der Atemwegswände, was wiederum Tropfen aus der Flüssigkeit der Atemwegsbeschichtung RTLF[12] von hauptsächlich zentralen Atemwegen erzeugen kann (siehe A in Abb. 4.6).

[12] RTLF - Respiratory Tract Lining Fluid

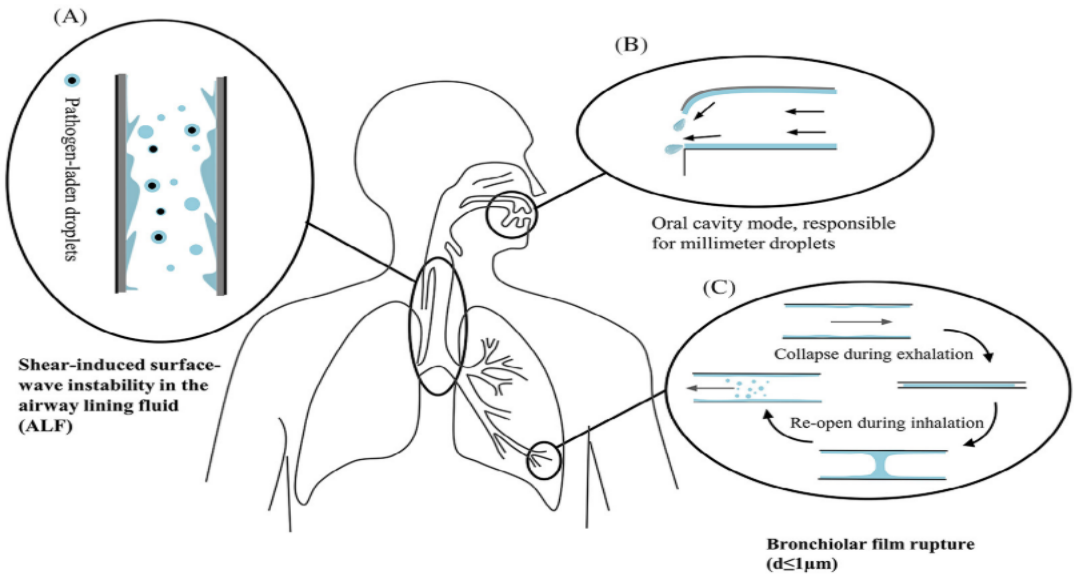


Abb. 4.6 Herkunft von Atmungstropfen

Schematische Darstellung der Herkunft und des Erzeugungsmechanismus von Atmungstropfen. (A) Instabilität der Atemwegsflüssigkeit, (B) Modell der Mundhöhle und (C) Filmriss /WEI 16/

Diese Art der turbulenzinduzierten Partikelerzeugung ist in den unteren Atemwegen bei normaler Atmung unwahrscheinlich, da der Luftstrom in den kleineren bronchialen Atemwegen bis zu den Alveolen laminar ist. Der Mechanismus ist daher auf den Kehlkopf (siehe B in Abb. 4.6) oder vielleicht auf Bifurkationen beschränkt, wo lokale Wirbel auftreten können. Auch bei normaler Atmung können durch so genannten Filmriss in den kleinen Atemgefäßen Partikel gebildet werden (siehe C in Abb. 4.6).

4.3.2 Größenverteilung der ausgeatmeten Partikel

Während die Hauptbestandteile der ausgeatmeten Luft eine Mischung aus Stickstoff, Sauerstoff, Kohlendioxid, Wasser und Edelgasen (siehe Tab. A 3 im Anhang) sind, enthält ein einziger Atemzug auch Tausende von Partikeln, deren Bildung in Abs. 4.3.1 beschrieben wurde. Einen Überblick über das mögliche Größenspektrum verschafft die Durchsicht von 26 Studien durch Gralton et al. /GRA 11/, in denen die Partikelgrößen dokumentiert wurden (vgl. Tab. A 6 und Tab. A 7 im Anhang), die beim Atmen, Husten, Niesen und Sprechen entstehen. Demnach atmen gesunde Personen Partikel zwischen 0,01 und 500 [μm] und Personen mit Infektionen der Atemwege Partikel zwischen 0,05 und 500 [μm] aus.

Aus experimentellen Werten (siehe Tab. 5.1) /MOR 09/ lassen sich der geometrisch mittlere Durchmesser d_g (4.5) und die geometrische Standardabweichung σ_g (4.6) der

ausgeatmeten Aerosole bei verschiedenen Aktivitäten (Atmen, Sprechen, Husten) ermitteln, die in COCOSYS als Eingangsgrößen für die Simulation der einzelnen Bio-Aerosol-Freisetzungsvorgänge benötigt werden. Für die hier zu betrachtenden Aerosole werden die Partikelgröße oberhalb von 10 [μm] als nicht relevant betrachtet, da diese nur über einen geringen Zeitraum luftgetragen sind /BUO 20b/.

$$\ln(d_g) = \frac{\sum n_i \ln(d_i)}{N} \quad 4.5$$

$$\ln(\sigma_g) = \sqrt{\frac{\sum n_i \left((\ln(d_i) - \ln(d_g)\right)^2}{N-1}} \quad 4.6$$

Für die verwendete Datengrundlage /MOR 09/ und die daraus abgeleiteten Parameter bestehen Unsicherheiten hinsichtlich der allgemeinen Übertragbarkeit auf die Risikogruppen in Kranken- und Pflegeeinrichtungen, angesichts der experimentell gesetzten Randbedingung. Eine Studie /ZAY 12/ deutet jedoch darauf hin, dass Alter, Geschlecht, Gewicht, Größe oder Körpermasse keinen statistisch signifikanten Einfluss auf die Aerosolzusammensetzung in Bezug auf Größe und Anzahl der Tropfen haben. Nichtsdestotrotz kann der Einfluss auf die Partikelbildung und die resultierende Anzahl und Zusammensetzung der Bio-Aerosole, die eine erkrankte SARS-CoV-2 infizierte Person freisetzt, auf Grundlage der Untersuchungsreihe von Morawska et al. /MOR 09/ nur abgeschätzt werden.

4.3.3 Lipidhülle und der Einfluss der relativen Feuchtigkeit auf die Überlebensfähigkeit von Viren

Die Überlebensfähigkeit in der Luft ist ein weiterer Schlüsselfaktor bei der Virusverbreitung, wobei neben den Eigenschaften der Tropfen bei der Freisetzung auch die physikalischen Eigenschaften der Umgebung eine wichtige Rolle spielen. Insbesondere die Umgebungstemperatur und die relative Luftfeuchtigkeit sind kritische Parameter für die Überlebensfähigkeit des Bio-Aerosols. Wenn die Aerosoltropfen beispielsweise verdampfen, werden sie kleiner und bieten dem Virus weniger Schutz, um unbeschädigt zu bleiben. In der Studie von Ijaz et al. /IJA 85/ über das luftübertragene humane Coronavirus 229E wurde gezeigt, dass niedrige Temperaturen die Überlebensfähigkeit der Viren bei hoher Luftfeuchtigkeit verbessern. Das luftübertragene humane Coronavirus

229E (HCV/229E)[13] wurde bei zwei verschiedenen Temperaturen und bei niedriger, mittlerer oder hoher relativer Feuchte untersucht /IJA 85/. Es wurde festgestellt, dass eine hohe RH für das Überleben von aerosoliertem HCV/229E schädlich ist. Niedrige Temperaturen verbesserten jedoch die Überlebensfähigkeit des Virus bei hoher relativer Luftfeuchtigkeit (siehe Abb. 4.8 und Abb. 4.9).

SARS-CoV-2 ist ein behülltes Virus, was bedeutet, dass die RNA innerhalb einer äußeren Fett- oder Lipidmembran (siehe Abb. 4.7) verpackt ist. Während umhüllte Viren nicht immer eine definierte Struktur haben, sind Coronaviren meist kugelförmig. Die Fettmembran von SARS-CoV-2 enthält Virusproteine und wirkt wie ein Beutel, der die RNA aufnimmt und schützt. Die Membran muss ausreichend stabil sein, um die RNA vor der Umgebung zu schützen, aber nicht so stabil, dass sie innerhalb der Wirtszelle nicht aufbrechen kann, um die RNA freizusetzen. Dieses Gleichgewicht zwischen struktureller Stabilität und der Fähigkeit, RNA freizusetzen, ist für die Übertragung und Replikation des Virus von wesentlicher Bedeutung, macht die Membran aber auch anfällig für eine Zerstörung durch Seife oder Reinigungsmittel /UKR 20/.

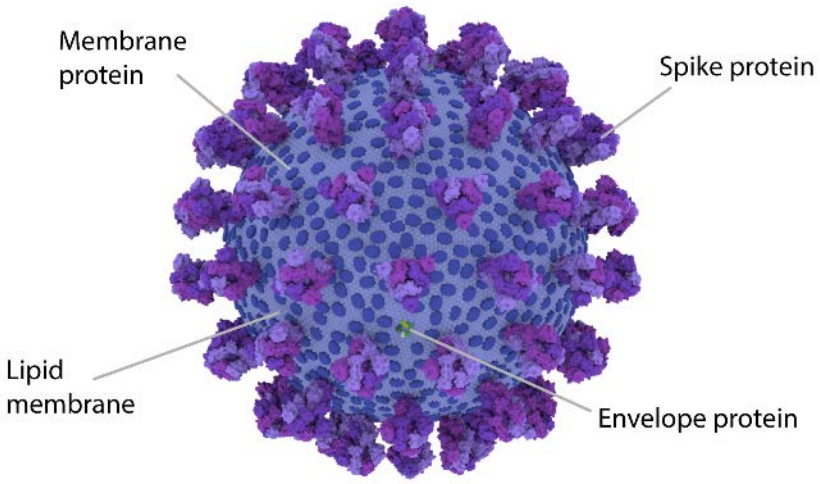


Abb. 4.7 Darstellung der strukturellen Hülle des SARS-CoV-2-Virus /UKR 20/

[13] Die sieben bekannten humanpathogenen Coronavirus-Spezies (HCoV) fallen in zwei Genera: Alphacoronavirus (HCoV-229E, HCoV-NL63) und Betacoronavirus (HCoV-HKU1, HCoV-OC43, SARS-CoV, MERS-CoV, SARS-CoV-2). Vier dieser Spezies zirkulieren weltweit endemisch: HCoV-229E, HCoV-NL63, HCoV-HKU1 und HCoV-OC43 /RKI 20c/

Das **Rhinovirus-14** hingegen, welches über keine Lipidschicht verfügt, überlebt besser bei hoher Luftfeuchtigkeit, wenn es sich bei niedriger Temperatur befindet. Dies trifft auch auf das Rotavirus SA11 zu. Bei niedriger und mittlerer Luftfeuchtigkeit ging die Infektiosität des luftübertragenen Virus rasch verloren. Bei 24 $[°C]$ ist das Überleben des Virus der japanischen B-Enzephalitis als Aerosol umgekehrt proportional zur relativen Luftfeuchtigkeit.

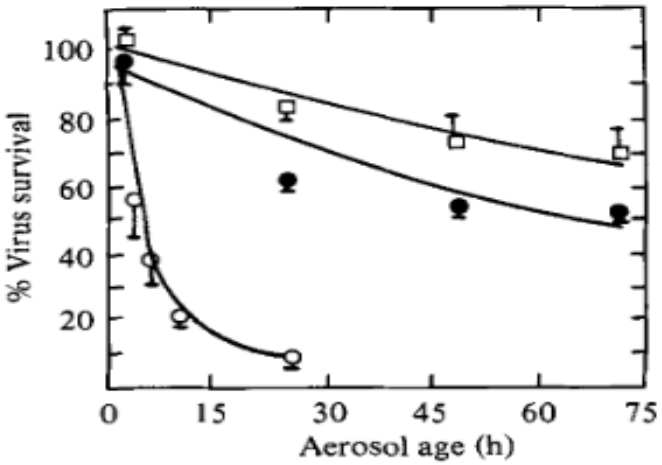


Abb. 4.8 Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf das Überleben von Bio-Aerosolen

Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf das Überleben von Bio-Aerosolen mit HCV/229E, die bei 20 ± 1 [°C] für 72 [h] gelagert werden. O: hohe RH (80 ± 5 %)], □: mittlere RH (50 ± 5 %) und ●: niedrige RH (30 + 5 %) /IJA 85/

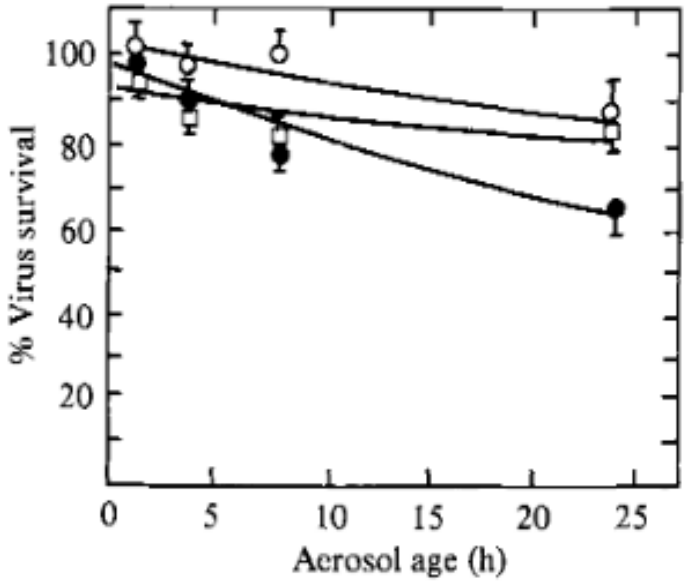


Abb. 4.9 Temperatureinfluss auf das Überleben von luftgetragenen Viren

Einfluss der niedrigen Temperatur (6 + 1 [°C]) auf das Überleben von luftgetragenem HCV/229E bei verschiedenen RH-Werten. O: hohe RH (80 ± 5 %)], □: mittlere RH (50 ± 5 %) und ●: niedrige RH (30 + 5 %) /IJA 85/

Hieraus kann geschlossen werden, dass im Allgemeinen Viren mit geringerem Lipidgehalt bei hoher RH eine größere Stabilität aufweisen als lipidhaltige Viren. Das heißt, dass Viren, die eine Lipidhülle besitzen, in trockener Luft stabiler sind, während Viren ohne Schutzhülle in feuchter Luft eine höhere Stabilität aufweisen. Zu den Viren, die durch eine Lipidhülle geschützt sind, gehören Influenza-, Parainfluenza-, respiratorische Syncytial- und **Coronaviren** (siehe Abb. 4.7). Eine weitere allgemeine Schlussfolgerung ist, dass Viren bei niedrigen Umgebungslufttemperaturen eine höhere Stabilität aufweisen. Daher bleiben im Aerosol vorhandene Viruspartikel bei kalter Witterung länger infektiös als bei wärmerer Witterung. Zum Beispiel treten Influenza-Epidemien gewöhnlich während der kalten Wintersaison auf, wenn niedrige Luftfeuchtigkeit vorherrschender ist. Aber auch in modernen klimatisierten Gebäuden herrschen solche Bedingungen wie kalt und trocken /DHA 20/, /MOR 06/, WAN 20a/.

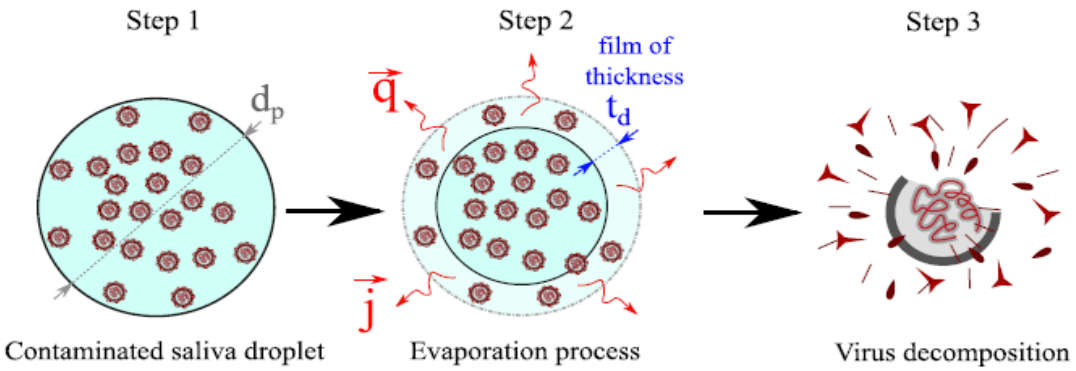


Abb. 4.10 Dreistufiger Mechanismus der Virusvernichtung

Schritt 1: Ein Speicheltropfen mit dem Durchmesser d_p wird zunächst mit CoV-Partikeln der C0-Konzentration kontaminiert.

Schritt 2: Der Verdampfungsprozess beginnt aufgrund der Advektion der Speicheltropfen in Luft und der Verdampfung. In der Darstellung bezeichnet $\vec{q}$ die Oberflächenwärme, $\vec{j}$ die Massenflüsse und t_d die Dicke des verdampfenden Films.

Schritt 3: Viruszersetzung und Inaktivierung /DBO 20/

Es wird diskutiert, dass die Raumluft in natürlich belüfteten Räumen in den Wintermonaten eine deutlich geringere relative Luftfeuchte aufweist, als in den Sommermonaten, was zusätzliche infektionsbegünstigende Effekte haben kann, wie z. B. die Austrocknung der Schleimhäute und damit eine verbundene Schwächung des Immunsystems. Eine geringe relative Luftfeuchte begünstigt ebenfalls die Entwicklung von Staub und hält Staubpartikeln und darin befindliche **Mikroorganismen länger schwebfähig**. Bei höherer relativer Luftfeuchte werden u. a. Bakterien oder Viren mit Wasser umschlossen. Dadurch erhöht sich der Partikeldurchmesser, was zum einen zu einer Zunahme der Sinkgeschwindigkeit führt und zum anderen das Vordringen der Teilchen in den Atemtrakt erschwert /HAH 07/.

4.3.4 Zerfall und Ablagerung auf Oberflächen

Aktuell ist der Zerfall des SARS-CoV-2-Virus in Aerosolen durch COCOSYS nicht darstellbar, so dass für die spätere Auswertung und Bewertung der Simulationsergebnisse u. a. die Ergebnisse aus der Studie von Smither et al. /SMI 20/ herangezogen werden. In dieser Studie wurde die Fähigkeit von SARS-CoV-2 untersucht, im Dunkeln, bei zwei verschiedenen relativen Luftfeuchtigkeitswerten (**Medium**: 40 – 60 %, **High**: 68 – 88 %) und in künstlichem Speichel zu überleben. Es wurde nachgewiesen, dass SARS-CoV-2 im Dunkeln in einem dynamischen Kleinpartikel-Aerosol unter den vier getesteten Versuchsbedingungen stabil ist und lebensfähige Viren noch nach 90 Minuten gemessen werden. In dieser Studie konnten ebenfalls die Zerfallsrate und Halbwertszeit bestimmt werden, wobei die Zerfallsraten von 0,4 – 2,27 % pro Minute und die Halbwertszeiten von 30 bis 177 Minuten für die verschiedenen Bedingungen reichte.

Die theoretische Zerfallskurven von SARS-CoV-2 in **TCM**[14] (Quadrate, durchgezogene Linien) oder **künstlichem Speichel** (Kreise, gestrichelte Linien) bei mittlerer RH (gefüllte Formen) oder hoher RH (offene Formen) wird in Abb. 4.11 dargestellt, wobei der Zerfall als Prozentsatz der Ausgangsmenge dargestellt ist. Horizontale gepunktete Linien bei 50 % stellen die Halbwertszeit dar und bei 10 % wird die Zeit angegeben, bis die Ausgangsmenge um 90 % abfällt /SMI 20/.

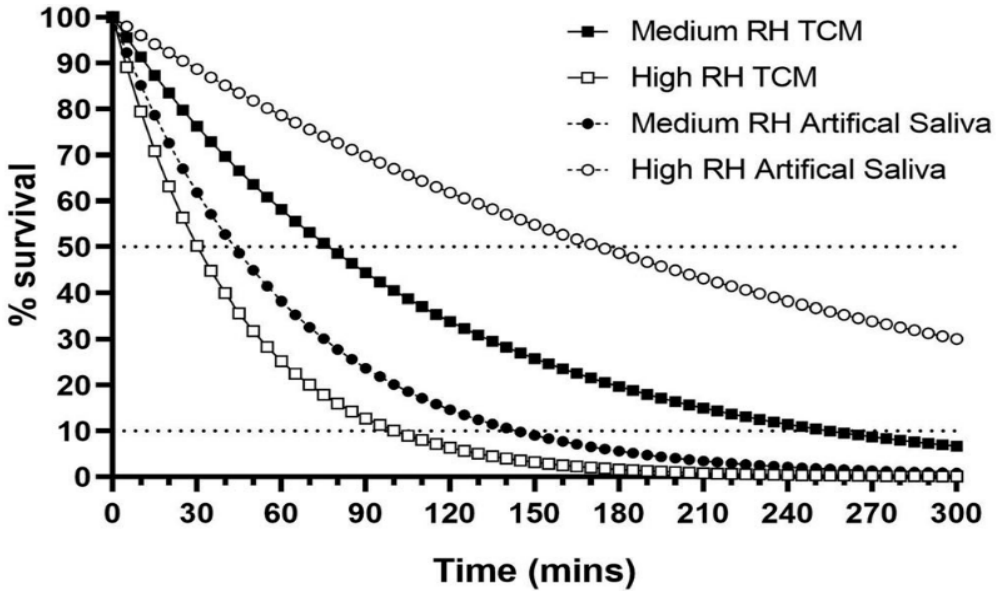


Abb. 4.11 Theoretischer Zerfall von SARS-CoV-2 /SMI 20/

[14] Tissue Culture Media – Medium für Gewebekulturen

Ablagerung

In der COCOSYS-Modellierung werden neben den luftgetragenen Bio-Aerosolen auch deren Ablagerung auf Einbauten und Köperoberflächen involvierter Personen betrachtet. Die messbare Kontamination von Oberflächen wird in der Studie von Chia et al. /CHI 20/ diskutiert. In dieser Studie wurden Oberflächen- und Luftproben aus Krankenhauszimmern von COVID-19-Patienten auf SARS-CoV-2-RNA untersucht und Umweltproben in drei Luftinfektions-Isolationsräumen (AIIRs), auf der Intensivstation und 27 AIIRs[15] (Luftinfektionsraum) auf der allgemeinen Station entnommen. Hierbei wurden 245 Oberflächenproben gesammelt, wobei in 56,7 % der Zimmer mindestens eine Umgebungsoberfläche kontaminiert war. Eine hohe Kontamination der Berührungsflächen zeigt sich auch bei 10 (66,7 %) von 15 Patienten in der ersten Krankheitswoche und bei 3 (20 %) nach der ersten Krankheitswoche. Die Luftprobenahme wurde in drei der 27 AIIRs auf der allgemeinen Station durchgeführt und wiesen in zwei Räumen SARS-CoV-2 PCR[16]-positive Partikel der Größen > 4 $[\mu m]$ und 1 - 4 $[\mu m]$ nach, obwohl in diesen Räumen 12-mal pro Stunde die Luft gewechselt wird.

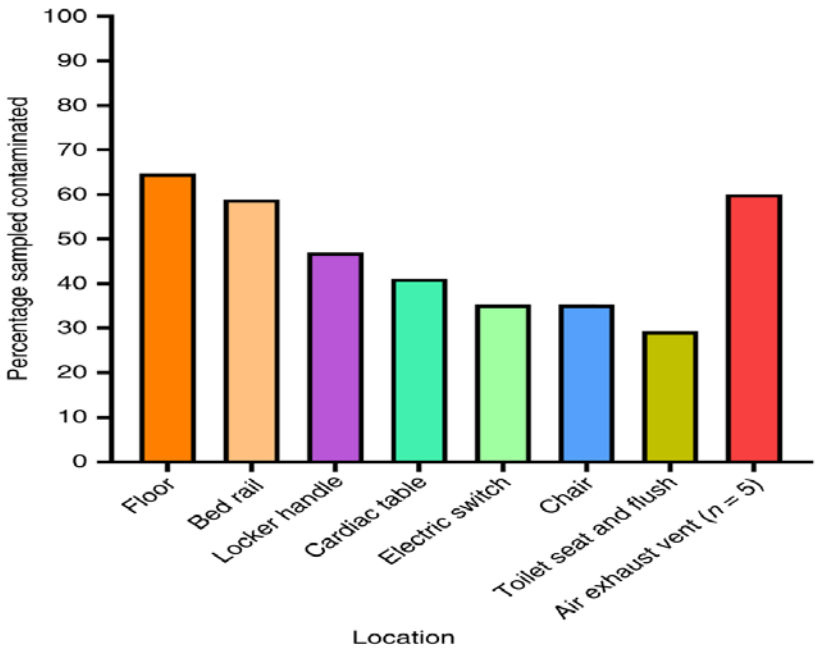


Abb. 4.12 Prozentualer Anteil kontaminierter Abstriche von Oberflächenproben in Räumen mit jeglicher Kontamination /CHI 20/

[15] AIIR: Airborne Infection Isolation Room

[16] PCR: Polymerase Chain Reaction: Methode zur in-vitro-Amplifikation (Vermehrung) spezifischer DNA-Fragmente /SPE 20/

5 Infektionsrisiko-Modell

Im folgenden Abschnitt wird die Größe Quanten-Emissionsrate ER_q eingeführt, die in Kapitel 6 zur Bestimmung der Bio-Aerosolquelle als Einspeisung für COCOSYS verwendet wird. Auf dieser Grundlage wird anschließend das Infektionsrisiko-Modell motiviert, das zur Ermittlung des individuellen Infektionsrisikos von Personen in den betrachteten Szenarien auf Basis der errechneten COCOSYS-Aerosolkonzentrationen benutzt wird.

5.1 Abschätzung der Quantenemissionsrate

Der in der Arbeit /BUO 20b/ vorgeschlagene Ansatz basiert auf der **Hypothese**, dass die von der infizierten Person ausgestoßenen Tropfen die gleiche Viruslast c_v wie das Sputum tragen. Wenn also die Konzentration des Virus im Sputum und die Menge der emittierten Tropfen mit Abmessungen von weniger als 10 $[\mu m]$ bekannt ist, kann die emittierte Viruslast über eine Massenbilanz bestimmt werden. Die emittierte Viruslast wird als Quanten-Emissionsrate (ER_q, $[Quanta/h]$) ausgedrückt[17] und durch die Gleichung 5.7 beschrieben:

$$ER_q = c_v \cdot c_i \cdot V_{br} \cdot N_{br} \cdot \int_0^{10\,\mu m} N_d(D)\, dV_d(D) \qquad 5.7$$

Hierbei sind:

- c_v die Viruslast im Sputum ($[\mathrm{RNA-Kopien}/mL]$),
- c_i ein Konversionsfaktor, definiert als das Verhältnis zwischen einem infektiösen Quantum und der Infektionsdosis, ausgedrückt in viralen RNA-Kopien,
- V_{br} das Volumen der ausgeatmeten Luft pro Atemzug ($[cm^3]$; Tidalvolumen),
- N_{br} die Atemfrequenz $[h^{-1}]$,
- N_d die Tropfen-Anzahlkonzentration (part. cm^{-3}) und
- $V_d(D)$ ist das Volumen eines einzelnen Tropfens (mL) als Funktion des Tropfendurchmessers (*D*).

[17] Ein Quantum ist definiert als die Dosis an luftgetragenen Tropfenkernen, die erforderlich ist, um eine Infektion bei 63 % der exponierten Personen zu verursachen (vgl. Gleichung 5.20)

Der Konversionsfaktor c_i (Quanta RNA-Kopien^{-1}), d. h. das Verhältnis zwischen einem infektiösen Quantum und der infektiösen Dosis, ausgedrückt in viralen RNA-Kopien, stellt die Wahrscheinlichkeit dar, mit der ein Erreger im Wirt überlebt und die Infektion auslöst. c_i = 1 bedeutet also implizit, dass für jeden Erreger (RNA-Kopie im Falle von SARS- CoV-2), den die exponierten Personen erhalten, eine Infektion erfolgt. Um die in viralen RNA-Kopien angegebene Infektionsdosis in infektiöse Quanten umzuwandeln, sollten zwei Parameter bekannt sein:

I) die Anzahl der infektiösen Viruspartikel (RNA-Kopien), die zur Initiierung der Infektion benötigt werden (c_{RNA}, RNA-Kopien PFU^{-1})[18]
II) der Umwandlungsparameter Quanten-zu-Plaque-bildende Einheit (PFU) (c_{PFU}, PFU-Quanten^{-1}).

$$c_i = \frac{1}{c_{RNA} \cdot c_{PFU}} \qquad 5.8$$

Dann ist, wie in Gleichung. 5.8 ausgedrückt, der Konversionsfaktor c_i das Produkt aus c_{RNA}^{-1} und c_{PFU}^{-1}. Tatsächlich gibt es in der wissenschaftlichen Literatur derzeit keine c_{PFU}-Werte für SARS-CoV-2. Watanabe et al. /WAT 10/ schätzten die infektiösen Dosen mehrerer Coronaviren auf der Grundlage von Datensätzen, die Menschen mit dem Virus HCoV-229E (bekannt als Erreger der menschlichen Erkältung) und Tiere mit SARS-CoV-1 infizieren. Auf der Grundlage dieser Daten lässt sich ein durchschnittlicher Wert von $\boldsymbol{c_{PFU} = 2.1 \times 10^2}$ PFU-Quanten^{-1} abschätzen. Was den c_{RNA}-Parameter anbelangt, so wird eine Schätzung /FEA 20/ für das SARS-CoV-2-Virus von in einer experimentellen Charakterisierung der Persistenz von SARS-CoV-2 in Aerosolsuspensionen verwendet. Aus diesen Daten wurde eine $\boldsymbol{c_{RNA} = 1.3 \times 10^2}$ RNA-Kopien PFU^{-1} angenommen /BUO 20a/, womit sich ein Wert für c_i von 3.663×10^{-5} ergibt.

Das Tropfenvolumen (V_d) in Gleichung 5.7 lässt sich z. B. auf der Grundlage von experimentell gewonnenen Daten (siehe Tab. 5.1) /MOR 09/ bestimmen. Die Tab. 5.1 kennzeichnet die Tropfen-Größenverteilung der untersuchten exspiratorischen Aktivitäten (Stimmzählung, Flüsterzählung, unmodulierte Vokalisation, Atmung). Bei dem

[18] pfu, Abk. für engl. plaque forming units (Plaque bildende Einheiten), Anzahl infektiöser und damit in einem Bakterienrasen Plaques bildender Phagenpartikel (Bakteriophagen) in einer gegebenen Suspension /PFU 20/.

Experiment wurde erkannt, dass solche Tropfen einen oder mehrere Modi aufweisen, die in unterschiedlichen Konzentrationen auftreten.

Tab. 5.1 Experimentell ermittelte Tropfenkonzentration ($\boldsymbol{N_i}$ part. $\boldsymbol{cm^{-3}}$) /MOR 09/

Num.	Exspirationsaktivität	$\boldsymbol{D_1(0.8\,\mu m)}$	$\boldsymbol{D_2(1.8\,\mu m)}$	$\boldsymbol{D_3(3.5\,\mu m)}$	$\boldsymbol{D_4(5.5\,\mu m)}$
1	Stimmhaftes Zählen	0.236	0.068	0.007	0.011
2	Flüsterndes Zählen	0.110	0.014	0.004	0.002
3	Unmodulierte Vokalisierung	0.751	0.139	0.139	0.059
4	Atmung	0.084	0.009	0.003	0.002
5	Husten	0.567	0.093	0.012	0.678

Basierend auf den experimentellen Daten lässt sich Gleichung 5.7 wie folgt vereinfachen auf vier diskrete Größenklassen:

$$ER_q = c_v\, c_i\, IR \sum_{i=1}^{4} N_{i,j}\, V_i \qquad 5.9$$

Die Eingangsgrößen bezeichnen

- j die Nummer der verschiedenen, betrachteten exspiratorischen Aktivitäten in Tab. 5.1 und
- IR $(m^3 h^{-1})$ die Inhalationsrate, d. h. das Produkt aus Atemfrequenz N_{br} und Tidalvolumen V_{br}, die eine Funktion des Aktivitätsniveaus der infizierten Person ist.

Der Summenterm in Gleichung 5.9 lässt sich mit den Tropfenvolumina $V_i = \frac{\pi}{6}\, D_i^3$ $(i = 1..4)$ und den Tropfenkonzentration aus Tab. 5.1 für die einzelnen Exspirationsaktivitäten zusammenfassen. Der Eintrag „Mixed (1+3)“ entspricht dem Mittelwert, der aus den Aktivitäten „Stimmhaftes Zählen“ und „Unmodulierte Vokalisierung“ gebildet wurde und in Vorbereitung von Kapitel 6 mit angegeben wird. Eine Übersicht der in Summe freigesetzten Bio-Aerosol DNV_j je Volumen $1\ [m^3]$ Atemluft bei den verschiedenen Aktivitäten ist in Tab. 5.3 geben.

$$DNV_j = \sum_{i=1}^{4} N_{ij}\, V_i \left[\frac{pl}{m^3}\right] \qquad 5.10$$

Tab. 5.2 Freigesetztes Bio-Aerosolvolumen je Aktivität

Num.	Exspirationsaktivität	DNV_j [$\mathrm{pL/m^3}$]
1	Stimmhaftes Zählen	1386.31
2	Flüsterndes Zählen	336.26
3	Unmodulierte Vokalisierung	8885.94
4	Atmung	291.57
5	Mixed (1+3)	5126.12
6	Husten	59484.51

Die durch Buonanno et al. /BUO 20b/ gegebenen Werte für die Atemvolumenrate IR bei unterschiedlichen Belastungszuständen werden in dieser Arbeit übernommen und sind in Tab. 5.2 aufgeführt.

Tab. 5.3 Atemvolumenrate,-frequenz und -volumen bei unterschiedlichen Belastungen

Num.	Belastungs-zustand	Atemvolu-menrate IR [m^3/h]	Atemfrequenz N_{br} [min^{-1}]	Atemvolumen V_{br}[L]
1	Ruhe	0.49	16.33	0.5
2	Stehen	0.54	18.00	0.5
3	Leichte Übungen	1.38	28.75	0.8
4	Moderate Übungen	2.35	32.63	1.2
5	Schwere Übungen	3.30	34.37	1.6

Anhand der Tab. 5.2 und Tab. 5.3 lässt sich aus dem Produkt $DNV_j \cdot IR$ eine entsprechende **Volumenrate** $\boldsymbol{VR}$ [$\boldsymbol{pL/s}$] in Abhängigkeit von Aktion und Belastungszustand ermitteln.

$$VR = DNV_J \cdot IR\ [pl/s\ ] \tag{5.11}$$

Eine Darstellung der Volumenrate für die Kombinationen aus Aktion und Belastungszustand ist durch Abb. 5.1 gegeben. Unter Verwendung einer temperaturabhängigen Dichtefunktion $\rho(T)$ [kg/m^3] für die Bio-Aerosoltropfen lässt sich eine entsprechende **Massenrate** $\boldsymbol{MR}$ [$\boldsymbol{kg/s}$] in Abhängigkeit von Aktivität und Belastungszustand berechnen, die nachfolgend als Eingangsgröße in der COCOSYS-Modellierung eingeht.

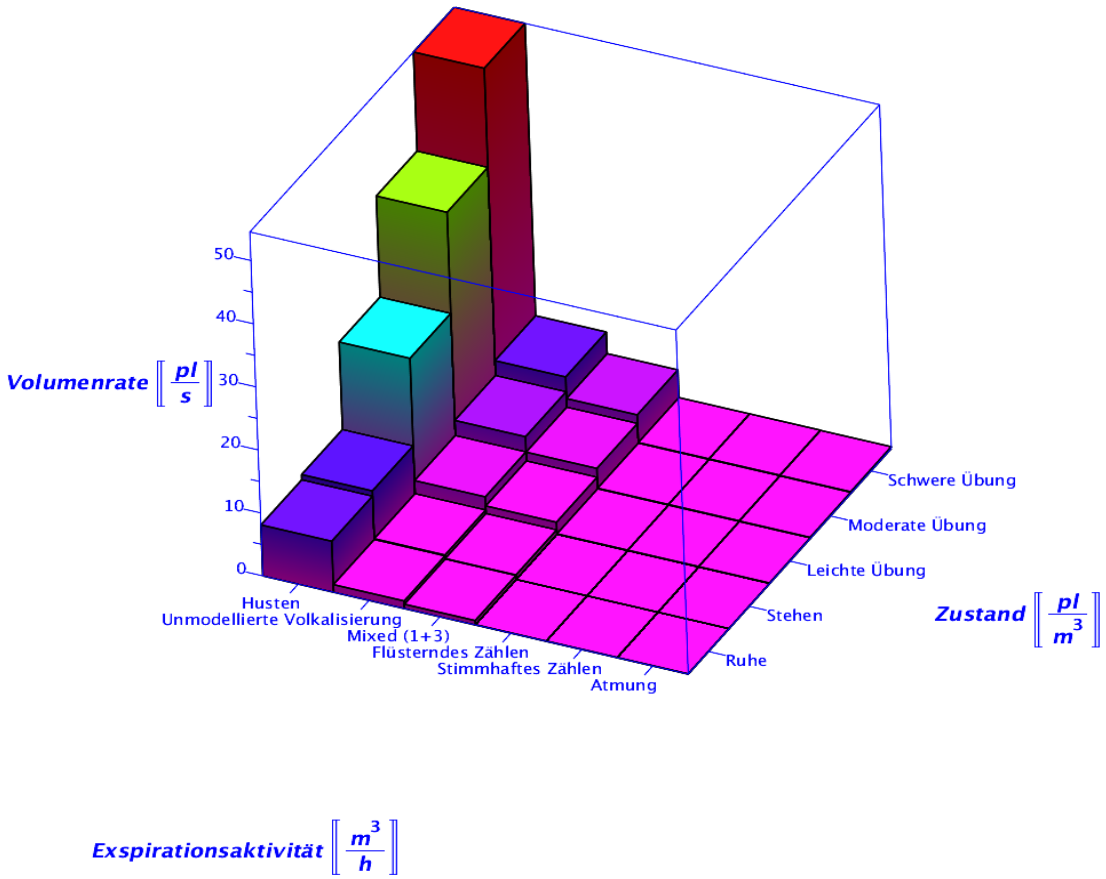


Abb. 5.1 Bio-Aerosol-Volumenrate in Abhängigkeit von Aktivität und Zustand

$$MR = VR \cdot \rho(T)\ [\frac{kg}{s}] \tag{5.12}$$

Vereinfachend wurde als Dichte $\rho(T)$ des Sputums und damit für die der Bio-Aerosole die approximative Dichtefunktion von Wasser $\rho_{water}(T)$ verwendet.

$$\rho_{water}(T) = 999.85308 + 6.32693 \cdot 10^{-2} \cdot T - 8.523829 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 6.943248 \cdot 10^{-5} \cdot T^3 - 3.821216 \cdot 10^{-7} \cdot T^4\ [kg/m^3] \tag{5.13}$$

Bei bekannten Werten für die Viruskonzentration im Sputum c_V [RNA-Kopien ml^{-1}] und der Virusdichte $\rho_{virus}\ [kg/m^3]$ lässt sich in analoger Weise eine Massenrate $MR_{virus}\ [kg/s]$ für die Viren als COCOSYS-Eingangsgröße bestimmen.

Die Quanten-Emissionsrate ER_q aus Gleichung 5.9 kann in einem weiten Bereich variieren, in Abhängigkeit von der Viruskonzentration im Sputum c_V , dem Aktivitätsniveau, den verschiedenen Arten der Exspiration, dem Alter und dem Geschlecht der infizierten

Person (siehe Tab. A 1 und Tab. A 2 im Anhang). Die Funktion ER_q beschreibt somit die von der infizierten Person exhalierte Bio-Aerosol-Menge in der Zeit.

Viruskonzentration im Sputum c_v

Wie aus Gleichung 5.9 ersichtlich, hängt die Quanten-Emissionsrate, ER_q, von mehreren individuellen Parametern ab. In Bezug auf die SARS-CoV-2-Viruslast im Mund konnten c_v-Werte von bis zu 10^{11} $[RNA - Kopien\ /mL]$ nachgewiesen werden, die jedoch beim gleichen Patienten im Verlauf der Erkrankung variabel waren /WOE 20/. In Abb. 5.2 wird beispielhaft die Abhängigkeit der Quanten-Emissionsrate, ER_q von der Inhalationsrate IR und der Viruslast im Sputum c_v über den jeweils erfassten Parameterbereich dargestellt.

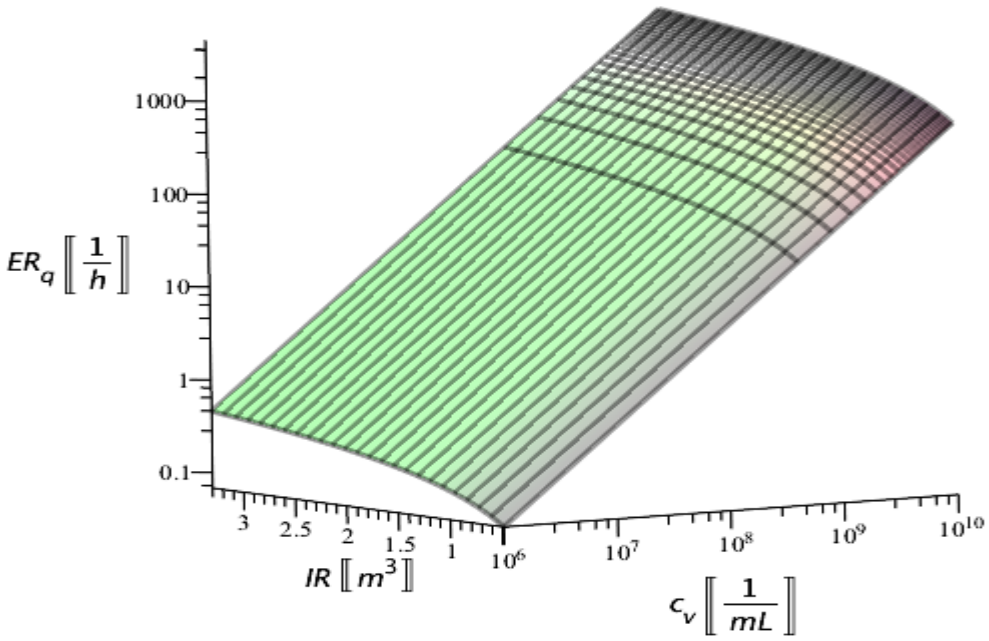


Abb. 5.2 Abhängigkeit der Quanten-Emissionsrate $\boldsymbol{ER_q}$ von Inhalationsrate $\boldsymbol{IR}$ und Sputum-Viruslast $\boldsymbol{c_v}$ (Fall: stimmhaftes Zählen (siehe Tab. 5.1), $\boldsymbol{c_i = 0.02}$)

Zum Beispiel wird in /ROT 20/ über einen SARS-CoV-2-Infektionsfall berichtet, bei dem beim Indexpatienten während der Inkubationszeit eine hohe Viruslast von 10^8 $[RNA - Kopien\ /mL]$ nachgewiesen wurde, was bestätigt, dass **asymptomatische Personen** potenzielle Quellen einer SARS-CoV-2-Infektion sind. Darüber hinaus wiesen Pan et al., 2020 /PAN 20/ in einer Studie an 82 SARS-CoV-2-infizierten Patienten c_v-Werte im Bereich von $10^8 - 10^9$ $[RNA - Kopien\ /mL]$ nach, ebenfalls in den vorangegangenen Tagen und in den ersten Tagen des Krankheitsbeginns.

Folglich können die Konzentrationen der Viruslast im Mund während des Krankheitsverlaufs Werte von 10^9 $[RNA - Kopien\ /mL]$ und gelegentlich bis zu 10^{11} $[RNA - Kopien\ /mL]$ erreichen. Um die große Variabilität (über mehrere Größenordnungen) des ER_q als Funktion des c_v darzustellen, wird die Grafik (siehe Abb. 5.3) auf einer bi-logarithmischen Skala dargestellt.

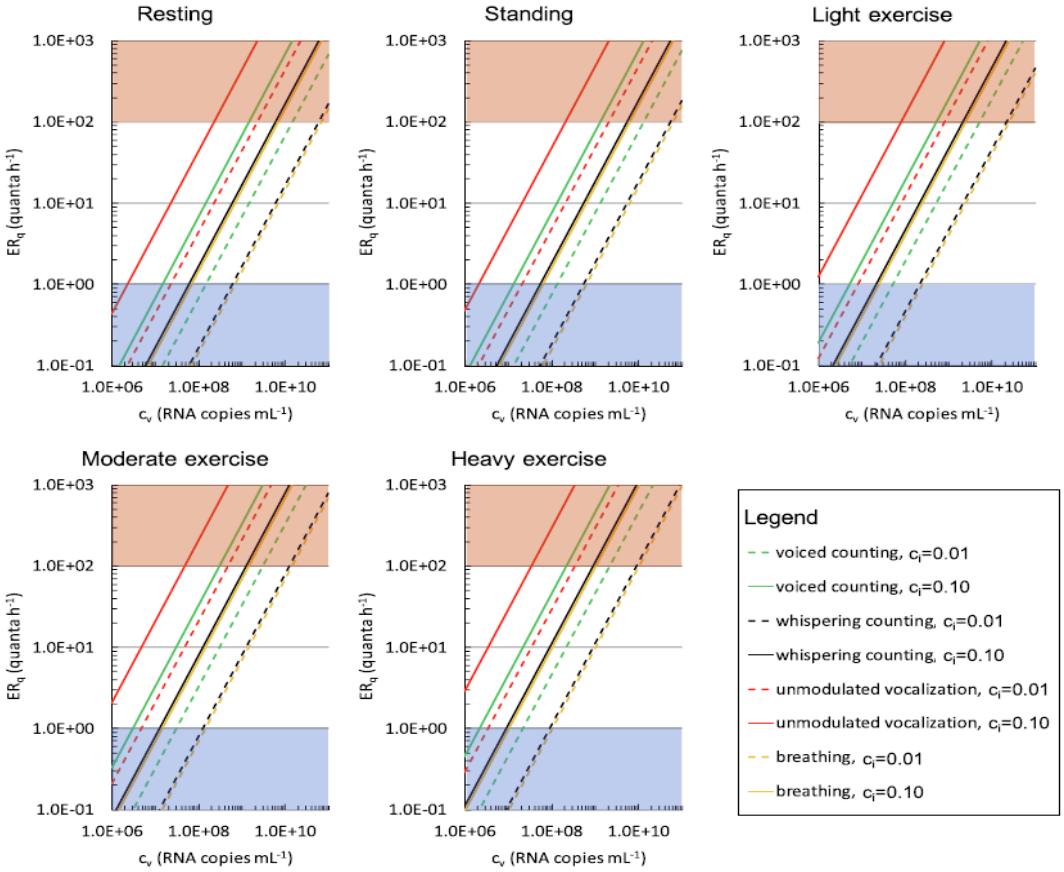


Abb. 5.3 Trends des $\boldsymbol{ER_q}$ $[\mathbf{Quanta/h}]$ als Funktion der Viruslast im Sputum

Trends des ER_q ($[Quanta\ /mL]$) als Funktion der Viruslast im Sputum (c_v, $[RNA - Kopien\ /mL]$) und des Korrekturfaktors (c_i) für Quanten-RNA-Kopien für verschiedene respiratorische Aktivitäten (Stimmzählung, Flüsterzählung, unmodulierte Vokalisation, Atmung) und verschiedene Aktivitätsniveaus (Ruhe, Stehen, leichte Übung, mäßige Übung und schwere Übung). Zonen, die für niedrige (< 1 $[Quanta\ /mL]$) und hohe (> 100 $[Quanta\ /mL]$) Quantenemission repräsentativ sind, werden als blau bzw. rot schattierte Bereiche angezeigt /BUO 20b/.

Es wurden drei Emissionsbereiche identifiziert:

(i) die Niedrig-Emissionszone mit Werten von ER_q < 1 $[Quanta\ /mL]$

(ii) die Emissionszone bis zu 100 $[Quanta\ /mL]$

(iii) die Hoch-Emissionszone für Werte von mehr als 100 $[Quanta\ /mL]$

Im Fall eines Ruhezustands (der den typischen Zustand eines hospitalisierten Patienten darstellen könnte) mit einem c_v < $10^7[RNA-Kopien/mL]$ hat das infektiöse Subjekt meistens eine niedrige Emission (< 1 $[Quanta\ /mL]$), außer im besonderen Fall der unmodulierten Vokalisation und einer Infektiosität gleich 0,1.

Eine hohe Emission bei Mundatmung kann nur bei sehr großen c_v-Werten, d. h. höher als 10^{10} $[RNA-Kopien/mL]$, erreicht werden. Während der Ruhezustand hauptsächlich charakteristisch für einen symptomatischen hospitalisierten Patienten ist, stellt die leichte körperliche Aktivität (z. B. langsames Gehen) den typischen Zustand einer **asymptomatischen Person** während ihrer täglichen Aktivitäten dar. In diesem Fall ist ein c_v von 10^6 $[RNA-Kopien/mL]$ erforderlich, um eine geringe Emission zu gewährleisten. Ein Subjekt mit einem c_v von 10^9 $[RNA-Kopien/mL]$, repräsentiert einen ER_q, der in die Emissionszone fällt, die im Fall einer Vokalisation die Hochemissionszone erreicht.

Schließlich ist es interessant festzustellen, dass bei schwerer körperlicher Betätigung die Hochemissionszone theoretisch mit einem c_i-Wert von 0,10 nur während der Mundatmung erreicht werden kann. Diese Bedingung ist repräsentativ für jede Person, die Sport treibt. Die Hochemissionszone kann auch für einen **asymptomatischen SARS-CoV-2-Patienten** in der Kombination der drei Parameter c_v, c_i und IR erreicht werden, und zwar sowohl in der leichten Übungsbedingung beim Sprechen als auch in der schweren Übung mit Mundatmung.

In der Arbeit von Evans /EVA 20/ wird hierzu festgestellt, dass die Viruslast im Speichel (c_v), bei Personen, die auf COVID-19 getestet wurden, um mehr als acht Größenordnungen schwankt. Etwa 90 % der getesteten Personen haben eine Viruslast von weniger als $c_v = 10^9[mL^{-1}]$, während 1 % eine Viruslast von mehr als $c_v = 3 \times 10^{10}$ $[mL^{-1}]$ haben kann.

Beobachtet wurde, dass die Viruslast nach dem Einsetzen der Symptome abnimmt, so dass die präsymptomatische Viruslast am oberen Ende der Verteilung liegen kann. Die Abb. 5.4 zeigt neben einer Log-Normalverteilung (zentriert bei 10^6 $[mL^{-1}], \sigma = 10^2$ (vgl. auch Anhang A.5), die von Evans geschätzte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Viruslast im Speichel, welche am Ende nach oben geschoben ist, um den Abwärtstrend der Viruslast nach Symptombeginn zu berücksichtigen.

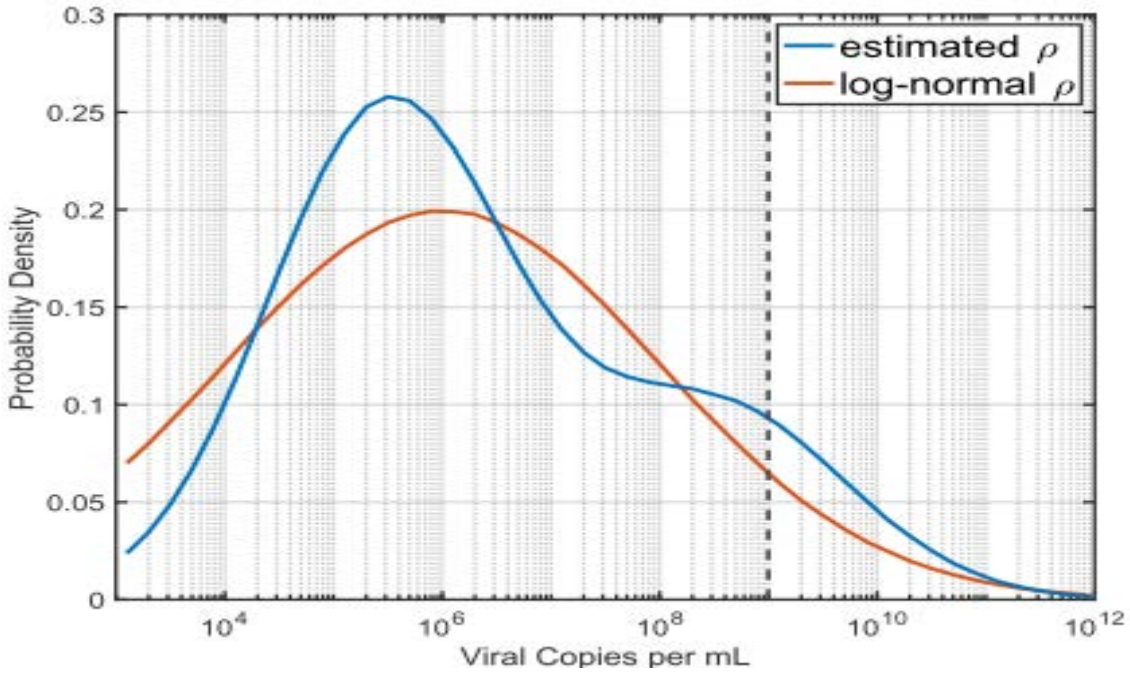


Abb. 5.4 Darstellung der Log-Normalverteilung (orange) und der geschätzte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Viruslast $\boldsymbol{c_v}$ im Speichel /EVA 20/

In der Tab. 5.4 werden die für SARS-CoV-2-Viren verwendeten Werte dargestellt, durch die sich die Quantenemissionsrate ER_q quantifizieren lässt. Für den Exponenten m, der in die Bestimmung der Viruskonzentration im Sputum c_{virus} eingeht, lässt sich durch obige Betrachtungen ein Wertebereich von $m \in [0{,}5]$ festlegen.

Tab. 5.4 Charakteristische Daten SARS-CoV-2

SARS-CoV-2	Variable	Wert	Referenz/Funktion
Masse	m_{virus}	$1\ [fg]$	/YIN 20/
Durchmesser	d_{virus}	100 [nm]	/YIN 20/
Volumen	v_{virus}	$5.23 \times 10^{-22}\ [m^3]$	$v_{virus} = \frac{\pi}{6}\, d_{virus}^3$
Dichte	ρ_{virus}	$1909.85\ [kg/m^3]$	$\rho_{virus} = \frac{m_{virus}}{v_{virus}}$
Viruskonzentration im Sputum	c_{virus}	$10^{6+m}\ [mL^{-1}]$[19]	/BUO 20b/
Halbwertzeit	ht_{virus}	$1.1\ [h]$	/VAN 19/

[19] Der Exponent m erfasst die streubreite Viruslast c_v (m= [0,5]) (vgl. Abb. 5.4).

Aus den gegebenen Daten in Tab. 5.4 und der Gleichung 5.11 lässt sich für die COCOSYS-Modellierung eine entsprechende Massenrate für die Virionen in den Aerosoltropfen bestimmen.

$$MR_{virus} = VR \cdot c_{virus} \cdot m_{virus} \left[\frac{kg}{s}\right] \qquad 5.14$$

5.2 Das Infektionsrisiko Modell

In diesem Abschritt wird die Funktion der Quantenkonzentration $n(t)$ entwickelt, die einen Bezug herstellt, zwischen der Quanten-Emissionsrate ER_q der infizierten Person und dem betrachteten Raum, in dem sich die Person über einen gewissen Zeitraum aufhält. Aufgrund der Annahme, dass die freigesetzten Bio-Aerosole auch nach Verlassen der infizierten Person in der Raumluft bis zu drei Stunden enthalten sind, besteht sowohl für gleichzeitig anwesende als auch nachfolgende Personen ein potenzielles Infektionsrisiko. Das hier verwendete Gammaitoni- und Nucci-Modell /GAM 97/ basiert auf der Ratenänderung des Quanten-Niveaus über die Zeit, insbesondere die Differentialgleichungen für die Änderung der Quanten in einem Kontrollvolumen sowie die Anfangsbedingungen erlauben es, die Quantenkonzentration n(t) in einer Innenraumumgebung zum Zeitpunkt t zu bewerten:

$$n(t) = \frac{ER_q \cdot I}{IVRR \cdot V} + \left(n_0 - \frac{ER_q \cdot I}{IVRR}\right) \cdot \frac{e^{-IVRR \cdot t}}{V} \qquad [\text{Quanta}/m^3] \qquad 5.15$$

Wobei

- $IVRR$ $[h^{-1}]$ die Abreicherungsrate des Bio-Aerosols in dem untersuchten Raum,
- n_0 $[Quanta]$ die anfängliche Anzahl von Quanten in dem Raum,
- *I* die Anzahl der infektiösen Subjekte,
- $V[m^3]$ das Volumen des betrachteten Innenmilieus und
- ER_q die Quanten-Emissionsrate ($[Quanta/h]$), die für die spezifische Krankheit/Virus charakteristisch ist.

Die Abreicherungsrate des Bio-Aerosols ($IVRR$) ergibt sich aus der Summe von drei Beiträgen /YAN 11/:

- die Luftaustauschrate (AER) durch Belüftung
- die Partikelablagerung auf Oberflächen (k) (Gravitationsablagerung)
- die Virusinaktivierung (λ)

$$IVRR = AER + k + \lambda \quad [h^{-1}] \tag{5.16}$$

Die von Buonanno et al. verwendeten Daten für die Ablagerungsrate, als Verhältnis zwischen der Absetzgeschwindigkeit der Partikel (etwa 1.0×10^{-4} $[m\,s^{-1}]$) und der Höhe der Emissionsquelle (1,5 [m]) belief sich auf k = 0.24 $[h^{-1}]$. Die virale Inaktivierung wurde auf der Grundlage der von van Doremalen et al. /VAN 20/ ermittelten Halbwertszeit von SARSCoV-2 (1,1$[h]$) bewertet, so dass sich für λ ein Wert von 0,63 $[h^{-1}]$ ergab.

5.2.1 Grenzwertbetrachtung

Die Gleichung 5.15 für die Quantenkonzentration $n(t)$ konvergiert im zeitlichen Limes ($t \to \infty$) gegen den Grenzwert 5.17. Dieser Wert stellt das dynamische Gleichgewicht aus Bio-Aerosol-Anreicherung (ER_q) und Abreicherung ($IVVR$) in einem Raum der Größe V dar.

$$\lim_{t\to\infty} n(t) = \frac{ER_q \cdot I}{IVRR \cdot V} \; [\frac{1}{m^3}] \tag{5.17}$$

Für den Sonderfall, dass die Abreicherungsrate $IVVR$ in Gleichung 5.15 im Limes gegen Null strebt $IVVR \to 0$, ergibt sich für die Quantenkonzentration $n(t)$ eine monoton steigende Funktion (5.18), so dass keine Konvergenz gegen ein dynamisches Gleichgewicht in diesem Fall besteht.

$$\lim_{IVVR\to 0} n(t) = \frac{n_0}{V} + \frac{ER_q \cdot I}{V} \cdot t \; [\frac{1}{m^3}] \tag{5.18}$$

5.2.2 Vereinfachende Annahmen

Die Gleichung 5.15 wurde unter Berücksichtigung der folgenden vereinfachenden Annahmen abgeleitet:

- Die Quanten-Emissionsrate ER_q wird für den simulierten Zeitraum als konstant angesehen.
- Die latente Periode der Krankheit (mehrere Tage) ist länger als die Zeitskala des Modells (einige Stunden).
- Die Tropfen sind sofort und gleichmäßig im Raum verteilt.

Annahme der Durchmischung

Bei der Epidemie-Modellierung, bei der das Ziel die Untersuchung der Krankheitsausbreitung in der Bevölkerung ist, ist es nahezu unmöglich, die exakten Geometrien, die Belüftung und die Standorte der infektiösen Quellen in jeder Mikroumgebung eindeutig zu spezifizieren. Daher ist die Annahme der **Durchmischung** im Allgemeinen vernünftiger als Hypothesen über spezifische Umgebungen und Szenarien, wie sie in CFD-Ansätzen verfolgt werden, da die Ergebnisse auf statistischer Grundlage interpretiert werden müssen /TOG 10/. Die Durchmischungsannahme wird durch die von Lindsley et al. /LIN 12/ durchgeführte Studie zur Ausbreitung und Exposition in einem simulierten medizinischen Untersuchungsraum unterstützt. Hierin wurde u. a. ermittelt, dass sich durch Husten erzeugte Aerosolpartikel schnell im ganzen Raum verbreiten und dass eine anwesende Person innerhalb von fünf Minuten überall im Raum potenziell gefährlichen Aerosolen ausgesetzt ist.

5.2.3 Infektionsrisiko $\boldsymbol{R(T)}$

Die nachfolgend betrachtete Funktion für das Infektionsrisiko $R(T)$ stellt eine Verbindung zwischen der infizierten und nicht-infizierten Person über den untersuchten Raum her, in dem sich beide über einen gewissen Zeitraum aufhalten. Hierbei ist die Betrachtung eines zeitgleichen Aufenthalts beider Personen nicht zwingend notwendig, da die freigesetzten Bio-Aerosole auch nach Verlassen der infizierten Person über einen längeren Zeitraum in der Raumluft erhalten bleiben. Somit ergibt sich für jede Person jeweils ein unabhängiges Zeitfenster $ZF_{1,2}$, welches wesentlich den Wert resultierenden Infektionsrisikos für die nicht-infizierte Person bestimmt (ZF_1: Zeitraum in dem sich die infizierte Person im betrachteten Raum aufhält, ZF_2: Zeitraum, in dem sich die nicht-infizierte

Person im Raum aufhält). Das hier betrachtete Modell zur Quantifizierung des durch die Raumluft übertragenen Infektionsrisikos basiert auf dem früheren Modell von Wells und Riley /RIL 78/ und wurden von Gammaitoni et al. /GAM 97/ weiterentwickelt. Dieses Modell wurde bereits in früheren Arbeiten zur Abschätzung des Infektionsrisikos von anderen Krankheiten (z. B. Influenza, SARS, Tuberkulose, Rhinovirus) in verschiedenen Innenräumen wie Flugzeugen /WAG 09/, Autos /KNI 11/ und Krankenhäusern erfolgreich eingesetzt. Zur Bestimmung des Infektionsrisikos $R(T)$ als Funktion der Expositionszeit (t) von empfänglichen Personen wird die Quantenkonzentration $n(t)$ über die Zeit durch die Wells-Riley-Gleichung /RIL 78/ integriert:

$$R(T) = \left(1 - e^{-IR \int_0^T n(t)dt} \right) [\%] \qquad 5.19$$

Hierbei bezeichnet IR die Inhalationsrate der exponierten, d. h. nicht-infizierten Person (die wiederum durch das Aktivitätsniveau dieser Person beeinflusst wird) und *T* die Gesamtexpositionszeit ist. $R(T)$ beschreibt das Infektionsrisiko einer Person, die über einen Zeitraum T den belasteten Aerosolen ausgesetzt ist. Aus einer Grenzwertbetrachtung für den Exponenten der Gleichung 5.19 folgt, dass eine Infektionswahrscheinlichkeit von 63 % erreicht wird, wenn der exponentielle Term in 5.19 einen Wert von 1 annimmt /SZE 10/.

$$\lim_{x \to 1}(1 - e^{-x}) = 0.63 \qquad 5.20$$

6 COCOSYS-Verifizierungsrechnung anhand eines Apotheken-Szenarios

Für die COCOSYS-Vergleichsrechnung wurde das exemplarische Fallbeispiel aus einer italienischen Apotheke (Raumvolumen $V = 75\ [m^3]$) von Buonanno, Stabile, et al., 2020 /BUO 20b/ verwendet, dass die für zwei theoretischen Expositionsszenarien (A: vor dem Lockdown, B: nach dem Lockdown) die potentiellen Infektionsrisiken berechnet.

Szenario A: (vor dem Lockdown)

Beim Szenario A wurden für die Apotheke keine besonderen Maßnahmen betrachtet, d. h. die Menschen betreten den Innenraum und stellen sich in einer Schlange an, was häufig zu einer überfüllten Umgebung führt. Zusätzlich wurde angenommen, dass aufgrund fehlender technischer Voraussetzungen, nur eine natürliche Belüftung mit einer konstanten Luftwechselrate von $AER = 0.2\ [h^{-1}]$ (5.16) in der Apotheke vorherrscht.

Szenario B: (nach dem Lockdown)

Für das Szenario B wurden typische Maßnahmen berücksichtigt, wie verringertes Personal, geringere Anzahl an Kunden innerhalb der Apotheke, Kunden standen außerhalb der Apotheke an und die Türen wurden offengehalten. In Folge der getroffenen Maßnahmen wurde bei diesem Szenario von einer erhöhten Luftwechselrate von $AER = 2.2\ [h^{-1}]$ (offenstehende Tür) ausgegangen.

Bei beiden Szenarien (A, B) wurde davon ausgegangen, dass eine infizierte Person als erster Kunde die Apotheke betritt und diese anschließend nach $10\ [min]$ wieder verlässt. Während der Aufenthaltszeit werden in das Raumvolumen der Apotheke virenhaltige Bio-Aerosole eingetragen, die bis zu drei Stunden nach der Aerosolfreisetzung in der Luft lebensfähig d. h. virulent bleiben (mit einer Halbwertszeit von 1,1$[h]$, siehe Tab. 5.4) und somit für das Personal und nachfolgende Kunden eine potentielles Infektionsrisiko im Weiteren darstellen /VAN 19/.

Für die Form der Aerosolfreisetzung durch infizierte Person wurden die Aktivitäten „stimmhaftes Zählen“ in Kombination mit „unmodulierter Vokalisierung“ (siehe Tab. 5.2, “Mixed 1+3“) als realistisch angenommen, so dass auf Grundlage der Daten aus Tab. 3.1 entsprechende Werte für den geometrischen mittleren Durchmesser d_g (4.5) und die geometrische Standardabweichung σ_g (5.6) für die Verteilfunktion ermitteln lassen. Für

die infizierte Person wurde weiterhin ein durchschnittlicher Atemvolumenstrom IR von $1.38\ \left[\frac{m^3}{h}\right]$ zugrunde gelegt (siehe Tab. 5.3, "leichte Übung"). Aus der angenommenen Aktivität und dem Belastungszustand lassen für die freigesetzten Bio-Aerosole-Tropfen eine Volumenrate (5.11) $VR = 1.968\ [pL/s]$ und Massenrate (5.12) $MR = 1.965 \times 10^{-12}\ [kg/s]$ als COCOSYS-Eingangsgrößen ermitteln.

Unter Verwendung der Viruskonzentration c_{virus} im Bio-Aerosol-Tropfen und der Virusmasse m_{virus} aus Tab. 5.4 kann mit Gleichung 5.14 die resultierende Virionen-Massenrate $MR_{virus} = 1.968 \times 10^{-18}\ [kg/s]$ bestimmt werden. Hierbei wurde der Exponent $m = 3$ (siehe Tab. 5.4) und der Konversionsfaktor $c_i = 0.02$ (5.10) im Rahmen dieser Vergleichsrechnung von Buonanno et al. /BUO 20b/ übernommen. Der hier errechnete Wert für die Quantenemissionsrate ER_q von $141.75\ [h^{-1}]$ weicht nur geringfügig von dem durch Buonanno et al. ermittelten Wert ($142\ [h^{-1}]$) ab und lässt sich auf Unsicherheiten in den charakteristischen Größen für den SARS-CoV-2-Virus (siehe Tab. 5.4) zurückführen.

$$ER_q = c_i \cdot c_{virus} \cdot\ VR\ [h^{-1}\ ] \qquad 6.21$$

Die zeitliche Entwicklung der Quantenkonzentration $n(t)$ im betrachteten Apothekenraum V wird durch die Gleichung 5.15 beschrieben.

Im Sonderfall einer fehlenden Abreicherungsrate ($IVVR \to 0$) ist keine Konvergenz in ein dynamisches Gleichgewicht für der Quantenkonzentration $n_{IVVR \to 0}(t)$ möglich, so dass ein konstanter Anstieg im Zeitverlauf besteht (5.18).

$$n_{IVVR \to 0}(t) = \frac{ER_q}{V} \cdot t\ [m^{-3}\ ] \qquad 6.22$$

Für das vorliegende Apotheken-Szenario ergibt sich in Gleichung 5.15 ein Wert von $n_0 = 0$, da ausgeschlossen wird, dass vor der infizierten Person eine weitere Person virenhaltige Bio-Aerosole in die Raumluft der Apotheke eingetragen hat. Weiterhin folgt $I = 1$, da zur selben Zeit nur eine infizierte Person im Raum anwesend ist.

Der allgemeine Fall ($IVVR \neq 0$) ist im zeitlichen Limes durch ein dynamisches Gleichgewicht für die Quantenkonzentration $n(t)$ gekennzeichnet. Dieser Fall wird relevant, wenn z. B. angenommen wird, dass statt eines Kunden sich ein infizierter Apothekenan-

gestellter im Apothekenraum befindet oder wie im Kapitel 7 betrachteten Fall, bei dem sich eine infizierte Person über einen längeren Zeitraum in einem Patientenzimmer aufhält.

In Abb. 6.1 ist der Verlauf der analytischen Lösung $n(t)$ für diese Situation und die beiden Szenarien (A, B) dargestellt (Szenario A: $IVVR = 1.07\ [h^{-1}]$ bei Luftwechsel AER = $0.2\ [h^{-1}]$, Szenario B: $IVVR = 3.07\ [h^{-1}]$ bei Luftwechsel AER = $2.2\ [h^{-1}]$). Die analytische Lösung wurde unter Verwendung der Gleichung 5.15 und o. g. Randbedingungen erstellt. Hierbei wurde angenommen, dass der infizierte Angestellte über einen Zeitraum von $500\ [min]$ ($8.33\ [h]$) anwesend ist. Nach dem Verlassen bei $500\ [min]$ sinkt die Quantenkonzentration in Folge der Abreicherung $IVVR$ im Apothekenraum wieder ab. Die Grenzwerte im dynamischen Gleichgewicht lassen sich aus der Gleichung 5.17 bestimmen.

Szenario A: $\lim_{t\to\infty} n(t) = 1.766\ [m^{-3}]$

Szenario B: $\lim_{t\to\infty} n(t) = 0.6156\ [m^{-3}]$

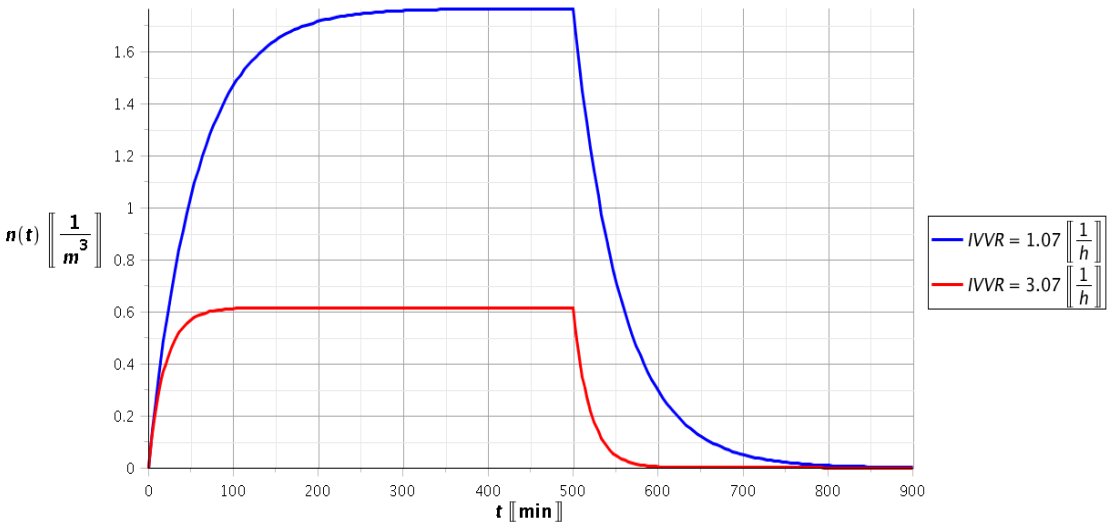


Abb. 6.1 Konvergenz gegen dynamisches Gleichgewicht mittels analytischer Lösung

6.1 Anfangsdaten und Übertragung nach COCOSYS

Die charakteristischen Eigenschaften von SARS-CoV-2-Viren sind in Tab. 5.4 aufgeführt. Für die Simulation mit COCOSYS müssen diese als Aerosolkomponenten berücksichtigt werden. Dabei wurden die Aerosol-Größenklassen in COCOSYS für einen Bereich: $[d_{min}, d_{max}]$ = $[0.01\ \mu m\ , 100\ \mu m]$ unter dem KEYWORD AEROSOL verwendet (DIAM1, DIAM2).

Korrekturfaktor

Bei der Simulation des Virus-Aerosols ist zu beachten, dass die Massen so gering sind, dass innerhalb von COCOSYS mit einem Korrekturfaktor VIR_FAC gearbeitet werden muss, da COCOSYS Aerosolmassen > $10^{-18}\ [kg]$. benötigt. Dieser Korrekturfaktor muss bei der Auswertung und Quantenberechnung wieder herausgerechnet werden. Außerdem ist zu beachten, dass die Virusmasse unter Verwendung der Korrektur immer noch um Größenordnungen kleiner ist als die Tröpfchenmasse, da diese Menge sonst die Aerosoleigenschaften beeinflusst. Wenn sie jedoch Größenordnungen kleiner ist, kann die Viruskomponente als eine Art Tracer verstanden werden. In den COCOSYS-Rechnungen werden die Tröpfchen mit einer Aerosolkomponente WATER berücksichtigt, für die es experimentelle Untersuchungen gibt /MOR 09/. Die Bio-Aerosol-Komponente VIRUS wird zusätzlich mit einer deutlich kleineren Masse eingespeist, da dieses Bio-Aerosol in den Tröpfchen enthalten ist. Daher muss es auch mit derselben Partikelgrößenverteilung eingespeist werden wie die Tröpfchen. Das geschieht unter der Annahme, dass die Virion-Anzahl pro Volumen in den Tröpfchen dieselbe ist, wie die im Speichel einer infizierten Person. Die VIRUS-Einspeisung geschieht unter Verwendung des oben erläuterten Korrekturfaktors.

Die Annahmen für die Aerosoltröpfchen in der Apothekenrechnung aus Buonanno, Stabile, et al., 2020 /BUO 20b/ basieren auf der experimentellen Untersuchung von Morawska /MOR 09/. Die Tab. 5.1 und Tab. 5.2 geben die zu erwartenden Tröpfchenanzahl pro $[m^3]$ Atemvolumen in Abhängigkeit von der Tröpfchengröße sowie der Aktivität wieder, in der sich die Probanden befunden haben. Aus derselben Quelle /BUO 20b/ sind die, bei verschiedenen körperlichen Aktivitäten angenommenen Atemvolumenraten übernommen worden (siehe Tab. 5.3 und vgl. auch Anhang A.1).

Die Anzahl der freigesetzten Tröpfchen variiert also mit der Art des Ausscheidungsvorgangs – also Atmen, Flüstern, Sprechen, etc. – als auch über einen geänderten Volumenstrom bei unterschiedlichen Aktivitäten. In der Apothekenrechnung ist eine konservative Annahme mit hoher Freisetzung getroffen worden, dass sich die Tröpfchenanzahl aus dem Mittelwert der Fälle für „stimmhaftes Zählen“ und „unmodulierte Vokalisierung“ (siehe Tab. 5.1) zusammensetzt (siehe Abb. 5.1).

Für die Atemvolumenrate der infizierten Person wurde der Wert $1.38\,[m^3/h]$ aus /BUO 20b/ verwendet, der der körperlichen Aktivität einer „Leichte Übung“ bei $ER_q = 142\,[Quanta/h]$ entspricht (siehe Tab. 5.3).

Um die Partikelgrößenverteilung für die COCOSYS-Eingabe zu bestimmen, ist die oben gegebene Anzahlverteilung (siehe Tab. 5.1) aus dem Mittelwert der Fälle „stimmhaftes Zählen“ und „unmodulierte Vokalisierung“ in eine Massenverteilung umgerechnet worden. Für diese ist der Massenmedian und die geometrische Standardabweichung bestimmt worden. In COCOSYS werden diese beiden Werte unter der Annahme einer Log-Normalverteilung (siehe Anhang A.5) der Tröpfchenmassen als Eingabegröße vorgegeben. Die für diesen Fall verwendeten Aerosolparameter sind in Tab. 6.1 aufgelistet.

Der so ermittelte Massenmedian mit zugehöriger geometrischer Standardabweichung ist durch eine Log-Normalverteilung angepasst worden, die COCOSYS als Eingabe dient. Ein Vergleich der lognormalen Annäherung an die experimentellen Zahlen ist in Abb. 6.2 dargestellt.

Tab. 6.1 Aerosolparameter in Apothekenrechnung nach /BUO 20b/

Quantität	Wert
mittlerer geometrischer Massendurchmesser	$4.23 \times 10^{-6}\,[m]$
Geometrische Standardabweichung	1.50797
Tropfenvolumen Rate	$1.97 \times 10^{-15}[m^3/s]$
Virus-Anzahlrate	$1.97\,[s^{-1}]$
Quantenrate	$142\,[Quanta/h]$
Tropfen-Massenrate	$1.97 \times 10^{-12}[kg/s]$
Virus-Massenrate	$1.97 \times 10^{-18}[kg/s]$

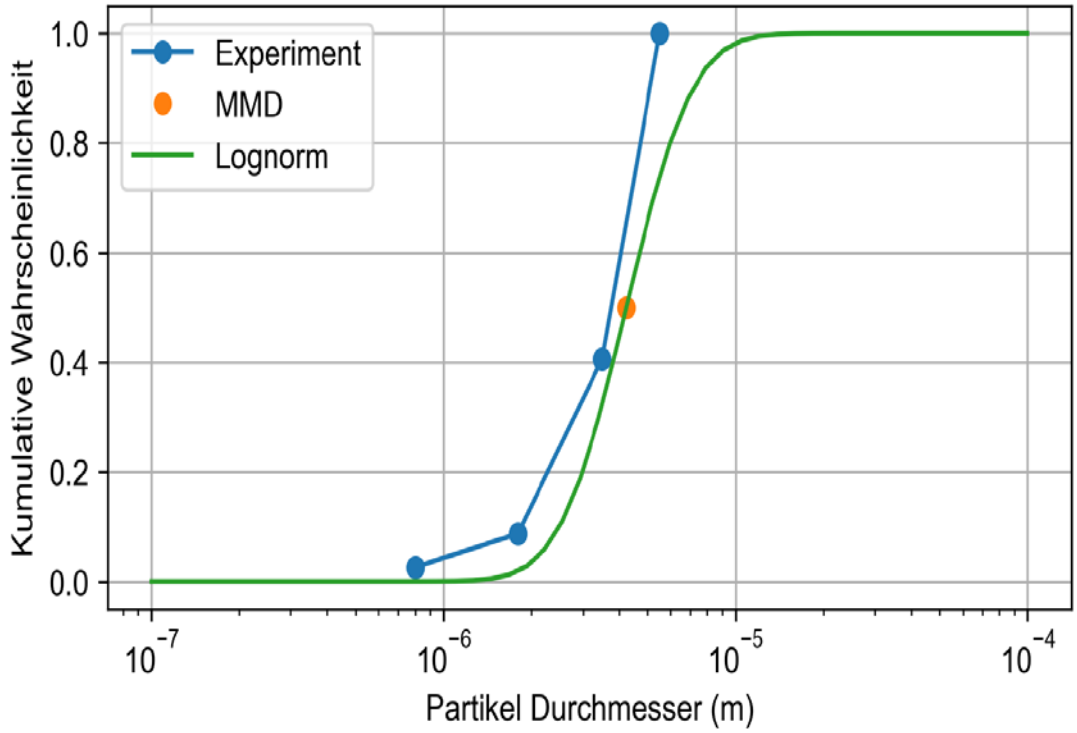


Abb. 6.2 Massenverteilung Apotheke

Die Gesamtmasse des eingespeisten Tröpfchenaerosols lässt sich mit der Dichte von Wasser (5.13) über die Masse der Tröpfchen in den einzelnen Größenklassen aufsummieren.

Die Anzahl der Virionen innerhalb eines Tröpfchens lässt sich über die Anzahl der Virionen im Speichel c_v bestimmen. Das ist ein Wert mit einer großen Unsicherheit. Für die Apothekenrechnung werden 10^9 Virionen pro ml Speichel unterstellt, d. h. $c_v = 10^9\ [RNA - Kopien/\ mL]$. Mit der Masse eines einzelnen Virions von $10^{-18}\ [kg]$ (siehe Tab. 5.4) lässt sich die einzuspeisende Bio-Aerosolmasse berechnen. Nach Tab. 6.1 beträgt die zu verwendende Tröpfcheneinspeiserate $1.97 \times 10^{-12}[\mathrm{kg/s}]$ und die Einspeiserate für das Bio-Aerosol $1.97 \times 10^{-18}[\mathrm{kg/s}]$.

Der Faktor c_i beschreibt, wieviele Virionen benötigt werden, um eine Infektion zu verursachen, was der Größe eines Quantas entspricht (siehe Abschnitt 5.1). Für die Apothekenrechnung wird der Wert von 1/50=0,02 $\left[\frac{Quanta}{Virion}\right]$ /BUO 20b/ übernommen. Das heißt 50 Virionen sind nötig, damit eine Person sich mit einer Wahrscheinlichkeit von 63 % infiziert, falls diese Menge einatmet wird. Die in dem Skript berechnete Rate entspricht den in /BUO 20b/ angegebenen 142 $[Quanta/h]$.

6.2 Reproduktion der Ergebnisse

In den nachfolgenden Abschnitten 6.2.1 und 6.2.2 werden die Simulationsergebnisse aus der COCOSYS-Modellierung diskutiert. Hierbei sind zwei Modellierungsansätze für die Reproduktion der Ergebnisse aus Buonanno et al. /BUO 20a/ betrachtet worden.

Die Ergebnisse in Abschnitt 6.2.1 wurden unter Vernachlässigung von COCOSYS-Strukturkomponenten erstellt, um dem analytischen Ansatz aus Gleichung 5.15 zu entsprechen. Dieser Ansatz basiert auf der vereinfachenden Annahme, dass die Partikelablagerung auf Oberflächen k (5.16) im zeitlichen Verlauf konstant ist und berücksichtigt somit nicht den Einfluss des dynamischen Partikelspektrums auf das zeitliche Sedimentationsverhalten der Partikel.

In Abschnitt 6.2.2 sind die Strukturkomponenten im COCOSYS-Modellierungsansatz berücksichtigt, so dass die Simulationsergebnisse das physikalische Sedimentationsverhalten der Aerosole realistischer wiedergeben werden.

6.2.1 Simulation ohne COCOSYS-Strukturen

Für die Reproduktion der Ergebnisse werden bei diesen COCOSYS-Simulationen die vereinfachende Annahme aus Buonanno et al. /BUO 20a/ bzgl. der Partikelsedimentation durch die Vernachlässigung von COCOSYS-Strukturkomponenten in der Modellierung beschrieben. Die zeitliche Abreicherungsraten $IVVR$ (5.16) (Szenario A: 1.07 $[h^{-1}]$, Szenario B $[3.07\ [h^{-1}]]$) werden in der COCOSYS-Modellierung ausschließlich über den Parameter der Luftwechselzahl erfasst. Der Wert für den Virus-Korrekturfaktor VIR_FAC wurde auf 1 gesetzt. Die Ergebnisse aus den COCOSYS-Simulationen (A, B) und dem analytischen Ansatz, Gleichung 5.15 für Quantenkonzentration $n(t)$ werden in Abb. 6.3 dargestellt und zeigen im zeitlichen Verlauf eine hohe Übereinstimmung.

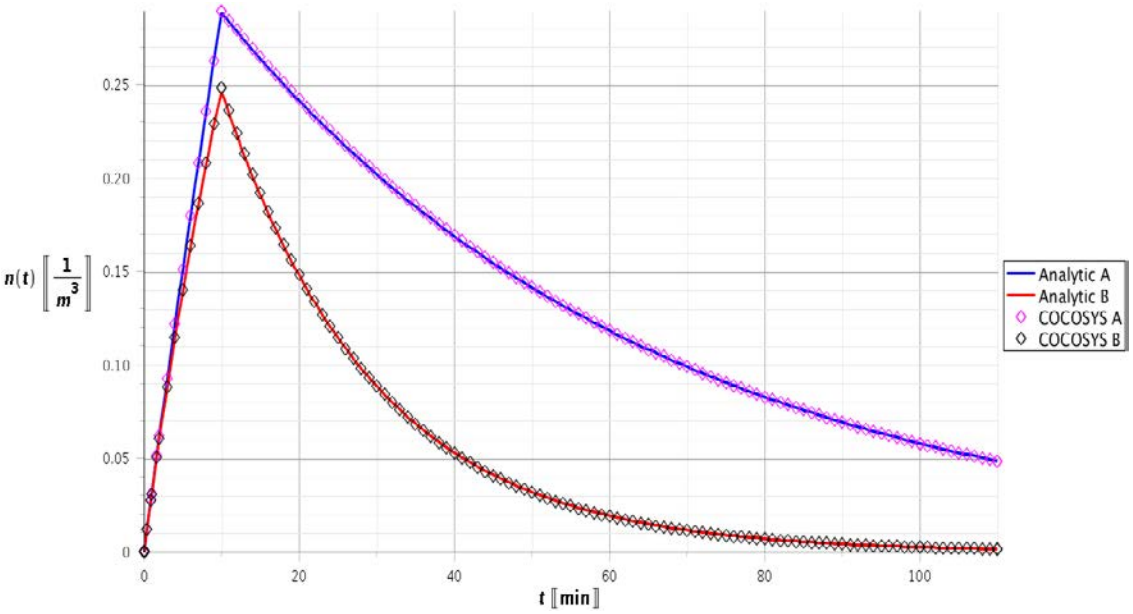


Abb. 6.3 COCOSYS-Simulation und analytische Lösung für die Quantenkonzentration

Das zeitliche Infektionsrisiko $R(T)$ (5.19) nicht-infizierter Kunden wurde unter der Annahme errechnet, dass diese den Apothekenraum für $10\ [min]$ betreten und in Abhängigkeit vom Eintrittszeitpunkt und der vorherrschenden Luftwechselrate (Szenario A, B) einer zeitabhängigen Bio-Aerosolkonzentration ausgesetzt werden. Die analytische Lösung und die COCOSYS-Simulationsergebnisse werden in Abb. 6.4 dargestellt. Für den Vergleich der Ergebnisse aus den COCOSYS-Simulationen und den von Buonanno et al. /BUO 20a/ durchgeführten Rechnungen ist zusätzlich Abb. 6.5 aufgenommen worden. Der Vergleich beider Ergebnisse zeigt, dass das Infektionsrisiko $R(T)$ in der COCOSYS-Rechnung etwas höhere Werte aufweist als die Buonanno et al.-Rechnung. Die Ergebnisse für die Quantenkonzentration $n(t)$ in beiden Rechnungen weisen hingegen eine hohe Übereinstimmung auf. Durch die Berücksichtigung der vereinfachenden Annahmen in der COCOSYS-Modellierung ist somit eine hohe Übereinstimmung mit den Buonanno et al.-Ergebnissen möglich.

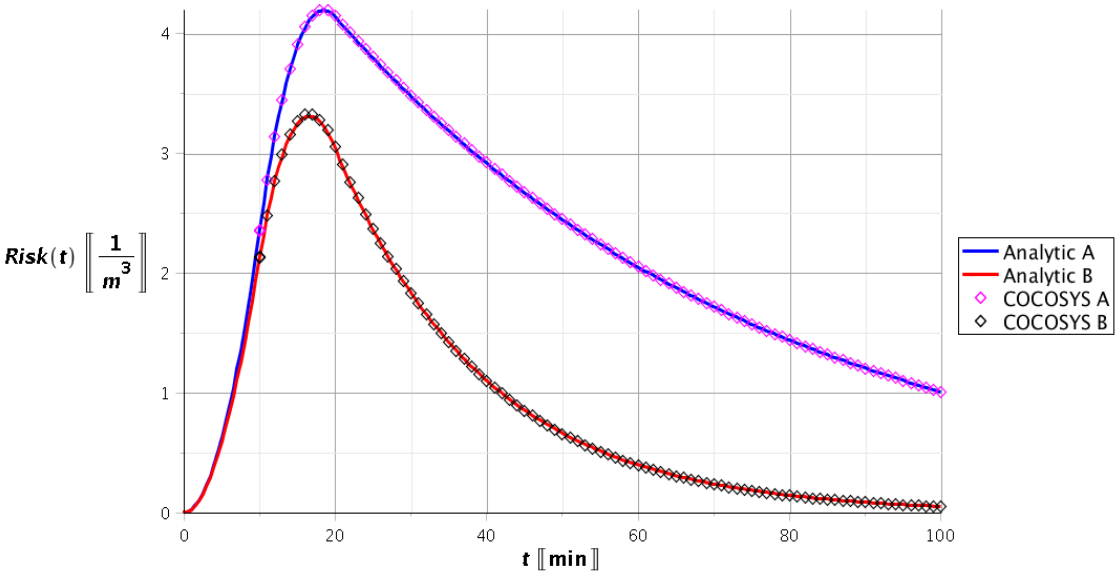


Abb. 6.4 COCOSYS-Simulation und analytische Lösung für die Infektionsrisiken $\boldsymbol{R(T)}$

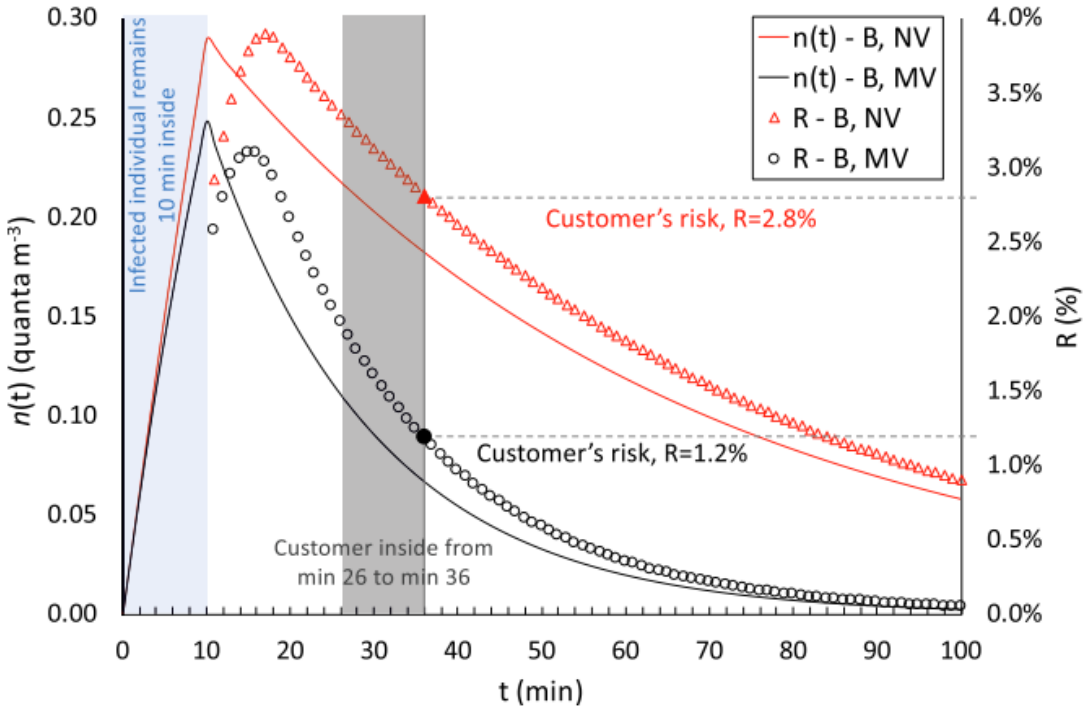


Abb. 6.5 Ergebnis der Apothekenrechnung aus /BUO 20b/

Berechnung der Quantenkonzentrationen $n(t)$ und der Infektionsrisiken R in der Apothekenumgebung für die Expositionsszenarien vor dem Verschließen (B) unter natürlichen (NV) und maschinellen (MV) Lüftungsbedingungen. Die Grafik zeigt den Eintritt des infizierten Individuums (erste zehn Minuten) und das Risiko für einen Kunden, der bei Minute 26 in die Mikroumgebung eintritt und für zehn Minuten darin verbleibt. Die Trends sind für bis zu 100 [min] dargestellt, um die Spitzen der $n(t)$- und R-Werte hervorzuheben.

6.2.2 Simulation mit COCOSYS-Strukturen

Zunächst wird eine Rechnung mit COCOSYS gezeigt, die die Ergebnisse der Apothekenrechnung in /BUO 20b/ reproduzieren soll. Dabei wird eine Verdampfung der Wassertröpfchen weitgehend unterdrückt. Das geschieht dadurch, dass der Virus-Korrekturfaktor auf $VIR_FAC = 10^6$ gesetzt wird. Dadurch ist die Viruseinspeiserate im selben Bereich wie die Tröpfcheneinspeiserate von 1.97×10^{-12} [kg/s], wodurch jedes Partikel in etwa aus derselben Masse Wasser und VIRUS besteht. Damit verdampft immer nur das halbe Volumen der Tröpfchen und ein Verschub zu kleineren Partikelgrößen wird verhindert, wodurch relativ schwere Partikel in der Luft verbleiben, die schneller sedimentieren.

Mit COCOSYS lässt sich die Aerosolkonzentration der VIRUS-Komponente über der Zeit berechnen. Diese lässt sich über oben beschriebene Methoden in eine Quantenkonzentration umrechnen. Diese ist für den Apothekenfall in folgender Grafik dargestellt. Nach dem Eintreten einer infizierten Person bei 0 min baut sich die Quantenkonzentration von $0\ [\mathrm{Quanta}/m^3]$ bis zum Verlassen bei zehn Minuten auf. Im Falle mit Luftwechselzahl $0.2\ [h^{-1}]$ beträgt der Maximalwert 0.28 $[\mathrm{Quanta}/m^3]$, im Fall von $2.2\ [h^{-1}]$ etwa 0.24 $[\mathrm{Quanta}/m^3]$. Mit der höheren Luftwechselzahl wird beinahe das gesamte Bio-Aerosol nach 120 $[min]$ herausgeleitet, während im Fall der schwächeren Lüftung noch 0.1 $[\mathrm{Quanta}/m^3]$ übrigbleiben. Die gestrichelten Kurven zeigen die Vergleiche der Rechnungen mit vorgegebenen Luftwechselraten für die Sedimentation und die Inaktivierung (Halbwertzeit) der Viren, wie sie in Abschnitt 6.2.1 berechnet worden sind. In beiden Fällen bleibt das Aerosol länger in der Luft, wenn die Berechnung der Sedimentation mit COCOSYS intern erfolgt. Das liegt daran, dass die Inaktivierung innerhalb von COCOSYS nicht modelliert ist. Der Effekt ist bei der niedrigeren Luftwechselzahl von $0.2\ [h^{-1}]$ deutlicher zu erkennen, da diese bei schwacher Lüftung relativ gering ist im Vergleich zur Inaktivierung des Virusmaterials. Dem hingegen ist die Lüftung im Fall mit der höheren Luftwechselzahl immer dominierend im Vergleich zur Inaktivierung $\lambda = 0.66\ [h^{-1}]$ (siehe Abschnitt 5.2).

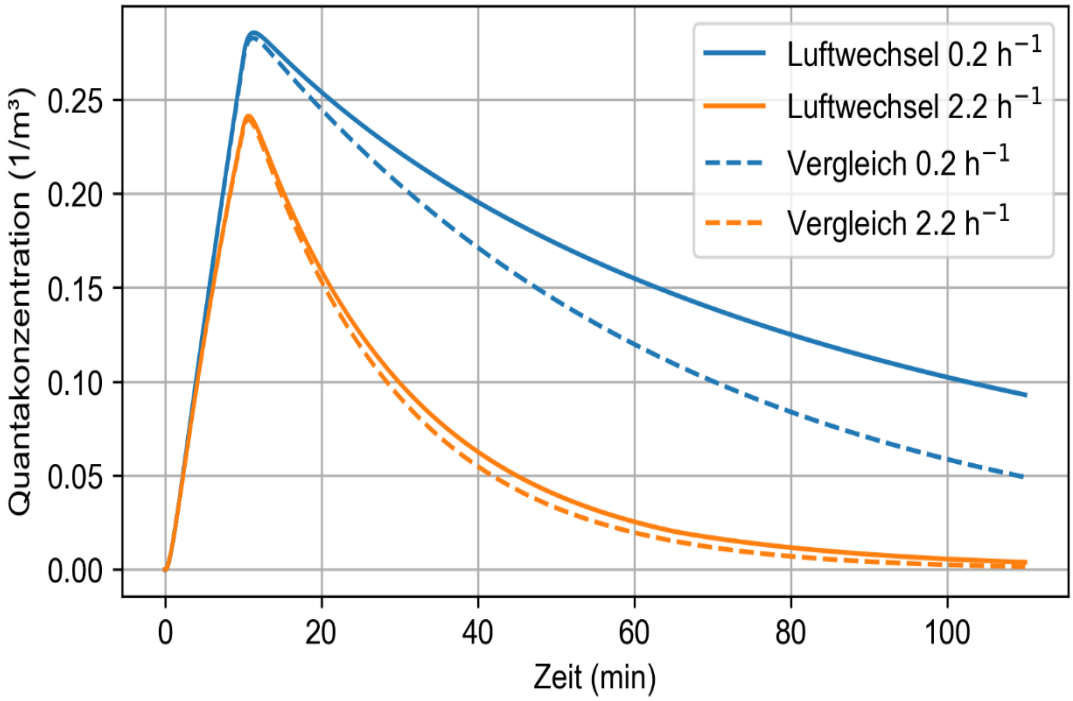


Abb. 6.6 Quantenkonzentration

Aus diesen Daten lässt sich mit der Inhalationsrate das potenzielle Infektionsrisiko einer nachfolgend eintretenden Person berechnen. In der Abb. 6.7 ist das für beide Luftwechselzahlen für Personen mit zehn Minuten Aufenthaltszeit in der Apotheke geschehen. Die Kurven geben jeweils das Risiko bei unterschiedlichen Luftwechselraten für eine Person an, die zu diesem Zeitpunkt die Apotheke nach 10-minütigem Aufenthalt wieder verlässt. Der erste Wert bei zehn Minuten bezieht sich somit auf eine Person, die mit der infizierten Person die Apotheke betreten und nach zehn Minuten wieder verlassen hat. Diese Person hat nicht das höchste Risiko, da sich die Konzentration der Bio-Aerosole erst aufbauen muss, und diese Person einen Mittelwert aus $0\ [m^{-3}]$ und dem Maximalwert nach zehn Minuten aufnimmt. Dem hingegen nimmt eine Person, die erst nach 18 Minuten die Apotheke verlässt, eine viel höhere durchschnittliche Quantenkonzentration auf und hat mit etwa 4,2 % das höchste Infektionsrisiko im Szenario A und etwa 3,4 % im Szenario B. Analog zur Quantenkonzentration ist auch beim Infektionsrisiko die Abweichung zu den Rechnungen „Vergleich“ in Abschnitt 6.2.1 bei geringer Lüftung ($0.2\ [h^{-1}]$) größer als bei $2.2\ [h^{-1}]$, da bei hoher Luftwechselrate in beiden Fällen die Lüftung dominiert.

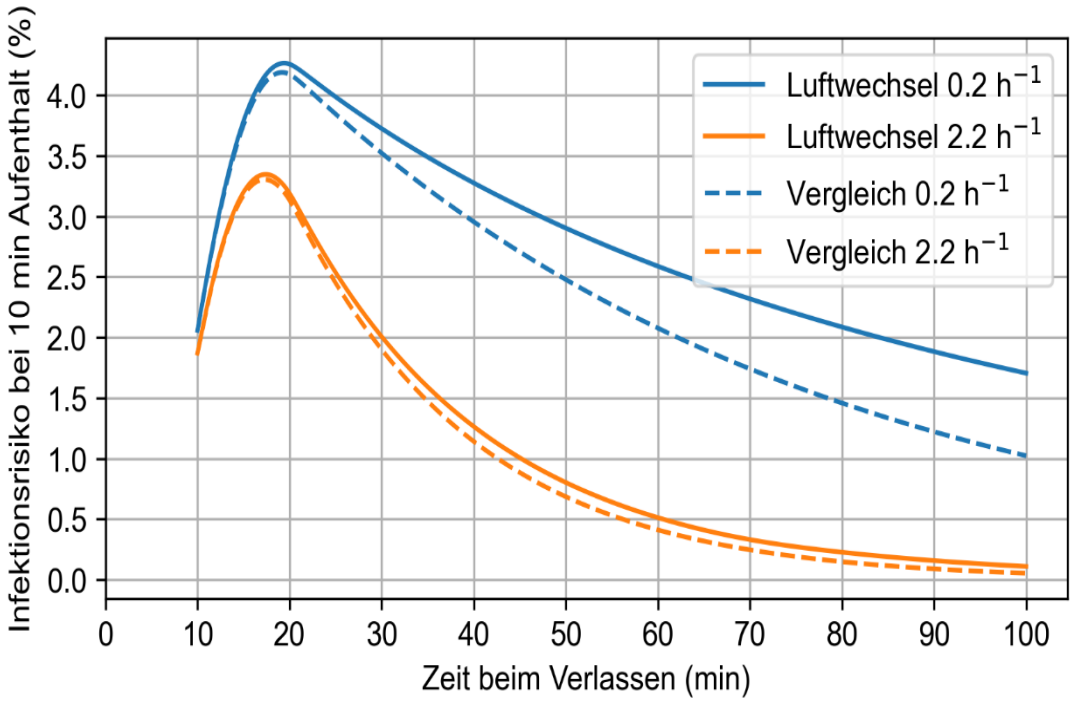


Abb. 6.7 Potenzielles Infektionsrisiko bei zehn Minuten Aufenthalt

Im Vergleich zu Abb. 6.5 /BUO 20b/ sehen die Kurven sehr ähnlich aus. Jedoch ist der Abfall zum Ende hin nicht so stark. Das liegt daran, dass COCOSYS keine Halbwertzeit der Viren berechnet.

Rechnung mit Berücksichtigung von Verdampfung

Um eine realistischere Beschreibung des Aerosolverhaltens zu bestimmen wurde eine weitere Rechnung unter der Berücksichtigung von Verdampfung an den Aerosolpartikeln durchgeführt. Dadurch verschiebt sich das Partikelgrößenspektrum mit der Zeit zu kleineren Durchmessern.

Zunächst wird für diesen Fall wieder die berechnete Quantenkonzentration diskutiert. Während für die höhere Luftwechselrate die Kurve sehr ähnlich aussieht, ist bei der kleineren Luftwechselrate eine deutlich geringere Abnahme zu beobachten mit immer noch mehr als $0{,}2\ [Quanta/m^3]$ am Ende der Rechnung, wohingegen in der ersten Rechnung der Endwert kleiner als $0{,}1\ [Quanta/m^3]$ war. Dieses lässt sich dadurch verstehen, dass bei der hohen Luftwechselrate das Ausströmen des Aerosols dominierend ist, während bei der kleineren Rate die Ablagerung einen größeren Anteil hat. Verringert sich die Sedimentation durch die Verschiebung des Partikelspektrums zu kleineren Partikeln, so ist eine deutliche Verringerung der Abfallrate zu beobachten. Auch hier ist der Vergleich mit den Ergebnissen aus Abschnitt 6.2.1 in den gestrichelten Kurven dargestellt. Bei

geringer Lüftung ist der Unterschied hier sehr deutlich. Bei Berücksichtigung der Verdampfung sind nach zwei Stunden mehr als viermal so viele Viren luftgetragen wie im Fall mit vorgegebenen Reduktionen für die Sedimentation und die Inaktivierung über zusätzliche Luftwechselraten. Auch in diesem Fall ist keine Inaktivierung der Viren durch COCOSYS berücksichtigt. Dabei wird deutlich, dass unter Inklusion von Verdampfungsprozessen die Virusaerosole sehr viel länger luftgetragen bleiben. Für den Fall einer stärkeren Lüftung $2.2\ [h^{-1}]$ ist der Unterschied nicht mehr dominant.

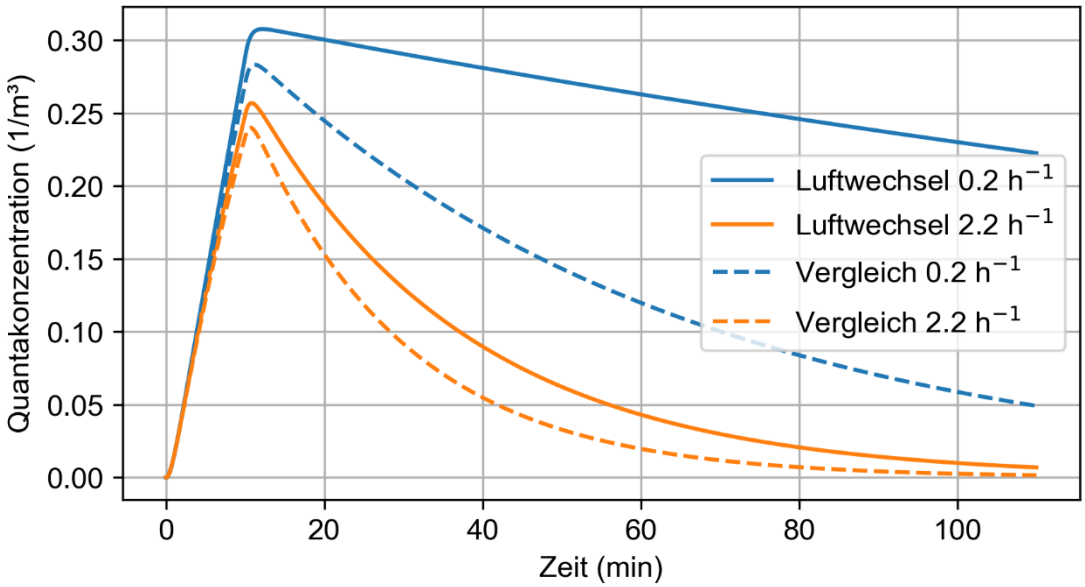


Abb. 6.8 Quantenkonzentration mit Verdampfung der Tröpfchen

Dieses Verhalten lässt sich auch bei der Berechnung des Infektionsrisikos beobachten. Während die Kurve mit der höheren Luftwechselzahl beinahe gleichgeblieben ist, erhöht sich das Infektionsrisiko bei schwacher Lüftung deutlich auf immer noch mehr als 3,5 % am Ende der Rechnung im Vergleich zu kleiner 2 % in der Rechnung ohne Verdampfung. Das liegt daran, dass die kleineren Partikel länger luftgetragen bleiben, da sie weniger stark sedimentieren. Damit bleibt auch längere Zeit nach dem Verlassen der infizierten Person das Infektionsrisiko erhöht. Dieser Effekt wird im nächsten Abschnitt näher beleuchtet. Die etwa gleichbleibende Kurve für die höhere Luftwechselrate zeigt die hohe Bedeutung, die eine ausreichende Lüftung für die Verringerung der Viruskonzentrationen in geschlossenen Räumen spielt. Der Vergleich mit den Kurven aus Abschnitt 6.2.1 zeigt auch für das Infektionsrisiko einen großen Unterschied bei nur geringer Lüftung ($0.2\ [h^{-1}]$).

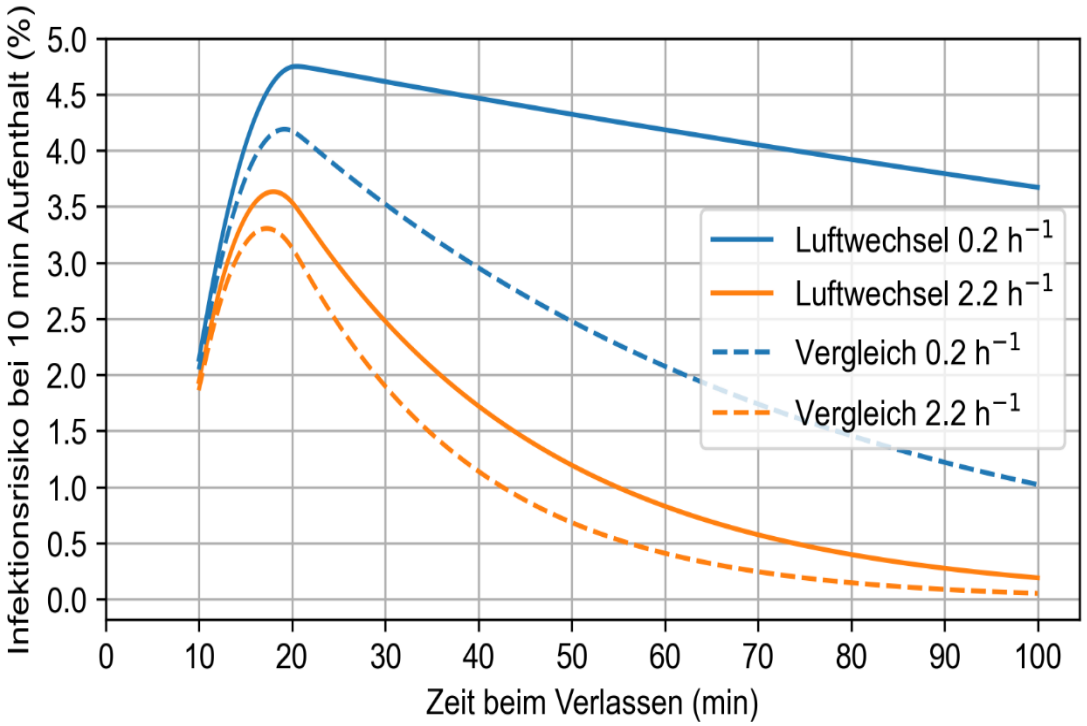


Abb. 6.9 Risiko bei zehn Minuten Aufenthalt mit Verdampfung der Tröpfchen

6.2.3 Vergleich des Partikelspektrums

Im Folgenden soll das unterschiedliche Verhalten des Partikelspektrums der beiden Rechnungen anhand der Partikelgrößenverteilung der VIRUS-Aerosolkomponente erläutert werden. Die beiden Grafiken zeigen die Konzentration der VIRUS-Aerosolkomponente in der Apotheke zu zwei verschiedenen Zeitpunkten; einmal bei 600 [s], wenn die infizierte Person die Apotheke verlässt und einmal zu einem späteren Zeitpunkt bei 1050 [s]. T8.1 bezeichnet dabei die Rechnung mit der kleineren Luftwechselrate von $0{,}2\ [h^{-1}]$ und T8.2 die Rechnung mit der höheren Luftwechselrate von $2{,}2\ [h^{-1}]$.

Im ersten Fall ohne Verdampfung stellt sich zum Zeitpunkt 600 [s], d. h., wenn die infizierte Person die Apotheke verlässt, ein Maximum der Verteilung bei etwa 2 - 3 $[\mu m]$ ein. Nach 1050 [s] haben sich die absoluten Werte durch Sedimentation und die Lüftung auf der logarithmischen Skala kaum verringert. Hier ist aber zu sehen, dass sich das Maximum nicht verändert hat. Dadurch bleibt das Virusaerosol an gleichgroßen Partikeln gebunden, die mit derselben Geschwindigkeit ausfallen.

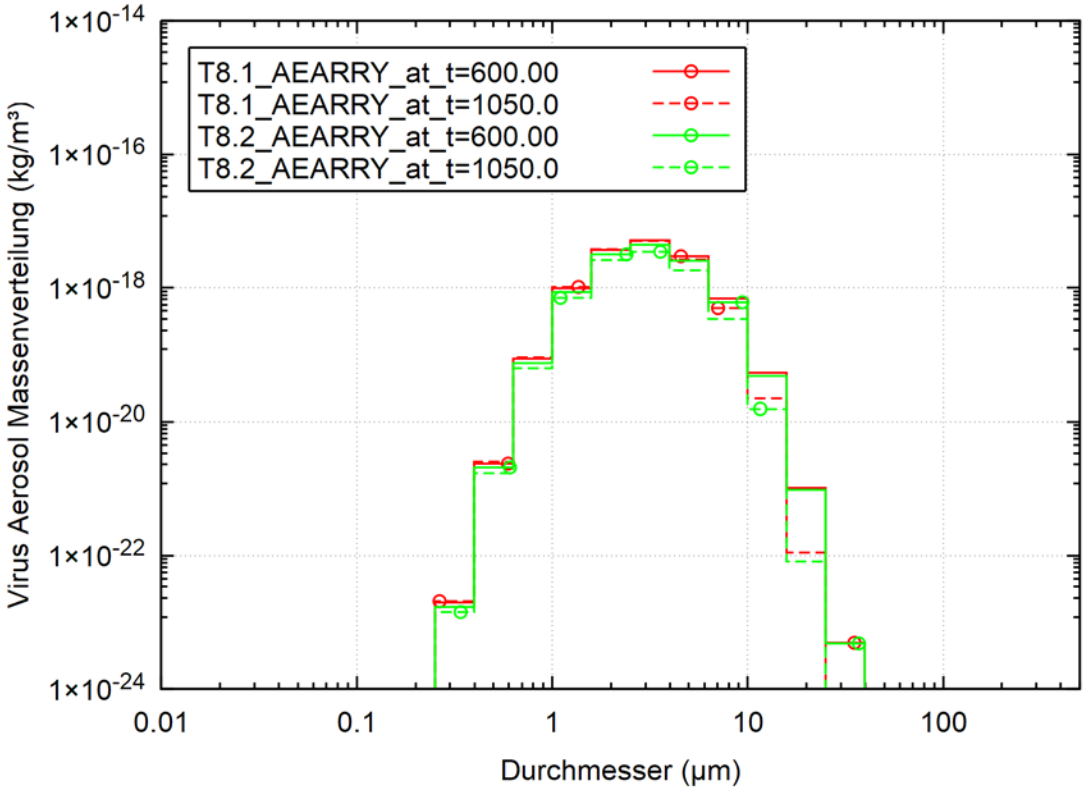


Abb. 6.10 Größenspektrum des Virus-Aerosols für den Fall **ohne** Verdampfung

Im zweiten Fall mit Verdampfung sind zum Zeitpunkt 600 [s], als die infizierte Person die Apotheke verlässt, zwei Maxima bei 4 - 5 $[\mu m]$ und eines bei einem kleineren Durchmesser von 0,5 $[\mu m]$ zu erkennen, wobei das Maximum bei den kleinen Partikeln sehr viel höher ist. Es ist die einzige Größe, bei der mehr als 10^{-18} $[kg/m^3]$ berechnet werden, was bedeutet, dass mehr als ein Virus pro Kubikmeter vorhanden ist. Numerische Artefakte sind auch noch bei Durchmessern von 0,02 $[\mu m]$ und 100 $[\mu m]$ zu beobachten, die aber hier nicht genauer diskutiert werden, da das Virus einen Durchmesser von 100 $[nm]$ aufweist. Das Maximum bei 4 - 5 $[\mu m]$ entspricht der Quelle beim Ausatmen der infizierten Person. Das Maximum bei 0,5 $[\mu m]$ lässt sich auf „ältere“ Aerosole zurückführen, von denen bereits Wasser verdampft ist. Zu einem späteren Zeitpunkt verbleiben nur noch die zu kleineren Durchmessern verschobenen Aerosolpartikel, die dadurch länger in der Luft getragen werden.

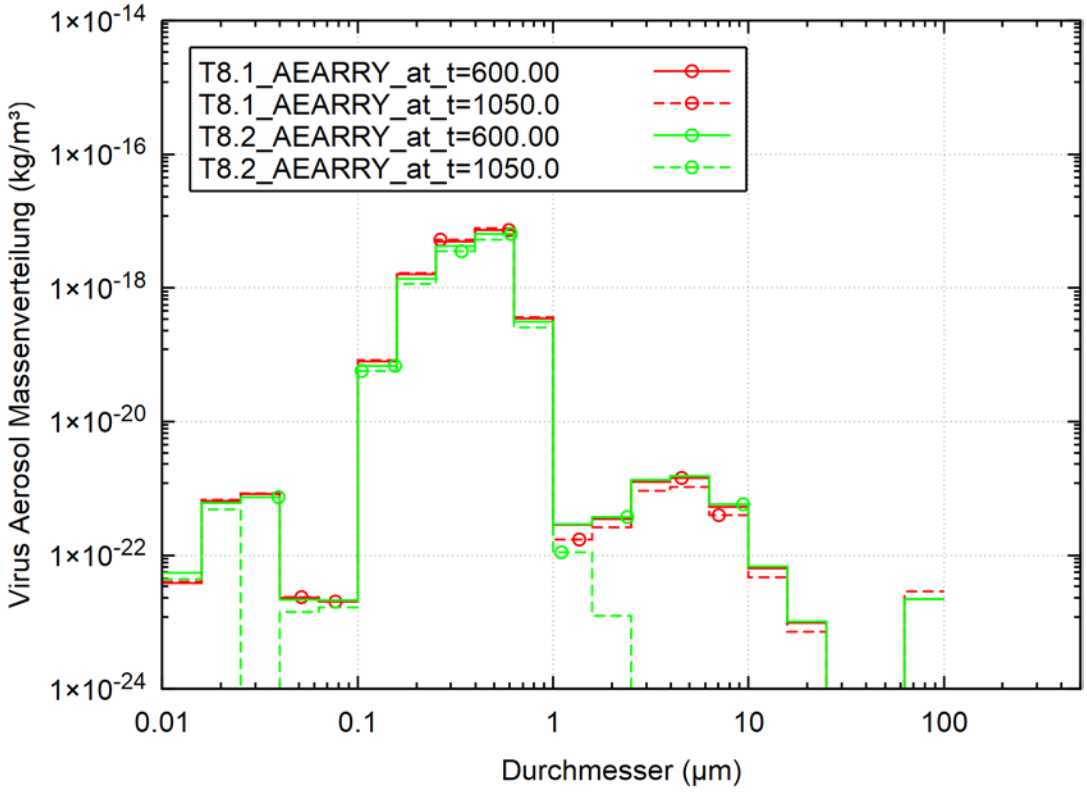


Abb. 6.11 Größenspektrum des Virus-Aerosols für den Fall **mit** Verdampfung

Diese Rechnungen zeigen, dass Verdampfungsvorgänge der Tröpfchen einen Einfluss haben. Hier werden allerdings weder in dem Speichel enthaltene Salze berücksichtigt, die ein komplettes Verdampfen der Wasserkomponente verhindern könnten, noch gibt es eine Interaktion mit in der Luft befindlichen Staubpartikeln. In verbesserten Rechnungen müssten diese Effekte berücksichtigt werden. Auch von Bedeutung ist die zeitliche Inaktivierung des Virus, die hier noch nicht berücksichtigt ist. Eine exakte Modellierung des Multikomponentenaerosols bedarf also noch weiterer Modellierungen, idealerweise inklusive einer Validierung an geeigneten Experimenten.

6.3 Diskussion der Verifikationsrechnung

Die COCOSYS-Rechnungen zur Apotheke erzielen ähnliche Ergebnisse wie in der Literatur mit einer einfachen Formel. Berücksichtigt wird die korrekte Einspeisung von Wassertröpfchen zusammen mit einer enthaltenen VIRUS-Aerosolkomponente. Aus der sich einstellenden Aerosolkonzentration lässt sich über Ansätze aus der Literatur eine Quantenkonzentration in der Luft berechnen, in die die VIRUS-Aerosolkonzentration eingeht. Die Quantenkonzentration gibt dabei an, welches Luftvolumen eingeatmet werden muss, um sich mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zu infizieren (siehe Abschnitt 5.1). Über einen auch aus der Literatur vorhandenen Ansatz (siehe Abschnitt 5.2.3) lässt sich daraus das Infektionsrisiko ermitteln, welches entsteht, wenn sich eine Person für einen gewissen Zeitraum im Raum aufhält.

In der ersten Rechnung zur Apotheke **ohne Verdampfung** der Wasser-Aerosoltröpfchen kann dieses Risiko recht gut nachgerechnet werden (siehe Abschnitt 6.2.1). Die Werte liegen dabei etwas höher als in der verglichenen Literatur, was damit zu erklären ist, dass derzeit in COCOSYS kein zeitlicher Zerfall der Viren, d. h. ein Verlust an Infektiosität mit einer gesetzten Halbwertszeit (siehe Abschnitt 4.3.4) berechnet wird.

In einer zweiten Rechnung wurde die **Verdampfung** von Wasser-Aerosoltröpfchen berücksichtigt. Dabei ist zu beobachten, dass bei einer niedrigeren Luftwechselrate von 0,2 $[h^{-1}]$ (siehe Abb. 6.8 und Abb. 6.9) der Abbau der Aerosole aus der Atmosphäre deutlich verringert wird. Das liegt daran, dass die Viruspartikel nur in geringer Zahl in den Tröpfchen vorliegen. Beim Verdampfen der Tröpfchen werden diese kleiner, was sich auch in einer Verschiebung zu kleineren Durchmessern in der Partikelgrößenverteilung ausdrückt. Dieselbe VIRUS-Aerosolkomponente (Masse) bleibt also in einem viel kleineren Wassertröpfchen bestehen. Aufgrund der geringeren Masse des geschrumpften Tropfens nimmt die Sedimentation ab, und die Wassertröpfchen bleiben samt dem enthaltenen VIRUS-Aerosol länger luftgetragen (vgl. Abschnitt 3.2). Diese Verdampfungseffekte sind bei der Bewertung, wie lange die Viren luftgetragen bleiben können, wichtig. Damit bietet COCOSYS eine erweiterte Simulationsmöglichkeit im Vergleich zu einfachen Gleichungsansätzen.

7 COCOSYS-Simulationen für ein repräsentatives Patientenzimmer

Für die COCOSYS-Analyse eines repräsentativen Patientenzimmers wurde eine exemplarische Kranken- und Pflegeeinrichtung ausgewählt, für die hinreichende Informationen bezüglich der baulichen Gegebenheiten vorliegen. Die Außenansicht des Gebäudes ist durch Abb. 7.1 gegeben.

Abb. 7.1 Gebäude einer exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung

Der in den nachfolgenden Simulationen verwendete Grundriss umfasst ein möbliertes Einzelzimmer inklusive separierter Nasszelle mit Dusch- und Toilettenfunktion (siehe Abb. 7.14). Die Abb. 7.15 zeigt eine 3D-Visulaisierung des Patientenzimmers.

In der COCOSYS-Analyse wurde nur der Wohnbereich (A) des Zimmers simuliert, d. h. durch eine Zone abgebildet. Dies ist im Rahmen der gegenwärtigen GRS-Projektstudie zur Demonstration der Simulationsmöglichkeiten von COCOSYS bzgl. COVID-19 ausreichend.

7.1 Luftwechsel durch Fenster

Da die Aerosolkonzentration in der Raumluft wesentlich durch den bestehenden Zuluftvolumenstrom $\dot{V}\ [m^3/h]$ an Frischluft bzw. durch die Luftwechselrate $A_{ER}\ [1/h]$ über technische und natürliche Belüftungseinrichtungen bestimmt wird, ist eine entsprechen-

de Bestimmung der Kenngrößen notwendig. Anders als bei technischen Belüftungssystemen, für die der Volumenstrom leicht bestimmbar ist, ist bei natürlicher Belüftung über Türen und Fenster neben den meteorologischen Größen auch das individuelle Lüftungsverhalten eine maßgebende Einflussgröße /MAA 95/.

Die Effektivität der natürlichen Lüftung ist u. a. abhängig von

- der Temperaturdifferenz zwischen der Innen- und Außen-Luft $\Delta\theta$,
- der Windgeschwindigkeit, -richtung und -fluktuation u,
- der Topographie des Gebäudeumfeldes,
- der Anordnung des Fensters in der Fassade,
- der Größe der Öffnungsfläche des Fensters (Höhe h , Breite b),
- der horizontalen und vertikalen Anordnung der Öffnungsflächen,
- der Laibungstiefe und dem Laibungsabstand zum Fenster,
- der Anordnung eines Heizkörpers zum Fenster,
- dem Fensterschmuck, z. B. Pflanzen, Gardinen und
- dem Lüftungsverhalten des Nutzers (Öffnungsart und -dauer in Abhängigkeit von Lärm, Raumlufttemperatur und Niederschlag).

Für die Bestimmung des Volumenstroms durch die Fenster (siehe Abb. 7.14) mit angenommener Dreh- und Kippfunktion werden in erster Näherung experimentelle Untersuchungen von Maas /MAA 95/ genutzt. Der hier verwendete Ansatz für den Volumenstrom $\frac{dV}{dt}[m^3/s]$ (7.23) berücksichtigt neben der lichten Fläche der Fensteröffnung A_l $[m^2]$, dem Durchflussverhältnis Θ, der Windgeschwindigkeit u $[m/s]$, der Temperaturdifferenz $\Delta\,\theta$ (innen/außen) zusätzlich die experimentell ermittelte Geschwindigkeits-, Temperatur- und Turbulenzkoeffizienten[20] (C_1, C_2 und C_3).

$$\frac{dV}{dt} = \frac{1}{2} \cdot A_l \cdot \Theta \cdot \sqrt{C_1 \cdot u^2 + C_2 \cdot h\,\Delta\theta + C_3}\ [\frac{m^3}{s}] \qquad 7.23$$

[20] Infolge Diffusion und lokaler Turbulenzen erfolgt ein Luftwechsel auch ohne eine wirksame Temperaturdifferenz.

Die Werte der experimentell gefundenen Koeffizienten C_1, C_2 und C_3 sind gegeben durch

$$C_1 = .0056$$

$$C2 = 0.0037\ [m/s^2K]$$

$$C_3 = 0.012\ [m^2/s^2]$$

Die effektiven Öffnungsflächen A_{eff} (siehe Abb. 7.3) von Kipp- und Flügelfenstern in Abhängigkeit von der Fensterhöhe h, -breite b und dem gewählten Öffnungswinkel α werden jeweils durch die Gleichungen für Kipp- und Flügelfenster 7.24 und 7.25 ausgedrückt /ERH 15/.

Kippfenster:

$$A_{\text{eff}}^{kip}(\alpha, h, b) = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{(w \cdot h)^2} + \frac{1}{\left(2 \cdot b \cdot h \cdot \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) + h^2 \cdot \sin(\alpha)\right)}}}\ [m^2] \qquad 7.24$$

Flügelfenster:

$$A_{\text{eff}}^{flü}(\alpha, h, b) = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{(w \cdot h)^2} + \frac{1}{(2 \cdot b \cdot h \cdot \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) + b^2 \cdot \sin(\alpha))}}}\ [m^2] \qquad 7.25$$

Hieraus lassen sich für beide Fenstertypen (Kipp/Flügel) jeweils das Durchflussverhältnis Θ (siehe Abb. 7.4) zur Berechnung des Volumenstroms dV/dt nach (7.23) ermitteln.

$$\Theta = \frac{A_{\text{eff}}(\alpha, h, b)}{A_{\text{eff}}\left(\frac{\pi}{2}, h, b\right)} \qquad 7.26$$

Aus Abb. 7.2 und Abb. 7.14 wurden die Größenverhältnisse des Flügelfensters auf die Breite $b = 60\ [cm]$ und Höhe $h = 1.80\ [m]$ abgeschätzt.

Abb. 7.2 Innenhofansicht der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung

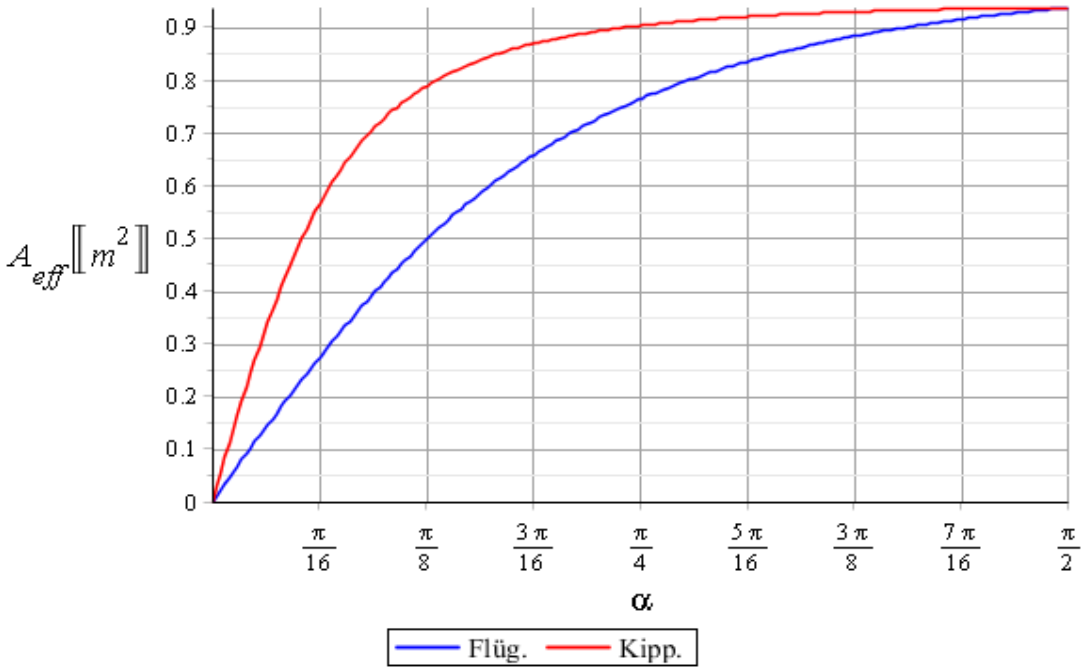


Abb. 7.3 Darstellung der effektiven Öffnungsflächen $\boldsymbol{A_{eff}}$ für Kipp- und Flügelfenster in Abhängigkeit vom Öffnungswinkel $\boldsymbol{\alpha}$ ($\boldsymbol{b = 0.6\ [m], h = 1.8\ [m]}$)

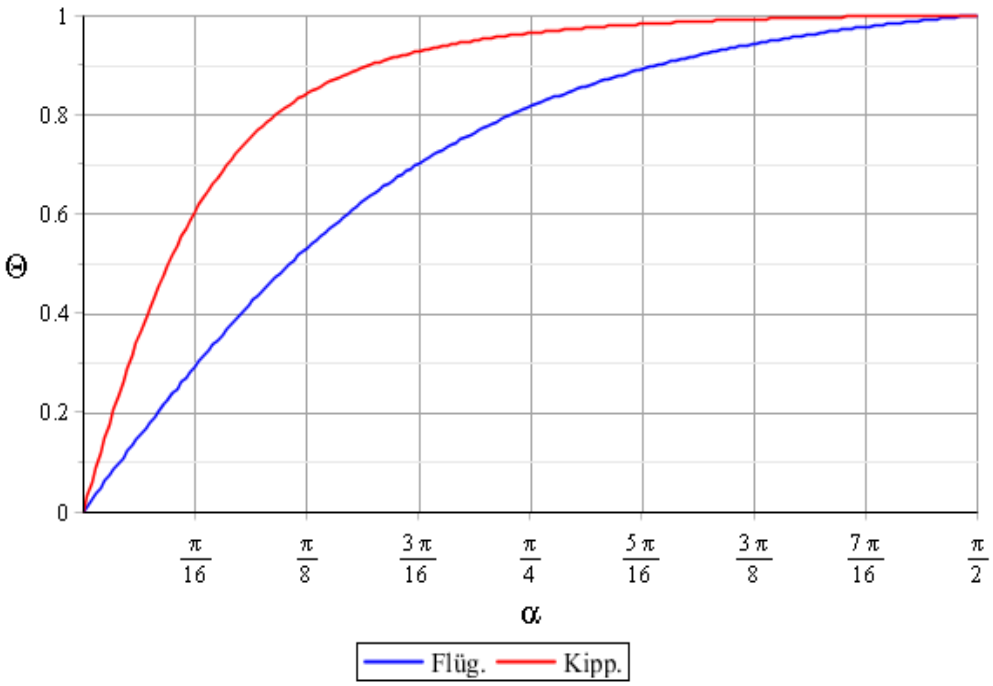


Abb. 7.4 Darstellung des Durchflussverhältnis $\boldsymbol{\Theta}$ für Kipp- und Flügelfenster in Abhängigkeit vom Öffnungswinkel $\boldsymbol{\alpha}$ ($\boldsymbol{b = 0.6\ [m], h = 1.8\ [m]}$)

Luftwechselrate

Die Luftwechselrate A_{ER} (7.27) eines Raums oder Gebäudes ist durch den Quotienten aus zugeführtem Luftvolumenstrom dV/dt (7.23) Frischluft und dem (Netto-)Luftvolumen des Raums /ENE 20/ gegeben. In der COCOSYS-Simulation ist das Volumen des Sanitärbereiches B_{vol} nicht berücksichtigt.

$$A_{ER} = \frac{dV/dt}{A_{vol}} \left[\frac{1}{h}\right] \qquad 7.27$$

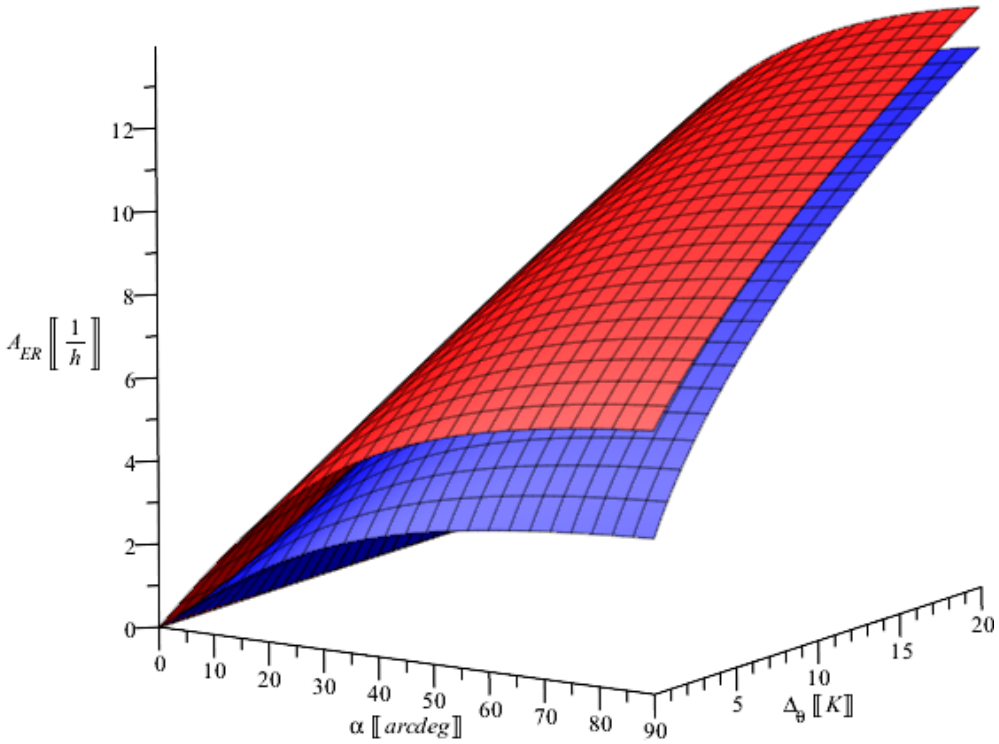


Abb. 7.5 Darstellung der Luftwechselrate $\boldsymbol{A_{ER}}$ durch das Flügelfenster

A_{ER} für zwei Windgeschwindigkeiten u (blau: 0 $[m/s]$, rot: 2 $[m/s]$) bei einem Öffnungswinkel von α von 0 ° bis 90 ° und einer Temperaturdifferenz Δ_θ von 0 $[K]$ bis 20 $[K]$.

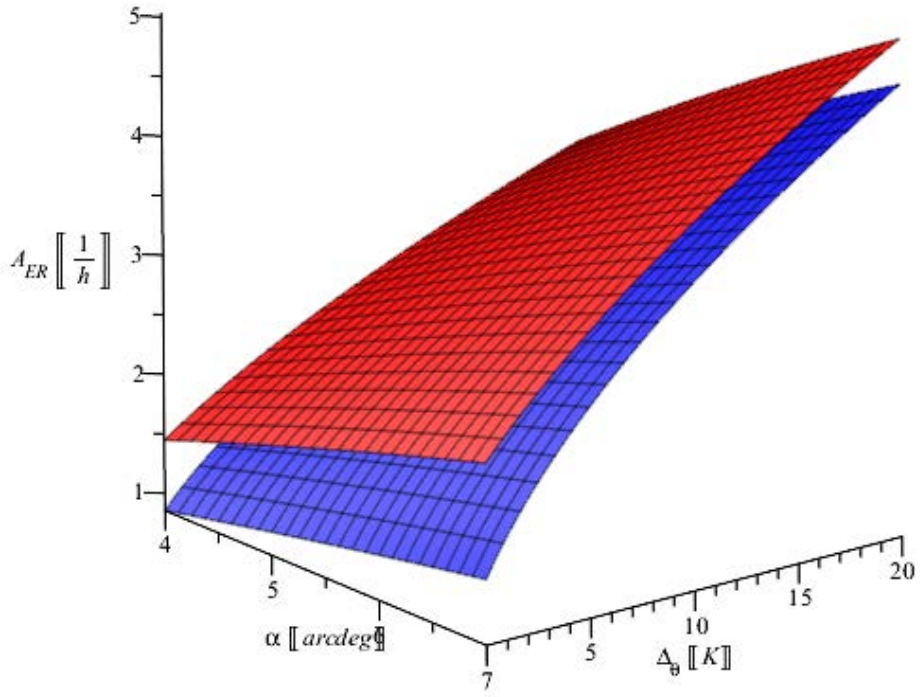


Abb. 7.6 Darstellung der Luftwechselrate $\boldsymbol{A_{ER}}$ durch das Kippfenster

A_{ER} für zwei Windgeschwindigkeiten u (blau: 0 $[m/s]$, rot: 2 $[m/s]$) bei einem Öffnungswinkel von α von 4 ° bis 7 ° und einer Temperaturdifferenz Δ_θ von 0 $[K]$ bis 20 $[K]$.

7.2 Bestimmung der Umgebungswerte

Für die Bestimmung der Umgebungswerte (durchschnittliche Höchst- und Tiefsttemperatur, relative Luftfeuchtigkeit, durchschnittliche Windgeschwindigkeit und -richtung) des Gebäudekomplexes der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung wurden die meteorologischen Daten von der Webseite Weatherspark /WEA 20b/ und Weather-Atlas /WEA 20a/ für eine erste Abschätzung der notwendigen Randbedingung in COCOSYS übernommen (siehe Abb. 7.7 bis Abb. 7.10). Die topographische Umgebung des Gebäudes ist geprägt von mehrstöckigen Mehrfamilienhäusern (siehe Abb. 7.11, linke Seite), welche in Ost-West Richtung ausgerichtet sind. Die vorherrschende durchschnittliche Windrichtung ist laut Webseite Weatherspark das ganze Jahr über aus Richtung West geprägt. Aus der Ausrichtung (West-Ost bzw. Innenhof) der Fensterfront des betrachteten Einzelzimmers kann eine Abschätzung bzgl. der zu verwendenden Windgeschwindigkeit u auf Grundlage der meteorologischen Daten für Gleichung 7.23 durchgeführt werden. Hieraus lassen sich prinzipiell realitätsnahe Werte für die Luftwechselrate in COCOSYS ermitteln. Für die Simulation wird angenommen, dass die Windlast auf eine Fensterfront im Innenhofbereich, aufgrund der geographischen Ausrichtung, baulichen Gegebenheiten und strömungstechnischer Erwägungen, geringere Werte aufweist als eine Fensterfront im Außenbereich (siehe Abb. 7.11 und Abb. 7.12).

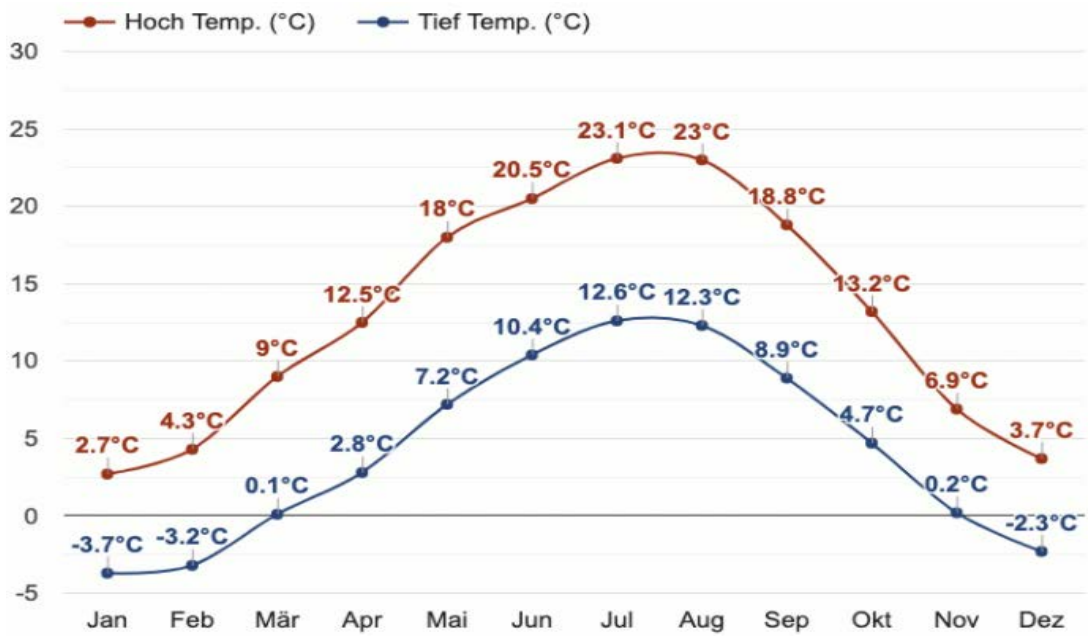


Abb. 7.7 Durchschnittliche Temperatur der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung /WEA 20a/

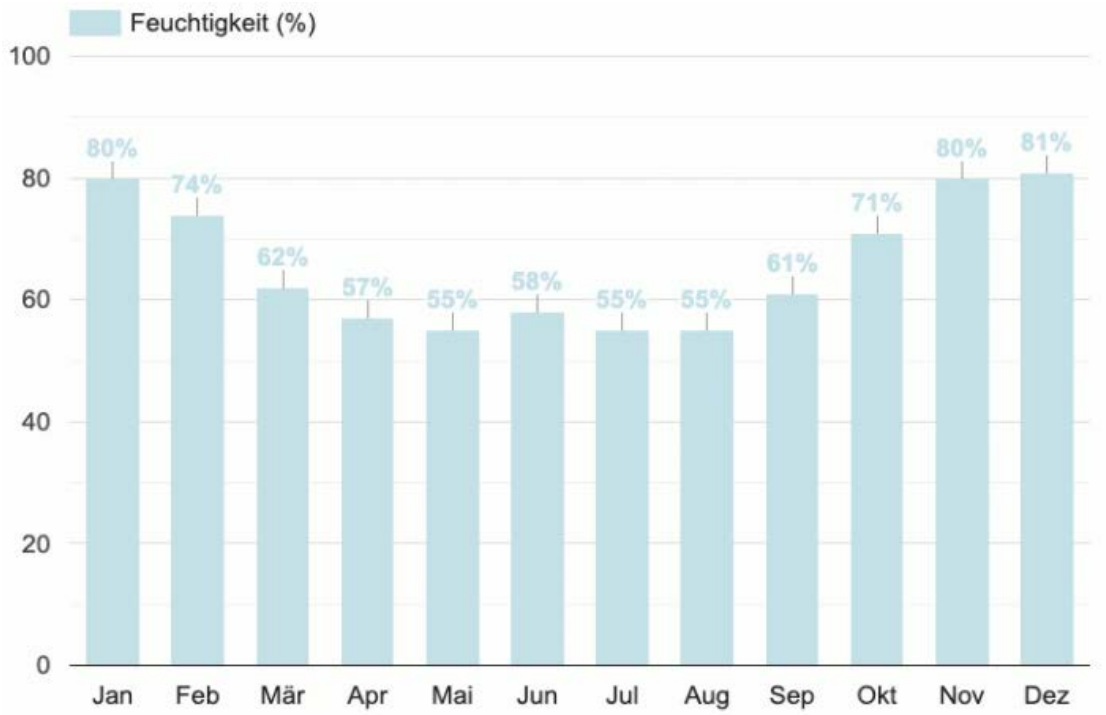


Abb. 7.8 Durchschnittliche relative Luftfeuchtigkeit der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung /WEA 20a/

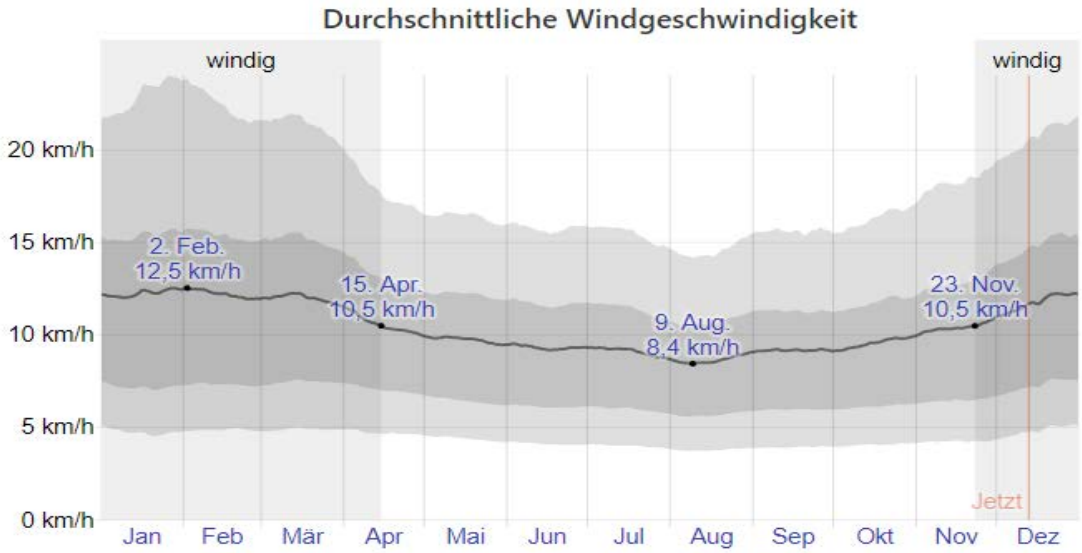


Abb. 7.9 Mittlere stündliche Windgeschwindigkeiten

Durchschnitt der mittleren stündlichen Windgeschwindigkeiten (dunkelgraue Linie) mit Perzentil-Bändern von 25 – 75 % und 10 – 90 % /WEA 20b/

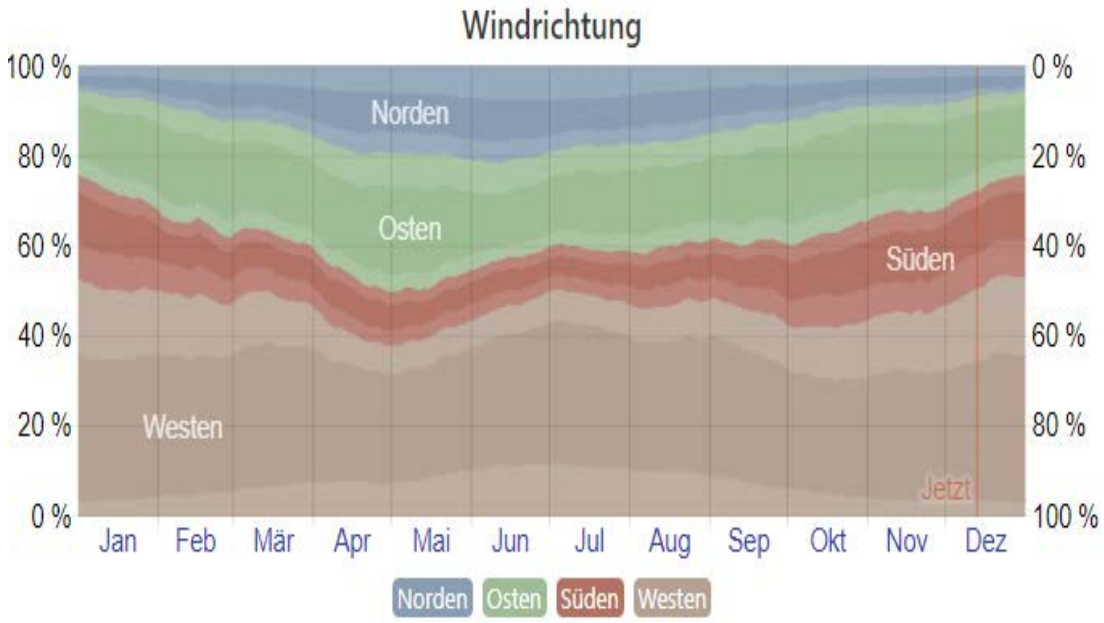


Abb. 7.10 Vorherrschende Windrichtung

Der Prozentsatz an Stunden, in denen die mittlere Windrichtung aus einer der vier Hauptwindrichtungen kommt, ausschließlich der Stunden, in denen die mittlere Windgeschwindigkeit unter 1,6 $[km/h]$ liegt. Die leicht getönten Bereiche an den Grenzen stellen den Prozentsatz an Stunden dar, in denen der Wind aus den implizierten Zwischenrichtungen kam (Nordost, Südost, Südwest und Nordwest). Die vorherrschende durchschnittliche stündliche Windrichtung ist das ganze Jahr über vom Westen /WEA 20b/.

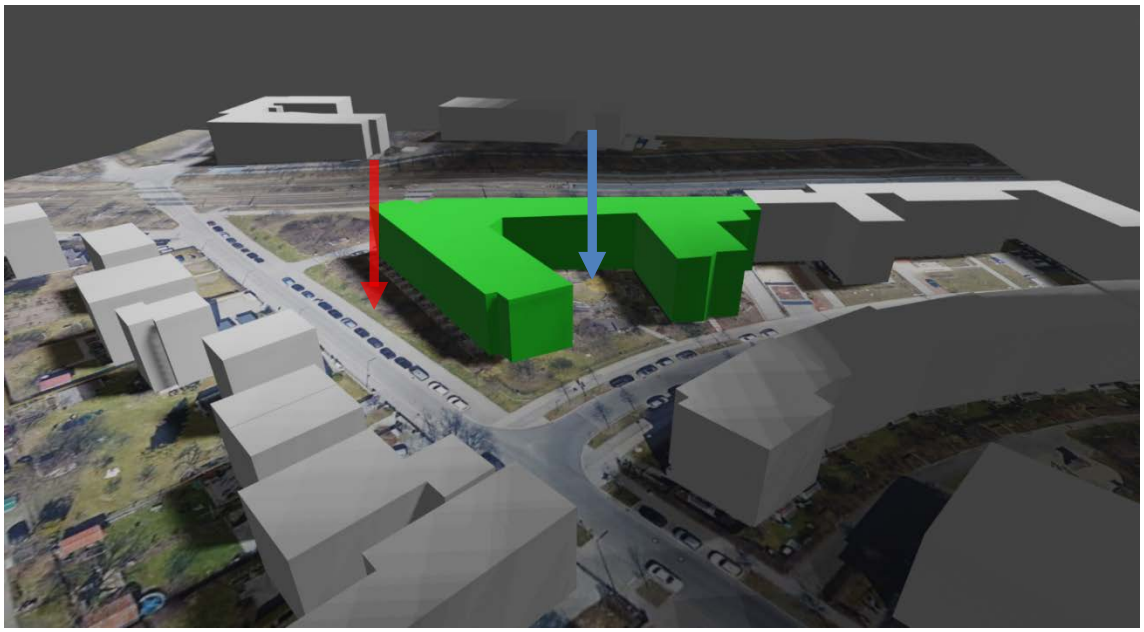


Abb. 7.11 Topografie des Gebäudekomplexes der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung

Der blaue Pfeil kennzeichnet den Innenhofbereich, der rote Pfeil den Außenbereich.

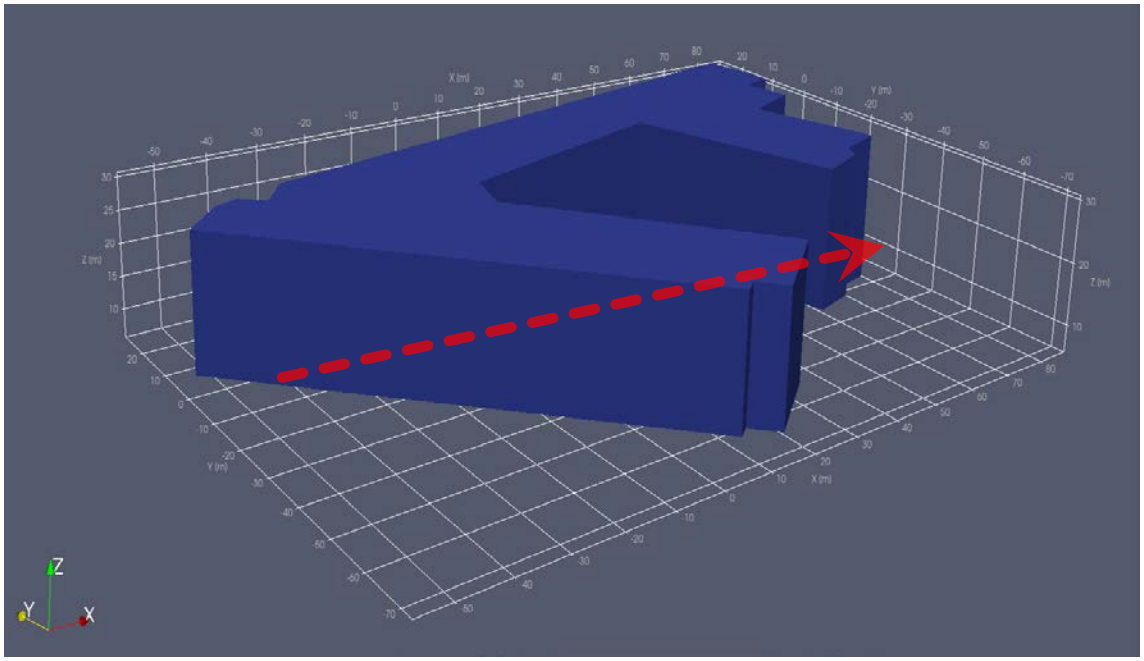


Abb. 7.12 3D Darstellung des Gebäudekomplexes der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung

Der rote Pfeil kennzeichnet die vorherrschende durchschnittliche Windrichtung (West).

7.3 Beschreibung des COCOSYS-Datensatzes

Die für die COCOSYS-Rechnungen erstellte Nodalisierung ist in Abb. 7.13 dargestellt. Sie ist die bildliche Darstellung der im COCOSYS-Datensatz hinterlegten Geometrie-Informationen sowie der verwendeten Anfangs- und Randbedingungen.

Die Nodalisierung umfasst sieben Modellzonen (Kontrollvolumen): den Wohnbereich des Patientenzimmers (Zone PZ1), zwei Umgebungen für die Simulation des Luftwechsels (ENVIR-IN und ENVIR-OUT) sowie zwei Personen. Zone PE1 stellt die Lunge der infizierten Person dar (Virusträger), die sich permanent im Zimmer aufhält. Zone PE2 ist die Lunge der betreuenden Pflegekraft, die nur zeitweilig zur Verrichtung von Tätigkeiten das Zimmer betritt und sich dabei einer Infektionsgefahr aussetzt. Zusätzlich ist im Modell jeweils der Rachen der Personen (THR1/2) von der Lunge (PE1/2) getrennt nachgebildet.

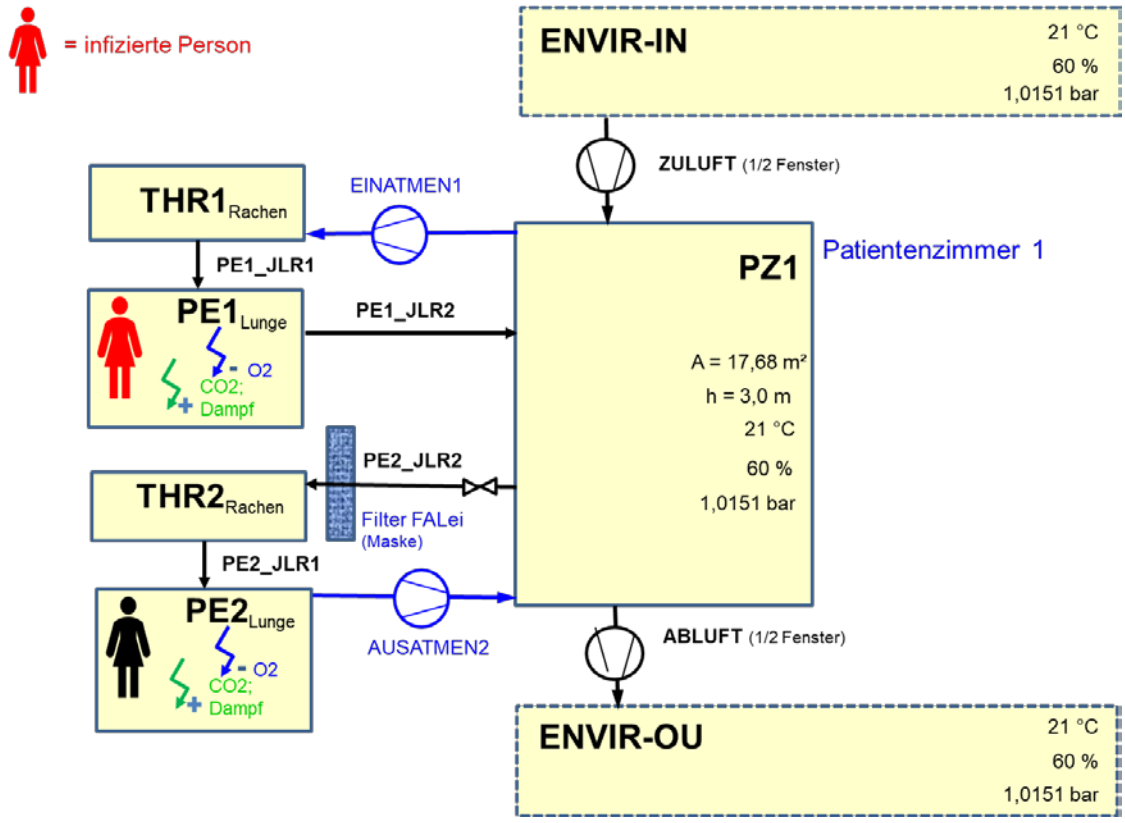


Abb. 7.13 COCOSYS-Nodalisierung für das Patientenzimmers

Aus dem Grundriss entsprechend Abb. 7.14 wurde die Grundfläche für den Wohnbereich bei einer Breite des Zimmers 3,9 [m] zu A_{area} = 17,68 $[m^2]$ bestimmt. Überdeckte Flächen wie Schrank, Bett, Tisch sind dabei nicht abgezogen, da ihre Oberseiten weiterhin als Ablagerungsfläche für virenhaltige Aerosole wirksam sind.
Hinsichtlich der Deckenhöhe liegen keine gesicherten Informationen vor, so dass in erster Näherung eine Raumhöhe von 3,0 [m] angenommen und damit das Brutto-Luft-Volumen als $A_{vol_{brutto}} = 54\ [m^3]$ abgeschätzt wurde. Das für die Aerosolkonzentration relevante Netto-Luftvolumen, das aufgrund ggf. individueller Einrichtungsvorlieben der Bewohner für die Einbauten und Dekorationsgegenständen mit Unsicherheiten behaftet ist, wurde letztendlich auf $A_{vol_{netto}} = 51\ [m^3]$ festgelegt.

Die Personen (Zonen PE1 und THR1 bzw. PE2 und THR2) sind vereinfachend mit identischen Geometrien festgelegt. Entsprechend Abschnitt 4.2.1 wurden das Lungenvolumen und der Rachen jeweils zu 6 Litern definiert. Die Umgebungszonen wurden ausreichend groß angenommen ($10^{10}\ [m^3]$), um während der gesamten Simulation konstante Randbedingungen (Druck, Temperatur, Luftfeuchte) zu gewährleisten.

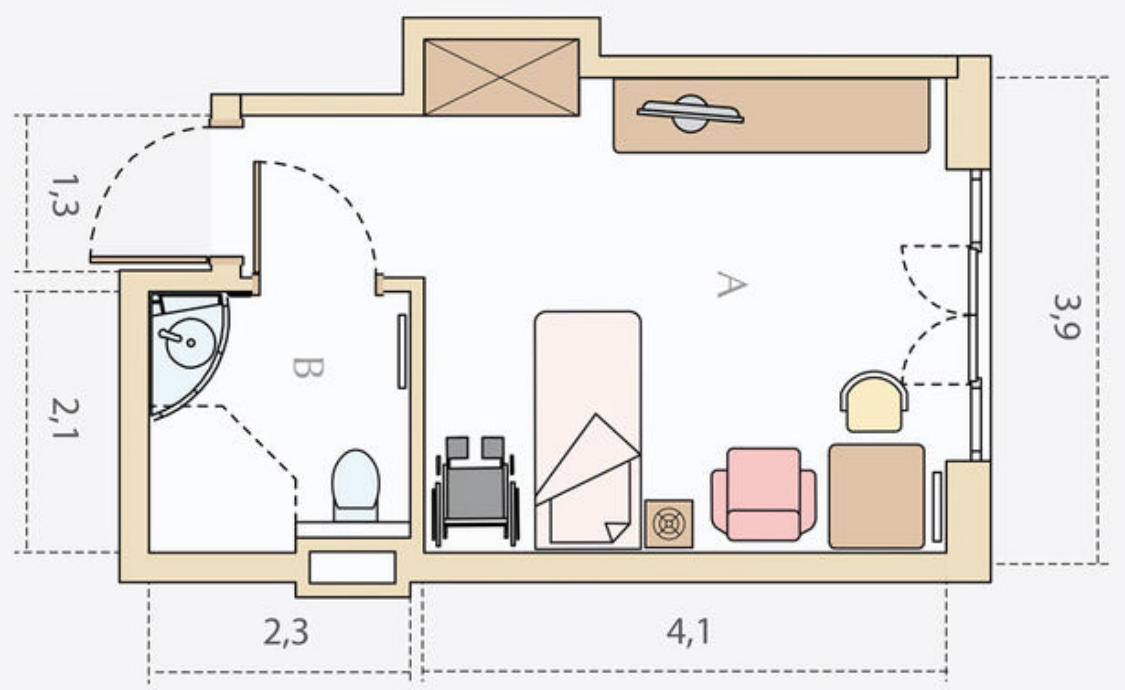


Abb. 7.14 Grundriss eines Patientenzimmers der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung

Abb. 7.15 3D-Visualisierung des Patientenzimmers

Die Zonen sind durch vier atmosphärische Verbindungen sowie vier Lüftungssysteme miteinander verknüpft. Das Patientenzimmer verfügt im Außenwandbereich über ein zweiflügliges Fenster mit angenommener Dreh- und Kippfunktion. Über dieses Fenster wird der Luftaustauch mit der Umgebung realisiert, d. h. Undichtheiten in der Tür oder

zum geschlossenen Bad (siehe B in Abb. 7.14) sind in den Simulationen vernachlässigt. Die Volumenströme durch die Lüftungen ZULUFT und ABLUFT (siehe Abb. 7.13) haben gleiche Werte, die mit Hilfe der Gleichungen in Abschnitt 7.1 für ein geschlossenes, angekipptes und voll geöffnetes Fenster berechnet wurde.

Die Person 1 (infizierte Person), d. h. ihr Rachen und ihre Lunge, sind über die Verbindungen PE1_JLR1 und PE1_JLR2 angeschlossen. Der Atem-Vorgang (Luftaustausch mit dem Zimmer PZ1) wird durch das Lüftungssystem EINATMEN1 aufgeprägt. Aussagen zur Atmung sind in Abschnitt 4.2 dargelegt. Im Datensatz wird anstatt einzelner Atemzüge ein über die Zeit gemittelter Volumenstrom verwendet, der auf Grund des gleichen integralen Wertes den gleichen Luftaustausch und damit Aerosoltransport bewirkt wie ein periodisches Atmen.

Die Person 2 (Pflegekraft) ist im Prinzip in gleicher Weise angeschlossen, allerdings sind hier die Verbindung PE_JLR2 und AUSATMEN2 getauscht. Grund dafür ist der Filter FALei in PE_JLR2, mit dem der Einfluss einer Gesichtsmaske der Pflegekraft untersucht werden soll. Gegenwärtig ist im NewAFP-Hauptmodul von COCOSYS noch kein Filter in einem Lüftungssystem nutzbar, so dass für Person 2 die Atmung durch Transport der Luft aus der Lunge über eine atmosphärische Verbindung erfolgt. Sowohl die Verbindung PE2_JLR2 als auch das FAN-System AUSATMEN2 sind über Zeitsignale ansteuerbar, so dass damit die Zeiten (Aufenthaltsdauer) im Patientenzimmer festgelegt werden können.

Die Maske der Person 2 (Filter FALei) dient der Simulation der Rückhaltung der Bio-Aerosole. Die Filtercharakteristik wurde über eine nutzerdefinierte partikelgrößenabhängige (konstante) Verteilung der Rückhaltefaktoren definiert. Es wird weiterhin angenommen, dass die infizierte Person keine Maske trägt.

Für die Atmung der Person 1 ist neben dem Volumenstrom durch die Aufnahme von Sauerstoff auch die entsprechende Abgabe von Kohlendioxid berücksichtigt worden. In der Lunge PE1 ist dafür eine Senke (O_2) bzw. Quelle (CO_2) definiert, so dass sich im Patientenzimmer während der Simulation der CO_2-Gehalt in der Luft kontinuierlich erhöht. Die mit der Atmung verbundene Freisetzung von Feuchtigkeit (Dampf) ist auf Null gesetzt, da in der Aerosoleinspeisung neben dem Virus auch Wassertropfen freigesetzt werden, deren Verdampfung die Luftfeuchte in PZ1 erhöht. Der Einfluss des ausgeatmeten Wasserdampfes wird gegenwärtig als nicht prioritär eingeschätzt, zudem der Feuchteeinfluss in der Parameterstudie (siehe Abschnitt 7.6) analysiert ist.

Aufgrund der kurzen Aufenthaltszeit der Person 2 im Patientenzimmer wird gegenwärtig der Stoffumsatz für sie in PE2 nicht berücksichtigt.

Die Aerosolfreisetzung (Virus und Wassertropfen) durch die Atmung der Person 1 erfolgt in PE1. Weitere Angaben dazu sind in Abschnitt 7.4 zu finden. Mit dem durch EIN-ATMEN1 aufgeprägten Luftstrom werden Aerosole dann in das Zimmer PZ1 transportiert.

Ein neues Feature des NewAFP-Hauptmoduls von COCOSYS ist, dass die thermohydraulischen Strukturoberflächen automatisch als Aerosol-Ablagerungsflächen genutzt werden. Die entsprechenden relevanten Ablagerungsprozesse sind in Abschnitt 3.2 diskutiert. Weitere Eingaben für die Aerosolablagerungsflächen sind daher nicht mehr nötig.

Um in der Lage zu sein, Aussagen zur Möglichkeit der Schmierinfektion zu treffen (siehe Abschnitt 4.3.4), sind zwei Oberflächen definiert, die den Kopf und Körper einer Person simulieren. Diese zwei Strukturen sind permanent im PZ1 für die Aerosolablagerung aktiv (unabhängig von der Aufenthaltsdauer der Person 2), so dass in der Nachbearbeitung für verschiedene Zeiten aus Differenzbetrachtungen der abgelagerten Aerosolmassen Aussagen getroffen werden können. Aus thermohydraulischer Sicht sind diese Körperstrukturen von untergeordneter Bedeutung, zumal die Wärmefreigabe durch die anwesenden Personen nicht berücksichtigt wurde. Als Körperoberfläche wurde nach Gleichung 4.4 für eine Person mit einer Körpergröße von $1.7\ [m]$ und $70\ [kg]$ Körpergewicht eine Fläche von $1.8\ [m^2]$ bestimmt, von der etwa 10 % auf den Kopf entfallen. Als Materialdaten sind Haut (Kopf) und Baumwolle (Kleidung) definiert.

Es sei hier darauf hingewiesen, dass im NewAFP Aerosolmodule kein Modell zur Berücksichtigung der Überlebenszeit (Halbwertszeit) von Virus in der Atmosphäre existiert. Ohne Berücksichtigung der Überlebenszeit werden die auf Basis der atmosphärischen COCOSYS-Aerosolkonzentration ermittelten Infektionsrisiken konservativ überschätzt.

Im COCOSYS-Datensatz sind die relevanten Eingabegrößen wie Volumina, Flächen, Höhenknoten und die Anfangsbedingungen, wie Temperatur, Luftfeuchte usw. sowie Kontrollgrößen (Aufenthaltszeiten) über Parameter-Definitionen /ARN 20b/ festgelegt, so dass sie an zentraler Stelle schnell modifizierbar sind.

7.4 Aerosoldaten

Analog zur vorangegangenen Apothekenrechnung in Kapitel 6 wurde in dieser Simulation ein entsprechender Korrekturfaktor von 10^3 verwendet worden, um numerische Probleme bei so kleinen VIRUS-Aerosolmassen zu verhindern. Für die Analyse der Ergebnisse muss hinterher wieder durch diesen Faktor dividiert werden. Anders als in der Apothekenrechnung soll eine an SARS-CoV-2 erkrankte Person (siehe Person 1, Abb. 7.13) simuliert werden, die nicht aktiv tätig ist, sondern sich in Ruhe befindet. Daher wird angenommen, dass die Atemvolumenrate dem Fall Ruhe mit $0{,}49\ [m^3/h]$ entspricht. Zusätzlich werden zehn Hustenanfälle pro Stunde mit einer Dauer von $30\ s$ unterstellt, während derer die Person 1 mit dem Fall Schwere Übungen von $3{,}3\ [m^3/h]$ atmet. Für den Fall Ruhe wird das Partikelspektrum der Fälle Stimmhaftes Zählen und Atmen gemittelt und für den Fall des Hustens wird die Partikelverteilung des Falls Husten benutzt.

Tab. 7.1 Angenommene Massenverteilung Atmen und Sprechen für die Aerosolfreisetzung im Patientenzimmer

Quantität	Wert
Mittlerer geometrischer Massendurchmesser	$4.01 \times 10^{-6}\ [m]$
Geometrische Standardabweichung	1.71761
Tropfenvolumen Rate	$1.14 \times 10^{-16} [m^3/s]$
Virus-Anzahlrate	$0.14\ [s^{-1}]$
Quantenrate	$8.22\ [Quanta/h]$
Tropfen-Massenrate	$1.14 \times 10^{-13} [kg/s]$
Virus-Massenrate	$1.14 \times 10^{-19} [kg/s]$

Der für das Sprechen und Atmen ermittelte Massenmedian beträgt $4{,}01 \times 10^{-6}\ [m]$ mit einer geometrischen Standardabweichung von 1,71761. Ein Vergleich der lognormalen Annäherung an die experimentellen Zahlen (siehe Tab. 5.1) ist in Abb. 7.16 dargestellt:

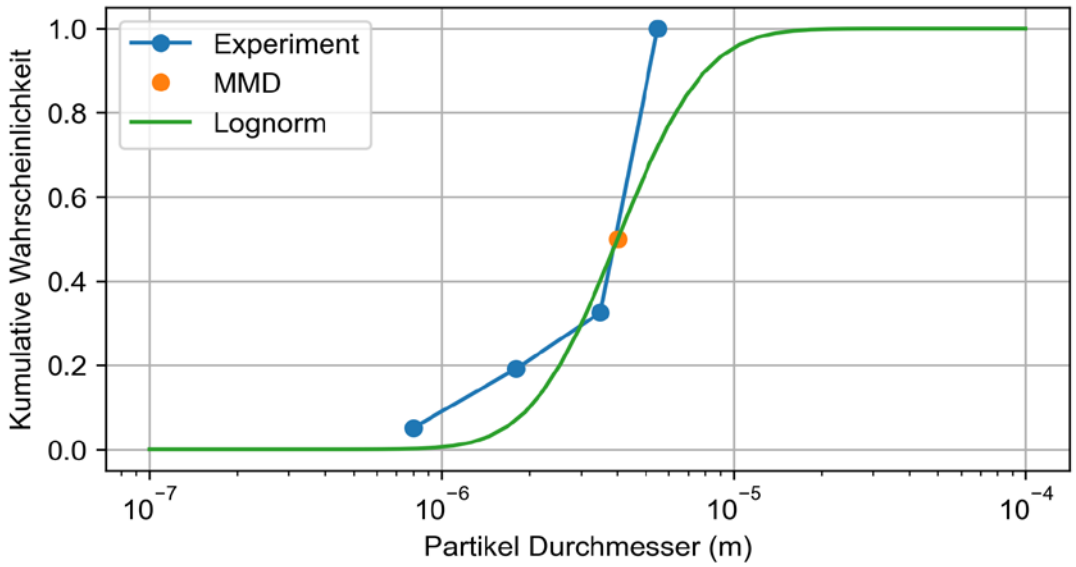


Abb. 7.16 Massenverteilung Sprechen und Atmen und lognormale Anpassung für COCOSYS

Tab. 7.2 Angenommene Massenverteilung Husten für die Aerosolfreisetzung in COCOSYS

Quantität	Wert
Mittlerer geometrischer Massendurchmesser	$3.03 \times 10^{-6}\ [m]$
Geometrische Standardabweichung	1.93840
Tropfenvolumen Rate	$9.38 \times 10^{-17}\ [m^3/s]$
Virus-Anzahlrate	$9.38 \times 10^{-2}\ [s^{-1}]$
Quantenrate	$6.75\ [Quanta/h]$
Tropfen-Massenrate	$9.38 \times 10^{-14}\ [kg/s]$
Virus-Massenrate	$9.38 \times 10^{-20}\ [kg/s]$

Der für das Husten ermittelte Massenmedian (siehe Tab. 7.2) beträgt 3.03×10^{-6} [m] mit einer geometrischen Standardabweichung von 1,9384. Die in der Tabelle angegebenen Raten für das Husten sind aufgrund der geringen Häufigkeit (10-mal pro Stunde mit jeweils 30 [s]) kleiner als die in Tab. 7.1.

Ein Vergleich der lognormalen Annäherung an die experimentellen Zahlen ist in Abb. 7.17 dargestellt.

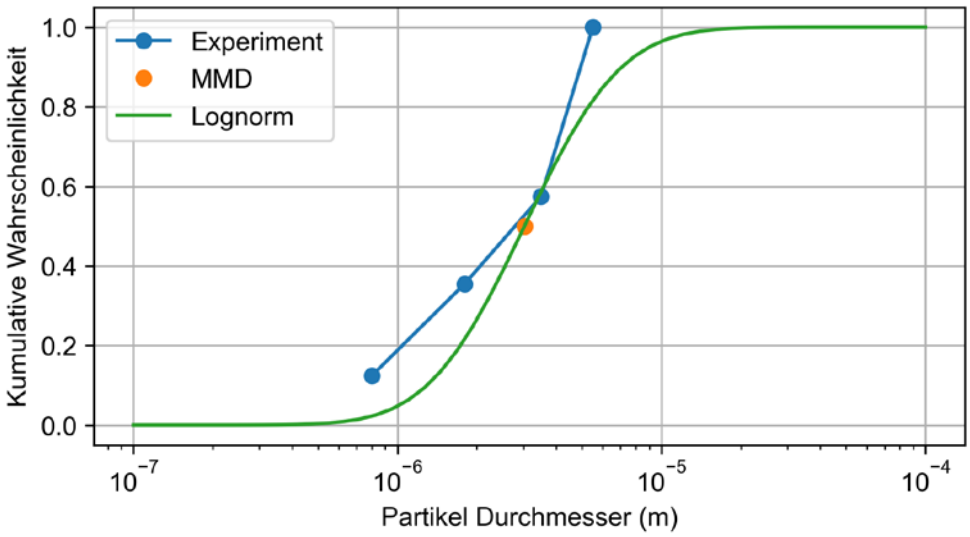


Abb. 7.17 Massenverteilung Husten und lognormale Anpassung für COCOSYS

Die beiden Partikelgrößenverteilungen werden separat eingespeist, wobei das Bio-Aerosol mit der zugehörigen Tropfengrößenklassenverteilung eingespeist wird. Im Fall Ruhe beträgt die Quelle 8,22 $[Quanta/h]$ und für das Husten 6,75 $[Quanta/h]$. Die Summe von 14,97 $[Quanta/h]$ liegt also bei nur etwas mehr als einem Zehntel des Apothekenfalls (siehe Kapitel 6).

7.4.1 Modell einer Alltagsmaske

Das verwendete Filtermodell zur Simulation eines Mund-Nasen-Schutzes ist an experimentelle Arbeiten von /ZAN 20/ angepasst worden. Diese Veröffentlichung liefert Filter-Effizienzen verschiedener Materialien für Partikeldurchmesser im Bereich 50 $[nm]$ bis 800 $[nm]$. Es wurde ein schlecht filternder Twill-Stoff verwendet (Köperbindung), bei dem es sich um einen simplen doppelt gewebten Stoff handelt.

Alltagsmasken ermöglichen also bereits höhere Abscheidungen. Die Daten sind aus Abb. 7.18 abgeschätzt und wie in Abb. 7.19 dargestellt für die Größenklassen, mit denen COCOSYS rechnet, angenähert worden. Twill (Köperbindung) repräsentiert eine einfache Stoffmaske und N95 ist vergleichbar zu einer FFP2-Maske.

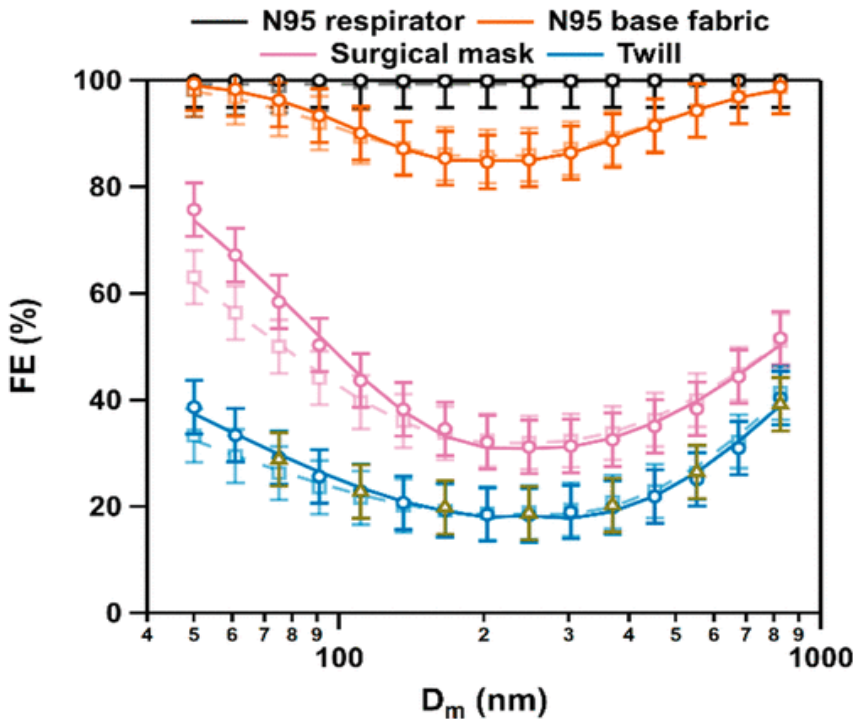


Abb. 7.18 Größenabhängige Filterwirkung für verschiedene Maskentypen /ZAN 20/

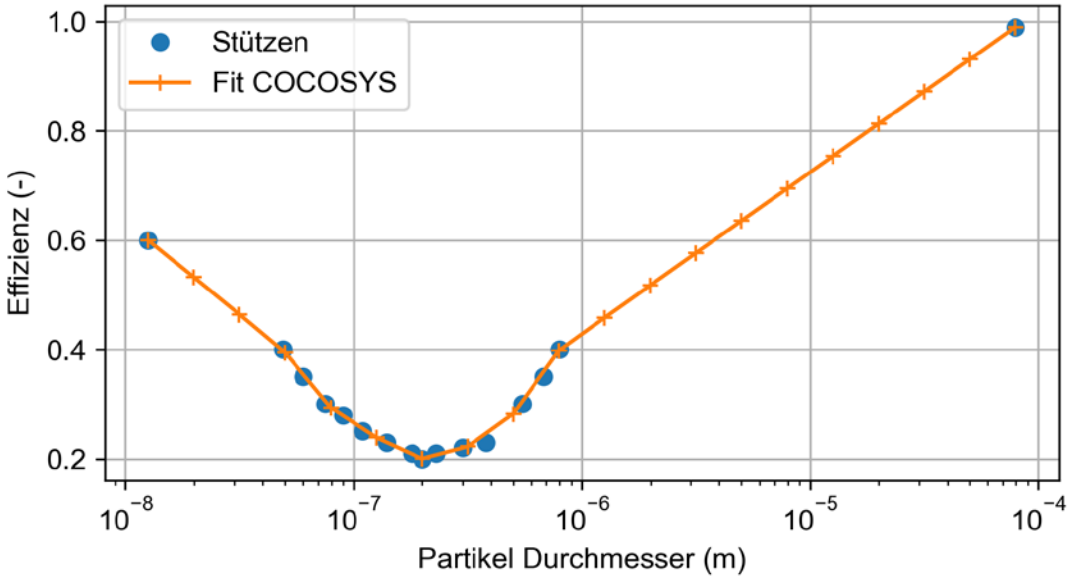


Abb. 7.19 Filtereffizienz eines Mund-Nasen-Schutzes, „Stützen“ sind die experimentellen Werte (vgl. Abb. 7.18)

Bei dem kleinsten in COCOSYS simulierten Partikeldurchmesser ist eine Effizienz von 0,6 und zum größten Durchmesser von 0,99 angenommen worden. Der Bereich kleiner 50 $[nm]$ und größer 800 $[nm]$ ist allerdings experimentell nicht bestimmt worden. Wobei zu beachten ist, dass das Virion bereits einen Durchmesser im Bereich von 100 $[nm]$ hat. Die so ermittelten Filtereffizienzen sind für den COCOSYS-Eingabedatensatz die erforderlichen Dekontaminationsfaktoren umgerechnet worden. Der entsprechende Filter FALei wurde in die Verbindung zwischen PZ1 und THR2 definiert (siehe Abb. 7.13), also als Maske der Person 2.

7.5 Ausgangsszenario

Unter Anwendung des in Abschnitt 7.3 charakterisierten Datensatzes wurde ein Ausgangsszenario (Referenzrechnung) definiert.

Aufgrund der großen Unsicherheiten in den möglichen Randbedingungen (Aufenthaltszeiten, Fensteröffnung, Umgebungsbedingungen usw.) wurde auf das ursprüngliche Ziel verzichtet, den in Anhang Tab. A 8 dargestellten Tagesablauf in einer Pflegeeinrichtung exakt nachzubilden. Der Tagesablauf diente dem unterstellten Szenario aber nach wie vor als Orientierung.

Die im COCOSYS-Datensatz hinterlegten Anfangs- und Randbedingungen für das Ausgangsszenario sind in Tab. 7.3 aufgelistet. Die Luft ist (neben dem Wasserdampfanteil als Funktion von der Temperatur und der relativen Feuchte) durch die Gase N_2, O_2 und CO_2 abgebildet.

Tab. 7.3 Übersicht über die im Ausgangsszenario verwendeten Anfangs- und Randbedingungen

Parameter	Wert	Kommentar
Raumdruck [bar]	1,0151	auch in Umgebung
Raumtemperatur [°C]	21	auch in Umgebung
Relative Luftfeuchte [%]	60	auch in Umgebung
CO_2 Anfangsdruck [%]	0,033	(Raumdruck minus Dampfdruck entspr. Feuchte) * 0,033
N_2/O_2 Verhältnis [%]	79/21	Andere Gase wie Ar als N_2 simuliert, N_2 = (Raumdruck minus Dampfdruck entspr. Feuchte minus CO_2) * 0,79

Die Umgebungsbedingungen sind nicht direkt verwendet, sondern flossen in die Definition der Anfangswerte bzw. Luftwechselzahlen durch das Fenster (Systeme ZULUFT und ABLUFT) ein. Maßgebliche meteorologische Einflussfaktoren auf den natürlichen Luftwechsel durch das Fenster sind, wie auch schon in Abschnitt 7.2 genannt, die Windgeschwindigkeit und -richtung, sowie die Temperaturdifferenz zwischen Raum- und Außenlufttemperatur /MAA 95/. Hier ist eine Windgeschwindigkeit von 0 $[m/s]$ sowie eine Temperaturdifferenz von 0 $[K]$ berücksichtigt; die Verringerung der Fläche z. B. durch einen Rollladen ist nicht unterstellt. Die Luftwechselzahlen sind also untere Werte. COCOSYS bietet die prinzipielle Möglichkeit der Vorgabe von zeitabhängigen Wetterrandbedingungen (Druck und Temperatur als WEATHER_BOUNDARY /ARN 20b/, aber nicht die Option der Vorgabe der Luftfeuchte und Windgeschwindigkeit zur Berechnung der Luftwechselzahl. Alle nicht gesondert aufgeführten Daten entsprechen denen in Abschnitt 7.3.

Die in der COCOSYS-Simulation verwendeten Zeitereignisse sind in Tab. 7.4 angegeben. Die Person 1 befindet sich die gesamte Simulation über im Zimmer und stellt damit die permanente Virenquelle dar – inklusive der CO_2-Quelle für die Atmung. In der ersten Phase 0 - 8,33 $[h]$, die entsprechend Anhang A.9 die längst mögliche Zeitspanne ohne Betreten des Zimmers darstellt, ist ein Zimmer mit einer Luftwechselzahl von $0[\ h^{-1}]$ unterstellt. Dadurch wird die maximale Viruskonzentration im Zimmer erreicht. Danach sind zwei mögliche Phasen mit gekipptem und voll geöffnetem Fenster simuliert. Die Person 2 betritt das Zimmer insgesamt dreimal für jeweils zehn Minuten, während dessen Atmung im COCOSYS-Modell aktiviert wird.

Tab. 7.4 Im Ausgangsszenario angenommene Zeitereignisse

Simulationszeit		**Aktion**	**Bemerkung**
[h]	**[s]**		
0	0	Start der Simulation	(Beginn Nachtruhe laut Ablaufplan in Anhang A.9) Fenster geschlossen (Luftwechselrate ZULUFT/ABLUFT = 0 $[\ h^{-1}]$)
8,33	30 000	Schwester (Person 2) betritt Patientenzimmer	(Wecken)
8,5	30 600	Schwester kippt Fenster an und verlässt Patientenzimmer	Fenster angekippt, Luftwechselrate nach Abschnitt 7.1 = 0,85$[\ h^{-1}]$
11,33	40 800	Schwester (Person 2) betritt Patientenzimmer	(pflegerische Tätigkeiten)

Simulations-zeit		Aktion	Bemerkung
[h]	[s]		
11,5	41 400	Schwester öffnet Fenster und verlässt Patientenzimmer	Fenster voll geöffnet, Luftwechselrate = 3,73 [h^{-1}]
14,33	51 600	Schwester (Person 2) betritt Patientenzimmer	(pflegerische Tätigkeiten)
14,5	52 200	Ende der Simulation	

7.5.1 Ergebnisse

Im Folgenden sind die Ergebnisse des Ausgangsszenarios diskutiert. Zunächst werden in Abb. 7.20 die Volumenströme zur Simulation der Lüftung über das Fenster dargestellt. Aufgrund der Annahme, dass das Fenster für 8,5 $[h]$, das heißt über Nacht, geschlossen ist, bleibt der Volumenstrom in dieser Periode gleich Null. Von 8,5 - 11,5 $[h]$ steht das Fenster auf Kipp mit einem Volumenstrom von etwa 0,012 $[m^3/s]$, was einer Luftwechselrate von 0,88 $[h^{-1}]$ entspricht. Danach wird von 11,5 $[h]$ bis zum Ende der Rechnung ein offenes Fenster simuliert mit einem Volumenstrom von etwa 0,052 $[m^3/s]$ (Luftwechselrate von 3,73 $[h^{-1}]$).

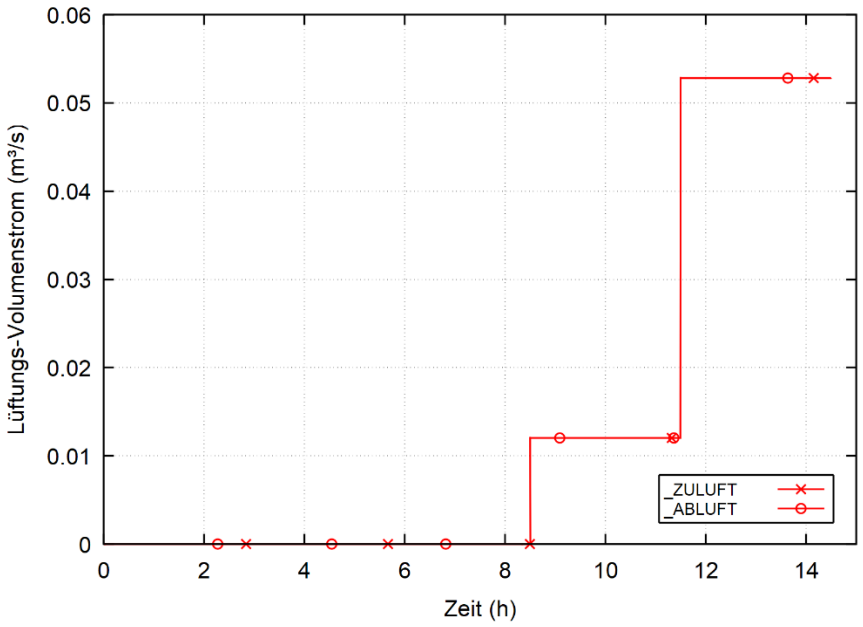


Abb. 7.20 Simulierte Volumenströmungen für Lüftung über das Fenster

Die Atmung der Person 1 wird über die gesamte Zeit angenommen und ist mit einer konstanten Atmungsrate simuliert. Die Atmung der eintretenden Person 2 wird jeweils nur solange simuliert wie sie sich im Zimmer befindet. Da die Infektionswahrscheinlichkeit in einem Zeitraum von zehn Minuten untersucht werden, ist das Lüftungssystem AUSATMEN2 der Person 2 auch jeweils zehn Minuten angeschaltet. Die drei gewählten Zeitpunkte sind für die Phasen des geschlossenen Raumes ohne Lüftung, mit Fenster auf Kipp und Fenster ganz geöffnet jeweils am Ende gewählt, um die sich einstellende Bio-Aerosolkonzentration zu erfassen. Der Atem-Volumenstrom für beide Personen beträgt jeweils $1{,}4166 \cdot 10^{-4}$ $[m^3/s]$, was 17 Atemzüge in der Minute mit einem Volumen von jeweils einem halben Liter entspricht (siehe Abb. 7.21).

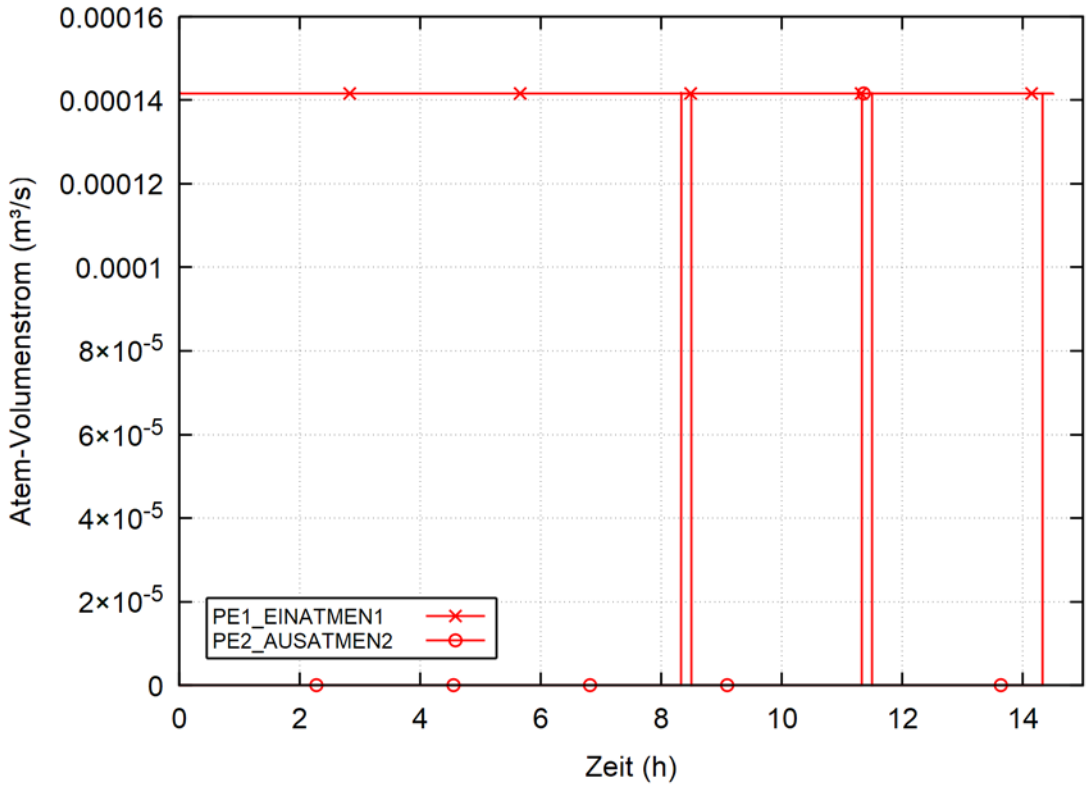


Abb. 7.21 Simulierte Volumenströmungen für Atmung

Die von COCOSYS berechnete luftgetragene Aerosolkonzentration der VIRUS-Komponente lässt sich direkt in die Quantenkonzentration umrechnen. In Abb. 7.22 ist diese für das Patientenzimmer (PZ1) über der Zeit dargestellt. Über Nacht nimmt die Quantenkonzentration beinahe linear zu, da die Rechnung mit Verdampfung des Wasseranteils vom Aerosol durchgeführt worden ist und das feine Aerosol damit kaum der Sedimentation unterliegt. Daher ist dieser Wert auch um einen Faktor 10 höher als in der Apothekenrechnung. Innerhalb der drei Stunden Lüftungsphase bei gekipptem Fenster verringert sich die Quantenkonzentration auf 0,5 $[Quanta/m^3]$ und am Ende der Phase bei

offenem Fenster auf einen deutlich verringerten Wert von 0,1 $[Quanta/m^3]$. Außerdem wurde die Quantenkonzentration im Rachen der Person 2 (THR2) ausgewertet, also hinter der Maske der eintretenden Pflegekraft. Die Maske verringert die Aerosolkonzentration nur zu einem geringen Teil, da mit Verdampfung der Tröpfchen im Patientenzimmer sich ein sehr feines Aerosol einstellt, das beim Einatmen entsprechend der definierten Filterfunktion nur unvollkommen zurückgehalten wird. Es ist davon auszugehen, dass eine Maske der infizierten Person 1 deutlich besser wirkt, da die Quelle ein Partikelgrößenspektrum aufweist, das zu größeren Durchmessern verschoben ist.

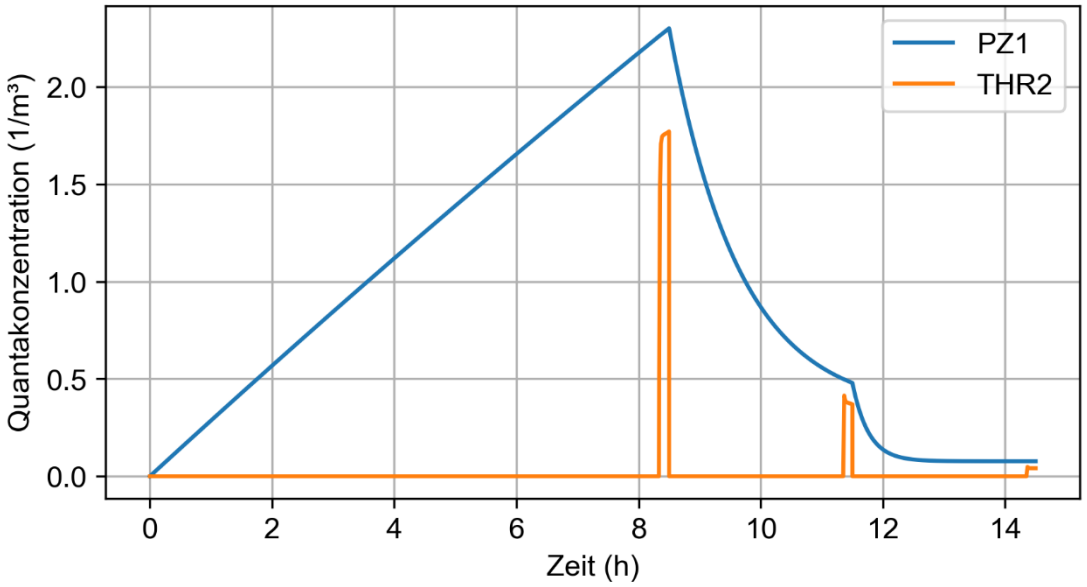


Abb. 7.22 Quantenkonzentration über der Zeit

Wie oben bereits diskutiert, führt das feine Aerosol zu einer geringen Ablagerung während der Ruhephase ohne Lüftung bis 8,5 $[h]$. Zusammen mit der nicht modellierten Inaktivierung über eine Halbwertszeit von etwa 1,5 $[h]$ führt das ohne Maske zu einem Infektionsrisiko von über 30 % bei einem 10-minütigen Aufenthalt im Patientenzimmer. Nach Kippen des Fensters verringert sich dieses Risiko innerhalb von drei Stunden auf etwa 7,5 % und nach einer weiteren Phase bei ganz geöffnetem Fenster auf einen konstanten Wert im Prozentbereich. Die Ergebnisse mit Maske sind abgegriffen in der Zone THR2. Die einzelnen Phasen zeigen einen ansteigenden Wert bis zum Verlassen des Raums, weil jeweils über die letzten zehn Minuten integriert wird und vorher anteilig Nullwerte mit integriert werden. Die Wirksamkeit der hier angesetzten Alltagsmaske (einfacher Gesichtsschutz, Twill Gewebe) ist wie bereits oben diskutiert vergleichsweise gering, da die Partikel relativ klein sind.

Aus der Simulation lässt sich ableiten, dass das Betreten des Pflegezimmers insbesondere nach der Nachtruhe bei verschlossenen Fenstern ein hohes Infektionsrisiko darstellt. Neben dem Tragen einer Maske mit höherer Rückhaltung (vgl. Abb. 7.18) sollte als erste Aktion durch das Personal das Fenster geöffnet werden, bevor pflegerische Tätigkeiten durchgeführt werden.

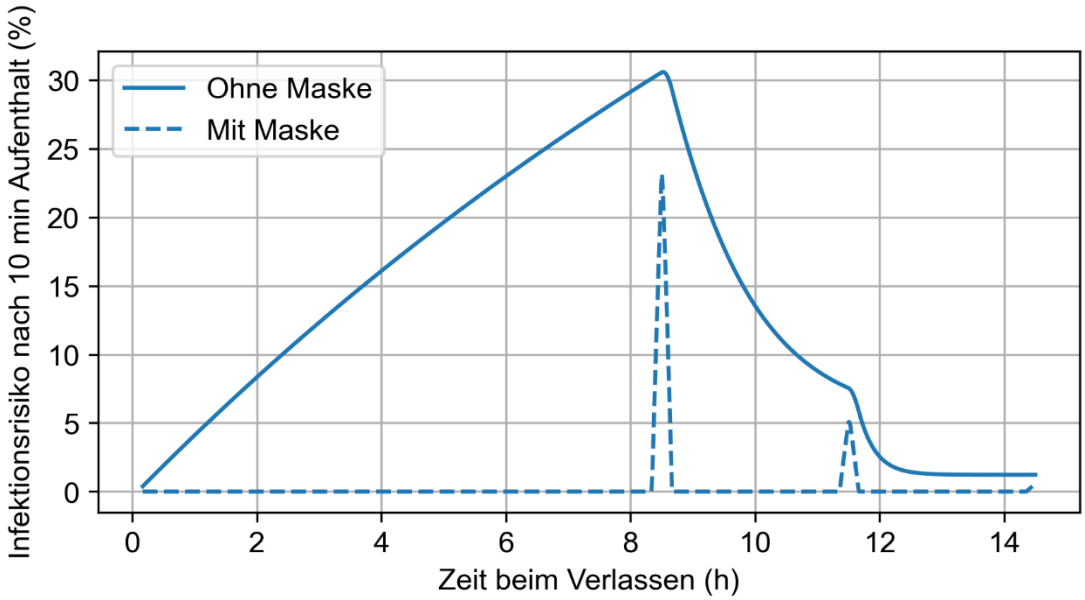


Abb. 7.23 Infektionsrisiko eines 10-minütigen Aufenthalts im Patientenzimmer

In Abb. 7.24 ist die Entwicklung der CO_2-Konzentration im Zimmer aufgetragen. Der CO_2-Anteil steigt kontinuierlich durch die Atmung der infizierten Person. Der Verlauf ist ähnlich zu der Aerosolkonzentration (siehe Abb. 7.22) mit einem Maximum am Ende der ungelüfteten Phase bei 8,5 $[h]$. Aus der Korrelation zwischen CO_2- und Aerosolkonzentration kann man ableiten, dass eine CO_2-Messung ein gutes Mittel zur Abschätzung der Bio-Aerosolkonzentration darstellen kann.

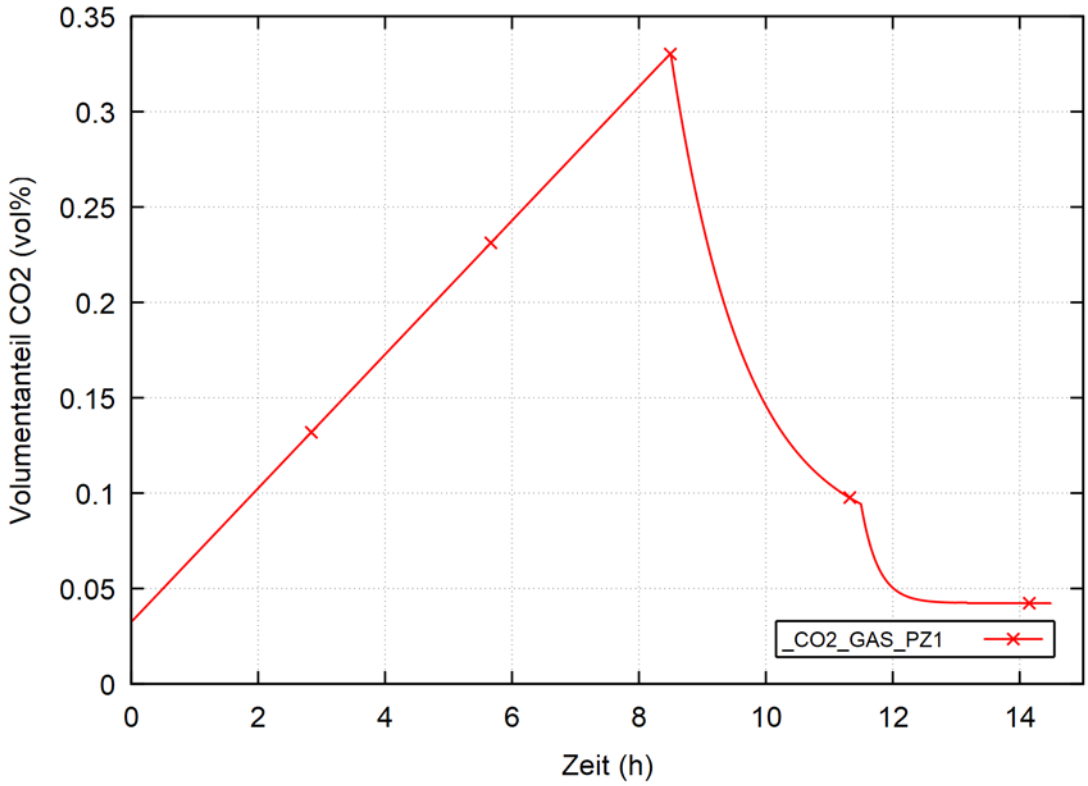


Abb. 7.24 Volumenanteil CO_2 als Tracer für Ausatmung

Die typische Partikelgrößenverteilung ist für diese Rechnung in Abb. 7.25 für das Wasseraerosol als auch die VIRUS-Komponente für einen Zeitpunkt ganz am Anfang nach 10 $[s]$ und etwas später nach 1050 $[s]$ (0,29 $[h]$) in PZ1 aufgetragen. Während das Wasseraerosol nur einen kleinen Versatz zu kleineren Durchmessern macht, hat die VIRUS-Komponente einen starken Anteil kleiner Partikel. Das kommt daher, das der Wasseranteil zu kleinen Durchmessern hin komplett verdampft. Die VIRUS-Komponente hingegen bleibt als festes Aerosol mit kleinem Durchmesser übrig und damit lange luftgetragen. Bei 1050 $[s]$ besteht die Verteilung aus einem Schwanz mit größeren Durchmessern, der die neu eingespeisten Teilchen repräsentiert und einem Anteil kleinerer getrockneter VIRUS-Partikel. Nur für den Durchmesserbereich bei 0,3 $[\mu m]$ wird eine Konzentration größer als 10^{-18} $[kg/m^3]$ berechnet, was bedeutet, dass in diesem Größenbereich mehr als ein Virus pro Kubikmeter vorhanden ist.

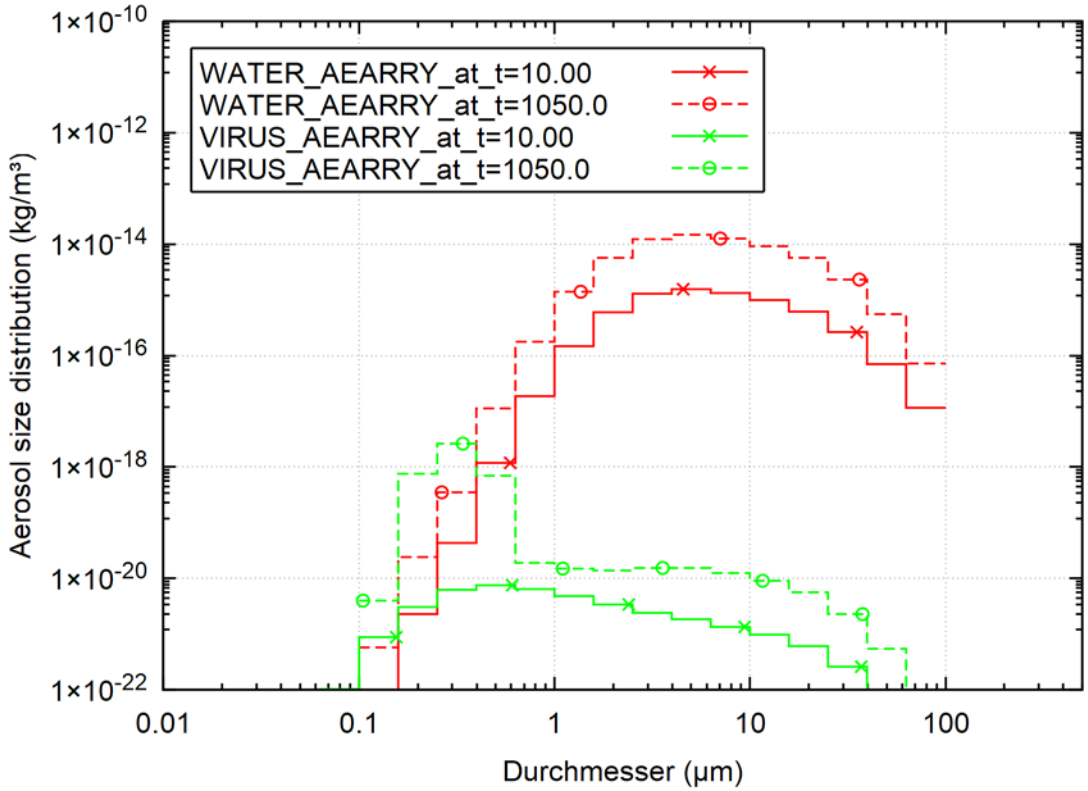


Abb. 7.25 Partikelgrößenverteilung im Patientenzimmer

Die Entwicklung der Größenordnung der Aerosole lässt sich besser anhand des Massenmedian-Durchmessers in Abb. 7.26 verfolgen. Dieser weist zu Beginn den Wert der Einspeisung auf, nimmt aber im Verlauf der Zeit immer weiter ab auf einen Wert unterhalb von 1 $[\mu m]$, weil sich das feine VIRUS-Aerosol im Laufe der Zeit ansammelt. Erst mit dem Öffnen des Fensters nimmt dieser Wert wieder zu, da das feine Aerosol mit der Atmosphäre abtransportiert wird.

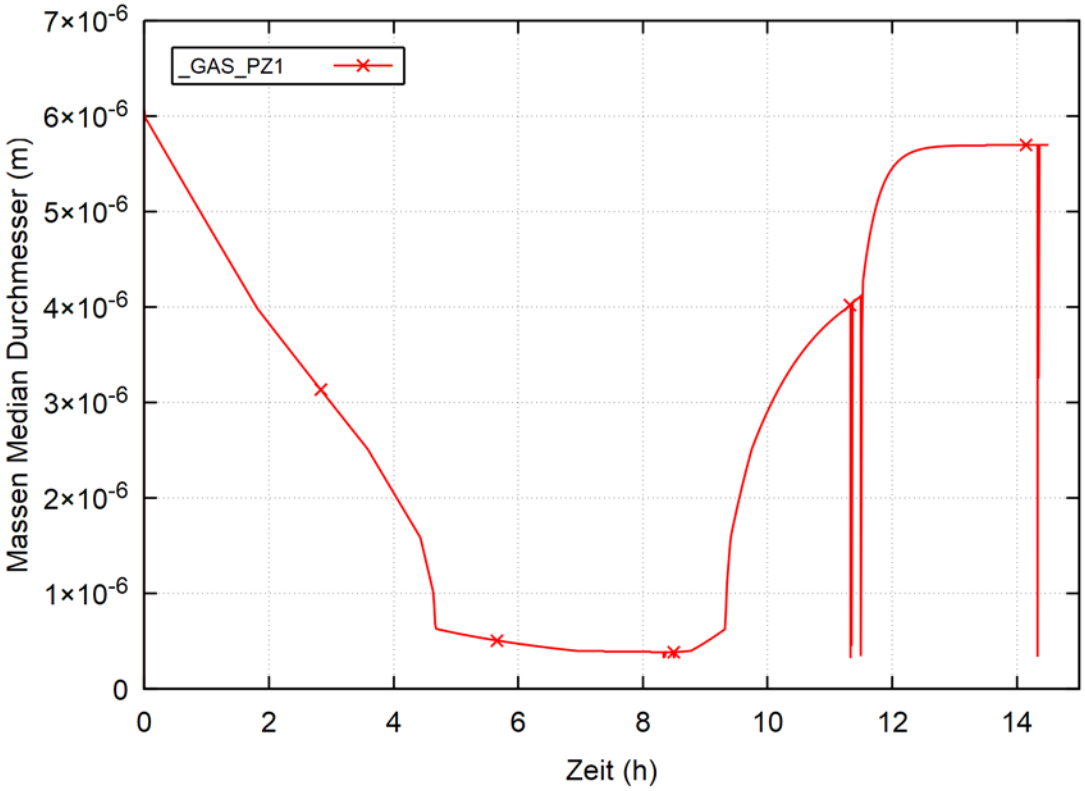


Abb. 7.26 Massenmediandurchmesser über der Zeit

Mit COCOSYS können auch die Ablagerungen der VIRUS-Aerosolkomponente auf verschiedenen Strukturen erfasst werden. Die Abb. 7.27 zeigt, dass das meiste Aerosol auf dem Boden und schon deutlich geringer auf den Wänden des Zimmers abgelagert wird. Auf der Deckenfläche lagert sich um zwei Größenordnungen weniger ab. In Abb. 7.27 enthalten ist auch die Beladung des Filters (Maske, Kurve „_VIRUS_F1“), die sich in zwei Schritten während der Aufenthaltszeiträume erhöht. Zur Interpretation ist zu beachten, dass die Masse der Virionen im Bereich von 10^{-18} $[kg]$ liegt. Damit zeigt sich, dass sich dort nur einzelne Virionen ablagern. Ablagerungen auf der Kleidung bzw. freien Hautpartien der Pflegekraft können in einem Post-Processing ausgerechnet werden, indem die Differenz aus der Ablagerungsmasse über die Zeiträume gebildet werden, in der die Pflegekraft sich im Zimmer befindet. Die dabei festgestellten abgelagerten Massen befinden sich aufgrund der kurzen Aufenthaltsdauern von jeweils zehn Minuten nur knapp oberhalb 10^{-18} $[kg]$ und sind bzgl. der Infektionsübertragung zu vernachlässigen.

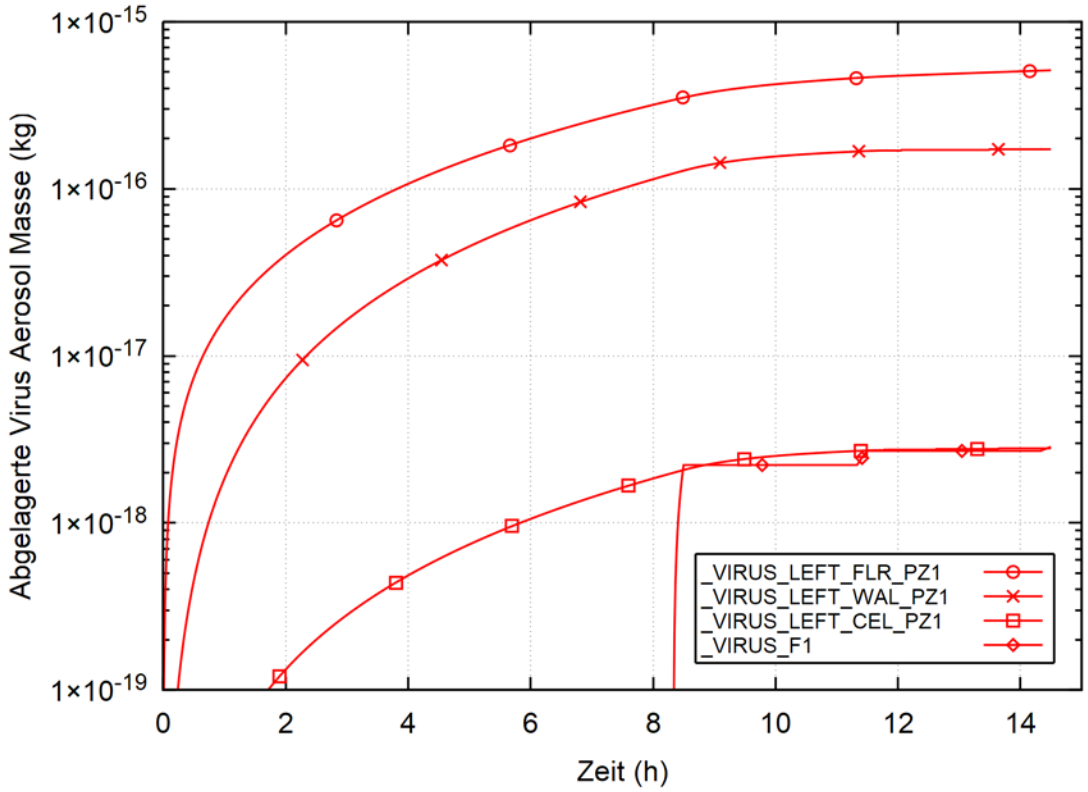


Abb. 7.27 Ablagerungen der VIRUS-Aerosolkomponente auf Strukturen und im Filter F1

7.6 Parameterstudie

Im Rahmen einer Parameterstudie sollte zunächst der Einfluss verschiedener Eingabe- und Modellparamater auf die berechnete Aerosolkonzentration im Patientenzimmer PZ1 und damit auf das Infektionsrisiko ermittelt werden. Dabei sollte auch geprüft/gezeigt werden, wo die Möglichkeiten und Grenzen von COCOSYS bzgl. der Virussimulation liegen.

Basierend auf dem Ausgangsszenario nach Abschnitt 7.5 wurden die in Tab. 7.5 aufgelisteten Parameter analysiert. Die jeweiligen Referenzwerte entsprechen denen im Ausgangsszenario. Generelle Raumdaten (Volumen, Oberflächen, …) sind nicht variiert, ebenso nicht die Nodalisierung (1-Raum Modell für das Patientenzimmer). In allen Rechnungen wurde ein Atmosphärendruck von 1015,1 $[hPa]$ verwendet.

Tab. 7.5 Übersicht über die COCOSYS Variantenrechnungen zum Patientenzimmer

Fett = Referenzwerte

Variante	Parameter	Variierter Parameter-bereich	Kommentare
1.	Aerosolrate (Biovirusquelle) [kg/s]	Faktor 10 kleiner und Faktor 10 größer als Referenzwert für alle Tröpfchen- und VIRUS-Einspeisungen	Details siehe Abschnitt 7.4.
2.	Speicheltropfengrö-ßenspektrum [μm]	4.01E-07/3.03E-07, **4.01E-06/3.03E-06**, 4.01E-05/3.03E-05	Massenmedian Durchmesser der beim Atmen/Husten freige-setzten Speicheltropfen (siehe Abschnitt 7.4)
3.	Salzgehalt der Speicheltropfen [kg/m**3]	Salzgehalt 0,2 % der Tropfenmasse/**ohne**	Diskussion in Abschnitt 7.6.1.
4.	Raumtemperatur (Luft) [°C]	18, **21**, 27	Umgebungstemperatur = Raum-temperatur
5.	Relative Luftfeuch-tigkeit [%]	40, **60**, 80, 99	Umgebungsfeuchte = Raum-feuchte *99 % ist unrealistisch hoch, aber aus Kenntnis der COCOSYS Aerosolmodelle interessant (100 % Sättigung)*

Weitere mögliche Parameter wurden im Rahmen dieses GRS-Projektes diskutiert, aber letztendlich nicht berücksichtigt wie:

- Virenanzahl pro m³ Tropfenvolumen
  Dieser Einfluss ist prinzipiell durch die Aerosolrate mit abgedeckt.

- Hintergrundaerosol
  Es spielt eine Rolle als Keimbilder bei der Kondensation von Wasserdampf, wurde aber wegen der Definition der Aerosoleinspeisung inklusive Tropfen als untergeord-net eingeschätzt. Dieser Einfluss sollte in Zukunft weiter untersucht werden.

- Luftwechselzahl der Patientenzimmers
  Der Einfluss durch variierten Öffnungszustand des Fensters nach 8,5 und 11,5 [h] mit abgedeckt.

- Atmosphärenzusammensetzung
  Der Einfluss auf das Bio-Aerosolverhalten wurde als vernachlässigbar eingeschätzt.

- Ablagerungsfläche auf einer Person
  Diese Fläche der Person 2 ist klein im Verhältnis zur Bodenfläche und zudem mit starken Unsicherheiten behaftet, so dass sie auf die Aerosolkonzentration im Zimmer PZ1 und damit das Infektionsrisiko nur sehr geringen Einfluss hat. Sie wurde deshalb aus der Parameterstudie ausgeschlossen.

- Berücksichtigung des Kelvin-Effektes
  Varianten mit Berücksichtigung waren numerisch instabil, so dass alle Rechnungen ohne Kelvin-Effekt durchgeführt wurden. Die Anwendbarkeit dieser Modelle in dem Bereich mit viel kleineren Aerosolkonzentrationen muss überprüft werden.

Die Varianten 1, 2 und 4 entsprechend Tab. 7.5 lieferten die erwarteten Ergebnisse: die Werte der Aerosolkonzentration und damit das Infektionsrisiko werden verschoben, ohne dass dabei die generelle Charakteristik der in Abschnitt 7.5.1 gezeigten Graphen ändert. Die Erhöhung der Aerosolfreisetzungsrate (Variante 1) erhöht das Infektionsrisiko, die Erhöhung des mittleren Tropfendurchmessers (Variante 2) verringert das Risiko. Der Einfluss der Raumtemperatur (Variante 4) ist vernachlässigbar gering. Dasselbe gilt für Variante 5, allerdings nur so lange kein Salz im Speichel berücksichtigt wird. Daher wird in diesem Bericht nur eine Variation der Varianten 3 und 5 beschrieben, also der Einfluss der Luftfeuchtigkeit bei vorhandenen Salzen im Speichel.

7.6.1 Einfluss der Luftfeuchte bei vorhandenen Salzen im Speichel

Als interessantester Fall wurde eine Mischung der Varianten 3 und 5 identifiziert, da die Variation der relativen Feuchte nur bei vorhandenen Salzen einen Einfluss hat. Deren Ergebnisse sind im Folgenden eingehender diskutiert. In den Varianten 80 % und 99 % relative Luftfeuchtigkeit wurde der Salzgehalt in den freigesetzten Speicheltropfen mitberücksichtigt. Die enthaltenen Salze wurden aufgrund von drei Literaturstellen /LAB 18/, /SIN 94/, /KAL 13/ auf 2 Massen-‰ der Speichelmasse abgeschätzt. Die Tab. 7.6 zeigt eine Zusammenfassung dieser Arbeiten.

Tab. 7.6 Literaturangaben über Speichelzusammensetzung

Stoff	Labat 2018/mM	Singh 1994/mEq/l	Kallapur 2013/$[mmol/L]$
Natrium	14.5 (11.5 - 18.6)	17.4 (8.7 - 24)	80.0 (11.5 - 217.3)
Kalium	29.2 (25.1 - 34.7)	14.1 (13 - 16)	8.9 (2.6 - 18.3)
Phosphate	6.33 (5.10 - 8.78)		
Calcium	0.28 (0.23 - 0.37)		

Im Speichel enthalten sind im Wesentlichen Natrium- und Kalium-Kationen. Als zugehöriges Anion wurde eine einfache OH-Gruppe angenommen und somit NaOH modelliert. Unter der Annahme: 50 $[mmol/L]$ NaOH und einer Molaren Masse von NaOH M_{NaOH} = 23+16+1 $[g/mol\,]$ = 40 $[g/mol\,]$ ergibt sich folgender Anteil von Salz im Speichel:

$$0.05\left[\frac{Mol}{kg_{\text{Wasser}}}\right] = 0.002\left[\frac{kg_{\text{NaOH}}}{kg_{\text{Wasser}}}\right]$$

Dadurch ist die Annahme von 2 Massen-‰ des Salzes auf die Speichelmasse begründet.

Der Einfluss der Feuchte bei vorhandenem Salzgehalt auf das Infektionsrisiko ist in Abb. 7.28 dargestellt. Die Kurve bei 80 % relativer Feuchte ist etwas niedriger als die Basiskurve ohne Salz und bei 60 % relativer Feuchte. Der Effekt ist bei dieser Feuchte noch gering. Bei einer eher akademisch angenommenen Feuchte von 99 % ist das Infektionsrisiko hingegen deutlich geringer. Das liegt daran, dass das Verdampfen der Partikel deutlich gebremst wird und größere Tröpfchen übrigbleiben, die schneller ausfallen als das feine VIRUS-Aerosol. Diese Rechnungen zeigen, dass bei hohen Luftfeuchten (z. B. in sanitären Einrichtungen) der Salzgehalt im Speichel mitberücksichtigt werden sollte.

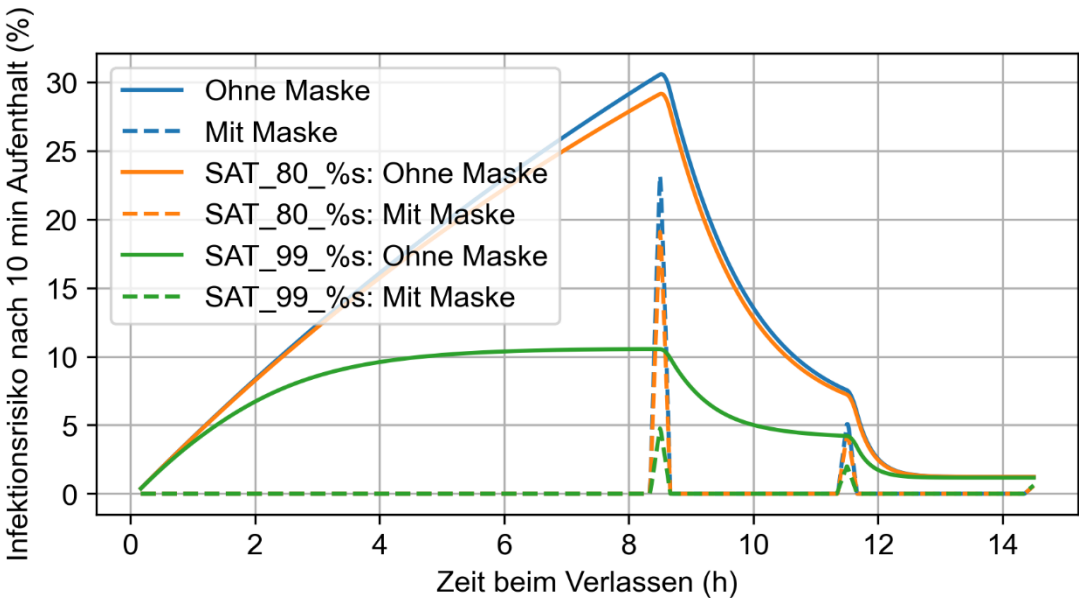


Abb. 7.28 Vergleich des Risikos bei verschiedenen relativen Feuchten mit enthaltenem Salz

Blaue Kurven: Ausgangsszenario mit 60 % relative Feucht aber ohne enthaltenes Salz

7.7 Diskussion der COCOSYS-Simulationen

In der hier beschriebenen COCOSYS-Anwendung ist eine Pflegeeinrichtung mit einer infizierten Person simuliert. Verschiedene Bedingungen, wie die der nächtlichen Ruhe bei geschlossenem Fenster, eines auf Kipp gestellten Fensters und eines komplett geöffneten Fensters sind in einem Szenario abgebildet und das potenzielle Infektionsrisiko ermittelt worden, das das Pflegepersonal bei einem 10-minütigen Aufenthalt in dem Patientenzimmer hat. Nach der nächtlichen Ruhe von 8,5 $[h]$ ergibt sich ein sehr hohes Risiko von ca. 30 %, da die Aerosole nach der weitgehenden Verdampfung der Tröpfchen lange luftgetragen bleiben. Dieser Wert wird in der Rechnung überschätzt, da COCOSYS gegenwärtig den Zerfall der Viren (siehe Abschnitt 4.3.4) nicht berücksichtigen kann, der in der Größenordnung von 1 bis 2 $[h]$ liegt. Nach Beginn der Lüftung, zunächst über ein angekipptes Fenster und später über ein ganz geöffnetes Fenster, nimmt das Risiko sehr stark ab, da in diesen Fällen der Aerosoltransport aus dem Zimmer über das Fenster in die Umgebung im Vergleich zur Sedimentation auf Oberflächen im Zimmer stark überwiegt.

Darüber hinaus ist auch die Schutzwirkung einer einfachen Maske für das Pflegepersonals simuliert worden, die partikelgrößenabhängig mit vorgegebenen Rückhaltefaktoren arbeitet. Die COCOSYS-Simulation konnte bestätigen, dass das Infektionsrisiko bereits durch das Tragen einer einfachen Maske verringert wird. Die Verwendung einer FFP2-Maske mit wesentlich höherer Rückhaltung (vgl. Abb. 7.18) verringert das Infektionsrisiko deutlich. Weiterhin ist anzunehmen, dass die Schutzwirkung durch eine Maske, die von der infizierten Person getragen wird, aufgrund der besseren Zurückhaltung der größeren, ausgeatmeten Partikel, höher ist.

Die berechneten Infektionsrisiken (mit und ohne Maske) sind konservativ überschätzt, da, wie bereits für die Apothekensimulation dargestellt, COCOSYS derzeit keinen zeitlichen Zerfall der Viren simulieren kann.

Wegen des großen Einflusses der Verdampfung in der Apothekenrechnung, ist dieser Effekt in der Parameterstudie für das Patientenzimmer speziell untersucht worden. Einen Einfluss auf die finale Tröpfchengröße haben auch im Speichel gelöste Salze, die das weitere Verdampfen unterhalb einer minimalen Größe verhindern können. In dieser Variation ist dem Wasseraerosol neben der VIRUS-Komponente auch eine zweite Komponente SALT eingespeist worden und mit dem Ausgangsszenario ohne Salz verglichen worden. Diese Variantenrechnungen sind mit relativen Luftfeuchten von 80 % und 99 %

durchgeführt und mit der Ausgansrechnung (mit 60 %) verglichen worden. In dem 80 %-Fall ist eine leichte Verringerung des Risikos zu beobachten (im Fall mit 60 % sind die Ergebnisse mit und ohne Salz quasi deckungsgleich), wohingegen bei dem eher akademischen Fall von 99 % ein starkes Absinken auf weniger als die Hälfte zu beobachten ist. Der Grund ist, dass das vorhandene Salz den Sättigungsdampfdruck an der Tröpfchenoberfläche absenkt, weswegen eine weitere Verdampfung verhindert wird und die Tröpfchen mit einem größeren Durchmesser schneller ausfallen.

Ein weiteres Ergebnis ist, dass eine gewisse Korrelation zwischen der Bio-Aerosol- und atmungsbedingten CO_2-Konzentration bestätigt werden konnte. Somit können CO_2-Messgeräte als Indikatoren für ein potenzielles Infektionsrisiko verwendet werden. Zu erwähnen ist, dass die errechneten Bio-Aerosolkonzentrationen entscheidend durch die Annahmen zu Undichtheiten (Fläche, genaue Lage) und/oder Tür-/Fenster-Öffnungsvorgängen (zeitlicher Öffnungsverlauf von Strömungsverbindungen) bestimmt werden.

8 Ableitung zukünftiger Arbeiten

Während der Anwendung von COCOSYS wurde eine Reihe von möglichen Programmerweiterungen identifiziert, die entweder die Simulationsmöglichkeiten bzgl. Bio-Aerosolen verbessern oder nützlich für die Auswertung der Ergebnisse sind. Diese können in einem möglichen Folgevorhaben in den COCOSYS-Programmcode implementiert werden. Diese sind:

- Berücksichtigung der Zerfallszeit (Halbwertszeit) von Viren in Luft
- Stabilisierung des Kelvin-Effekt unter den Bedingungen kleiner Aerosolkonzentrationen im Vergleich zu Containment-Anwendungen
- Erweiterung der Vorgabe von Wetterrandbedingungen (Luftfeuchte, Windgeschwindigkeit)
- Berechnung der Luftwechselzahl für vorgegebene Fenster und Türen in Abhängigkeit von den Wetterrandbedingungen (inkl. den Druck- und Temperaturdifferenzen Zone-Umgebung)
- Ermöglichung der Deaktivierung und Reaktivierung der Aerosolablagerung auf Strukturen über External Events (zeitabhängig) um Ablagerung und Transport von Aerosolen auf der Bekleidung des Pflegepersonals zu simulieren.

Folgende Arbeitspunkte, die im Projekt bisher nicht weiter untersucht wurden, aber als die Aerosolkonzentration und damit das Infektionsrisiko beeinflussend eingeschätzt werden, sollten weiterverfolgt werden:

- Bereitstellung von realistischer Speichelzusammensetzung, insbesondere der enthaltenen Salze, für die Berechnung der Verdampfung der Tröpfchen
- Validierung der zeitabhängigen Partikelgrößenänderungen anhand von Experimenten ist wünschenswert, hängt jedoch von der Verfügbarkeit von experimentellen Daten zu Bio-Aerosol-typischen Ausbreitungs- und Ablagerungsprozessen ab
- Untersuchung der Wechselwirkung der Aerosoltröpfchen mit Staub und Feinstaub als Hintergrundaerosol
- Berücksichtigung des Kelvin-Effekts

COCOSYS bietet prinzipiell die Erweiterung der Aerosolausbreitung auf Mehrraumgeometrien. Allerdings sollte vor einer solchen Erweiterung der Verdampfungseffekt von

Speicheltröpfchen, insbesondere die begrenzende Wirkung von Salzen, untersucht werden. Dazu ist es notwendig, die im Speichel vorhandenen Salze näher zu spezifizieren, damit eine korrekte Berechnung des Verdampfens der Tröpfchen möglich wird. Darüber hinaus spielt der Kelvin-Effekt (vgl. Abschnitt 3.2) eine Rolle bei der Verdampfung der Tröpfchen, indem die Oberflächenspannung an der gekrümmten Wasseroberfläche zunimmt. Zwar kann das entsprechende Modell in COCOSYS diesen Effekt simulieren, allerdings erwies sich dieses Modell unter den geringen Aerosolkonzentrationen im Vergleich mit Containment-Anwendungen als instabil, weshalb die Berücksichtigung des Kelvin-Effekts ausgeschaltet worden ist. Außerdem ist die Wechselwirkung mit in der Atmosphäre typischerweise vorhandenem Staub zu klären.

9 Zusammenfassung

Bei der gegenwärtigen COVID-19-Pandemie gelten die Aerosol- und Tröpfcheninfektion als Hauptübertragungswege, wobei der Übergang beider Formen fließend ist. Während größere Tröpfchen schnell zu Boden sinken, können kleinere Tröpfchen je nach Größe eine Zeit lang in der Luft verbleiben und sich ausbreiten (luftgetragene Aerosole).

Zuletzt verdichteten sich die Hinweise, dass Infektionen über Aerosole insbesondere in schlecht belüfteten Innenräumen wesentlich zur Ausbreitung des Virus beitragen. Daher ist die Untersuchung von virenhaltigen Aerosolen in der Raumluft von Gebäuden und die Abschätzung des diesbezüglichen Infektionsrisikos von besonderem Interesse.

Einige der gegenwärtigen Untersuchungen zur Aerosolausbreitung basieren auf vereinfachten, d. h. parametrisierten Berechnungsansätzen, in denen die physikalischen Vorgänge (z. B. Diffusion, thermische Effekte, verändertes Schwebeverhalten durch Partikelverkleinerung) nicht im Detail abgebildet werden. Auch der wichtige Einfluss äußerer Luftbewegungen auf die Aerosolausbreitung (Luftzug, Konvektion) wird oftmals nicht berücksichtigt.

Vor diesem Hintergrund hat die GRS im Rahmen des Vorhabens AeroCoV untersucht, inwieweit das selbstentwickelte und für die Analyse von Stör- und Unfällen in Containments von Kernkraftwerken validierte Simulationsprogramm COCOSYS (Teil des Programmsystems AC^2) ohne weitere Anpassungen zur Ausbreitungsanalyse von SARS-CoV-2-Aerosolen verwendet kann. Mit COCOSYS können neben Transportprozessen (z. B. Diffusion, Absetzung und Aufwirbelung) auch Zustandsänderungen (z. B. Wachstum durch Zusammenstoß, Verdampfung) und Rückhalteprozesse bei Aerosolen, z. B. durch Filter, abgebildet werden. Die für die Anwendung des Programms notwendige Erstellung eines Modells umfasst Zonen, die jeweils durch gemittelte Zustandsgrößen beschrieben werden („lumped parameter“ Ansatz) und somit die räumliche Auflösung der Ergebnisse bestimmen.

Zunächst wurden die für eine solche Analyse notwendigen Eingangsgrößen und Modellannahmen in einer umfangreichen Literaturstudie identifiziert und bestimmt. Dabei wurden neben Aerosol-spezifischen Eigenschaften insbesondere auch medizinisch-virologischen Daten und Zusammenhänge erfasst. Letztere beinhalten personenbezogene Kenngrößen, wie Atemvolumen, Aktivitätsmuster der Person, Aerosolfreisetzung, -aufnahme und -ablagerung. Weiterhin wurde ein Infektionsrisiko-Modell identifiziert, mit

dem das Infektionsrisiko aus einer gegebenen Aerosolkonzentration berechnet werden kann (sogenanntes Wells-Riley-Modell).

Anschließend zeigte eine erste Verifizierungsrechnung, dass eine einfache Abschätzung eines italienisch-australischen Forscherteams zum zeitlichen Verlauf des Infektionsrisiko in einem eng definierten Szenario mit COCOSYS gut reproduziert werden kann. Dabei stand die Frage im Vordergrund, welches Infektionsrisiko mit dem Betreten eines Apothekenraums einhergeht, in dem sich zuvor eine infizierte Person aufgehalten hat (jeweils 10-minütiger Aufenthalt). In Übereinstimmung mit den Literaturwerten zeigt COCOSYS, dass das Infektionsrisiko am größten ist, wenn der Raum acht Minuten nach der infizierten Person betreten wird (ca. 4,2 %). Danach sinkt das Infektionsrisiko nur allmählich, insbesondere bei geringer Lüftung (50 Minuten nach Verlasen der infizierten Person auf 2,5 % (COCOSYS) bzw. 2 % (Literaturwert)). Der Abfall reduziert sich zusätzlich, wenn in COCOSYS zusätzlich die Verdampfung an den Aerosolpartikeln (und damit ein realistischeres Sedimentationsverhalten) simuliert wird. Dieser Effekt wurde in der vereinfachten Abschätzung vernachlässigt und unterstreicht die Wichtigkeit, die physikalischen Phänomene bei Aerosolausbreitungen umfassend zu berücksichtigen.

Nachfolgend wurde mit COCOSYS in einem ersten umfassenden Anwendungsfall das Ansteckungsrisiko in einem repräsentativen Zimmer einer Kranken- bzw. Pflegeeinrichtung berechnet. Dabei wurde eine im Zimmer lebende infizierte Person und typische Arbeitsabläufe einer (eintretenden) Pflegekraft unterstellt sowie bauliche und lüftungstechnische Randbedingungen berücksichtigt. Weiterhin umfasst die COCOSYS-Modellierung mit dem Patientenzimmer und zwei Umgebungszonen (Atmosphäre bzw. angrenzender Flur) sowie dem Rachen und der Lunge beider Personen insgesamt sieben Modellzonen.

Den Simulationsergebnissen zufolge beträgt das Infektionsrisiko für eine Pflegekraft beim Betreten des Zimmers (10-minütiger Aufenthalt) nach der Nachtruhe ca. 30 %, wenn in Folge unzureichender Lüftung über die Nacht eine hohe Konzentration von virenhaltigen Bio-Aerosolen vorliegt. Das Risiko verringert sich drei Stunden später auf 7,5 % (mit Alltagsmaske 5 %), insofern das Fenster nach der Nachtruhe gekippt wird (Luftwechselrate 0,88 pro Stunde). Die anschließende vollständige Öffnung des Fensters lässt das Infektionsrisiko nach kurzer Zeit auf einen Wert von ca. 1 % absinken (ohne Maske). Anders als bei einer FFP2-Maske ist die Wirksamkeit der simulierten Alltagsmaske begrenzt, da die Filterwirkung für Aerosole über den gesamten relevanten Größenbereich unzureichend ist. Weitere Untersuchungen zeigten, dass sich auch ge-

ringe Luftwechselraten und insbesondere Strömungsverbindungen („Durchlüften“) deutlich auf die Ergebnisse auswirken. Da COCOSYS derzeit keinen zeitlichen Zerfall von Viren berücksichtigt, wird aktuell das berechnete Infektionsrisiko tendenziell überschätzt.

Die Simulation zeigt einerseits, dass das Infektionsrisiko in einem repräsentativen Patientenzimmer aufgrund einer infizierten Person innerhalb weniger Stunden ohne Luftwechsel ein signifikantes Niveau erreicht. Andererseits konnte die Wirksamkeit von Handlungsmaßnahmen (gekipptes Fenster, vollständig geöffnetes Fenster, Tragen von Masken) quantifiziert werden.

Insgesamt legen die Ergebnisse des AeroCoV-Vorhabens nahe, dass mit COCOSYS plausible Infektionsrisiken durch virenhaltige, luftgetragene Aerosole ermittelt werden können. Insbesondere kann das Zusammenwirken mehrerer Faktoren wie die Speicherung virenhaltiger Aerosole in der Raumluft, räumliche Randbedingungen, veränderliche Temperatur und Luftfeuchte, der Einfluss von Luftwechsel und Filtersystemen (Masken) detailliert und über hinreichende Zeitdauern untersucht werden. Damit unterscheidet sich der COCOSYS-Ansatz deutlich von vereinfachten analytischen Ansätzen sowie CFD-Berechnungen.

Der wissenschaftliche Kenntnisstand für das SARS-CoV-2-Virus verdichtet sich derzeit rapide, jedoch bestehen für gewisse Eingangsgrößen noch große Unsicherheiten hinsichtlich ihrer realistischen Werte. Zu nennen sind die verwendeten Größen c_i(Verhältnis zwischen einem infektiösen Quantum und der infektiösen Dosis in viralen RNA-Kopien), und c_v (Maß für die Viruslast ($[RNA - Kopie/mL]$ Speichel), wobei aktuell für c_v-Werte in einer Bandbreite zwischen 10^6 und 10^{11} diskutiert werden.

Aufbauend auf dem AeroCoV-Vorhaben können in nachfolgenden Arbeiten Szenarien mit mehreren Räumen und komplexeren Interaktionen zwischen Personen (einschließlich verschiedener Aktivitäten) untersucht werden. Insbesondere an Orten mit wohldefinierten/getakteten Abläufen (Schulen, Kindertagesstätten, ÖPNV, Einzelhandel, industrielle Produktionsstätten etc.) erscheint eine Abschätzung des Infektionsrisikos und die Ableitung konkreter Handlungsempfehlungen anhand von COCOSYS-Simulationen als zielführend.

Der hier gewählte Simulationsansatz offeriert auch die Möglichkeit, die gewonnenen Erkenntnisse auf bevorstehende Ausbreitungsverläufe von pathogenen Bio-Aerosol bzw. Mutationen des SARS-CoV-2-Virus zu übertragen.

In Vorbereitung dieser komplexeren Anwendungen ist es notwendig, die Zerfallszeit von Viren in COCOSYS in direkter Weise zu berücksichtigen. Außerdem sind Annahmen bzgl. Speichelzusammensetzung und die zeitliche Partikelgrößenänderungen zu überprüfen.

Literaturverzeichnis

/ALL 07/ Allelein, H.-J., Intensivierte Validierung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC BMWi Projekt RS1147, Abschlussbericht GRS-A-3330 Teil I und II, 2007.

/ARN 20a/ Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Eschricht, D., Nowack, H., Reinke, N., Brückner, N. Regression testing for COCOSYS 3.0.1, GRS-P-3/Vol. 3, 2020.

/ARN 20b/ Arndt, S., Band, S., S., B., Eschricht, D., Iliev, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Weber, G., COCOSYS 3.0 User Manual: Vol. GRS-P-3/Vo. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2020.

/BAK 19/ Bake, B., Larsson, P., Ljungkvist, G., Ljungström, E., & Olin, A. C., Exhaled particles and small airways. Respiratory Research, 20(1), 1–14, https://doi.org/10.1186/s12931-019-0970-9, 2019.

/BUL 20/ Bulfone, T. C., Malekinejad, M., Rutherford, G. W., Razani, N., Outdoor Transmission of SARS-CoV-2 and Other Respiratory Viruses, a Systematic Review, The Journal of Infectious Diseases, https://doi.org/10.1093/infdis/jiaa742, 2020.

/BUN 20/ Bundesregierung (n.d.), Corona-Warn-App: Unterstützt uns im Kampf gegen Corona. Retrieved November 9, 2020, from https://www.bundesregierung.de/breg-de/themen/corona-warn-app.

/BUO 20a/ Buonanno, G., Morawska, L., Stabile, L., Quantitative assessment of the risk of airborne transmission of SARS-CoV-2 infection: Prospective and retrospective applications, https://doi.org/10.1016/j.envint.2020.106112, 2020.

/BUO 20b/ Buonanno, G., Stabile, L., Morawska, L., Estimation of airborne viral emission: Quanta emission rate of SARS-CoV-2 for infection risk assessment, Environment International, 141(May), 105794, https://doi.org/10.1016/j.envint.2020.105794, 2020.

/BUT 20/ Butowt, R., Bilinska, K., SARS-CoV-2: Olfaction, Brain Infection, and the Urgent Need for Clinical Samples Allowing Earlier Virus Detection. ACS Chemical Neuroscience, 3–6, https://doi.org/10.1021/acschemneuro.0c00172, 2020.

/CHI 20/ Chia, P. Y., Coleman, K. K., Tan, Y. K., Ong, S. W. X., Gum, M., Lau, S. K., Lim, X. F., Lim, A. S., Sutjipto, S., Lee, P. H., Son, T. T., Young, B. E., Milton, D. K., Gray, G. C., Schuster, S., Barkham, T., De, P. P., Vasoo, S., Chan, M., … Moses, D., Detection of air and surface contamination by SARS-CoV-2 in hospital rooms of infected patients. Nature Communications, 11(1), 1–7, https://doi.org/10.1038/s41467-020-16670-2, 2020.

/DBO 20/ Dbouk, T., Drikakis, D., Weather impact on airborne coronavirus survival. Physics of Fluids, 32(9), 093312. https://doi.org/10.1063/5.0024272, 2020.

/DHA 20/ Dhand, R., Li, J., Coughs and Sneezes: Their Role in Transmission of Respiratory Viral Infections, including SARS-CoV-2. American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine, 202(5), 651–659. https://doi.org/10.1164/rccm.202004-1263PP, 2020.

/ENE 20/ Energie-Lexikon, RP-Energie-Lexikon - Luftwechselrate, Zufuhr, Frischluft, Luftwechselzahl, Belüftung, Fensterlüftung, Gebäudehülle, Entfeuchtung, Luftfeuchtigkeit. https://www.energie-lexikon.info/luftwechselrate.html, 2020.

/ERH 15/ Erhart, T., Guerlich, D., Schulze, T., Eicker, U., Experimental validation of basic natural ventilation air flow calculations for different flow path and window configurations. Energy Procedia, 78, 2838–2843, https://doi.org/10.1016/j.egypro.2015.11.644, 2015.

/EVA 20/ Evans, M. J., AVOIDING COVID-19: AEROSOL GUIDELINES, https://doi.org/10.1101/2020.05.21.20108894, 2020.

/FEA 20/ Fears, A., Klimstra, W., Duprex, P., Hartman, A., Weaver, S., Plante, K., Mirchandani, D., Plante, J., Aguilar, P., Fernandez, D., Nalca, A., Totura, A., Dyer, D., Kearney, B., Lackemeyer, M., Bohannon, J. K., Johnson, R., Garry, R., Reed, D., Roy, C., Comparative dynamic aerosol efficiencies of three emergent coronaviruses and the unusual persistence of SARS-CoV-2 in aerosol suspensions. MedRxiv : The Preprint Server for Health Sciences, 2020.04.13.20063784. https://doi.org/10.1101/2020.04.13.20063784, 2020.

/FIR 96/ Firnhaber, M., Kanzleiter, T. F., Schwarz, S., Weber, G., International Standard Problem ISP37: VANAM M3 - A Multi-compartment aer-osol depletion test with hygroscopic aerosol material: comparison report Report N° NEA/CSNI/R(96)26, 1996.

/FIR 02/ Firnhaber, M., Fischer, K., Schwarz, S., Weber, G., KAEVER – Experiments on the Behavior of Core-melt Aerosols in a LWR Containment OECD NEA ISP44, Comparison Report, NEA/CSNI/R(2003)5, 2020.

/FRE 19/ Freitag, M., Gupta, S, Beck, S., Sonnenkalb, M., Experimental and Analytical Investigations of Aerosol Processes - Wash-Out and Wash-Down, Nuclear Science and Engineering, 193, 1-2, p. 198-210, 2019 DOI: 10.1080/00295639.2018.1479091

/GAM 97/ Gammaitoni, L., Nucci, M. C., Using a Mathematical Model to Evaluate the Efficacy of TB Control Measures. Emerging Infectious Diseases, 3(3), 335–342, DOI: 10.3201/eid0303.970310 1997.

/GRA 11/ Gralton, J., Tovey, E., Mclaws, M.-L., Rawlinson, W. D., The role of particle size in aerosolised pathogen transmission: A review, Journal of Infection, 62, 1–13, https://doi.org/10.1016/j.jinf.2010.11.010, 2011.

/GRO 20/ Großschweidnitz. (n.d.). Tagesablauf auf den Stationen | Sächsisches Krankenhaus Großschweidnitz. Retrieved December 11, 2020, from https://www.skh-grossschweidnitz.sachsen.de/krankenhausaufenthalt/tagesablauf-auf-den-stationen/

/HAH 07/ Hahn, V., „Trockene Luft" und ihre Auswirkungen auf die Gesundheit-Ergebnisse einer Literaturstudie „Dry air" and its effects on health-Results of a literature survey, https://www.dguv.de/medien/ifa/de/pub/grl/pdf/2007_009.pdf, 2007.

/HAL 98/ Hales, T. C., An overview of the Kepler conjecture. 1–16. http://arxiv.org/abs/math/9811071, 1998.

/HIN 82/ Hinds, W. C., Aerosol Technology (2.), WILEY Interscience, 1982.

/HOL 11/ Holmgren, H., On the formation and physical behavior of exhaled particles, 66, 2011.

/HOM 20/ homologe Rekombination - Lexikon der Biologie. (n.d.). Retrieved October 20, 2020, from https://www.spektrum.de/lexikon/biologie/homologe-rekombination/32436.

/IJA 85/ Ijaz, M. K., Brunner, A. H., Sattar, S. A., Nair, R. C., Johnson-Lussenburg, C. M., Survival characteristics of airborne human coronavirus 229E. Journal of General Virology, 66(12), 2743–2748, https://doi.org/10.1099/0022-1317-66-12-2743, 1985.

/KAL 13/ Kallapur,B., Bastian,K. R.,Mujib, A., Sarkar, A., Sethuraman, S., Quantitative estimation of sodium, potassium and total protein in saliva of diabetic smokers and nonsmokers: A novel study Journal of Natural Science, Biology and Medicine Year: 2013,Volume : 4, Issue : 2, Page : 341-345, DOI: 10.4103/0976-9668.117006

/KAN 20/ Kaniyala Melanthota, S., Banik, S., Chakraborty, I., Pallen, S., Dharshini Gopal, |, Chakrabarti, S., Mazumder, | Nirmal, Elucidating the micro-scopic and computational techniques to study the structure and pathol-ogy of SARS-CoVs, https://doi.org/10.1002/jemt.23551, 2020.

/KEZ 20/ Ke, Z., Oton, J., Qu, K., Cortese, M., Zila, V., McKeane, L., Nakane, T., Zivanov, J., Neufeldt, C. J., Cerikan, B., Lu, J. M., Peukes, J., Xiong, X., Kräusslich, H. G., Scheres, S. H. W., Bartenschlager, R., Briggs, J. A. G., Structures and distributions of SARS-CoV-2 spike proteins on intact virions. Nature, 1–5, https://doi.org/10.1038/s41586-020-2665-2, 2020.

/KLH 13/ Klein-Heßling, W., Arndt, S., & Wolff, H., COCOSYS V2.4 Assessment Document, 2013.

/KLH 17/ Klein-Heßling, W., Nowack, H., Sonnenkalb, M., New concepts in the aerosol and fission product module of the containment code system COCOSYS, In: The 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics, NURETH-17. Xi'an, China, 2017.

/KNI 11/ Knibbs, L. D., Morawska, L., Bell, S. C., Grzybowski, P., Room ventilation and the risk of airborne infection transmission in 3 health care settings within a large teaching hospital, American Journal of Infection Control, 39(10), 866–872, https://doi.org/10.1016/j.ajic.2011.02.014, 2011.

/KOR 06/ Koralewski, H. E., Energiehaushalt und Temperaturregulation B. Wärmehaushalt und Temperaturregulation 4. Wärmebildung und Wärmetransport, 2006.

/KOW 98/ Kowalski, W. J., Bahnfleth, W., Airborne respiratory diseases and mechanical systems for control of microbes, HPAC Heating, Piping, Air Conditioning, 70(7), 1998.

/KOW 99/ Kowalski, W. J., Bahnfleth, W. P., Whittam, T. S., Filtration of airborne microorganisms: Modeling and prediction. ASHRAE Transactions, 105 (January 1999), 1999.

/LAB 18/ Labat, C., Thul, S., Pirault, J., Temmar, M., Thornton, S. N., Benetos, A., Bäck, M., Differential Associations for Salivary Sodium, Potassium, Calcium, and Phosphate Levels with Carotid Intima Media Thickness, Heart Rate, and Arterial Stiffness, Hindawi, Disease Markers, Volume 2018, Article ID 3152146, 12 pages, https://doi.org/10.1155/2018/3152146

/LER 19/ Lerchl, G., Arndt, S., Band, S., S., B., Eschricht, D., Iliev, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Weber, G., Austregesilo, H., Langenfeld, A., Schöffel, P., Cron, D. von der, Weyermann, F., GRS software package AC^2-19, https://user-codes.grs.de, 2019.

/LIN 12/ Lindsley, W. G., King, W. P., Thewlis, R. E., Reynolds, J. S., Panday, K., Cao, G., Szalajda, J. V., Dispersion and exposure to a cough-generated aerosol in a simulated medical examination room. Journal of Occupational and Environmental Hygiene, 9(12), 681–690. https://doi.org/10.1080/15459624.2012.725986, 2012.

/MAA 95/ Maas, A., Experimentelle Quantifizierung des Luftwechsels bei Fensterlüftung, 1995.

/MAZ 20/ Mazucanti, C. H., Egan, J. M., SARS-CoV-2 disease severity and diabetes: why the connection and what is to be done? Immunity and Ageing, 17(1), 1–11, https://doi.org/10.1186/s12979-020-00192-y, 2020.

/MIK 04/ Mikhailov, E., Vlasenko, S., Niessner, R., & Pöschl, U., Interaction of aerosol particles composed of protein and saltswith water vapor: hygroscopic growth and microstructural rearrangement. Atmospheric Chemistry and Physics, 4(2), 323–350, https://doi.org/10.5194/acp-4-323-2004, 2004.

/MOR 06/ Morawska, L., Droplet fate in indoor environments, or can we prevent the spread of infection? Indoor Air, 16(5), 335–347, https://doi.org/10.1111/j.1600-0668.2006.00432.x, 2006.

/MOR 09/ Morawska, L., Johnson, G. R., Ristovski, Z. D., Hargreaves, M., Mengersen, K., Corbett, S., Chao, C. Y. H., Li, Y., Katoshevski, D., Size distribution and sites of origin of droplets expelled from the human respiratory tract during expiratory activities. Journal of Aerosol Science, 40(3), 256–269, https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2008.11.002, 2009.

/NIC 05/ Nicas, M., Nazaroff, W. W., Hubbard, A., Toward understanding the risk of secondary airborne infection: Emission of respirable pathogens, Journal of Occupational and Environmental Hygiene, 2(3), 143–154, https://doi.org/10.1080/15459620590918466, 2005.

/ONE 20/ Onetz. (n.d.). Neumarkt: Corona-Ausbruch in Altenheim | Onetz. Retrieved November 13, 2020, from https://www.onetz.de/oberpfalz/berching/neumarkt-corona-ausbruch-altenheim-id3128640.html.

/PAL 13/ Palombo, M., Gabrielli, A., Servedio, V. D. P., Ruocco, G., Capuani, S., Structural disorder and anomalous diffusion in random packing of spheres. Scientific Reports, 3, 1–7, https://doi.org/10.1038/srep02631, 2013.

/PAN 20/ Pan, Y., Zhang, D., Yang, P., Poon, L. L. M., & Wang, Q., Viral load of SARS-CoV-2 in clinical samples. In The Lancet Infectious Diseases (Vol. 20, Issue 4, pp. 411–412), Lancet Publishing Group, https://doi.org/10.1016/S1473-3099(20)30113-4, 2020.

/PFE 20a/ Pfeifer, M., Ewig, S., Voshaar, T., Randerath, W.J., Bauer, T., Geiseler, J., Dellweg, D., Westhoff, M., Windisch, W., Schönhofer, B., Kluge, S., Lepper, P.M., Guidelines Position Paper for the State-of-the-Art Application of Respiratory Support in Patients with COVID-19, https://doi.org/10.1159/000509104, 2020.

/PFE 20b/ Pfeifer, M., Ewig, S., Voshaar, T., Randerath, W., Bauer, T., Geiseler, J., Dellweg, D., Westhoff, M., Windisch, W., Schönhofer, B., Kluge, S., Lepper, P. M., Position Paper for the State of the Art Application of Respiratory Support in Patients with COVID-19 German Respiratory Society, Pneumologie, 74, 337–3357, https://doi.org/10.1055/a-1157-9976, 2020.

/PFU 20/ pfu - Lexikon der Biologie. (n.d.). Retrieved October 29, 2020, from https://www.spektrum.de/lexikon/biologie/pfu/50757.

/PLE 20/ pleomorph - Lexikon der Biologie. (n.d.). Retrieved October 20, 2020, from https://www.spektrum.de/lexikon/biologie/pleomorph/52393.

/RAT 10/ Rathgeber, J., Baum, J., Neumann, P., Schiffmann, J., Züchner, K., Grundlagen der maschinellen Beatmung (2. Auflage). Georg Thime Verlag KG. DOI: 10.1055/b-002-41834, 2010.

/REI 19/ Reinke, N. et al., Validierung & Verifikation der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS-551, 2019.

/RIL 78/ Riley, C. E., Murphy, G., Riley, R. L., AIRBORNE SPREAD OF MEASLES IN A SUBURBAN ELEMENTARY SCHOOL. American Journal of Epidemiology, 107(5), 421–432, 1978.

/RKI 05/ RKI, Infektionsprävention in Heimen, Bundesgesundheitsblatt - Gesundheitsforschung - Gesundheitsschutz, 48(9), 1061–1080. https://doi.org/10.1007/s00103-005-1126-2, 2005.

/RKI 20a/ RKI (n.d.), Kontaktpersonen-Nachverfolgung bei SARS-CoV-2-Infektionen, Retrieved November 13, 2020, from https://www.rki.de/DE/Content/InfAZ/N/Neuartiges_Coronavirus/Kontaktperson/Management.html.

/RKI 20b/ RKI, Prävention und Management von COVID-19 in Alten- und Pflegeeinrichtungen und Einrichtungen für Menschen mit Beeinträchtigungen und Behinderungen, https://www.rki.de/DE/Content/InfAZ/N/Neuartiges_Coronavirus/Alten_Pflegeeinrichtung_Empfehlung.pdf;jsessionid=263DF411D2990CB2C04349B01100E42B.internet082?__blob=publicationFile, 2020.

/RKI 20c/ RKI, SARS-CoV-2: Virologische Basisdaten sowie Virusvarianten, Retrieved October 24, from https://www.rki.de/DE/Content/InfAZ/N/Neuartiges_Coronavirus/Virologische_Basisdaten.html, 2020.

/ROT 20/ Rothe, C., Schunk, M., Sothmann, P., Bretzel, G., Froeschl, G., Wallrauch, C., Zimmer, T., Thiel, V., Janke, C., Guggemos, W., Seilmaier, M., Drosten, C., Vollmar, P., Zwirglmaier, K., Zange, S., Wölfel, R., Hoelscher, M., Transmission of 2019-nCoV Infection from an Asymptomatic Contact in Germany. New England Journal of Medicine, 382(10), 970-971. https://doi.org/10.1056/nejmc2001468, 2020.

/SAH 20/ Saheb Sharif-Askari, N., Saheb Sharif-Askari, F., Alabed, M., Temsah, M. H., Al Heialy, S., Hamid, Q., Halwani, R., Airways Expression of SARS-CoV-2 Receptor, ACE2, and TMPRSS2 Is Lower in Children Than Adults and Increases with Smoking and COPD, Molecular Therapy - Methods and Clinical Development, 18, 1–6, https://doi.org/10.1016/j.omtm.2020.05.013, 2020.

/SCA 16/ Schaal, S., Kunsch, K., Kunsch, S., Der Mensch in Zahlen (4th ed.). Springer Berlin Heidelberg, https://doi.org/10.1007/978-3-642-55399-8, 2016.

/SCN 20/ Schnichels, S., Rohrbach, J. M., Bayyoud, T., Sebastian, T., Focke, Z., & Hurst, J., Kann SARS-CoV-2 das Auge infizieren? – Ein Überblick über den Rezeptorstatus in okularem Gewebe, Springer Medizin Verlag GmbH, ein Teil von Springer Nature 2020, https://doi.org/10.1007/s00347-020-01160-z, 2020.

/SCR 20/ Schröder, I., COVID-19: A Risk Assessment Perspective. ACS Chemical Health & Safety, 27(3), 160–169, https://doi.org/10.1021/acs.chas.0c00035, 2020.

/SCW 20/ Schwarzkopf, A., Virale Pandemien am Beispiel SARS-CoV-2: Hintergründe - Maßnahmen - Prävention (1st ed.), 2020.

/SEG 20/ Segars, J., Katler, Q., McQueen, D. B., Kotlyar, A., Glenn, T., Knight, Z., Feinberg, E. C., Taylor, H. S., Toner, J. P., Kawwass, J. F., Prior and novel coronaviruses, Coronavirus Disease 2019 (COVID-19), and human reproduction: what is known? Fertility and Sterility, 113(6), 1140–1149. https://doi.org/10.1016/j.fertnstert.2020.04.025, 2020.

/SIN 94/ Singh, G., IYER, E., Malik H., RELATIVE CHANGES IN SALIVARY SODIUM AND POTASSIUM IN RELATION TO EXPOSURE TO HIGH G STRESS, Medical Journal Armed Forces India, Volume 50, Issue 4, October 1994, Pages 261-265,https://doi.org/10.1016/S0377-1237(17)31082-1

/SMC 20/ Nase als Eintrittspforte für SARS-CoV-2 | Science Media Center Germany, https://www.sciencemediacenter.de/alle-angebote/research-in-context/details/news/nase-als-eintrittspforte-fuer-sars-cov-2/, 2020.

/SMI 20/ Smither, S. J., Eastaugh, L. S., Findlay, J. S., Lever, M. S., Experimental aerosol survival of SARS-CoV-2 in artificial saliva and tissue culture media at medium and high humidity. In Emerging Microbes and Infections (Vol. 9, Issue 1, pp. 1415–1417). Taylor and Francis Ltd. https://doi.org/10.1080/22221751.2020.1777906, 2020.

/SPE 20/ Spektrum.de., Polymerase-Kettenreaktion - Lexikon der Biologie. https://www.spektrum.de/lexikon/biologie/polymerase-kettenreaktion/52909, 2020.

/SUN 20/ Sungnak, W., Huang, N., Bécavin, C., Berg, M., Queen, R., Litvinukova, M., Talavera-López, C., Maatz, H., Reichart, D., Sampaziotis, F., Worlock, K. B., Yoshida, M., Barnes, J. L., HCA Lung Biological Network, SARS-CoV-2 entry factors are highly expressed in nasal epithelial cells together with innate immune genes. Nature Medicine, 26(5), 681–687, https://doi.org/10.1038/s41591-020-0868-6, 2020.

/SZE 10/ Sze To, G. N., Chao, C. Y. H., Review and comparison between the Wells-Riley and dose-response approaches to risk assessment of infectious respiratory diseases. Indoor Air, 20(1), 2–16. https://doi.org/10.1111/j.1600-0668.2009.00621.x, 2010.

/THI 20/ Georg Thieme Verlag KG., Atemwegsklimatisierung - eRef, Thieme. https://eref.thieme.de/cockpits/clAINS0001/0/coIntensiv00011/4-1270, 2020.

/TOG 10/ To, G. N. S., Chao, C. Y. H., Review and comparison between the Wells–Riley and dose-response approaches to risk assessment of infectious respiratory diseases. INDOOR AIR, 20, 2–16, https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC7202094/, 2010.

/TOZ 20/ Tozzi, A., Peters, J. F., Annesi-Maesano, I., D'Amato, G., Collective Clustering Dynamics of SARS-COV-2 Particles, Researchgate, https://doi.org/10.20944/preprints202004.0296.v1, 2020.

/TUC 20/ TU-Chemnitz. (n.d.). . Amphiphile Moleküle: Ein einführender Überblick.

/UKR 20/ UK Research and Innovaiton, Coronavirus: the science explained. https://coronavirusexplained.ukri.org/en/, 2020.

/VAN 19/ Neeltje van Doremalen, Trenton Bushmaker, Morris, D. H., Holbrook, M. G., Gamble, A., Williamson, B. N., Tamin, A., Harcourt, J. L., Thornburg, N. J., Gerber, S. I., Lloyd-Smith, J. O., Wit, E. de, Munster, V. J., Aerosol and surface stability of HCoV-19 (SARS-CoV-2) compared to SARS-CoV-1, Journal of Chemical Information and Modeling, 53(9), 1689–1699, https://www.nejm.org/doi/full/10.1056/nejmc2004973, 2019.

/VAN 20/ van Doremalen, N., Bushmaker, T., Morris, D. H., Holbrook, M. G., Gamble, A., Williamson, B. N., Tamin, A., Harcourt, J. L., Thornburg, N. J., Gerber, S. I., Lloyd-Smith, J. O., de Wit, E., Munster, V. J., Aerosol and Surface Stability of SARS-CoV-2 as Compared with SARS-CoV-1, New England Journal of Medicine, 382(16), 1564–1567, https://doi.org/10.1056/nejmc2004973, 2020.

/VEJ 18/ Vejerano, E. P., Marr, L. C., Physico-chemical characteristics of evaporating respiratory fluid droplets, J. R. Soc. Interface, 15. https://doi.org/10.1098/rsif.2017.0939, 2018.

/VUO 20/ Vuorinen, V., Aarnio, M., Alava, M., Alopaeus, V., Atanasova, N., Auvinen, M., Balasubramanian, N., Bordbar, H., Erästö, P., Grande, R., Hayward, N., Hellsten, A., Hostikka, S., Hokkanen, J., Kaario, O., Karvinen, A., Kivistö, I., Korhonen, M., Kosonen, R., … Österberg, M., Modelling aerosol transport and virus exposure with numerical simulations in relation to SARS-CoV-2 transmission by inhalation indoors. Safety Science, 130(100), 1–49, https://doi.org/10.1016/j.ssci.2020.104866, 2020.

/WAG 09/ Wagner, B. G., Coburn, B. J., Blower, S., Calculating the potential for within-flight transmission of influenza A (H1N1). BMC Medicine, 7, https://doi.org/10.1186/1741-7015-7-81, 2009.

/WAN 20a/ Wang, Jingyuan, Tang, K., Feng, K., & Lv, W., High Temperature and High Humidity Reduce the Transmission of COVID-19, SSRN Electronic Journal, https://doi.org/10.2139/ssrn.3551767, 2020.

/WAN 20b/ Wang, Jun, Li, X., Allison, C., Hohorst, J., Nuclear Power Plant Design and Analysis Codes (1st Editio), Woodhead Publishing, 2020.

/WAT 10/ Watanabe, T., Bartrand, T. A., Weir, M. H., Omura, T., Haas, C. N., Development of a dose-response model for SARS coronavirus. Risk Analysis, 30(7), 1129–1138, https://doi.org/10.1111/j.1539-6924.2010.01427.x, 2010.

/WEA 20a/ Weather-atlas, München, Deutschland - Detaillierte Klimaangaben und Monatliche Wettervorhersage | Weather Atlas. https://www.weather-atlas.com/en/germany/munich, 2020.

/WEA 20b/ Weatherspark, Durchschnittswetter in München, Deutschland das ganze Jahr über - Weather Spark, https://de.weatherspark.com/y/70344/Durchschnittswetter-in-München-Deutschland-das-ganze-Jahr-über, 2020.

/WEI 16/ Wei, J., Li, Y., Airborne spread of infectious agents in the indoor environment. American Journal of Infection Control, 44(January), 102-108, 2016.

/WHO 21/ WHO, Coronavirus disease (COVID-19). https://www.who.int/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019?adgroupsurvey=%7Badgroupsurvey%7D&gclid=EAIaIQobChMInNK33r_Q7gIVZRoGAB3NNAGZEAAYASAAEgI-5_D_BwE, 2021.

/WOE 20/ Wölfel, R., Corman, V., Guggemos, W., Seilmaier, M., Zange, S., Müller, M., Niemeyer, D., Kelly, T., Vollmar, P., Rothe, C., Hoelscher, M., Bleicker, T., Brünink, S., Schneider, J., Ehmann, R., Zwirglmaier, K., Drosten, C., Wendtner, C., Virological assessment of hospitalized cases of coronavirus disease 2019. MedRxiv, 2020.03.05.20030502. https://doi.org/10.1101/2020.03.05.20030502, 2020.

/XIE 07/ Xie, X., Li, Y., Chwang, A. T. Y. Y., Ho, P. L., Seto, W. H., How far droplets can move in indoor environments. Indoor Air, 17(3), 211-2256, https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1600-0668.2007.00469.x 2007.

/YAN 11/ Yang, W., Marr, L. C., Wan, Y., Linsey, C. M., Dynamics of Airborne influenza A viruses indoors and dependence on humidity. PLoS ONE, 6(6). https://doi.org/10.1371/journal.pone.0021481, 2011.

/YIN 20/ Yinon, M. B.-O., Flamholz, A., Phillips, R., Milo, R., SARS-CoV-2 (COVID-19) by the numbers. Annals of Internal Medicine, 172(10), 697–698. https://elifesciences.org/articles/57309 2020.

/ZAN 20/ Zangmeister, C. D., Radney, J. G., Vicenzi, E. P., Weaver, J. L., Filtration Efficiencies of Nanoscale Aerosol by Cloth Mask Materials Used to Slow the Spread of SARS-CoV-2. ACS Nano, 14(7), 9188–9200, https://doi.org/10.1021/acsnano.0c05025, 2020.

/ZAY 12/ Zayas, G., Chiang, M. C., Wong, E., MacDonald, F., Lange, C. F., Senthilselvan, A., King, M., Cough aerosol in healthy participants: Fundamental knowledge to optimize droplet-spread infectious respiratory disease management, BMC Pulmonary Medicine, 12, https://doi.org/10.1186/1471-2466-12-11, 2012.

/ZHA 20/ Zhang, R., Li, Y., Zhang, A. L., Wang, Y., Molina, M. J., Identifying airborne transmission as the dominant route for the spread of COVID-19, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 117(26), 14857–14863, https://doi.org/10.1073/pnas.2009637117, 2020.

/ZIE 20/ Ziegler, C. G. K., Allon, S. J., Nyquist, S. K., Mbano, I. M., Miao, V. N., Tzouanas, C. N., Cao, Y., Yousif, A. S., Bals, J., Hauser, B. M., Feldman, J., Muus, C., Wadsworth, M. H., Kazer, S. W., Hughes, T. K., Doran, B., Gatter, G. J., Vukovic, M., Taliaferro, F., … Zhang, K., SARS-CoV-2 Receptor ACE2 Is an Interferon-Stimulated Gene in Human Airway Epithelial Cells and Is Detected in Specific Cell Subsets across Tissues. Cell, 181(5), 1016-1035.e19, https://doi.org/10.1016/j.cell.2020.04.035, 2020.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1 Änderungen des Wassertropfendurchmessers als Folge der Verdunstung 13

Abb. 3.2 Partikel Depositionsmechanismus /HOL 11/ 15

Abb. 3.3 1D-Simulationen an verdampfenden Tropfen unter der Annahme stagnierender Umgebungsluft. a) Verdampfungszeit, d. h. Wells-Kurve, für Wasser /VUO 20/, /XIE 07/ 16

Abb. 3.4 Sedimentationszeit von Wassertropfen mit nicht flüchtigem Inhalt 17

Abb. 4.1 Schematische Darstellung des Corona-Virus mit Darstellung der Strukturproteinkomponenten /KAN 20/ 20

Abb. 4.2 Morphologie von SARS-CoV-2-Virionen, die aus infizierten Zellen freigesetzt werden /KEZ 20/ 21

Abb. 4.3 Diagramm der menschlichen Nasenhöhle mit blau und gelb gekennzeichneten Atem- und Riechschleimhaut-Bereichen /BUT 20/ 22

Abb. 4.4 Bedeutung der viralen Abwehr und der systemischen inflammatorischen Antwort für die Klinik von Patienten mit COVID-19 /PFE 20b/ 24

Abb. 4.5 Klimatisierung der Atemluft bei Nasenatmung in Ruhe 26

Abb. 4.6 Herkunft von Atmungstropfen 28

Abb. 4.7 Darstellung der strukturellen Hülle des SARS-CoV-2-Virus /UKR 20/ 30

Abb. 4.8 Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf das Überleben von Bio-Aerosolen 31

Abb. 4.9 Temperatureinfluss auf das Überleben von luftgetragenen Viren 32

Abb. 4.10 Dreistufiger Mechanismus der Virusvernichtung 33

Abb. 4.11 Theoretischer Zerfall von SARS-CoV-2 /SMI 20/ 34

Abb. 4.12 Prozentualer Anteil kontaminierter Abstriche von Oberflächenproben in Räumen mit jeglicher Kontamination /CHI 20/ 35

Abb. 5.1 Bio-Aerosol-Volumenrate in Abhängigkeit von Aktivität und Zustand 41

Abb. 5.2 Abhängigkeit der Quanten-Emissionsrate $\boldsymbol{ERq}$ von Inhalationsrate $\boldsymbol{IR}$ und Sputum-Viruslast $\boldsymbol{cv}$ (Fall: stimmhaftes Zählen (siehe Tab. 5.1), $\boldsymbol{ci = 0.02}$) 42

Abb. 5.3 Trends des $\boldsymbol{ERq}$ $[\mathrm{Quanta/h}]$ als Funktion der Viruslast im Sputum 43

Abb. 5.4 Darstellung der Log-Normalverteilung (orange) und der geschätzte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Viruslast $\boldsymbol{cv}$ im Speichel /EVA 20/ 45

Abb. 6.1 Konvergenz gegen dynamisches Gleichgewicht mittels analytischer Lösung 53

Abb. 6.2 Massenverteilung Apotheke 56

Abb. 6.3 COCOSYS-Simulation und analytische Lösung für die Quantenkonzentration 58

Abb. 6.4 COCOSYS-Simulation und analytische Lösung für die Infektionsrisiken $\boldsymbol{R(T)}$ 59

Abb. 6.5 Ergebnis der Apothekenrechnung aus /BUO 20b/ 59

Abb. 6.6 Quantenkonzentration 61

Abb. 6.7 Potenzielles Infektionsrisiko bei zehn Minuten Aufenthalt 62

Abb. 6.8 Quantenkonzentration mit Verdampfung der Tröpfchen 63

Abb. 6.9 Risiko bei zehn Minuten Aufenthalt mit Verdampfung der Tröpfchen 64

Abb. 6.10 Größenspektrum des Virus-Aerosols für den Fall ohne Verdampfung 65

Abb. 6.11 Größenspektrum des Virus-Aerosols für den Fall mit Verdampfung 66

Abb. 7.1 Gebäude einer exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung 69

Abb. 7.2 Innenhofansicht der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung 72

Abb. 7.3 Darstellung der effektiven Öffnungsflächen $\boldsymbol{A\mathrm{eff}}$ für Kipp- und Flügelfenster in Abhängigkeit vom Öffnungswinkel $\boldsymbol{\alpha}$ ($b = 0.6\,m, h = 1.8\,[m]$) 72

Abb. 7.4 Darstellung des Durchflussverhältnis $\boldsymbol{\Theta}$ für Kipp- und Flügelfenster in Abhängigkeit vom Öffnungswinkel $\boldsymbol{\alpha}$ ($b = 0.6\,m, h = 1.8\,[m]$) 73

Abb. 7.5 Darstellung der Luftwechselrate $\boldsymbol{AER}$ durch das Flügelfenster 74

Abb. 7.6 Darstellung der Luftwechselrate $\boldsymbol{AER}$ durch das Kippfenster 74

Abb. 7.7 Durchschnittliche Temperatur der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung /WEA 20a/ 75

Abb. 7.8 Durchschnittliche relative Luftfeuchtigkeit der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung /WEA 20a/ 76

Abb. 7.9 Mittlere stündliche Windgeschwindigkeiten 76

Abb. 7.10 Vorherrschende Windrichtung 77

Abb. 7.11 Topografie des Gebäudekomplexes der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung 77

Abb. 7.12 3D Darstellung des Gebäudekomplexes der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung 78

Abb. 7.13 COCOSYS-Nodalisierung für das Patientenzimmers 79

Abb. 7.14 Grundriss eines Patientenzimmers der exemplarischen Kranken- und Pflegeeinrichtung 80

Abb. 7.15 3D-Visualisierung des Patientenzimmers 80

Abb. 7.16 Massenverteilung Sprechen und Atmen und lognormale Anpassung für COCOSYS 84

Abb. 7.17 Massenverteilung Husten und lognormale Anpassung für COCOSYS 85

Abb. 7.18 Größenabhängige Filterwirkung für verschiedene Maskentypen /ZAN 20/ 86

Abb. 7.19 Filtereffizienz eines Mund-Nasen-Schutzes, „Stützen“ sind die experimentellen Werte (vgl. Abb. 7.18) 86

Abb. 7.20 Simulierte Volumenströmungen für Lüftung über das Fenster 89

Abb. 7.21 Simulierte Volumenströmungen für Atmung 90

Abb. 7.22 Quantenkonzentration über der Zeit 91

Abb. 7.23 Infektionsrisiko eines 10-minütigen Aufenthalts im Patientenzimmer 92

Abb. 7.24 Volumenanteil CO_2 als Tracer für Ausatmung 93

Abb. 7.25 Partikelgrößenverteilung im Patientenzimmer 94

Abb. 7.26 Massenmediandurchmesser über der Zeit 95

Abb. 7.27 Ablagerungen der VIRUS-Aerosolkomponente auf Strukturen und im Filter F1 96

Abb. 7.28 Vergleich des Risikos bei verschiedenen relativen Feuchten mit enthaltenem Salz 99

Abb. A.1 Wechselwirkung von Coronavirus-Partikeln bei verschiedenen Vergrößerungen /TOZ 20/ 134

Abb. A.2 Elektronenmikroskopische Aufnahmen von SARS-CoV-2-Virionen 135

Abb. A.3 Exemplarische Darstellung zufälliger Kugel-Anordnung (Packungsdichte $\phi = 0.35 - 0.737$) und der dichtesten Anordnung ($\phi = 0.74$) /PAL 13/ 137

Abb. A.4 Exemplarische Darstellung der betrachteten Aerosol-Größenklassen 138

Abb. A.5 Darstellung der verwendeten 20 Durchmesser-Größenklassen mit zugehörigem Durchmesser 138

Abb. A.6 Anzahl der Virionen bei maximaler Packungsdichte in Abhängigkeit von der Aerosol Größenklasse 139

Abb. A.7 Anzahl der Virionen bei maximaler Packungsdichte in Abhängigkeit vom Aerosoldurchmesser 139

Abb. A.8 Darstellung einer Log-Normalverteilung für $\sigma = 3.1$ und $\mu = 0.1$ 141

Abb. A.9 Relative Größenverhältnisse von luftgetragenen respiratorischen Pathogenen /KOW 98/ 142

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1 Tropfenfallzeit als Funktion der Größe /MOR 06/ 13

Tab. 3.2 Hauptbestandteile von Schleimarten /NIC 05/ 14

Tab. 5.1 Experimentell ermittelte Tropfenkonzentration ($\boldsymbol{Ni}$ part. $\boldsymbol{cm-3}$) /MOR 09/ 39

Tab. 5.2 Freigesetztes Bio-Aerosolvolumen je Aktivität 40

Tab. 5.3 Atemvolumenrate,-frequenz und -volumen bei unterschiedlichen Belastungen 40

Tab. 5.4 Charakteristische Daten SARS-CoV-2 45

Tab. 6.1 Aerosolparameter in Apothekenrechnung nach /BUO 20b/ 55

Tab. 7.1 Angenommene Massenverteilung Atmen und Sprechen für die Aerosolfreisetzung im Patientenzimmer 83

Tab. 7.2 Angenommene Massenverteilung Husten für die Aerosolfreisetzung in COCOSYS 84

Tab. 7.3 Übersicht über die im Ausgangsszenario verwendeten Anfangs- und Randbedingungen 87

Tab. 7.4 Im Ausgangsszenario angenommene Zeitereignisse 88

Tab. 7.5 Übersicht über die COCOSYS Variantenrechnungen zum Patientenzimmer 97

Tab. 7.6 Literaturangaben über Speichelzusammensetzung 98

Tab. A.1 Atemfrequenz, Atemvolumen und Atemminutenvolumen (0 – 14 Jahre) /SCA 16/ 129

Tab. A.2 Atemfrequenz, Atemvolumen und Atemminutenvolumen (Alter > 14 Jahre) 129

Tab. A.3 Zusammensetzung der Atemluft sowie Partialdrücke /SCA 16/ 130

Tab. A.4 Durchschnittlicher Sauerstoffverbrauch eines Menschen /SCA 16/ 130

Tab. A.5 Sauerstoff und Gasaustausch /SCA 16/ 131

Tab. A.6 Partikelgröße bei Atmung, Husten, Niesen und Sprechen /GRA 11/ 132

Tab. A.7 Fortsetzung: Partikelgröße bei Atmung, Husten, Niesen und Sprechen /GRA 11/ 133

Tab. A.8 Airborne Respiratory Pathogens - Sizes and Dimensions /KOW 99/..... 144

Tab. A.9 Airborne Respiratory Pathogens - Sizes and Dimensions (continued) ... 145

Tab. A.10 Partikelgrößenbereiche und Definitionen für Aerosole /HIN 82/ 146

Tab. A.11 Arbeitsabläufe im Sächsischen Krankenhaus Großscheidnitz 148

A Anhänge

A.1 Atmung

Tab. A.1 Atemfrequenz, Atemvolumen und Atemminutenvolumen (0 - 14 Jahre) /SCA 16/

Alter und Geschlecht	Atemfrequenz	Atemzugvolumen	Atemminutenvolumen
Neugeborene	49,7	17,3 ml	0,83 l/min
Säuglinge	62,8	17,5 ml	1,03 l/min
Kinder, 2–3 Jahre	23,7	122,0 ml	2,80 l/min
Kinder, 4–5 Jahre	23,2	138,0 ml	4,00 l/min
Kinder, 6–7 Jahre	21,1	203,0 ml	4,30 l/min
Knaben, 12 Jahre	16,3	305,0 ml	4,80 l/min
Mädchen, 12 Jahre	16,1	289,0 ml	4,50 l/min
Knaben, 14 Jahre	17,0	316,0 ml	5,30 l/min

Tab. A.2 Atemfrequenz, Atemvolumen und Atemminutenvolumen (Alter > 14 Jahre)

Alter und Geschlecht	Atemfrequenz	Atemzugvolumen	Atemminutenvolumen
Mädchen, 14 Jahre	15,6	315,0 ml	4,90 l/min
Knaben, 16 Jahre	15,6	344,0 ml	5,10 l/min
Mädchen, 16 Jahre	15,2	282,0 ml	4,20 l/min
Erwachsene, 20–39 Jahre	17,2	494,2 ml	8,50 l/min
Erwachsene, 40–59 Jahre	16,9	562,1 ml	9,50 l/min
Erwachsene, ab 60 Jahren	16,3	644,1 ml	10,50 l/min
Männer, ruhend	11,7	630,0 ml	7,40 l/min
Männer, leichte Arbeit	17,1	1670,0 ml	28,60 l/min
Männer, Schwerarbeit	21,2	2030,0 ml	43,00 l/min
Männer, hoch ausdauertrainiert (Durchschnitt N=56)	70,0	4000,00 ml	<250 l/min
Frauen, ruhend	11,7	390,0 ml	4,60 l/min
Frauen, leichte Arbeit	19,0	860,0 ml	16,40 l/min

Tab. A.3 Zusammensetzung der Atemluft sowie Partialdrücke /SCA 16/

Atemgas	Anteile des Luftgemisches	Anteil am Gesamtvolumen	Partialdruck des Gases
Inspirationsluft	Sauerstoff (O_2)	20,9 Vol %	150 mmHg (20 kPa)
	Kohlenstoffdioxid (CO_2)	0,03 Vol %	0,23 mmHg (0,03 kPa)
	Stickstoff (N_2) u. Edelgase	79,1 Vol %	601 mmHg (80,13 kPa)
Alveoläres Luftgemisch	Sauerstoff (O_2)	13,2 Vol %	100 mmHg (13,33 kPa)
	Kohlenstoffdioxid (CO_2)	5,1 Vol %	39 mmHg (5,2 kPa)
	Stickstoff (N_2) u. Edelgase	75,5 Vol %	574 mmHg (76,5 kPa)
	Wasserdampf	6,2 Vol %	47 mmHg (6,27 kPa)
Expirationsluft	Sauerstoff (O_2)	15,1 Vol %	115 mmHg (15,33 kPa)
	Kohlenstoffdioxid (CO_2)	4,3 Vol %	33 mmHg (4,4 kPa)
	Stickstoff (N_2) u. Edelgase	74,4 Vol %	565 mmHg (75,33 kPa)
	Wasserdampf	6,2 Vol %	47 mmHg (6,27 kPa)

Tab. A.4 Durchschnittlicher Sauerstoffverbrauch eines Menschen /SCA 16/

In Ruhe	150–300 ml/min
Bei leichter Arbeit (60 W)	1000–1200 ml/min
Bei mittelschwerer Arbeit (120 W)	1600–1950 ml/min
Bei schwerer Arbeit (180 W)	2000–2600 ml/min

Tab. A.5 Sauerstoff und Gasaustausch /SCA 16/

Sauerstoffverbrauch pro kg Körpergewicht	
Frühgeborene	2,6 ml/min
Neugeborene (bis 7. Tag)	5,7 ml/min
Säugling, 3 Monate	6,9 ml/min
Säugling, 6 Monate	7,1 ml/min
Säugling, 12 Monate	7,0 ml/min
Erwachsene	
in Ruhe	3,4 ml/min
bei Schwerstarbeit	70,0 ml/min
Angaben zum Gasaustausch	
Alveokapilläre Membran (Blut-Luft-Schranke)	
Dicke	1 µm
Kontaktzeit eines Erythrozyten	0,7 s
Diffusionszeit für O_2	0,3 s
Verhältnis Ventilation zu Durchblutung in der Lunge	0,8–1
Sauerstoffaufnahme pro Tag	400–800 l
Sauerstoffaufnahme pro Minute	280 ml/min
Kohlenstoffdioxidabgabe pro Tag	350–700 l
Kohlenstoffdioxidabgabe pro Minute	230 ml/min
Respiratorischer Quotient V_{CO2}/V_{O2}	0,82

A.2 Partikelgrößen bei Atmung, Husten, Niesen und Sprechen

Tab. A.6 Partikelgröße bei Atmung, Husten, Niesen und Sprechen /GRA 11/

Author, Date	Method of sizing (device, where possible)	Infection Status of participants		Predominant particle size range for activity (μm)			
		Healthy	Infected (bacterial/viral)	Breathing	Coughing	Sneezing	Talking
Heymann et al.,1899[69]	Solid impaction (glass slide with microscopy)	–	Bacterial *Mycobacterium tuberculosis*	–	30–500	–	–
Strauz et al., 1926[72]	Solid impaction (glass slide with microscopy)	–	Unknown infection	–	70–85	–	–
Jennision, 1942[2]	High-speed photography	Healthy	Unknown infection	–	>100[b]	7–100[b]	–
Duguid et al., 1946[15]	Solid impaction (glass slide with microscopy)	Healthy[a]	–	–	100–125 (DN: 8–16)	100–125 (DN: 4–8)	100–125 (DN: 8–16)
Eichenwald et al., 1960[68]	Liquid impaction (impinger)	–	Bacterial	<5.0	–	–	–
	Solid impaction (sieve sampler)						
Buckland et al., 1964[55]	Liquid impaction (impinger)	–	Bacterial Unknown spp.	–	–	80–180	–
Gerone et al., 1966[56]	Solid Impaction	–	Viral	–	<1.0–1.0	<1.0–1.0	–
	Liquid Impaction		Unknown spp.				
Loudon et al., 1967[73]	Solid impaction (paper with microscopy)	Healthy[a]	–	–	55.5	–	85
Papineni et al., 1997[95] [c]	Optical technology (optical particle counter)	Healthy	–	OPC: <0.6	OPC: <0.6	–	OPC: <0.6
	Solid impaction (glass slide with transmission electron microscopy)			SI:>1.0			
Edwards et al., 2004[100]	Optical technology (optical particle counter)	Healthy	–	0.15–0.19	–	–	–
Fennelly et al., 2004[70]	Solid impaction (Andersen sampler)	–	Bacterial Unknown spp.	–	≤3.3	–	–
Yang et al., 2007[99]	Time-of-flight technology (aerodynamic particle size)	Healthy	–	–	0.62–15.9 (DN 0.58–5.42)	–	–
	Charge separation (scanning mobility particle sizer)						
Fang et al., 2008[101]	Time-of-flight technology (aerodynamic particle sizer)	Healthy	Unknown infection	–	H:<1.0 I: Unknown	–	–
Fabian et al., 2008[49]	Optical technology (optical particle counter)	–	Viral Unknown spp.	0.3–0.5	–	–	–
Hersen et al., 2008[71]	Electrical impaction (electrical low pressure impactor)	Healthy	Viral Unknown spp.	H: 0.09–<0.16 I: 0.09–>9.97	–	–	–
Li et al., 2008[96]	Solid impaction (glass slide with microscopy)	Healthy[a]	–	50–100	50–100	–	50–100
	Optical technology (dust monitor)						
Morawska et al., 2008[9]	Time-of-flight technology (aerodynamic particle sizer)	Healthy	–	0.1–1.0	0.1–1.0	–	0.1–1.0
Chao et al., 2009[98]	Optical technology (interferometric Mie imaging)	Healthy	–	–	4–8	–	4–8

Tab. A.7 Fortsetzung: Partikelgröße bei Atmung, Husten, Niesen und Sprechen /GRA 11/

Author, Date	Method of sizing (device, where possible)	Infection Status of participants		Predominant particle size range for activity (µm)			
		Healthy	Infected (bacterial/ viral)	Breathing	Coughing	Sneezing	Talking
Xie et al., 2009[75]	Solid impaction (glass slide with microscopy) Optical technology (dust monitor)	Healthy	–	–	50–75	–	50–75
Morawska et al., 2009[102]	Time-of-flight technology (aerodynamic particle sizer)	Healthy	–	0.4–1.1	0.4–10.0	–	0.4–4.0
Wainwright et al., 2009[54]	Solid impaction (Andersen sampler)	–	Bacterial Unknown infection	–	≤3.3	–	–
Almstrand et al., 2010[5]	Optical technology (optical particle counter)	Healthy	–	0.3–0.4	–	–	–
Haslbeck et al., 2010[8]	Time-of-flight technology (laser spectrometer)	Healthy	–	0.1–7.0			
Holmgren et al., 2010[7]	Optical technology (optical particle counter) Charge separation (scanning mobility particle sizer)	Healthy	–	OPC: 0.4–4.0 SMPS: 0.01–0.3	–	–	–
Lindsley et al., 2010[97]	Solid impaction (Two-stage aerosol sampler)	–	Viral Influenza spp.	–	<1.0	–	–
Milton et al., 2010[108]	Unknown method	–	Viral Influenza spp.	0.05–5.0	–	–	–
	Expelled particle size range			***0.01–100***	***<0.1–500***	***<1.0–125***	***0.1–125***

Key: DN: Droplet nuclei; H: Healthy; I: Infected; OPC: Optical particle counter; SI: Solid impactor; SMPS: Scanning Mobility Particle Sizer.

[a] Assumed to be healthy individuals but not explicitly described in literature.

[b] No size stratification was made by authors on the basis of diseased state.

[c] Papineni and Rosenthal (1997) measured particles generated from breathing using optical and solid impaction methods – particles from coughing and talking were measured only by optical methods.

A.3 Die Partikelaggregation und die Schleimeigenschaften

Bei der Untersuchung der verfügbaren mikroskopischen Bilder von Coronaviren fanden Tozzi et al. /TOZ 20/ Hinweise auf das Auftreten von (möglicherweise vorübergehenden) SARS-Cov-2-Aggregaten, in denen sich Virionen tendenziell in multipartikulären Komplexen anhäufen. Bezüglich SARS-Cov-2 deuten die ausgewerteten Bilder auf einen eigentümlichen Mechanismus der **Partikelaggregation** hin: die Virion-Virion-Interaktion, die zur Bildung progressiv wachsender kugelförmiger Virusansammlungen führt. Tozzi et al. stellen die Hypothese auf, dass solche Aggregate zur Ausbreitungsrate von COVID-19 und zur Ausbreitung von SARS-Cov-2 von Zelle zu Zelle beitragen könnten. Es ist bekannt, dass einzelne Virionen in der Regel Zellen nicht infizieren. Nichtsdestotrotz kann die kollektive Ausbreitung von Viruspartikeln das Ergebnis der Infektion beeinflussen, unabhängig von Übertragungswegen und -engpässen.

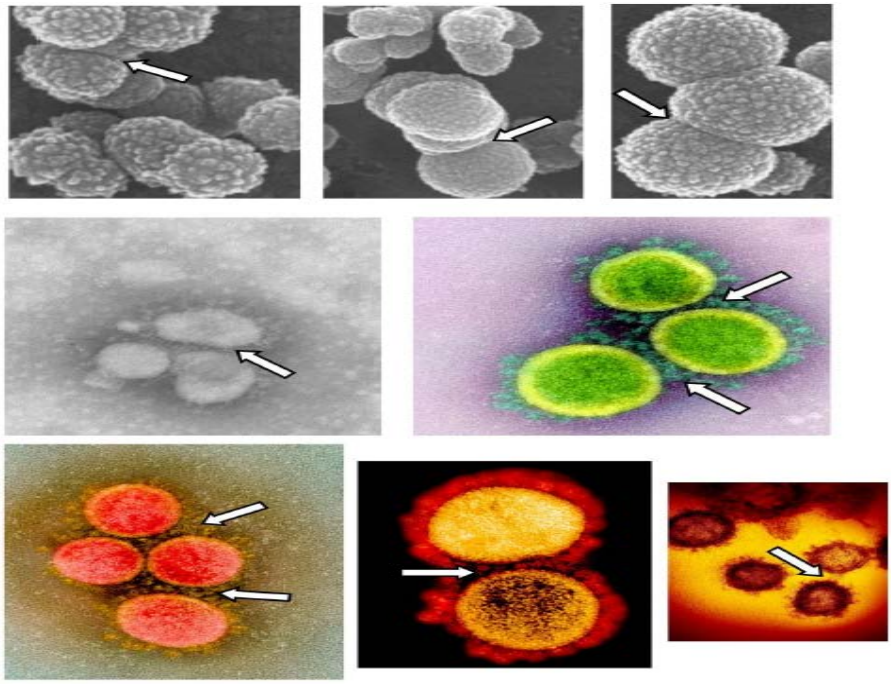


Abb. A.1 Wechselwirkung von Coronavirus-Partikeln bei verschiedenen Vergrößerungen /TOZ 20/

Die Schwarz-Weiß-Bilder veranschaulichen das Erscheinungsbild der SARS-CoV-Partikel und ihrer Grenzfläche. Die farbigen Bilder veranschaulichen das Erscheinungsbild der SARS-CoV-2-Partikel und ihrer Grenzfläche (Adhäsionsflächen). Die aus einem Patienten isolierten Virionen treten aus der Oberfläche von im Labor kultivierten Zellen auf. Die Pfeile zeigen auf die Adhäsionsflächen zwischen verschiedenen Virionen.

Die Fähigkeit, Partikelansammlungen zu bilden und ein kollektives dynamisches Verhalten zu erreichen, kann SARS-Cov-2 unschätzbare Vorteile bringen. Um ein Beispiel zu

nennen: Nicht überlappende Kugeln (vgl. Anhang A.3) innerhalb eines dreidimensionalen euklidischen Raumes sind eingeschränkten Anordnungen unterworfen. Dies führt zur geometrischen Frage des Kugelpackungsproblems, das darauf abzielt, Anordnungen zu finden, in denen die Kugeln einen möglichst großen Teil des Raumes ausfüllen. Wenn SARS-Cov-2-Partikel ineinanderstecken bzw. aneinanderhaften, bilden sie eine Anordnung, die die einzelnen Virionen zusammendrückt. Dieser Verlust der Kugelform modifiziert die Kugelpackung in drei Dimensionen, da eine erhöhte Anzahl von Viruspartikeln in der Lage ist, eine gegebene Menge an verfügbarem Raum auszufüllen.

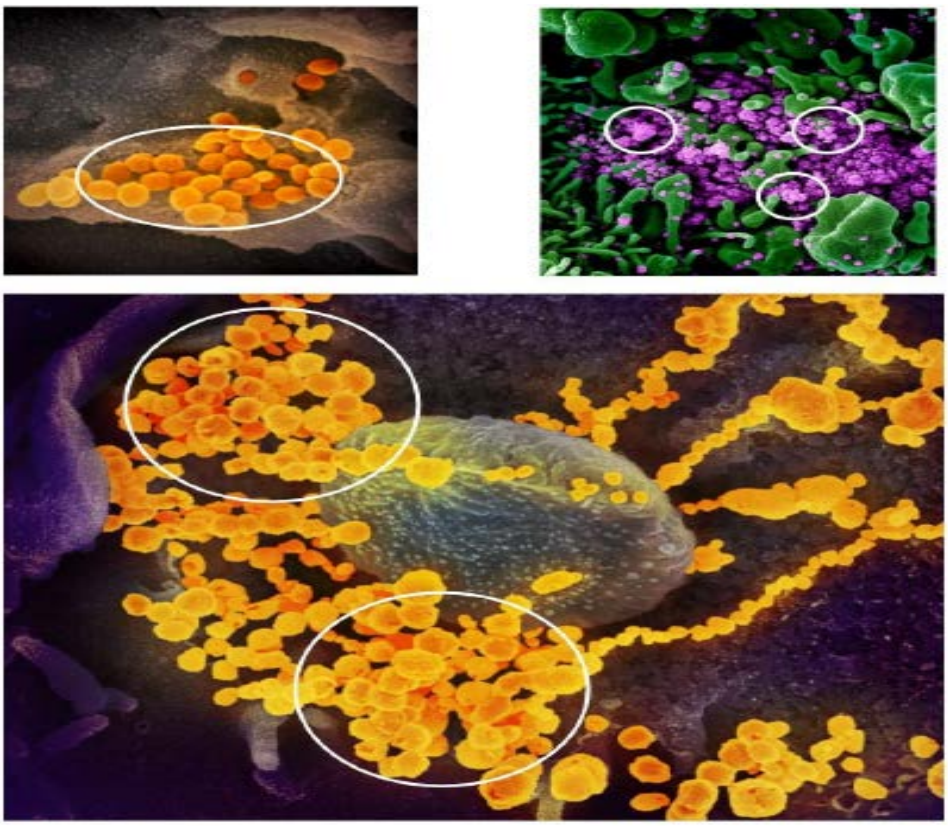


Abb. A.2 Elektronenmikroskopische Aufnahmen von SARS-CoV-2-Virionen

Abtastungen mittels elektronenmikroskopischer Aufnahmen zeigen SARS-CoV-2-Virionen, die aus der Oberfläche kultivierter infizierter Zellen austreten. Zu beobachten ist, wie kleine Cluster dazu neigen, zu konvergieren und größere netzartige Aggregate aus zahlreichen Partikeln zu bilden /TOZ 20/.

Durch die Erzielung einer **optimalen Packung** wird eine Zunahme der lokalen Dichte der zusammengepressten Viruspartikel in der Wirtsflüssigkeit erreicht, wodurch die Viruslast maximiert wird. Die erhöhte Anzahl von Virionen kann auch zu einer **Erhöhung der Viskosität** des infizierten Sputums und/oder anderer biologischer Flüssigkeiten führen, wodurch ein Schutz gegen die Entfernung des Wirts oder gegen Umweltnoxen erreicht wird. Die kugelähnliche Anordnung mehrerer SARS-CoV-2-Virionen kann einen weiteren Vorteil gegen Wirtsimmunität und Umweltschäden bieten. Selbst, wenn Immunsysteme oder Umweltfaktoren den äußeren Kern der Virusansammlung angreifen, könnten innere, virale Virionen vor weiteren Schäden bewahrt werden. Zusammenfassend weisen die Ergebnisse von Tozzi et al. auf die Möglichkeit einer gebündelten Verbreitung von SARS-Cov-2 hin /TOZ 20/.

A.4 Abschätzung der Anzahl an RNA-Kopien (Virionen) in sphärischen Aerosolen

Eine grobe Abschätzung der maximalen Virionanzahl in einem Aerosoltropfen gegebener Größe soll auf Grundlage der Kepler-Vermutung der dichtesten Packung von kongruenten Kugeln in drei Dimensionen getroffen werden. Hierfür werden die einzelnen Virionen vereinfacht als kugelförmig, mit einem mittleren Durchmesser von $100\ [nm]$ betrachtet, deren Anordnung im Aerosol so gewählt wird, dass diese ein minimales Volumen beanspruchen. Für die dichteste Kugelpackung konnte gezeigt werden, dass der Raum zwischen den Kugeln ca. 26 % (Wasser) des Gesamtvolumens einnimmt, so dass die Packungsdichte der Kugeln in dieser Anordnung maximal wird und bei ca. 74,048 % liegt /HAL 98/. Für jede zufällige Anordnung liegt der Wert der Packungsdichte unterhalb dieses Wertes /PAL 13/.

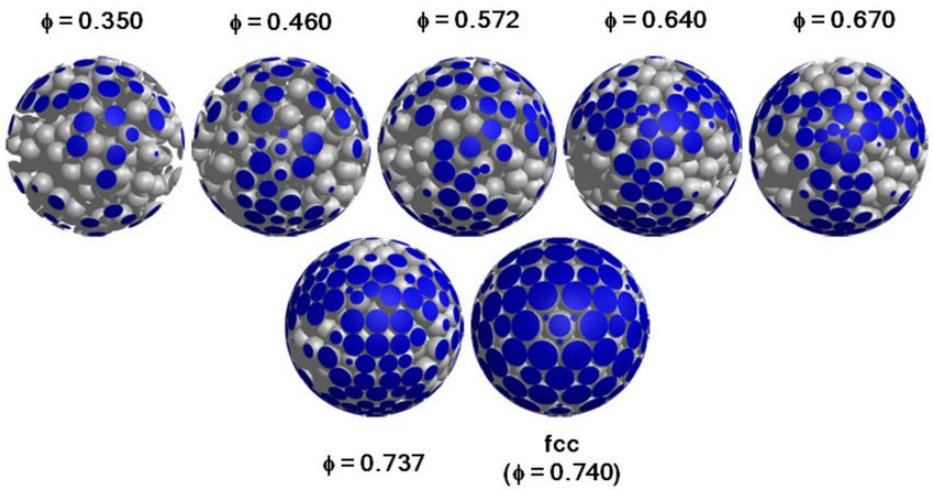


Abb. A.3 Exemplarische Darstellung zufälliger Kugel-Anordnung (Packungsdichte $\boldsymbol{\phi = 0.35 - 0.737}$) und der dichtesten Anordnung ($\boldsymbol{\phi = 0.74}$) /PAL 13/

Für die untersuchten Virionhaltigen Aerosole lassen sich im Zusammenhang mit der COCOSYS-AFP-Analyse 20 unterschiedliche Durchmesser-Größenklassen für die Aerosole betrachten, wobei für den kleinsten und größten Durchmesser jeweils ein Wert von $0.01\ [\mu m]$ bzw. $100\ [\mu m]$ verwendet wurde. Eine exemplarische Darstellung der verwendeten 20 Größenklassen und deren Größenverhältnisse kann der Abb. A.4 entnommen werden. Zusätzlich gibt Abb. A.5 den verwendeten Durchmesser für jede Größenklasse wieder.

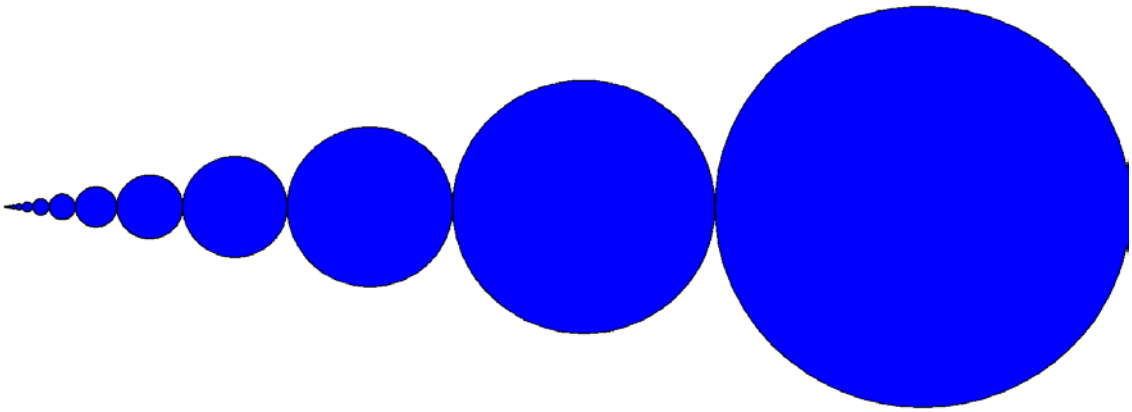


Abb. A.4 Exemplarische Darstellung der betrachteten Aerosol-Größenklassen

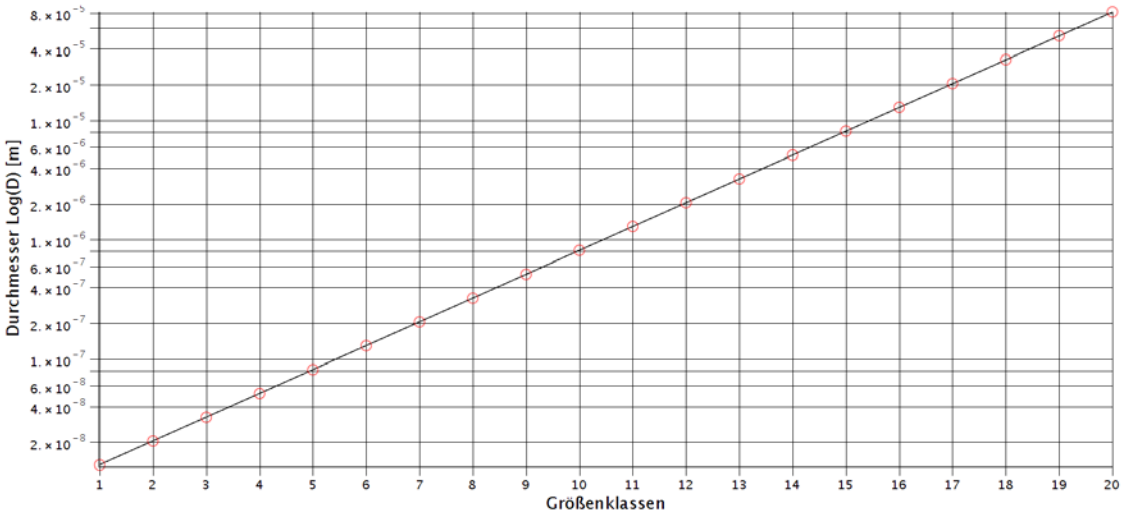


Abb. A.5 Darstellung der verwendeten 20 Durchmesser-Größenklassen mit zugehörigem Durchmesser

Aus dem mittleren Durchmesser ($\mathrm{Virion_{dia}} = 100\ [\mu m]$) eines einzelnen Virions ergibt sich unter der Annahme einer kugelförmigen Gestalt ein Volumen von ca. $\mathrm{Virion_{vol}} = 5.23 \times 10^{-23}\ [m^3]$. Hieraus lässt sich unter Annahme der dichtesten Packungsanordnung der Virionen im Aerosol (74,048 % des Aerosol-Volumens) die maximale Anzahl N_V an Virionen, die im betrachteten Aerosol-Volumen ($\mathrm{Aerosol_{vol}}\ [m^3]$) enthalten sind, errechnen.

$$\text{Dichteste Packung: } 74.048\% = \mathrm{N_v} \times \frac{\mathrm{Virion_{vol}}}{\mathrm{Aerosol_{vol}}} \qquad \text{A.28}$$

$$N_V(\mathrm{Aerosol_{dia}}) = 0.74048 \left(\frac{\mathrm{Virion_{dia}}}{\mathrm{Aerosol_{dia}}}\right)^3 \qquad \text{A.29}$$

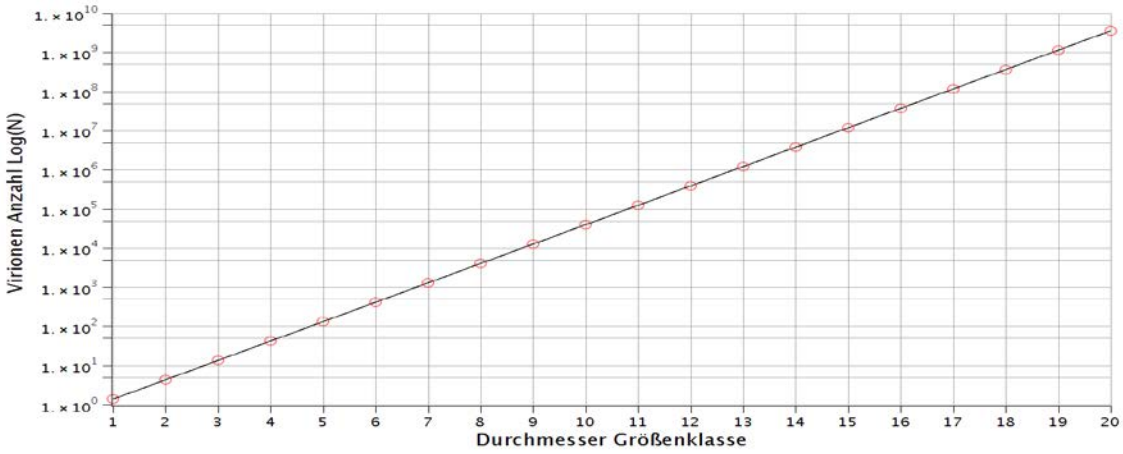


Abb. A.6 Anzahl der Virionen bei maximaler Packungsdichte in Abhängigkeit von der Aerosol Größenklasse

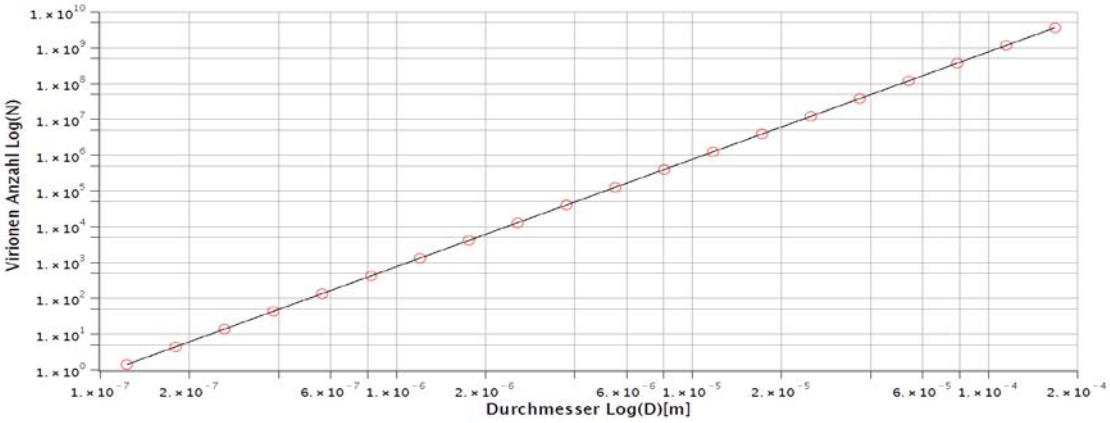


Abb. A.7 Anzahl der Virionen bei maximaler Packungsdichte in Abhängigkeit vom Aerosoldurchmesser

Unter den getroffenen Annahmen lässt sich ermitteln, dass in einem Aerosol mit Durchmesser von $11.05\ [\mu m]$ etwa 10^6 Virionen enthalten sind.

A.5 Log-Normalfunktion

Aerosole können durch die **Normalverteilung** (oder **Gaußsche Verteilung**) beschrieben werden. Alle Normalverteilungen sind symmetrisch und haben eine glockenförmige Dichtekurve mit einem einzelnen Peak, der sich beim Mittelwert μ befindet. Die Wahrscheinlichkeitsfunktion, $P(x)$, einer Normalverteilung kann durch die Gleichung A.30 beschrieben werden.

$$\boldsymbol{P(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}} \qquad \text{A.30}$$

Dabei ist μ der Mittelwert der Verteilung, an welchem der Dichte-Spitzenwert auftritt, und σ die Standardabweichung, die die Streuung der Kurve angibt.

Die Normalverteilungsfunktion (A.30) wird nur selten zur Beschreibung von Aerosolpartikelgrößenverteilungen verwendet, da die meisten Aerosole eine schiefe (bei großen Größen lange Schwanzfunktion) Verteilungsfunktion aufweisen. Die Normalverteilung (A.30) ist hingegen natürlich symmetrisch. Sie kann auf monodisperse Testaerosole[21], auf bestimmte Pollen und Sporen und auf speziell präparierte Polystyrol-Latex-Kugeln angewandt werden. Eine Darstellung der Größenverhältnisse respiratorischer Pathogene, wie Sporen, Bakterien und Viren und kann dem Anhang A.6 entnommen werden. Die hier betrachteten polydispersen Aerosole weisen eine große Bandbreite von Partikelgrößen auf, so dass zu deren Charakterisierung stattdessen die log-Normalverteilung verwendet wird. Hierfür werden die Parameter in Gleichung A.30 durch ihre logarithmischen Entsprechungen (A.31) ersetzt /HIN 82/.

$$\boldsymbol{P(x) = \frac{1}{\log(\sigma)\sqrt{2\pi}}\, e^{\frac{-(\ln(x)-\ln(\mu))^2}{2\ln(\sigma)^2}}} \qquad \text{A.31}$$

Eine Beispieldarstellung einer log-Normalfunktion ist durch Abb. A 8 gegeben.

[21] Monodisperse Aerosole enthalten Partikel, die alle die gleiche Größe haben und im Labor zur Verwendung als Testaerosole hergestellt werden können /HIN 82/.

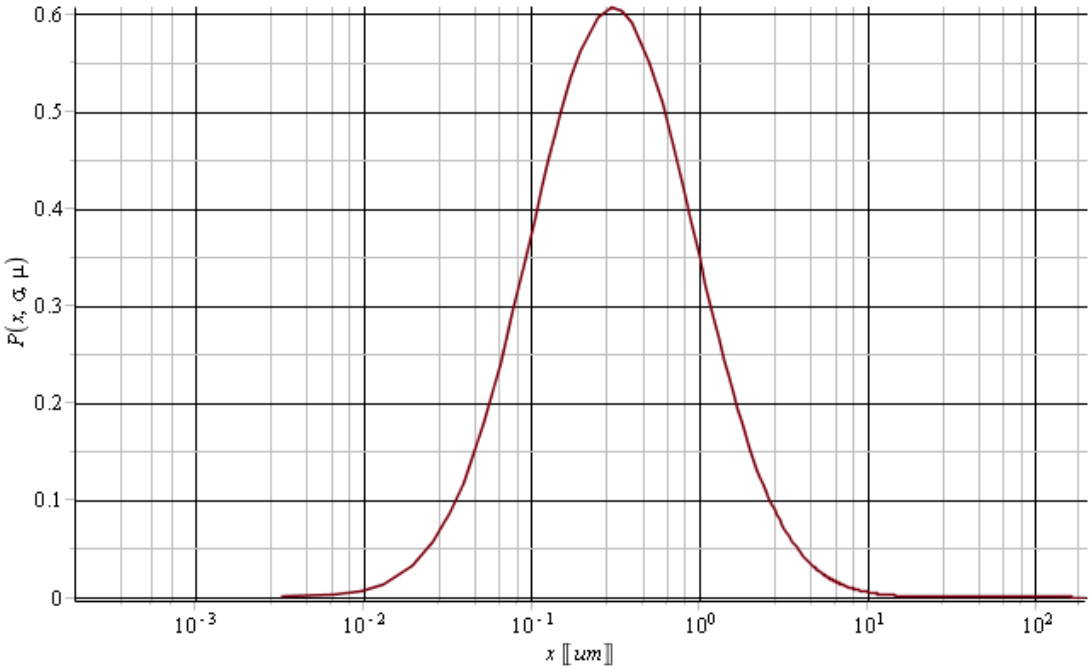


Abb. A.8 Darstellung einer Log-Normalverteilung für $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{3}\ .\mathbf{1}$ und $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{1}\ .\mathbf{1}$

A.6 Größenverhältnisse respiratorischer Pathogenen

Pathogene sind alle krankheitserregenden Mikroorganismen und der Begriff gilt für alle mikrobiellen Erreger mit Reizungen der Atemwege, einschließlich Allergene oder toxigene Pilze. Krankheitserreger der Atemwege werden in drei taxonomische Hauptgruppen eingeteilt: Viren, Bakterien und Pilze. Die Pilze und einige Bakterien, vor allem die Actinomyceten, bilden Sporen. Da Sporen charakteristischerweise größer und resistenter gegen Faktoren sind, die Viren und Bakterien zerstören, ist es günstiger, Sporen als eine definitive und separate Kategorie aufzuzeigen.

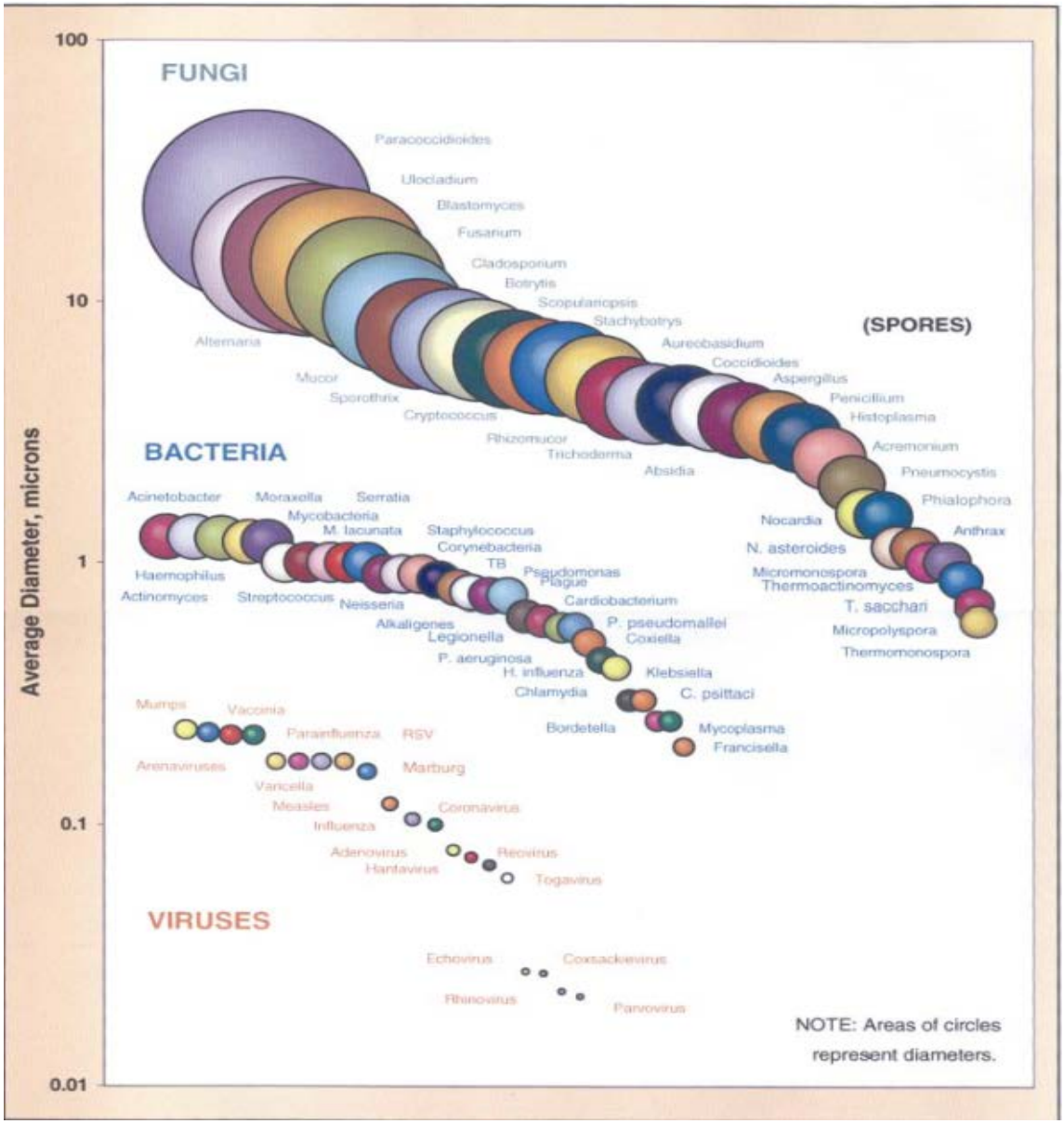


Abb. A.9 Relative Größenverhältnisse von luftgetragenen respiratorischen Pathogenen /KOW 98/

Das wichtigste physikalische Einzelmerkmal, anhand dessen luftübertragene Krankheitserreger klassifiziert werden können, ist die Größe, da sie sich direkt auf die Filtrationseffizienz auswirkt. Die Abb. A 9 zeigt einen graphischen Vergleich von luftübertragenen Krankheitserregern der Atemwege, bei dem allein aufgrund der Größe eine gute Differenzierung der Sporen, Bakterien und Viren beobachtet werden kann. Die linke Achse zeigt den "durchschnittlichen" oder typischen Durchmesser oder die Breite an. Die Flächen der Kreise stellen nicht die tatsächlichen Größen der Mikroben dar, sondern jeweils den Durchmesser im Verhältnis zueinander. Die Spannweite der Durchmesser wird mit fast vier Größenordnungen angegeben. Einige Mikroben sind oval oder stabförmig, und nur für diese wird die kleinere Dimension angegeben /KOW 98/.

A.7 Luftgetragene respiratorische Pathogene

Tab. A.8 Airborne Respiratory Pathogens - Sizes and Dimensions /KOW 99/

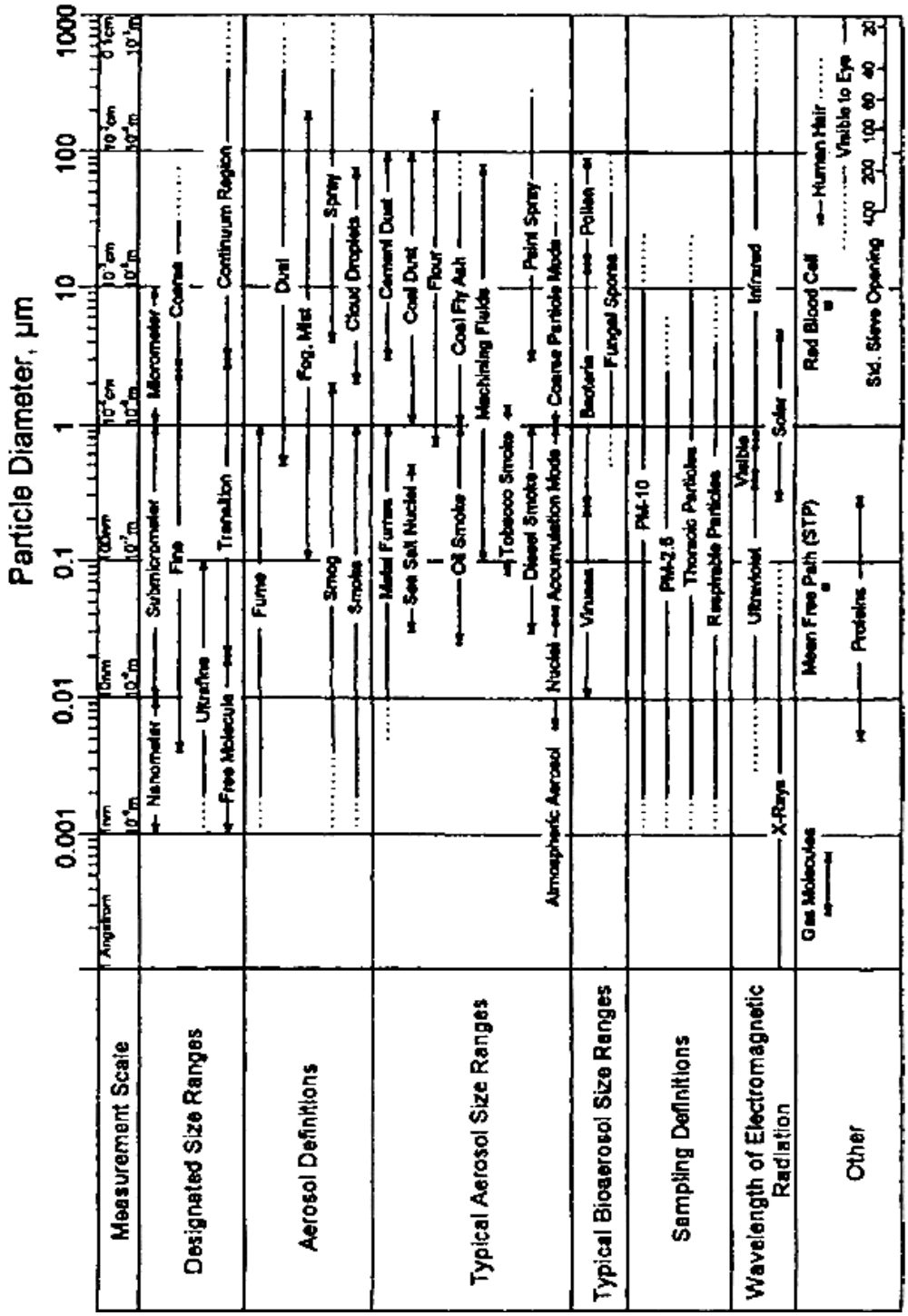
AIRBORNE PATHOGEN	AVG DIA	DIA/WIDTH		LENGTH		AR	EQUIV DIA	LOGMEAN DIAMETER	LN STDEV
		MIN	MAX	MIN	MAX				
Parvovirus B19	0.022	0.018	0.026			1		0.022	0.074
Rhinovirus	0.023	0.018	0.028			1		0.022	0.088
Coxsackievirus	0.025	0.02	0.03			1		0.024	0.081
Echovirus	0.025	0.02	0.03			1		0.024	0.081
Hantavirus	0.06	0.05	0.07			1		0.059	0.067
Togavirus	0.063	0.05	0.075			1		0.061	0.081
Reovirus	0.073	0.07	0.075			1		0.072	0.014
Adenovirus	0.08	0.07	0.09			1		0.08	0.050
Orthomyxovirus	0.1	0.08	0.12			1		0.10	0.081
Coronavirus	0.11	0.08	0.13			1		0.10	0.097
Varicella-zoster	0.15	0.1	0.2			1		0.14	0.139
Arenavirus	0.18	0.05	0.3			1		0.12	0.358
Francisella tularenis	0.19	0.08	0.3	0.2	0.7	2.4	0.13	0.15	0.264
Morbillivirus	0.2	0.1	0.3			1		0.17	0.220
Respiratory Syncytial Virus	0.22	0.14	0.3			1		0.20	0.152
Parainfluenza	0.23	0.15	0.3			1		0.21	0.139
Poxvirus - Vaccinia	0.23	0.2	0.25	0.25	0.3	1.2	0.08	0.22	0.045
Mycoplasma pneumoniae	0.23	0.15	0.3			1		0.21	0.137
Paramyxovirus	0.23	0.15	0.31			1		0.22	0.145
Bordetella pertussis	0.25	0.2	0.3	0.5	1	3	0.21	0.24	0.081
Chlamydia pneumoniae	0.3	0.2	0.4			1		0.28	0.139
Chlamydia psittaci	0.3	0.2	0.4			1		0.28	0.139
Klebsiella pneumoniae	0.4	0.3	0.5			1		0.39	0.102
Haemophilus influenzae	0.43	0.2	0.3	1	1.5	5	0.43	0.35	0.081
Coxiella burnetii	0.5	0.45	0.55			1		0.50	0.040
Pseudomonas aeruginosa	0.57	0.3	0.8	1	3	3.6	0.57	0.51	0.209
Pseudomonas pseudomallei	0.57	0.3	0.8	1	3	3.6	0.57	0.51	0.209
Actinomyces israelii	0.6	0.2	1	2	5	5.8	1	0.90	0.183
Legionella pneumophila	0.6	0.3	0.9	2	2	3.3	0.57	0.72	0.091
Thermomonospora viridis	0.6	0.3	0.9	0.6	1.5	1.8	0.30	0.52	0.220
Cardiobacterium	0.63	0.5	0.75	1	3	3.2	0.57	0.65	0.107
Micropolyspora faeni	0.69	0.66	0.72			1		0.7	0.017
Thermoactinomyces sacchari	0.7	0.6	0.8	1	3	2.9	0.57	0.72	0.071
Mycobacterium kansasii	0.71	0.2	0.6	1	4	6.3	0.71	0.57	0.277
Alkaligenes	0.75	0.5	1	0.5	2.6	2.1	0.44	0.71	0.139
Yersinia pestis	0.75	0.5	1	1	2	2	0.43	0.71	0.139
Pseudomonas mallei	0.77	0.3	0.8	1.4	4	4.9	0.77	0.67	0.210
Neisseria meningitidis	0.8	0.6	1			1		0.77	0.102
Streptococcus pyogenes	0.8	0.6	1			1		0.77	0.102
Mycobacterium tuberculosis	0.86	0.2	0.6	1	5	7.5	0.86	0.64	0.322
Staphylococcus aureus	0.9	0.8	1			1		0.89	0.045
Streptococcus pneumoniae	0.9	0.8	1			1		0.89	0.045
Corynebacteria diphtheria	1	0.3	0.8	1	6	6.4	1.0	0.72	0.348
Haemophilus parainfluenzae	1	0.75	1.25			1		0.97	0.102

Tab. A.9 Airborne Respiratory Pathogens - Sizes and Dimensions (continued)

AIRBORNE PATHOGEN	AVG DIA	DIA/WIDTH		LENGTH		AR	EQUIV DIA	LOGMEAN DIAMETER	LN STDEV
		MIN	MAX	MIN	MAX				
Moraxella lacunata	1	0.8	1.2	1.5	3	2.3	0.64	0.98	0.081
Micromonospora faeni	1	0.5	1.5			1		0.87	0.220
Thermoactinomyces vulgaris	1	0.5	1.5			1		0.87	0.220
Bacillus anthracis	1.13	1	1.25			1		1.12	0.045
Nocardia asteroides	1.14	1	1.25	3	5	3.6	1.14	1.19	0.071
Mycobacterium avium	1.2	1.075	1.325			1		1.19	0.042
Mycobacterium intracellulare	1.2	1.075	0.325			1		1.2	0.042
Acinetobacter	1.25	1	1.5	1.5	2.5	1.6	0.57	1.22	0.081
Moraxella catarrhalis	1.25	1	1.5	2	3	2	0.71	1.22	0.081
Serratia marcescens	1.25	1	1.5	2	6	3.2	1.14	1.31	0.107
Nocardia brasiliensis	1.5	1	2			1		1.41	0.139
Nocardia caviae	1.5	1	2			1		1.41	0.139
Phialophora spp.	1.5	1.20	1.8	3	4	2.3	1.0	1.5	0.081
Pneumocystis carinii	2	1	3			1		1.7	0.220
Acremonium spp.	2.5	2	3	4	6	2	1.43	2.4	0.081
Geomyces pannorum	3	2	4	2	5	1.2	1.0	2.8	0.139
Histoplasma capsulatum	3	1	5			1		2.2	0.322
Paecilomyces variotii	3	2	4	3	5	1.3	1.14	2.8	0.139
Wallemia sebi	3	2.5	3.5			1		3.0	0.067
Emericella nidulans	3.25	3	3.5			1		3.2	0.031
Phoma spp.	3.25	2.5	4	6	10	2.5	2.28	3.2	0.094
Penicillium spp.	3.3	2.8	3.8	3	4	1.1	1.0	3.3	0.061
Aspergillus spp.	3.5	2.5	4.5			1		3.4	0.118
Absidia corymbifera	3.75	2.5	5			1		3.5	0.139
Coccidioides immitis	4	2	6			1		3.5	0.220
Trichoderma spp.	4.1	3.6	4.5			1		4.0	0.045
Rhizomucor pusillus	4.25	3.5	5			1		4.2	0.071
Aureobasidium pullulans	5	4	6	8	12	2	2.85	4.9	0.081
Chaetomium globosum	5.5	4.8	6.2	5.9	6.8	1.2	1.81	5.5	0.051
Cryptococcus neoformans	5.5	5	6			1		5.5	0.036
Stachybotrys spp.	5.65	5.1	6.2			1		5.6	0.039
Eurotium spp.	5.75	4.5	7			1		5.6	0.088
Scopulariopsis spp.	6	5	7	5	8	1.1	1.85	5.9	0.067
Sporothrix schenckii	6.5	5	8	10	20	2.30	4.28	6.3	0.094
Botrytis cinera	7	5	9	7	14	1.5	2.99	6.7	0.118
Mucor plumbeus	7.5	5	10			1		7.1	0.139
Rhizopus stolonifer	8	4	12			1		6.9	0.220
Cladosporium spp.	9	5	13			1		8.1	0.191
Fusarium spp.	11.5	9	14			1		11.2	0.088
Helminthosporium	12.5	7.5	8.8	27.5	60	5.4	12.47	11.6	0.156
Blastomyces dermatitidis	14	8	20			1		12.6	0.183
Rhodoturula spp.	14	12	16			1		13.9	0.058
Alternaria alternata	14.4	7	18	18	83	4	14.39	12.9	0.244
Ulocladium spp.	15	10	20			1		14.1	0.139
Paracoccidioides brasiliensis	18.25	6.5	30			1		14.0	0.306

A.8 Übersicht Partikel-Durchmesserbereich

Tab. A.10 Partikelgrößenbereiche und Definitionen für Aerosole /HIN 82/



Die Tab. A 10 deckt einen Größenbereich von 10^7 ab, von Gasmolekülen bis hin zu millimetergroßen Partikeln. Die Partikelgrößen der in der Abbildung gezeigten Aerosole reichen von 0,01 bis 100 [μm]. Im Allgemeinen liegen Stäube, Mahlgut und Pollen im Mikrometerbereich oder größer, und Dämpfe und Rauch im Submikrometerbereich. Die kleinsten Aerosolpartikel nähern sich der Größe von großen Gasmolekülen und haben viele ihrer Eigenschaften. Ultrafeine Partikel decken den Bereich von großen Gasmolekülen bis etwa 100 [nm] ab (0,001 bis 0,1[μm]). Partikel unter 50 [nm] werden als Nanometerpartikel oder Nanopartikel bezeichnet. Partikel größer als 10 [μm]haben eine begrenzte Stabilität in der Atmosphäre. Die größten Aerosolpartikel sind sichtbare Körner mit Eigenschaften, die durch die bekannte Newtonsche Physik beschrieben werden /HIN 82/.

A.9 Gewöhnlicher Tages- und Arbeitsablauf in einer Pflegeeinrichtung

Der nachfolgenden generellen Arbeitsabläufe des Sächsischen Krankenhauses Großschweidnitz /GRO 20/ dienen zur Orientierung und Präzisierung der Simulationsabläufe in COCOSYS.

Tab. A.11 Arbeitsabläufe im Sächsischen Krankenhaus Großscheidnitz

Uhrzeit	Aktivität
6:00	Das Pflegeteam hat Schichtwechsel, der Nachtdienst berichtet dem Frühdienst wichtige Informationen von jedem Patienten.
6:30	Sie werden von Ihrer zuständigen Pflegeperson geweckt. Es beginnen allgemeine und für Sie individuell geplante pflegerische Tätigkeiten wie Betten machen, Hilfe bei der Körperpflege, beim Ankleiden, ärztliche Verordnungen, wie Blutentnahme, Einreibungen, Verbandswechsel, Messen von Blutdruck, Puls, Temperatur und so weiter.
7:30	Zeit für das Frühstück! Gegebenenfalls erhalten Sie Hilfe bei der Vorbereitung des Frühstücks und bei der Einnahme. Die Morgenmedikation wird gebracht und gegebenenfalls verabreicht. Unter Umständen kann es notwendig sein, dass Sie wegen einer anstehenden Untersuchung nüchtern bleiben müssen. In diesem Falle werden Sie vom Pflegepersonal informiert und Ihr Frühstück wird für Sie aufgehoben.
8:00	Der Stationsarzt ist auf Station. Es werden ärztliche Tätigkeiten (Infusionen, …) durchgeführt.
9:00	Die Visite wird durch den Stationsarzt zusammen mit einem Pflegepersonal durchgeführt. Einmal wöchentlich finden Oberarztvisiten statt. An diesen nehmen zusätzlich noch andere Therapeuten, wie Psychologen, Sozialarbeiter und so weiter teil. Chefarztvisiten finden in der Neurologie wöchentlich, in der Psychiatrie quartalsweise statt. Individuell geplant Pflege, Krankengymnastik, Ergotherapie sowie Untersuchungen werden durchgeführt. Entlassungen und Neuaufnahmen von Patienten stehen an.
11:30	Das Mittagessen und die Mittagsmedizin werden verteilt. Gegebenenfalls erhalten Sie Hilfe bei der Vorbereitung des Essens und bei der Einnahme. Pflegeberichte und Dokumentation werden erstellt. Die Ärzte in der Neurologie haben Röntgenbesprechung.
13:30	Bereitstellung und bei Bedarf Verteilung von Getränken wie Kaffee, Tee und Mineralwasser.
14:00	Das Pflegeteam hat Schichtwechsel, der Frühdienst berichtet dem Spätdienst wichtige Informationen von jedem Patienten.
14:30	Individuell geplante Pflege und ärztliche Verordnungen werden durchgeführt. Außerdem erfolgen von ärztlicher Seite weiterhin Untersuchungen, Aufnahmen und Entlassungen, andere Therapeuten führen ihre Behandlungen durch.

Uhrzeit	Aktivität
16:30	Der Stationsarzt auf den psychiatrischen Stationen hat Dienstschluss, der Bereitschaftsdienst beginnt. In der Neurologie ist bis 19:30 Uhr ein Arzt auf Station, dann übernimmt der Bereitschaftsdienst.
17:30	Die Abendmedikamente und das Abendessen werden verteilt.
18:00	Es werden allgemeine und für Sie individuell geplante pflegerische Tätigkeiten wie Betten machen, Hilfe bei der Körperpflege, beim Ankleiden sowie ärztliche Verordnungen durchgeführt. Pflegeberichte und Dokumentation werden erstellt.
22:00	Es ist Nachtruhe. Das Pflegeteam hat Schichtwechsel, der Spätdienst berichtet dem Nachtdienst wichtige Informationen von jedem Patienten. Sie werden die gesamte Nacht über von einer/zwei Pflegepersonen versorgt. Sie ist neben ihren Kontrollgängen jederzeit über die Rufanlage erreichbar.

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum
Boltzmannstraße 14
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de

ISBN 978-3-949088-21-6