



Afdækning af muligheder for etablering af standardværktøjer og/eller -kriterier til vurdering af sundheds- og miljørisici i forbindelse med større uheld (gasudslip) på risikovirksomheder

Robert Taylor
Rambøll A/S

Miljøstyrelsen vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, finansieret af Miljøstyrelsens undersøgelsesbevilling.

Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter.

Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

Indholdsfortegnelse

1	Indledning	1
1.1	Problemstilling og formål	1
1.2	Baggrund	2
1.3	Rapportstruktur	2
1.4	Begrænsninger	3
1.5	Begreber og forkortelser	4
2	Toksiske stoffer i Danmark	5
2.1	Flydende gasarter	5
2.2	Toksiske væsker	6
2.3	Pesticider	8
2.4	Faste stoffer	8
2.5	Gasformig gasarter	8
2.6	Kryogen gasarter	8
2.7	Krav til værktøjer	9
3	Risikoscenarier - gasudslip og uheldsformer	10
3.1	Fordråbete Gasarter	10
3.2	Toksiske gasser	15
3.3	Toksiske væsker	15
3.4	Udslip af væsker over kogepunktet	16
3.5	Reaktive stoffer	16
3.6	Udslip af syre og ammoniakvand	17
3.7	Frigivelse af støv	17
3.8	Toksisk røg	17
3.9	Kryogen udslip	18
3.10	Spredning af gassen	19
	22	
3.11	Et dækkende sæt af scenarier	23
4	Toksicitetskriterier	25
4.1	Toksisktvurderinger og fastlæggelse af grænseværdier	26
4.2	Forskellige koncentrationsgrænser	26
4.3	LC50 og probit værdier	27
4.4	Tidsskalering af Toksiske virkning	28
4.5	IDLH	29
4.6	ERPG værdier	29
4.7	AEGL værdier	30
4.8	TEEL værdier	31
4.9	Emergency Exposure Indices	31
4.10	Einsatztoleranzwerte	31
4.11	Dangerous Toxic Loads (DTLs)	31
4.12	Eksempel på anvendelse af de forskellige kriterier	32
4.13	Valg af kriterier	32
4.14	Hvad gør man hvis data ikke findes	33
4.15	Krav til standardværktøjer og beregninger	34
5	Modeller til gasspredningsberegning	35
5.1	Modeller	35
5.2	Usikkerheder i beregningerne	37
5.3	Manglende scenarier	38
5.4	Simple modeller og modelpakker	39
5.5	Computational Fluid Dynamics	39
5.6	Vigtigheden af modelundersøgelser	40

5.7	Kriterier der kan stilles for spredningsberegninger	41
5.8	A priori kontra tunede modeller	43
5.9	Fremgangsmåder til at opfylde kriterierne	45
5.10	Modeller for konsekvensreduktion	46
5.11	Spredningsberegninger og risikoanalyser	47
5.12	Opsummering	47
5.13	Krav til spredningsberegningsmodeller	48
6	Værktøjer til beregning af gasspredning	50
6.1	Risikoanalyse programpakker	50
6.2	Programmer specielt til gasspredningsberegning	51
6.3	Programmer til let-gasspredningsberegninger	52
6.4	Computational fluid dynamics programmer	52
6.5	Avancerede modeller til beredskabsplanlægning, ARGOS	54
6.6	Public domain kontra lukkede værktøjer	55
6.7	Opsummering	56
6.8	Krav til spredningsberegningsværktøjer	57
7	Anvendelse af spredningsberegninger	58
7.1	Anvendelse af spredningsberegninger til kommuneplanlægning	58
7.2	Samfundsomkostningen ved beregningsusikkerheder	60
7.3	Krav til standardværktøjer til risikoanalyse	62
7.4	Anvendelse af spredningsberegninger til medarbejderbeskyttelse	62
7.5	Anvendelse af spredningsberegninger som hjælpeværktøj til beredskabsplanlægning	64
7.6	Langvarige udslip og evakuering	66
7.7	Værktøj til støtte for beredskabsplanlægning	67
7.8	Præsentation af resultater	68
7.9	Valg af tilfælde til beredskabsplanlægning	69
7.10	Krav til standardværktøjer til beredskabsplanlægning	70
8	Konklusioner	72
9	Litteraturliste, referencer og selektiv bibliografi	78
9.1	Referencer	78
9.2	Bibliografi	86
Bilag A	Modeller til spredningsberegning	88
A.1	Valg af udslips hulstørrelse	88
A.2	Beregning af udslipsmængden for væske og gas	94
A.3	Beregning af tofase udslip	96
9.3	Udbredelse af væske på jorden	97
A.4	Fordampning af toksiske væsker	98
9.4	Jetudslip af gas	99
A.5	Jetudslip af fordråbede gasarter (tofase jet)	101
A.6	Fanespredning – let gas	102
A.7	Spredning af tunge gasarter	103
A.8	Meandering (Vandring af gasfaner)	107
9.5	Meget lave vindhastigheder	107
A.9	Spredning i terræn	108
A.10	Bygningseffekter	108
A.11	Separation	109
A.12	Indendørs udslip	109
A.13	Brud på trykbeholdere	110
A.14	Modeller til beregning af risikoreduktion	111
A.15	Usikkerheder i modelberegninger	112
A.16	Modellers kompleksitet	119
A.17	Computational fluid dynamics	119
A.18	Reproducerbarhed af beregninger.	123

1 Indledning

1.1 Problemstilling og formål

Toksiske gasarter anvendes bredt i samfundet. Den mest anvendte gasart i Danmark er ammoniak, der anvendes i så godt som alle større køleanlæg, f.eks. dem i de fleste supermarkeder. Toksiske gasarter kan også dannes ved uheld, for eksempel ved brand i lagre af plast eller skumgummi.

Hvor der findes toksiske gasarter, finder der også en mulighed for udslip af toksisk gas. Det er nødvendigt at kende omfanget af det område der påvirkes ved udslip, delvis for at sikre at sikkerhedsforanstaltningerne står i rimeligt forhold til risikoen, delvis for at forhindre placering af bebyggelser i områder hvor der ikke kan opnås tilstrækkelig sikkerhed og delvis for at danne grundlag for en korrekt tilpasset beredskabsindsats, hvis et uheld skulle opstå.

Beregninger af omfanget og udbredelse af gasudslip anvendes til godkendelse af anlæg, godkendelse af kommuneplanlægning omkring installationer med toksiske gasser, planlægning af sikkerhedsforanstaltninger og beredskabsplanlægning. Der er et stort problem med disse beregninger, idet de kan laves på mange forskellige måder, og fordi der ingen entydige standardmetoder findes. Som resultat forekommer der ofte mange forskellige beregninger og forvirring om hvilke beregning der er de "rigtige". Problemerne kan opsummeres som følgende:

- Beregningerne er ikke reproducerbare, idet forskellige metoder giver forskellige resultater. Der kan derfor opstå uenighed om resultaterne.
- Beregningerne er behæftede med usikkerheder. På dette punkt afviger beregningerne ikke fra mange andre beregninger der anvendes til planlægningsformål f.eks. de der anvendes til dimensionering af broer, bygninger, diger osv. Problemerne opstår fordi nogle af metoderne der anvendes til beregning af gasudslip og gasspredning har usædvanlig stor usikkerhed, sammenlignet med dem der normalt betragtes som rimelige ved planlægning.
- Nogle af metoderne der anvendes til beregninger i dag er direkte forkerte, idet de ikke passer til de aktuelle udslips og spredningsforhold.

Formålet med udredningsarbejdet har været at tilvejebringe et grundlag for Miljøstyrelsens og de øvrige risikomyndigheders videre arbejde med og vurderinger af mulighederne for at etablere "standardværktøjer og/eller -kriterier" til brug for myndighedernes vurdering af de sundheds- og miljørisici, der kan opstå i forbindelse med større uheld på risikovirksomheder. Udredningen omfatter ikke konsekvenser i omgivelserne, der udelukkende skyldes virkninger af brand og/eller eksplosion, hvor der ikke samtidig spredes sundheds- og/eller miljøskadelige stoffer i omgivelserne.

1.2 Baggrund

Beregning af gasspredning er blevet undersøgt systematisk siden begyndelsen af 1970'erne. Der er i dag mange beregningsmetoder som kan anvendes til de forskellige udslipssituationer. Der er stadigvæk mange usikkerhedsmomenter ved beregningerne selv med den omfattende forskning der er lavet indenfor feltet. Årsagerne hertil er, at spredning af toksiske gasarter er komplicerede, at det er dyrt og vanskeligt at opstille eksperimenter som kan underbygge modellerne og at der er mange forskellige former for udslip. Det er nødvendigt til planlægningsformål at tage højde for de mange forskellige former for udslip, og at reducerer så mange usikkerhedsmomenter som muligt. Det er også nødvendigt, hvor det er umuligt at reducere usikkerheden, at anvende forsigtighedsprincippet.

Gasspredning er blevet undersøgt eksperimentalt, med fuldskalaforsøg. Spredningsmodeller kan i dag siges at kunne beregne resultaterne fra disse eksperimenter nogenlunde korrekt (Sammenligninger beskrives i kapitel 5), når man tager i betragtning at gasspredning i miljøet er en statistisk fænomen, afhængig af turbulens. Men problemerne er ikke herved løst. Beregningsmetoder der anvendes i dag er for det meste begrænset til ideelle situationer, for eksempel gasspredning på åben mark. Der eksisterer spredningsmodeller som kan beregne de mere komplicerede situationer, for eksempel udslip i et industri- eller bymiljø, men disse metoder har kun en begrænset validering i forhold til eksperimenter.

En anden gruppe af problemer opstår fordi gasspredningsberegninger er afhængige af forudgående udslips- og fordampningsberegninger, og disse er behæftede med større usikkerheder end selve gasspredningerne. Det er især hvilken udslipstyper og scenarier der skal beregnes der giver problemer, men også modelleringen giver problemer.

Endelig har der været problemer i valg af kriterier for, hvor farlighedsgrænsen skal fastsættes, når man laver en gasspredningsberegning. Der har været problemer i valget af toksicitetsniveauer, som skal anvendes til beregningerne, og i hvordan man skelner imellem kortvarige og langvarige udslip. I kapitel tre beskrives der et omfattende arbejde der især er blevet foretaget i USA, for at fjerne disse problemer. Således kan der siges at være gode og velunderbyggede metoder til beregning af virkningen af toksiske gasser. Der skal dog stadigvæk besluttes **hvilken typer** af grænser, der skal anvendes til planlægning.

1.3 Rapportstruktur

kapitel 2 i denne rapport et oversigt over de forskellige toksiske stoffer, der findes i Danmark, som kan føre til gas eller dampudslip. Kapitlet beskriver også forskellige stoffer og udslipsformer, og illustrerer disse med eksempler. Kapitel 2 giver en oversigt over de forskellige typer af gasudslip der er relevante i Danmark. Kapitel 4 be-

skriver de forskellige toksicitets kriterier der eksisterer i dag, og vurderer dem i forhold til deres anvendelighed til planlægningsformål.

Kapitel 5 giver en oversigt over de forskellige beregningsmetoder der kan anvendes til forudsigelse af gasskyer og gasfaner's udbredelse. Det er ved sådanne beregninger nødvendigt, ikke kun at tage højde for udbredelse, men også at tage højde for udslipskilden (såkaldt "source term"), det vil sige, hvor meget af det toksiske stof slipper ud, og i hvilken form. Valg af udslipskilden kan påvirke beregningerne med op til flere størrelsesordner.

Det er forsøgt at holde beskrivelserne på et ikke matematisk plan, og kun beskrive de anvendelsesmæssige aspekter af beregningsmetoderne. Nogle fysiske og matematiske aspekter af beregninger beskrives i bilag A. Der beskrives de nyeste beregningsformer og beregninger for specielle situationer.

Det er muligt i langt de fleste tilfælde af gasudslip, at påvirke udslippets varighed eller udbredelseskonzentration. Kapitel 5 beskriver også disse metoder og deres beregning.

Kapitel 6 giver en oversigt over de værktøjer (computer programmer) der findes i dag til toksisk gas spredning. Ingen af de eksisterende værktøjer opfylder kravene til en alsidig anvendelig løsning, og der er stadigvæk en hurtig udvikling i metoder og redskaber. Der gøres overvejelser over, hvordan man kan komme frem til en løsning der opfylder alle behov, evt. ved anvendelse af flere værktøjer, eller ved at fortage en begrænset udvikling.

Kapitel 7 beskriver anvendelsen af gasspredningsberegninger til risikoanalyse, til kommuneplanlægning, til beredskabsplanlægning og til personalebeskyttelse. De forskellige krav, der opstår ved disse anvendelser udledes.

Kapitel 8 sammenfatter resultaterne fra litteraturundersøgelserne og konkluderer.

1.4 Begrænsninger

Denne rapport er begrænset til at omfatte udslip alene fra faste anlæg. Udslip er mulig under transport. Metoderne, der beskrives her kan anvendes til støtte for beredskab i tilfælde af transportuheld. Anvendelsen er dog mere besværlig, idet det kræver mere arbejde at skaffe information om stoffet der frigives, om spredningsforhold osv.

Spredningsberegningerne der beskrives her kan anvendes til udslip af brandbare gasser, for eksempel propan eller benzindampe. Bedømmelsen af sådanne udslip kræver dog overvejelse af mange andre faktorer, som for eksempel antændelse og eksplosionstryk.

1.5 Begreber og forkortelser

Gas jet	Den del af et gasudslip hvor hastigheden er større end eller sammenlignelig med vindhastigheden.
Gasfane	En spredning af gas med vinden eller terræn.
Tofase udslip	Et udslip af væske og gas. Et udslip af en fordråbet gasart igennem et rør vil give et tofase udslip, fordi væsken delvis fordampes i røret.
Kryogen udslip	Et udslip af en gasart som er omformet til en væske ved køling.
Nedslag	Bevægelse af gas eller røg nedad, for eksempel bag en bygning eller pga. storskala turbulens i atmosfæren.
PAH	Poly- aromatiske hydrokarboner, ofte kræftfremkaldende organiske stoffer
Risikoanalyse	Beregning af risiko i form af sandsynligheder eller hyppigheder, og konsekvenser
Risikovurdering	Vurdering af risiko i forhold til et acceptkriterium.
Sikkerhedsvurdering	Vurdering af sikkerhed i forhold til et kriterium. Kriteriet kan være et probabilistisk risikokriterium i en klassiske risikoanalyse, men kan også være et deterministisk kriterium, f.eks. "worst case" giver ingen skader, eller en eller to sikkerhedsforanstaltninger for alle uheldsscenerier.
Protokol	En aftalt procedure for at fastsætte en værdi, f.eks. en toksicitetsgrænse.

2 Toksiske stoffer i Danmark

De følgende afsnit giver en kort beskrivelse af nogle af de toksiske stoffer der findes i Danmark. Listen er ikke fuldstændig, men illustrerer de forskellige typer af problemer der kan opstå.

2.1 Flydende gasarter

Det mest almindelige toksiske stof i Danmark er ammoniak. Ammoniak anvendes som komprimeret flydende gas som kølemiddel i større kølesystemer. Ammoniak blev tidligere anvendt direkte som gødning fra ammoniakdistributions stationer, men disse blev gradvis nedlagt over de sidste 15 år. Brugen af ammoniak til gødning fortsætter i stort omfang (nedfældning for at undgå afdampning). Det giver anledning til en del oplag af ammoniak på bl.a. togvogne rundt omkring på jernbaneterrænerne i senere tid.

Ammoniak anvendes til røgrensning ved katalytisk omdannelse af nitroøse gasser i røgen til nitrogen, og i mindre mængder ved forskellige kemiske synteser.

Ammoniak er en letflydende svagt blå væske ved ca. 8.5 bar, og har et kogepunkt ved -33.5°C . Ammoniak er en gas ved atmosfærisk tryk og temperatur. Ammoniakken er giftig og frigives hurtigt ved brud på rør o.l. fordi den oplagres under tryk. Ammoniakken transporteres i tankvogne og importeres i skib.

Ammoniak anvendes også som opløsning i vand. Stoffet kaldes "ammoniak" eller "ammoniakvand" men det er faktisk en opløsning af ammonium hydroxid. Ammonium hydroxid har et relativt beskedent damptryk og frigiver ammoniak gas kun relativt langsomt derved til luften. Gasfaner fra et spild af ammonium hydroxidopløsning har derfor et meget mindre omfang end fra et udslip af en ækvivalent mængde af flydende ammoniak.

Klor anvendes i Danmark til kemisk syntese, til fremstilling af natrium hypoklorit og til vandbehandling. Klor transporteres i jernbanetankvogne og med lastbil i mindre cylindere.

Svovldioxid anvendes i Danmark i mindre mængder til kemisk syntese. Svovldioxiden transporteres i tankbiler.

Etylenoxid er en flydende gas ved almindelig temperaturer om sommeren, men med et kogepunkt på 10.4°C kan der være en letfordampelig væske ved lav ambient temperaturer. Etylenoxid anvendes i Danmark til sterilisering. Etylenoxid anvendes i udlandet til forskellige synteser, f.eks. fremstilling af etylen glycol.

Metylbromid anvendes til insektbekæmpelse i specielle situationer (anvendelse kræver speciel træning). Metylbromid, med et kogepunkt på omkring 3°C (det anvendes normalt med en mindre tilsætning af kloropicrin) er normalt en flydende gas. Stoffet transporteres i cylindre.

Der har været nogle eksempler på udslip af flydende gasarter i Danmark:

- Et udslip af ammoniak i Fredericia i 1964 på grund af en fejl under installation af udstyr. Udslippet medførte et dødsfald.
- Et udslip af ammoniak fra en tank anvendt til landbruget i Ringsted i 1996. En bundstuds blev beskadiget mens tanken blev løftet på en lastbil. Udslippet blev bekæmpet med vandtåge fra slanger.
- Der sker en gang imellem et udslip fra køleanlæg, fortrinsvis ved vedligeholdelse arbejde. Et eksempel på et udslip sket i februar 2006 ved nedrivning af en fabriksbygning (Odinsvej, Ringsted).
- En ventil sprang læk ved Enstedværket 3 juni 2004, og i alt 6 personer kom på sygehuset i Aabenraa pga. ammoniakforgiftning.
- Et udslip i en Skagen Havn virksomhed i 1989 forårsagede forbrændinger på to medarbejdere.

Disse eksempler har alle involveret udelukkende små mængder eller lave udslipshastigheder.

2.2 Toksiske væsker

I Danmark anvendes forskellige toksiske væsker som ved fordampning kan frembringe toksiske dampe. De vigtigste eksempler angives i tabel 2.1. Bemærk at faregraden af disse stoffer afhænger både af flygtighedsgraden og af toksiciteten. Mange stoffer er giftige eller endda ekstremt giftige, men der frigives meget lidt gas ved spild med mindre stoffet har et rimeligt højt damptryk. Et mindre giftigt stof kan blive farligere fordi det har et højere damptryk.

Faren vil blive større hvis stoffet frigives under tryk således at det sprøjter og danner en tåge eller en regn af små dråber.

Man kan angive et indeks af faregraden ved at dividere damptrykket med toksicitetsgrænsen, f.eks. LC₅₀ (se kapitel 4)

Stof	Anvendelse	TEEL 3 mg/m ³	Toksicitetsindeks Damptryk/TEEL 3 mm Hg/ mg/m ³ *1000
Toluen diisocyanat	Fremstilling af uretan skum- plast Andre isocyanater anvendes til fremstilling af lim og spe- cielle plasttyper	3.63	19.6
Formalin (Opløsning af formaldehyd i vand)	Sterilisering	30.7	52
Metyl Pyrrolidon	Bruges i forskellige kemiske synteser og analyser	1500	26.5
Acrylamid	Tilsætningsstof til kunsthar- piks	60	26.6
Kulstof disulfid	Opløsningsmiddel og reagens i kemisk syntese	1490	618
Kloretan	Reagens i kemisk syntese	10000	2000
Metylenklorid	Opløsningsmiddel	13920	87.5
Cyanoacrylater	Lim	60	16
Fenol	Reagens i kemisk syntese af kunstharpiks	769	2
Kulstoffetetraklorid	Opløsningsmiddel	3270	175
Trikloretylen	Opløsningsmiddel	20400	15.3
Thionylklorid	Reagens i kemisk syntese	48.7	10

Tabel 2.1 Eksempler på toksiske væske der anvendes i større mængder. For definition af TEELs se kapitel 3. Lave værdier indikerer højere toksicitet

Ud over de stoffer der anvendes i større mængde findes der mange stoffer der anvendes i mindre mængder til farmaceutisk formål og i laboratorier. Eksempler er brom, metyl iodid, og acrylonitril.

Det bemærkes at nogle stoffer som ikke anvendes i store mængder i Danmark alligevel transporteres igennem Danmark.

Eksempler på uheld i Danmark der har medført frigivelse af toksiske dampe er:

- Simmersted ulykken i 1972, hvor en tankvogn forulykkede og frigav større mængder fenol
- Næstved ulykken i 1992, hvor en jerbaneulykke førte til frigivelse af acrylonitril
- Udslip af toluen diisocyanat i 2006

2.3 Pesticider

Pesticider produceres, formuleres og anvendes i Danmark. Disse frigiver sjældent tilstrækkelige dampe til i sig selv at være kilder til farlige dampe, men stofferne kan frigive giftig røg ved brand.

2.4 Faste stoffer

Der er mange faste toksiske stoffer, der anvendes i industrien og nogle der fremstilles. En stor gruppe er faste pesticider. Metalpulver, specielt nikkel, anvendes til fremstilling af specielkomponenter, og som katalysator til hydrogenering af olie (til margarine osv.) samt til kemiske synteser. Toksiske metalsalte anvendes ved overfladebehandling. Der er mange flere der anvendes i små mængder til laboratoriebrug.

Nogle toksiske faste stoffer anvendes til medicinsk behandling, f.eks. cytotoxiske stoffer til kræftbekæmpelse. Mængderne er små, men frigivelse fra en pakke kan alligevel give problemer indenfor et betydeligt område (flere ti meter) samt indendørs.

Faste stoffer spredes normalt ikke som gasarter, men kan især blive spredt ved eksplosioner eller brand.

Fosfor og svovl anvendes i Danmark, og kan ved brand forårsage frigivelse af toksisk røg i form af henholdsvis svovldioxid og forskellige fosforoxider

2.5 Gasformig gasarter

Nogle få toksiske stoffer oplagres som gas i cylindere. De fleste anvendes i kemiske synteser eller laboratoriebrug. Eksempler er cyanbrint, klor, hydrogenklorid, og nogle særestoffer der anvendes i specielindustrier, som phosphine, silane, og diborane.

2.6 Kryogen gasarter

Oxygen og nitrogen anvendes i store mængder i Danmark, til industrielle og medicinske formål, og til forhindring af eksplosioner i opløsningsmiddeltanke. De distribueres som gasser der er gjort flydende ved nedkøling. Gasserne er ikke toksisk, men skal alligevel vurderes med spredningsberegninger. Oxygen er i stand til at øge brandsandsynligheden. Nitrogen er asfyxierende (Kvælende).

2.7 Krav til værktøjer

Sammenlignet med mange andre europæiske lande findes der relativ få toksiske kemikalier i Danmark. Ethvert værktøj bør dog indeholde en database med de relevante stoffer med deres fysiske egenskaber og toksicitet. Dette er især nødvendigt fordi stofegenskaber som f.eks. damptryk og gassens densitet ændrer sig med temperaturen og beregning af disse er nødvendig for at kunne beregne gasspredningen.

No.	Krav til værktøjet
1.	Værktøjerne til gasspredning bør indeholde en database over farlige stoffer, deres toksicitet og deres fysiske egenskaber. Egenskaberne bør kunne beregnes som funktion af temperaturen.

3 Risikoscenarier - gasudslip og uheldsformer

Der er flere situationer hvor gasudslip kan ske. Alle centrerer omkring frigivelse af et toksisk materiale. En nogenlunde dækkende liste over udslipsformer der kan forekomme i Danmark er:

- Udslip af gasformig toksisk gas, fra cylindere, lagertanke eller rør
- Udslip af fordråbede gasarter (ammoniak, klor osv.) fra et hul i en beholder eller rør
- Udslip forårsaget af tankbrud, især tryktanke til fordråbede gasarter
- Udslip af syrer og af vandammoniak (disse kræver anderledes modeller end de som anvendes for rene stoffer)
- Udslip af kryogen (nedkølede) gasarter
- Udslip af toksisk væske, efterfulgt af fordampning.
- Brand med frigivelse af toksisk røg
- Udslip af toksisk gasser under reaktioner, hvor reaktionen kan være en normal tilsigtet reaktion, eller en utilsigtet reaktion.
- Frigivelse af toksisk støv

Eksempler på alle disse scenariotyper er sket i Danmark i løbet af de sidste 30 år, med undtagelsen af store tryktankbrud og kryogenudslip.

Der vil ofte være en væsentlig forskel imellem udslip der forgår udendørs og dem der foregår indendørs. Af denne grund fordobles antallet af forskellige scenarier som skal kunne beregnes.

Der er nogle steder hvor væske eller fordråbede gasarter kan frigives på vand, især ved losning af skibe. Antallet af scenarier der skal kunne behandles øges herved.

Den fysiske form af disse frigivelsesscenarier beskrives nedenfor.

Der er andre scenarier der sjældent forekommer men som kan være omfattende i omfanget. Eksempler er eksplosioner i siloer, eksplosioner i kloak og drænsystemer. Disse scenarier behandles ikke her fordi gasspredning kun er en mindre del af scenariovurderinger.

I det følgende beskrives hvordan de forskellige udslip forgår.

3.1 Fordråbede Gasarter

Langt de alvorligste gasudslip opstår ved uheld med fordråbede gasarter, af hvilken ammoniak, klor og svovldioxid er de mest almindelige.



Figur 3.1 Udslip af ammoniak ved destruktion af en 15 l. cylinder. (Photo Dave Crosbie, Burnsville Fire Department and the Minneapolis Police Department Bomb Squad.) (15 liter udslip)

Udslip fra en trykbeholder kan opstå ved:

- tæring eller brud i rør
- revner i beholder
- totalbrud i beholder
- brud på fyldningsslanger
- udslip fra flanger
- menneskelige fejl ved åbning af en ventil
- udslip igennem en sikkerhedsventil
- overtryk
- væskeslag

Totalbrud på en statisk beholder forekommer yderst sjældent (Se statistik i ref. 111). Brud på tankvogne (tankbiler eller jernbane tankvogne) sker ca. en gang pr. år på verdensbasis. Et tilfælde af et mindre brud i en transportabel ammoniak tank kendes i Danmark. (Ringsted, 1997).

Brud i lastnings- eller losningsslange kan være forårsaget af slid, men den mest almindelige årsag til udslip er frakørsel uden afkobling af slangen.

Der er forskel i både form og omfang af et udslip, afhængigt af, om udslippet sker fra toppen af beholdere eller i gasfyldte rør, hvor kun gas frigives, eller fra lavere rør eller bunden af beholderen, hvor stoffet frigives som væske.



Figur 3.2 En jetudslip af gas under tryk (propylen)

Hvis stoffet frigives som gas under tryk, sker den første del af udslippet i form af en jet (se figur 3.2). Jetten bliver bredere og jettens hastighed mindre, ved at luft suges ind. Denne effekt er vigtig for beredskabet idet fortyndingsgraden kan være op til en faktor 100 (se bilag A).

Når hastigheden i jetten falder til ca. vindhastigheden, går spredningen over i en ny fase, hvor den tager form af en fane. Fortyndingen sker ved opblanding af gassen med luft pga. turbulens i atmosfæren. Graden af fortynding afhænger af vindhastighed, atmosfærens stabilitet og af omgivelserne.

Spredning af gas påvirkes af omgivelser ved frigivelsen. Længden af jetten afkortes hvis den rammer en beholder eller en væg. Fortyndingen påvirkes dog ikke i særlig høj grad. Hvis udslippet derimod sker i en brønd, et højt bassin eller indendørs, destrueres jettens momentum uden at der sker væsentlig fortynding. Resultatet er at jettens fortyndingsvirkning går tabt og fanerne derved bliver betydeligt længere.

Hvis udslippet sker som væske tager udslipsjetten form af en intens strøm af gas og fine dråber. Væsken er ofte op til 80 % af udslippet for stoffer som ammoniak eller klor (se bilag A). Jetten og fanen spredes alligevel i en form der ligner et gasudslip, idet væskedråberne i mange tilfælde er så små, at de bæres med som en tåge. I nogle tilfælde regner der dråber fra jetten. Dette sker specielt hvis stoffet har et lavt

damptryk, som for eksempel fluorbrint eller butan og specielt ved udslip med lave temperaturer i beholderen.



Figur 3.3 Udslip af en tofase jet (forsøg, ved anvendelse af mindre farlig stof, dvs. vand over kogepunktet)

Væsken i jetten medfører at blandingen holdes kold (ved kogepunktet af gassen, f.eks. -33.5° for ammoniak). Den kolde blanding af luft, gas og væsketåge spredes som et tungt lag og spredes som en såkaldt "pandekagesky".

Hvis en tofase jet rammer en anden beholder eller en væg, sker der et betydeligt udfald af væsken fra jetten. Resultatet bliver at der dannes en pøl af væske, der fordamper relativt langsomt. Fjernelse af væske fra fanen medfører at fanen bliver kortere (ca. 30 % kortere for typiske ammoniakudslip, se bilag A).



Figur 3.4 Spredning af tung gas i industriområde med meget turbulens (nitrogen).

Et eksempel på denne slags udslip er en frigivelse af ammoniak (i Ringsted), hvor en studs brækkede væk fra en ammoniakbeholder der var ved at blive hejset op på en lastvogn.

Det sker i nogle sjældne tilfælde, at en beholder med fordråbet gas sprænges (ca. 1 gang om året under transport på verdensplan, som nævnt tidligere). Årsagerne kan være dårlige svejsninger, tæring (specielt af svejsninger), overfyldning eller "væskeslag". (Væskeslag i en beholder sker ved hurtig overfyldning gennem et langt rør, således at væsken rammer toppen af beholderen med stor kraft).

Hvis en fordråbet gasbeholder sprænges, sker der en hurtig opkogning og både væske og gas kastes ud af beholderen. Der dannes en sky af gas iblandet luft og væsketåge. Skyen er tungere end luft og indenfor nogle få sekunder begynder den at falde som en flad "pandekagesky", som derefter bevæger sig med vinden. Skyen fortyndes som resultat af turbulens i luften.

Et eksempel på totalbrud på en tank (en af de få i verden) er den fra Potchefsroom i Syd Afrika i 1973. En 50 tons beholder svigtede pga. en svejsefejl. Der blev dannet en sky 150 m bred og 20 m. høj. 11 personer indenfor 100 m. døde (der var 30 personer indenfor 70 m. radius, så mange overlevede). Nogle personer i et kontrolrum

indenfor 80 m. blev reddet efter 30 minutter. De havde anvendt våde klude til at reducere ammoniak indåndingen. Fire personer udenfor hegnet døde.

3.2 Toksiske gasser

Toksiske gasarter anvendes til tekniske formål og til kemisk syntese. Eksempler er cyanbrint, phosphine, fosgen og klorbrinte. Gasserne leveres i cylindre. Udslip kan ske pga. cylindersvigt, brud på rør eller fejl i opkobling af cylinder til anlæg.

Gasspredningen sker som en jet. Et udslip vil ofte ske indendørs, idet anvendelsen oftest sker indendørs. Spredningen sker derfor igennem vinduer, døre eller udluftningsskakter. Den første fortynding vil være afhængig af hvor meget ventilation der er i bygningen.

3.3 Toksiske væsker

Nogle toksiske væsker anvendes i industrien, i kemisk syntese og til produktion af f.eks. polyuretanskum

Udslip af disse væsker kan ske ved brud på rør, ved overfyldning af tanke, ved brud på losningsslanger eller ved deciderede tankbrud.

Spredning af giftige dampe afhænger af hvor meget væske der frigives, og hvor stor pølen bliver. Pølen størrelse afhænger af væskens viskositet, men i højre grad af afgrænsninger som bassiner, kantsten og hulninger i jorden.

Spredning af giftige dampe afhænger også af jordtemperaturen, solens stråling og af vindhastigheden, eller indendørs, af ventilationsforhold.

Et af problemerne med toksiske væsker er, at frigivelsen af dampe kan være langvarige, for det første fordi oprensningen kan vare flere timer, og for det andet, fordi det kan være vanskeligt at rense overfladen (f.eks. jorden) totalt.

3.4 Udslip af væsker over kogepunktet

Nogle væsker anvendes under tryk over kogepunktet. Dette er tilfældet ved flere kemiske synteser, hvor opløsningsmidlet ofte er over kogepunktet. Udslip af disse væsker ved f.eks. rørbrud eller udslip igennem en sprængplade sker som en gas jet eller to fase jet. Formen af udslippene ligner dem for fordråbede gasarter.

3.5 Reaktive stoffer

Forskellige reaktive stoffer kan danne toksiske gasarter ved reaktioner. Dette gælder for visse stoffer der indgår i kemiske synteser, for eksempel klorbrinte og svovldioxid fra forskellige kloreringer med thionylklorid. Disse vil normalt kun blive frigivet hvis et anlægs skrubber svigter. Der er også mange stoffer, der kan reagere i uheldssituationer, f.eks. pga. forkert blanding, og det kan give overraskende frigivelse af toksiske gasser. Tilfældene bør i forhold til Seveso direktivet være identificeret for samtlige kolonne 1 og kolonne 2 virksomheder, men der eksisterer tilfælde i almene industrier, hvor identifikation er mere besværlig.

Bedømmelsen af udslipshastigheden vil ofte afhænge af nøjagtigheden i bedømmelse af blandingshastigheden, for eksempel af salpetersyre med organiske stoffer. Mange tilfælde er næsten umulige at bedømme på forhånd, og der behøves derfor metoder til bedømmelse af den aktuelle udslipssituation.

Gasspredning fra reaktioner beregnes på den samme måde som for gasudslip fra beholdere, men uden den initiale jet spredning.

En af de væsentligste grupper af stoffer der kan frigive toksiske gasarter er de stoffer der reagerer voldsomt med vand. Nogle, som thionylklorid, danner toksiske gasarter ved reaktionen. Andre, som isocyanater, danner varme under reaktionen med vand, hvorved der dannes giftige dampe.

Et eksempel på udslip af toksisk gas efter en reaktion er frigivelse af nitrøse gasser efter antændelse af gødningspiller under tørring, i Fredericia i 1996. Uheldet sket ved en varmetørringsproces for gødning, hvor en kontaminering af stoffet førte til dekomponering.

Reaktioner kan til tide forekomme på uforventede måder. For eksempel skete der en eksplosion i et bryggeri i Faxe i 1997 på grund af en fejlfyldning af salpetersyre til en formalintank. Reaktionen ville nødvendigvis have ført til frigivelse af toksiske dampe og gasser.

Et tredje eksempel er frigivelse af flere tons svovldioxid i Næstved i 199X, der skete på grund af en utilsigtet blanding af to stoffer

3.6 Udslip af syre og ammoniakvand

Ammoniakvand (ammonium hydroxid) og syrer (specielt oleum, dvs. meget stærk svovlsyre) danner dampe ved frigivelse. Der kræves dog specielle modeller til beregning af frigivelsen, idet ammoniak og syre er bundet til vand i opløsning. Almindelige fordampningsmodeller som der findes i de eksisterende beregningsværktøjer, kan ikke anvendes.

3.7 Frigivelse af støv

Giftigt støv kan frigives ved eksplosioner, ved brand, ved spild og med vinden. Omfanget af farerne er normalt begrænset. Frigivelsen kan dog give andre langvarige problemer, idet jorden bliver kontamineret.

Et eksempel er nikkel pulver, der anvendes til hydrogenering, f. eks. i margarineproduktionen. Ved spild bliver pulveret ofte antændt og ved branden spredes nikkeloxid.

Til beregning af spredning i disse tilfælde kræves der både modeller for spredning og modeller for nedfald (deponering) af støvet.

Et eksempel på et uheld af denne slags er udslippet af en blanding af natrium hypoklorit, fenol, triklorfenol med et stort indhold af dioxiner i Seveso i 1976. Reaktionen var løbet løbsk og stofferne blev frigivet igennem en sprængplade. Et område på ca. 7 kvadrat km blev påvirket.

3.8 Toksisk røg

Toksisk røg dannes ved de fleste brande i form af kulmonoxid og PAHs. Risikoen er normalt høj indendørs, men lav udenfor, fordi røgen stiger til vejrs.

En højere risiko opstår hvis det brændende stof indeholder klor, idet der dannes både klorbrinte og fosgen. Andre problemer opstår hvis det brændende materiale selv er giftigt, f.eks. træ behandlet med arsen eller andre fungicider.

Et andet eksempel er en brand i gødningslager, hvor gødningen indeholder ammonium nitrat. Herved dannes toksiske nitrøse gasser ved brand (se figur 3.5).



Figur 3.5 Frigivelse af nitrøse gas fra en brand

Risikoen bliver specielt høj hvis

- branden opstår i et nabolag med højhuse
- der sker røgnedslag
- branden ikke er særlig varm og der ikke sker en separation af røgfanen fra jordniveau

Vurdering af området der påvirkes af toksisk røg kræver modeller for dannelse af toksiske stoffer, modeller for opstigning af røg, såvel som modeller for spredning.

Et eksempel på frigivelse af toksisk røg er branden ved en kontorvarefabrik i Allerød i 2000, hvor PVC'en brændte. Der dannes klorbrent i en sådan brand og røgen kan være væsentlig mere toksisk end ved en brand i ikke klorholdige stoffer.

3.9 Kryogen udslip

Der opbevares kun to former for gasarter i nedkølet flydende form i Danmark, nemlig oxygen og nitrogen. Begge gasarter kan blive farlige ved udslip. Oxygen, fordi det kan forårsage brand og nitrogen fordi det kan forårsage asfyxiering (kvælning).

Kryogen væske flyder fra udslipsstedet som andre væsker, men koger når de kommer i kontakt med jorden, hvorved jorden køles. Opkogningen ved udslipsstedet reduceres derved og væsken spreder sig over jorden med en intens opkogning ved kanten af pølen og mindre opkogning hvor jorden er blevet kølet (se figur 3.6)



Figur 3.6 Udslip og fordampning af et kryogen væske (ammoniak, bemærk at oxygen og nitrogen spredt på den samme måde))

Vurdering af området der påvirkes af et kryogen udslip kræver modeller for udslipshastighed, for spredning på jorden og fordampning af stoffet, såvel som modeller for spredning af gassen.

3.10 Spredning af gassen

Gassen spredes med vinden når den er frigivet. Gassen blandes med luften på grund af turbulens i atmosfæren. Når himlen er overskyet dannes turbulensen hovedsagelig på grund af vindens friktion mod jorden og mod træer, bygninger osv. Turbulensen blander gassen med luften således at den fortyndes (Figur 3.7).



Figur 3.7 Turbulens fortynder et udslip af kuldioxid

Luften ved jorden bliver varm når jorden varmes af solen. Resultatet er, at den varme luft stiger. Turbulens øges ved denne stigning, fordi langsomt bevægende luft ved jorden blandes med hurtigere bevægende luft højere oppe (figur 3.8). Atmosfæren siges at være ustabil. Resultatet er en meget hurtigere fortynding, men det kan også medføre, i tilfælde af toksisk røg, at røgfanen bringes ned på jordniveau (figur 3.9).

Luftlaget tæt på jorden bliver kold, når jorden er koldere end luften. Dette sker især om natten ved klar himmel, når jorden udstråler varme, og hvor der er ingen skyer til at reflektere varmen tilbage. Den kolde tunge luft bevæger sig ikke så let i vertikal retning og har en tendens til at bevæge sig ned igen hvis den turbulent hvirvel flytter sig opad. Resultatet er, at turbulensen dæmpes, især hvis vindhastigheden er under ca. 4 m/s. Turbulensen mindskes og atmosfæren siges at være stabil (figur 3.10). Fortyndingen af toksiske udslip foregår langsomt under disse forhold (figur 3.11).



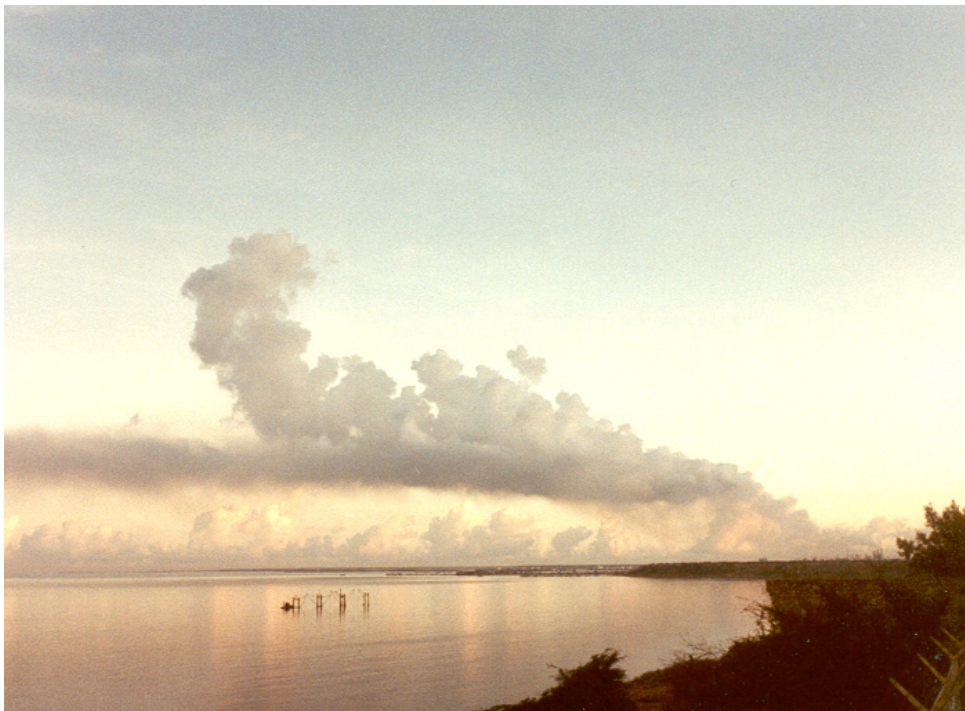
Figur 3.8 Storturbulens der opstår pga. varm let luft ved jorden



Figur 3.9 Storskala turbulens bringer større hvirvler af røg mod jorden.



figur 3.10 Mosekonebryg der bevæger sig langsomt ned ad en bakke under stabil atmosfærisk forhold.



Figur 3.11 En fane af svovl dioxid (nederst) og røg med damp (øverst). Svovldioxid fanen blev målt med signifikant koncentration 50 km. fra udslipsstedet. Der er et stabilt lag nederst.

3.1.1 Et dækkende sæt af scenarier

Eksempler af næsten alle de scenarier der er beskrevet ovenfor er sket i Danmark, og der er muligheder for at alle vil kunne forekomme (Forfatterens personlige observationer efter ca. 35 års arbejde i danske virksomheder). Listen er mere omfattende end den der gives i de eksisterende vejledninger om risikoanalyse eller beredskabsplanlægning. (se f.eks. refs. 1 til 6). Listen svarer nogenlunde til den liste der forekommer med relativ høj hyppighed rund omkring i verden. Der er nogle vigtige udslipsscenarioer der er forekommet andre steder, men som ikke er taget med her, fordi der er få eller ingen muligheder for at de vil kunne ske i Danmark. Eksempler er udslip af kryogen ammoniak (findes ikke i Danmark siden lukningen af Lyngs Odde anlægget), frigivelse af stor mængde svovlsyre til vand (ingen stor syretanke ved vandkanten i Danmark) og frigivelse af blandinger af butan og fluorbrint (ingen anvendelse af disse stoffer til fremstilling af benzin i Danmark).

Værktøj der skal anvendes til spredningsberegninger ved kommuneplanlægning og beredskabsplanlægning bør kunne håndtere et komplet sæt af scenarier der er relevante i Danmark. Scenarierne er beskrevet ovenfor. Listen opsummeres i tabel 3.2 nedenfor. Det skal understreges at et værktøj der kun kan beregne gasspredning er i denne sammenhæng så godt som værdiløs alene. Beregning af udslipshastigheden, spredning af væske på jorden, nedfald af dråber fra fanen, fordampning og interaktionen med foranstaltninger som sprinklere, er lige så vigtige.

No.	Krav til værktøjet	Tilfælde i Danmark
1.	Værktøjet skal kunne beregne udslip af gas igennem huller eller rør.	Flere er sket. Kun få potentiel steder
2.	Værktøjet skal kunne beregne udslip der foregår indendørs eller udendørs.	Cirka halvdelen af udslippene der er sket i Danmark er startet indendørs
3.	Værktøjet skal kunne beregne spredning fordråbede gasarter fra hul eller rør.	Flere er sket i Danmark og der er mange potentialer for udslip.
4.	Værktøjet skal kunne beregne virkningen af, at en gas eller tofasestrøm rammer en væg eller andre forhindringer.	Dette gælder for langt de fleste tofase udslipsskilder.
5.	Værktøjerne bør kunne beregne udslip af toksiske væsker under atmosfærisk tryk eller ved pumpning igennem huller eller rør.	Flere tilfælde er skete i Danmark, mere end 50 % af kemikalie uheld
6.	Værktøjet bør kunne beregne spredning af toksiske væsker på jorden.	Flere tilfælde er sket i Danmark.
7.	Værktøjet bør kunne beregne fordampningen af toksiske væsker fra jorden, og ved sprøjt og plaskning af væsker.	Flere tilfælde er sket i Danmark.
8.	Værktøjet bør kunne beregne for syrer og for ammoniakvand såvel som for rene stoffer.	Flere tilfælde i Danmark.
9.	Værktøjet bør kunne beregne spredningen af toksiske støv der spredes ved eksplosioner. (Dette medføre at værktøjet også bør kunne beregne eksplosioner, inklusiv støvekspllosioner).	Kun nogle få tilfælde i Danmark. Eksplosioner i ventilationskanaler med støv er vigtig ved medicinalproduktion
10.	Værktøjet bør kunne beregne dannelsen af toksiske røg, såvel som spredningen.	Nogle tilfælde i Danmark
11.	Værktøjet skal kunne beregne dannelse af toksiske gasser eller dampe ved uønskede reaktioner. Dette inkluderer dannelsen og frigivelsen, såvel som spredningen.	Flere tilfælde i Danmark.
12.	Værktøjet skal kunne beregne fordampning fra plask og sprøjt. (Ikke inkluderet i nuværende vejledninger f.eks. refs 1 til 6, men er vigtig.	Eksempel fra Buncefield uheldet i England 2006, og kan ske i Danmark

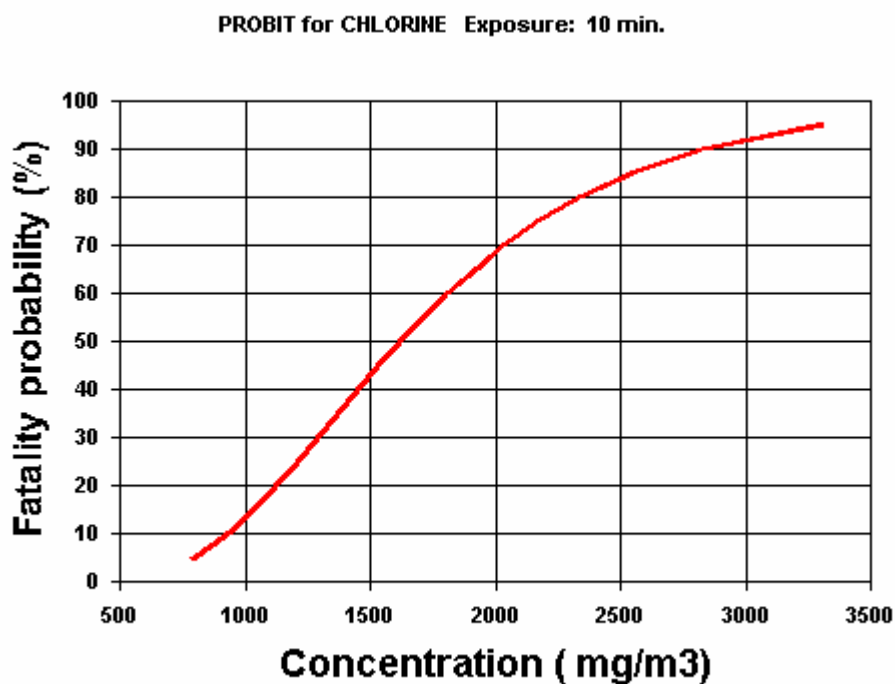
Tabel 3.1 Et rimelig dækkende sæt af scenarier der omhandler gasspredninger, med relevans i Danmark..

4 Toksicitetskriterier

Det er nødvendigt at specificere hvilke koncentrationer der betragtes som farlige, uanset hvordan faneudbredelsen beregnes. Fanens længde og bredde defineres af "slutpunktet" ("end point") som angives ved at specificere en bestemt koncentration, eller en bestemt indtaget toksisk dosis.

Bag fastsættelsen af sådanne slutpunkter er den antagelse, at mennesker kan tolerere en vis mængde af et toksisk stof. Paracelsus udtrykte dette ved at sige "Der er ingen toksiske stoffer, kun toksiske doser".

Menneskers følsomhed over for toksiske stoffer varierer. Normalt antages det at små børn, ældre og syge er mere følsomme overfor toksiske stoffer. Følsomhed overfor toksiske stoffer udtrykkes oftest med "Probit kurver" (figur 4.1) der angiver sandsynligheden for en effekt (skade, død) som funktion af den toksiske påvirkning. Toksisk påvirkning kan udtrykkes som koncentration, indtaget dosis, eller andre mål.



Figur 4.1 Probit kurve (baseret på konstanter fra ref. 4.1)

En måde at udtrykke toksisk påvirkning på er at multiplicere koncentration med eksponeringstiden. Dette er basis for "Haber's Lov" (som faktisk ikke er en naturlov men derimod en hypotese der afspejler observationer fra mange tilfælde). (ref. 6)

$$TE = Ct$$

Hvor TE er toksisk påvirkning

C er koncentrationen

t er eksponeringstiden

Det konstateres dog, at effekten af toksisk stof ikke altid kan udtrykkes sådan. Mennesker er meget mere følsomme overfor nogle stoffer, hvis den totale toksiske dosis indtages med høj koncentration over en kort tid end hvis dosen indtages med lav koncentration over lang tid. Relationen mellem toksisk effekt og koncentrationen af stoffet er med andre ord ikke linear. Dette udtrykkes ved relationen:

$$TE = C^n t$$

For de fleste stoffer er eksponenten mellem 1 og 2.

4.1 Toksisktvurderinger og fastlæggelse af grænseværdier

To forskellige fremgangsmåder anvendes ved vurdering af toksicitet. En fremgangsmåde er at anvende en fast procedure til behandling af observationer fra dyreforsøg og kliniske rapporteringer. Denne fremgangsmåde anvendes f. eks. i den hollandske "Grønne bog" (ref. 6). Den anden fremgangsmåde er at et ekspertpanel vurderer observationer, og anvender ekspertise til at vurdere de "bedste" eller mest sandsynlige værdier. Ekspertpanelet kan følge en fast protokol for vurdering, men panelmetoden giver bedre mulighed for at tage hensyn til kendt viden om toksicitetsmekanismer. Den sidstnævnte fremgangsmåde anvendes ved fastlæggelse af AEGL og ERPG værdier beskrevet i de følgende afsnit.

4.2 Forskellige koncentrationsgrænser

I risikoanalyser søger man oftest at beregne sandsynligheden for dødsfald. Man bør i princippet også beregne sandsynligheden for skade, men definition af skader er vanskelig og man plejer derfor at antage, at mennesker er beskyttet imod skader, hvis de også er beskyttet mod dødsfald. Princippet holder i en vis grad i nogle situationer. Der er dog situationer, hvor mennesker kan blive eksponeret for koncentrationer, som ikke er fatale, men som kan gøre dem syge. "Risikoen" for dødsfald vil derved være lig nul, men risikoen er ikke dermed ubetydelig. Det er nødvendigt at anvende sandsynligheden for dødsfald i risikoanalysen. Men det er også nødvendigt at beregne konsekvensen af mindre ekstreme koncentrationer for at sikre, at alle potentielle problemer dækkes.

Nogle toxicitetskriterier, der anvendes til at beregne sandsynligheden for dødsfald er:

LC 50: Koncentrationen, som medfører 50 % sandsynlighed for dødsfald (normalt med 30 minutters eksponering)

LC10: Koncentrationen, som medfører 10 % sandsynlighed for dødsfald (normal med 30 minutters eksponering)

TD 50: Toksisk dosis for 50 % dødsfald

TE 50: Toksisk påvirkning for 50 % dødsfald

Der er også software, der anvender probit kurve-værdier direkte.

Andre grænsetyper skal anvendes til at sikre, at personer er **beskyttet** mod dødsfald eller skader. Værdierne, der anvendes er derfor under dem, som giver dødsfald. Sådanne værdier behøves til beredskabsplanlægning. Eksempler er AEGL (Acute Exposure Guidance Levels) og ERPG (Emergency Response Planning Guides). Sådanne værdier kan ikke anvendes til risikovurdering, fordi de er baseret på en vurdering af, at ingen dør eller kommer til skade.

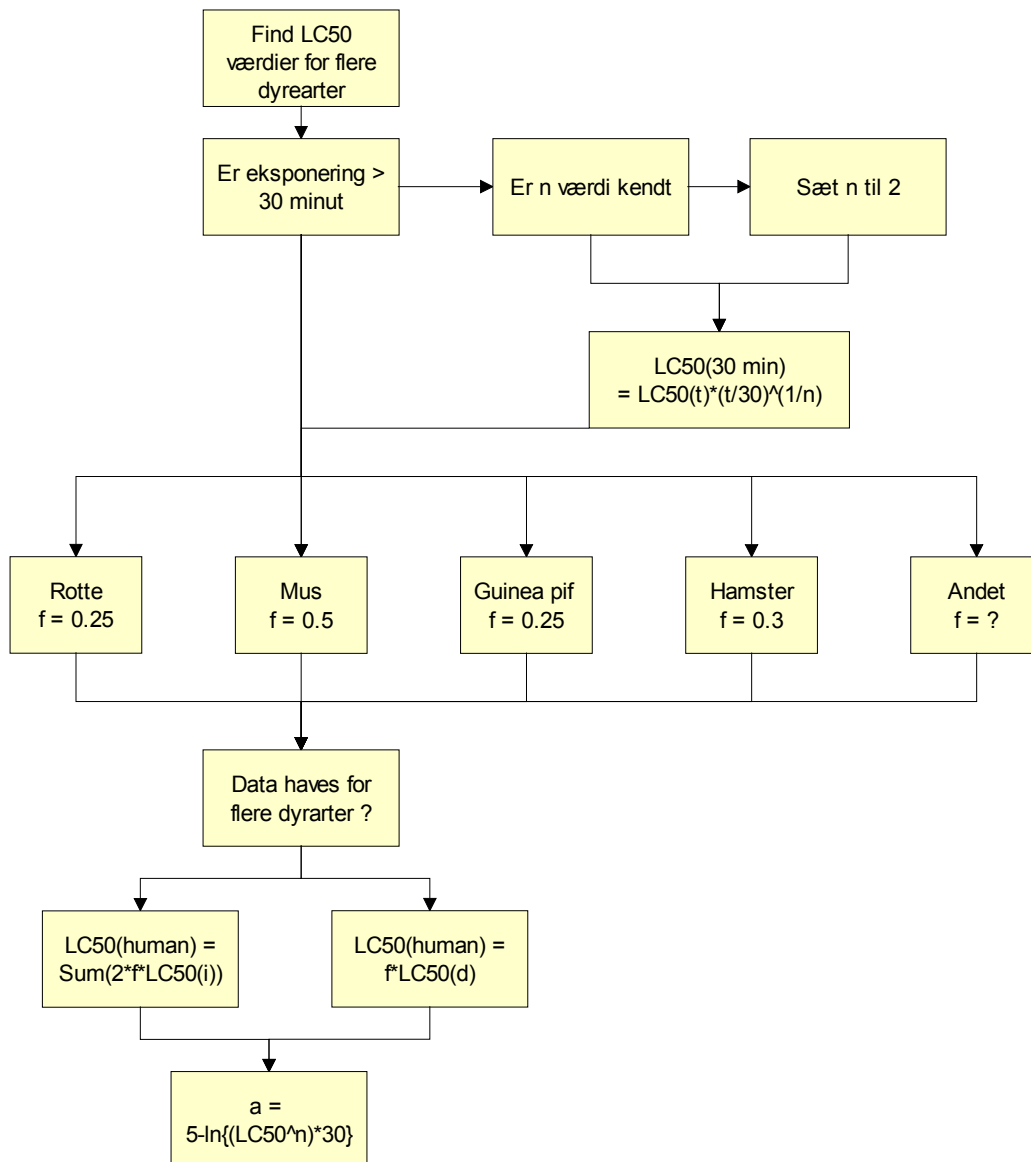
4.3 LC50 og probit værdier

Probitværdierne, der anvendes i risikoanalyse er oftest enten dem samlet af Eisenberg til US Coast Guard (ref. 7) eller dem, som er samlet af TNO i det Grønne Bog (ref. 6).

TNO's fremgangsmåde ved fastsættelse af probitværdier er vist i figur 4.2. Som det kan ses, er fremgangsmåden ligefrem. Resultater er givet for 22 stoffer men metoden kan i princippet anvendes af alle med adgang til RTECS databasen.

Griffiths (ref. 8) har påpeget, at toksiske effekter varierer med eksponeringsmønsteret med tid. Svingende koncentrationer har en stærkere effekt end konstante koncentrationer med den samme gennemsnitskoncentration. Dette medfører at der sandsynligvis burde introduceres nye sikkerhedsfaktorer i anvendelsen af grænseværdier.

Schubach (ref. 9) har sammenlignet TNO's probit konstanter med dem, som anbefales i AIChE/CCPS vejledning om risikoanalyse (ref. 4). Disse værdier er udarbejdet på basis af udvalgsarbejdet udført af I Chem E i England. Værdierne er baseret på ekspertvurdering af eksperimentale værdier, men uden fast protokol.



Figur 4.2 Systematisk procedure for udledning af probit konstanter

4.4 Tidsskalering af Toksiske virkning

Det ligger implicit i Haber's lov, og den ikke-lineare variant af loven, at den toksiske virkning afhænger af tid. En højere eksponeringstid vil kræve en lavere koncentration eller slutpunkt, for at begrænse den skadelige virkning.

Eksempel:

LC₅₀ for ammoniak f.eks. er ifølge den Grønne bog (ref. 6) 8750 mg/m³ for en 30 minutters eksponering. Hvis eksponeringen varer 3 minutter er den tidsskaleret LC₅₀ værdi i forhold til Haber's lov:

$$LC_{50,3} = 8750 * (30/3) = 87500 \text{ mg/m}^3$$

Hvis man anvender den ikke lineare variant af loven, med en eksponent af 2.4 bliver den tidsskalerede LC_{50} værdi:

$$LC_{50,3} = 8750 * (30/3)^{1/2.4} = 8750 * 2.6 = 22750 \text{ mg/m}^3$$

Den lavere grænse for en skalering af denne type er ikke klarlagt – man kan sjældent finde data for toksisk virkning for eksponeringer under 10 minutter. Det tages som givet at modellen ikke gælder for eksponeringer under 1 minut. Man kan derimod ofte finde at modellen er valideret med data for toksitetsvirkning over flere timer. 8 timers eksponering er for eksempel ofte anvendt ved dyreforsøg.

4.5 IDLH

IDLH værdier var det første forsøg på systematisk at opstille grænseværdier for akut eksponering til toksiske gasarter. Værdierne blev opstillet med et NIOSH-udvalgsarbejde (ref. 10) og skulle anvendes til vejledning, om hvornår man skulle anvende gasmaske. Værdierne anvendes stadigvæk til dette formål.

De oprindelige IDLH-værdier blev kritiseret, fordi der ikke blev anvendt en entydig protokol til opstillingen og fordi nogle af værdierne afveg fra den gængse viden om toksiske virkninger. Værdierne blev revideret i 1994 med en klar protokol til bestemmelse af værdien (ref. 10). Det blev samtidigt anbefalet, at man skulle anvende de værdier fra den hollandske "Grønne bog" (ref. 6) til tidsskalering. Det blev ikke gjort klart, om man skulle anvende de 22 aktuelle værdier fra den Grønne bog, eller princippet i fastsættelse af værdierne.

IDLH værdier findes for 135 stoffer. De anvendes normalt ikke til risikoanalyse, fordi deres formål er til sikring af medarbejdere og beredskabspersonale. Standarder for gasmasker i USA er derimod bundet til definitionen af IDLH-værdier.

4.6 ERPG værdier

Emergency Response Planning Guides (ERPG) værdier (ref. 11) blev defineret af ACGIH netop til anvendelse ved beredskabsplanlægning og specielt til at understøtte amerikansk lovgivning om "local emergency response committees" (LERCs). Værdierne defineres som:

ERPG1 – Den maksimale luftbårne koncentration, under hvilken det forventes, at næsten alle individer kunne eksponeres for op til 1 time, uden at opleve andet en mild og kortvarige sundhedspåvirkninger eller klart defineret dårlig luft.

ERPG2 – Den maksimale luftbårne koncentration, under hvilken det forventes at næsten alle individer kunne eksponeres på op til 1 time uden at opleve eller udvikle irreversible eller andre alvorlige sundhedspåvirkninger eller symptomer, som kunne forhindre individerne til at tage beskyttende aktion.

ERPG3 – Den maksimale luftbårne koncentration, under hvilken det forventes at næsten alle individer kunne eksponeres på op til 1 time, uden at opleve eller udvikle livstruende sundhedspåvirkninger.

Kvaliteten af det professionelle arbejde i fastsættelse af ERPG-værdierne er meget høj med en fast protokol og offentlig høring ved fastsættelse af alle værdierne i detaljer om toksiske virkninger og baggrunden for alle stofferne er offentliggjort i form af et kort notat på cirka 10 sider for hvert stof. Der fandtes i 2005 ERPG-værdier for 113 stoffer. De fleste stoffer der falder ind under risikodirektivet i Danmark har ERPG værdier.

De største problemer ved anvendelse af ERPG værdier er, at der ingen vejledning gives om tidsskalering, og at en eksponering på 60 minutter er relativt langt i forhold til den faktiske eksponering ved de fleste ulykker der involverer eksponering til gasser eller dampe.

4.7 AEGL værdier

Acute Exposure Guideline Levels (ref. 12) er blevet defineret af US EPA til anvendelse ved beredskab og beredskabsplanlægning. Arbejdet foregår efter en fast protokol med offentlig høring om værdierne.

De tre niveauer er defineret som følger:

AEGL1 er den luftbårne koncentration over hvilken det forventes, at den generelle offentlighed inklusiv sårbare personer, vil kunne opleve mærkbare gener, irritation eller ikke sensible effekter. Effekterne skal ikke være invaliderende og skal være kortvarige og irreversible ved endt eksponering.

AEGL 2 er den luftbårne koncentration over hvilken det forventes, at den generelle offentlighed inklusiv sårbare personer vil kunne opleve irreversible eller alvorlige længerevarende sundhedspåvirkninger, eller reducerede evne til at rede sig.

AEGL3 er den luftbårne koncentration over hvilken det forventes, at den generelle offentlighed inklusive sårbare personer vil kunne opleve livstruende sundhedspåvirkninger eller død.

AEGL værdier gives for flere tidseksponeringer fra 10 minutter til 8 timer. Der var i februar 2006 173 værdier offentliggjort hvoraf 22 hvor status er endelig godkendt. De fleste stoffer der falder ind under risikodirektivet i Danmark har AEGL værdier.

Kvaliteten af det professionelle arbejde i fastsættelse af AEGL-værdierne er meget høj med en fast protokol for fastsættelse af værdier og med offentlige høringer for at tillade anden viden at komme frem. Der findes "Technical Support Documents" for mange af stofferne med 20 til 30 sider beskrivelse af toksiciteten for hvert stof.

4.8 TEEL værdier

TEEL (Temporary Emergency Effect Levels) værdier (ref. 13) blev oprettet af US Department of Energy for at kunne dække deres interne behov for beskyttelse af medarbejdere og naboer. Der er en tabel, der anvender værdier fra andre kilder efter et fastlagt hierarki, hvor værdierne med den højeste kvalitet foretrækkes. I version 21 af TEELS findes der 2946 stoffer. DOE indrømmer, at arbejdet, der ligger til grund for mange af værdierne ikke er af højeste kvalitet (derfor begrebet Temporary i titlen) men værdierne er lavet for at tilfredsstille et behov som kan ikke afvente færdiggørelse af AEGL værdier.

4.9 Emergency Exposure Indices

Disse værdier blev defineret af ECETOC, med definitioner der ligner AEGL's. Der var i 1999 to værdier defineret. Ingen senere udvidelse af listen kunne findes.

4.10 Einsatztoleranzwerte

Udviklet af det tyske Bundesamt for Zivilschutz (ref. 14), disse værdier defineres som niveauer som ikke skulle medføre sundhedsskader for ubeskyttet beredskabs-personale eller den generelle befolkning ved en 4 timers eksponering. Der findes værdier for 33 stoffer. Værdierne er interessant pga. den meget målrettede definition af formålet, men værdierne er begrænset til en enkelt eksponeringstidsperiode.

4.11 Dangerous Toxic Loads (DTLs)

DTL's defineres af UK Health and Safety Executive (HSE) (ref. 15) som belastninger (loads) der for Specified Level of Toxicity (SLOT) kan medføre:

- Alvorlige gener for næsten alle i området
- Signifikant fraktion af personer i området behøver medicinsk hjælp
- Nogle personer alvorligt skadet, således at der behøves langvarig behandling
- Mulige dødsfald for særligt sårbare personer.

Significant Likelihood of Death (SLOD) værdier defineres som dem som giver en signifikant sandsynlighed for død og baseres på LC_{50} værdier

DTL værdier beregnes som:

$$DTL = C^n \cdot t$$

hvor C er koncentration i ppm

n er en konstant, specifik for hvert stof

t er tid i minutter

SLOT og SLOD grænseværdier er defineret for HSE for 195 stoffer

Anvendelse af DTL metoden er ækvivalent til anvendelse af LC50 and LC1 værdier med tidsskalering

4.12 Eksempel på anvendelse af de forskellige kriterier

Et eksempel tages på et udslip af ammoniak gas fra et 50.8 mm. rørbrud, med frit udslip i et åbent landskab. En vindhastighed på 3 m/s, neutral stabilitet antages og 10 minutters eksponering antages.

Kriterium	ERPG3	ERPG2	AEGL3	AEGL2	LC50	LC10	SLOD	SLOT
Koncentrationstærskel (mg/m ³)	500	200	2700	220	10400	5480	5250	8666
Jet/fane længde (m)	293.9	485.7	135.2	460.1	58.5	105.5	107.0	359.9

Tabel 4.1 Jet/fanelængder ved forskellige kriterier for toksicitet

4.13 Valg af kriterier

Princippet for valg af toksicitetskriterier bør være simpelt. Man bør anvende de kriterier der har den bedst videnskabelige underbygning, og som passer til anvendelsen. Dette medfører at AEGL værdier anvendes til beredskabsplanlægning og det hollandske Grønne bog (ref. 6) værdier anvendes til risikoanalyse.

Der opstår ofte problemer fordi disse kilder giver værdier for kun nogle få stoffer (24 i det Grønne bog, ref. 6, 175 AEGL's). TEEL systemet løser dette problem for beredskabsniveauer ved at danne et hierarki af kriterier – man vælger det bedste grænsetype hvis der er værdier, det næstbedste hvis dette ikke er tilfældet, og så fremdeles. Dette fører til det følgende hierarki for beredskabskriterier:

1. AEGL
2. ERPG
3. IDLH
4. Diverse litteraturkilder

Der findes ikke noget formelt hierarki af lignende art til anvendelse ved risikoanalyse, og fremgangsmåden er ikke nødvendigt, idet proceduren som kortlægges i Den Grønne Bog, (ref. 6) er tilstrækkelig, såfremt der er data i RTECS (ref. 16) (Der er en stor sandsynlighed for at offentliggjort data ikke findes, hvis det ikke findes i RTECS)

Tidsskalering bør altid anvendes. I langt de fleste udslip, med udslipstider under en time, bliver koncentrationsgrænserne højere og fanerne tilsvarende kortere. Det medfører at mange unødige alarmeringer kan undgås – unødige alarmeringer kan være farlige, idet der altid eksisterer en risiko for hjerteanfald og lignende skader ved evakuering. Måske vigtigere er det, at virkningen af langvarige udslip undervurderes med mindre tidsskalering anvendes.

4.14 Hvad gør man hvis data ikke findes

Der er mange stoffer for hvilken toksicitetsdata slet ikke findes. Faktisk mangler der data for langt flere stoffer end dem hvor data findes.

Problemet opstår kun sjældent i praksis for kemiske virksomheder, fordi data findes for de fleste stoffer der anvendes i store mængder eller mange steder. Problemet dog ofte for farmaceutiske virksomheder, når de udvikler nye farmaka.

En fremgangsmåde, som er blevet anvendt, er at klassificere stofferne i forhold til de aktive grupper i molekylet (toksofor grupper), og antage, at det nye stof har en toksicitet som er lige så stor som det mest toksiske stof i gruppen. Et stof kan tilhøre flere grupper. Fremgangsmåden er blevet undersøgt af forfatteren (ref. 17) og medføre sjældent en undervurdering af toksicitet, men ofte en overvurdering. Fremgangsmåden er alligevel anvendelig i mange tilfælde, fordi nye stoffer normalt anvendes kun i små mængder. Der kan i princip opstå fejl ved fremgangsmåden fordi et stof kan være toksisk pga. tilstedeværelsen af to aktive grupper, der forstærker hinanden, eller pga. molekylets form. Fremgangsmåden kræver derfor en del erfaring og ekspertise i anvendelsen for at vurdere, om stoffet er en undtagelse. (Fremgangsmåden anbefales af UK HSE, ref. 15)

Metoden ligner en simplificeret version af QSAR metoden, som anvendes til vurdering af kroniske toksiske virkninger.

Der er meget få (sandsynligvis ingen) installationer, der falder ind under risikodirektivet, der har toksiske stoffer for hvilken AEGL værdier ikke eksisterer. Der er nogle få, fortrinsvis farmaceutiske virksomheder, som fremstiller stoffer, for hvilken der ingen toksicitetsværdier findes. Stofferne anvendes eller produceres i små mængder. I nogle tilfælde stilles krav om vurdering af disse stoffer i forbindelse VVM sagsbehandling.

4.15 Krav til standardværktøjer og beregninger

Der kan udledes flere krav til standardværktøjer fra det ovenstående:

No.	Krav til værktøjet
1.	Skal kunne beregne flere forskellige koncentrationsgrænser, enten ved separate kørsler eller helst i det sammen kørsel.
2.	Skal kunne beregne toksisk belastning eller tidsskaleret toksiske grænser. For kontinuerligt udslip medfører dette, at beregningen har udslipstid eller oplag og udsliprate som parameter. For skyudbreddelser kræves det, at eksponeringstiden genberegnes i forhold til skyens størrelse
3.	Skal kunne beregne de koncentrationer der opstår indendørs når der lukkes vinduer og døre, såvel som koncentrationer der opstår uden-dørs og i åben landskab.

5 Modeller til gasspredningsberegning

Fysiske modeller er den basis på hvilken spredningsberegningssværktøjer er bygget. Værktøjerne kan ikke forventes at fungere godt hvis der er problemer med modellen. Der er dog mange problemer selv om man har studeret gasspredning siden 1930'erne. Hovedgrunden hertil er, at luftens turbulens er meget kompleks. Man har dog opnået et niveau hvor man kan sige at modellerne er "brugbare". Der er stadigvæk nogle områder ved beregning af udslipsskilderne som er stadigvæk ikke undersøgt, tilsyneladende på grund af manglende interesse eller forglemmelser. Status for modeludviklingen beskrives i dette kapitel.

Usikkerhed i beregninger er vigtig fordi resultaterne anvendes til planlægning og har konsekvenser både for anvendelse på kommuneområdeplanlægning og på sikkerhed. Enkeltmodeller til gasspredning har en usikkerhed som er, for de bedste modeller, indenfor en faktor 30 % for simple tilfælde, men mange af modellerne der anvendes i dag har en afvigelse fra eksperiment resultater på en faktor 2. Dette kan betyde betydelig øgning i størrelsen af sikkerhedszoner, for eksempel fra 300 m til 600 m. i praktiske tilfælde. En sådan usikkerhed har stor betydning for planlægning. Der er derfor her lagt vægt på modellernes nøjagtighed.

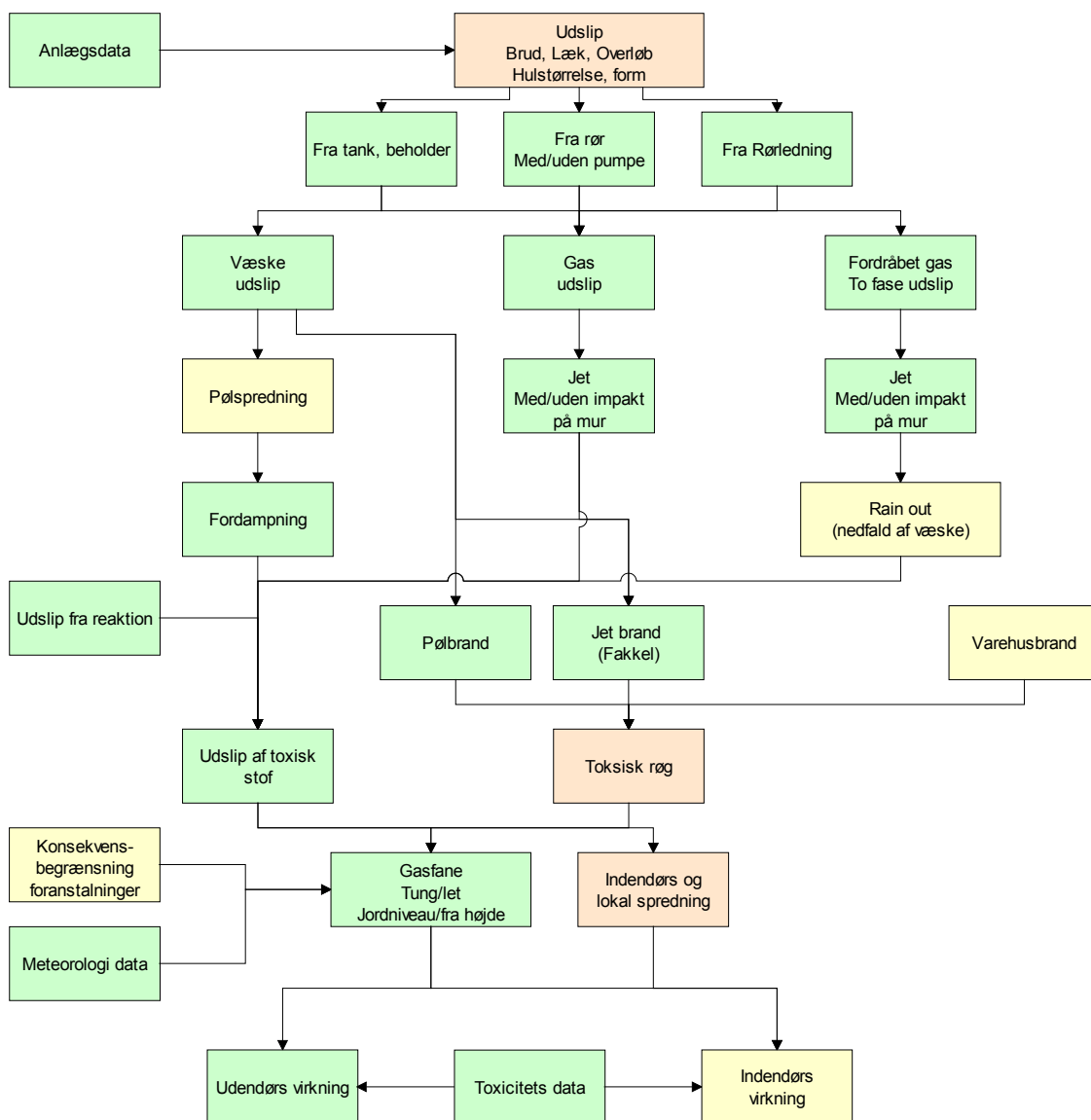
Usikkerhed i resultaterne afhænger ikke kun af spredningsberegninger. Udslipsberegninger der anvendes til at fodre spredningsberegninger med input data har også usikkerheder. Usikkerhederne lægges sammen. Det er derfor nødvendigt at sikre så god kvalitet i modellering på alle stadier i udslippet og spredningen, hvis man vil opnå et rimeligt samlet resultat.

5.1 Modeller

Beregning af gasspredning kræver at der er fysiske modeller til hver fase af udslippet og spredningen. Selve spredningen kan beskrives med ca. tolv modeller (jet og fane, for let og tung gas, fri, i bymiljø og indendørs), men der skal også være beregninger til frigivelse. Figur 5.1 viser de forskellige modeller og deres sammenhæng i fremstilling af rimelige nøjagtige og dækkende beregninger.

I figur 5.1 anvendes grøn til at vise de steder hvor der er velafprøvede og validerede modeller som passer til de fleste praktiske tilfælde. Gul viser tilfælde hvor modelsættet er kun delvis udviklet. Rød viser beregninger hvor der er kun lidt eksperimentalinformation i dag. Bemærk at en grøn farve betyder ikke at en bestemt modeltype er totalt problemfri. Toksicitetsdata er for eksempel problemfri for ca. 100 af de vigtigste stoffer, men der er mange stoffer der anvendes i mindre mængder, hvor data mangler.

Modeldetaljer beskrives i Bilag A og et oversigt over status ved udvikling af modeller gives i tabel 10.2.



Figur 5.1 Modeller som anvendes til beregning af relevante udslipsscenarier i Danmark.

Fremgangsmåden for beregninger vist i figur 5.1 er kun en del af den samlede risikoanalyse- og risikovurderingsproces. En samlede risikoanalyse omfatter også: beregninger for brande og eksplosioner; beregninger af hyppigheder for udslip og pålidelighed af sikkerhedsforanstaltninger; plotning af risikokort og frekvens/konsekvens kurver; og sammenligning af resultaterne med akceptkriterier.

5.2 Usikkerheder i beregningerne

Alle de modeller der anvendes til beregninger involverer usikkerhedsmomenter. Usikkerhederne stammer fra flere forskellige kilder:

1. Forenklinger introduceres bevidst, for at reducere beregningsarbejdet og for at gøre resultaterne håndterlige. Man beregner ofte for eksempel kun med tre hulstørrelser, tre vindhastigheder, og tre atmosfæriske stabilitetsklasser. Der anvendes i nogle tilfælde endnu færre beregninger. Usikkerheden herved er undersøgt i mange studier, f.eks. i ref. 22 til 28, og vurderes til at være typisk ca. 30 % for de bedste modeller. Usikkerhederne vil kunne reduceres ved mere præcis tilpasning af beregnings procedurer til aktuel data, men modellerne derved mister en del fleksibilitet.
2. De fleste modeller der anvendes er empiriske eller delvis empiriske, dvs. modellerne er baseret på basis af eksperimenter i stedet for teori. Resultatet er, at usikkerhed i eksperimentmålinger overføres til beregningerne. Dette er specielt et problem med gasspredningsberegninger, hvor parametre som gasfanebrede og koncentration svinger meget under eksperimenterne, og målinger skal behandles statistik. Ref. 5.6 giver en god beskrivelse af vanskelighederne. Usikkerheden i gasfanemodellering angives af UK HSE på deres web site (ref. 29) til ca. 50 % overalt. Yderligere detaljer gives i Bilag A.
3. Modellerne der anvendes er næsten altid en forenkling af den aktuelle fysisk situation, der negligerer mindre vigtige faktorer. Disse forenklinger kan være meget små, ubetydelige detaljer, for eksempel ved at man udelader effekten af ventilmodstand i en rørudslipsberegning, men disse detaljer kan blive vigtige i specielsituationer. For standard eller simple situationer vurderes usikkerheden, der introduceres ved forenkling, til at ligge normalt indenfor den 50 % som nævnes ovenfor. Eksempler af situationer hvor usikkerheden er større beskrives i Bilag A, og nævnes i tabel A.2. Ref. 30 giver beregninger over effekten af forenklinger på resultaterne, og måder hvormed usikkerheden kan reduceres. Bemærk, at usikkerheden der introduceres ved forenkling normalt søges at være på den sikre side. Denne fremgangsmåde fremmer personsikkerhed, men kan være dyr i område planlægningen. Det er ikke alle tilfælde hvor beregningerne forenkles på den sikre side.
4. I nogle tilfælde anvendes der modeller der slet ikke passer til situationen, enten fordi der ikke findes modeller der passer, fordi de modeller der eksisterer, mangler validering, eller fordi de modeller der er til rådighed ikke er implementeret som beregningsværktøj. Et eksempel er udslip af ammoniak fra en kompressor i et kompressorrum, hvor det oftest forenkles til en kompressor stående på åben mark.
5. Der vil altid være et behov for data som input til modelberegninger. Der er altid usikkerheder tilknyttet disse data, enten fordi de ikke kan måles nøjagtig-

tigt, eller fordi målearbejdet vil medføre for meget arbejde. Et eksempel er parametre for jordbundens ledningsevne, der anvendes til beregning af fordampning af kryogen gasarter. Denne parameter bliver aldrig målt, der anvendes i stedet standardværdier afhængig af jordtype. Usikkerheden ved sådanne valg holdes oftest til under 50 % i korrektudført beregninger, men det er sjældent i praksis at jordtypen inspiceres.

6. Et speciel parametreusikkerhed er vindhastigheden og stabilitetskategorier der anvendes i risikoberegninger til kommuneplanlægning. Der anvendes ofte værdier fra den nærmeste målestation, som er ofte den nærmeste lufthavn. Lokale vindhastigheder kan afvige betydeligt fra målestationens værdier, især for kystnære anlægsplaceringer.

Usikkerheden i vinddata vil kunne reduceres. For eksempel er ARGOS programmet, der beskrives i det næste kapitel, tilpasset et system HIRLAM, der beregner lokale vindfelter på basis af målinger fra mange målestationer. Der findes også vindkort som er udarbejdet til planlægning af vindturbine placeringer.

7. En af de væsentligste usikkerheder i dag er, at beregningerne laves efter helt forskellige principper. Der findes flere vejledninger for udførelse af beregningerne men ingen af disse dækker alle de situationer der opstår i en sikkerhedsanalyse, og det faktum, at der findes flere vejledninger i sig selv medfører en usikkerhedsmoment.

Et problem med disse kilder til usikkerhed er, at de opstår i flere modeller, som skal anvendes en efter den anden. En usikkerhed på 50 % i modeller til udslip, til initialspredning i jet, og til gasfanespredning vil medføre en usikkerhed på ca. 150 % (se Bilag A), dvs., at der vil være en chance for, at resultatet er 150 % større end det er beregnet. Usikkerheder skal derfor bekæmpes i alle de forskellige delmodeller i en beregning.

5.3 Manglende scenarier

Det er ønskeligt at et standardværktøj skal dække alle de scenarier, der vil kunne forekomme og give alvorlige konsekvenser. Det er dog usandsynligt at dette mål vil kunne opnås. En mere rimelig krav er måske at kunne beregne alle de uheldskonsekvenser der er opstået i praksis.

De eksisterende programmer har betydelige svagheder, set fra dette synspunkt. Eksempler er modeller til spredning af gas fra sprøjtende væsker, eller fra væsker der løber fra tanke på grund af overfyldning. Sådanne mangler vises fra uheldet i Buncefield, England i 2006, hvor benzin løb fra toppen af en tank, fordampede, og hvor den resulterende dampfane var af meget større omfang end forventet på basis af pølfordampningsmodeller (ref. 30). Der er identificeret i alt 7 uheldssituationer i procesanlæg for hvilken der ingen publicerede modeller eksisterer.

5.4 Simple modeller og modelpakker

De programmer, der anvendes i dag til risikoanalyse, er næsten udelukkende baseret på simple analytiske formler, dvs. formler der for det meste kan beregnes med en lommeregner, hvis man har tålmodighed nok. Nogle programmer implementerer kun enkelte modeller, for eksempel spredning af gas, men de programmer der anvendes er oftest integrerede pakker, der inkluderer modeller for udslip, fordampning, spredning, brand og eksplosioner, og inkluderer databaser over stofegenskaber. Eksempler beskrives i det følgende kapitel.

Simple modeller er ikke nødvendigvis dårligere end de mere avancerede og indviklede modeller der beskrives nedenfor. Den mest nøjagtige model til spredningsberegning i dag er Britter og MacQuaid's, ref. 32, der er en simpel formel tilpasning til eksperiment resultater. De mere indviklede modeller er tilpasset de sammen eksperimenter, som de simple. Fordelen med de mere avancerede modeller er, at de kan behandle situationer som f.eks. gasspredning omkring bygninger, hvor de simple modeller slet ikke passer.

5.5 Computational Fluid Dynamics

Der er kommet metoder i de senere år der anvender avancerede numeriske metoder til at løse de fundamentale ligninger for gasspredning. Metoderne har hidtil været for krævende til almindelig anvendelse i sikkerhedsvurdering og især i risikoanalyse. Metoderne har typisk krævet timer eller dage til at udføre en enkelt beregning. Der er kommet nyere metoder i den senere tid som kræver meget mindre beregningstid, i visse tilfælde ned til 10 minutter per beregning. Der er dog ofte flere dages eller ugers indsats i opbygning af modellerne. Værktøj der anvender disse metoder beskrives i det følgende kapitel. Disse modeller anvendes i stort omfang til beregning af gasspredning på olie- og gasplatforme, hvor anlægsbudgetter berettiger omfattende beregninger.

Disse modeller kan ikke være meget mere nøjagtige til beregning af simpelt tilfælde end de simplere modeller, idet alle skal justeres, således at de passer til de samme eksperimenter. CFD modellerne har den fordel, at de kan anvendes i langt flere situationer end simple modeller, og kan for eksempel behandle udslip indendørs og i tætte bebyggelser.

De fleste CFD programmer kræver en del ekspertise til at opnå et korrekt resultat. (Det samme kan siges om simple modeller, men omfanget af den nødvendige ekspertise er større for CFD metoder). Det anbefales ofte, at man tager et kursus i programanvendelse før man anvender den. Nogle kommercielle programmer sælges kun med kursusafgift indbygget i prisen.

Det vil være nødvendigt, for at få reproducerbar resultater ved anvendelse af disse programmer, at der bliver udarbejdet grundige vejledninger i, hvordan man opnår et pålideligt resultat.

5.6 Vigtigheden af modelundersøgelser

Der er ingen naturlig teori, der kan forudsige spredningen af gasfaser, og som samtidig tillader praktiske beregninger med eksisterende computer. Alle de anvendte modeller baseres mere eller mindre på teori suppleret med observationer og eksperimenter. Derfor bør ingen model bruges, med mindre dens resultater er blevet bekræftet med eksperimenter.

Der er blevet foretaget mange undersøgelser af spredningsberegningsmodeller for at bestemme nøjagtigheden af beregningsresultater. Disse har for det meste beskæftiget sig med fasespredning og jet udslip, med nogle få sammenligninger af momentanudslip og af fordampning af kryogen væsker.

Undersøgelser af selve gasspredning af tung gas er relativt godt undersøgt, med undersøgelser fra US EPA (ref. 33), og et undersøgelse af S.R. Hanna et al. (ref. 28). Nyere undersøgelser er SMEDIS, lavet af en samarbejdsgruppe for EU (resultater kun delvis publiceret (ref. 34)).

Dispersion modeller vurderes ofte i forhold til eksperimenter med parametrene "geometric mean bias" og "geometric variance". "Mean bias" måler graden med hvilken beregningerne systematisk undervurderer eller overvurderer resultater. "Geometric variance" måler den gennemsnitlige afvigelse fra måleværdierne for simple tunggasspredning. CCPS (ref. 28) offentliggjorde resultater for 10 meget anvendte programmer vurderet mod 6 eksperimentserier (32 eksperimenter i alt, med 132 målepunkter). To af programmerne kunne udelukkes på grund af gennemgående dårlige resultater. Resten havde en "mean bias" og "geometric variance" af mindre end en faktor 2. Vi har gentaget disse vurderinger med sammenligninger med nogle nyere eksperimenter. Resultaterne gives i bilaget, sektion 9.9.

Modeller for mere komplicerede situationer, som for eksempel når en gasfase rammer en væg ("impingement"), er mere sjældne, men der findes nyere eksperimentserier der kan anvendes (ref. 35). Der findes flere sæt eksperimenter om spredning i bymiljø, der blev lavet for at kunne vurdere frigivelse af giftstoffer ved terrorisme. Disse er relevante i det nuværende sammenhæng fordi de omfatter de samme fænomener som udslip ved uheld (ref. 36, 37). Der er også flere eksperimenter om let gas spredning, lavet primært for forureningsvurderinger, der kan anvendes til vurdering af uheldsudslip. Nogle eksperimenter er også blevet lavet til vurdering af tunggas udslip i industriel miljø, ved anvendelse af vindtuneller (f.eks. ref. 38).

Der er mange nyere eksperimenter og vurderinger om tofase udslip, med henblik især at bestemme omfanget af "rain out" dvs. nedfald af dråber fra ammoniak og lignende udslip af fordråbede gasarter (se f.eks. ref. 39 til 44). Der er kun lidt data

offentliggjort i nyere tid om mængden og hastigheden af tofaseudslip, men omfattende eksperimenter blev foretaget til afprøvning af de oprindelige tidlige publikationer (se f.eks. ref. 43)

Eksperimenter og valideringer for udslip og af spredning af væske på jorden, og indendørs spredning, er sjældne. Det er ofte nødvendigt at søge oprindelige data, i visse tilfælde 60 år eller mere tilbage, for at finde eksperimental data. Data om fordampning blev indsamlet af MacKay og Matsugu (ref 47) og det er disse data der anvendes oftest. Tidligere data blev samlet af Sutton (ref 45) og Pasquill (ref.47). MacKay and Matsugu's er stadigvæk den mest anvendte model men bør erstattes af en senere model af Kawamura og MacKay (ref.48). Modellerne passer enten til letflygtige væsker ((Kawamura og McKay) eller til sværfordampelige væsker(MacKay og Matsugu). Modellerne passer kun til fordampning under neutralt atmosfærisk forhold. Modellerne anvendes dog oftest ukritisk. Modellen af Brighton er tilpasset moderne forståelse af turbulens i atmosfæren, og passer meget bedre til eksperimentale resultater, men Brighton's model anvendes sjældent.

Der er nogle relevante områder hvor der næsten intet findes eller intet hvor der er ikke offentliggjorte måledata. Eksempler er væskespredning på jorden på realistisk industrielt jordforhold, udslip fra realistisk hulformer, og gasspredning i bygninger. Det er næsten meningsløst at tale om valideret modeller, når der er disse huller i det videnskabelig grundlag for beregninger. Nogle få eksperimenter er blevet fortaget for at "lappe på hullerne" og disse afslører en relativ stor usikkerhed i de "tommelfingerregler" som anvendes på nogle områder. Keller og Simmons har udført eksperimenter om pool spredning (ref. 50 til 52), med henblik på miljøbeskyttelse, men eksperimenter er igen næsten ukendt i risikoanalyse kredse. En af de største "huller" er manglen på validerede modeller for fordampning fra plaskende og sprøjtende udslip.

Rediphem som er et europæisk samarbejde om data spredning, med hjemsted på Risø, giver en omfattende samling af data om tung gas spredning (ref. 53). En oversigt og samling af referencer om brugbar eksperimentresultater gives i ref. 54.

5.7 Kriterier der kan stilles for spredningsberegninger

Det er ikke overraskende, med de ovenstående usikkerheder, og med mange alternative modeller, at to forskellige analyser af det samme situation producerer forskellige resultater. Situationen er kendt fra mange ingeniørgrene. Der er, for eksempel, betydelige usikkerheder i beregning af styrken af en bygning eller en bro. Disse usikkerheder håndteres normalt ved anvendelse af standardberegningsmetoder og sikkerhedsfaktorer. Spørgsmålet er, om vi kan stille lignende krav til spredningsberegninger og de sikkerhedsanalyser der baseres på dem.

Der er forskellige typer af krav der kan stilles til beregningerne:

- Beregningerne skal være **reproducerbare**, hvis de skal anvendes til administrativt formål som f.eks. kommuneplanlægning. Det vil sige at to personer der laver en spredningsberegning bør få det samme resultat. Dette er det simpleste krav, men er svært at opfylde i dag, fordi der er så mange situationer og så mange parametre der skal vurderes. Givet, at der er væsentlig usikkerheder i beregningerne er det ikke nødvendigt at opnå reproducerbarhed indenfor to eller tre signifikante cifre. Reproducerbarhed indenfor f.eks. 20 % ved udførsel af en fast beregningsprocedure bør dog kunne opnås.
- Beregningerne bør være rimelig nøjagtige, helst indenfor en faktor 2 ved beregning af sikkerhedsafstande, for eksempel. Større usikkerheder vil medføre store omkostninger for samfundet ved planlægning af grænsen imellem industriområder og beboelsesområder. En sådan grad af nøjagtighed kan opnås i dag for nogle beregninger, men større usikkerheder forekommer ofte (se ref. 19 der viser en succes med reproducerbarhed af analyser).

Nøjagtighed i denne henseende er størrelse som kan være vanskelig at definere. Ved risikoanalyse især antages det især, at anlægget er "et gennemsnitsanlæg". Antagelsen tillader at der anvendes hyppigheder for svigt af rør, svigt af sikkerhedsforanstaltninger og form og typer af udslip som er baseret på erfaring fra hele industrien. Resultaterne kan derfor blive "**nøjagtighed i gennemsnittet**". Det vil sige at man vil få en beregning af risikoen for et stort antal anlæg som passer til det aktuelle gennemsnit. Det vil ikke nødvendigvis passe til et bestemt anlæg.

- Anvendelse af industri gennemsnitsdata i beregninger kan medføre problemer, idet det aktuelle anlæg kan afvige betydeligt fra gennemsnittet. Hvordan tager man højde, for eksempel, for at rør og beholdere i et bestemt anlæg er betydeligt ældre end gennemsnittet? Ligeledes, hvordan opmuntrer man industrien til at hæve sikkerhedsstandarden, hvis man derefter vil vurdere resultatet som om anlægget var uforbedret og kun af gennemsnitskvalitet?

Man bør være i stand til at kompensere for sådanne afvigelser og derved opnå en grad af "**anlægsspecifik nøjagtighed**". Dette er ikke normal praksis i dag, men der er udviklinger i gang som gør sådanne beregninger mulige (ref. 30)

- Beregningerne bør være **troværdige**. Der er under alle omstændigheder problemer ved accept af planer i lokalplanlægning, hvor der ofte er helt legitime modsætningsforhold. Modelresultater skal kunne anvendes uden at skabe yderligere problemer end dem der ligger i implicit i planlægningssituationen. Dette kan kun delvis opnås ved at få pålidelige modeller. De fleste interesserede personer vurderer sikkerhedsspørgsmål på basis af egne erfaringer hvis disse haves, og ellers efter reportager fra aviser og især fjernsynet. Beregninger bør reflektere de erfaringer fra uheld og specielt vanskeligheder i håndtering af uheld. Eksempler er spredninger i ekstreme

situationer, som for eksempel meget høje eller lave vindhastigheder og problemer med nedslag af giftig røg omkring bygninger. Det er måske unødvendigt at alle disse fænomener modelleres men det bør gøres klart, at specielsituationer kan opstå, og der bør være en vurdering af disse.

5.8 A priori kontra tuned modeller

Modeller til udslipsberegning kan laves på basis af en grundlæggende teori. Beregninger af udslippet af væske fra et rundt hul kan for eksempel baseres på Bernoulli's ligning, som følger direkte fra energibevarelse og fra løsning af flow langs strømlinier. Modellen baseres ikke på eksperimentale resultater. Modellen bekræftes igennem eksperimenter men anvender ingen eksperimentalt baserede konstanter eller tilpasninger i sin opbygning. Sådanne modeller hedder "a priori" modeller.

Der er kun få modeller der anvendes i spredningsberegninger som er rene a priori modeller. Men mange er i sin overordnede form baseret på et teoretisk grundlag, med delmodeller som er baseret på eksperimenter der beskriver enkelte fænomener. De fleste tunggas spredningsmodeller, for eksempel, er baseret på masse, energi og momentumbevarelse, men anvender resultater fra detaileksperimenter til bestemmelse af værdier af diffusionskonstanter, varmetransmissionskonstanter og konstanter for effektiviteten af omdannelse af potentiel til kinetisk energi.

Modsætningen til "a priori" modeller er rene empiriske modeller, der baseres på tilpasning af formler til eksperimentale resultater. Formlerne vælges frit for at opnå det bedste tilpasning til eksperimenterne uden nødvendigvis at tage hensyn til underliggende teori. Modellerne gøres rimeligt bredanvendelig ved at laver tilpasning på basis af dimensionsfrie variabler. En sådan model er Britter og McQuaid's model for tunggas spredning.

"A priori" modeller betragtes som bedre end empiriske modeller fordi de forklarer mere og burde i princip være mere robust, idet de vil passe situationer der ligger udenfor området der er dækket af eksperimenter.

Empiriske modeller vil altid vise sig at være de bedste hvis kvaliteten af modellerne vurderes alene udefra nøjagtigheden af overensstemmelse med eksperimentale resultater. Overensstemmelsen kan gøres perfekt, hvis modellen gøres tilstrækkelig kompliceret. Men en empirisk model vil måske vise sig at være unøjagtig hvis den sammenlignes med nye eksperimentale resultater.

En mellemstadie imellem rene empiriske modeller og a priori modeller er "tuned" modeller. Disse baseres på a priori modeller, men med en eller få konstanter for hvilken der er ingen teoretiske grundlag. Tilpasningen til eksperimentale resultater laves med at vælge værdier for disse konstanter.

Muligheden for tuning gør valget af modeller mere vanskelig. Man bør ikke vælge modellen der passer eksperimenterne bedst hvis den model er baseret på rene empi-

ri fordi man ved ikke hvornår der vil opstå situationer hvor modellen passer ikke. Der er til gengæld ingen grund til at foretrække en model med et godt teoretisk grundlag hvis de beregnede resultater passer dårligt til eksperimenterne. Et kompromis er oftest nødvendigt. Et rimeligt kriterium er at man bør vælge den a "priori model" der passer eksperimentale resultater bedst såfremt den underlæggende teori er i orden og den ikke er væsentlig dårligere end den bedste empiriske model. Der er alligevel den beslutning at tage, om man bør tune modellerne. Ref. 25 beskriver vanskelighederne i at vælge den bedste model.

5.9 Fremgangsmåder til at opfylde kriterierne

Ingen af de nuværende vejledninger til spredningsberegninger af toksiske gasarter der anvendes i dag opfylder kravene fra den forrige sektion. Der er dog flere fremgangsmåder hvormed det vil være muligt at forbedre situationen:

1. Det er muligt at specificere et standardværktøj til beregning af gasspredning. Et standardværktøj, sammen med en detaljeret vejledning i anvendelsen, vil sikre at beregningerne var i hvert fald reproducerbare. Denne fremgangsmåde er blevet anvendt til forureningsspredningsberegninger med modeller som ADMS(ref. 55), den danske OML(ref. 56) og AERMOD(ref. 57), som er såkaldte "regulatory models". Fremgangsmåden er anvendt til beredskabsplanlægning i USA, med CAMEO modellen (ref. 5.58) der anvendes til beredskabsplanlægning. Fremgangsmåden er også anvendt i dag i Holland og Italien til risikoanalyseberegninger hvor PHAST programpakken (ref. 59) blev valgt. De britiske myndigheder anvender et standardværktøj, RISKAT (ref. 60), til deres egne vurderinger, men værktøjet er ikke tilgængelig for virksomheder.

Fremgangsmåden har to ulemper. Der er stadigvæk betydelige forbedringer i beregningerne hvert år og der er ingen standardværktøjer i dag der dækker samtlige relevante uheldsscenerier. Beregninger i nærfeltet, indenfor virksomhedens hegn er specielt dårligt understøttet af de oftest anvendte værktøjer.

2. Mange usikkerheder vil kunne fjernes ved at følge en bedre procedure i beregningerne. Der findes i dag to gode vejledninger, fra CCPS (ref. 1) og fra de hollandske myndigheder, i form af de Red, Yellow, Green and Purple Books (ref. 4,5 og 6). De hollandske vejledninger har især har gjort det muligt at forbedre reproducerbarheden af risikoanalyser således at forskellige analytikerhold har opnået at reducere maksimum variationer fra lavest til højest risikoværdi til 50 %(ref. 19). Efterfølgende studier har vist at der er stadigvæk mange detaljer der bør dækkes, før man kan opnå et analyseprocess der vil sikre den ønskede grad af reproducerbarhed (ref. 5.37).
3. Usikkerheder med hensyn til vindforhold vil kunne reduceres ved udarbejdelse af et vindkort for Danmark som er egnet til risikoanalyse og spredningsberegninger. (vindkort findes i dag på Risø)
4. Det er muligt at gennemføre en slags standardisering af beregningsmetoder ved at opstille eksperimentdata, der skal anvendes til vurdering af beregningsnøjagtighed. Som beskrevet ovenfor findes der en del data til validering af spredningsberegninger. Ref. 54 giver en oversigt over eksperimentdata, som er til rådighed. Der er nogle områder, hvor der er en mærkelig mangel på eksperimentalt data, selv på områder hvor eksperimenter kan udføres med simple midler, f.eks. fordampning fra sprayudslip..

5. Vejledninger om fortolkning af resultater vil kunne udarbejdes for de områder hvor standardværktøjer ikke er til rådighed i dag. En sådan fremgangsmåde er anvendt for eksempel i ref. 61, "Emergency Responders' Rules-of-Thumb for Air Toxics Releases in Urban Environments" af Michael J. Brown & Gerald E. Streit, Los Alamos National Laboratory. Bemærk, at det ikke vil være så nødvendig at anvende de mere komplicerede beregninger, hvis man havde et velafprøvet sæt af tommelfingerregler til vurdering af størrelsen af afvigelserne i specielle situationer.
6. Modellerne bør være åbne for at kunne opnå troværdighed. Dette kan delvis opnås ved at afprøve modellerne imod eksperimentale resultater, og fremlægge resultaterne, men det er ønskværdigt, at også de underliggende modeller er offentliggjort. Fremlæggelse af den grundlæggende fysik er ofte nødvendig for at kunne forstå modellernes begrænsninger. Mange af modellerne der anvendes i dag er åbne, men nogle er "proprietary" dvs. modellerne betragtes som kommercielle hemmeligheder.
7. Det vil øge troværdigheden af spredningberegninger, hvis der blev udarbejdet en konsensus om behandling af usikkerheder og nødvendigheden af anvendelse af sikkerhedsfaktorer i beregningen. Det noteres, at behovet for sikkerhedsfaktorer varierer imellem de forskellige anvendelser, for eksempel imellem beregninger til risikoanalyse og til beredskabsplanlægning, idet forskellige overvejelser indgår i vurderingerne. (Se bilag A)

5.10 Modeller for konsekvensreduktion

Konsekvensreduktion er et krav i de bekendtgørelser der anvendes til styring af risici ved industrielle anlæg. Konsekvensreduktion er også ønskelig, fordi der er flere situationer hvor store konsekvenser kan give betydelige kommuneplanlægningsproblemer. Eksempler på konsekvensreducerende foranstaltninger der overvejet eller anvendt i praksis i Danmark er:

- Anvendelse af tilbageholdesesmure eller volde, for at forhindre spredning af tunggas ved lave vindhastigheder.
- Anvendelse af sprinkler, spray og vand monitorer for at "slå gasfaner ned"
- Anvendelse af træbælter for at øge gasdispersion
- Anvendelse af vand og dampgardiner
- Anvendelse af nødskrubbere
- Anvendelse af skumtildækning

Det er ønskelig at have anerkendte modeller til dette formål, både til støtte for projektering af risikoreduktion, og for at kunne vurdere indvirkning af disse effekter på planlægning. Der findes modeller og eksperimentale data til alle disse formål. (f.eks. refs. 62 til 68)

5.11 Spredningsberegninger og risikoanalyser

Kvantitative risikoanalyser anvendes i dag til kommuneplanlægning, tillige med de kvalitative. Kvantitativ risikoanalyse foretages med beregning af mange scenarier og scenario varianter, ofte op til 90 scenarier per beholder. Det er specielt for kvantitative metoder, at der skal studeres et bredt spektrum af scenarier (i princip samtlige scenarier) og at sandsynligheder for disse scenarier skal beregnes.

Kvalitative risikoanalyser baseret oftest på anvendelse af hazard og operabilitetsmetoden (HAZOP), der undersøger alle de forstyrrelser der teoretisk forstyrrelser, der kan opstå på et procesanlæg.

Fremgangsmåderne er komplementære. Risikoacceptkriterier fra "Kvantitative og kvalitative kriterier for risikoaccept", Miljøprojekt 112 (ref. 69), har igennem ca. 15 år gjort det muligt at vurdere risikoen ved "Seveso virksomheder" på en objektiv og konsistent måde under den forudsætning, at der blev taget rimeligt hensyn til usikkerhederne i beregningerne.

Spredningsberegninger anvendes i dag i Danmark til både kvalitative og kvantitative risikoanalyser. Det vurderes at ca. halvdelen af de sikkerhedsrapporter der laves i Danmark i dag udføres med kvantitative metoder som et element af rapporten (forfatterens vurdering), og at anvendelsen af kvantitative metoder er så godt som 100 % for stort anlæg og anlæg med potentiale for stor konsekvenser. Risikoberegninger af denne type kræver data for hyppigheden af udslip og for pålidelighed af sikkerhedsforanstaltninger. Usikkerheden i risikoberegninger stammer til dels fra spredningsberegninger, og til dels fra hyppigheds data.

I dag foregår der et ihærdigt arbejde på EU planen for at udvikle standard hyppighedsdata til anvendelse i sikkerhedsrapporter (ref. 70). Det forventes at dette arbejde vil medføre en betydelig forbedring i både reproducerbarhed og nøjagtighed af risikoanalyserne indenfor det kommende år.

5.12 Opsummering

Beregninger af spredning af toksisk gas involverer flere modeller til de forskellige stadier i et udslipsscenario typisk mellem tre og fem modeller. Der er betydelige usikkerheder på op til 50 % for flere af modellerne og større for nogle få modeller til nogle scenarier.

En gennemgang af tabel A.2 viser, at der kan foretages spredningsberegninger for mange af scenarierne med et minimum af usikkerhed, ca. en faktor 2 overalt. Dette kræver omhyggelig tilrettelæggelse af beregningsvejledninger, således at usikkerhederne der opstår fra datavalg og scenarievalg minimeres. Modeller der baseres direkte på eksperimentdata kan opnå en bedre nøjagtighed end en faktor 2.

Der er større områder hvor usikkerheden i beregningerne er større og nogle områder hvor der ikke findes anerkendte metoder. Spredningsberegninger foretages fortrinsvis med simple modeller i dag og der er områder hvor disse modeller slet ikke passer. Eksempler er udslip i tæt bebyggelse og indendørs. Resultatet er, at beregninger ofte ikke vil kunne anvendes til vurdering af risikoen for medarbejderne.

Der er muligheder for forbedring af situationen, for eksempel ved validering af modeller til nærfeltsberegninger og indendørsberegninger og ved en større anvendelse af CFD metoder.

Der vil ligeledes være muligheder for reduktion af usikkerheder ved at udvikle bedre vejledninger til beregninger, der minimerer unødvendig variationer i beregningsresultater.

5.13 Krav til spredningsberegningsmodeller

Det er muligt at udlede funktionelle krav til standardberegningsmetoder på basis af de ovenstående modelvurderinger. Andre krav der stammer fra anvendelsesbehov, specielt ved beredskabsberegninger, udledes i de senere kapitler.

No.	Krav til modelsæt
1.	Skal kunne håndtere realistiske hulformer, specielt revner
2.	Skal kunne beregne udslip fra rør såvel som beholderpunkteringer
3.	Skal kunne beregne tofaseudslip fra rør
4.	Skal kunne beregne rainout fra tofase jet og fra væskesprøjt
5.	Skal kunne beregne udslip fra tankoverløb
6.	Skal kunne beregne spredning af væske på jord med forskellige forhold
7.	Skal kunne beregne fordampning fra pøle
8.	Skal kunne beregne jetspredning
9.	Skal kunne tage højde for forhindringer (jetten rammer væge)
10.	Skal kunne beregne for let og tung gas
11.	Skal kunne beregne spredning ved indendørs udslip
12.	Skal kunne tage højde for et bredt udsnit af vind og stabilitetsforhold, inklusiv meget lave vindhastigheder
13.	Skal kunne beregne spredning omkring bygninger og i bymiljø
14.	Skal kun beregne virkningen af risikoreducerende tiltag: • anvendelse af mur og volde til tilbageholdelse af gas • anvendelse af vand eller dampgardiner • anvendelse af vandmonitorer • anvendelse af skumtildækning
15.	Skal kunne beregne udslip fra tankbrud
16.	Skal kunne beregne størrelsen af væskeudkast under et tankbrud
17.	Skal kunne beregne indendørs eksponering, og eksponering i biler
18.	Skal kunne beregne spredningen af toksisk støv fra udslip og brand
19.	Skal kunne beregne deponering af toksisk støv og væske fra faner.

6 Værktøjer til beregning af gasspredning

Der findes flere typer af software, der kan anvendes til beregning af gasspredninger. Disse kan grupperes som:

- Integrerede pakker af modeller, der dækker et bredt spektrum af scenarier.
- Selvstændige tung-gasspredningsberegningsprogrammer. Disse skal ofte suppleres med kildeberegninger for at kunne anvendes.
- Let-gasspredningsberegningsprogrammer. Disse er for det meste udviklet til vurdering af forurening, men kan anvendes til beregning af spredning af lette gasser og røg fra brande. Nogle af disse programmer er udviklet til at kunne beregne spredning i bymiljøer.
- Computational fluid dynamics programmer.
- Programmer der er udviklet til beredskabsstøtte.

Disse typer af programmer har alle forskellige fordele og ulemper. Det ideelle vil være, at man kombinerer fordelene fra alle programmerne, men i praksis er det sandsynligt, at man vil være tvunget til at kombinere to eller flere programtyper for at kunne dække alle behov.

6.1 Risikoanalyse programpakker

Der er igennem årene blevet udviklet flere programsæt til risikoanalyseformål. Disse inkluderer moduler til beregning af udsliprate, til jet- og pølspredning, til fordampning, til gasspredning og endelig til konsekvensvurdering. De fleste kan beregne brand og eksplosioner såvel som gasspredning. Eksempler på sådanne programmer er:

- EFFECTS, fra TNO (ref. 71)
- PHAST, fra DNV (ref. 59)
- Safeti fra dNV (ref. 72)
- CANARY, fra Quest Consultants (ref. 73)
- ALOHA, udviklet af NOAA og distribueret gratis som internet download fra US EPA (ref. 74), har til primærformål at understøtte beredskabsplanlægning, men har næsten de samme faciliteter som dem nævnt ovenfor.
- QRA Pro fra Taylor Associates (ref. 75)

Det bemærkes, at disse programmer ikke kan beregne alle scenarier som er relevante. De er, med få undtagelser begrænset til beregninger af idealudslipsscenarier på flad mark. Ingen kommercielpakker kunne findes med en fuldtudbyggede pakke til beregninger af indendørs udslip. Kun en af pakkerne indeholder beregninger af konsekvensreducerende foranstaltninger.

QRA Pro, som er anvendt sammen med EFFECTS og PHAST til beregningerne i bilaget, er et specielt programsæt, udviklet af forfatteren til undersøgelse af modelnøjagtighed og risikoanalysenøjagtighed. Det indeholder et meget bredt sæt af modeller, deriblandt modeller til indendørsspredning og til risikoreduktion. Funktioner i de forskellige programmer vises i separat spreadsheet. SAFETI og QRA Pro er udbygget med scenariohåndtering, således at der kan foretages mand tusinde af beregninger der er nødvendig for fremstilling af risikokort for større anlæg. EFFECTS er udbygget med RISKCURVE der tillader gennemførelse af større risikoanalyser.

PHAST, SAFETI, CANARY og EFFECTS er åbne værktøjer idet alle de underliggende modeller er publicerede og dokumenterede, men er lukkede idet det ikke er muligt at modificere programmerne. QRA Pro er åbne idet alle modellerne er publicerede og dokumenterede og er åben for modifikationer fordi brugeren kan inkorporere egne modeller i programpakken. Ingen af værktøjerne til større risikoanalyser er "public domain".

6.2 Programmer specielt til gasspredningsberegning

Der findes mange programmer, der er udviklet alene til tunggasspredningsberegning. Nogle af disse er "public domain" modeller, hvor kildekoden, teorien og i mange tilfælde undervisningsmateriale er tilgængelig og ofte er gratis. Andre er kommercielle programmer. Eksempler er:

- SLAB, fra Lawrence Livermore Laboratoriet (public domain) (ref. 76)
- DEGADIS, fra NOAA og US EPA (public domain) (ref. 77)
- HGSYSTEM, fra Shell Research og US DOE (public domain) (ref. 78)
- GASSTAR, fra CERC (Kommercielt) (ref. 79)
- GREAT, fra Risø National Laboratoriet (ref. 80)

Public domain modellerne er på ingen måde "dårlig", men kommercielle programmer har ofte en løbende udvikling, således at de kan tage højde for de nyeste eksperimenter.

Specielle programmer til tung-gasspredningsberegning vil ikke kunne stå alene. Der vil altid være et behov for at støtte dem med udsliprateberegningsprogrammer (kil-

destyrke programmer). Programmerne er sjældent udstyret med databaser og beregningspakker til bestemmelse af stofdata eller toksicitet.

6.3 Programmer til let-gasspredningsberegninger

Beregninger for spredning af lette gasser (lettere end luft eller neutrale gasser med densitet omtrent lig lufts densitet) er i så godt som alle tilfælde baseret på gaussiske spredningsmodeller med spredningskonstanter fastsat empirisk. De oprindelige modeller blev opstillet af Pasquill men ændrede empiriske konstanter blev senere opstillet af Smith og af Turner og Pasquill og med modeller for fanestigning af Briggs (ref. 81 to 85). Reviderede konstanter til anvendelse i bymiljø er givet af McElroy og Pooler (ref.86)

Tidlige modeller beregner spredningskonstanter på basis af faktorer som er lette at observere, så som vindhastighed og stabilitetsklasser. Nyere modeller anvender en mere avanceret teori, der ikke kræver faste stabilitetskategorier, og som tager hensyn til ændring i vindhastigheden med højde. De er også udviklet til at tage højde for variationer i terrænhøjde. Eksempler er AERMOD modellen fra US EPA, ADMS modellen fra Cambridge Environmental Research Consultants og OML modellen fra Dansk Miljø Undersøgelsen (refs 55 til 57). Bemærk, at brugere af moderne modeller ofte vil anvende input data baseret på vindhastighed og stabilitetsklasser, fordi der ikke er anden let tilgængelig information. Således vil usikkerheder, der stammer fra valg af disse kategorier, ikke kunne undgås. Det er muligt at forbedre nøjagtigheden ved anvendelse af vindatlas data. Risø's vindatlas er offentlig tilgængelig på CD ROM, men det kræver måske en mere specifikke bearbejdning for at kunne anvendes til spredningsberegninger.

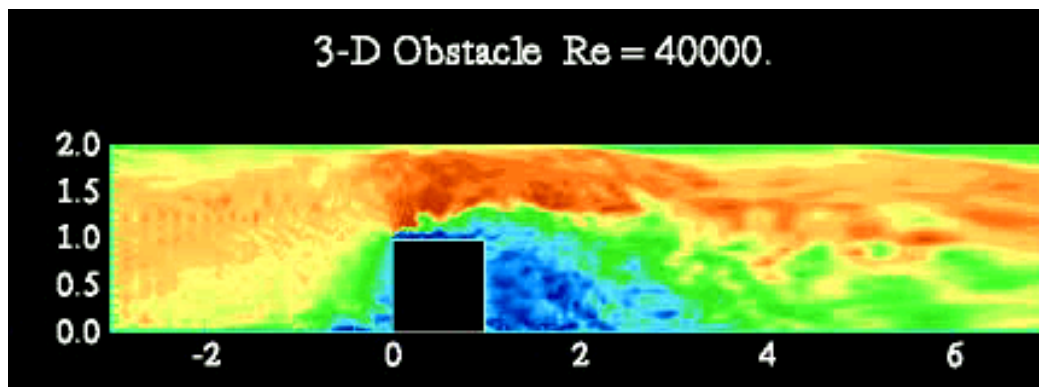
Nyere udviklinger medfører, at modellerne også kan anvendes til bymiljøer, og industrielle zoner for eksempel (ref.87). Modeller AERMOD, OML og ADMS har været meget lidt anvendt til beregning af akutvirkninger fra kemisk uheld. Der er gode grunde til at overveje deres anvendelse, idet de nyere modeller passer bedre til eksperimentdata end simple gaussiske modeller og er mere fleksibel til beregning af spredning i områder med bygninger.

6.4 Computational fluid dynamics programmer

Navier Stokes ligningen er den fundamental ligning, der beskriver gasstrømning. Ligningen er svær at løse, og forenklinger af ligningen anvendes til beregning af gas-spredning ved uheldssituationer. CFD modeller løser ligninger for gasspredning ved at opdele det relevante område i et net af celler, og approximerer Navier Stokes ligningerne i hver celle i nettet.

Et eksempel på en sådan beregning vises i figur 6.1 for en gasspredning omkring en bygning. Billedet viser hvorledes gas samler sig foran og bag bygningen, en effekt

der kan være vigtig for medarbejdere og for beredskab (beregning og billede af J C. Bennetsen).



Figur 6.1 Eksempel på CFD simulering for gas flow forbi en bygning.

Hall (ref. 88 og 89) har undersøgt anvendelsen af gasspredningsberegninger til risikovurdering. Resultaterne blev sammenlignet med eksperimentresulater fra markforsøg og fra vindtuneller. God kvalitativ overensstemmelse blev opnået. Sammenligningerne viste en acceptabel gennemsnitsberegning af koncentrationer, men undertrykkelse af kortvarige variationer (naturlig nok siden undertrykkelse af kortvarige variationer anvendes til at opnå kortere beregningstider). Beregning af gennemsnitskoncentrationer over 30 sekunder afveg fra målinger med en forskel på 10 % til 20 %. Beregningstiderne var mellem en halv og tre timer på datidens arbejdsstationer for et simpelt problem og 20 til 60 timer for et praktisk eksempel af udslip på en kemifabrik.

Udviklingen i ligningsløsningsmetoder og i computer hastigheder har betydet, at resultaterne kan opnås meget hurtigere i dag. Praktiske modeller med simpel geometri (rektangulære bygninger etc.) løses i løbet af få timer med generel software. Metoderne er for det meste stadigvæk for langsomme til anvendelse i risikoanalyse af store installationer som f.eks. raffinaderier, men anvendes i dag til undersøgelser af individuelle udslipsscenarier. Nogle enkelte programmer kan beregne selv komplicerede spredningsforhold i tider ned til ca. 10 minutter per scenario ved at lave et initial sæt af vindfeltsberegninger.

CFD programmer anvendes i dag som en supplerende til risikoanalysepakker. De er specielt nyttige til vurdering af spredning i bygninger, omkring bygninger og til vurdering af konsekvensreducerende tiltag.

CFD programmer er blevet anvendt rutinemæssig i Belgien og Frankrig, og af større olie kemivirksomheder til projektering. Nogle få fuldskalarisikoanalyser er blevet lavet, men de har krævet relativ stor regnekraft. Hanna, Hansen og Dhamavaram (ref. 90) beskriver 40 til 50 beregninger på simple situationer lavet med FLACS programmet, ved anvendelse af ti 1 GHz PC'er i løbet af nogle få dage. Forfatterens kolleger har opnået lignende resultater ved anvendelse af CFX og EXIM program-

merne (ref. 91 til 96). Zhe Fahn et al har til sammenligning lavet store simuleringer af et udslip i New Yorks gader med en samling på 32 modern grafik kort af den type der anvendes til computerspil, med en regnetid på nogle sekunder (ref. 98).

Programmet Panache PANEPR (ref 97) er et kommercielt CFD program som er lavet specielt til gasspredningsberegning. Relative hurtige beregninger er opnået (ca. 10 minutter for en praktisk industriel situation) til risikoanalyse efter opstilling af modellen og en initiale beregning af vindfeltet. (Man skal normalt anvende nogle dage til at opstille modellen lige som for andre CFD modeller). Programmet anvendes af mange olie og kemivirksomheder udenfor Danmark.

Programmet FDS (Fire Dynamics Simulator) er udviklet primært til beregning af brand og røgspredning, men er også blevet anvendt til gasspredning. Det har en speciel status fordi det distribueres gratis af NIST (ref. 99), fordi det anvendes bredt i Danmark til brandbeskyttelsesdimensionering. Det er godt kendt blandt beredskabs- og brandchefer, og fordi det derfor kendes godt af de fleste beredskabschefer. Programmet har begrænsninger sammenlignet med de kommercielle programmer, men vil kunne anvendes til mange tilfælde med en tilstrækkelig omhyggelig vejledning.

Det er fælles for CFD programmerne at resultaterne kan se meget troværdige ud, men kan samtidig være totalt misvisende. Problemet opstår, fordi løsninger er afhængige af hvor finmasket beregninger laves, dvs. hvor mange punkter eller tredimensionelle celler man stiller op i beregningen. Det er ikke en gang sikkert, at en meget finmasket beregning vil give det mest nøjagtig resultat. Af denne grund bør et CFD program aldrig anvendes som standardværktøj, uden at der findes en grundig vejledning i anvendelse af værktøjet til gasspredningsberegning, og at der findes en procedure for efterkontrol af resultaterne. UK HSE har givet vejledninger for myndighedens efterkontrol af beregningerne. (ref. 100)

6.5 Avancerede modeller til beredskabsplanlægning, ARGOS

Der er nogle programmer, der er udviklet til beredskabsstøtte under aktuelle uheld. Mange af disse blev udviklet til beredskab ved nukleare uheld eller angreb. Modellerne kan være meget sofistikerede. Kun en af disse nævnes her, fordi disse programmer normalt er konstrueret med mange flere faciliteter end dem som er nødvendig ved kommuneplanlægning. Det danske program af denne type, ARGOS, nævnes fordi det er en seriøse kandidat for anvendelse som en standardmodel og det er det nuværende basis for beredskabsstøtte i Danmark samt mange andre lande.

ARGOS systemet (ref. 101) er et eksempel på et sådan programsæt. Det er udviklet til at beregne den dynamiske udvikling af en gasspredning og kan tage højde for mange detaljer som f.eks. bygninger, terræn og skift i meteorologiske betingelser. Systemet kan tage meteorologisk data fra mange målestationer, og kalkulerer vindforhold løbende.

ARGOS anvender RIMPUFF programmet (ref. 102) til selve spredningsberegningen. Programmet behandler en spredning som et stort antal "puffs", der følger efter hinanden således, at udbredelsen kan beregnes med skiftende udslipsforhold, skiftende vindretning og andre vejrforhold. Spredning omkring bygninger kan beregnes ved at "dele" puffs således, at en del af gassen bliver hængende ved bygningen og andre dele bevæger sig forbi. Empiriske modeller anvendes til puff-deling og spredning.

Fremgangsmåden ved puff baseret modellering er ekstrem fleksibel. Selve ARGOS/RIMPUFF (ref. 103), i den nuværende form, er ikke egnet til spredning af tung gas eller til spredningsberegning i nærfeltet, idet modellen der anvendes er "mesoscale" dvs. egnet fra 1 km til 1000 km. Systemet er blevet udstyret med Urban Dispersion Model (UDM) udviklet af Defence Science and Technology Laboratory i UK (ref. 104). UDM er en puff model, som er udviklet med henblik på beregning af gas-spredning i et bymiljø og er velegnet til en mindre skala. Modellen er udviklet på basis af et stort antal vindtunnel eksperimenter. Valideringsstudier viser en god sammenhæng imellem forudsigelser og eksperimentmålinger med resultater for det meste indenfor en faktor 2 af målte værdier (ref.105).

ARGOS er blevet udviklet til at kunne beregne kemiske udslip. UDM beregner ikke tung gas spredning og der er derfor anvendt Risø's nyeste tung gas spredningsmodel til dette formål.

Der har været problemer ved anvendelsen af UDM modellen i ARGOS, fordi det er en lukket model, der er oven i købet belagt restriktioner vedrørende anvendelsen, fordi det betragtes som vigtig i militær sammenhæng. En erstatning for UDM komponenten i ARGOS er i øjeblikket under udvikling. Der er ved denne udvikling en mulighed for, at den ny model, som anvender RIMPUFF konceptet (RIMPUFF URBAN) ikke kun vil være en åben model, men også mere nøjagtig.

Under en demonstration af ARGOS blev forfatteren hurtigt overbevist om fordelene ved sådanne programmer. Deres primære formål er til støtte for beredskabsstyrker under et aktuelt uheld. Men de vil have betydelige fordele under beredskabsplanlægning og træning, fordi modellerne er meget realistiske og ved at dynamisk 3D visning medfører betydelig bedre forståelse for uheldene. At se udviklingen med tiden frembringer en særlig dyb forståelse for spredningsprocessen.

6.6 Public domain kontra lukkede værktøjer

Det er ønskeligt at programmer der skal anvendes som standardværktøjer er "åbne". Kravet er ikke kun et spørgsmål om videnskabelig og administrativ anstændighed. Åbenhed medfører at det bliver muligt at vurdere modellens antagelse, begrænsninger og anvendelighed til specielle forhold. Det er sjældent at modellens oprindelige forfattere kan gennemskue alle de forskellige former for anvendelse som deres programmer bliver udsat for.

Public domain værktøjer er værktøjer der stilles til rådighed til generel anvendelse, oftest gratis eller til meget lave priser. De er ofte blevet lavet til en myndighed (næsten udelukkende i USA) og understøttes af massiv dokumentation. Nogle af programmerne har "Open code", dvs. at programteksten også er frit tilgængelig. Anvendelse af open code programmer gør det muligt at bruge velafprøvede og validerede metoder, men samtidig at opretholder fleksibilitet. Det er normalt muligt at videreudvikle en public domain model med nye faciliteter. Kommercielle udviklinger er derimod normalt fastfrosset i længere perioder og kan sjældent udvikles til specielle situationer (i hvert fald ikke indenfor rimelige budgetter og tidsskalaer). Der er et mellemtrin, hvor åbne konsortier udvikler programmer i fællesskab. Programmerne SLAB OG Degadis er eksempler hvor koden er frit tilgængelig. Programmet er blevet udvidet af tredje part, for eksempel til gasspredninger forbi vægge.

Der er god grund til at foretrække en eller anden form for åbent system til spredningsberegning. Det medfører, at både myndigheder og enkelte virksomheder får adgang til de samme beregningsmetoder, og der kan opbygges en bred erfaring i anvendelse af beregningerne. CAMEO systemet, beskrevet ovenfor, har haft god gavn af at være åbent således, at det i dag er den mest anvendte software til beregning af spredning af toksiske gas, trods en noget forældet interface og stærk begrænsninger i anvendelsesområdet.

Nogle af "Open code" programmerne har haft nogle af de bedste resultater i sammenligninger med eksperimenter. Der er offentliggjort artikler hvor programmerne er blevet justeret til at tage højde for de seneste eksperimentresultater (ref 106)

6.7 Opsummering

Det mest oplagte valg til anvendelse af spredningsberegning i dag er en af de tilgængelige risikoanalyseberegning værktøjspakke f.eks. EFFECTS eller PHAST. Disse er efterhånden stabile og lige så nøjagtige, som det er muligt at lave den slags software, når man tager i betragtning, at selve eksperimenterne indeholder betydelige usikkerheder. Programværktøjerne er rimelig nøjagtige til beregning af simple tilfælde med spredninger over åbne marker og brede bymiljøer. Der er dog i dag intet værktøj, hverken åben domain eller proprietary, der opfylder samtlige beregningsbehov.

Det er dog ønskeligt, at få software som er "åbent" således, at det er muligt at inkludere nye modeltyper, fordi det nuværende software begrænser sig til et undersæt af de relevante scenarier (dækker mellem halvdelen og to tredjedele af scenarierne beskrevet i kapitel 2).

Det er usandsynligt, at eksisterende konsekvensberegningssystemer vil opfylde hele behovet i fremtiden. Der er et stigende ønske om beregning af udslip i og omkring bygninger. Hertil vil det være nødvendigt at anvende programmer som UDM eller CFD modeller.

6.8 Krav til spredningsberegningsværktøjer

Det er muligt at udlede funktionelle krav til standardberegningsmetoder på basis af de ovenstående modelvurderinger. Andre krav der stammer fra anvendelsesbehov, specielt ved beredskabsberegninger, udledes senere i kapitel 7.

No.	Krav til værktøjet
1.	Skal være rimelig nemt at anvende (skal ikke kræve flere års uddannelse i spredningsberegning)
2.	Skal være valideret imod eksperiment data
3.	Skal kunne håndtere spredning i bymiljø såvel som åbne terræn
4.	Skal om muligt kunne håndtere indendørs udslip
5.	Skal kunne fremstille resultater i en forståelig og anvendbar form, f.eks. kort
6.	Skal helst kunne håndtere alle relevante scenarier. I mangel deraf, bør værktøjet være så åben, at andre programmer kan integreres uden at man er nødt til at skifte til et helt nyt system, f.eks. til plotning, kortlægning osv.
7.	Skal helst kunne anvende vindfeltsdata, ikke kun en vindrose fra et enkelt sted.
8.	Skal helst skulle kunne håndtere mange tusinder af scenarier.

7 Anvendelse af spredningsberegninger

7.1 Anvendelse af spredningsberegninger til kommuneplanlægning

Spredningsberegninger anvendes i meget stort omfang til risikoanalyse ved kommuneplanlægning i dag. Der var megen skepsis overfor anvendelsen i begyndelsen af 1990'erne, men det er i dag et fast krav ved projektering og godkendelse af olieproduktionsanlæg og til godkendelse af større kemianlæg i de fleste europæiske lande.

Som beskrevet tidligere har der været god grund til skepsis overfor anvendelse af risikoanalyse. Såkaldte "bench mark" studier i 1990'erne viste at der var en meget stor spredning i resultaterne fra analyser på den samme installation foretaget af forskellige ekspertgrupper. I begyndelsen var spredningen flere størrelsesordener (ref. 21, 1992), men usikkerheden blev reduceret således at en lignende undersøgelse i 2002 viste en spredning i resultater nærmere på en faktor 2 (ref. 19).

Usikkerhedernes størrelser nødvendiggør en diskussion af, hvad kravene er til en risikoanalyse. Man har i forvejen en usikker proces til godkendelse af bygningsplaner omkring anlæg til kemisk produktion. Før introduktionen af risikoanalysen er de fleste anlæg tidligere blevet godkendt på basis af faste sikkerhedsafstande, eller helt uden kriterier. Uheld ved Seveso, Flixborough, og Toulouse (refs. 8.4) har vist svagheder i planlægning uden en eller andet form for sikkerhedsanalyse. Men en dårlig risikoanalyseproces og med stor usikkerheder vil ikke nødvendigvis medføre forbedringer.

De kriterier beskrevet i kapitel 5 om modeller passer i lige så høj grad om risikoanalyseprocessen, med stigende krav til kvalitet:

1. Det mildeste krav til en risikoanalyse er, at det afspejler den aktuelle risiko. Analyser af to anlæg skulle gerne give den samme rangordningen af risiko som eksisterer i virkeligheden. Et anlæg som er i praksis farligere end en anden burde give en højere beregnet risiko.
2. En stramning af krav 1 er at analyseresultater skulle afspejle de aktuelle relative risici. Et anlæg som har en ti gange højere risiko end en anden, skulle også have en ti gange højere risikoanalyseresultat.
3. Et vigtigt krav til en metodik, som skal anvendes til godkendelse af anlæg, eller til kommuneplanlægning omkring et anlæg, er at analyserne er reproducerbare. Reproducerbarhed kan for eksempel opnås ved at kræve at beregningerne foretages med en fast procedure.
4. Det ideelle krav er, at risikoanalyserne giver resultaterne som er meget tæt på den aktuelle risiko for det aktuelle anlæg. Dette er vanskelig at opnå eller bevise, fordi det kræver at man ved hvad risikoen er fra det aktuelle anlæg, og det kræver at man har erfaring fra mange uheld fra det aktuelle anlæg. Kravet til beviset

er umuligt at opfylde for et enkelt anlæg, fordi det kræver for megen uheldsstatistik. Det bedste man kan opnå er, at analysen kan beregne risikoen med rimelig nøjagtig forudsigelse af gennemsnitsrisikoen for flere lignende anlæg. Man kan kalde dette et krav til gennemsnitsnøjagtighed.

5. Det vil være ønskværdigt at kunne definere et gennemsnitsanlæg, når man anerkender at det kun er muligt at bevise gennemsnitsnøjagtigheden for anlæg. Man bør kunne specificere en procedure, der identificere de afvigelser fra gennemsnittet der vil øge risikoen.

Det nuværende situation er, at analyserne er på cirka trin 2 i dette sæt af krav, med mindre man anvender en meget fast procedure. Men det ud til at være muligt at opnå det fjerde trin, hvis man accepterer en faste og valideret procedure.

De Hollandske myndigheder har specificeret en procedure til risikoanalyse der opfylder krav 3, i den "Purple Book" (ref. 5). Vejledningen i Purple Book er det hidtil bedste bud på en reproducerbar analysemetodik. Der er foretaget et benchmark studie for at vurdere reproducerbarheden af risikoanalyser (ref. 19), hvor fem erfarne risikoanalysehold beregnede risikoen ved et typisk anlæg. Sikkerhedsafstande (afstande til for eksempel 10^{-6} per år) varierede med kun ca. 50 %, selv om man anvendte forskellige software og forskellige beregningsmodeller. Der er en aktivitet i gang i Holland for at udvælge et bestemt software program. Man skulle forvente at resultaterne ville medføre en yderligere forbedring i reproducerbarhed. Der er i ref 30 foretaget et studie over usikkerhedsmomenter som stadigvæk eksisterer i procedurerne, hvor det gøres klart at selve anvendelsen af Purple Book kræves der yderligere vejledning i hvilken antagelser, man bør anvende.

Risiko niveau	Analytikerhold					Max/Min
	A	B	C	D	E	
1.00E-05		350		500	415	1.185714
1.00E-06	810	800	710	1100	1053	1.549296
1.00E-07	1625	1500	1250	2400	2146	1.92
1.00E-08	4000	3500	2500	4250	3559	1.7

Tabel 7.1 Afstand til et givent risikoniveau for en realistisk "bench mark" analyse

Der er i ref. 30 gjort et ihærdigt forsøg på at udvikle risikoanalysemetoder som opfylder krav 4 og 5, om nøjagtigheden. Usikkerhedskilder i risikoanalyserne er blevet undersøgt i detaljer og resultaterne er blevet sammenlignet med aktuelle uheldsstatistikker for forskellige anlægstyper. Resultaterne for sammenligningen af uheldshyppigheder vises i tabel 7.2.

Anlægstype	Antallet af anlæg * antallet af driftsår	Antallet af eksplosioner	Frekvens af eksplosioner per anlægs år	Prædikterede værdier	Forhold prædiktering/ observation
Alkylering	7,800	4	$5.1 \cdot 10^{-4}$	$4.4 \cdot 10^{-4}$	0.86
Katalytisk Cracking	9,240	6	$6.5 \cdot 10^{-4}$	$7.7 \cdot 10^{-4}$	1.18
Katalytisk re-formering	15,180	4	$2.6 \cdot 10^{-4}$	$4.0 \cdot 10^{-4}$	1.54
Crude enhed	14,340	7	$4.9 \cdot 10^{-4}$	$6.4 \cdot 10^{-4}$	1.31
Hydrocracking	3,540	2	$5.6 \cdot 10^{-4}$	$6.7 \cdot 10^{-4}$	1.20
Hydrotreating	25,000	5	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$5.0 \cdot 10^{-4}$	2.50
All refinery plants	112,740	48	$4.3 \cdot 10^{-4}$		

Tabel 8.2 Forudsigelse af frekvenser i risikoanalyse
Tilknytning til brand og eksplosionsanalyser

De fleste risikoanalyser til kommuneplanlægning involverer både gasspredningsberegninger og brand og eksplosionsberegninger. Koblinger imellem disse opstår fordi:

- Domino påvirkninger er ofte årsagen til udslip af toksisk gas
- Gasspredningsberegninger anvendes også til vurdering af eksplosionsrisikoen ved udslip af brandbare væsker
- Toksisk røg er et af de væsentligste scenarier der involverer toksiske gasser
- Alle beregningsresultaterne skal til sidst anvendes til en samlet risikovurdering, ofte i form af kort.

De værktøjer der anvendes i dag til risikoanalyser, kan alle håndtere mange forskellige typer af brand og eksplosioner. Nye værktøjer skulle hest inkludere lignende faciliteter. Et praktisk alternativ vil være at lave et åbent system, hvor forskellige værktøjer kan indgå i en samlet beregningspakke.

7.2 Samfundsomkostningen ved beregningsusikkerheder

Risikoanalyser anvendes i dag til vurdering af anlæg der falder indenfor Seveso direktivets bestemmelser. Analyserne anvendes også i stigende grad som en støtte til anden kommuneplanlægning, for eksempel som et led i områdeplanlægninger og VVM analyser. Risikozoner påvirker de måder hvorpå man anvender arealer. Usikkerheder kompenseres (eller skulle man måske sige **bør** kompenseres) ved at anvende sikkerhedsfaktorer. Usikkerheden i beregningerne får derved en klar samfundsomkostning. En stor usikkerhed medfører en stor sikkerhedsmargin og derfor en større risikozone. En større sikkerhedszone medfører begrænsninger i anvendelsen

af arealer, f.eks. begrænsning til anvendelse som industriel zone i stedet for beboelse. Omkostningen kan være stor hvis kravene håndhæves strengt. Der har f.eks. været en sag i Danmark hvor udviklingen af et indkøbscenter i en by afhang af størrelsen af risikozonen. Flere andre sager er i gang. Der vil være stor værdi i at opnå den mindste grad af usikkerhed.

Den nemmeste og billigste metoder til at løse "dyre" planlægningssager har indtil nu været at anvende "tekniske løsninger", f.eks. konsekvensbegrænsende foranstaltninger som højkapacitetssprinklersystemer eller automatiske skumsystemer, og indkapsling af lager af toksiske materialer (som f.eks. ved Dansk Soyakage's klørager i 1980'erne). Til sidst er man dog nødt til at indrømme, at der er en restrisiko, selv med den bedste tekniske løsning. Usikkerheder bør derefter reduceres så meget som muligt. Værdien af en reduktion i usikkerheden kan være et tocifrede millionbeløb på et enkelt sted, hvis det gøres op i penge og kan betyde hæmninger på enten industriudvikling eller beboelses og kommunaludvikling.

Konklusionen er, at man bør anvende den bedst tilgængelige beregningsmetodik, i hvert fald i kritiske planlægningssager. Spørgsmålet opstår derefter om hvad der er "bedst". Definitionen som er blevet anvendt her er:

a) at modellerne bør anvendes der passer bedst til de tilgængelige eksperimentdata

og

b) at modelusikkerheden, f.eks. ved valg af scenarier, bør undersøges og minimeres,

og

c) metodeusikkerhed bør holdes til et niveau, som er mindre end eksperimentusikkerheden

7.3 Krav til standardværktøjer til risikoanalyse

Fra det ovenstående kan der udledes flere krav til standardværktøjer:

No.	Krav til værktøjet
1.	Skal kunne beregne mange scenarier (flere tusinde for større anlæg), og lagre dem i en tilgængelig form (database eller spreadsheet)
2.	Skal kunne tillade senere bearbejdning i form af risikokort.
3.	Skal kunne tillade senere bearbejdning til fremstilling af samfundsrisikokurver.
4.	Skal kunne tillade vurdering af risikoreducerende tiltag
5.	Skal kunne modellere rimelig nøjagtig af gasspredning i nærfeltet, op til 100 m. såvel som udenfor hegnet.
6.	Skal helst inkludere beregninger for brand og for eksplosioner
7.	Som alternativ til 6, bør gasspredningsberegningstværktøjer have interface faciliteter således, at resultaterne kan anvendes i mere omfattende risikoanalyser.
8.	Beregninger bør have så lille en usikkerhed som er teknisk mulig.
9.	Værktøjerne bør være fleksible, således at de kan tages hensyn til resultaterne fra nye eksperimenter, når disse bliver tilgængelige. Dette vil kunne gøres ved at anvende principperne for funktionelle standarder, som dem der i dag anvendes til brandsikring.

7.4 Anvendelse af spredningsberegninger til medarbejderbeskyttelse

Gasspredningsberegninger anvendes i dag til:

- Vurdering af sikkerhedsafstande, således at der kan sikres at en medarbejder bringes i sikkerhed ved samlingspunkter på anlægget.
- Vurdering af koncentrationer ved udslip i bygninger.
- Vurdering af reaktionstid og effektivitet af gasdetekteringsnetværker.
- Projektering af automatiske sikkerhedsnedlukningssystemer.
- Medarbejder risikoanalyse.

Metoder til disse beregninger er ikke blevet dyrket i tilnærmelsesvis det samme omfang som til kommuneplanlægning. Undtagelsen er beregningsmetoder til brandbare gasarter på olieudvindingsplatforme, hvor der er lavet mange modeller og valideringseksperimenter.

Behov der opstår ved praktisk anvendelse, og som er vanskelige at svare korrekt med de værktøj der anvendes normalt til kommuneplanlægning er især:

- Hvor skal samlingsstedet være for samling af personale under et gasudslip.
- I hvor lang tid vil personalet være sikre i kontrolrummet
- Er der behov for to samlingssteder
- Er flugtveje i bygningerne tilstrækkelige til at sikre effektiv redning ved
- Er gasdetektorer placeret således at detektering vil være effektiv.

Der er lavet flere oversigtsrapporter til beregning af gasspredning i og omkring bygninger i en serie af rapporter fra UK HSE (ref. 89). Nogle modeller findes, men få validerinseksperimenter. De nuværende modeller til gasspredningsberegninger indenfor virksomheder har mangler bl. a.:

- Simple modeller til beregning af spredning fra gasjet der rammer vægge, mure eller andre beholdere eller rør ("Impinging jets"). Disse effekter får en stigende vigtighed når afstandene er kort.
- Modeller til beregning af fordampning fra indendørs spild af væsker.
- Simple modeller til beregning af spredning af gasser indendørs.
- Modeller for medarbejdernes reaktion på gasalarmer og selvevakuerings, således at påvirknings perioden kan beregnes.
- Modeller for medarbejdernes kollaps eller påvirkning af synet, således at man kan vurdere sandsynligheden for en effektiv evakuering.

Beregning af gasspredning indendørs kan i dag laves med høj kvalitets fluiddynamik (CFD) beregninger. Disse beregninger anvendes i nogle projekter, for eksempel til beregning af nødventilation og til vurdering af muligheden for opbygning af eksplosive koncentrationer af brandbar gas. Metoderne er dog i dag for tidskrævende til at kunne anvendes i de fleste projekterings- og planlægningsopgaver. Effektive metoder af denne slags er blevet udviklet til beregning af krav til brandbeskyttelse (ref. 8.5). Men selv her er beregningerne for krævende til at kunne anvendes til risikoanalyse, hvor der kræves beregning af mange uheldsscenarier. Typiske beregningstider for et scenario er flere timer, eller i komplicerede tilfælde flere døgn. Men beregningerne vil kunne foretages for nogle vigtige scenarier uden at belaste en risikoanalyse- eller et beredskabsplanlægningsprojekt i en alvorlig grad.

En udvikling på dette område er ønskelig.

7.5 Anvendelse af spredningsberegninger som hjælpeværktøj til beredskabsplanlægning

Spredningsberegninger anvendes i dag som støtte til beredskabsplanlægning og beredskabsindsats.

Det er nemt at forstille sig, at en "ideel" information til beredskabsplanlægning vil være en rimelig præcis beskrivelse af udslipsforløbet og gasfaneudbreddelsen for alle mulige udslipsscenarier. Om det er faktisk det bedste informationgrundlag er tvivlsomt, pga. mængden af informationen i en sådan beskrivelse. Et komplet sæt af scenarier for udslip af ammoniak fra en enkelt ammoniaklagertank vil for eksempel omfatte:

- Mellem 2 og 10 udslipssteder
- Typisk 4 udslipstørrelser, eller kun to størrelser hvis det er det maksimum som kan identificeres ved indsatsen.
- Typisk 3 vindhastigheder
- Typisk 3 stabilitetsbetingelser
- Typisk 8 eller 12 vindretninger
- Varianter afhængig af funktion eller svigt af sikkerhedssystemer
- Varianter der viser effekten af forskellige beredskabsindsats.
- Typisk 3 forskellige koncentrationsgrænser

Antallet af kort eller illustrationer er derved over 10,000, og informationsmængden gør kortene ubrugelige i praksis.

Den normale praksis i dag er derfor at anvende kort valgt for nogle få typiske eller ekstreme scenarier, og kun to vind og stabilitetsbetingelser (f.eks. 2 m/s med stabile betingelser og 5 m/s med neutrale betingelser). I interviews med brandchefer er det konstateret, at planlægning ikke kræver så mange kort, idet planlægningen alligevel skal tage højde for, at vindhastigheden kun vil være approksimativ kendt ved et aktuelt udslip. Det er vigtigere, at ved hvad rimeligvis **kan** ske end at vide hvad **vil** ske. Derimod er der udtrykt et ønske fra beredskabschefer om beregning af flere scenarier end er almindelig i dag (beredskabskort der beregnes i dag er ofte kun en "worst case" og en "rimelig" scenario). Ved indsatsplanlægning er det nødvendigt at kunne vurdere faren ved og virkningen af hver indsats.

Der er også forskellige præsentationsteknikker der kan reducere antallet af forskellige kort, for eksempel ved at vise flere koncentrationer på samme kort. Behovet er

der ved reduceret til ca. 60 kort pr. beholder, hvis alle ønskerne fra beredskabsplanlæggere skal kunne dækkes.

Der er metoder, som kan gøre gasspredningskortene mere anvendelige. En er at anvende påhæftede "spredningsfaner" af gennemsigtig plast, som kan drejes eller bevæges for at se hvilken område der bliver påvirket. Et alternativ, som er lidt mindre informationsgivende, er at tegne afstandskort med påvirkningscirkler.

Man skal overveje hvad behovet er, hvis man vil komme videre i udvikling af beregninger til støtte til beredskabsplanlægningen.

Kort anvendes i beredskabsplanlægning til valg af indsattstyper, til dimensionering af beredskabsplaner, til at vurdere adgangsveje, og især til at vurdere evakuerings- og eksklusionszoner. Beredskabsplaner skal nødvendigvis være fleksible, fordi det er umuligt at tage højde for alle mulige varianter af uheld der kan opstå. Kortene skal derfor mere tjene til besvarelse af spørgsmål, end til en mekanistisk basis for valg af indsats.

Nogle af spørgsmålene der typisk opstår under en beredskabsplanlægning, hvor kortmateriale anvendes, er:

- Hvordan ved vi at der foregår et udslip foregår?
- Hvordan kan vi bestemme omfanget af udslippet?
- Hvordan kan vi vurdere hvem der vil være påvirket og i hvilken grad?
- Hvor lang tid har vi til at lave indsatsen før konsekvenserne eskalerer?
- Hvad er den mest optimale indsats ved et givet scenario?
- Hvilken beskyttelse er nødvendig for beredskabspersonalet (politi, indsatsstyrken og det medicinske personale)?
- Hvordan får vi adgang til indsats?
- Hvad er den bedste form for redning?
- Hvor stor skal evakueringszoner være?

Gasspredningsberegningerne der anvendes i dag giver kun delvist svarer på disse spørgsmål. I det følgende afsnit beskrives nogle af metoderne for at opnå et bedre svar.

Det er muligt i dag at fremstille meget bedre præsentationer af gasspredningsinformation til planlægningsformål. Beregningerne i ARGOS demonstrerer fordelene af at vise spredningen dynamisk. Men det er ønskeligt under planlægningen, at man skal

kunne vælge scenarier, sammenligne dem, stille "what if" spørgsmål og se konsekvenserne af forskellige beslutninger. Disse ønsker vil delvis kunne opfyldes ved at lave kort i elektronisk form og genspille kortene på computer når man ønsker at vurdere en indsats. En endnu bedre mulighed vil være, at kunne foretage beregninger dynamisk mens man planlægger. Systemer af denne slags eksisterer i dag, men der er kun lidt publicerede information om dem.

De kort, der produceres i dag er relativt informationsfattige, idet de kun giver information om gasspredningen. Et beredskabshold, der planlægger, har behov for information om adgangsveje, tilgængeligt udstyr, vandresurser, og hvor personer er truet. Det er sikkert, at værktøjerne som er tilgængelige i dag, kan forbedres således at de bedre svarer til behovet.

7.6 Langvarige udslip og evakuering

Større udslip af toksisk gas vil normalt være overstået på 10-15 minutter. Et overrevet 3 tomme ammoniakrør, f.eks. frigiver ca. 1000 kg. per minut og er overstået efter 15 minutter fra en 15m³ beholder. Med udslip af disse størrelser er det nytteløst at tale om evakuering, idet udslippet vil være overstået inden evakueringen kan iværksættes. Evakuering vil endda være skadelig, idet koncentrationer udenfor hus/bygningerne vil være langt større end indendørs. (Selvevakuering vil ofte ske hvis personer lugter udslippet, men erfaringen viser, at dette ofte vil øge risikoen).

Situationen er anderledes ved langvarige udslip. Et eksempel er udslippet af acrylonitril i Næstved i 1992. Der er tid til ved langvarige udslip at foretage en evakuering. Evakuering vil i nogle tilfælde være nødvendig fordi udslippet ikke kan standses. Der vil også ved langvarige udslip være tid til at foretage opslag i referenceberegningssamlinger og endda foretage specielberegninger. Det dog nødvendigt ved denne slags beregninger at tage højde for mulige skift i vindhastighed og vindretning.

I praksis forekommer langvarige udslip langt hyppigere end store udslip. F.eks. udslip fra tæringshuller, fra flanger eller dampudslip fra en væskepøl. Der er tilfælde hvor udslippet vil kunne fortsætte i flere timer. Lignende tilfælde vil kunne opstå ved brande der udvikler toksisk røg. Langvarige udslip ved fordampning af væsker kan gøre til kortvarige ved tildækning med skum (som i Næstved i 1992).

Beskyttelse indendørs er mindre effektiv hvis et udslip er langvarigt. Luftskiftetiden i de fleste danske huse er ca. 2 timer med døre og vinduer lukkede. Dette medfører, at koncentrationen indendørs når op på ca. 60 % af den udendørs koncentration indenfor en time.

7.7 Værktøj til støtte for beredskabsplanlægning

Der er blevet lavet mange hjælpemidler i tidens løb til støtte for beredskabsplanlægning. Nogle er lavet som forsøg, mens andre har opnået bredt anvendelse.

Flere værktøj er blevet udviklet i USA til støtte for beredskabsplanlægning. To er væsentlige i den nuværende sammenhæng, CAMEO (ref. 58) og ARCHIE. Begge er stillet gratis til rådighed af henholdsvis US EPA/NOAA og af US DOT. Cameo inkluderer DEGADIS modellen (ref. 77), som er en af de velanskrevne tunggas spredningsberegningsmodeller og en dynamisk gaussiske spredningsberegningsmodel for neutral og let gas.

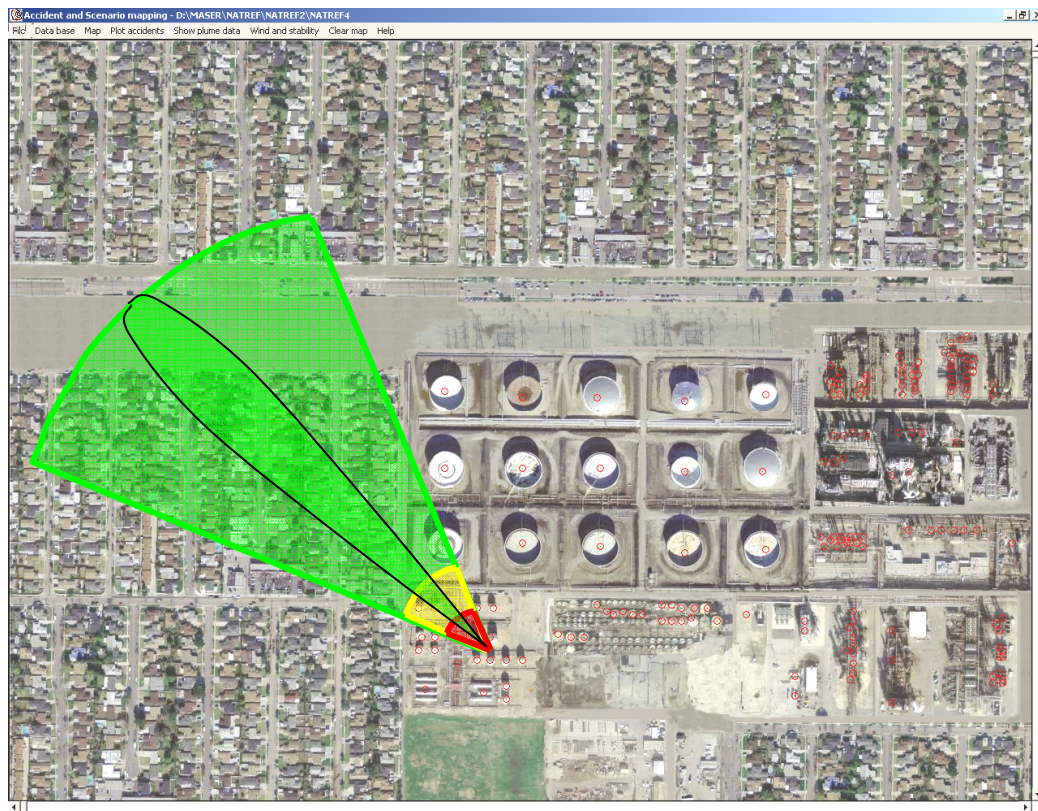
CAMEO er et beregningsværktøj med et respektabelt sæt af modeller, med kortlægningsfaciliteter og med bred anvendelse. Det vil rimeligvis kunne anvendes til mindre risikoanalyseopgaver, men har ikke faciliteter til at behandle stor opgaver på effektiv vis.

ARCHIE er en beregningsprogram med meget mere begrænsede muligheder. Det er lavet af US Department of Transport til støtte for HAZMAT indsats.

CAMEO og ARCHIE er vigtige, selv om de er forældet til at komme i betragtning som rimelige standardværktøjer. Der eksisterer en enormt erfaring i anvendelse af disse programmer, og en omfattende litteratur der danner en god basis for opbygning af nye værktøjer

Der findes adskillige kommercielle programmer til støtte for beredskabsplanlægning der tillader hurtig og fleksible beregninger af gasfaner. Ingen af dem der er fundet, løser alle de problemer som beskrives i kapitel 5, eller de krav som er anbefalet opfyldt i kapitel 4,5, og 6.

Nye udviklinger har gjort det muligt at fremstille computer programmer der kan beregne gasspredning og vise resultater med meget kort og simpel betjening. Efter opstilling af anlægsdata er de kun et minimum af information fra brugeren der er nødvendig; placering af udslippet, hulstørrelse (f.eks. stor eller lille), vindretning, vindhastighed og atmosfærisk stabilitet. Det har vist sig muligt under prøveforhold at producere et første kort over påvirkede områder på under 40 sekunder, og at opdatere korte eller fortage nye beregninger endnu hurtigere. Dette betyder at det dynamisk anvendelse beskrevet i afsnit 8.4 er teknisk mulig i dag.



Figur 7.1 Beredskabskort på skærm, baseret på satellitfotografering. Farezoner vises her med den aktuelle fane i midten. Farezonen er det område hvor fane kunne være ved en given vindretning fra sydvest. Rød, gule og grønne repræsenterer AEGL-1, 2 og 3. Sådanne kort kan fremstilles ved et enkelt klik på musen, når de nødvendige databaser er

7.8 Præsentation af resultater

Et af problemerne, som er bemærket ved fremstilling af kort, er forståelse og fortolkning af kortet. Forfatteren har fundet, for eksempel, i aktuelle diskussioner, at kort der viser IDLH grænser, opfattes som om alle indenfor området vil dø. (Det korrekt fortolkning er, i forhold til definitionen, at ingen udenfor området vil dø). Ligeledes kan det ske, at cirkler der viser omfanget af farezonen ofte fortolkes som om hele zonen vil blive påvirket på en gang. Det er i praksis kun personer indenfor gasfanen der vil blive påvirket. Det konkluderes hurtigt at selve fanerne skal vises. Men det er ønskeligt at studere den form der giver optimal beredskabsplanlægning, og de vejledninger der er nødvendig for fortolkning af kortene.

7.9 Valg af tilfælde til beredskabsplanlægning

Der er blevet valgt mange forskellige typer af beregninger i aktuelle sagsbehandlinger. Forskellene har været bl. andet:

- Forskellige toxicitetskriterier anvendes
- Forskellige scenarier vælges, nogle med ekstremt lave sandsynligheder (f.eks. total pludseligt tankbrud koblet med ekstreme vejrforhold)
- Nogle gange tages der hensyn til sikkerhedsudstyr, andre gange tages der ikke hensyn.

Typer af kort der bør fremstilles blev diskuteret med personer indenfor beredskabsstyrelsen der har ansvar for beredskabsplanlægning. Nogle kommentarer fra beredskabscheferne var:

"Der produceres kort i dag der ingen klar basis giver for planlægning, fordi det er svært at fortolke hvad de betyder"

"Kortene der produceres er ofte ubrugelig, fordi de dækker tilfælde der vil kun ske en gang hver million år. Der er behov for kort, der beskriver de situationer, som mødes i praksis"

"Vi vil hellere have flere kort, evt. på elektronisk form, end at blive stillet over for at skulle vælge nogle få tilfælde"

"Kortene skal være realistisk. De skal for eksempel tage højde for situationer der kan opstå, for eksempel med nedslag bag bygninger og tanke"

Det blev klart i diskussioner, at ideer om risikobaseret beredskabsplanlægning endnu ikke har slået igennem ved fremstilling af sikkerhedsrapporter, selv om risikobaseret beredskabsplanlægning er i fuld gang.

Det vil ikke være særlig vanskeligt at lave et fuldt sæt af kort til beredskabsplanlægning, med alle alternativer. I dag findes der systemer der kan lave alle de ønskede kort automatisk. Spørgsmålet er, om det er det som beredskabsplanlægger har behov for. Et rimeligt sæt af beregninger der kun fremstilles som planlægningsgrundlag blev anbefalet i diskussionerne:

- Et repræsentativt sæt af scenarier, med flere udslipssteder og flere udslipsstørrelser.
- Kun to vindforhold, et "normalt" og et med lav vindhastighed og stabil betingelser, men med kommentarer f.eks. om betydningen af andre vindforhold, mulige vindskift

- LC10, LC50 kort og separat, AEGL1, AEGL2, og AEGL3 kort, eller ækvivalent hvor AEGL værdier mangler. (Flere grænser kan vises på et enkelt kort, som i figur)
- Kort med og uden konsekvensbegrænsende foranstaltninger (deluge, nødstop osv.).
- Nogle indikationer af problemer der vil kunne opstå, og som vil gøre beregningerne misvisende.

7.10 Krav til standardværktøjer til beredskabsplanlægning

Der kan udledes fra de ovenstående betragtninger flere krav til standardværktøjer:

No.	Krav til værktøjet
1.	Spredningsberegninger bør understøtte planlægning af nedlukningsfasen og vise hvor man kan færdes med sikkerhed i anlægget.
2.	Gasspredningsberegninger bør kunne understøtte planlægning af beslutningstagning umiddelbar efter alarmering.
3.	Systemer til spredningsberegning bør kunne understøtte planlægning af identifikation af stoffet der frigives.
4.	Systemer til spredningsberegning bør kunne støtte vejledning i hurtig vurdering af udslippets størrelse
5.	Systemer til spredningsberegningerne bør helst producere kort der viser påvirkede områder i forhold til vindretning, hastighed og udslipstørrelser.
6.	Resultater fra spredningsberegninger bør støtte med information, således at beslutninger om alarmering kan tages meget hurtigt.
7.	Udslipberegninger bør understøtte planlægning af tilgangsruter for at minimere risikoen for beredskabspersonale.
8.	Udslipberegninger bør indikere de tilfælde hvor beskyttelsesudstyr er påkrævet.
9.	Spredningsberegninger bør understøtte vurdering af behovet for evakuering vurdering af evakueringsområdet.
10.	Spredningsberegninger bør understøtte vurdering af evakueringsområdet.
11.	Skal kunne vise farezoner på en forståelig måde
12.	Skal kunne producere kort for AEGL og LC kriterier
13.	Skal kunne producere kort for flere scenarier, mht. placering og størrelse, helst på overskuelig elektronisk form, således at beredskabsplanlæggerne kan "plukke" de ønskede kort.

Bemærk at disse krav er møntet på planlægningsfasen, Der er yderligere krav til værktøjer som skal anvendes under en aktuel indsats.

8 Konklusioner

Målsætningen for dette projekt har været at belyse den nuværende status for gas-spredningsberegninger og risikoanalyseværktøjer og især at undersøge om det er muligt at undgå at forskellige specialister anvender forskellige toksicitetskriterier og modeller og derfor kommer til forskellige resultater.

Der er blevet studeret forskellige modeller og værktøjer til beregning af gasspredning. De værktøjer, der anvendes i dag, er oftest pakker af modeller, der er fremstillet til risikoanalyser. Spredningsberegningsmodellerne, der anvendes i disse pakker, er i stand til at producere resultater, der afviger med mindre end en faktor to fra eksperimentdata. Omhyggeligt valg af programmer kan i de fleste tilfælde give resultater, der ligger indenfor 50 % afvigelse fra eksperimentdata. De programmer, der giver den bedste overensstemmelse er ofte også de simpleste modeller, der er tilpasset til de eksperimentale resultater.

At der ofte er langt større afvigelser imellem to sæt af beregninger lavet af forskellige analysehold skyldes at:

- De scenarier der beregnes ofte varierer fra analyse til analyse, selv når scenarierne er nominelt ens og har samme navn. Med andre ord, metodologien for analyserne er ikke tilstrækkelig standardiseret.
- De grundlæggende antagelser i analyserne er meget varierende.
- De valgte præsenteringsformer og de tilfælde, der vælges for at præsentere resultatet, er ofte stærkt varierende. (Myndighederne i forskellige områder beder f.eks. om forskellige kort og forskellige toksicitetskriterier.)
- Der anvendes ofte modeller, der slet ikke passer til de relevante scenarier. Dette gælder især for beregninger i "nærfeltet", dvs. indenfor 100 til 200 m, når der er bygninger, mure osv. eller når udslippet sker indendørs.
- Der er stor variation i kildemodellerne, dvs. de modeller, der anvendes til beregning af selve udslipsmængden. Usikkerheden her er større end usikkerheden ved beregning af selve gasspredningen.

De to væsentligste skridt for at få reproducerbar og troværdige resultater er:

- Samle relevante eksperimentresultater. Et rimelig udvalg af eksperimenter gives i ref. 53
- Anvend kun de modeller der er valideret mod relevante eksperimentdata, og som har en lille afvigelse fra eksperimenterne.

- Anvend en fast metodologi og fast procedure til gennemførelse af beregningerne.

Beregningsmodellerne er i dag tilstrækkeligt veludviklet til at kunne understøtte sådanne faste procedurer med en grad af sikkerhed som er væsentlig bedre end den for andre planlægningsberegninger. Der er dog flere typer af scenarier, der ikke er dækket af dagens "standard praksis" og der vil sikkert dukke nye behov op i fremtiden. Der er også betydelige mangler i de fleste standardværktøjer der findes i dag, idet de ikke beregner effekten af risikorreducerende foranstaltninger og ikke beregner effekten af bygninger og udstyr i nærfelten. Der er en dog en hurtig udvikling i modellering i gang, og løsninger på disse problemer findes på modelleringsstadiet i dag. (Som et led i dette projekt blev mangler i de eksisterende standardværktøjer identificeret, og modeller der løser manglerne implementeret som en del af en. Nogle af resultaterne vises i bilaget). Derfor:

- Omfanget af modelleringen bør defineres. Det bør omfatte i det mindste de scenarier som er beskrevet i kapitel 3
- Det bør være frit at kunne udvikle nye modeller, men man bør stille de samme krav til fremtidige modeller som der stilles til "standardmodeller" dvs. overensstemmelse med eksperimentdata.
- Det er muligt at specificere et sæt af åbne modeller der vil være den "bedst" blandt de nuværende og som vil kunne beregne konsekvenser i åbent terræn med usikkerhed indenfor 50 % i langt de fleste tilfælde. De bedste nuværende (åbne) modeller identificeret igennem modelsammenligninger er listet i tabel 8.1.

Udviklingen i CFD modellering er i dag så hurtig, at det vil blive et bredt anvendt værktøj indenfor en relativ kort årrække. Man bør åbne for anvendelse af disse modeller til risikoanalyse og planlægning, hvis et valg af standardværktøjer skal kunne holde i en rimelig periode. Kvalitet og troværdighed i anvendelsen af disse metoder vil kunne sikres ved at stille de samme krav til valideringer og faste procedurer, som stilles for andre modeller. Derfor:

- Der bør være en vejledning i anvendelse af CFD beregninger i risikoanalyse.

Et godt udgangspunkt for udvikling af en standardprocedure er den hollandske "Purple Book" (ref. 5), som det har vist sig kan skabe reproducerbare resultater til brug for risikoanalyse. Undersøgelser har dog vist at det vil være nødvendigt på en række punkter at supplere "Purple Book". Der mangler f.eks. i dag vejledninger til beregninger, der skal anvendes til beredskabsplanlægning eller til beskyttelse af medarbejdere. En sådan vejledning skulle helst være baseret på afprøvninger der viser at resultaterne er konsistent og stemmer rimeligt overens med enten eksperimenter eller aktuel erfaring. De nuværende vejledninger efterlader også stor frihed for forkert anvendelse af modeller. Derfor:

- Metodologivejledninger bør være mere detaljerede og bredere i omfang.
- Der bør være en vejledning om, hvornår man ikke skal anvende modellerne.
- Såvel metodologien som modellerne skal afprøves og der skal vises at metodologien fører til rimelige nøjagtige resultater.

En mulig fremgangsmåde til at sikre ensartede beregninger vil være at vælge et bestemt program som basis for beregningerne. Der er dog flere ulemper ved denne fremgangsmåde, blandt andet at der er flere relevante uheldsscenerier, der ikke dækkes af de nuværende værktøjer. For eksempel er der ingen standardværktøjer i dag der kan beregne spredning ved meget lave vindhastigheder. Standardværktøjer i dag halter bagud for modellering og eksperimenter, og der foregår en aktiv forskning til udvidelse af det sæt af scenarier, der kan beregnes. Tabel A.2 i bilaget viser status for de forskellige modeller.

Der er nogle specifikke ændringer i beregningspraksis, som vil forbedre nøjagtigheden af spredningsberegningerne og de sikkerhedsvurderinger, der baseres på dem. En vil være at anvende vinddata baseret på vindfelts-beregninger eller vindatlas-data, i stedet for en enkelt vindrose fra den nærmeste målestation. En anden vil være at anvende CFD beregninger til bestemmelse af spredning i nærheden af bygninger eller indendørs. Dette er i praksis en mulighed i dag, selv om det vil være nødvendigt at begrænse antallet af beregnede scenarier på grund af den lange tid, der kræves, for at opstille model og gennemføre beregninger.

Toksicitetsdata er i dag tilgængelige for langt de fleste af de relevante stoffer, dvs. de, der både er toksiske og behandles i større mængder. LC_{50} , LC_{10} og evt. LC_1 værdier kan beregnes og bør anvendes i risikoanalyser. Tidsskaleringsmetoder for disse grænser giver væsentlig forbedring i nøjagtigheden af resultaterne.

DTL værdier kan anvendes, men er egentlig baseret på de samme grunddata som LC_{50} værdier. Det vil ikke kræve en ændring i de danske principper for risikoaccept (ref. 69) at anvende DTL værdier direkte som planlægningsgrundlag, men det vil kræve at beregningsværktøjer blev tilpasset til DTL kriterier. Derfor:

- Tidsskaleret LC_{50} og LC_{10} toksicitetsgrænser bør anvendes til risikoanalyse.
- Behovet for at anvende LC_1 værdier bør undersøges.
- DTL værdier skulle kunne introduceres i takt med at egnede værktøjer blev tilgængelige.

AEGL værdier er dem, som giver den bedste basis for beredskabsplanlægning. Der kan være stoffer for hvilke AEGL værdier ikke findes. I disse tilfælde kan ERPG, IDLH og TEEL værdier anvendes. Valget er uvæsentligt, idet TEEL værdier baseres på AEGL værdier, hvis disse er til rådighed, derefter på ERPG værdier og til sidst på

IDLH værdier, hvis de andre mangler, og anvender de bedst tilgængelige forsøgsdata hvis alle andre mangler. Derfor:

- AEGL værdier bør anvendes til beredskabsplanlægning hvor det er muligt
- ERPG værdier bør anvendes hvis AEGL værdier mangler
- TEEL værdier bør anvendes hvis AEGL og ERPG værdier mangler

Der mangler en praksis for, hvordan der skal foretages beregninger til beredskabsplanlægning. Forskellige beregninger foretages med forskellige toksicitetskriterier, med forskellige tilfælde som f.eks. "worst case" eller mere sandsynlige tilfælde, og med og uden aktivering af sikkerhedsforanstaltninger. En rimelig praksis vil kunne opstilles ved at undersøge anvendelsen af forskellige former for beregninger. Basisberegninger for et sådan undersøgelse er til rådighed. Et konkret forslag til udvikling af en praksis vil være, at fortage et sæt af beregninger på forskellige fremgangsmåder, med forskellige kortform, og evaluere deres praktik anvendelse. Derfor:

- Der bør være en vejledning i, hvordan man fremstiller beredskabskort.

ARGOS programmet viste betydelige fordel som beredskabsplanlægningsværktøj, specielt fordi det kan vise et realistisk dynamisk billede af gasspredningen. De relevante dele af ARGOS systemet er stadigvæk under udvikling. Udviklingen anvender gode moderne metoder. Derfor:

- Der bør undersøges hvorledes de dynamiske aspekter af ARGOS kan gøres tilgængelig for beredskabsplanlæggere, f.eks. at planlæggerne kan køre programmet selv, eller ved at fremstille en "viewer" for ARGOS resultater.
- ARGOS programmet bør valideres på de samme metoder og med de samme eksperimentdata som andre værktøjer.

Anvendelse af ARGOS til risikoanalyse er mere problematisk i dag idet det mangler mange modeller, mangler brand og eksplosionsberegninger, og mangler sandsynlighedsdata. Det vil være muligt at inkludere beregningsdelen af ARGOS (RIMPUFF URBAN) i eksisterende risikoberegningspakker, som alternativ til eksisterende gasspredningsmodeller.

Gasspredningsberegninger er kun lidt anvendt i dag til medarbejderbeskyttelse idet hovedvægten lægges på prævention af udslip. Der er dog en betydelig udvikling i metoderne således at beregninger af effektiviteten af alarmeringsanlæg, anvendelse af nødventilation, anvendelse af vandgardiner osv. kan foretages. Derfor:

- Man bør være opmærksom på udviklingen af beregningsmetoder specielt møntet på nærfeltsspredning og projektering af beskyttelsessystemer.

Tabel 8.1 De bedste åbne modeller i sammenligninger med modeller, ref. 30

Fænomen	Model	Reference
Udslip af væske fra et hul	Bernoulli	1
Udslip af gas fra et hul	St Venants gas ligning	1
Udslip af væske fra et rør	Colebrook white	4
Udslip af gas fra et rør, steady state	Colebrook white	4
Udslip af gas fra et rør, dynamisk	Finite element programmer	30
Tofase udslip fra kor rør	HEM modeller eller OMEGA modellen	118, 114
Tofase udslip fra en rørledning	Tam's model	4
Spredning af væske på jorden	Keller og Simmons implementering af shallow layer og Green/Amt modeller	50, 51, 52
Fordampning fra en pøl	Brighton's model, eller Kawamura og MacKay's moder med modifikationer af Lebuser og Schecker	146, 48, 49
Fordampning fra en sprøjtende udslip	Ingen anerkendte modeller indenfor risikoanalyse, men standardmodeller er tilgængelige	Perry and Chilton, Chemical Engineers Handbook
Fordampning fra en plaskende væske	Ingen model i litteraturen	
Jet spredning af gas	Flere modeller, få forskelle	125
Jet spredning med impingement	Nye modeller, kun delvis evalueret her, men med gode eksperimentgrundlag	35
To fase jet	Resultater fra FLIE projekt endnu ikke evalueret	Bibliografi reference 10 til 16

Fænomen	Model	Reference
Tung gas fanespredning	Hegadas eller SLAB, med forbedringer i forhold til Kit Fox eksperimenterne	76, 78
Tung gas skyer	Evalueringer ukomplet i ref. 30, flere modeller og eksperiment resultater findes	Evaluering ukomplet August 2006
Udslip af fordråbede gas fra en beholderbrud	To modeller offentliggjort, eksperimenter af Fletcher.	134, 135, 145
Gas spredning omkring bygninger	Evalueringer ukomplet, men flere modeller eksisterer. Anvend CFD for kritiske situationer	87,88,89
Gas spredning ved lav vindhastigheder	Ingen validerede modeller.	130
Letgasspredning	OML og ADMS modeller. Kun OML modellen er evalueret	55, 56
Indendørs spredning af gas	Brighton, Deaves, kun lidt validering. Anvend CFD	143, 147 Evaluering ukomplet August 2006
Dannelsen af røg	Evalueringer ukomplet i ref. 30, nogle modeller og eksperiment resultater findes	Evaluering ukomplet August 2006
Spredning af røg	Evalueringer ukomplet i ref. 30, nogle modeller og eksperiment resultater findes Anvend CFD	Evaluering ukomplet August 2006

9 Litteraturliste, referencer og selektiv bibliografi

9.1 Referencer

1. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, *Guidelines for Use of Vapour Cloud Dispersion Models* (sec.eddit.), New York, 1996.
2. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, *Guidelines for Chemical Process QRA* (sec.eddit.), New York, 2000
3. Technica Ltd. *Techniques for Assessing Industrial Hazards*, technical paper 55, The World Bank
4. "The Yellow Book", *Methods for the Calculation of the Effects of the Escape of Dangerous Materials*, Dutch Ministry of Labour, 1978
5. B Ale et al. "The Purple Book", *Guidelines for quantitative risk assessment*, Purple Book, Director General for Social Affairs and Employment 1999
6. TNO, "The Green Book" *Methods for the Determination of Possible Damage* Directorate general of Labour, Holland 1992
7. Eisenberg et al 1975 Vulnerability model; a simulation System for assessing damage resulting from marine Spills (vm1) ada-015-245 US Coast guard
8. Griffiths R.F., The use of probit expressions in the assessment of acute population impact of toxic releases *Journal Of Loss Prevention In The Process Industries*, 4, 1, 1991
9. Schubach S., Comparison of probit expressions for the prediction of lethality due to toxic exposure, [Journal of Loss Prevention in the Process Industries](#), Volume 8, Number 4, July 1995, pp. 197-204(8)
10. NIOSH, Documentation for Immediately Dangerous to Life or Health Concentrations (IDLH), 1994
11. AIHA Emergency Response Planning Guidelines Committee, Emergency Response Planning Guidelines, 2002
12. US EPA, The Development of Acute Exposure Guideline Levels (AEGs), www.epa.gov/oppt/aegl/
13. US Department of Energy, AEGs, ERPGs, or Rev. 21 TEELs for Chemicals of Concern 2005, [www.eh.doe.gov/chem_safety/teel/TEELs_Rev21_Introduction\(2\).pdf](http://www.eh.doe.gov/chem_safety/teel/TEELs_Rev21_Introduction(2).pdf)
14. Greim, H.: Entwicklung von Verfahren zur Abschätzung der gesundheitlichen Folgen von Großbränden. Unveröffentlichter Bericht zum Forschungsvorhaben des Bundesamtes für Zivilschutz, München, 1995/6., se også www.umweltbundesamt.de/anlagen/AEGLWEB/
15. UK HSE, A methodology to prioritise substances for possible further development of Acute Exposure Threshold Levels (AETLs). se også www.hse.gov.uk/hid/haztox.htm
16. NIOSH, Registry of Toxic Effects of Chemical Substances (RTECS), www.cdc.gov/niosh/rtecs/default.html

17. J.R.Taylor Use of the toxophore theory in risk assessment, Taylor Associates, 2004
18. Allen B. Richon, An Introduction to QSAR Methodology, Glaxo Wellcome Research, 1997, www.netsci.org/Science/Compchem/feature19.html
19. BJM Ale et al. Benchmark risk analysis models, RIVM report 6100660015, 2001
20. F. Markert, M. Christou, D. Hourtolou, and Z. Nivolianitou, A benchmark exercise on risk analysis of chemical installations, ESMG - symposium, March 2001
21. A.Amendola, S. Contini, I. Ziomas, EFCHE Loss Prevention Conference, Procedures and Uncertainties in Chemical Risk Assessment, Taormina, March 1992
22. Steven Hanna , Philip Chatwin, Edul Chikhliwaia, Richard Londergan, Thomas Spicer , Jeffrey Weil, Results from the model evaluation panel, Plant/Operations Progress Volume 11, Issue 1 , Hanna SR, Chang JC, Strimaitis DG. Uncertainties in source emission rate estimates using dispersion models. Atmos Environ 1990; 24A:2971-2980
23. Hanna SR, Strimaitis DG, ChangJC. Evaluation of 14 hazardous gas models with ammonia and hydrogen fluoride field data. J Hazardous Materials 1991; 26:127-158.
24. Hanna SR. Hazardous gas model evaluations. Is an equitable comparison possible? J Loss Prev in the Process Ind 1994; 7:133-138.
25. Hanna SR, Chang JC, Strimaitis DG. Hazardous gas model evaluation with field observations. Atmos Environ 1993; 27A:2265-2285.
26. Hanna, S. R., J. C. Chang, 1992a: Hazard Response Modeling Uncertainty (A Quantitative Method), Volume I I Evaluation of Commonly Used Hazardous Gas Dispersion Models (American Petroleum Institute, Washington), API Publication Number 4547.
27. Steven R. Hanna, Peter J. Drivas, Joseph J. Chang, Guidelines for use of vapour cloud dispersion models, 2nd edition, CCPS 1996
28. Hanna, S. R., D. G. Strimaitis, and J. Chang (1990). *Results of Hazard Response Model Evaluation Using Desert Tortoise and Goldfish Data Bases.*, Vol. 1: Summary Report. Washington, Dc , American Petroleum Institute.
29. UK HSE, Safety Report Assessment Guid Chlorine, www.hse.gov.uk/comah/sragchl/images/chlorine.pdf
30. J.R.Taylor, The QRA quality project, Taylor Associates , 2006
31. UK HSE, The Buncefield Investigation, Progress Report, 1, 2 og 3, 2006, www.buncefieldinvestigation.gov.uk
32. Britter, R. E., and J. McQuaid (1988). *Workbook on the Dispersion of Dense Gases*. HSE Contract Research Report No. 17/1988, U.K. Health and Safety Executive.
33. G.D. Kaiser technical background document for offsite Consequence analysis for Anhydrous and aqueous ammonia, chlorine, and Sulfur dioxide, US EPA, www.yosemite.epa.gov/oswer/ceppoweb.nsf/
34. Carissimo B., S.F. Jagger, N.C. Daish , A. Halford, S. Selmer-Olsen, K. Riikonen, J.M. Perroux, J. Würtz, J. Bartzis, N.J. Duijm, K. Ham, M. Schatzmann, and R. Hall, "The SMEDIS Database and Validation Exercise", International Journal of Environment and Pollution, 16, 1-6, 2001.

35. Cooper, M.G. A model for jet dispersion in a congested environment, CRR 396, UK HSE 2001
36. K.J.Allwine et al. Overview of URBAN 2000: A Multiscale Field Study of Dispersion through an Urban Environment, Bulletin of the American Meteorological Society: Vol. 83, No. 4, pp. 521–536.
37. US DOD. Joint Urban 2003, Atmospheric Dispersion Study in Oklahoma City, <http://ju2003.pnl.gov/>
38. Petersen, R.L., "A Wind Tunnel Evaluation of Methods for Estimating Surface Roughness Length at Industrial Facilities" *Atmospheric Environment*, Vol. 31, No 1, pp 45 -57 , 1997.
39. UK HSE, Flashing liquid jets and two-phase dispersion A review, CRR 403/2002
40. Ramsdale,S.A. Tickle,G.A. ,Review of RELEASE rainout model and the Center for Chemical Process Safety (CCPS) data. UK HSE CRR 277, 2000
41. Abdellah Touil, Jean-Pierre Bigot, *Rainout Prediction: Initial Droplet Diameter Experimental Determination*, Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, 11th International Symposium Loss Prevention 2004, Praha Congress Centre, 31 May – 3 June 2004.
42. Yildiz, D.; Rambaud, P.; Van Beeck, J. ,*Droplet size and velocity characterizations of a superheated two-phase flashing jet*, 19th Annual Meeting of the Institute for Liquid Atomisation and Spray Systems (Europe), Nottingham, 6-8 September 2004.
43. [Patrick Bonnet](#) and [Jean-Marc Lacôme](#), Experimental Study of Accidental Industrial LPG Releases, Ineris, Verneuil-en-Halatte, 60 550, France
44. David W. Johnson, John L. Woodward, RELEASE: A Model with Data to Predict Aerosol Rainout in Accidental Releases, CCPS, 1998
45. Sutton, O. G., 1934: Wind structure and evaporation in a turbulent atmosphere. *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A*, **146**, 701–722
46. Pasquill, F., 1943: Evaporation from a plane, free-liquid surface into a turbulent air stream. *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A*, **182**, 75–94
47. Mackay, D., and RS Matsugu. 1973The evaporation of volatile liquids. *J. Hazardous. Materials* 15:343-364.
48. Kawamura P.I., Mackay D., The Evaporation of Volatile Liquids, *J.Haz.Mat.* 15 343 ,1987
49. Lebuser U., Schecker H.G., Verdampfung von Flüssigkeiten aus offenen Lachen, Dechema - Monographien, Band 107, VCH Verlagsgesellschaft, S.331, 1987
50. Simmons CS, and JM Keller. 2003. *Status of models for land surface spills of nonaqueous liquids*.PNNL-14350, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA.
51. Simmons CS, JM Keller, and JL Hylden. 2004. *Spills on flat inclined pavements*. PNNL-14577, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA.
52. J. M. Keller og C. S. Simmons, The Influence of Selected Liquid and Soil Properties on the Propagation of Spills Over Flat Permeable Surfaces J. M. Keller, PNNL-15058, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA.
53. S.Ott og M. Nielsen, Rediphem data base, www.risoe.dk/vea-atu/densegas/rediphem.htm

54. Taylor, J.R. Experimental data for validation of risk analysis models. 7th edition
Taylor Associates, 2006
55. Cambridge Environmental Research Consultants, Ltd. (1998), *ADMS Technical Specification*, CERC, 3 Kings Parade, Cambridge, U.K. CB2 1SJ
56. Berkowicz, R. and H. R. Olesen, 1993: Danish point source dispersion model - OML, MSTLuft-A94, NERI, Roskilde, Denmark
57. Cimorelli A.J., Perry S.G., Venkatram A., Weil J.C., Paine R.J., Wilson R.J., Lee R.F. and Peters W.D. (1998), AERMOD --Description of Model Formulation (Version 98314 (AERMOD and AERMET) and 98022 (AERMAP). USEPA, RTP, NC 27711, 113 pages.
58. NOAA Introduction to CAMEO, <http://archive.orr.noaa.gov/cameo/intro.html>
59. DnV software, The PHAST software,
<http://www.dnv.com/software/all/phast/productInfo.asp>
60. Helen Balmforth, Ron Macbeth, Toxic RISKAT version 3.1 - The Inclusion of the Site Risk Methodology HSL/2002/27
61. Michael J. Brown & Gerald E. Streit, Emergency Responders' Rules-of-Thumb for Air Toxics Releases in Urban Environments, Los Alamos National Laboratory
62. Heskestad, G., Kung, H. C., & Todtenkopf, N. F. (1976). Air entrainment into water sprays and spray curtains. In *Proceedings of the ASME Winter annual meeting*, Paper 76-WA/FE-40, 2-12.
63. Griolet, F. (1996). Dimensionnement des rideaux d'eau. Modélisation et applications industrielles. Thèse Doct. Sci., Univ. Claude Bernard - Lyon I, Fr. : 218 pp.
64. Fthenakis, V. M., & Blewitt, D. N. (1995). Recent development in modelling mitigation of accidental releases of hazardous gases. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 8, 71-77.
65. Prétrel, H., & Buchlin, J. M. (1997). Experimental study of the hydrodynamic of water-curtain - Application to the attenuation of fire radiation. In *Proceedings of the 4th Conference on Experimental Heat Transfer Fluid Mechanics and Thermodynamics*, Brussels, 8 pp.
66. Petersen, R.L., and D.N. Blewitt, "Evaluation of Water Spray/Fire Monitor Mitigation Systems for Two Refineries," Presented at the CCPS Process Plant Safety Symposium, Houston, Texas, May1992.
67. Meroney, R.N., Neff, D.E., Shin, S.H., Steidle, T.C., Tan, T.Z., and Gang Wu, ANALYSIS OF VAPOR BARRIER EXPERIMENTS TO EVALUATE THEIR EFFECTIVENESS AS A MEANS TO MITIGATE HF CLOUD CONCENTRATIONS, for EXXON Research and Engineering Company, HF Vapor Barrier Subcommittee, Florham Park, New Jersey, July 1988, CER88-89RNM-DEN-SHS-TS-TZT-GW-1.
68. Meroney, R.N. and Shin, S.H. FLUID MODELING OF A HEAVY GAS VAPOR DETENTION SYSTEM. Proceedings of Australian Wind Engineering Conference, Hunter Valley, New South Wales, Australia, 7-8 February 1991. [CEP90-91-RNM-SHS-10](#).
69. J.R.Taylor, C.G.Petersen, J Kampmann, L. Schepper, EK Kragh, RS Selig, P.Becher, K.E.Petersen, Kvantitative og kvalitative kriterier for risikoaccept", Miljøprojekt 112, Miljøstyrelsen 1987
70. EF data projekt

71. TNO, EFFECTS For calculating the physical effects due to hazardous materials releases, www.mep.tno.nl/software/
72. dNV software, SAFETI, www.dnv.com/software/all/safeti/
73. Quest, Canar modelling software, www.questconsult.com/canary.html
74. US EPA, Computer aided management of emergency operations CAMEO, www.epa.gov/swercepp/cameo/
75. Taylor Associates, QRA Pro functional description, QRA Pro model validation, www.itsa.dk/QRA Pro/
76. D.Ermack, Users Manual for SLAB, available from www.weblakes.com
77. J. Havens, T Spicer, A dispersion model for elevated dense gas jet releases, available from www.weblakes.com
78. HGSYSTEM, from www.hgsystem.com
79. Gastar - Dense gas dispersion model, from www.cerc.co.uk/software/gastar.htm
80. S. Ott, GReAT (Gas Release Analysis Tools), from www.risoe.dk/vea-atu/densegas/models.htm
81. Pasquill, F., 1961: The estimation of the dispersion of windborne material. *Meteor. Mag.*, **90**, 33–49.
82. Pasquill, F., "Atmospheric dispersion parameters in Gaussian plume modeling. Part II: Possible requirements for change in Turner Workbook values", U.S. EPA Publication 600/4-76-030b, June 1976
83. Turner, D.B., "Workbook of atmospheric dispersion estimates", U.S. EPA Publication AP-26, revised 1970
84. Briggs, G.A., "Plume rise", USAEC Critical Review Series, 1969
85. Smith, F. B., 1973: A scheme for estimating the vertical dispersion of a plume from a source near ground level. *NATO CCMS Air Pollution*, No. 14.
86. McElroy, J.L. and F. Pooler, 1968: The St. Louis Dispersion Study. U.S. Public Health Service, National Air Pollution Control Administration, Report AP-53.
87. Hanna, SR and RE Britter, Wind Flow and Vapor Cloud Dispersion at Industrial and Urban Sites, AIChE/CCPS 2002
88. A.G. Robins, R. Hall, I.R. Cowan, J.G. Bartzis, A. Albergel, Evaluating modelling uncertainty in CFD predictions of building affected dispersion, *International Journal of Environment and Pollution*, Volume 14, Numbers 1-6 / 2000
89. Hall, R.C., Dispersion of releases of hazardous materials in the vicinity of buildings, CRR127, UK HSE, 1997
90. Steven R. Hanna, Olav R. Hansen, Seshu Dharmavaram, FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations *Atmospheric Environment* 38 (2004) 4675–4687
91. A.K.M. Chua, R.C.W. Kwok, K.N. Yu Study of pollution dispersion in urban areas using Computational Fluid Dynamics (CFD) and Geographic Information System (GIS) *Environmental Modelling & Software* 20 (2005) 273–277
92. [Sklavounos S, Rigas F.](#) Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles. *J Hazard Mater.* 2004 Apr 30;108(1-2):9-20.
93. C.J.Lea, A Review of the State-of-the-Art in Gas Explosion Modelling, HSL/2002/02 UK Health and Safety laboratory, 2002

94. EXSIM . Joint-Venture: Shell Global Solutions, UK
(www.shellglobalsolutions.com), Telemark Technological R&D Centre. Norway
(www.tel-tek.no), Cambridge University, UMIST.
95. The FLACS (FLame ACceleration Simulator) CMR-GEXCON, Norway (was Christian Michelsen Research Institute).
<http://www.gexcon.com/index.php?src=flacs/overview.html>
96. AutoReaGas, ANSYS. <http://www.ansys.com>, At the time of the writing of the report, (AutoReaGas originated from joint venture between Century Dynamics Ltd. and TNO, and ANSYS acquired Century Dynamics in January 2005).
97. Fluidyn PANACHE - PANEPH validation with dense gas dispersion experiments
www.fluidyn.com
98. Wei Li, Zhe Fan, Xiaoming Wei, and Arie Kaufman, GPU-Based Flow Simulation with Complex Boundaries. Technical Report 031105, Computer Science Department, SUNY at Stony Brook, Nov 2003.
99. NIST Fire Dynamics Simulator (FDS) and Smokeview, www.fire.nist.gov/fds/
100. S Jagger, Guidance for nsd on the assessment of cfd simulations in safety cases FS/97/8, UK HEALTH AND SAFETY LABORATORY 1997
101. ARGOS description, prolog development center,
www.pdc.dk/uk/cbrn/Information/argos/argos-technical.htm
102. Thykier-Nielsen, S., Deme, S. and Mikkelsen T. (1998). RIMPUFF, Atmospheric Dispersion Model, RIMDOS8, Users Guide. Department of Wind Energy and Atmospheric Physics, Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, June 1998.
103. Poul Astrup, Søren Thykier-Nielsen, Torben Mikkelsen, In-town dispersion calculations with RIMPUFF and UDM, Risø National Laboratory, November 2005
104. Hall, D.J.; Spanton, A.M.; Griffiths, I.H.; Hargrave, M; and Walker S., The Urban Dispersion Model (UDM): Version 2.2 Technical Documentation., DSTL/TR04774. 2 September, 2002.
105. Brook, D. R., N.V. Beck, C. M. Clem, D. C. Strickland, I.H.Griffiths, D. J. Hall,R. D. Kingdon, J. M. Hargrave, Validation of the Urban Dispersion Model (UDM), 8th Int. Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
106. Hanna SR, Chang JC. Kit Fox dense gas dispersion field experiments and HEGADAS model testing. Atmos Environ 2001; 35:2231-2242.
107. B. De Marchi, S. Funtowicz, and J. Ravetz, Seveso: A paradoxical classic disaster, www.unu.edu/unupress/unupbooks/uu21le/uu21le09.htm
108. Accident summary on the Flixborough (Nypro UK) explosion 1st June 1974, www.hse.gov.uk/comah/sragtech/caseflixboroug74.htm
109. C. Whetton, Ammonium Nitrate Explosion at AZF, Toulouse, France, www.saunalahti.fi/ility/Dossiers/Doss%20AZF.htm
110. UK HSE, HID statistics report, HSR 2002 002, Offshore hydrocarbon releases statistics and analysis, 2002
111. Taylor, J.R Process plant release frequency and failure rate data with root causes, Vol 1 to Vol 3, Issue 6, Taylor Associates 2004
112. Fauske H.K. and Epstein M., Source term considerations in connection with Chemical Accidents and Vapour Cloud Modelling. Int. Conf. Vapour Cloud Modelling AICHE 1987

113. Lackmé, Claude (1980), Thermodynamics of Critical Two-Phase Discharge from Long Pipes of Initially Subcooled Water. Heat Transfer in Nuclear Safety Reactors, pp 391-407.
114. Leung, J.C. , A Generalized Correlation for One-component Homogeneous Equilibrium Flashing Choked Flow, AIChE Journal, Vol 32, No. 10, pp 1743-1746, 1986
115. Leung, J.C. , M. Grolmes, The Discharge of Two-Phase Flashing Flow in a Horizontal Duct, AIChE Journal, Vol 33, No. 3, 1987
116. Kukkonen, J. Modelling Source Terms for the Atmospheric Dispersion of Hazardous Substances, Commentationes Physico-Mathematicae 115, 1990
117. Fletcher, B., Flashing flow Through Orifices and Pipes. AICHE Loss Prevention symposium, Denver 1983.
118. Nyren K., Winter S. , Two phase discharge of liquified gases through pipes. Fields experiments with ammonia and theoretical model., 4 th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, No 33 Vol. 1, p. E1-E11, 1983
119. Webber D M and Jones S J "A model of spreading vaporising pools", in "International Conference on Vapor Cloud Modeling", Boston Massachusetts, USA, November 1987,
120. Wu, J. M., and J. M. Schroy (1979). "Emissions from Spills, *APCA and WPCF Joint Conference on Control of Specific (Toxic) Pollutants*. Feb. 13-16, Gainesville, FL: Air Pollution Control Association, Florida Section.
121. Fleischer, M. T. (1980.). *SPILLS: An Evaporation/Air Dispersion Model for Chemical Spills on Land*. Houston, TX: Shell Development Center.
122. Rémy Bouet, Ammoniac, Essais de dispersion atmosphérique à grande échelle, INERIS, 1999
123. RICOU, F.P. and SPALDING, D.B. (1961). Measurements of entrainment by axisymmetrical turbulent jets. J. Fluid Mech., 11(1), 21
124. Chen, C.J. and Rodi, W. Turbulent Free Jets, Pergamon Press, 1980
125. Hoot T G, Meroney R N, and Peterka J A: Wind Tunnel Tests of Negatively Buoyant Plumes; Fluid Dynamics and Diffusion Laboratory, Colorado State University; distributed by National Technical Information Service, US Department of Commerce, Report PB-231-590, October
126. Woodward, J.L and A. Papadourakis (1991). "Modeling of Droplet Entrainment and Evaporation in a Dispersing Jet," in CCPS (1991), pp. 147-167.
127. Hanna, S.R. and R.E. Britter, 2002: Wind Flow and Vapor Cloud Dispersion at Industrial and Urban Sites. ISBN No: 0-8169-0863-X, CCPS/AIChE. 3 Park Ave., New York, NY 10016-5901, 140 pages + CD-ROM
128. Cox, R.A and Carpenter R.J., Further Developments of a Dense Vapour Cloud Dispersion Model in heavy Gas and Risk Assessment, in Hartwig 1980.
129. H.W.M. Witlox, A. Holt, A unified model for jet, heavy and passive dispersion including droplet rainout and re-evaporation, in: International Conference and Workshop on Modelling the Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials, CCPS, San Francisco, CA, September 28–October 1, 1999
130. Lines, I.G. Kenyon, Y.M. Deaves, D.M., Assessment of the validity of current dense gas dispersion models at low wind speeds, CRR 275, UK HSE

131. Meroney, R. N., LIFT OFF OF BUOYANT GAS INITIALLY ON THE GROUND, J. of Industrial Aerodynamics, Vol. 5 (1979) pp. 1-11, [CEP77-78RNM66](#)
132. Lonsdale, H., "Ammonia Tank Failure - South Africa," *Ammonia Plant Safety* 17 (1975),
133. US EPA. Catastrophic failure of storage tanks, Chemical Safety Alert, yosemite.epa.gov/oswer/ceppoweb.nsf/
134. FLETCHER, B. (1982). Sudden discharge of superheated fluid to atmosphere. The Assessment of Major Hazards (Rugby: Instn Chem. Engrs), p. 25 (Ottawa), vol. 2, p. 607
135. HESS, K., HOFFMANN, W. and STOECKEL, A. (1974). Propagation processes after the bursting of tanks filled with liquid propane $\pm$ experiments and mathematical model. *Loss Prevention and Safety Promotion* 1, p. 227
136. VAN ULDEN, A.P. (1974). On the spreading of a heavy gas released near the ground. *Loss Prevention and Safety Promotion*, 1, p. 221
137. VAN ULDEN, A.P. (1987). The heavy gas mixing process in still air at Thorney Island and the laboratory. *J. Haz. Materials*, 16, 411 model. *Atmos. Environ.*, 21, 1573
138. WHEATLEY, C.J., BRIGHTON, P.W.M. and PRINCE, A.J. (1986). Comparison between data from heavy gas dispersion experiments at Thorney island and predictions of simple models. In de Wispelaere, C., Schiermeier,
139. EMBLEM, K. and MADSEN, O.K. (1986). Full scale test of a water curtain in operation. *Loss Prevention and Safety Promotion* 5, p. 461
140. Meroney, R. N. and Neff, D. E., NUMERICAL ASSESSMENT OF WATER SPRAY BARRIERS FOR DISPERSING DENSE GASES, *Journal of Boundary-Layer Meteorology*, Vol. 31, March 1984, pp. 233-247, [CEP83-84RNM-DEN1](#).
141. BARTH, U. (1992). Steam curtains, mitigation of heavy gas clouds on industrial terrain. *Loss Prevention and Safety Promotion*, 7, vol. 2, 96-1
142. JEULINK, J. (1983). Mitigation of the evaporation of liquids by fire fighting foams. *Loss Prevention and Safety Promotion* 4, vol. 1, p. E12
143. Brighton, P. W. M. (1986). Heavy-gas dispersion from sources inside building or in their wakes. In *Proceedings of the Symposium of the Institution of Chemical Engineers - Refinement of Estimates of the Consequences of Heavy Toxic Vapour Releases*, North Western Branch Papers, Manchester, 1, 2.1-2.18.
144. Webber D M "A model for pool spreading and vaporisation and its implementation in the computer code G*A*S*P", SRD/HSE R507, September 1990
145. BRIGHTON, P.W.M. et al. (1994). Comparison of heavy gas dispersion models for instantaneous releases. *J. Haz. Materials*, 36, 193
146. BRIGHTON, P.W. (1985b). Evaporation from a plane liquid surface into a turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 159, 323
147. Deaves, D.M. Simple modelling of gas releases from buildings, CRR 110, UK HSE, 1996

9.2 Bibliografi

Litteratur der blev studeret men ikke refereret.

Generelt om risikoanalyse

1. Spouge, A guide to quantitative risk assessment for offshore installations, Centre for Marine and Petroleum Technology, 1999

Toxicity

1. Users Guide to Hazardous Substance Data Banks Available in OECD Members Countries, *OECD/GD(91)102*.
2. Lethal Toxicity of Chlorine, *J. Haz.Mat.* 22, 1989 pp13-56.
3. Ammonia Toxicity Monograph, *ICChem E, Rugby*, 1988.
4. S.Schubach " Comparison of probit expression for the prediction of lethal due to toxic exposure" *J. Loss Prev. Process Ind.* vo.8, No.4 pp 197-204 (1995).
5. D.J.Finney "Probit Analysis" *Cambridge University Press, Cambridge* (1971).
6. NIOSH, Pocket Guide to Chemical Hazards, U.S. Department of Health and Human Services (1994).
7. Fairhurst S and Turner RM (1993) Toxicological assessments in relation to major hazards. *Journal of Hazardous Materials* 33, 215-227
8. Davies P C and Purdy G (1986) Toxic Risk Assessments - The effect of Being Indoors. Refinement of Estimates of the Consequences of Heavy Toxic Vapour Releases. *I.Chem.E. Symposium No. 1, Manchester, January 1986*
9. Franks AP, Harper PJ and Bilo M (1996) The relationship between risk of death and risk of dangerous dose for toxic substances. *Journal of Hazardous Materials* 51, 11-34

To fase udslip

10. Hans-Christen Salvesen, Modelling of release at a surface in CFD code FLACS, Ref. No.: GexCon-03-F46103 – 4 (draft report)
11. Dilek Yildiz, Patrick. Rambaud, Jeroen van Beeck, Jean-Marie Buchlin, A Study on the Dynamics of a Flashing Jet, FLIE final report, 2005.
12. P. Bonnet, Description of experimental large scale two-phase release jets, FLIE final report, 2005.
13. A.E. Holdø, R.K. Calay et al. CFD Modelling of flashing jet dispersion, FLIE final report, 2005.

14. BEHNIA M. et al (1999), Numerical study of turbulent heat transfer in confined and unconfined impinging jets, International Journal of Heat and Fluid Flow, No. 20, p. 1-9
15. BOUET, "Descriptif des moyens d'essais pour la réalisation de rejets diphasiques à grande échelle", Ref : INERIS DRA-PBn- 2004-N°41508 /rapport_operation_f_PBn_nv. 1999.
16. Ammoniac – Essais de dispersion atmosphérique à grande échelle, Rapport final, INERIS-DRA-Rbo-1999-20410, Ministère de l'Aménagement du Territoire et de l'Environnement.
17. BROWN, R. and YORK, J. L., (1961).Sprays formed by flashing liquid jets, A.I.Ch.E. Journal 8 (1961) pp149-153.
18. LACKME, Claude (1980), Thermodynamics of Critical Two-Phase Discharge from Long Pipes of Initially Subcooled Water. Heat Transfer in Nuclear Safety Reactors, pp 391-407.
19. SALLET, D. et al., 1978. The influence of the Thermodynamic Properties on the Calculation of Homogenous Mass Flow rates. ASME paper 78-WA/HT-48.
20. D.W. SALLET, 1990. Critical two-phase mass flow rates of liquefied gases, J. Loss Prev. Process Ind., 1990, vol. 3, p. 38.
21. Multi-dimensional modeling of thin liquids films and spray-wall interactions resulting from impinging sprays,International Journal of Heat and Mass Transfer, No. 21, p. 3037-3054
22. VAN DEN AKKER H.E.A., SNOEY H., SPOELSTRA H.(1983) Discharges of pressurised liquified gases through apertures and pipes4 th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, No 33 Vol. 1, p. E23-E35
23. Impact of drops on solid surfaces : self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity Journal of Fluid Mechanics, Vol. 283, p. 141-173

Bilag A Modeller til spredningsberegning

Beregning af gasfanestørrelser kræver flere delberegninger, som dækker de forskellige faser af et udslipsforløb (figur 5.1). De første trin er beregningen af, hvor meget væske eller gas, der bliver frigivet. Andet trin, hvis det er en væske der frigives, kræver beregning af fordampningshastigheden. For gas og alle fordråbede gasudslip kræves beregning af udformningen og fortynding i jetten. Derefter kræves der beregning af gasspredning i form af en fane. Hertil er der to slags modeller der skal anvendes, modeller for udslip af gas med let eller let eller neutral densitets (lettere eller samme densitet som luft) eller tung gas.

Korrekt og veltilpasset valg af modeller er nødvendig til alle disse trin i beregningen. Høj kvalitet i et trin kan ødelægges totalt af dårlig kvalitet i modellering i et andet trin. Valg af model skal også tilpasses formålet med beregningerne. Beregninger til beredskab, skal ofte tage hensyn til ekstreme vejrforhold, for eksempel meget lav vindhastighed, fordi disse forhold kan blive dimensionerende for beredskabsindsatsen. Modeller til beregning af beskyttelse af personale (arbejdspladssikkerhed) er normalt anderledes end de for kommuneplanlægningen, fordi de gængse spredningsberegninger er uegnede for beregning af spredning på meget kort afstand.

Der refereres tit i dette kapitel til de hollandske Yellow, Green og Purple Books (refs. 4,5 og 6). Disse bøger er vigtige, fordi de giver en grundig vejledning i risikoanalyser for olie- og kemiinstallationer og transport. Der findes andre vejledninger, men ingen i det samme klasse af grundighed, og ingen andre så bredt anvendt. Der findes dog nyere eksperimentale resultater, som supplerer og går videre end disse bøger. Der findes også en nyere vejledning om risikoanalyse på offshore anlæg, der giver væsentlig forbedringer i styringsprocessen for risikoanalyser.

A.1 Valg af udslips hulstørrelse

Størrelsen af gasfaner er afhængig af størrelsen af udslippet og derfor også af størrelsen af hullet igennem hvilken udslippet sker. Valg af hulstørrelse er en af de største kilder til usikkerhed i de fleste spredningsberegninger. Det er rimeligt nemt at bestemme hulstørrelse ved et totalt rørbrud, men selv her er der problemer. Skal man tage hensyn til udslip fra begge ender af røret eller kun den ende mod lagertanken. Spørgsmålet er undersøgt i ref. 30 hvor faner fra en eller to ende udslip sammenlignes. Udslippet kan i nogle tilfælde være dobbelt så meget, som den fra en enkelt rørende, men er oftest kun lidt højere end fra den ene ende. Spredningsberegningen påvirkes dog meget af, om udslippet sker fra den ene eller begge brudt ender.

Totalt rørbrud er ekstremt sjældent når det gælder toksiske stoffer. Totalt rørbrud er ikke ualmindeligt (dvs. en eller to gange om året på verdensplan) i naturgaslednin-

ger. Et antændt gas udslip fra et mindre hul kan udvikle sig til en totalbrud, ved at røret svigter yderligere på grund af opvarmning. Mere almindelige er "fiskemunds huller" hvor røret splittes delvis åbent (se figur A.1). Disse sker pga. overtryk eller fra en delvis svækkelse af rørvæggen, eller oftest en kombination af disse. Langt de fleste udslip sker dog fra mindre huller i rør, fra flangelæk, fra svigtende flanger, fra revner i beholdere, eller fra åbne eller lækkende ventiler. Eksempler på disse typer af udslip gives i figur A.2 til A.6.



Figur A.2 Fiskemundsåbning pga. væskehammer i et propanrør



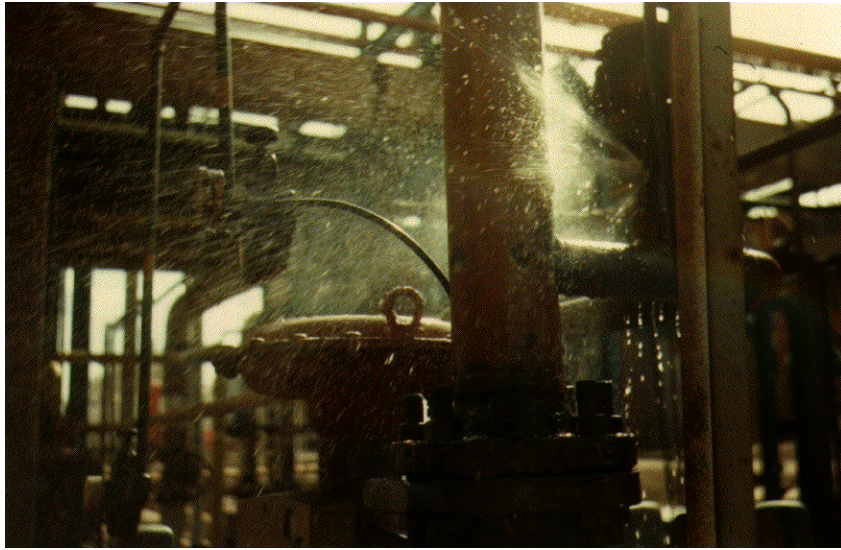
Figur A.3 Mindre læk af syre fra en flange



Figur A.4 Totalbrud i et 12 tomme PVC rør til syre, der skyldes fejlmontering af en ekspansionsbælg



Figur A.5 Ventil knækket fra en syretank pga. stød under vedligehold



Figur A.6 Læk af saltsyre og ethylendiklorid pga. tæring



Figur A.7 Udslip af klor pga. tæring ved en svejsning



Figur A.8 Et mindre udslip af gas (propylen) pga. en ventillæk. Gassen er kold, fordi det kommer fra dampende væske. Bemærk at vinden blæser gassen tilbage mod udslipsretningen.



FigurA.9 Et knækket skueglas som kilde til et udslip (etylen gas og olie).



Figur A.10 Tæring som årsag til gasudslip i en vent linie.

Når man tager den store mængde forskning i gasspredning i betragtning er det overraskende, at der kun er meget lidt arbejde om vurdering af hulstørrelser og så godt som ingen om hulform. Dette betyder ikke så meget for beredskabsplanlægning, hvor man ofte er nødt til at tage højde for totalt rørbrud. Det er mere kritisk for risikoanalyser der skal anvendes til kommuneplanlægning eller medarbejderbeskyttelse, hvor hulstørrelser antaget i beregningerne påvirker størrelsen af området hvor risikoen er "uacceptabel".

Der er to relevante studier hvor sandsynlighedsfordelinger af hulstørrelser er blevet offentliggjort, en for offshore olieanlæg (ref. 110) og en for onshore petro- og kemi-anlæg (ref. 111). Begge viser relativ stor afvigelse af aktuelle hulstørrelser, fra dem der anbefales i de nuværende vejledninger om gennemførelse af QRA. Der forventes at der vil komme nye vejledninger i løbet af 2006. Tabel A.1 viser en sammenligning af forskellige valg af udslipstørrelser for rør anvendt til klor gas. De første sæt af hulstørrelser er den, der er anbefalet i den hollandske "Purple Book" (ref. 5), den anden den som er anbefalet i CCPS's vejledning om risikoanalyse (ref. 1), det tredje den baseret på dataindsamlinger i ref. 110.

	Hul størrelse tommer, og frekvens per m. år						Fanelængder, m.		
	Rørbrud		Stor læk		Med. læk		Rørbrud	Stor læk	Med. læk
	100 %						100 %		
Purple Book	1	$1 \cdot 10^{-7}$	-		0.1	$5 \cdot 10^{-7}$	68.2		5.1
CCPS	1	$1 \cdot 10^{-5}$	-		0.2	$23 \cdot 10^{-5}$	68.2		11.2
HSE	1	$6 \cdot 10^{-6}$	0.59	$13 \cdot 10^{-6}$	0.27	$79 \cdot 10^{-6}$	68.2	41.6	16.1

Tabel A.1 Hyppigheder og fanelængder for udslip af klor gas fra et 1 tomme rør, ved hul 10 m. fra beholder. Faner til LC50 koncentration ved 10 minutters eksponering, 3 m/s vindhastighed, neutral stabilitet.

Der er, som det fremgår af tabellen, ingen forskel i fanelængder for totalt rørbrud, men meget stor forskel i længder for mindre udslip. Bemærk også meget stor forskel i hyppighedsdata.

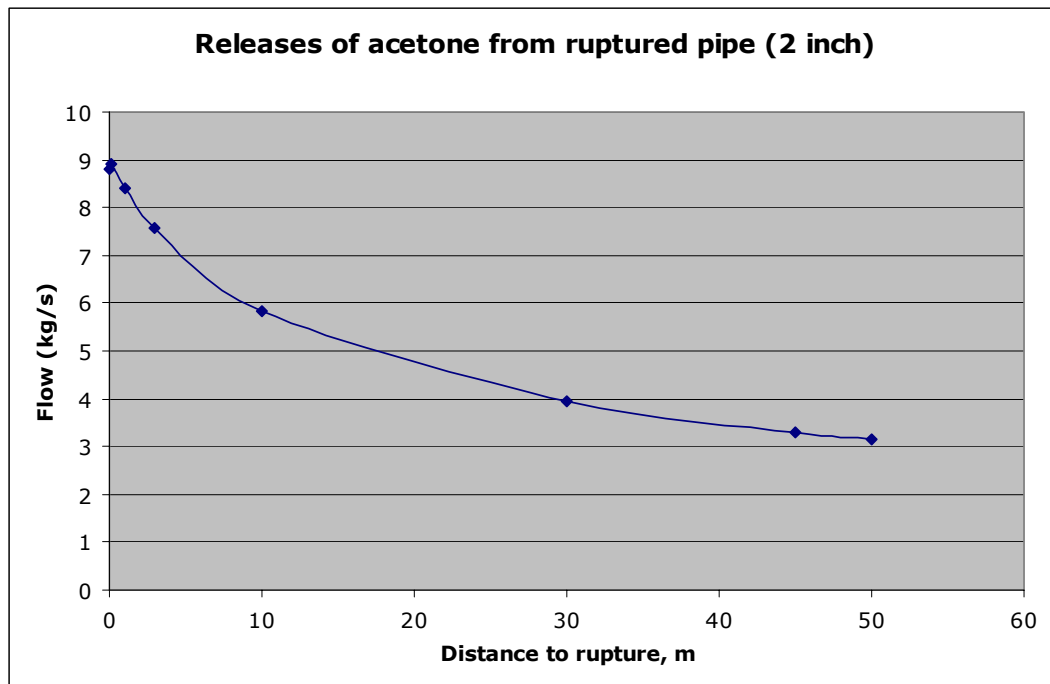
Der foregår arbejde i EU regi for øjeblikket som har til hensigt at fremstille velunderbyggede værdier for hulstørrelser og hyppigheder.

A.2 Beregning af udslipsmængden for væske og gas

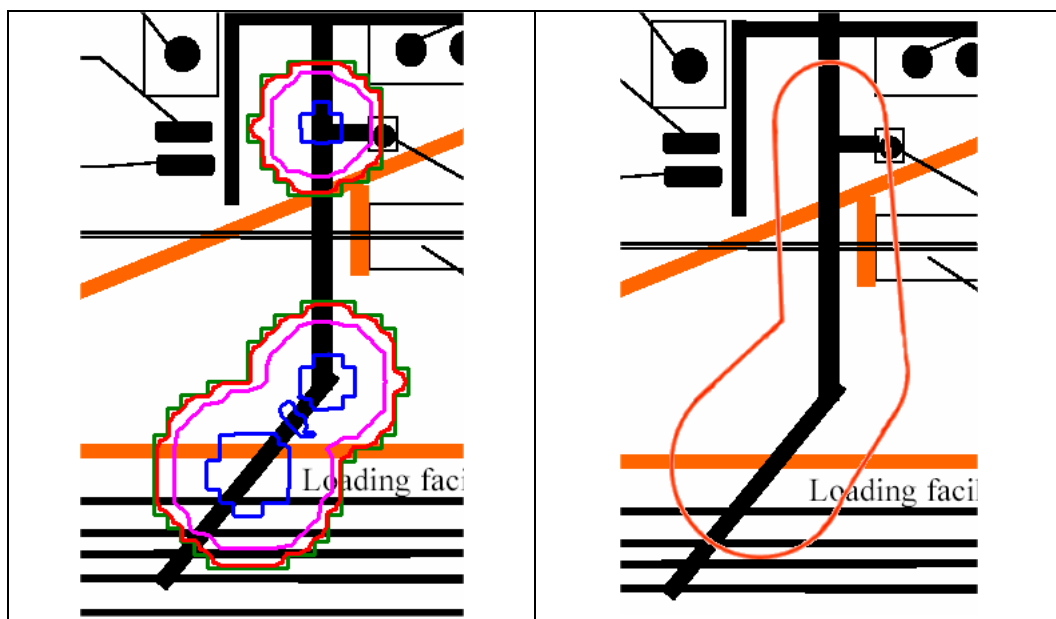
Udslip af toksiske væsker og gasser beregnes med Bernoulli ligningen (væske) eller St. Venant ligningen (gasser). Disse modeller anvendes stort set uden undtagelser i risikoanalyse, idet modellerne er efterprøvet og anvendt igennem i mere end hundrede år. Hvis udslippet sker igennem et rør, bliver friktion i røret ofte vigtig (hvis røret er langt og hullet stort), og forskellige beregninger baseret på Colebrook-White ligningen, som anvendes. I praksis anvendes flere forskellige formuleringer og approksimationer baseret på Colebrook-White modellen, men alle giver resultater nogle få procent af afvigelser fra hinanden (ref. 30).

Ved beregning af udslip fra rør er valget af udslipsstedet på røret vigtig. Den Hollandske Purple Book anbefaler tre placeringer, ved starten, i midten, og ved enden af røret. Vigtigheden af valg af udslipsstedet illustreres i figur A.11, hvor udslipshastigheden for et acetoneudslip fra et brud i et 50 m langt 2 tommer rør, fra en 4 m. høj tank beregnes. Som kan ses, er der ca. en faktor 3 variation i udslipshastigheden afhængig af bruddets placering. Dette vil give mindst en faktor 50 % variation i gasfanelængden ved fordampning fra det resulterende acetonepøl (ref. 30).

Risikoen ved større afstande vil kunne beregnes med rimelig nøjagtighed ved at anvende de tre udslipssteder. Risikoen indenfor en virksomhed vil ikke kunne beregnes korrekt ved anvendelsen af kun tre udslipssteder. Figur A.12 viser to risikokort, en med beregning hvor kun tre udslipssteder indgår i beregningen og et hvor der anvendes en beregning hvor risikoen justeres i forhold til afstand.



Figur A.11 Variation i udslipshastigheden fra et rør, afhængig af afstanden til bruddet.



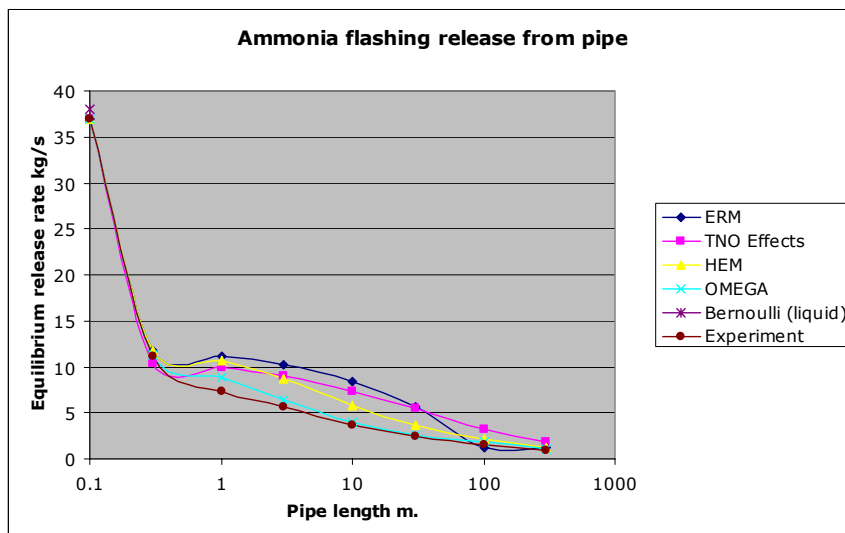
Figur A.12 Risikokort for et typisk væskeudslip. Til venstre, tre punkttilfælde, til højre en eksakt beregning af risikokurven. Den gradvise reduktion i risikozones brede kan ses. Tre tilfælde er tilstrækkelige til at vurdere størrelsen af sikkerhedszonen. To tilfælde vil måske være nok.

A.3 Beregning af tofase udslip

Det er vigtigt, at kunne beregne omfanget af tofase udslip i risikoanalyse og ved beredskabsplanlægning, fordi de største uheld med toksisk gas involverer frigivelse af fordråbede gasarter lagret under tryk. Store mængder frigives gennem et givet hul pga. trykket, hvorefter der sker en umiddelbar spredning af gassen. Et rent gasudslip ved lignede tryk og hulstørrelse giver en væsentlig mindre massestrøm (10 til 15 gange mindre masseflow for de vigtigste toksiske gasser, mens udslip som væske vil give endnu større massestrøm, men kun en relativ lille gasfrigivelse, fordi fordamningsprocessen går relativt langsomt fra væsken.

Mange forskellige metoder anvendes i beregning af tofase udslip. Modeller af Fauske og Epstein (ref. 112), Lakmé (ref. 113) og af Leung (ref. 114, 115) anvendes mest i risikoanalyse, mens den Hollandske Gule Bog anbefaler anvendelsen af en model af Kukkonen (ref. 116). Leungs "homogeneous equilibrium model" (HEM) er basis for en hel familie af metoder. OMEGA metoden (ref. 114) er en approksimation til HEM modellen som er nyttig fordi det ikke er så krævende mht. omfanget og kvaliteten af stofdata der skal anvendes. "Equilibrium rate model", ERM, af Fauske og Epstein er den mest anvendte i risikoanalyse fordi den er meget simpel.

Det har været nødvendigt at tilpasse de oprindelige modeller efter at Fletcher (ref. 117) beviste at overgangen fra væskeflow til tofaseflow tager flere millisekunder, og at flow i korte rør (under ca. 100 mm.) derfor ikke er i ækvilibrium. Udslip hvor det meste af stoffet er væske, vil have et større masseflow end et tofase flow i ækvilibrium. Effekten kan ses i figur A.13.



Figur A.13 Tofase udslipsberegninger for en 2 tomme rør, forskellige modeller. Alle modeller anvender empiriske modeller baseret på Fletcher og Johnsons arbejde for rør under 200 mm i længde. (Data fra Nyren og Winter, ref. 118)

9.3 Udbredelse af væske på jorden

Toksiske væsker spredtes på jorden eller på gulvet i et udslip. Størrelsen af den resulterende pøl er vigtig, idet fordampningsraten af toksiske dampe er i direkte forhold til pølens areal.

Flere modeller for pøludbredelse er blevet foreslået. De mest anvendte er Webber's (ref 119) og Wu og Schroy (ref. 120). Disse to modeller giver højst forskellige resultater. Wu og Schroy modellen giver i nogle implementeringer resultater, som er fysisk umulige (pøldybder på en hundrededel af en millimeter, f.eks.). I praksis anvendes ofte en enklere model, hvor pølens udbredelse bestemmes ud fra en minimum dybde, ofte 1 cm. Arealet fastsættes ved at dividere den frigivne volumen med dybden.

Disse modeller har meget lidt eksperimentel underbygning (overraskende nok, når man tager i betragtning, hvor nemt det er at foretage eksperimenterne). En kendetegn for pølspredningsmodeller der anvendes til risikoanalyse i dag er, at de antager at jorden er flad, og de forsøger ikke at karakterisere ujævnheder. Modellerne er således dømt til at passe dårlig til aktuelle uheld. For at give et bedre grundlag for bestemmelse, har forfatteren foretaget nogle eksperimenter med pøler dannet på 1, 10, 150 og 1000 liter størrelser på forskellige jordtyper (asfalt, bar jord, grus og græs), på flad og skrånende terræn (ref 30). Vigtige resultater fra disse eksperimenter er, at en minimumsdybde af pøler på asfalt er ca. 0.5 mm, og at så godt som ingen industrielle områder er flade.

Andre eksperimenter er lavet af Simmons og Keller (refs. 50 til 52). Et tilfælde af aktuelle udslip er beregnet i deres ref. 52, og vises i figur A.14, sammen med beregninger med flere af modellerne.

Resultaterne er overraskende idet de viser at en af de vigtigste kilder til nøjagtighed i beregning af fane fra spild af toksiske (eller brændbare) væsker er modellerne for pølspredning. Der er dog endnu meget arbejde der bør foretages for at klassificere de forskellige industrielle jordoverflader.



Modellering

Observeret diameter,
18m.

St Venant/Green Amp
model, 18m.

Wu and Schroy,
500+ m.

Webber, 63m.

Webber 1 cm min
ddybde, 34.7 m.

1 cm dybde, 33.9 m.

PHAST 24.9m.

"Shallow layer dynamic
model" 19.7 m.

Figur A.14, Beregninger for et udslip af kerosen , Udslip 59 kg/s, total 7,300 kg

A.4 Fordampning af toksiske væsker

Toksiske væsker, især dem med et højt damptryk, vil danne en pøl ved udslip og fordampe herfra. Fordampningshastigheden er bestemmende for, hvor store de resulterende dampfaner vil være.

Fordampningshastigheden er afhængig af damptryk og konvektion, og er derved afhængig af udslipstemperaturen, jord og luft temperaturen, af solens indstråling, og af køling pga. fordampningen.

Mange fysiske modeller er blevet foreslået til beskrivelse af fordampning. De modeller, der oftest finder anvendelse i risikoanalyse er den af Fleischer (ref. 121), og den af McKay og Matsugu (ref. 47)(baseret på tidligere arbejde af Sutton ref 46). Ved sammenligninger giver disse modeller lignende resultater. McKay og Matsugu modellen foretrækkes, idet den tager hensyn til vindhastighed og til solens indstråling mens Fleischer's model tager kun hensyn til vindhastighed.

MacKay and Matsugu's er stadigvæk den mest anvendte model men bør erstattes af en senere model af Kawamura og MacKay (ref.48). Lebusser og Schecker viste at

disse modeller kan undervurdere fordampningen med op til en factor 2 i nogle tilfælde, men dette arbejde er relativt ukendt (ref.49). Problemet bekræftes fra vores egen, ikke offentliggjort eksperimenter, og af Brighton (ref. 146).

9.4 Jetudslip af gas

En jet dannes, når gas frigives under tryk fra et hul. Jetten har konisk form, idet luft suges ind i jetten. Gas/luftblandingshastigheden falder, idet momentum er konstant, mens massestrømmen vokser med luftmængden. Jetvinklen er i alle tilfælde tæt på 17° for en fri jet. Jetten betragtes som endt, når jethastigheden falder til under vindhastigheden.

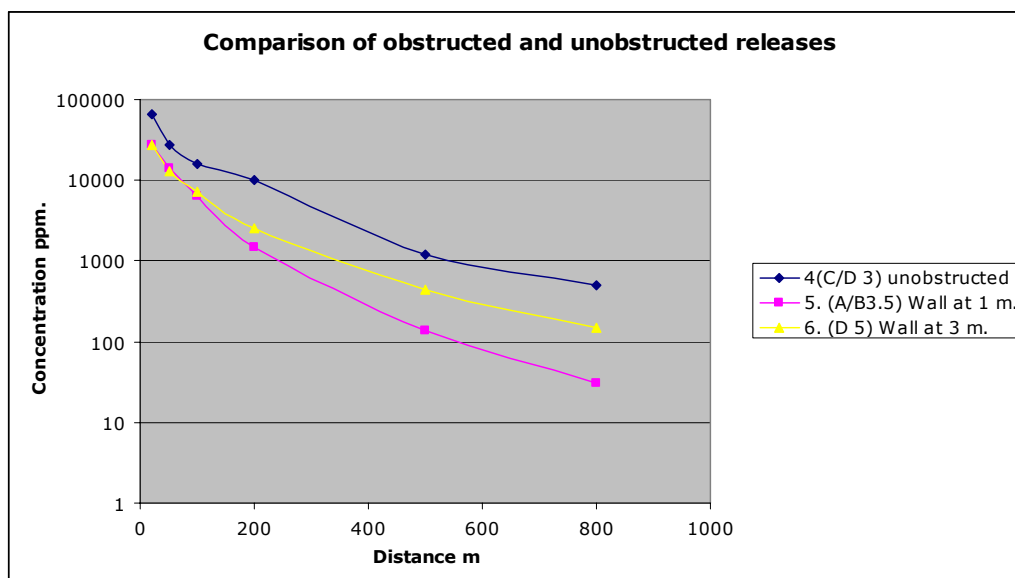


Figur A.15 En jetudslip af gas, der viser den koniske form.

Jetudslip er meget vigtig for beregning af gasfaneudbredelsen idet der sker en stor fortynding af gassen i jetten. Hvis vi for eksempel har en jet med en begyndelseshastighed på 212 m/s, (klor med temperatur på 20°) og vindhastigheden er 4m/s, er faldet i hastigheden en factor 53. For at momentum balancen opretholdes, er massestrømmen ved jettens afslutning øget med en faktor 53, dvs. en fortynding til 40 g gas per m^3 . Typiske koncentrationsreduktionsfaktorer for toksiske gasser i en jet er mellem 10 og 200.

Jettens retning påvirker fortyndingen. Jettens længde bliver størst hvis den er parallel med vindens hastighed. Længden påvirkes ikke meget hvis jetten er på tværs af vinden, men jetten afbøjes. Jetten bliver væsentligt kortere, og fortyndingen større, hvis jetten er rettet direkte mod vinden.

Fortyndingen i jetten påvirkes kun lidt hvis jetten rammer en beholder eller en flad mur, idet den samlede kinetiske energi, og derved også den samlede momentum, ikke påvirkes særligt meget af en enkelt fast forhindring. Hovedvirkningen er normalt kun, at jetten ændrer retning. Figur A.16 viser resultater fra to eksperimentale udslip (ref. 122), en på fri mark, og en rettet mod en mur 20 m fra udslipstedet. Som det fremgår af grafen, medfører muren, at man opnår en fortynding umiddelbart ved udslipstedet, der svarer til fortyndingen ca. 50 m. i faneretning dvs. ca. den samme afstand som selve jetlængden. Bemærk at forskelle i fortyndingen i de enkelte forsøg efter ca 100 m skyldes forskelle i de meteorologiske betingelser imellem eksperimenterne.



Figur A.16 Udslip af ammoniak, uden og med en forhindring

Fortyndingen bliver påvirket i meget stor grad, hvis jetten rammer et område, som er delvist indelukket, eller jetten forekommer indendørs. Fortyndingen påvirkes på to måder. Delvist bliver jettens kinetiske energi reduceret ved turbulens, og delvist udebliver fortyndingen, fordi den gas, der suges ind i jetten, ikke længere er ren luft, men den gasluftblanding, der stammer fra selve jetten.

Disse virkninger er vigtige i alle anvendelser; beredskabsplanlægning, kommuneplanlægning og medarbejderbeskyttelse. Desværre er der ingen af de kommercielt tilgængelige softwarepakker med beregningsmodeller, der i dag tager hensyn til disse effekter. (Dog anvendes CFD programmer ofte til beregning af gasspredning i offshore moduler).

Den simpleste model til beregning af en gasjet er "uniform momentum jet" modellen (ref.123), hvor jetten antages at have konstant koncentration på tværs af strømmingen. Modellen er temmelig nøjagtig ved den første del af strømmingen og er nødvendigvis nøjagtig "i gennemsnit" ved jettens afslutning. SLAB systemet (ref 76) anvender en momentum jetløsning, men tilpasser en gaussiske (klokkeformet) fordeling af koncentration på jetten, således at jetten bliver længere men også smallere, og med varierende koncentration på tværs af jetretningen. Modellen svarer mere til observationer fra aktuelle forsøg.

Cohen og Rhode (ref 124) har lavet en empirisk model for jetudbredelse, og modellen anbefales i den hollandske "Gule Bog". Modellen har en svaghed, idet den er baseret på udslip med tryk kun på op til 2 bar.

Modeller er blevet lavet til udslip af tung gas fra højde. Modellerne beskriver fanens form ved fald mod jorden. Den hollandske "Gule Bog" (ref. 3) og CCPS (ref. 1) anbefaler modellen af Hoot, Meroney og Peturka (ref 125).

Om et udslip af tung gas sker fra højde eller ved jorden, gør ikke meget forskel ved større afstande, for eksempel udenfor lageret ved en stor fabrik. Forskellen kan dog være stor indenfor hegnet, hvor det kan være vigtigt at vide, om en jet af gas rammer et bestemt bygningsluftindtag, eller om det passerer over en bygning. Et typisk problem er vurdering udslip af tung gas fra et ventrør, der har udkast over tagniveau; for eksempel trykaflastning på en kemisk reaktor.

A.5 Jetudslip af fordråbede gasarter (tofase jet)

Udslip af fordråbede gasarter, som for eksempel klor, ammoniak eller svovldioxid er ofte de vigtigste uheldsscenarier i en planlægning. Årsagen er, at udslippet er større for en given hulstørrelse og tryk, end ved et rent gasudslip og spredningen er større end ved et væskeudslip.

Modeller til udformning af en tofase jet er simple udbygninger fra momentumjetmodellen. Der skal tages højde for "rain out" af væsken fra jetten, og for fordampning af væskens dråber.

Der har været meget diskussion om dråbestørrelser og omfang af rain out i videnskabelige kredse. Specielt en model lavet af Woodward og Papadourakis (ref. 126, 44) er vigtig, fordi den blev lavet til vurdering af udslip af fluorbrinte (en stor risikofaktor ved nogle raffinaderier, især i USA) og fordi modellerne og teorien afveg fra anden forskning. Der har derefter været megen forskning med anvendelse af avancerede målemetoder til måling af dråbestørrelser og – hastigheder. I dag findes der modeller som er baseret på eksperimentel detailviden. Disse modeller er endnu ikke inkluderet i kommercielt konsekvensberegningssoftware, men der er forskningsbase-

rede programmer der giver bedre resultater og nye modeller er på vej, som tager højde for de seneste eksperimentale resultater.

Rain out er ikke specielt vigtigt ved beregning af fri udslip af ammoniak, klor eller svovldioxid fra lager med omgivelsernes temperatur. Trykket ved udslip for disse stoffer er af størrelsesorden 6 til 10 bar, og dette tryk medfører et meget voldsomt jetudslip. Dråberne er små, og hastighederne store, således at rain out er minimalt. Rain out er derimod meget vigtigt for jetudbredelse af stoffer som butan og fluorbrint, hvor lagertrykket ikke er så højt, og hvor kogepunktet er kun lige så højt, at der er en lille fraktion af stoffet der fordamper til gas. Rain out er også vigtig for stoffer som er væsker, men som behandles i processer over deres kogepunkt.

Rainout bliver også vigtig, hvis jetten ikke er fri, men derimod rammer en væg eller andet udstyr. Rainout ved ammoniak udslip kan i disse tilfælde være i størrelsesorden 60 % af udslippet, med betydelig reduktion af en pøl som indeholder det meste af det frigivne stof. Pølen fordamper langsomt, således at fanen er kortere, men mere langvarig. Der er foretaget eksperimenter i Frankrig, hvor der blev konstateret op til 65 % tilbageholdelse af flydende ammoniak ved at et jetudslip blev rettet mod bunden af et bassin og lignende store mængde af ammoniak blev tilbageholdt ved at jetten ramte en væg. (ref. 122) Disse observationer er vigtige, fordi de indikere en måde, hvorpå man kan reducere udslip med rene passive foranstaltninger. Forfatteren anvendte teorien for virkning af "impingement scrubbing" til at modellere effekten med god overensstemmelse med observationerne.

A.6 Fanespredning – let gas

Beregninger for spredning af lette gasser (lettere end luft eller neutrale gasser, med densitet omtrent det samme som luft) er i så godt som alle tilfælde baseret på gaussiske spredningsmodeller, med konstanter fastsat empirisk. De oprindelige modeller blev opstillet af Pasquill, men ændrede empiriske konstanter blev senere opstillet af Smith og af Turner og Pasquill (refs. 81,82 og 83). Tidlige modeller beregner spredningskonstanter på basis af faktorer, som er lette at observere – vindhastighed og stabilitetsklasser. Nyere modeller baserer spredningskoefficienten på Monin Obhukov længde (en karakteristisk længde, der afhænger af solindstråling og jordvarme udstråling) og af jordens ruhed. Eksempler er AERMOD modellen fra US EPA, ADMS modellen fra Cambridge Consultants, og OML modellen fra Dansk Miljø Undersøgelsen (refs. 55 til 57)

At repræsentere stabilitet med en kontinuerlig parameter, Monin Obhukov længden, giver i praksis ikke mere nøjagtighed i repræsentationen af stabilitet, med mindre man anvender meteorologi data der angiver målte Monin Obhukov længder. Man er stadigvæk i de fleste tilfælde nødt til at basere beregninger i et aktuelt tilfælde på meteorologiske observationer, der angiver stabilitetsklasser. I så godt som alle tilfælde er de eneste observation, der er tilgængelige, vindretningen, vindhastigheden og skydækket. Disse omformes til stabilitetsklasser og Monin Obhukov længden be-

regnes fra disse. Den væsentlige ændring i beregninger med de moderne modeller, er derfor ikke, at man bedre kan karakterisere meteorologiske betingelser, men derimod, at man kan modellere de ændringer af faneudbreddesparametre der sker med højden.

Spredning af let gas involverer stigning af gasfanen. Forskellige semiempiriske modeller er blevet udviklet. Den oprindelige model fra Briggs (ref. 84) giver dog lige så gode resultater som andre.

Fanespredningsmodeller blev udviklet på basis af observationer over relativt store afstande. De fleste modeller følges af en advarsel om, at de ikke er nøjagtige på kort afstand, f.eks. under 200 m. Dette er vigtigt for risikobedømmelser, idet mange toksiske faner i praksis er kortere end 200 m.

De oprindelige passive spredningsberegninger blev udviklet for åbent terræn. Et ruhedsparemetre anvendes til at karakterisere de forskellige jordoverflader, der påvirker den atmosfæriske turbulens. Modellering med større ruhedsparemetre er blevet anvendt for at beregne spredning i industrielt terræn. Der har i den senere tid været interesse i udvikling af nye modeller, der tager mere eksplicit højde for bygninger og lignende forhindringer (ref. 127 samt afsnit A.12).

A.7 Spredning af tunge gasarter

Tunge gasarter, som klor eller svovl dioxid, falder mod jorden ved frigivelse. Fane spredes med tyngdekraften ("slumping") og der dannes flade, lave skyer eller faner.

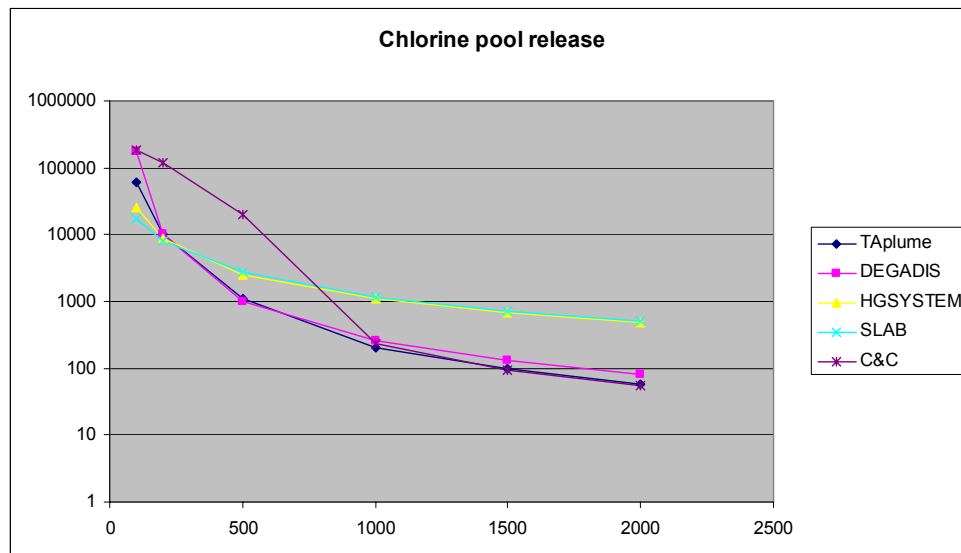
Der er i tidens løb blevet udviklet mange modeller til beregning af tung gas spredning. Langt de fleste er såkaldt "top hat" modeller, hvor fortynding af gassen beregnes fra en "blandingshastighed" ovenfra og fra siden. Koncentrationen i fanen antages at være konstant på tværs af fanen, i bredden og i højden. Forskellige teorier er blevet udviklet til beregning af blandingshastigheden. Så godt som alle modeller anvender to empiriske konstanter, for at tillade tilpasning af modellen til eksperimentelle resultater.

Der kan skelnes imellem modeller der behandler tung gasspredning og neutral spredning separat, med et overgangskriterium (f.eks. Cox Carpenter modellen ref. 128) og dem hvor der sker en glat overgang imellem tung gas og neutral gasspredning (f.eks. Ermak's SLAB model ref. 76)

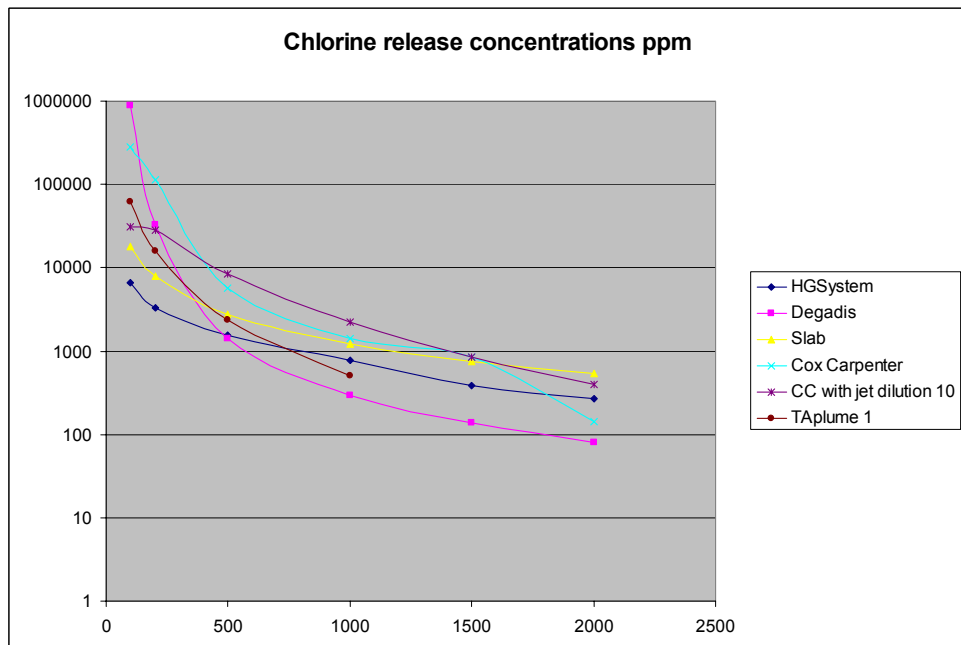
Mange af programmerne der anvendes i dag til beregning af tung gas spredning er "integrerede modeller", der kombinerer f.eks. jetspredning og fanespredning, f.eks. SLAB, DEGADIS, HG SYSTEM, og UDM (ref 76, 77, 78, 129). Dette gør det vanskeligt at sammenligne modellerne, specielt fordi de scenarier der beregnes af forskellige modeller ikke altid er de samme. Modellerne er blevet undersøgt og "skilt ad" (ref. 30) således at flere modeller kan sammenlignes på lige fod. Sammenligningsresulta-

ter for nogle scenarier er vist i figur A.19 og A.20. Som det kan ses, er der relativ stor forskel imellem modellerne, selv om de fleste er blevet kalibreret mod eksperimentelle resultater.

Af denne grund er modellerne blevet sammenlignet med eksperimentelle resultater i flere eksperimenter (ref. 30).

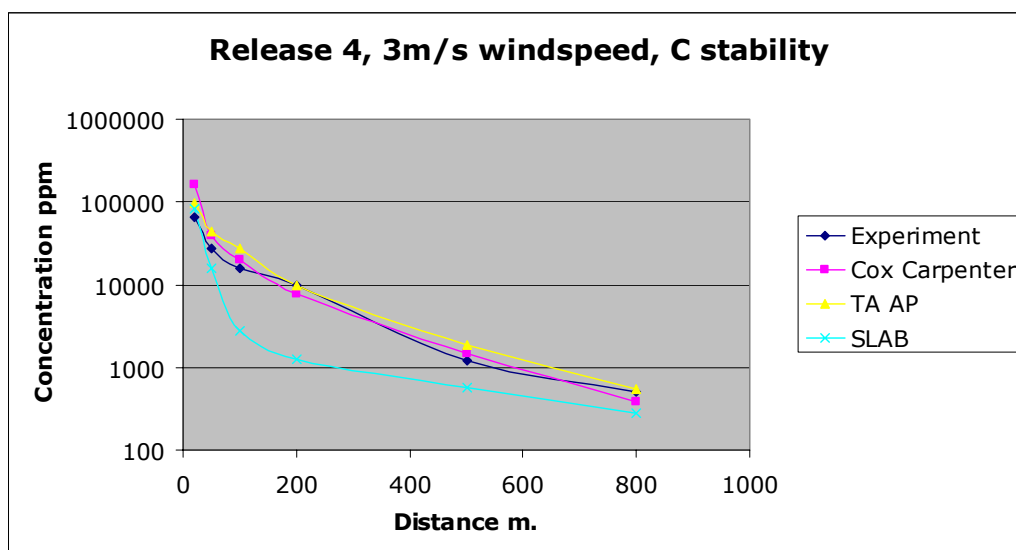


Figur A.17 Sammenligning af nogle tung gas beregningsresultater, udslip fra en kryogen pøle af klor



Figur A.18 Sammenligning af nogle tung gas beregningsresultater, udslip fra en jet udslip af klor

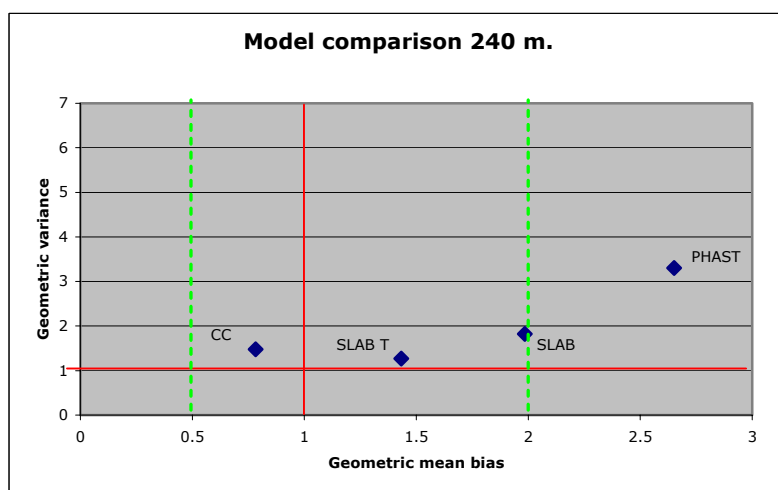
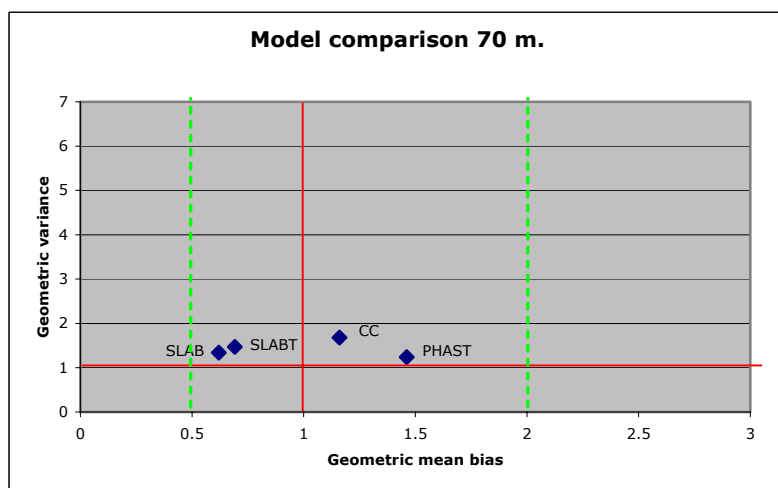
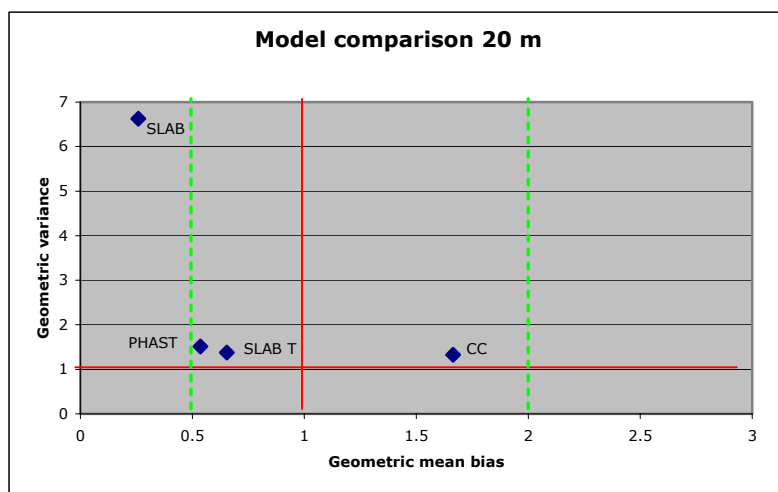
En serie eksperimentale resultater er valgt her som basis for sammenligning. Eksperimenterne er udført af INERIS/Ecole des Mines (ref. 122) og er specielt anvendelig i det nuværende sammenhæng fordi de omfatter ammoniak udslip fra relevante rørstørrelser; fordi de er velinstrumenteret ude til en lang afstand (800 m); og fordi de omfatter udslip med forhindringer. Resultater fra sammenligningen vises i figur A.19. Som det kan ses, passer alle modeller til mindst et sæt af resultater. Problemet ligger delvist i at modellens forfattere gerne vil beholde modellernes teoretiske integritet, og delvist at det er umuligt at tilpasse modellerne hvor der er mange forskellige indgående parametre med brug af kun to tilpasningskonstanter.



Figur A.19 Sammenligning af eksperimentale og beregningsresultater for nogle beregningsmetoder (ref. 30)

Der er lavet mange studier med sammenligning af modeller med eksperimentalt data. Nogle af de mest autoritative er lavet af Hanna og hans kolleger, med en kontinuerlig indsats siden 1987, det seneste undersøgelse i 2004 (refs. 25 til 28). Hannas metode til evaluering af kvaliteten af beregningerne baseres på beregning af geometric mean variance og geometric mean bias. Det først er et mål for, hvor meget spredning der er i beregningerne. Det andet er et mål for systematiske afvigelser til den ene eller anden side. Ideelle værdier er en for begge mål.

Hanna og andre målte den samlede overensstemmelse imellem beregninger og eksperimenter. En bedre sammenligning fås, hvis man beregner kvaliteten af overensstemmelse for forskellige afstande, fordi forskellige fysiske fænomener sker langs gasfanen. En sådan evaluering er blevet lavet her, med sammenligninger i forhold til FLADIS eksperimenterne i figur A.20. Værdier for geometric mean bias mellem 0.5 og 2 indikerer at værdierne ligger indenfor en faktor 2 af eksperimenterne. Værdier under 1 indikerer underprediktering. SLAB T er en tunet version af SLAB modellen.



Figur A. 20 Evaluering af fire gasspredningsprogrammer

A.8 Meandering (Vandring af gasfaner)

Modellerne beskrevet ovenfor er i de fleste tilfælde baseret på en antagelse om konstant vindretning. I praksis varierer vindretningen, således at faner vandrer fra side til side. Dette kan fortolkes som en slags stor-skala turbulens.

Vandringen medfører at fanen kan betragtes som en meget bredere fane, med lave koncentration. Mange spredningsmodeller indeholder en suppleringsmodel, som tillader at man kompenserer for vandringen, med et frit valg af perioden over hvilken gennemsnits koncentrationen varierer. Typiske anvendte værdier er 10 eller 30 minutter.

Fanevandring introducerer flere problemer for vurdering af risikoen eller for beredskabsplanlægning.

- a) Mange udslip varer mindre end 10 minutter. Valg af vandringskompensering burde derfor tilpasses den aktuelle forventede udslipstid.
- b) Som beskrevet i kapitel 5 er toksicitetsvirkninger i de vigtigste tilfælde ikke lineært afhængig af koncentrationen. Anvendelse af formler for beregning af gennemsnits koncentrationer over en periode vil i disse tilfælde undervurdere udslippets toksiske virkning.
- c) Vandringseffekter er vigtige for beredskabsindsats, fordi man der er nødt til at tage hensyn til ændringen i vindretningen. Der er dog i dag ingen simpel måde at rapportere vindretningsstabiliteten, og programmer til beregning af faner viser ikke disse virkninger grafisk.

9.5 Meget lave vindhastigheder

En af de alvorligste situationer ved et udslip af toksisk gas opstår når vindhastigheden er meget lav, og atmosfæren meget stabil. I disse situationer er der meget lidt turbulens, og fortynding af gassen med luft foregår meget langsomt. Under disse betingelser kan selv et kortvarigt udslip have en langvarig påvirkning.

Ingen af de almindeligt anvendte modeller for tung gasspredning er i dag i stand til at beregne disse situationer korrekt, og i så godt som alle tilfælde undervurderer risikoen.

UK HSE og Lines g Deaves i en UK HSE forskningsrapport (ref. 130) har undersøgt muligheden for at lave beregninger. Deres forslag til modeller beskrives i bilaget..

Lave vindhastigheder kan være vigtige i særsituationer. Et udslip af oleum i Karlstad medførte at ingen kunne bevæge sig udendørs i over tre dage.

A.9 Spredning i terræn

Standardmodeller for spredning af let gas som AERMOD og ADMS er blevet udviklet til evaluering af neutral gasspredning i kuperet terræn. De fleste modeller beregner en blanding af en spredningsberegning uden at tage hensyn til kuperet terræn og en beregning, af hvordan luftstrømmen følger terræn.

Tunggasspredning i terræn er vigtig, fordi frigivelse af tung gas på skråning medfører hurtigere spredning end på flad mark.

- tung gas kan samles i fordybninger i terrænet
- tung gas vil ofte ikke spredes op ad en bakke, før det er blevet fortyndet ved dispersion.

Klor blev frigivet ved afsporing af et godstog i Missisauga, Canada i 1979. Lommer af klorgas hængte i lavninger for fire dage.

Modeller til beregning af spredning i terræn er blevet udviklet som forskningsprojekter, men anvendes rutinemæssigt kun i Belgien til risikoanalyse og til beredskabsplanlægning.

Der er i praksis kun få steder i Danmark hvor der er en mulighed for toksisk gasudslip, og hvor der er væsentlige højdeforskelle i terrænet.

A.10 Bygningseffekter

Luftstrømmen forstyrres ved gasspredning forbi en bygning. Gassen bevæger sig op over bygningen og gasfanen kan løftes betydeligt. Som tommelfingerregel kan der ske et løft af op til 1.4 gange bygningens højde. Bag bygningen dannes der en hvirvel, hvor gassen opholder sig, og hvor der foregår en omfattende opblanding af gas og luft.

Koncentrationen i fanen bag bygningen kan beregnes med en meget simpel model, hvor koncentrationen bag bygningen er uniform, fanens hastighed er omgivelsernes vindhastighed og fanens bredde og højde er lidt større end bygningen. (Disse modeller er næsten lige så nøjagtige som meget mere udviklede modeller)

Der er blevet udviklet simple modeller til anvendelse til beregning af spredning af gasarter i bymiljø, specielt "urban canyons" dvs. slugter imellem høje lejlighedskomplekser, kontorbygninger og højhuse. En af de førende er den danske OMPS model. Modellen beregner opbygningen af gaskoncentrationer i en slugt, samt frigivelse af gassen i laget oven for bygninger. Slugtmodellerne er hovedsageligt blevet anvendt til beregning af trafikforureningekoncentrationer.

Spredning af tung gas i byområder kræver særlige modeller. Flere femgangsmåder beskrives i ref. 127

A.11 Separation

Spørgsmålet om en gasfane stiger til vejrs er vigtig i nogle tilfælde, især for gasser som ammoniak og for gasser der frigives fra ulmende brande. Fanen stiger ikke til vejrs hvis turbulent dispersion forårsager, at gassens udbredelse nedad foregår hurtigere end fanens stigning. Dette vil ske, hvis luft/gas blandingen kun er lidt lettere end den omgivende luft.

Flere modeller er blevet udviklet til beregning af separation (se f.eks. ref 131).

Det er klart at en fane vil i de fleste tilfælde være mindre farlig hvis den stiger til vejrs. Det er dog vigtigt at huske, at en fane, som allerede er steget højt, i nogle tilfælde kan ramme et højhus. Beregning af udbredelsen af en fane i den tredje dimension i højden er derfor vigtig. (Ingen af de kommercielle softwarepakker undersøgt i dette projekt havde faciliteter til disse beregninger).

Separation er især vigtig ved dannelse af toksisk røg i en brand. Røgen vil oftest stige til vejrs ved en sådan brand, hvis branden danner normal varme. Røgen i en brand vil være køligere under brandslukning eller ved sprinkling. Lignende begrænsende temperaturer vil opstå ved brande i bygninger, hvis luftforsyning til branden er begrænset.

UK HSE har givet modeller til beregning af et separationskriterium for røgfaner i lagerbyggningsbrande. (www.hse.gov.uk)

A.12 Indendørs udslip

Udslip af toksiske gasarter indendørs kan medføre stor fare for medarbejdere. Eksempler er spild i bygninger, der anvendes til fin kemikalieproduktion og udslip af ammoniak i køleanlægskompressorrum.

Der er udviklet flere modeller til beregning af gasspredning indendørs. Simple analytiske modeller baseret på ideel opblanding i et rum, og en massebalance i mellem gasfrigivelse i rummet, og tab igennem ventilationer, er de mest anvendte. Til mere præcise beregninger anvendes oftest CFD beregninger (se nedenfor, afsnit A.16)

Disse indendørs spredningsberegninger er vigtige for beregning af beskyttelse af medarbejdere. De er også vigtige for beregning af faner udendørs, idet:

- Ventilationen, især tvungen ventilation, kan medføre en betydelig fortynding af gassen
- Selve rummet vil forhindre jetfortynding af gassen.

Disse to forhold kan medføre helt forskellige udgangsbetingelser for den udendørs spredningsberegning.

A.13 Brud på trykbeholdere

Brud på trykbeholdere i en virksomhed sker sjældent. Et tilfælde af brud på en ammoniakbeholder kendes (Potschefsroom, Syd Afrika, i 1973, ref. 132), og nogle for klorbeholdere. Der er ingen kendte tilfælde af brud på almindelige lagringsbeholdere blandt de nyere generationer af trykbeholder, hvor der anvendes røntgeninspektion af svejsninger. (Se dog advarsler fra USEPA, ref. 133 for tilfælde af brud på nogle små lavtryks beholdere i 2003). Hyppigheden af sådanne totalbrud på moderne statisk tryktanke vurderes normalt til at være ca. 1 per 10 millioner år. (ref. 5)

Der forekommer derimod meget oftere (ca 1 pr. år) brud på jernbanetryktankvogne, med mange rapporterede tilfælde i USA og Canada.

Ved brud på en trykbeholder, der indeholder en fordråbet gasart, slynges gas og væske ud. Mængden af væske der slynges ud er afhængig af gstrykket. For en gas som ammoniak, med en lagrings temperatur på 15°C , slynges ca. 80 % af væsken ud. (Logisk set vil mængden også afhænge af hullets størrelse).

Mængden af gas der frigives ved beholderbrud beregnes meget nemt ved at anvende "flash fraktion" beregninger. Eksperimentelle undersøgelser af den frigivne mængde af væske er foretaget af Hess et al. i ref. 135 og af Fletcher i ref 134. Empiriske formler er opnået.

Ved bruddet dannes der en sky af gas, luft og væskedråber når gas og væske slynges ud af beholderen. Størrelsen af denne sky er vigtig, idet den turbulente iblanding af luft udgør den første fortynding af gasskyen. Fortyndingsgraden er omkring en faktor 10 for fordråbede gasarter med et højt damptryk, som f.eks. ammoniak og klor. Empiriske formler til beregning af denne fortyndings faktor er blevet udviklet, men antallet af eksperimenter er begrænset.

Skyen falder og spredes efter den første dannelse, og dermed dannes en lav, flad sky ("slumping"). Teoretiske modeller er udviklet til denne fase, af Van Ulden, ref. 135 og i ref. 136. Modellerne er blevet efterprøvet eksperimentelt, især ved Thorney Island eksperimenter (ref 137).

Skyen bevæger sig med vinden efter den første "slumping fase". Teorier for spredningen ligner dem for gasfaner, med formler for opblanding med luft ved kanten af skyen og ovenfra.

Modeller til beregning af gasskyer er blevet vurderet af Brighton (ref. 144) og af Hanna (ref.23)

A.14 **Modeller til beregning af risikoreduktion**

Forslag til risikoreduktion er et krav i Sevesodirektivet og de tilhørende vejledninger. Der er flere metoder til begrænsning af skader fra gasudslip:

- Bygning af mure og volde til tilbageholdelse af gas og dråber af fordråbede gasarter. Denne metode er passiv og kræver ikke aktivering for at kunne fungere. Modeller for, og eksperimentelle bekræftelse af virkningen af disse metoder gives i ref. 67 og 68
- Anvendelse hurtiglukningsgsventiler ("Emergency Shutdown Valves"). Korrekt analyse af disse kræver at gasspredningsberegningsprogrammer kan håndtere beregning af korte udslip.
- Vandgardiner og vand sprøjter fra håndslanger og vandkanoner. Virkningen af disse afhænger af gassen. Ammoniak, for eksempel, absorberes i vandet, mens de fleste andre gasser bare bliver fortyndet. Modellering af disse foranstaltninger skal kunne beregnes korrekt, fordi eksperimenter har vist, at mange systemer vil være ineffektive på grund af at vandet blæses væk af gas jet. Systemerne fungerer godt, hvis de placeres i den rigtige afstand. Modeller for, og eksperimentelle bekræftelse af virkningen af disse metoder gives i f.eks. i ref. 139, 140
- Dampgardiner anvendes ikke i Danmark, men skulle måske kunne beregnes. Modeller for, og eksperimentelle bekræftelse af virkningen af disse metoder gives f.eks. i ref. 141
- Nedlægning af skum er en effektiv metode til at begrænse dampe fra spildte toksiske væsker og er en af de vigtigste beredskabsaktioner til begrænsning af udslip af toksiske faner. Virkning af skum beskrives i ref. 142.

Alarmering, vandgardinaktivering, og lukning af ventiler er næsten altid afhængig af fungerende gasdetektorer. Vurdering af disse alarmer kræver anvendelse af gode gasspredningsberegninger i bygninger, i fri områder og i områder med murer i tre dimensioner. Mange gasalarmsystemer fungerer dårligt, især i fri områder, fordi gassen kan blæse forbi gasdetektorerne. Forfatteren har for eksempel observeret gasudslip omringet med seks gasdetektorer i 6 m. afstand, hvor gasfanen blæste forbi alle detektorerne. Det er ikke muligt at opstille generelle regler for projektering af kritiske alarmsystemer, og gasspredningsberegningssystemer bør altid anvendes. Dette kræver normalt de mere avancerede beregningsmetoder.

A.15 Usikkerheder i modelberegninger

Som det kan ses fra nogle af sammenligningerne, er der usikkerheder i mange af beregningerne til spredning af toksiske gasarter. Usikkerheden er stor selv i områder hvor der har været meget optimering og mange eksperimenter og validering. Hanna et. al. fandt at de to mest avancerede modeller, ADMS og AEROMOD, undervurderede koncentrationer med i gennemsnit henholdsvis 20 og 40 % og gav resultater der afveg med mere end en faktor 2 i henholdsvis 47 og 54 % af de undersøgte scenarier. De bedste tunggas spredningsberegninger afveg fra eksperimentale resultater med en faktor af ca 30 %.

Afvigelser imellem teori og praksis er ikke specielt vigtig i risikoanalyse til kommuneplanlægning hvis:

- a) der ikke er en konsistent under- eller overvurdering,
- b) koncentrations usikkerheder er under en faktor 2.
- c) der anvendes et "blødt" kriterium for koncentrationens toksiske effekt, f.eks. en probitkurve (se næste kapitel), således at der ikke opstår situationer hvor risikoen i en landsby ændres fra 0 til en høj værdi med kun en lille ændring i kriterier, modeller eller scenario opstilling.

Med andre ord, risikoanalyseresultater vil være robuste, fordi afvigelse i en retning ofte vil opvejes af andre afvigelse i den modsatte retning. Opmærksomhed af denne form for udjævning er afhængig af, at der foretages beregninger for mange scenarier, og at beregningsformen ikke introducerer specielle usikkerheder. (Eksempler på sådanne usikkerheder er anvendelse af en vindrose med kun få vindretninger)

Der blev foretaget undersøgelser for at underbygge denne observation i ref.30 Værdier for parameter som hulstørrelse, spredningskonstanter, vindhastigheder blev valgt tilfældigt fra sandsynligheds distributioner i stedet for at anvende optimale eller autoriserede værdier. Distributionerne blev baseret på aktuelle observationer af usikkerheder, for eksempel i svigthyppighedsdata og i modelforudsigelser. Risikoværdier ændredes ikke meget ved anvendelse af denne form for beregning, hvor der blev taget hensyn til usikkerheden. Resultaterne varierede derimod meget med:

- Anvendelse af forenklede modeller
- Anvendelse af forkerte modeller (f.eks. fordi software ikke pakker indehold de rigtige modeller, eller fordi modellernes anvendelsesområde er dårlig beskrevet)
- Anvendelse af modeller med systematiske svagheder i forhold til nogle scenarietyper

Situationen er anderledes for beredskabsplanlægning, hvor man er interesseret i den aktuelle risiko ved et specifikt scenario. Modelusikkerheder er i dette tilfælde meget vigtige. Man vil normalt blive tvunget til at vige til den forsigtige side dvs. at anvende den model, der giver det værste resultat. (Dette må betragtes som den korrekte fremgangsmåde så længe at resultatet er troværdigt, fordi alternativet kunne være, at man sat menneskeliv på spil.) Hovedpointen er, at enhver beregning der anven-

des til beredskabsplanlægning skal være så nøjagtig som muligt, og specielt skal tage højde for specielle effekter som f.eks. udslip rettet mod jorden, for at sikre at der ikke opstår uventede situationer med speciel høj risiko.

Man vil også i en aktuel beredsskabssituation have en anden kilde til usikkerhed, idet udslipstørrelsen ofte ikke kendes, før man er kommet tæt på. Man er derfor igen tvunget til at vige til den forsigtige side i fastsættelse af modellens indgående parameter. Det er unødvendigt at anvende modeller, som er meget mere præcise end den viden man har til rådighed angående modellens parameter. Men det er nødvendigt at anvende modeller, som er fleksibel og tager højde for alle fænomener der øger risikoen, f.eks. opsamling af gas i lavpunkter.

Der laves meget arbejde for at minimere usikkerheden i gasspredningsberegninger, med store eksperimenter og meget teoretisk arbejde. Det er forfatterens erfaring at lang de største fejl i beregningerne skyldes at de forkerte beregninger foretages. Eksempler på sådanne fejl er:

- Beregninger baseret kun på store udslip, som derved undervurderer risikoen for medarbejdere, hvor små udslip giver det største bidrag til risikoen
- Beregninger baseret på langvarige udslip, når langvarige udslip er umulige, fordi der ikke er stof nok til at opretholde udslipstrømmen. Sådanne beregninger vil normalt give resultater der afviger på den "forsigtige side", men sådanne beregninger vil alligevel være farlige, fordi de undertrykker vigtigheden af hurtige reaktioner for at standse udslippet, og kan derfor resultere i forkert fokus i en beredskabsplan. (Eksempler kendes af beredskabsplaner med farlige evakueringer af tusinde af personer, der blev erstattet af planer for at sikre lukning af ventiler, og forbedring af sikkerhedsudstyr til personale.
- Beregninger der ikke tager højde for vigtige detaljer i udslip og spredningsforløbet, f.eks. spredning opvinds ved store udslip, og som derefter anvendes til udvikling af mangelfuld eller potentielt farlige beredskabsplaner.
- Beregninger der baseres på en standard 30 minutters eksponering, i tilfælde hvor udslippet tiltager flere timer eller dage til at få standset.

Det er derfor vigtigt at tilpasse beregninger til de praktiske forhold, og ikke kun til de eksperimentale resultater man har til rådighed eller til de modeller der findes i en bestemt programpakke.

Tabel A.2 viser usikkerhedsfaktorer for forskellige delmodeller i en spredningsberegning, og den samlede usikkerhed, udtrykt som variation i afstanden til en bestemt koncentration, og afstanden til en bestemt risikoniveau. Usikkerhedsfaktorer klassificeres som:

- Metodeusikkerhed, som opstår fordi man vil anvende en praktisk fremgangsmåde med kun få varianter for hvert scenario.
- Modelusikkerhed, som opstår fordi modellen kun beskriver approksimativt det fysiske fænomen.
- Model anvendelsesfejl, fordi modellerne ikke passer til det aktuelle scenario

- Datausikkerhed, der opstår når dataværdier ikke kendes for de aktuelle stoffer eller anlæg, og standardværdier anvendes.
- Statistisk usikkerhed i parametre
- Grupperings usikkerhed, der opstår fordi man er tvunget til at beregne nogle få tilfælde som skal repræsentere en gruppe. For eksempel beregning af udslip med kun tre hulstørrelsesværdier.

Det ser ud som om man vil kunne opstille et samlet modelsæt og regler der giver en usikkerhed i risiko på mindre end en faktor 2 i koncentrationer overalt. Beregningsreglerne skal dog være meget mere detaljerede end dem som anvendes i dag, hvis denne grad af nøjagtighed skal kunne opnås i praksis.

Tabel A.2 Usikkerheder ved udlipsberegninger af gas og væske fra rør

Usikkerhedskilde	Usikkerhedstype	Virkning	Usikkerhed	Eksperimenter og data
Hulstørrelse	Usikkerhed er delvis statistisk, og delvis metodebestemt, fordi man skan minimere antallet af beregninger.	Kan undervurderer udsippet systematisk	20 % ved anvendelse af nyeste data	To data samlinger (refs.)
Hullets placering (metodebestemt)	Metodeusikkerhed, fordi der skal regnes med kun få placeringer, ofte kun en	Overvurdering hvis beregningen er konservativ.	Op til en faktor 3 i nogle tilfælde	Se undersøgelse i sektion A.2
Hul form	Modelusikkerhed	Overvurdering af risiko, overvurderingsfaktor ukendt	Ukendt	Ingen data eller undersøgelser (nogle eksperimenter om revne)
Udslip fra hul	Ingen usikkerhed mht. væske og gas (nøjagtige modeller) Modelusikkerhed for tofase udslip	Ukendt	Lille	Mange eksperimenter for tofase udslip
Udslip fra rør, væske, gas	Datausikkerhed Ruhedsfaktor og viskositet er usikre variabler		Meget lav, bortset fra ruhedsværdi, lille når flow er turbulent	Oprindelige eksperimenter af Nikuradse accepteres, er meget nøjagtige, men ruhedsværdier vælges konventionelt, ikke efter aktuel tilstand.
Tofase udslip fra rør	Data usikkerhed, ruhed, viskositet, Modelusikkerhed	Undervurdering med mange modeller	Se model sammenligning i afsnit A.3	Eksperimenter samlet af Leung

Usikkerhedskilde	Usikkerhedstype	Virkning	Usikkerhed	Eksperimenter og data
Virkning af ventiler, pumper osv.	Metodeusikkerheder Disse negligeres normalt for at reducere omfanget af analysearbejde. Metodeanvendelsesfejl, fordi det anvendt ikke metode passer til det aktuelle situation, med flow begrænsninger.	Overvurdering når pumpe og ventiler negligeres. Undervurdering når pumpning negligeres	Op til en faktor to, normal ca. 10 %	Standardværdier efter målinger fra forskning 1940'erne Ser Perry and Chilton, Chemical Engineers Handbook
Udslipsretning	Metodeusikkerhed, begrænsning typisk til en retning	Fanelængder ned af	Typisk ca. 50 til 100 m. ekstra fane længde	Nogle få eksperimenter
Placering af muere, obstruktioner	Metodeusikkerhed Effekten ignoreres oftest	Lokale koncentrationer undervurderes. Fanelængder undervurderes i nogle tilfælde	Op til en faktor to i typiske tilfælde	Nogle få men gode eksperimenter.
Spredning af væske på jorden	Modelusikkerhed	Ingen virkning hvis udslippet er stort og der er et bassin	Op til en faktor 5 ved forsøg	Nogle få eksperimenter under realistisk forhold fortaget af forfatteren (ikke offentliggjort) og i ref. 50
Fordampning af væske på jorden	Modelusikkerhed Datausikkerhed fordi det lokale vindhastighed ved jorden ikke kendes	Der vil ofte være en undervurdering	Undervurdering med op til en faktor 2	Eksperimenter af Pasquill (1940) og Mackay og Matsugu (1973). Eksperimenter under realistiske forhold af Schecker

Usikkerhedskilde	Usikkerhedstype	Virkning	Usikkerhed	Eksperimenter og data
Jetspredning,	Modelusikkerhed	Formodentlig kun en lille effekt langt fra jetten, fordi momentum ligningen skal passe	Ca. 20 % baseret	Meget lidt eksperimentelt data
Fanespedning	Modelusikkerhed	Overvurdering og undervurdering, afhængig af modellen	Typisk op til en faktor 2 ved de fleste modeller. 50 % ved de bedste modeller	Mange eksperimenter, meget data, men eksperimentdata indeholder væsentlig usikkerheder
Dannelse af toksisk røg	Modelusikkerhed	Ukendt	Ukendt	Nogle gode forsøg i nyere tid, men på begrænset skale. Mange faktorer ikke undersøgt
Spredning af røg fra jorden og bygninger	Modelusikkerhed	Ukendt	Ukendt	Nogle modeller fra nyere tid. Begrænset skala.
Vindhastighed	Datausikkerhed, data tages fra den nærmeste målestation Metodeusikkerhed, kun nogle få kategorier	Kun relevant ved risikoanalyse	I princip op til en faktor 2 i størrelsen af risikozonen, i praksis mindre	Meget data til rådighed Sammenligninger på basis af data fra "Purple Book"
Atmosfærisk stabilitet	Datausikkerhed, data tages fra den nærmeste målestation Metodeusikkerhed, kun nogle få kategorier	Kun relevant ved risikoanalyse	I princip op til en faktor 2 i størrelsen af risikozonen, i praksis mindre	Meget data til rådighed Sammenligninger på basis af data fra "Purple Book"

Usikkerhedskilde	Usikkerhedstype	Virkning	Usikkerhed	Eksperimenter og data
Vindretning	Datausikkerhed, data tages fra den nærmeste målestation Metodeusikkerhed, kun nogle få kategorier	Kun relevant ved risikoanalyse	I princip op til en faktor 2 i størrelsen af risikozonen, i praksis mindre	Meget data til rådighed Sammenligninger på basis af data fra "Purple Book"
Nødstop	Statistisk usikkerhed på sandsynlighed Model usikkerhed pga. aktuel tilstand tages ikke i betragtning	Kun relevant ved risikoanalyse	Ca. 50 % ved valg af den bedst data	Flere gode datasamlinger
Udslips varighed	Datausikkerhed Metodeusikkerhed			

A.16 Modellers kompleksitet

Læseren vil have bemærket, ved læsning af dette kapitel, at beregninger af gasfanestørrelser er relativt indviklet. Der er mange fysiske fænomener, man skal tage i betragtning. Det skal dog være muligt at anvende modellerne i praksis.

Beregningernes kompleksitet kan skjules ved anvendelse af veltilpasset software med et godt menneske/maskine interface. Men et problem er svært at overkomme - De mere præcise modeller kræver mere detaljerede data input.

Dette princip kan illustreres ved at betragte udslip fra et system til forsyning af ammoniak til et røg-gasrensningssystem. Et sådant system vil normalt bestå af et ammoniaklager, et relativt langt rør til ammoniakforsyning og et katalysatormodul. En simpel scenarieopstilling vil, for eksempel omfatte slangebrud ved lagerbeholderen, rørbrud ved lagerbeholderen og rørbrud ved et enkelt sted midt på forsyningsrøret. Et mere præcis beregning kun opnås ved at inkludere rørbrudsberegninger flere steder langs røret. Men mens de få scenarier kun kræver specifikation af huller ved tre steder, kræver den præcise beregning specifikation af rørets placering langs hele rørets udstrækning.

Der vil være en balance imellem arbejdsindsatsen og præcisionen ved resultatet. I dag er det normalt at man begrænser antallet af udslipscenarier til nogle få, ofte kun to per beholder (se ref. 5) og højst otte ved de bedste risikoanalyseberegninger. Resultatet kan være godt nok til beregning af risikoen udenfor hegnet, men det ville ofte være utilstrækkeligt til beregning af risikoen for medarbejdere. Det vil være ønskeligt, ved en aktuel beredskabsindsats, at man kan specificere det aktuelle udslipsted.

På lignende vis kræves der mere data om omgivelserne, hvis man skal tage højde for terræn, træer, volde og bygninger. De steder i verden hvor man er ved at introducere de mere avancerede modeller, er man også i gang med at introducere mere effektive metoder til opsamling af den nødvendige input data. Man er for eksempel i gang med at anvende radar/lidar sammen med satellitbilleder for at op-bygge tredimensionale bybilleder.

A.17 Computational fluid dynamics

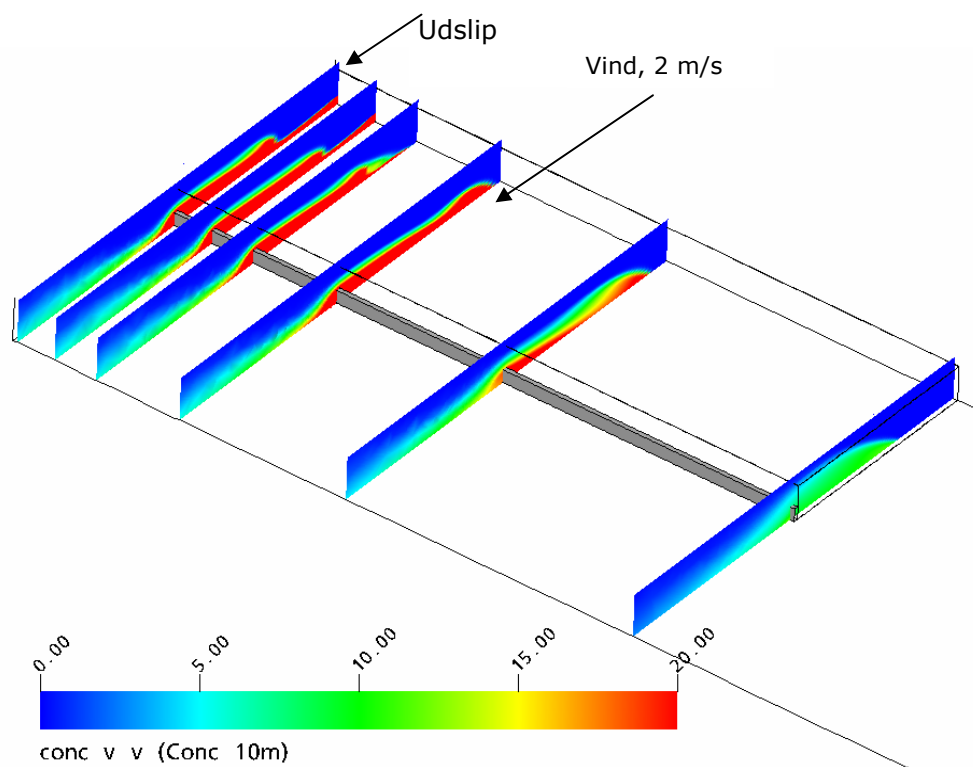
De forskellige fænomener der beskrives ovenfor giver en relativ indviklet samling af teoretiske og empiriske modeller. Men selv alle disse modeller dækker kun i idealiserede situationer. En spredning, der begynder i en fabrik, passerer over en mark, og derefter ind i et beboelsesområde, kan således ikke beregnes i detaljer. Modeller kunne i princippet udvikles, men det vil under alle omstændigheder tage flere år at validere modellerne.

Der findes computational fluid dynamics modeller, som er udviklet specielt til beregning af spredning af gasser. Disse modeller løser forskellige simplificerede udgaver af Navier Stokes ligningerne, der beskriver gasstrømning. Ligningerne giver en præcis beskrivelse af gasbevægelser, men er vanskelige at løse. En form af løsning, så kaldt direkte numerisk simulering (DNS) har vist sig at være i stand til at beregne med høj præcision udvikling af selve små detaljer i et gas flow. Grunden til at disse metoder endnu ikke anvendes i risikovurdering er den lange beregningstid der kræves. Den DNS beregning som er beskrevet, tog i alt et år på en hurtig computer.

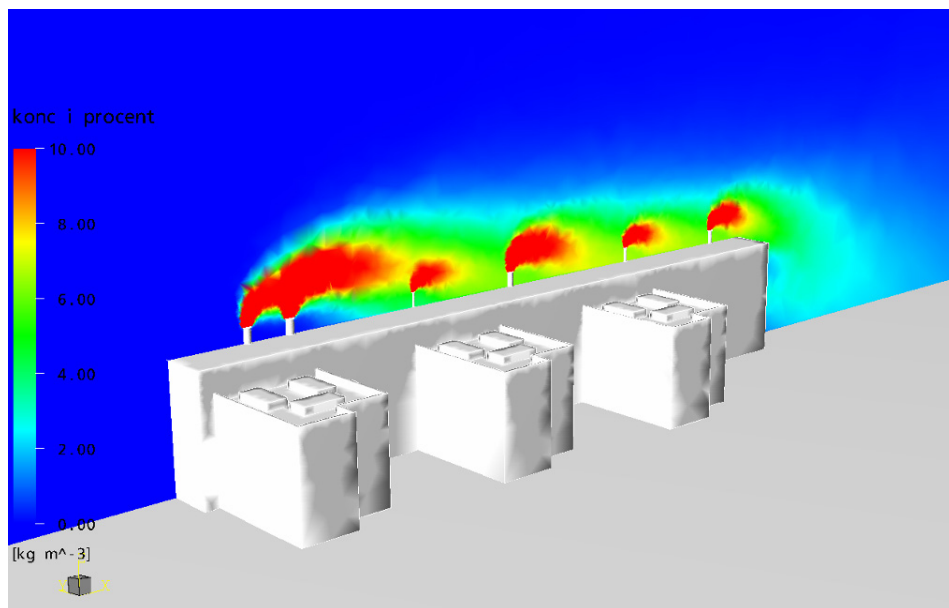
Andre, hurtigere metoder, kan anvendes til at opnå approksimative løsninger og giver gode resultater. Metoderne anvendes rutinemæssigt i dag til beregning af brand og røgudvikling i bygninger, til beregning af ventilation i industribygninger og til eksplosionsberegning i olieproduktionsplatforme (CFD anvendes også til mange andre formål, som ikke er relateret til toksisk gas spredning).

CFD modeller løser ligninger for gasspredning ved at opdele det relevante område i et net af celler og approximerer Navier Stokes ligningerne i hver celle i nettet.

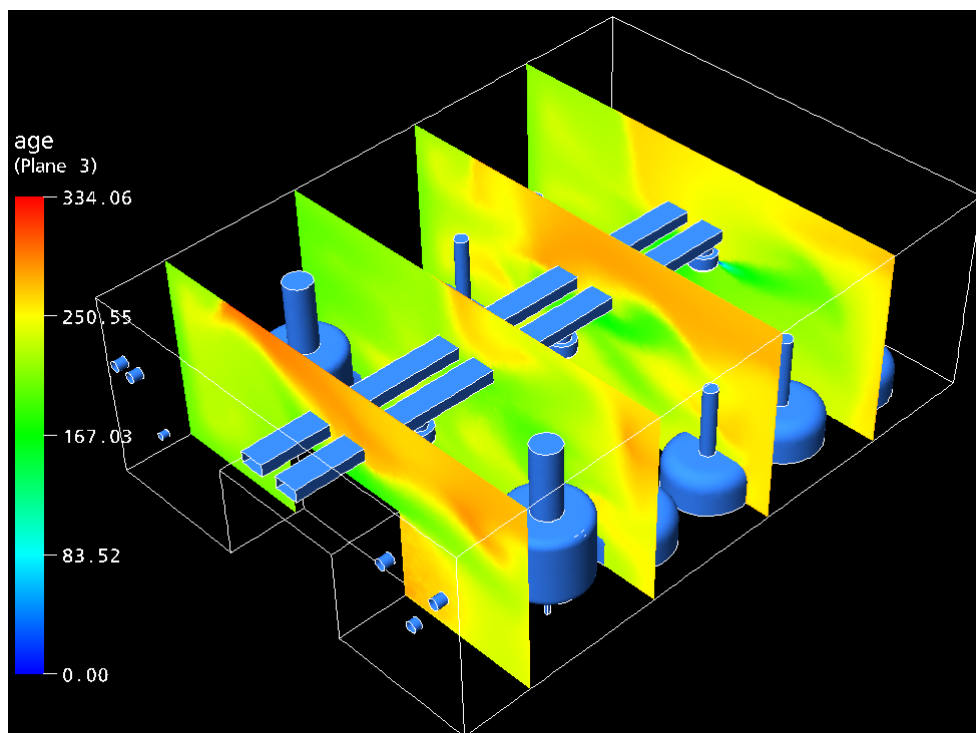
Direkte numeriske simuleringsmodeller forsøger at løse de fundamentale ligninger med et meget fint net, således at de mindre hvirvler kan modelleres. Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS) metoder modellerer de turbulente diffusion aspekter af gas strømning med en simpel empirisk model (K- ϵ model). Et eksempel på en sådan beregning vises i figur A.21 for en gasspredning som tilbageholdes af en mur, og i figur A.22 for udslip fra ventrør i en kemiskproduktion. Metoderne er specielt nyttige til beregning af gasspredning indendørs (figur A.42)



Figur A.21 Gasspredningsberegning for udslip af gas og tilbageholdelse ved en mur

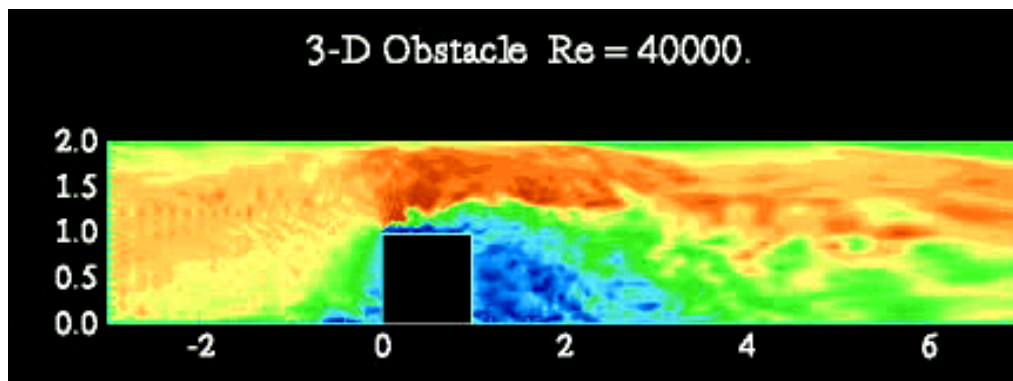


Figur A.22 Gasspredningsberegninger for udslip fra fabrik ventilation



Figur A.23 gasspredningsberegning indendørs

Large Eddy Simulation (LES) modeller simulerer de større facetter af turbulens (f.eks. dannelse af hvirvler ned til f.eks. 1 m diameter) og simulerer transport på mindre skala med empiriske modeller.



Figur A.24 Eksempel på LES simulering for gas flow forbi en bygning

Hall (ref. 89) har undersøgt anvendelsen af K- ϵ gasspredningsberegninger til risikovurdering. Resultaterne blev sammenlignet med fuldskala eksperimenter. God kvalitativ overensstemmelse blev opnået. Sammenligningerne viste en acceptabel gennemsnitsberegning af koncentrationer, men undertrykkelse af kortvarige variationer (naturlig nok da undertrykkelse af kortvarige variationer anvendes ofte til at opnå kortere beregningstider). Beregning af gennemsnitskoncentrationer over 30 sekunder afveg fra eksperimentmålinger med en forskel på 10 til 20 %. Beregningstider var mellem en halv og tre timer på datidens arbejdsstationer for et simpelt problem, og 20 til 60 timer for et praktisk eksempel af udslip i en kemifabrik.

Udviklingen i ligningsløsningsmetoder og i computer hastigheder har betydet at resultaterne kan opnås meget hurtigere i dag. Praktiske modeller med simpel geometri (rektangulære bygninger etc.) løses i løbet af få timer.

Metoderne er stadigvæk for langsomme til anvendelse i risikoanalyse af store installationer, som f.eks. raffinaderier, men anvendes i dag til undersøgelser af individuelle uslips scenarier.

Department of Homeland Security i USA og forskellige nationale laboratorier (LLNL, BNL og PNNL) har udviklet og valideret CFD modeller til spredning af toksiske gasarter i bymiljø. Der arbejdes på etablering af CFD metoden som standard for beredskabsplanlægning. Det kræver dog meget kraftige computere til at opnå rimelige beregningstider.

Høj kvalitets risikoanalyser til kommuneplanlægning kræver beregninger af ca. 150 scenarier pr. beholder (tre udslipstyper, tre udslipsstørrelser, med og uden nødstop, tre vindhastigheder og tre stabilitetskategorier giver $3 \times 3 \times 2 \times 3 \times 3 = 162$). Dette vil i dag medføre ca. 150 timer beregningstid på en rimelig kraftig PC, for et enkelt beholder, eller ca. 60.000 timer for et raffinaderi – dvs. CFD metoderne er upraktiske til anvendelse til de fleste beregninger risikoanalyse.

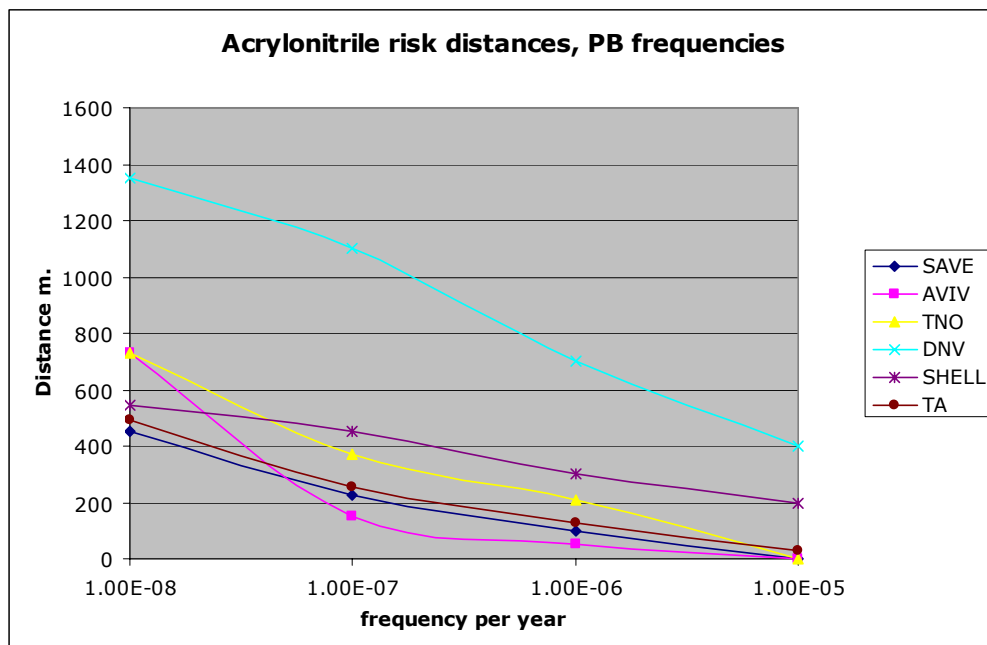
Metoderne anvendes derfor i dag hovedsageligt i risikoanalyse til vurdering af effektiviteten af sikkerhedsforanstaltninger. Metoderne er praktiske til beregninger til støtte ved beredskabsplanlægningen, hvor der normalt kun er et behov for beregning af nogle få repræsentative scenarier (se kapitel 7, diskussion om beredskabsplanlægning). Metoderne vil ofte være de eneste der kan anvendes til beregning af koncentrationer af toksiske gasarter til medarbejderbeskyttelse.

A.18 Reproducerbarhed af beregninger.

Det er beskrevet ovenfor, hvordan forskellige valg af modeller kan give forskellige resultater. Omfanget af variationen kan minimeres ved anvendelse af moderne risikoanalyseværktøjer og ved anvendelse af en detaljeret vejledning. Fremgangsmåden blev undersøgt i et sammenligningsstudie i 2001, hvor fem erfarne risikoanalysehold deltog. Størrelsen af "en pr. million år" risikozonen varierede med den højeste 50 % større end den laveste (se figur 44). At resultaterne er så tæt på hinanden betragtes som et stort fremskridt idet tidligere studier i 90'erne viste variationer på op til en faktor 100. Men at der overhovedet er en betydelig variation viser, at de nuværende vejledninger er ikke tilstrækkeligt veludviklede. En byplanlægger, der for eksempel ved at kravet til en sikkerhedszone omkring et anlæg som er beregnet af en analytiker til 700 m, men som er beregnet af andre til at være 1100 m, vil have et problem.

I nogle lande (Holland og Italien) er dette problem blevet løst ved at specificere et enkelt program til anvendelse i risikoanalyse. Princippet er, at beregningsresultaterne måske er forkerte med en fraktion, men at fejlen i det mindste burde være konstant, og man derfor kan definere acceptkriterier derefter. Princippet kendes fra beregning af miljøbelastninger fra skorsten. Princippet går under navnet "regulatory modelling".

Der er dog flere problemer med denne fremgangsmåde. Vejledninger til risikoberegninger er i øjeblikket ikke tilstrækkeligt præcise til at sikre ens resultater, selv når to hold anvender det samme software. De nuværende vejledninger er heller ikke tilstrækkeligt veludviklede til at tilbyde en pålidelig eller sikker beregning i alle tilfælde, således at mange vigtige specialtilfælde ikke er behandlet eller dækket. Nogle studier er i gang for at danne grundlag for forbedring af denne situation.



Figur A.25 Eksempel på sammenlignende benchmark studier over risikoafstande til bestemte risikoniveauer.