



BfK

Beräkningsmodeller för Kemikalieexponering

Modell- och systembeskrivning

Erik Wetter,
Lennart Thaning, Sune Westman och Stellan Winter



This page is intentionally left blank

FÖRSVARETS FORSKNINGSANSTALT

Avdelningen för NBC-skydd

901 82 UMEÅ

FOA-R--00-01641-990--SE

November 2000

ISSN 1104-9154

BfK

Beräkningsmodeller för

kemikalieexponering

Modell- och systembeskrivning

Erik Wetter, Lennart Thaning, Stellan Winter och Sune
Westman

Dokumentets utgivare Försvarets forskningsanstalt Avdelningen för NBC-skydd 901 82 UMEÅ	Dokumentbeteckning, ISRN FOA-R--00-01641-990--SE	
	Dokumentets datum November 2000	Uppdragsnummer E4631
	Projektamn (ev förkortat) BfK	
	Upphovsman(män) Erik Wetter, Lennart Thaning, Stellan Winter och Sune Westman	
		Uppdragsgivare Räddningsverket
		Projektansvarig Per-Erik Johansson
		Fackansvarig
Dokumentets titel BFK – BERÄKNINGSMODELLER FÖR KEMIKALIEEXPONERING Modell- och systembeskrivning		
Sammanfattning <p>BfK är ett program för simulering av källstyrka, koncentrationer och skadeutfall vid utsläpp av kemikalier. Systemplattform är MS Windows 95/98/NT4/2000.</p> <p>För att beräkna koncentrationen av en kemikalie efter ett visst läckage krävs flera fysikaliska modeller. Dessa modeller är sedan tidigare utvalda eller utvecklade på FOA men vissa justeringar har gjorts för att de skall passa bättre att implementeras i datorprogram. För att kunna dokumentera källkoden på ett vettigt sätt skrivs denna rapport vid sidan av implementationen.</p> <p>Rapporten beskriver hur olika komponenter i BfK-programmet fungerar. Den beskriver främst de fysikaliska modellerna och resonerar i text runt omkring dem, till exempel begränsningar och idéer om framtida utveckling.</p>		
Nyckelord BfK, gasutsläpp, gasspridning, källmodell, spridningsmodell, toxikologi, inläckning.		
Övriga bibliografiska uppgifter	Språk Svenska	
ISSN 1104-9154	ISBN	
	Omfång 78 sidor	Pris Enl. prislista

Defence Research Establishment Division of NBC-Defence SE-901 82 UMEÅ SWEDEN	Document ref. No., ISRN FOA-R--00-01641-990--SE	
	Date of issue November 2000	Project No. E4631
	Project name (abbrev. if necessary) BfK	
Author(s) Erik Wetter, Lennart Thaning, Stellan Winter och Sune Westman	Initiator or sponsoring organization Swedish Rescue Services Agency	
	Project manager Per-Erik Johansson	
	Scientifically and technically responsible	
Document title in translation BFK - CALCULATION MODELS FOR CHEMICAL EXPOSURE System and model description		
Abstract BfK is a computer program for simulation of source strength, concentration and casualty assessments when a chemical is released. OS platform can be MS Windows 95/98/NT4/2000. To calculate the concentration of a chemical following a certain release, a number of physical models are needed. These models have already been chosen or developed by FOA but some adjustments have been made to make them better suited for being implemented in a computer program. To be able to document the source code in a proper way this report is written during the process of the implementation. This report describes how different components in the BfK program work. It mainly describes the physical models and discusses them, for example limitations and ideas of future improvements.		
Key words BfK, gas release, gas dispersion, source model, dispersion model, toxic hazards, leakage		
Further bibliographic information	Language Swedish	
ISSN 1104-9154	ISBN	
	Pages 78	Price Acc. to pricelist

Innehållsförteckning

MODELL- OCH SYSTEMBESKRIVNING.....	1
1. INLEDNING.....	6
1.1. BAKGRUND	6
1.2. MÅL	6
1.3. PROJEKTGRUPPEN.....	6
1.4. TECKENFÖRKLARINGAR	7
1.5. FUNDAMENTALA FYSIKALISKA KONSTANTER.....	7
2. SCENARIO.....	8
2.1. ALLMÄNT.....	8
2.2. DOKUMENT	9
3. VÄDER.....	11
3.1. LUFTTRYCK	11
3.2. AUTOMATISERING AV STABILITETSKLASSER	11
3.3. BERÄKNING AV SOLINSTRÅLNING	15
4. KÄLLSTYRKA.....	16
4.1. ALLMÄNT.....	16
4.2. GASUTSTRÖMNING – TRYCKKONDENSERADE GASER	23
4.3. VÄTSKEUTSTRÖMNING – TRYCKKONDENSERADE GASER	24
4.4. VÄTSKEUTSTRÖMNING – UNDERKYLDA VÄTSKOR OCH KRYOGENER.....	26
4.5. AVDUNSTNING OCH KOKNING	27
4.6. AVDUNSTNING	31
4.7. KOKNING	34
4.8. APPROXIMATION AV AVDUNSTNINGEN OCH KOKNINGEN	36
4.9. VARAKTIGHET	37
5. KOORDINATSYSTEM FÖR KEMIKALIEOLYCKOR	41
5.1. BERÄKNINGSMATRISER	41
5.2. DEN SEKTORFORMADE BERÄKNINGSMATRISEN.....	41
6. KOORDINATSYSTEM FÖR C-ANGREPP	48
6.1. BAKGRUND	48
6.2. BERÄKNING AV ETT MATRISELEMENTS EXAKTA POSITION	49
7. SPRIDNINGSMODELL	50
7.1. ALLMÄNT.....	50
7.2. KONTINUERLIG MODELL.....	50
7.3. TIDSBEROENDE MODELL.....	56
8. INLÄCKNING I BYGGNADER.....	63
8.1. ALLMÄNT.....	63
8.2. BERÄKNING	64
8.3. GRAF SOM VISAR INLÄCKNING VID OLIKA TIDER.	66
9. SKADEUTFALLSMODELL FÖR INHALATION AV GIFTIGA GASMOLN.....	68
9.1. ALLMÄNT.....	68
10. LITTERATURREFERENSER.....	70

APPENDIX A - LÖSNING AV EKVATIONSSYSTEM.....	71
APPENDIX B - ÖVERSÄTTNING AV KONSTANTER	73
APPENDIX C - KEMIKALIEDATA.....	74

1. Inledning

1.1. Bakgrund

Det transporteras och hanteras mängder av giftiga, brandfarliga eller explosiva ämnen i Sverige. Denna hantering kan utgöra ett hot mot befolkningen om en olycka skulle inträffa. Därför har Statens Räddningsverk (SRV) beslutat sig för att utveckla ett datorprogram för att kunna simulera konsekvenserna av en kemikalieolycka. SRV kontaktade Försvarets forskningsanstalt (FOA) för få hjälp med denna utveckling, detta främst på grund av FOAs erfarenheter av spridningsmodeller vad beträffar kemiska stridsmedel som också går bra att tillämpa på industrikemikalier.

Projektet Beräkningsmodeller för kemikalieexponering påbörjades i april 1996. Arbetet har sedan dess huvudsakligen inriktats på att skapa ett program med ett enkelt användargränssnitt jämfört med andra applikationer inom samma ämnesområde. Idag klarar programmet både av att simulera konsekvenserna av ett angrepp med C-stridsmedel såväl som en kemikalieolycka, dock är det olika modeller för de två fallen.

1.2. Mål

Denna systembeskrivning avser att vara ett komplement till källkoden för datorprogrammet BfK (Beräkningsmodeller för kemikalieexponering). Rapporten baserar sig i huvudsak på FOA:s egen rapport *Vådautsläpp av brandfarliga och giftiga gaser och vätskor*, denna kommer fortsättningsvis att refereras till som "handboken".

Rapporten kommer inte att behandla följande punkter:

- Användargränssnitt.
- Funktioner och metoder för att analysera resultaten, till exempel hur man får fram isolinjer ur matriserna.
- Spridningsmodellen för C-stridsmedel.
- Användningen av geografiska informationssystem (GIS)

Rapporten motsvarar BfK version 1.4.

Handboken - *Vådautsläpp av brandfarliga och giftiga gaser och vätskor* är således en grundreferens i denna rapport.

1.3. Projektgruppen

Förutom författarna har ytterligare ett par personer medverkat i utvecklingen av BfK.

Edvard Karlsson, FOA, har skrivit kapitel **8. Inläckning i byggnader**.

Håkan Eriksson, FOA, har gett värdefulla synpunkter på utformningen av BfK, främst vad gäller skadebegränsande åtgärder och andra områden inom räddningstjänst.

Ola Claesson, FOA, har hjälp till med att få fram kemikaliedata.

1.4. Teckenförklaringar

- Rubriken ”Kända storheter” kommer att förekomma på flera ställen i denna rapport. De variabler som anges i tabellerna under denna rubrik syftar på de storheter som måste vara kända för att beräkningarna skall kunna utföras.
- Symbolen \otimes förekommer också på flera ställen i rapporten och syftar på speciella antaganden som är gjorda för just implementationen av BfK.
- I ekvationer kommer $\lceil x \rceil$ att betyda att uttrycket x avrundas uppåt till närmaste heltal. På samma sätt kommer $\lfloor x \rfloor$ att innebära avrundning nedåt.

1.5. Fundamentala fysikaliska konstanter

\otimes	g , (gravitationsaccelerationen) = 9.8 m / s^2
\otimes	M_a , (luftens molvikt) = 29.0 kg / kmol
\otimes	ρ_a , (luftens densitet) = 1.239 kg / m^3
\otimes	R_u , (universella gaskonstanten) = $8.31451 \text{ J / mol K}$
\otimes	c_{pa} , (specifikt värme för luft) = 1004 J / kg K .

Gaskonstanten R för en specifik kemikalie kan räknas ut med hjälp av den universella gaskonstanten R_u och kemikalens molvikt M_w enligt:

$$R = \frac{R_u}{M_w} \quad (1.1)$$

2. Scenario

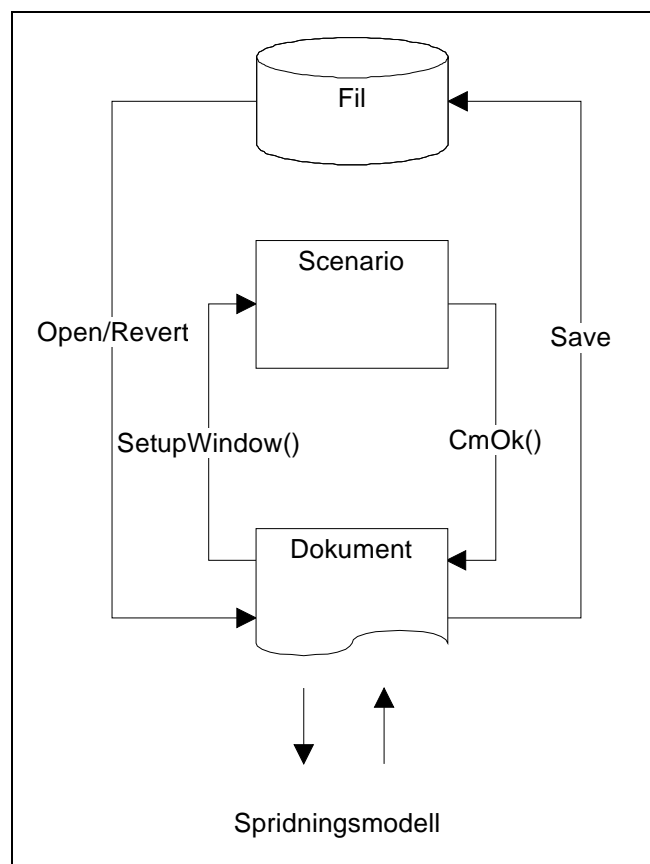
2.1. Allmänt

Strukturen i programmet skall följa vissa grundprinciper. Vi börjar med hur vi hanterar de data som beskriver en kemikalieolycka eller ett angrepp med C-stridsmedel.

Begrepp

Dokument	innehåller alla de data som beskriver ett fall.
Scenario	är själva dialogen för ett fall.
Fil	är den fysiska lagringen av ett dokument.

Strukturschema



Figur 2.1: Schematisk bild över struktur och dataflöden

Anledningen att vi väljer just denna struktur är att den passar bra med den föredefinierade klassen för dokumenthantering i Borland C++. Det är alltså endast dokument som används som indata till spridningsmodellerna.

2.2. Dokument

Indata för en spridningsberäkning i BfK måste innehålla vissa poster. Beroende på hur avancerade beräkningar vi vill göra används olika många indata. Följande tabell visar vilka indata som finns och inom vilka intervall det finns lämpliga värden. Observera att denna tabell inte gäller scenarion för C-angrepp.

Kemikalie		
M_w	Molvikt.	$1.0 - 1.0 \cdot 10^3$ kg / kmol
ρ_f	Densitet	$1 \cdot 10^{-6} - 1 \cdot 10^4$ kg / m ³
T_1	Referenstemperatur för approximationen av ångbildningsvärme.	$1.0 - 2.0 \cdot 10^3$ K
h_{fg1}	Ångbildningsvärmens vid T_1 .	$1.0 - 1.0 \cdot 10^7$ J / kg K
A	Konstant för approximation av mättnadskurvan.	$1 - \infty$ Pa
B	Konstant för approximation av mättnadskurvan.	$1 - \infty$ K
c_f	Vätskefasens specifika värme.	$1.0 - 1.0 \cdot 10^5$ J / kg K
T_c	Kritisk temperatur.	$1.0 - 2.0 \cdot 10^3$ K
T_b	Kokpunkt	$1.0 - 1.0 \cdot 10^3$ K
IDLH	Gränsvärde för "Immediately Dangerous to Life or Health".	$1.0 \cdot 10^{-6} - 1.0 \cdot 10^6$ ppm
n	Parameter till modellen för skadeutfall, se kapitel 9.	0.1 – 10.0
β_2	Parameter till modellen för skadeutfall, se kapitel 9.	
$\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_4$	Parametrar till modellen för skadeutfall, se kapitel 9.	-100.0 – 0.0
c_{pg}	Gasfasens specifika värme.	$100.0 - 1.5 \cdot 10^4$ J / kg K
a_j	Överföringshastighet mellan luften och ytor inomhus i byggnad, se kapitel 8.	0 – 0.01 m / s
b_j	Jämviktsparameter till modellen för inläckning i byggnader, se kapitel 8.	0.01 – 100.0 l / m
UN-nummer		
Faronummer		
Transportetiketter		Brandfarligt, giftigt, frätande, oxiderande.
Behållare		
Storlek		$0.0 - 1.0 \cdot 10^9$ kg
Diameter		
Vätskepelare		$0.0 - 1.0 \cdot 10^3$ m
Extra pålagt övertryck		0.0 – 100.0 bar
Lagringstemperatur		-200.0 – 200.0 C
Läckage		
Läckagets area		$0.01 - 1.0 \cdot 10^5$ m ²
Anslutningsrörets längd		0.01 – 100.0 m
Anslutningsrörets diameter		$1.0 \cdot 10^{-5} - 1.0$ m
Utsläppshöjd		0.0 – 150.0 m

Väder, se kapitel 3.		
T	Atmosfärens temperatur.	-55.0 – 40 C
U	Vindstyrkan på 10 m höjd.	0.5 – 15.0 m / s
Molnmängd		Klart, enstaka moln, mulet.
Tid på året		Sommar, höst, vinter, vår.
Tid på dygnet		Dag, Morgon/Kväll, Natt
Klimatzon		Norra norrland, södra norrland, svealand, götaland.
Skadebegränsande åtgärd, se kapitel 4.9.		
Tidpunkt		
Begränsningsgrad		0.0 – 100.0 %
Byggnader, se kapitel 8.		
Ventilationsintagens höjd		
Ventilationsraten		
GIS-presentation		
Vindriktning	Används endast för GIS-presentation.	0 – 360 °
Position	Används för GIS-presentation, anges som x- och y-koordinat i RT90.	x: $6 \cdot 10^6$ – $8 \cdot 10^6$ m y: $1 \cdot 10^6$ – $2 \cdot 10^6$ m
Övrigt		
Bebyggt område?		Ja, Nej
Ytråhet		$1.0 \cdot 10^{-6}$ – 1.0 m
Beräkningshöjd	Anger vilken höjd som spridningsberäkningen skall göras. Vanligen räknar vi på 1.5 m höjd eftersom det är normalhöjden för inandning.	0.0 – 100.0 m
Yttre beräkningsgräns	Avgör hur långt från utsläppspunkten vi skall utföra spridningsberäkning. Värdet anges som ett avstånd eller som en koncentration.	Koncentration: $1.0 \cdot 10^{-4}$ – $1.0 \cdot 10^3$ Avstånd: 100.0 - $1.0 \cdot 10^4$ m

3. Väder

Allmänt

Det väder som råder vid det tillfälle som vi vill skapa ett scenario för är av stor betydelse. Temperaturen påverkar källstyrkemodellen och det gör även solinstrålningen de gånger som en pöl bildas på marken som sedan avdunstar. För spridningsförloppet har vindstyrkan betydelse men vi måste även veta atmosfärens stabilitet.

3.1. Lufttryck

Ovanför oss i atmosfären finns luft, denna luftpelare ger upphov till ett tryck på oss här på jorden. Trycket kallas för atmosfärtrycket eller lufttrycket P_a . Lufttrycket varierar $\pm 10\%$ med olika typer av väder men vi kommer i våra modeller endast att betrakta lufttrycket som en konstant.

$$\otimes \quad P_a = 1.01325 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

3.2. Automatisering av stabilitetsklasser

Allmänt

Att beskriva atmosfärens stabilitet genom att ange den med s k pasquillklasser är svårt för en novis, därför passar inte det in i BfK:s grundidé om att vara så enkelt som möjligt för användaren. Ett sätt att lösa detta på är att beskriva de enkla faktorer som tillsammans styr stabiliteten och utifrån dessa beräkna atmosfärens stabilitet. De faktorer som främst styr är vindstyrkan och solinstrålningen (strålningsbalansen): Eftersom även solinstrålningen är svår att bedöma så beräknas den med hjälp av kunskap om tid på året, tid på dygnet, plats på jorden, molnmängd och snötäckningsgraden.

I BfK används följande 6 stabilitetsklasser:

- A..... Kraftigt instabil skiktning
- B..... Måttligt instabil skiktning
- C..... Svagt instabil skiktning
- D..... Neutral skiktning
- E..... Svagt stabil skiktning
- F..... Stabil skiktning

Kända storheter:

- d Antalet dagar som förlupit av ett år.
- t Tiden som förlupit av ett dygn (h).
- U Vindstyrkan (m / s).





För beräkningen av stabilitetsklass väljer vi årstider enligt följande tabell. Värdet d som väljs avser antalet dygn som förlupit av ett år. Vi visar i tabellen också ett ungefärligt datum för att lättare se motsvarigheten till antalet dagar.

	<i>Ungefärligt datum</i>	<i>d</i>
<i>Vår</i>	1 maj	120
<i>Sommar</i>	1 augusti	210
<i>Höst</i>	1 november	300
<i>Vinter</i>	1 februari	30

Vi måste också veta hur många timmar t som förlupit av ett dygn. Vi väljer detta ur följande tabell (observera att vi väljer samma värde för morgon och kväll eftersom vi endast behöver värdet för att beräkna solhöjden och antar att den är lika stor morgon som kväll):

	<i>t</i>
<i>Morgon / kväll</i>	7
<i>Dag</i>	12
<i>Natt</i>	0

Koordinaterna för platsen i latitud (Lat) och longitud (Lng) väljs ur följande tabell med avseende på klimatzonen:

		<i>Norra norrland</i>		<i>Södra norrland</i>		<i>Svealand</i>		<i>Götaland</i>
<i>Lat</i>		66.0		63.0		59.3		56.5
<i>Lng</i>		15		15		15		15

Följande tabell utgör ett slags approximativt värde på mängden snö vid olika tider på året i de olika klimatzonerna:

	<i>Sommar</i>	<i>Höst</i>	<i>Vinter</i>	<i>Vår</i>
<i>Norra norrland</i>	Barmark	Fläckvist med snö	Heltäckande snö	Heltäckande snö
<i>Södra norrland</i>	Barmark	Barmark	Heltäckande snö	Fläckvist med snö
<i>Svealand</i>	Barmark	Barmark	Heltäckande snö	Fläckvist med snö
<i>Götaland</i>	Barmark	Barmark	Fläckvist med snö	Barmark

Vi sätter värden på molnbas h_m och molnmängd n enligt följande tabell:

	<i>h_m</i>	<i>n</i>
<i>Klart</i>	3000	0/8
<i>Enstaka moln</i>	2000	5/8
<i>Mulet</i>	1000	8/8

Beräkning av stabilitetsklass

Vi beräknar solhöjden h_s i grader (Thaning):

$$\Delta = 23.45 \cdot \cos\left(\frac{d-173}{365} \cdot 2\pi\right) \quad (3.1)$$

$$h_s = 90 - \cos^{-1}\left(\cos\left(\left(t + \frac{Lng-15}{15}\right) \cdot 15 - 180\right) \cdot \cos(Lat) \cdot \cos(\Delta) + \sin(Lat) \cdot \sin(\Delta)\right) \quad (3.2)$$

Metoden som nu följer baserar sig på en artikel skriven av Sue Ann Bowling i *Atmospheric Environment* (1985).

Välj följande värde på nettostrålningsindex R_{ix} :

Om $n = 8/8$ och $h_m \leq 2000$ m

R_{ix}	$h_s < 6$	$h_s \geq 6$
	-0.5	0.0

annars

R_{ix}	$h_s \leq 6$	$h_s \leq 12$	$h_s \leq 15$	$h_s \leq 18$	$h_s \leq 35$	$h_s \leq 60$	$h_s > 60$
<i>Barmark</i>	0.5	1.0	2.0	2.0	2.0	3.0	4.0
<i>Fläckvist med snö</i>	0.0	0.5	1.0	2.0	2.0	3.0	4.0
<i>Heltäckande snö</i>	0.0	0.0	0.5	1.0	2.0	2.0	4.0

Om $R_{ix} < 1$

R_{ix}	$n = 0$	$1 \leq n \leq 3$	$n \geq 4$
	$3 \cdot (R_{ix} - 1)$	$2 \cdot (R_{ix} - 1)$	$R_{ix} - 1$

annars

R_m	$5 \leq n < 8$ och $h_m \leq 2000$	$5 \leq n < 8$ och $h_m > 2000$	$n = 8$
	$R_{ix} - 2$	$R_{ix} - 1$	$R_{ix} - 1$

$$R_{ix} = \max(1, R_m)$$

Beräkna kolumnvärdet I i matrisen av stabilitetsklasser:

Om $R_{ix} \geq 0$

$$I = 5 - \lfloor R_{ix} \rfloor$$

annars om $R_{ix} \leq -2.9$

$$I = 10$$

annars

$$I = 5 + \frac{\lfloor R_{ix} \rfloor}{-0.5}$$

Beräkna radvärdet J i matrisen av stabilitetsklasser:

Om $U > 5.75$

$$J = 9$$

annars om $U > 5.25$

$$J = 8$$

annars om $U > 3.75$

$$J = 2 + \lfloor U \rfloor$$

annars om $U > 3.25$

$$J = 5$$

annars

$$J = 1 + \lfloor U \rfloor$$

Stabilitetsklasserna fördelar sig i matrisen på följande sätt:

	<i>I=1</i>	<i>I=2</i>	<i>I=3</i>	<i>I=4</i>	<i>I=5</i>	<i>I=6</i>	<i>I=7</i>	<i>I=8</i>	<i>I=9</i>	<i>I=10</i>
<i>J=1</i>	A	A	B	C	D	E	F	F	G	H
<i>J=2</i>	A	B	B	C	D	E	F	F	G	G
<i>J=3</i>	A	B	C	D	D	D	E	F	F	G
<i>J=4</i>	B	B	C	D	D	D	E	E	F	F
<i>J=5</i>	B	B	C	D	D	D	D	E	E	E
<i>J=6</i>	B	C	C	D	D	D	D	D	E	E
<i>J=7</i>	C	C	D	D	D	D	D	D	E	E
<i>J=8</i>	C	C	D	D	D	D	D	D	D	D
<i>J=9</i>	C	D	D	D	D	D	D	D	D	D



Pasquillklass G och H har ersatts med F.

3.3. Beräkning av solinstrålning

Kända storheter

n Molnmängd (1/8).
 h_s Solhöjden ($^\circ$), se ekvation .3.2

Beräkning

Välj en reduktionsfaktor r beroende på molnmängden (Clarke, 1979):

	$n = 0/8$	$n = 1/8$	$n = 2/8$	$n = 3/8$	$n = 4/8$	$n = 5/8$	$n = 6/8$	$n = 7/8$	$n = 8/8$
r	1.0	0.89	0.81	0.76	0.72	0.67	0.59	0.45	0.23

Solinstrålningen q_s ges av:

Om $h_s < 0$, det vill säga att solen står under horisonten, sätts $q_s = 0$ annars (Chrosicki, 1971):

$$q_s = 697.8 \cdot \left(0.05 + 0.0023 \cdot h_s + \left(\frac{1.56 \cdot \sin(h_s)^2}{\sin(h_s) + 0.2} \right) \right) \cdot r \quad (3.3)$$

4. Källstyrka

4.1. Allmänt

Detta kapitel baserar sig i huvudsak på *Handboken*, kapitel 4, 5 och 7.

För att kunna beräkna spridningen av en kemikalie måste vi veta hur mycket av kemikalien i form av gas som tillförs atmosfären per tidsenhet, så kallad luftburen källstyrka. Denna källstyrka kan te sig på flera olika sätt beroende på omgivningens, vädrets och kemikalienens karaktär. Den största skillnaden ligger i hur kemikalien lagras/transporteras, vi får följande grundläggande varianter:

- **Underkyld vätska** – kemikalie som varken kokar vid underlagets eller atmosfärens temperatur.
Denna vätska kommer att rinna ut och avdunsta från en pöl på marken.
- **Kryogen** – kemikalie som lagrats vid en temperatur under sin kokpunkt men som kokar vid omgivningens temperatur.
Denna vätska kommer att börja koka om den läcker ut då den värms upp av underlaget eller atmosfären.
- **Superkritisk gas** – kemikalie som lagras i en temperatur över sin kritiska temperatur och i ett tryck som överskrider sitt kritiska tryck.
Då denna kemikalie läcker ut kommer den omedelbart att övergå till gas på grund av tryckfallet.
- **Överhettad gas** – kemikalie som lagras i en temperatur över sin kokpunkt men inte uppfyller kriterierna för att vara en fluid.
Vid ett läckage kommer denna kemikalie att strömma ut som en gas.
- **Tryckkondenserad gas** – kemikalie som lagrats under så högt tryck att den kondenserat och befinner sig i vätskefas.
Vid ett läckage bildas ett tryckfall som genast kommer att få vätskan i kokning och över i gasfas. Det bör noteras att det är stor skillnad ifall läckaget uppstår över eller under vätskans yta.

Detta ger oss två huvudsakliga metoder för att beräkna källstyrka:

- **Gasutströmning** (se kapitel 4.2. Gasutströmning – tryckkondenserade gaser).
- **Vätskeutströmning** (se kapitel 4.3. Vätskeutströmning – tryckkondenserade gaser eller kapitel 4.4 Vätskeutströmning) följt av avdunstning eller kokning (se kapitel 4.5).

Avdunstning och kokning).

Kända storheter:

T_0	Lagringstemperaturen för kemikalien (C).
A_v	Tvärsnittsarean på läckaget (m^2).
L	Anslutningsrörets längd om det är ett rörbrott (m).
D	Eventuellt anslutningsrörs diameter (m).
K	Eventuellt anslutningsrörs råhetstal.
L_0	Övre gräns för vad som är en kort kanal. (m).
P_{cc1}	Känt värde på ett mättnadstryck för kemikalien (Pa).
T_{cc1}	Referenstemperaturen på kemikalien då mättnadstrycket P_{cc1} råder (K).
P_{cc2}	Känt värde på ett mättnadstryck för kemikalien (Pa).
T_{cc2}	Referenstemperaturen på kemikalien då mättnadstrycket P_{cc2} råder (K).
h_{fg1}	Konstant som motsvarar ett sedan tidigare beräknat/uppmätt värde för ångbildningsvärmets (J / kg).
T_1	Referenstemperatur då ångbildningsvärmets h_{fg1} råder (K).
T_c	Kritiska temperaturen för en specifik kemikalie (K).
T_b	Kokpunkten för en specifik kemikalie vid atmosfärstryck (K).
T_G	Underlagets temperatur (K).
R	Gaskonstant för ämnet ifråga ($J / kg K$).
M_w	Kemikalimens molvikt (kg / mol).
v_f	Vätskefasens specifika volym (m^3 / kg).
c_f	Vätskefasens specifika värme ($J / kg K$).
M	Mängden kemikalie (kg).
D_t	Behållarens diameter (m).
P_t	Extra pålagt tanktryck (Pa).
P_T	Tryck i tankens överdel (Pa).
P_0	Tryck i läckagets nivå (Pa).
☒	$L_0 = 0.1 \text{ m}$
☒	$K = 1.0 \cdot 10^{-4} \text{ m}$
☒	$D_t = 2.0 \text{ m}$

För att avgöra vilken modell som skall användas måste vi först veta lite om hur kemikalien lagras. Följande skall ge en inblick i detta så att vi på slutet kan välja i en graf vilken modell som vi skall använda.

Tryck

Lufttryck

Kallas även atmosfärstryck, se kapitel 3.1. **Lufttryck**.

Mättnadstryck

Mättnadskurvan $P_s(T)$ går inte att på ett enkelt sätt implementera i ett datorprogram så därför väljer vi att approximera den med Clausius-Clapeyron's approximation, Callen (1960):

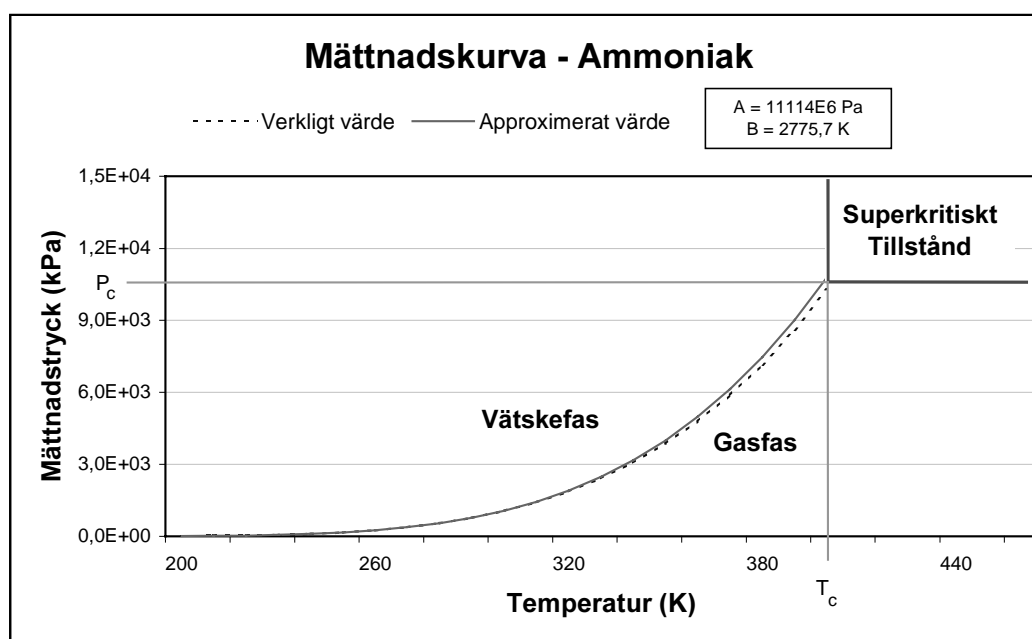
$$P_s(T) = A \cdot e^{-\frac{B}{T}} \quad (4.1)$$

Konstanterna A och B räknas fram genom två kända punkter på mättnadskurvan, (T_{cc1}, P_{cc1}) och (T_{cc2}, P_{cc2}) . Typiska värden för T_{cc1} är 273 K ($\cong 0$ C) och $T_{cc2} = 293$ K ($\cong 20$ C). Beräkningen av A och B på följande sätt:

$$A = P_{cc1} \cdot \left(\frac{P_{cc1}}{P_{cc2}} \right)^{\frac{T_{cc2}}{T_{cc1} - T_{cc2}}} \quad (4.2)$$

$$B = \frac{T_{cc1} \cdot T_{cc2}}{T_{cc1} - T_{cc2}} \cdot \ln \left(\frac{P_{cc1}}{P_{cc2}} \right) \quad (4.4)$$

Dessa två konstanter A och B beskriver den långsamt växande mättnadskurvan. Approximationen är tillräcklig så länge vi inte kommer nära det kritiska trycket P_c för kemikalien. För bästa resultat skall T_{cc1} och T_{cc2} väljas nära de temperaturer som kan anses bli intressanta. Vi får följande:



Figur 2: Exempel på mättnadskurva.

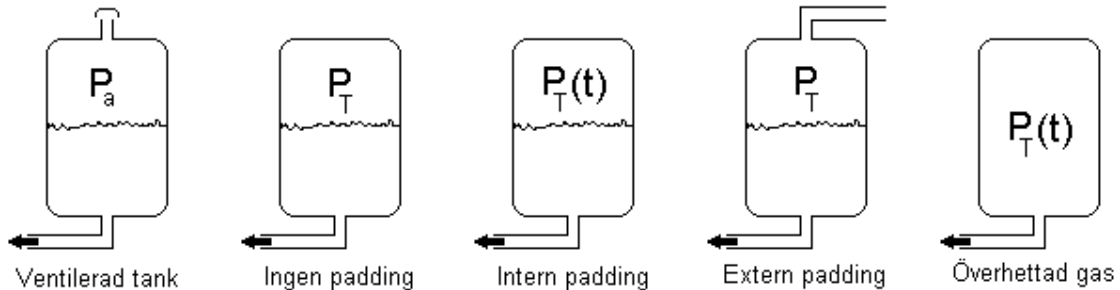
Vi kan nu använda ekvation 4.1 för att beräkna det kritiska trycket P_c genom att det motsvarar mättnadskurvan för den kritiska temperaturen T_c .

$$P_c = P_s(T_c) \quad (4.5)$$

När trycket blir större än det kritiska trycket P_c eller temperaturen överskrider T_c övergår vätskan till ett superkritiskt tillstånd. Detta tillstånd är har inte någon tydlig skillnad mellan gas- och vätskefas. Det beror på att ju närmare den kritiska temperaturen vi kommer desto mindre blir skillnaden i densitet mellan de olika faserna för att vid temperaturer över T_c ha samma densitet oavsett gas- eller vätskefas.

Trycksättning

För att lagra eller transportera kemikalier används idag flera metoder för att trycksätta dem. Ibland beror detta på att de kokar vid sin lagringstemperatur och ibland är det en metod för att snabba upp lossningsprocessen. De olika typerna av trycksättning kan delas in i fem kategorier:



Figur 3: Olika typer av trycksättning vid jämviktsförhållande.

Ventilerad tank

Det är endast underkylda vätskor och kryogener som kan transporteras och lagras på detta sätt. I en ventilerad tank så råder atmosfärstryck P_a i tankens överdel på grund av en öppning gentemot atmosfären i behållarens mantel.

Ingen padding

För tryckkondenserade gaser råder mättnadstrycket i tankens överdel, alltså $P_T = P_s(T_0)$.

När en behållare lastas med underkylda vätskor eller kryogener så ventileras tanken under påfyllnaden för att sedan slutas tätt, därför kommer atmosfärstrycket att råda i tankens överdel för dessa typer av kemikalier. Alltså $P_T = P_a$.

Padding

Vid till exempel lastning och lossning av kemikalier är det vanligt att en inertgas används för att höja trycket i tanken så att lossningsprocessen går snabbare. Inertgas används även för att skydda vissa känsliga kemikalier mot luft (syre), till exempel brandfarliga kemikalier. En vanlig inertgas är kvävgas (N_2) och metoden kallas *padding*.

Vi har två fall när det gäller padding, det ena är när paddingen är en gasbubbla med ett bestämt tryck P_T (*intern padding*), det andra när ett konstant externt gstryck läggs på i tanken (*extern padding*). Den externa paddingen har alltid trycket P_T som är högre än både mättnadstrycket $P_s(T_0)$ och atmosfärstrycket P_a .

Den interna paddingen har en gasbubbla som kommer att utvidgas allt eftersom vätskan sjunker undan vilket gör att även trycket i tanken sänks och kommer att vara en funktion av tiden. Trycket vid intern padding kommer dock initialt att vara P_T .

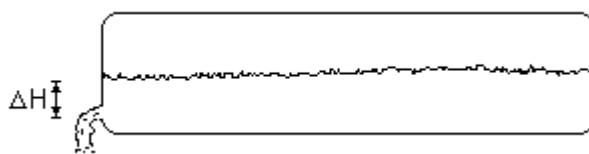
Observera att om ett läckage ovanför vätskenivån inträffar kommer effekten av padding snabbt att minska.

Överhettad gas

Att vi säger att gasen är överhettad har ingenting med någon extern uppvärmning att göra utan bara att kemikalien är varmare än sin kokpunkt och står under högt tryck utan att vara i vätskefas. Alltså lagringstemperaturen T_0 skall vara högre än kemikaliens kritiska temperatur T_c eller så skall lagringstrycket P_T vara mindre än mättnadstrycket vid lagringstemperaturen T_0 om denna temperatur är mindre än kemikaliens kritiska temperatur. Inom industrin kallas detta lagringsätt ofta för komprimerad gas. Om ett läckage uppstår kommer trycket i tanken att successivt sjunka, därför är trycket i tanken en funktion av tiden.

Trycket vid läckagets öppning

Trycket i tanken och höjden på vätskepelaren är det som styr det totala trycket vid läckagets mynning P_0 .



Figur 4: Läckagets placering och vätskenivån.

Beräkna ett värde för ΔH , som är vätskepelarens höjd över läckaget. Observera att om inget annat anges så antas läckaget ha uppstått i tankens botten samt att tanken approximeras till att vara halvfylld vid alla tider.

$$\Delta H = \frac{1}{2} \cdot D_t \quad (4.6)$$

Ovanstående ekvation gäller dock inte för läckage i gasfas eller för superkritiska och överhettade gaser, då de saknar vätskepelare och vi får $\Delta H = 0$.

Nu när vi vet vätskepelarens höjd kan vi räkna fram tryckskillnaden ΔP ovanför vätskeytan och vid läckagets öppning. Den ges av:

$$\Delta P = \frac{g \cdot \Delta H}{v_f} \quad (4.7)$$

När vi skall beräkna trycket vid läckagets mynning P_0 måste vi välja olika ekvationer beroende på vilken typ av trycksättning vi har av tanken.

Har vi en ventilerad tank väljer vi:

$$P_0 = P_a + \Delta P \quad (4.8)$$

För en tank med padding väljer vi:

$$P_0 = P_a + \Delta P + P_t \quad (4.9)$$

Om vi har en tank utan padding fylld med en underkyld vätska eller en kryogen så måste vi ta hänsyn till det undertryck som bildas i tanken när vätska strömmar ut. Detta har i experiment visat

sig motsvara en reduktion till en fjärdedel av utströmningen. Observera att fjärdedelen kvadreras i ekvationen eftersom vi kommer att dra kvadratroten ur den i ekvation 4.28. Vi får följande P_0 :

$$P_0 = P_a + \left(\frac{1}{4}\right)^2 \cdot \Delta P = P_a + \frac{\Delta P}{16} \quad (4.10)$$

För övriga kemikalier med ett mättnadstryck över atmosfärens, $P_s(T_0) > P_a$, gäller följande:

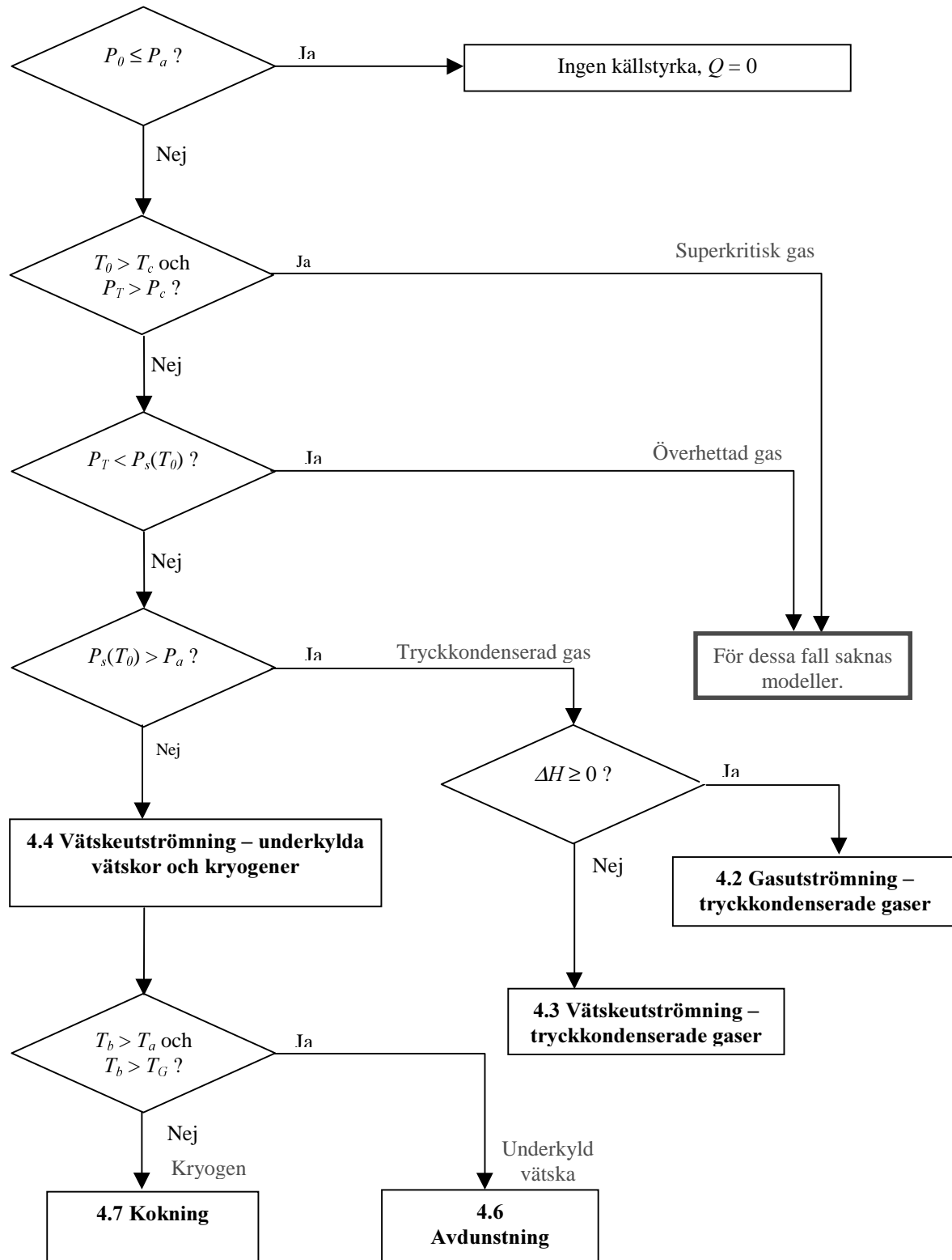
$$P_0 = P_s(T_0) + \Delta P \quad (4.11)$$

Kritisk strömning

Så länge som trycket i läckagets mynning är högre än omgivningens så råder så kallad kritisk strömning. När strömningen är kritisk är hastigheten på den utströmmande kemikalien lika med ljudhastigheten i mynningen. Vi kommer att se att vi måste göra vissa justeringar av modellerna för kritisk och icke kritisk strömning.

Val av modell

Beroende på kemikaliens karaktär och vilken typ av trycksättning som råder väljer vi olika modeller för att beräkna den luftburna källstyrkan Q . Vi studerar följande graf:



Ångbildningsvärme

Ångbildningsvärmets för kemikalien ges vid temperaturen T av följande approximation:

$$h_{fg}(T) = h_{fg1} \cdot \left(\frac{T_c - T}{T_c - T_1} \right)^{0.38} \quad (4.12)$$

Även i denna approximation använder vi oss av ett känt värde och en referenstemperatur. Det är lämpligt att välja en referenstemperatur T_1 som ligger nära de temperaturer som kan antas bli aktuella, till exempel mellan 230 – 310 K.

Utströmningskanalens längd

För alla beräkningar av källstyrka har utströmningskanalens längd betydelse. Vi skiljer på tre olika typer:

- **Punktering**, ett hål som uppstått direkt i behållarens mantel.
- **Kort utströmningskanal**, rörstump vars längd understiger L_0 .
- **Lång utströmningskanal**, rör som är längre än en kort utströmningskanal.

4.2. Gasutströmning – tryckkondenserade gaser

Förutsättning

Gasutströmning sker när ett läckage uppstår ovanför vätskefasen i en behållare med tryckkondenserad gas. Modellen är begränsad till små hål ($A_v \leq 20 \text{ cm}^2$). Om hålet är för stort kommer vätskan i behållaren att koka så häftigt att det bildas skum vilket bidrar till tvåfasutströmning, en mycket komplicerad modell som inte används i BfK. Har vi ett stort hål i gasfasen för en tryckkondenserad gas bör vi istället simulera detta genom att använda modellen för en kort utströmningskanal.

Beräkning

Vi börjar med att beräkna hur stor del av all kemikalie som läcker ut M_u genom följande ekvation:

$$M_u = M \cdot \left(1 - e^{-\frac{c_f}{h_{fg}(T_0)}(T_0 - T_b)} \right) \quad (4.13)$$

För denna typ av läckage väljer vi kontraktionsfaktorn $C_d = 0.7$.

Källstyrkan Q_{gp} beror sedan på ifall vi har kritisk strömning eller inte. För att avgöra detta behöver vi veta förhållandet mellan specifikt värme vid konstant tryck respektive specifikt värme vid konstant volym för kemikalien, denna storhet betecknas med γ . Denna konstant varierar mycket lite mellan olika kemikalier och därför väljer vi $\gamma = 1.3$ som värde för alla kemikalier.

Om $P_T \geq \left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \cdot P_a$ har vi kritisk strömning och källstyrkan Q_{gp} ges av:

$$Q_{gp} = C_d \cdot 0.667 \cdot A_v \cdot \frac{P_T}{\sqrt{R \cdot T_0}} \quad (4.14)$$

Annars om vi inte har kritisk strömning ges källstyrkan Q_{gp} av:

$$Q_{gp} = C_d \cdot 2.94 \cdot A_v \cdot \frac{P_a}{\sqrt{R \cdot T_0}} \cdot \left(\frac{P_T}{P_a}\right)^{0.231} \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{P_a}{P_T}\right)^{0.231}} \quad (4.15)$$

Källstyrkan vid gasutströmning är egentligen en avtagande funktion av tiden men för att förenkla denna så låter vi i BfK källstyrkan vara den initiala fast under kortare tid, läs mer i kapitlet om varaktighet, sidan 37.

4.3. Vätskeutströmning – tryckkondenserade gaser

Förutsättning

Att gasen är tryckkondenserad innebär att trycket i behållaren är högre eller lika med mättnadstrycket vid gällande lagringstemperatur och även att mättnadstrycket i sin tur är högre än atmosfärstrycket.

Alltså $P_T \geq P_s(T_0) > P_a$.

Notera att följande modell endast gäller för läckage av tryckkondenserade gaser där läckaget är under vätskenivån under hela förloppet. För modeller vid läckage ovanför vätskenivån, se kapitel **4.2 Gasutströmning – tryckkondenserade gaser**.

Beräkning

Ekvationen 1.1 för gaskonstanten R och ekvation 4.1 gör att vi nu kan beräkna gasfasvolumiteten för kemikalien med hjälp av allmänna gaslagen:

$$v_{g0} = R \cdot \frac{T_0}{P_s(T_0)} \quad (4.16)$$

Vid utströmning genom ett hål i behållarens mantel beräknas källstyrkan Q enligt:

$$Q = C_d A_v \sqrt{\frac{2(P_0 - P_a)}{v_f}} \quad (4.17)$$

där P_0 antas vara lika med P_T och $C_d = 0.60$

Vidare kan även massflödet per areaenhet vid kritisk strömning och jämvikt i tanken, G_{ERM} (kg / m² s) (ERM = Equilibrium Rate Model), beräknas:

$$G_{ERM} = \frac{h_{fg}(T_0)}{v_{g0} - v_f} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_f \cdot T_0}} \quad (4.18)$$

Kort kanal

Vid ett rörbrott på en kort kanal ($L < L_0$) gäller att vi beräknar två källstyrkor Q_1 och Q_2 för att senare välja det minsta av dem:

$$Q_{sc} = \frac{A_v}{\sqrt{\frac{v_f}{2 \cdot (P_s(T_0) - P_a)} + \frac{1}{G_{ERM}^2} \cdot \left(\frac{L}{L_0}\right)}} \quad (4.19)$$

$$Q_1 = A_v \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot (P_0 - P_a)}{v_f}} \quad (4.20)$$

$$Q_2 = A_v \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot (P_0 - P_s(T_0))}{v_f} + \left(\frac{Q_{sc}}{A_v}\right)^2} \quad (4.21)$$

För korta kanaler gäller alltså:

$$Q = \min(Q_1, Q_2)$$

Lång kanal

För att täcka in såväl kritisk som icke-kritisk strömning genom en lång kanal ($L \geq L_0$) så beräknas källstyrkan Q_λ genom att vi jämför två olika källstyrkor och väljer den mindre av dem. Först måste vi dock beräkna en reduktionsfaktor (friktion) för massflödet. Vi använder följande approximation för detta:

$$\eta_\lambda = \frac{1}{\sqrt[3]{1 + 0.012 \cdot \frac{L}{D}}} \quad (4.22)$$

Observera att ovanstående ekvation innehåller en konstant 0.012 som är en korrelation där kanalens råhetstal ingår. Detta är anledningen till att råhetstalet K inte används för tryckkondenserade gaser.

$$Q_{\lambda 1} = A_v \cdot \eta_\lambda \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot (P_0 - P_s(T_0))}{v_f} + G_{ERM}^2}$$

$$Q_{\lambda 2} = A_v \cdot \eta_\lambda \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot (P_0 - P_a)}{v_f}} \quad (4.23)$$

$$Q_\lambda = \min(Q_{\lambda 1}, Q_{\lambda 2})$$

4.4. Vätskeutströmning – underkylda vätskor och kryogener

Förutsättning

Kemikalien är i vätskefas då mättnadstrycket $P_s(T_0)$ är mindre eller lika med det totala trycket i tanken samt att kemikaliens kokpunkt T_b är högre än lagringstemperaturen T_0 . Alltså $P_s(T_0) < P_T$ och $T_b > T_0$.

Beräkning

Då läckage med underkylda vätskor uppstår måste vi först beräkna vätskeutströmningen Q_f .

Börja med att sätta ett värde på $C_d A_v$, där C_d är en dimensionslös kontraktionsfaktor.

$$C_d A_v = 0.6 A_v \text{ vid punktering på mantelytan.} \quad (4.24)$$

$$C_d A_v = A_v \text{ vid rörbrott.} \quad (4.25)$$

Om vi inte skall ta hänsyn till rörfriktion, det vill säga punktering på behållarens mantel, sätts massflödesreduktionsfaktorn $\eta_\lambda = 1$. I annat fall används:

$$\eta_\lambda = \left(1 + \frac{\lambda_{MIN} \cdot L}{D} \right)^{-1/2} \quad (4.26)$$

där λ_{MIN} , som är det minsta möjliga värdet på rörfriktionskoefficienten λ och ges av:

$$\lambda_{MIN} = \frac{1.33}{\left(\ln \left(3.72 \cdot \frac{D}{K} \right) \right)^2} \quad (4.27)$$

Vätskeutströmningen Q_f får vi sedan genom:

$$Q_f = C_d A_v \cdot \eta_\lambda \sqrt{\frac{2 \cdot (P_0 - P_a)}{V_f}} \quad (4.28)$$

4.5. Avdunstning och kokning

Allmänt

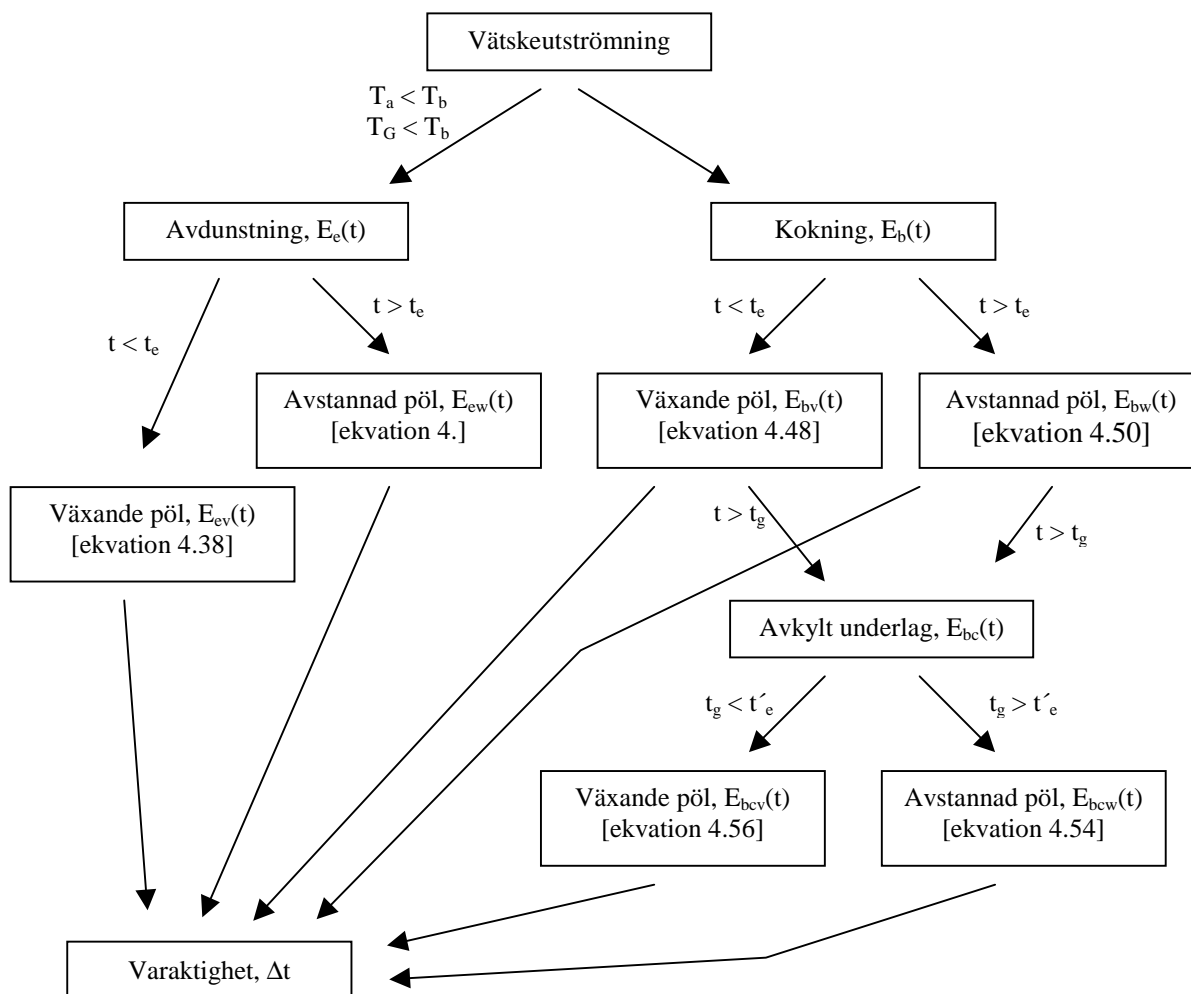
När en underkyld kemikalie läcker ut är den i vätskefas och kommer inledningsvis att bilda en pöl på marken, pölens storlek kommer att begränsas av att tillförseln av vätska upphör eller av olika typer av invallningar.

Ifall temperaturen i atmosfären och temperaturen på underlaget är under vätskans kokpunkt så kommer denna pöl kommer allt eftersom att avdunsta, det vill säga vätskan övergår i gasfas och sprids i atmosfären. Se vidare kapitel **4.6.**

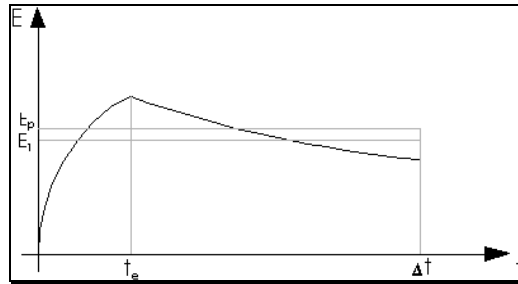
Avdunstning.

I de fall då omgivningen (luften och/eller underlaget) är varmare än kemikalien kokpunkt kommer vätskan att börja koka, detta kommer förstås att bidra till en högre källstyrka. Vid kokning går det åt energi och denna energi kommer ifrån markens värme, alltså kommer en avkylning av underlaget att äga rum och vid en viss tidpunkt så kommer underlaget inte längre att kunna tillföra kemikalien tillräckligt med energi. Se vidare kapitel **4.7. Kokning**.

Observera att det är den mängd som sprids i atmosfären som avses när vi talar om källstyrka. Vi visar hur de olika källstyrkemodellerna hänger samman:



Vi förutsätter att det i omgivningen finns naturliga eller avsiktliga invallningar som till exempel diken, vägbankar, snö, etcetera som gör att pölen som mest kan uppnå en maximal area A_M . Denna maximala pölarea kommer sedan inte att överskridas vid ytterligare påfyllning av vätska. Pölen kan naturligtvis också sluta breda ut sig på grund av att tillförseln av vätska upphör. Tidpunkten då pölen slutar breda ut sig betecknas med t_e och pölens area vid denna tid betecknas med A_e .



Figur 4.5: Avdunstningsförloppet och approximationen av detsamma.

På grund av det speciella sätt på vilket doseringsberäkningar utförs måste vi sedan beräkna olika källstyrkor beroende på ifall det är koncentrations- eller doseringsberäkningar vi vill göra. Detta kommer dock att förklaras utförligare senare i kapitel **4.8. Approximation av avdunstningen och kokningen.**

Den modell för samtidig avdunstning/kokning och pölutbredning som presenteras nedan är densamma som i *Handboken* och baseras på Kawamura & Mackay (1987) och Winter (1995).

Kända storheter:

Q_f	Tillrinningen av vätska till pölen (kg / s).
M_u	Totala mängden massa som kommer att läcka ut (kg).
d_p	Underlagets bindningskapacitet för vätskor (m).
φ_f	Vätskans densitet (kg / m ³).
A_M	Den maximala area som en pöl kan få på grund av invallningar (m ²).

Grundläggande funktioner och konstanter

Tankens tömningstid, det vill säga den tid som tillrinningen av vätska pågår:

$$\Delta t_u = \frac{M_u}{Q_f} \quad (4.29)$$

Vi antar inledningsvis att vi har en kvadratisk pöl som fyller ut invallningen, vilket ger oss följande pöllängd D i vindriktningen:

$$D = \sqrt{A_M} \quad (4.30)$$

$$\otimes \quad A_M, \text{ (maximal pölarean) } = 100 \text{ m}^2$$

Denna längd är endast en gissning, pölen kan självklart bli mindre men måttet behövs för beräkningen av överföringstalet (beskrivet ytterligare under respektive modell).

Typiska värden på värmekonduktivitet K_G och värmediffusivitet α_G för några olika underlag:

Underlag	K_G ($Jm^{-1}s^{-1}K^{-1}$)	α_G (m^2s^{-1})
<i>Sandig torr jord</i>	0,26	$2,0 \cdot 10^{-7}$
<i>Sandig fuktig (8%) jord</i>	0,59	$3,4 \cdot 10^{-7}$
<i>Grus</i>	2,5	$11 \cdot 10^{-7}$
<i>Betong</i>	0,92	$4,2 \cdot 10^{-7}$
<i>Is (-21 C)</i>	2,4	$1,4 \cdot 10^{-6}$

☒ *Underlag = Sandig fuktig jord.*

4.6. Avdunstning

d_p	Underlagets bindningskapacitet för vätskor (m).
T_a	Omgivningens temperatur (K).
T_f	Vätskepölens temperatur (K).
U_{10}	Vindstyrkan på 10 meters höjd (m / s).
k_0	Skala för massöverföringstal (m / s).
U_r	Skala för vindhastighet (m / s).
L_r	Skala för pöllängd (m).
R	Gaskonstant för ämnet ifråga (J / kg K).
Δt_u	Utsläppets varaktighet, det vill säga hur länge som vätskepåfyllningen varar.

☒	$d_p = 0,01$ m
☒	$k_0 = 0,0020$ m / s
☒	$U_r = 1,00$ m / s
☒	$L_r = 1,00$ m

Förutsättningar

För att modellen skall vara giltig förutsätts att kokpunkten för ämnet T_b ligger högre än atmosfärtemperaturen T_a och även är högre än underlagets temperatur T_G .

Funktioner och konstanter

Flyktigheten χ_s , det vill säga gaskoncentrationen på vätskeytan, denna beror på vätskans temperatur T_f :

$$\chi_s(T_f) = \frac{P_s(T_f)}{R \cdot T_f} \quad (4.31)$$

Semiempiriskt baserad ekvation för massöverföringstalet, det vill säga den hastighet varmed den mättade ångan lämnar vätskeytan:

$$k = k_0 \cdot \left(\frac{U_{10}}{U_r}\right)^{\frac{7}{9}} \cdot \left(\frac{L_r}{D}\right)^{\frac{1}{9}} \quad (4.32)$$

Vi definierar nu tre olika specifika avdunstningar ($\text{kg} / \text{m}^2 \text{ s}$), vilka alla ingår i modellen för att beräkna den totala specifika avdunstningen. För det första har vi den specifika avdunstning som skulle råda om ingen avdunstningsavkylning eller solinstrålning förelåg:

$$e_a = k \cdot \chi_s(T_a) \quad (4.33)$$

För det andra har vi den avdunstning som skulle råda om endast solinstrålningen svarade för värmeförseln, det vill säga ingen vind och på ett isolerande underlag:

$$e_r = \frac{q_s}{h_{fg}(T_f)} \quad (4.34)$$

Nu kan vi definiera den konstanta avdunstning som nås efter tillräckligt lång tid när värmeledningen från underlaget blivit försumbar:

$$e_{\infty} = e_a - \frac{e_a - e_r}{1 + \frac{1,63 \cdot P_a \cdot c_{pa} \cdot T_a}{(h_{fg}(T_a))^2 \cdot \chi_s(T_a)}} \quad (4.35)$$

Vidare definierar vi en tidskonstant Γ ($s^{1/2}$) som bland annat beror av underlagets värmeledningsförmåga:

$$\Gamma = \frac{\frac{K_G \cdot R \cdot T_a}{\sqrt{\pi \alpha_G \cdot k}}}{\frac{(h_{fg}(T_a))^2 \cdot \chi_s(T_a)}{T_a} + 1,63 \cdot P_a \cdot c_{pa}} \quad (4.36)$$

Den specifika avdunstningen från en yta som vätsks av vätskan vid tiden $t = 0$ kan då skrivas som funktion av tiden:

$$e_M(t) = \frac{e_{\infty} \cdot \sqrt{t} + e_a \cdot \Gamma}{\sqrt{t} + \Gamma} \quad (4.37)$$

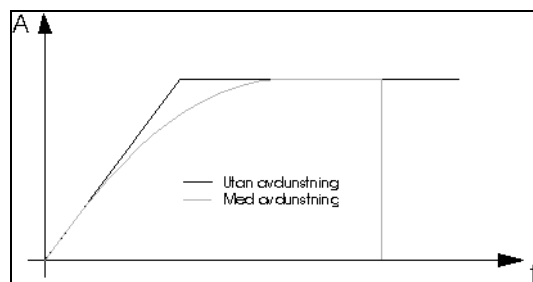
Totala avdunstningen och pölens area följer approximativt under pölutbredningsfasen:

$$E_{ev}(t) = Q_f \cdot \left(1 - e^{-\frac{e_M\left(\frac{t}{16}\right)}{\varphi_f d_p} t} \right) \quad (4.38)$$

$$A_{ev}(t) = \frac{E_{ev}(t)}{e_M\left(\frac{t}{4}\right)} \quad (4.39)$$

Pölens area

Vi börjar med att försöka finna t_e , det vill säga den tid då pölens utbredning upphör. För att göra det måste vi undersöka ifall pölen når ut till invallningen innan tillförseln av vätska upphör. För enkelhetens skull löser vi ekvation 4.39 numeriskt och för att kunna göra det behöver vi en steglängd dt_e . Ett klokt val är en bråkdel av det minsta värde t_e kan anta då ingen avdunstning föreligger.



Steglängden dt_e ges av följande två formler. Det finns två fall, ett där invallningen begränsar pölen och ett annat där tillförseln av vätska upphör; vi väljer det fall som sker först:

$$t_{e \min} = \min \left(\frac{A_M \cdot \phi_f \cdot d_p}{Q_f}, \frac{M_u}{Q_f} \right) \quad (4.40)$$

$$dt_e = \frac{t_{e \min}}{100} \quad (4.41)$$

Tiden t_e löses genom att stega från $t = 0$ med steglängden dt_e tills $A(t) > A_M$ eller tills $t > \Delta t_u$ vilketdera som inträffar först.

Avdunstningens varaktighet

Nästa steg blir att beräkna hur lång tid det tar innan all massa avdunstat, det vill säga tiden Δt . Vi börjar med att beräkna den area som pölen hade när den var som störst med hjälp av ekvation 4.39:

$$A_e = A_{ev}(t_e) \quad (4.42)$$

Efter som pöllängden $D = \sqrt{A_M}$ endast var en gissning så räknar vi nu om alla avdunstningssteg där vi sätter $D = \sqrt{A_e}$. Ytterligare iterationer är inte nödvändiga.

Eftersom vi känner t_e kan vi teckna en konstant τ (s):

$$\tau = \Gamma^2 \cdot \left(\frac{e_a - e_M \left(\frac{t_e}{4} \right)}{e_M \left(\frac{t_e}{4} \right) - e_\infty} \right)^2 - t_e \quad (4.43)$$

Sedan så tecknar vi ett uttryck för avdunstningen efter att pölen upphört att breda ut sig, det vill säga $t \geq t_e$:

$$E_{ew}(t) = A_e \cdot e_M(t + \tau) \quad (4.44)$$

Då återstår bara att lösa ut varaktigheten Δt ur följande uttryck (OBS! $E(t)$ ges av två olika funktioner beroende på om t avser tiden före eller efter det att pölutbredningen upphört):

$$M_u = \int_0^{t_e} E_{ev}(t) + \int_{t_e}^{\Delta t} E_{ew}(t) \quad (4.45)$$

Denna ekvation löses numeriskt med val av steglängden enligt följande:

$$dt = \frac{\Delta t_u}{100} \cdot \max \left(\frac{Q_f}{e_a \cdot A_M}, \frac{1}{1 - e^{-\frac{e_a \cdot \Delta t_u}{\phi_f \cdot d_p}}} \right) \quad (4.46)$$

I ekvationen ovan används pöllängden $D = \sqrt{A_M}$.

4.7. Kokning

d_p	Underlagets bindningskapacitet för vätskor (m).
T_G	Underlagets temperatur (K) .
h_{fg}	Vätskans ångbildningsvärme (J / kg).
T_b	Vätskans kokpunkt (K).
☼	$T_G = T_a$ (atmosfärens temperatur).

Förutsättningar

För att modellen skall vara giltig förutsätts att värmeledningen från underlaget dominerar över värmeförlust från luft och eventuell solinstrålning och att underlagets temperatur T_G är större än kemikaliens kokpunkt T_b .

Funktioner och konstanter

Först definierar vi en konstant θ enligt:

$$\theta = \frac{K_G(T_G - T_b)}{h_{fg}(T_b)\sqrt{\pi\alpha_G}} \quad (4.47)$$

Om vätsketillförseln Q_f och pölens medeldjup d_p är konstanta kan pölarean $A(t)$ och totala avkokningen $E(t)$ approximeras till:

$$E_{bv}(t) = Q_f \left(1 - \frac{\left(1 + \frac{2\theta\sqrt{t}}{3\varphi_f d_p} \right)}{\left(1 + \frac{4\theta\sqrt{t}}{3\varphi_f d_p} \right)^2} \right) \quad \text{för } t \leq t_e \quad (4.48)$$

$$A_{bv}(t) = \left(\frac{Q_f}{\varphi_f d_p} \right) \cdot \frac{t}{\left(1 + \frac{4}{3} \cdot \frac{\theta}{\varphi_f d_p} \cdot \sqrt{t} \right)} \quad \text{för } t \leq t_e \quad (4.49)$$

Pölens area

Pölutbredningen kommer att avstanna, antingen när vätsketillförseln upphör, eller när pölen hindras av en invallning av något slag. Tiden t_e då pöltillväxten avstannar tas fram numeriskt genom att beräkna dt_e enligt ekvation 4.40 och 4.41 och sedan stega t_e från $t = 0$ tills $A(t) > A_M$ eller tills tiden $t > \Delta t_u$.

Avstannad pöltillväxt

Om vi betecknar tidpunkten för avstannandet med t_e gäller med god approximation för $t > t_e$ att:

$$E_{bw}(t) = \frac{\theta \cdot A_e}{\sqrt{t + \tau_k}} \quad \text{för } t > t_e \quad (4.50)$$

$$A_{bw}(t) = A_e \quad \text{för } t > t_e \quad (4.51)$$

där A_e är den avstannade pölarean $A_{bv}(t_e)$ enligt ekvation 4.49 och tidskonstanten τ_k ges av:

$$\tau_k = \frac{A_e^2 \cdot \theta^2}{E_e^2} - t_e \quad (4.52)$$

E_e i denna ekvation är avkokningen $E_{bv}(t_e)$ enligt 4.48 just när pölutbredningen avstannade.

Avkylt underlag

I hela processen gäller att värmeförseln från underlaget skall dominera över andra former av värmeförsel till vätskan. Eftersom vi har en avkylning av underlaget kommer medelvärdet av värmeförseln från underlaget att avta med tiden, detta gör att modellen till sist underskattar den totala avgasningen. Därför används kokningsmodellen fram till tiden t_g vilket är så länge som följande är uppfyllt:

$$\frac{E(t)}{A(t)} \geq e_\infty \quad (4.53)$$

Där e_∞ är enligt ekvationerna 4.35, 4.33 och 4.34 för vanlig avdunstning men med T_b istället för T_a och med $D = \sqrt{A_M}$. När villkoret 4.53 inte uppfylls längre vid tiden t_g , används följande två alternativ för den fortsatta avdunstningen:

Om $t_g \geq t_e$, det vill säga pölutbredningen har avstannat.

$$E_{bcw}(t) = A_e \cdot e_\infty \quad \text{för } t > t_g \quad (4.54)$$

$$A_{bcw}(t) = A_e \quad \text{för } t > t_g \quad (4.55)$$

annars om $t_g < t_e$, det vill säga pölen breder fortfarande ut sig.

$$E_{bcv}(t) = Q_f \left[1 - \left(1 - \frac{A_g \cdot e_\infty}{Q_f} \right) \cdot e^{-\frac{e_\infty \cdot (t-t_g)}{\rho_f \cdot d_p}} \right] \quad \text{för } t_g < t < t'_e \quad (4.56)$$

$$A_{bcv}(t) = \frac{Q_f}{e_\infty} \left[1 - \left(1 - \frac{A_g \cdot e_\infty}{Q_f} \right) \cdot e^{-\frac{e_\infty \cdot (t-t_g)}{\rho_f \cdot d_p}} \right] \quad \text{för } t_g < t < t'_e \quad (4.57)$$

$A_g = A(t_g)$ enligt ekvation 4.49. Tiden t'_e anger när $A(t)$ avstannar, alltså när pölen slutar breda ut sig. Denna tid ges av:

$$t'_e = \min(t_1, \Delta t_u)$$

Tiden t_1 är när $A = A_M$ och utströmning ännu pågår och ges av:

$$t_1 = t_g + \frac{\rho_f \cdot d_p}{e_\infty} \cdot \ln \left[\frac{Q_f - A_g \cdot e_\infty}{Q_f - A_M \cdot e_\infty} \right]$$

När $t > t'_e$ gäller:

$$E(t) = A'_e \cdot e_\infty$$

Arean $A'_e = A(t'_e)$ enligt ekvation 4.57.

Kokningens varaktighet

Nästa steg blir att beräkna hur lång tid det tar innan all massa avdunstat/avkokat, det vill säga tiden Δt , vilken vi löser ut ur följande uttryck. Observera att $E(t)$ ges av flera olika funktioner beroende på om tiden avser före eller efter pölutbredningen avstannat och om villkoret för modellens giltighet är uppfyllt.

$$M = \int_0^{t_e} E_{bv}(t) dt + \int_{t_e}^{t_g} E_{bw}(t) dt + \int_{t_g}^{t'_e} E_{bcv}(t) dt + \int_{t'_e}^{\Delta t} E_{bcw}(t) dt \quad (4.58)$$

Denna ekvation löses numeriskt med steglängd enligt 4.40 och 4.41 för $0 \leq t \leq t'_e$ och med

$$dt = \frac{M_r}{A_e \cdot e_\infty} \cdot \frac{1}{100} \text{ för } t > t'_e \quad (4.59)$$

M_r i ekvation 4.59 är den återstående mängden vid t'_e i pölen.

4.8. Approximation av avdunstningen och kokningen

För att modellerna skall kunna implementeras i ett datorprogram måste vi göra vissa förenklingar. För det första så approximeras den tidsberoende avdunstningen/kokningen E med en konstant avdunstning/kokning.

I detta skede av koncentrationsberäkningen skall vi bestämma oss för ifall vi önskar beräkna koncentration eller dosering i våra framtida beräkningar. Vi måste nämligen utföra ett trick för att få rätt massbalans i våra beräkningar ifall vi vill beräkna dosering. Detta för att uttrycket för dosering innehåller en variabel p och ser ut på följande sätt:

$$D(t) = \int_{a=0}^t [C(a)]^p da \quad (4.60)$$

Skall vi beräkna dosering med hjälp av vår modell för avdunstning och kokning får vi följande uttryck för källstyrkan:

$$E(t) = E_p = \left[\frac{\int_{a=0}^t [E(a)]^p da}{\Delta t} \right]^{\frac{1}{p}} \quad (4.61)$$

I de fall då vi inte är intresserade av dosering utan bara skall utföra koncentrationsberäkningar approximerar vi bara källstyrkan från modellen för avdunstning och kokning med följande:

$$E = E_1 = \frac{M}{\Delta t} \quad (4.62)$$

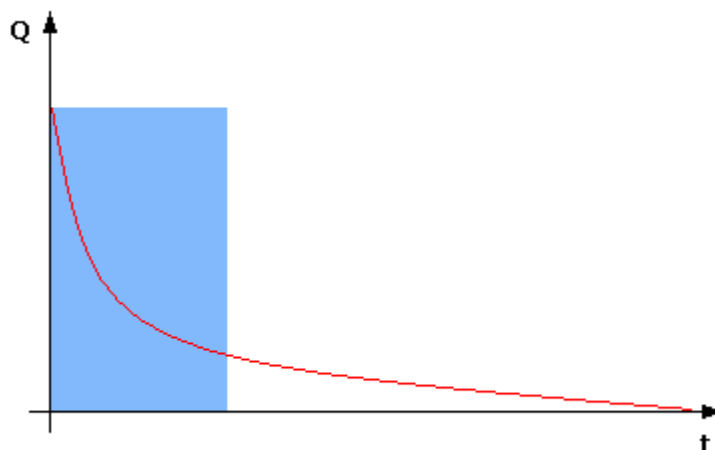
4.9. Varaktighet

Allmänt

Med begreppet varaktighet menas i detta fall den tid under vilken farlig gas lämnar en källa. Det finns två sätt på vilka farlig gas lämnar en källa, tryckkondenserad gas som sprutar ur en tank och underkyld vätska som läcker ut och bildar en avdunstande/kokande pöl. I dessa två fall betecknas källstyrkan med Q för de tryckkondenserade gaserna och E för de underkylda vätskorna. Efter en tid kan vi räkna med att en skadebegränsande åtgärd utförs, det innebär alltså att vi på lite olika sätt kan sänka källstyrkan från ett läckage. Vi tittar på hur olika skadebegränsande åtgärder påverkar källstyrkan med hjälp av några mycket enkla grafer.

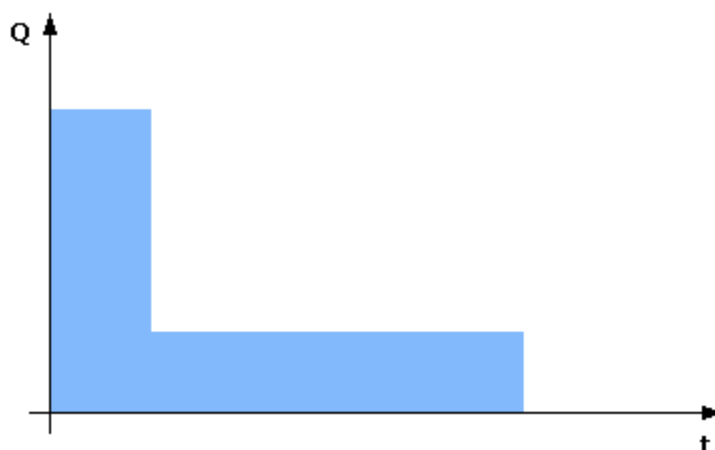
Tryckkondenserade gaser i gasfas

Utan skadebegränsande åtgärd



Källstyrkan vid gasutströmning är exponentiellt avtagande med tiden. I BfK låter vi källstyrkan vara lika med den initiala till dess att all massa läckt ut.

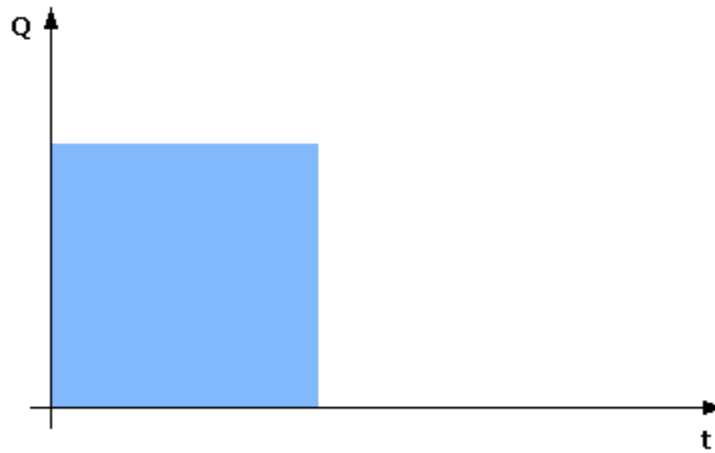
Skadebegränsande åtgärd genom absorption



Utströmmande gas är svår att hantera. En metod är att leda gasen ner i ett vattenbad. I BfK simuleras skadebegränsande åtgärd för gasutströmning med en sänkning av källstyrkan samtidigt som varaktigheten förlängs så att utläckt massa blir densamma.

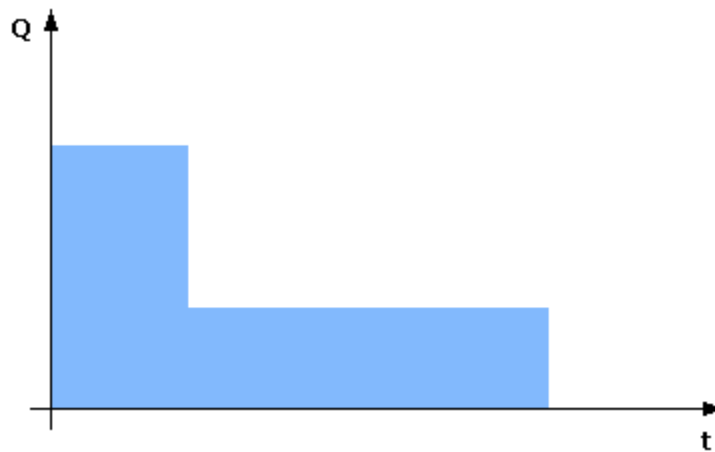
Tryckkondenserade gaser i vätskefas

Utan skadebegränsande åtgärd



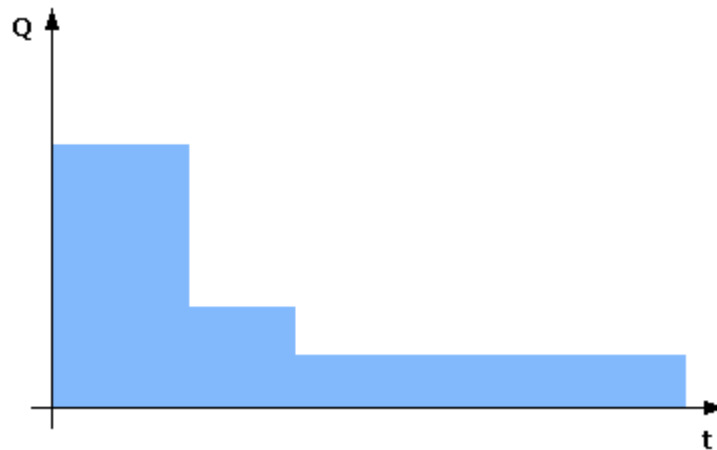
Full källstyrka tills all kemikalie läckt ut.

Skadebegränsande åtgärd genom att minska flödet



Denna typ av begränsning får vi då till exempel en kran delvis stängs, en träkil slås i läckaget eller en gummikudde används för att täcka för ett läckage. Vi ser att vi får en längre varaktighet där källstyrkan är begränsad under den senare fasen.

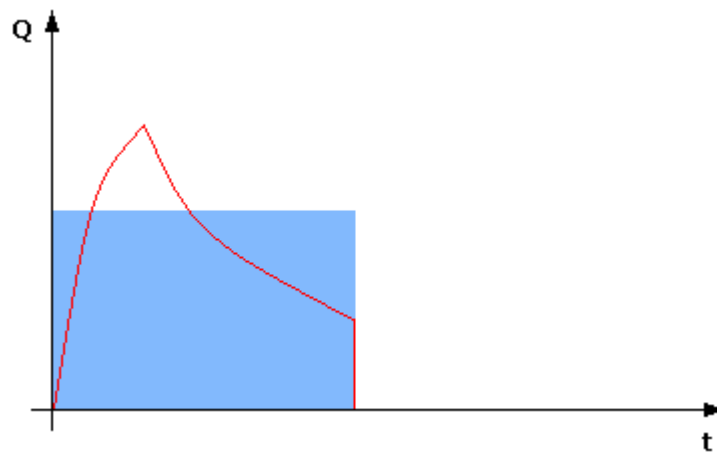
Skadebegränsande åtgärd genom återkondensering



Denna typ av begränsning får vi när den utströmmande tryckkondenserade vätskan inte hinner förgasas helt på grund av att vi försöker undvika värmeförlust. Den vätska som då bildas samlas upp i uppsamlingsanordningar och täcks över så att endast en mycket liten del läcker ut ur övertäckningen. Källstyrkebegränsningen är en tvåstegsfas där vi i den första fasen har kvar den så kallade adiabatiska förångningen. Den andra fasen är ren avdunstning från pölen.

Underkylda vätskor

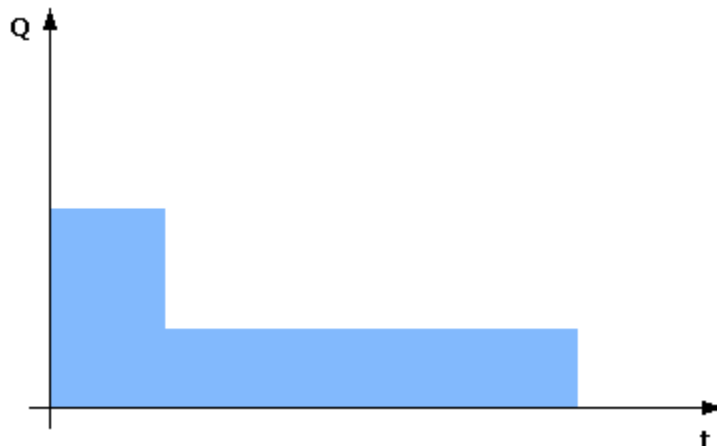
Utan skadebegränsande åtgärd



Avdunstningen/kokningen är en tidberoende funktion som approximeras till en och samma källstyrka (se kapitel 4.5.

Avdunstning och kokning). Observera att tömningstiden av tanken inte är den samma som varaktighet för underkylda vätskor ty när tanken är tom finns det fortfarande vätska på marken som avdunstar eller kokar.

Skadebegränsande åtgärd genom invallning



Genom att minska arean på pölen som den utströmmande vätskan bildar så minskar också avdunstningen och kokningen och därigenom också källstyrkan.

Beräkning av varaktighet

Programmet beräknar varaktighet i två olika varianter, en där ingen skadebegränsande åtgärd finns och en där vi räknar med en tvåfasvariant på skadebegränsande åtgärd. Följande algoritm används:

Kända storheter:

- M_u Mängden kemikalie som kommer att läcka ut (kg).
- Q Källstyrkan utan inverkan av skadebegränsande åtgärd (kg / s).
- Q_r Källstyrkan efter att en skadebegränsande åtgärd gjorts (kg / s).
- t_r Tiden till dess att en eventuell skadebegränsande åtgärd påbörjas (s).

Om vi har en skadebegränsande åtgärd måste vi börja med att beräkna den massa M_r som återstår i källan när den skadebegränsande åtgärden startar:

$$M_r = M_u - Q \cdot t_r \quad (4.63)$$

Om vi inte har någon skadebegränsande åtgärd eller om det visar sig att ingen massa återstår i källan vid $t = t_r$, det vill säga $M_r \leq 0$, så gäller:

$$\text{Varaktighet} = \frac{M_u}{Q} \quad (4.64)$$

annars så gäller:

$$\text{Varaktighet} = t_r + \frac{M_r}{Q_r} \quad (4.65)$$

5. Koordinatsystem för kemikalieolyckor

5.1. Beräkningsmatriser

En beräkningsmatris är en samling punkter som placerats ut över en yta så att i var och en av dessa punkter beräknas koncentrationen utifrån de speciella egenskaper som råder i punkten samt den tid som förlupit sedan utsläppet startade. I detta sammanhang är det endast lägeskoordinaten för punkten som är specifik, i framtiden skulle vi kunna tänka oss en mer avancerad variant med hänsyn till topografin, terrängen och väderförhållandet i varje punkt.

Vi ställer vissa krav på vad vi skall kunna göra med beräkningsmatris för att den skall passa för spridningsmodeller:

Sätta och hämta koncentrationvärden med hjälp av kända rad- och kolumnvärden. Vi kallar dessa två funktioner för $set(r,c)$ och $get(r,c)$ där r är den kända raden och c är den kända kolumnen.

Hämta ett koncentrationvärde med hjälp av en känd lägeskoordinat. Detta innebär alltså att om vi känner en lägeskoordinat så kan vi fråga efter värdet i denna. Det finns olika sätt att finna värdet i denna punkt. Valet av metod beror på avvägningen mellan korrekthet kontra komplexitet.

Tag reda på en viss beräkningspunkts lägeskoordinat. Detta gör vi med hjälp av kända rad- och kolumnvärden som nödvändigtvis inte behöver infalla på ett elements exakta position, det vill säga att rad- och kolumnvärden anges som flyttalsvärden. Vi gör detta med hjälp av två funktioner $getx(rf,cf)$ och $gety(rf,cf)$.

Det finns ytterligare ett krav som hänger ihop med det funktionsbibliotek som FOA använder för att finna isolinjer (nivågränser) i matrisen.

Hämta ett koncentrationvärde med hjälp av kända rad- och kolumnvärden som flyttal. Vi kallar denna funktion för $get(rf,cf)$.

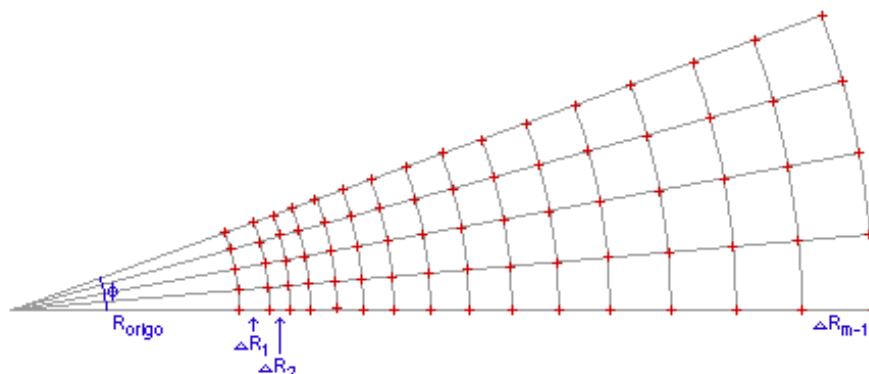
5.2. Den sektorformade beräkningsmatrisen

Grundidé

Den gasplym som bildas vid ett utsläpp som studeras uppifrån, alltså koncentrationen i ett horisontellt plan på en viss höjd och som överstiger en viss koncentrationsgräns, antar efter en tid en form som påminner en aning om ett fotavtryck eller en cigarr. För att då skapa beräkningsmatrisen som följer plymens form så bra som möjligt utan att bli för matematiskt komplicerad kan vi låta beräkningsmatrisen ha en form av en cirkelsektor så att matrisen växer med plymen på bredden. "Fotavtryckets" bredd avtar dock i vindriktningen och det uppstår ett problem eftersom beräkningsmatrisen fortsätter att breda ut sig. Detta kan justeras då den relativa koncentrationsförändringen avtar ju längre från källan vi kommer, då kan även beräkningspunkterna placeras glesare längre från källan och det gör mindre att den fortsätter växa. Det innebär att de punkter som ligger utanför plymen är glest placerade och är alltså få till antalet. Då blir det relativt få punkter beräknas i onödan jämfört med den ekvidistanta matrisen då punkterna på långa avstånd är placerade tätt och det blir många punkter som beräknas i onödan. Alltså en sektorformad matris där avståndet mellan beräkningspunkterna varierar med avståndet från källan bör vara en någorlunda effektiv utformning.

Matematisk uppställning

För att kunna hantera den sektorformade matrisen på ett enkelt sätt bör representationen vara sådan att alla funktioner är explicita, det vill säga att funktioner inte gör sökningar bland elementen för att finna svar på frågor utan med hjälp av ett matematiskt resonemang ges rätt svar.



Figur 5.1: Schematisk skiss över den sektorformade beräkningsmatrisen med beteckningar.

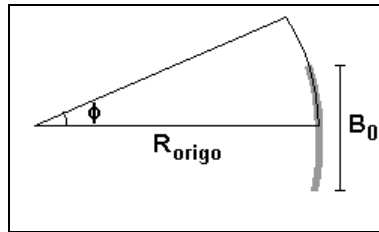
Den sektorformade matrisen bygger på att avståndet mellan punkterna växer med avståndet i vindriktningen både i x- och y-led. Tillväxten i y-led kommer naturligt i och med att avståndet mellan två vinkelben växer ju längre från origo vi kommer. Tillväxten i x-led får vi tvinga fram matematiskt med hjälp av en tillväxtfaktor C så att avståndet mellan två punkter alltid är en viss faktor större än avståndet mellan föregående punkter.

Kända storheter:

B_0	Primärkällans bredd (m).
ϕ	Sektorns öppningsvinkel (rad).
P	Faktor som styr koordinatsystemets upplösning (-).
L	Uppskattad längd av spridningsbilden.
☒	$\phi = 0.6$ rad
☒	$P = 0.0125$

Inpassning av primärkällan

Även om ett gasutsläpp sker från en punktkälla så görs spridningsberäkningarna utifrån ett så kallat primärfönster, en initial spridningsfas som inte beskrivs i gaussmodellen utan baseras på byggnader, topografi, utströmningsförlopp och så vidare. Det betyder alltså att gasflödet fördelas jämt över en vertikal yta tvärs vindriktningen. Detta primärfönster är egentligen bara en beräkningsteknisk egenhet men den ställer till lite problem för den sektorformade beräkningsmatrisen.



Figur 5.2: Visar hur primärfönstret flyttas fram så att den gott och väl ryms inom sektorn.

Eftersom den sektorformade matrisens spets endast kan beskriva en punktkälla så måste primärfönstret på grund av sin bredd att flyttas längs vindriktningen tills den gott och väl ryms inom sektorn, se Figur 5.2. Om vi antar att primärfönstrets bredd är B_0 så verkar det lämpligt att välja den erforderliga längden på sektorns cirkelbåge till $2B_0$ vid $x = R_{origo}$. Observera att spridningen är speglad längs vindriktningen vilket gör att endast halva bredden behöver beräknas, det vill säga att vi får följande uttryck för den ointressanta spetsen på sektorn där inga koncentrationvärden kommer att lagras (ϕ är en i förväg vald öppningsvinkel på sektorn och mäts i radianer):

$$R_{origo} = \frac{B_0}{\phi} \quad (5.1)$$

Allmänna formler

Den ekvation som är mycket av grundidéen för det matematiska resonemanget kring den sektorformade matrisen är den som beskriver tillväxtfaktorns C inverkan. Som sagts tidigare så är avståndet mellan två punkter i x-led C gånger större än mellan föregående två punkter.

Ett mer korrekt sätt att se det är egentligen att varje rad i matrisen representerar en cirkelbåge och på rad i är dess radie C gånger större än radien på cirkelbågen på raden $i-1$. Eftersom vi vet radien på en första raden kan vi skriva:

$$\begin{aligned} R_1 &= R_{origo} \\ R_i &= R_{i-1} \cdot C \end{aligned} \quad (5.2)$$

I Thaning & Winter (1997) kapitel 8.7.2 eller 8.9.2 framgår att σ_y först växer linjärt med avståndet ($\propto x$) för att senare gå mot att bli ($\propto \sqrt{x}$). Om vi antar att den intressanta bredden på gasplymen tvärs vindriktningen är $A\sigma_y(x)$, där A är en konstant, och vi kräver en upplösning på n gridpunkter i samma led får vi ett uttryck för bredden Δy längst ut på varje delsektor:

$$\Delta y(x) = \frac{A\sigma_y(x)}{n-1}$$

För ett momentant eller kortvarigt utsläpp är det lämpligt med ett samma avstånd tvärs som i vindriktningen eftersom $\sigma_x \approx \sigma_y$, Thaning & Winter (1997). För kontinuerliga eller längre utsläpp blir variationerna i x-led betydligt mindre. Detta resonemang leder till att det kan vara lämpligt att låta avstånden mellan punkterna vara ungefär lika både tvärs som i vindriktningen då det ger en tillräckligt bra upplösning i både det momentana och det kontinuerliga fallet. Vi väljer en fast öppningsvinkel på sektorn ϕ . Den bör väljas så att alla intressanta punkter kommer med utan att för den skull bli för stor, detta med tanke på att vid spridning långt bort längs vindriktningen med en stor öppningsvinkel blir avstånden tvärs vindriktningen onödigt stora. Vi uppskattar också spridningsbildens (plymens) längd till L , som antas vara känd beroende på hur långt från källan vi vill göra beräkningar. Därmed kan vi räkna fram ett ungefärligt värde på sektors radie R :

$$R = L + R_{origo} \quad (5.3)$$

Vi inför en vikt P som anger hur stor del av den totala radien R som skall motsvaras av det största avståndet ΔR_{m-1} . Observera att avståndet mellan kolumnerna i rad m blir aningen större men att detta bara är en försumbar effekt av avståndens definition.

$$\Delta R_{m-1} = P \cdot R \quad (5.4)$$

Vi kan nu med enkel trigonometri räkna fram vad avstånden mellan punkterna bör vara närmast källan så att vi fortfarande behåller samma avstånd i x- som y-led.

$$\Delta R_1 = R_{origo} \cdot \Delta \phi$$

Våra antaganden innebär alltså att vi får en beräkningsmatris där avståndet mellan punkterna växer linjärt med avståndet från källan. Vi använder tillväxtfaktorn C och får följande uttryck för avståndet till föregående rad i matrisen, alltså:

$$\Delta R_i = \Delta R_{i-1} \cdot C = \Delta R_1 \cdot C^{i-1} \quad (5.5)$$

Avståndet mellan två intilliggande punkter längs en kolumn är lika som skillnaden mellan deras respektive avstånd från origo. Om vi utnyttjar detta samt ekvation 5.2 får vi ett annat uttryck för ΔR_i :

$$\Delta R_i = R_{i+1} - R_i = R_i \cdot C - R_i = R_i \cdot (C - 1) \quad (5.6)$$

Vi bestämmer ett ungefärligt värde på den delvinkel vi vill ha mellan varje kolumn.

$$\Delta \phi = \frac{\Delta R_{m-1}}{R} = \frac{P \cdot R}{R} = P \quad (5.7)$$

Genom att utnyttja ekvation 5.2 och 5.6 kan vi nu lösa ut tillväxtfaktorn C , observera att $R = R_m$:

$$\begin{aligned} \Delta R_{m-1} &= R \cdot \Delta \phi \\ R_{m-1} \cdot (C - 1) &= R_m \cdot \Delta \phi \\ R_{m-1} \cdot (C - 1) &= R_{m-1} \cdot C \cdot \Delta \phi \\ C - 1 &= C \cdot \Delta \phi \\ C &= \frac{1}{1 - \Delta \phi} \end{aligned}$$

För godtyckliga punkter på rad j kan vi teckna ett uttryck för avståndet från origo som lyder:

$$R_j = R_{origo} + \sum_{i=1}^{j-1} \Delta R_i = R_{origo} + \sum_{i=1}^{j-1} \Delta R_1 \cdot C^{i-1}$$

Ovanstående uttryck är en geometrisk serie som kan utvecklas enligt metod i Nordling & Österman (1987):

$$R_j = R_{origo} + \frac{\Delta R_1 (1 - C^{j-1})}{(1 - C)} \quad (5.8)$$

Eftersom antalet rader och kolumner i matrisen måste vara kända för att vi skall kunna allokera utrymme i minnet så ställer vi upp några ekvationer för att finna m och n . Observera att vi får justera dessa ekvationer lite eftersom att m och n är heltal. Vi börjar med att finna antalet kolumner, det gör vi enkelt då vi vet delvinkeln $\Delta\phi$ samt hur stor hela öppningsvinkeln är.

$$\Delta\phi = \frac{\phi}{n-1} \quad (5.9)$$

$$n = \left\lceil \frac{\phi}{\Delta\phi} + 1 \right\rceil \quad (5.10)$$

Eftersom att n avrundas så måste vi justera $\Delta\phi$ genom att räkna om ekvation 5.9 med det framräknade värdet på n .

För att sedan finna antalet rader m sätter vi in m i ekvation 5.8, då får vi $R = R_m$ och löser ut antalet rader:

$$R_m = R_{origo} + \frac{\Delta R_1 (1 - C^{m-1})}{(1 - C)}$$

$$C^{m-1} = \frac{(R - R_{origo})(C - 1)}{\Delta R_1} + 1$$

$$m = \left\lceil \frac{\ln\left(\frac{(R - R_{origo})(C - 1)}{\Delta R_1} + 1\right)}{\ln(C)} \right\rceil + 1 \quad (5.11)$$

Nu återstår bara att justera den totala radien R efter det nu bestämda heltalsvärdet på m , detta görs genom att återigen sätta in m i ekvation 5.8.

Fysisk representation i minnet

Det vanligaste sättet att representera en matris ($m \times n$) där m är antalet rader och n är antalet kolumner är helt enkelt en vektor med tal. Denna vektor består alltså av $m \cdot n$ element och behöver bara innehålla koncentrationerna i de punkter som elementen motsvarar. Många andra typer av beräkningsmatrisen har extrainformation till varje punkt som till exempel koordinater men det behövs inte i detta fall på grund av att de går att räkna fram matematiskt.

Hanteringsfunktioner

I detta kapitel beskrivs de olika funktionerna som spridningsmodellerna kräver för att kunna utnyttja den sektorformade beräkningsmatrisen. Dessa krav finns beskrivna på sidan 41.

get(r,c)

Denna är den enklaste av alla funktionerna och bygger helt och hållet på den fysiska representationen i minnet. Funktionen returnerar helt enkelt bara värdet i matrisen på rad r och kolumn c . Om matrisen har n stycken kolumner får vi följande index för det sökta elementet i den fysiska vektorn i minnet:

$$index = r \cdot n + c$$

get(rf,cf)

Ibland så finns det ett behov av att kunna ta reda på koncentrationen i en punkt som inte ligger exakt på en av matrisens element. Funktionen *get(rf,cf)* hämtar ett värde ur matrisen där *rf* och *cf* är flyttalsvärden, det vill säga de behöver inte ange ett jämnt kolumn- eller radvärde i matrisen.

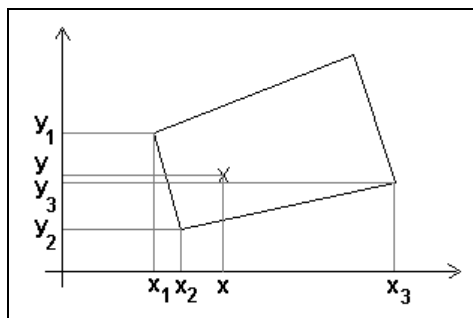
Här kan vi välja mellan ett flertal sätt att beräkna koncentrationen i punkten.

Närmaste punkten. Det vill säga att vi väljer samma värde som det närmaste matriselementet har. Detta är ett mycket enkelt sätt men har klara brister i sin korrekthet.

Medelvärde av intilliggande punkter. Detta är också en enkel metod men har precis som ovanstående sina brister. Tag till exempel det fall då de närmaste punkterna varierar mycket och den sökta punkten ligger mycket nära en känd punkt, då kommer denna metod att ge ett klart felaktigt värde.

Interpolering av koncentrationen utifrån intilliggande punkter. Denna metod innebär att avståndet till närliggande punkter och deras värde har betydelse för koncentrationen i den sökta punkten.

Eftersom interpolering i de allra flesta fall ger den mest korrekta och därmed bästa uppskattningen så väljer vi denna metod. Då variationen i gaussmodellen mellan punkterna är förhållandevis liten kan vi göra ett antagande om att tre av de närmaste punkterna spänner upp ett plan i vilket den sökta punkten ligger.



Figur 5.3: Beteckningarna på den sökta punkten och de närliggande matriselementen.

Ekvationen för ett plan ser ut på följande sätt där K är koncentrationen i punkten (x,y) och a, b och c är konstanter, Adams (1991) ekvation 12.4.1:

$$ax + by + c = K$$

I **Appendix A** finns lösningen av ekvationen då vi utnyttjar de närliggande punkterna (x_1, y_1) , (x_2, y_2) och (x_3, y_3) . Observera att punkten måste ligga inom sektorns område för att det skall finnas tre giltiga punkter att interpolera utefter. Då får vi följande ekvation för värdet i punkten (x,y) :

$$K = \frac{(y_1 - y_2)(K_2 - K_3) + (y_2 - y_3)(K_1 - K_2)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) - (x_2 - x_3)(y_1 - y_2)}(x - x_1) + \\ + \frac{(x_2 - x_3)(K_1 - K_2) + (x_1 - x_2)(K_2 - K_3)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) - (x_2 - x_3)(y_1 - y_2)}(y - y_1) + K_1$$

getx(rf,cf)

Det exakta avståndet från origo till punkten ges av ekvation 5.8 och den kallar vi för R_{r-1} . Vinkeln α till den sökta punkten ges av:

$$\alpha = cf \cdot \Delta\phi \quad (5.12)$$

Ur enkel trigonometri fås x-koordinaten enligt följande:

$$x = R_{r-1} \cdot \cos(\alpha) - R_{origo} \quad (5.13)$$

gety(rf,cf)

Vi beräknar α med hjälp av ekvation 5.12. Då får vi med hjälp av trigonometri ett uttryck för y-koordinaten:

$$y = R_{r-1} \cdot \sin(\alpha) \quad (5.14)$$

6. Koordinatsystem för C-angrepp

6.1. Bakgrund

Nedan anger x koordinaten längs vindriktningen och y koordinaten tvärs (90°) vindriktningen.

I Kap 3 diskuterades möjligheten att använda koordinatsystem med variabelt gridavstånd för att minska antalet beräkningspunkter men ändå ha tillräckligt bra upplösning överallt. Grundtanken var att eftersom molnet på grund av utspädning, tillväxer när det förflyttas i vindriktningen kan gridavståndet ökas när avståndet från källpunkten växer utan att antalet gridpunkter inom molnet minskar. Från diskussionen i kapitel 3 framgår att för avstånd ut till några km fungerar det bra att låta gridavståndet växa linjärt med avståndet eftersom molnets storlek, karakteriserad av $\sigma_y(x)$, i stort sett $\propto x$. För större avstånd blir dock tillväxten $\propto \sqrt{x}$ och för att undvika en alltför dålig upplösning på stora avstånd är det viktigt att ta koordinatsystemet utformas så att det tas hänsyn till detta.

I denna modell är har koordinatsystemet valts så att:

$$\Delta x = \frac{\sigma_y(t(x))}{2} \quad (6.1)$$

$$\Delta y = \frac{\sqrt{\sigma_y(t(x))^2 + \left(\frac{L_y}{4}\right)^2}}{2} \quad (6.2)$$

$$t(x) = \frac{x}{u_p} \quad (6.3)$$

där L_y linjekällans utsträckning i y -led och u_p är advektionshastigheten för primärmolnet.

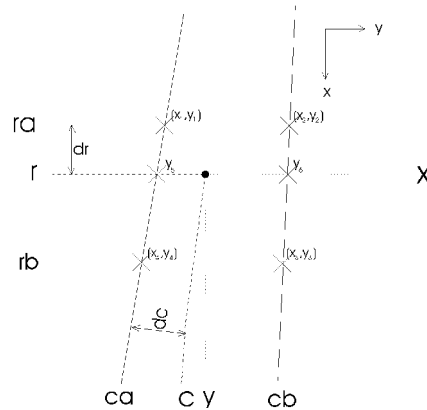
Ekvation 6.1 anger att gridavståndet i x -led alltid är proportionellt mot σ_y , det vill säga det är en funktion både av avståndet från källan och av vädersituationen (stabiliteten, se kapitel 3). Samma sak gäller för gridavståndet i y -led (ekvation 6.2) om $L_y \ll \sigma_y$, det vill säga vid punktutsläpp och/eller långt från källan. Om källans utsträckning i y -led är mycket stor kommer nära källan 9 gridpunkter (av totalt 23) att användas för att beskriva mittendelen av molnet medan 7 gridpunkter på vardera sidan om "linjen" används för att beskriva avklingningen mot kanterna.

En skillnad jämfört med den modell som används för kemikalieolyckor är att standardavvikelseerna i denna modell är funktioner av den tid (ekvation 6.3) det tar att med vindens hastighet tillryggalägga en sträcka x och inte en funktion av enbart sträckan. I princip får vi samma typ av tillväxt för standardavvikelseerna i de båda modellerna, men i en given situation med en viss vertikal vindprofil (vindhastigheten ökar med höjden) blir tillväxten i modellen för C-angrepp även en funktion av höjden. Tillväxten sker långsammare på högre höjd. När koordinatsystemet definieras används vindhastigheten på höjden för primärmolnets centrum. Den effektiva vindhastigheten för sekundärmolnets transport är lägre än för primärmolnet, vilket resulterar i en "bättre" upplösning för sekundärmolnet. För att minska risken att sekundärmolnet ska bli så brett att det delvis hamnar utanför gridnätet har detsamma gjorts mer än dubbelt så "brett" som nödvändigt för att beskriva primärmolnets utbredning.

6.2. Beräkning av ett matriselements exakta position

Allmänt

Syftet med denna interpolation är att utifrån en ”exakt” position i en matris få fram x- och y-koordinat för positionen. Detta kan vi göra eftersom att varje punkt i matrisen har känd koordinat. Följande är känt:



Figur 6.1: Schematisk bild med beteckningar

Kända storheter:

- ra raden som ligger strax ovanför den sökta punkten.
- rb raden som ligger strax under den sökta punkten.
- ca kolumnen som ligger strax före den sökta punkten.
- cb kolumnen som ligger strax efter den sökta punkten.
- r det ”exakta” radvärdet för raden i den sökta punkten.
- c det ”exakta” kolumnvärdet för raden i den sökta punkten.

Vi antar följande:

$$x_1 = x_2 \text{ och } x_3 = x_4.$$

$$dr = r - r_a$$

$$dc = c - c_a$$

Beräkning av x:

$$x = x_1 \cdot (1 - dr) + x_4 \cdot dr$$

Beräkning av y_5 och y_6 :

$$y_5 = y_1 \cdot (1 - dr) + y_4 \cdot dr$$

$$y_6 = y_2 \cdot (1 - dr) + y_3 \cdot dr$$

Beräkning av y:

$$y = y_5 \cdot (1 - dc) + y_6 \cdot dc$$

7. Spridningsmodell

Kapitlets huvudförfattare är:	Lennart Thaning Erik Wetter Stellan Winter
-------------------------------	--

7.1. Allmänt

Detta kapitel baseras huvudsakligen på *Handboken*, kapitel 8.

De spridningsberäkningar som görs i BfK bygger på att först beräknas en kontinuerlig modell, det vill säga en modell som visar hur gasplymen ter sig vid ett oavbrutet utsläpp med konstant källstyrka. Med hjälp av denna kontinuerliga modell kan vi sedan gå över till en tidsberoende modell där vi tar hänsyn till utsläppets varaktighet samt framåt- och bakåtspridning.

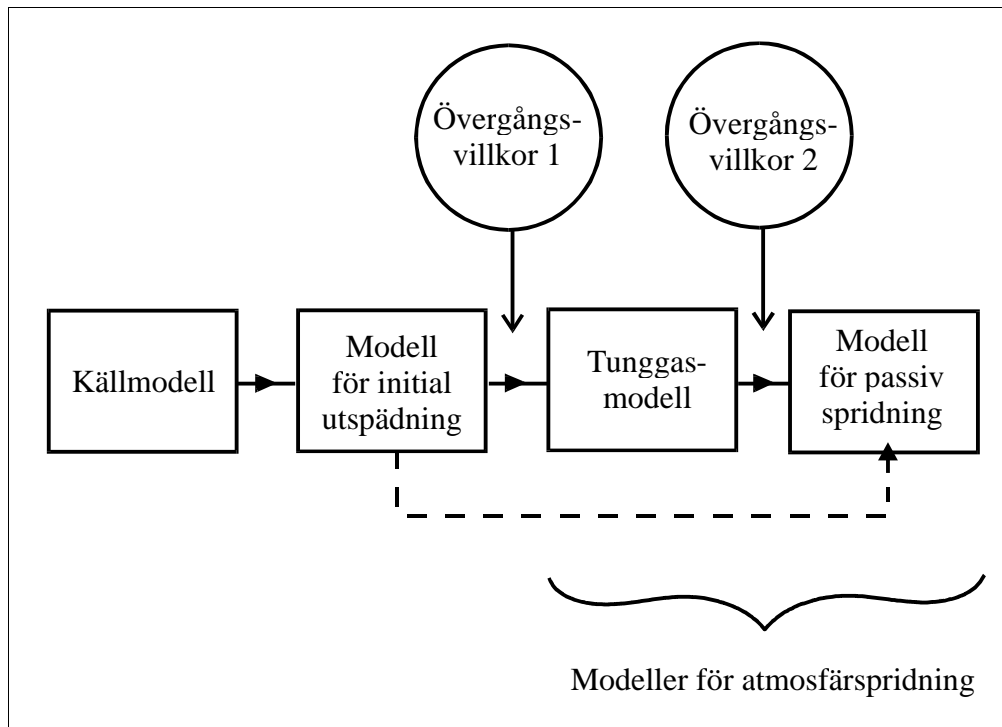
Både tunggasmodellen och modellen för passiv spridning är så kallade Gaussmodeller. Det betyder att koncentrationen antas vara normalfördelad, både horisontellt och vertikalt, och att molnets utbredning kan beskrivas av normalfördelningarnas standardavvikelser (σ_y respektive σ_z).

7.2. Kontinuerlig modell

Den kontinuerliga modellen kan delas upp i två huvudsakliga steg, först kommer tunggasmodellen som används så länge det finns gravitationseffekter, sedan kommer den passiva spridningsmodellen.

Kända storheter

c_{pg}	Gasens specifika värme.
D	Pölens diameter för avdunstande och kokande pölar.
h_{fg}	Ångbildningsvärme för tryckkondenserad gas.
Q	Källstyrkan.
t_5	Konstant tid 5 minuter (= 300 s).
T_a	Atmosfärens temperatur.
T_f	Tryckkondenserad gas temperatur före utsläpp.
T_{g0}	Avdunstande eller kokande gas temperatur före luftinblandning.
U	Advektionshastigheten (den vindhastighet som används för förflyttningen av molnet i atmosfären).
U_0	Minimala initiala jethastigheten (= 50 m / s).
z_0	Markytans skrovlighet.
z_{01}	Konstant skrovlighetslängd för 1 cm = 0.01 m.
z_{03}	Konstant skrovlighetslängd för 3 cm = 0.03 m.



Figur 7.1: Modellkedjan som används för spridningsberäkningar.

Källmodellerna som beskriver källstyrkan diskuteras i kapitel 4. **Källstyrka.**

Initial utspädning

Den initiala utspädningen modelleras på så sätt att molnets initiala bredd B_0 och dess initiala höjd H_0 bestäms enligt nedanstående för tryckkondenserade gaser:

$$B_0 = 4 \cdot \max \left(5 \cdot z_0, \frac{1}{2 \cdot U} \sqrt{\frac{Q \cdot U_0}{2 \cdot \rho_a}} \right) \quad (7.1)$$

$$H_0 = \frac{B_0}{2} \quad (7.2)$$

annars för avdunstande och kokande pölar väljer vi:

$$B_0 = D \quad (7.3)$$

$$H_0 = \frac{D}{10} \quad (7.4)$$

Övergångsvillkor 1

$$\sigma_{y0} = \frac{B_0}{4} \quad \text{och} \quad \sigma_{z0} = \frac{H_0}{2}$$

Tunggasmodell

Om spridningen sker i ett obebyggt område, sätt korrektionsfaktorn för ytans skrovlighet K_r till:

$$K_r = 2.51 \quad (7.5)$$

annars

$$K_r = \left(\frac{z_0}{z_{01}} \right)^{0.2} \quad (7.6)$$

Vi väljer sedan ett värde på konstanten β beroende på stabilitetsklassen ur nedanstående tabell:

	β
A	0.08*
B	0.08*
C	0.08*
D	0.08
E	0.06
F	0.04

* markerar att experimentdata saknas för dessa klasser men $\beta = 0.08$ underskattar inte koncentrationerna.

Med hjälp av detta β -värde kan vi beräkna derivatan av σ_y , σ'_{yp} vid bebyggt område enligt:

$$\sigma'_{yp} = \beta \quad (7.7)$$

annars:

$$\sigma'_{yp} = \beta \left(\frac{z_0}{z_{03}} \right)^{0.2} \quad (7.8)$$

Nästa steg blir att studera gasens tunggasegenskaper och vi börjar med att beräkna m_{ge} , substansens effektiva molvikt. För avdunstning och kokning av pölar gäller:

$$m_{ge} = m_g \cdot \left(1 + \frac{c_{pg} \cdot (T_a - T_{g0})}{c_{pa} \cdot T_a} \right) \quad (7.9)$$

Annars så gäller följande för tryckkondenserade gaser:

$$m_{ge} = m_g \cdot \left(1 + \frac{h_{fgf} + c_{pg} \cdot (T_a - T_f)}{c_{pa} \cdot T_a} \right) \quad (7.10)$$

Ett mått på tunggasbeteende får vi genom att beräkna en längdskala för bouyancy L_b :

$$L_b = g \cdot \left(1 - \frac{m_a}{m_{ge}}\right) \cdot \frac{Q}{\rho_a \cdot U^3} \quad (7.11)$$

Vi måste också välja en korrektionsfaktor för atmosfärens stabilitet, K_s enligt:

	K_s
A	1
B	1
C	1
D	1
E	1.75
F	3.5

Värdena på standardavvikelseerna σ_{y0} och σ_{z0} sätter vi till samma som vi räknat fram för den initial spridningen.

Standardavvikelseerna för tunggassteget blir:

$$\sigma_y(x) = \left(\sigma_{y0}^{3/2} + 0.35 \cdot \sqrt{L_b} \cdot x\right)^{2/3} \quad (7.12)$$

$$\sigma_z(x) = \frac{\left(x + \sqrt{85 \cdot \pi \cdot K_r^{-1} \cdot K_s \cdot \sigma_{z0} \cdot \sigma_{y0}}\right)^2}{85 \cdot \pi \cdot K_r^{-1} \cdot K_s \cdot \sigma_y(x)} \quad (7.13)$$

Övergångsvillkor 2

Villkoret för att vi skall använda oss av ett tunggassteg är att vi får ett x_{max} -värde som är större än 0. Detta värde måste justeras lite extra för mycket stabila spridningar i obyggt område. Tunggasstegets längd x_{max} beräknas genom att först beräkna:

$$x_1 = \frac{0.037 \cdot L_b}{(\sigma_{yp})^3} - \frac{\sigma_{y0}^{3/2}}{0.35 \cdot L_b^{1/2}} \quad (7.14)$$

För pasquillklass E och F och obyggt område måste vi även finna det x_2 som uppfyller följande villkor som härletts ur ekvation 7.24:

$$\sigma_z(x_2) = 0.95 \cdot \frac{a_z \cdot K_{rp}}{b_z} \quad (7.15)$$

Detta görs numeriskt med en steglängd på $x_1 / 100$. Den slutliga längden på tunggassteget får vi för ovannämnda speciella fall av stabila skiktningar och obyggt område till:

$$x_{max} = MIN(x_1, x_2) \quad (7.16)$$

I de övriga fallen ges x_{max} av:

$$x_{max} = x_1 \quad (7.17)$$

Om vi nu har ett tunggassteg beräknar vi för samtliga punkter med x-koordinat mellan 0 och x_{max} spridningen med hjälp av våra ekvationer för standardavvikelse σ_y och σ_z .

Passiv spridningsmodell

Detta kapitel baseras i huvudsak på *Handboken, kapitel 8.8*.

För beräkningspunkter på avstånd bortanför tunggasmodellen, det vill säga punkter med x-koordinat större än x_{max} , skall koncentrationsberäkningar göras enligt den passiva spridningsmodellen. Vi börjar med att välja stabilitetsberoende parameterar för obebyggda respektive bebyggda spridningsområden ur följande två tabeller:

	a_y	b_y	γ_y	a_z	b_z	γ_z
A	0.22	0.0001	0.5	0.20	0	0
B	0.16	0.0001	0.5	0.12	0	0
C	0.11	0.0001	0.5	0.08	0.0002	0.5
D	0.08	0.0001	0.5	0.06	0.0015	0.5
E	0.06	0.0001	0.5	0.03	0.0003	1
F	0.04	0.0001	0.5	0.016	0.0003	1

Tabell 7.1. Stabilitetsberoende parameterar för obebyggt område.

	a_y	b_y	γ_y	a_z	b_z	γ_z
A	0.32	0.0004	0.5	0.24	0.001	-0.5
B	0.32	0.0004	0.5	0.24	0.001	-0.5
C	0.22	0.0004	0.5	0.20	0	0
D	0.16	0.0004	0.5	0.14	0.0003	0.5
E	0.11	0.0004	0.5	0.08	0.0015	0.5
F	0.11	0.0004	0.5	0.08	0.0015	0.5

Tabell 7.2. Stabilitetsberoende parameterar för bebyggt område.

Sedan bestämmer vi korrigeringen K_{rp} för underlagets skrovlighet enligt nedanstående formel för obebyggt område:

$$K_{rp} = \left(\frac{z_0}{z_{03}} \right)^{0.2} \quad (7.18)$$

annars:

$$K_{rp} = 1 \quad (7.19)$$

Sedan beräkningar vi korrektionsfaktorn K_{yt} för samplingstiden enligt:

$$K_{yt} = \left(\frac{t}{t_5} \right)^{0.2} \quad (7.20)$$

Om vi har ett tunggassteg så väljs σ_{y0} och σ_{z0} enligt ($\sigma_y()$ och $\sigma_z()$ syftar på tunggassteget ekvationer för standardavvikelser):

$$\sigma_{y0} = \sigma_y(x_{\max}), \text{ där } \sigma_y() \text{ syftar på tunggassteget ekvation för standardavvikelsen.} \quad (7.21)$$

$$\sigma_{z0} = \sigma_z(x_{\max}), \text{ där } \sigma_z() \text{ syftar på tunggassteget ekvation för standardavvikelsen.} \quad (7.22)$$

Annars så använder vi samma värden på σ_{y0} och σ_{z0} som vi räknat fram för tunggassteget.

Efter detta går vi vidare med att en virtuell källa för den passive spridningen, x_{y0} och x_{z0} anger avstånden till den virtuella källan. Ekvationer för detta får vi genom att invertera ekvation 7.28 och 7.29. Följande ekvation gäller då $\gamma_y = 0.5$ och eftersom den enligt tabellerna ovan inte antar något annat värdet behöver vi heller ingen annan ekvation för x_{y0} än:

$$x_{y0} = \frac{\left(\frac{\sigma_{y0}}{K_{rp} \cdot K_{yt}}\right)^2 \cdot b_y + \frac{\sigma_{y0}}{K_{rp} \cdot K_{yt}} \cdot \sqrt{\left(\frac{\sigma_{y0}}{K_{rp} \cdot K_{yt}}\right)^2 \cdot b_y^2 + 4 \cdot a_y^2}}{2 \cdot a_y^2} \quad (7.23)$$

Valet av ekvation för x_{z0} är beroende av värdet på γ_z och väljs på följande sätt:

$\gamma_z = 1$:

$$x_{z0} = \frac{\left(\frac{\sigma_{z0}}{K_{rp}}\right)}{a_z - b_z \cdot \left(\frac{\sigma_{z0}}{K_{rp}}\right)} \quad (7.24)$$

$\gamma_z = 0.5$:

$$x_{z0} = \frac{\left(\frac{\sigma_{z0}}{K_{rp}}\right)^2 \cdot b_z + \frac{\sigma_{z0}}{K_{rp}} \cdot \sqrt{\left(\frac{\sigma_{z0}}{K_{rp}}\right)^2 \cdot b_z^2 + 4 \cdot a_z^2}}{2 \cdot a_z^2} \quad (7.25)$$

$\gamma_z = 0$:

$$x_{z0} = \frac{\sigma_{z0}}{K_{rp} \cdot a_z} \quad (7.26)$$

$\gamma_z = -0.5$:

$$x_{z0} = \frac{\sqrt{1 + \frac{4 \cdot \frac{\sigma_{z0}}{K_{rp}} \cdot (\sqrt{2} - 1) \cdot b_z}{a_z}} - 1}{2 \cdot (\sqrt{2} - 1) \cdot b_z} \quad (7.27)$$

Med detta har vi allt vi behöver för att beräkna standardavvikelsena:

$$\sigma_y(x) = \frac{a_y \cdot (x + x_{y0})}{(1 + b_y \cdot (x + x_{y0}))^{p_y}} \cdot K_{rp} \cdot K_{yt} \quad (7.28)$$

$$\sigma_z(x) = \frac{a_z \cdot (x + x_{z0})}{(1 + b_z \cdot (x + x_{z0}))^{p_z}} \cdot K_{rp} \quad (7.29)$$

Koncentrationsberäkning

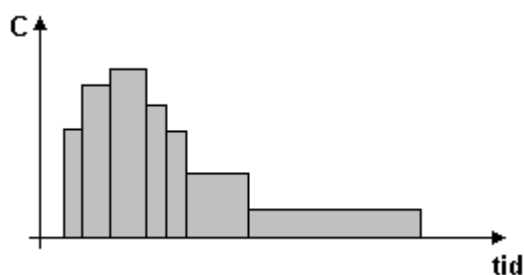
När vi i varje spridningssteg vet standardavvikelsena beräknar vi koncentrationen i varje beräkningspunkt med följande ekvation:

$$\chi(x, y, z) = \frac{Q}{2 \cdot \pi \cdot \sigma_y(x) \cdot \sigma_z(x) \cdot U} \cdot e^{-\frac{y^2}{2 \cdot \sigma_y^2}} \cdot \left(e^{-\frac{(z-H_{eff})^2}{2 \cdot \sigma(x)^2}} + e^{-\frac{(z+H_{eff})^2}{2 \cdot \sigma(x)^2}} \right) \quad (7.30)$$

7.3. Tidsberoende modell

Allmänt

Eftersom att källstyrkan som används i den kontinuerliga modellen är konstant och den i verkligheten varierar med tiden delar vi upp den i delkällstyrkor, Q_i . Detta kapitel skall visa hur vi går från den kontinuerliga koncentrationen i en viss punkt till koncentrationen i samma punkt vid en viss tid. Problemet här är främst framåt- och bakåtspridningen som förekommer vid plymens fram- och bakkant.

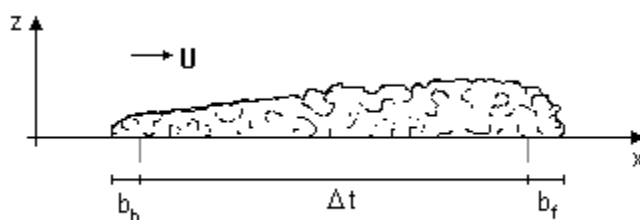


Figur 7.2: Koncentrationens variationer beroende på variationer i källstyrkan vid olika tidsperioder.

Kända storheter:

x	Positionen i x-led där vi vill beräkna koncentrationen (m).
y	Positionen i y-led där vi vill beräkna koncentrationen (m).
t	Den tid som förlupit sedan utsläppet började, alltså den tid som vi vill beräkna koncentrationen för (s).
C_{ik}	Koncentrationen i punkten (x,y) i den kontinuerliga modellen för delkällstyrka i (kg / m^3).
U	Vindhastigheten på 10 meters höjd (m / s).
p	Antalet delkällstyrkor.

Framåt- och bakåtspridning

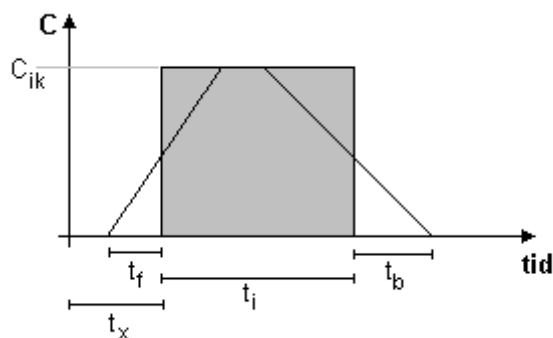


Figur 3: Storleken på framåt- och bakåtspridning.

Antag att vi befinner oss på avståndet x från källan och studerar hur koncentrationen varierar med tiden, vi kommer då att notera att om gasutsläppet började för t_a sekunder sedan så kommer gasplymen att nå oss före tiden x / U . Detta beror på att vi har en framåtspridning, alltså en viss mängd gas som transporteras snabbare än vindhastigheten. Vi antar att den verkliga framkanten anländer vid tidpunkten $t_a - t_f$. Där t_f bestäms enligt $t_f = b_f / U$, det vill säga $b_f + x$ är avståndet från källan till framkanten på molnet vid tidpunkten t . På liknande sätt har vi även en bakåtspridning b_b .

Delkällstyrkor

Varje delkällstyrka varar en viss tid t_i . Denna delkällstyrka ger upphov till en plym som har en framkant och en bakkant, framkanten kommer alltså att nå fram till en punkt före bakkanten. För att kunna utföra en utjämning av plymkanterna behöver vi känna till σ_y -värdena för dessa.



Figur 7.4: Tider som beskriver plymens utjämning.

Beräknar en tid t_a , tiden det tar innan plymen når fram till punkten (x,y) :

$$t_a = \frac{x}{U} \quad (7.31)$$

Vi kan nu beräkna delkällstyrkan Q_i :s plyms tidsgränser, tiden t_{i-} då framkanten passerar punkten och tiden t_{i+} då bakkanten passerar punkten:

$$\begin{aligned}t_{i-} &= t_x + \sum_{m=0}^i t_m \\t_{i+} &= t_{i-} + t_i\end{aligned}\tag{7.32}$$

Dessa två värden ger oss möjligheten att beräkna x-koordinaten för delplymens fram- och bakkant:

$$\begin{aligned}x_f &= (t - t_{i-}) \cdot U \\x_b &= (t - t_{i+}) \cdot U\end{aligned}\tag{7.33}$$

Vi beräknar b-värden för fram- och bakkant, härledningen av dessa finns i slutet av detta kapitel:

$$\begin{aligned}b_f &= \sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sigma_y(x_f) \\b_b &= \sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sigma_y(x_b)\end{aligned}\tag{7.34}$$

Nu kan vi beräkna hur långa tider som utjämnarna innefattar för fram- och bakkant:

$$\begin{aligned}t_f &= \frac{b_f}{U} \\t_b &= \frac{b_b}{U}\end{aligned}\tag{7.35}$$

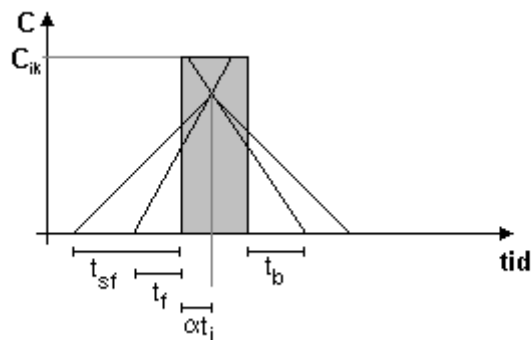
Vi tecknar följande två funktioner som beskriver utjämnningen av plymens kanter:

$$\begin{aligned}l_f(t) &= \frac{C_{ik}}{2 \cdot t_f} \cdot (t - t_{i-} + t_f) \\l_b(t) &= \frac{-C_{ik}}{2 \cdot t_b} \cdot (t - t_{i+} - t_b)\end{aligned}$$

Delkällstyrkan Q_i 's bidrag C_i till den totala koncentrationen i punkten vid en viss tid t ges av följande algoritm:

- Om $t_i - t_f < t < t_{i+} + t_b$ (Delkällstyrkan kommer att bidra)
- Om $t_f + t_b < t_i$ (Den kontinuerliga koncentrationen uppnås)
- Om $t_i + t_f > t$ (Anpassa till framkant)
- $$C_i = l_f(t)$$
- annars om $t_{i+} - t_b > t$ (Före anpassning till bakkant)
- $$C_i = C_{ik}$$
- annars (Anpassa till bakkant)
- $$C_i = l_b(t)$$
- annars
- Se kapitel **Specialfall för mycket kortvariga delkällstyrkor.**
- annars (Utanför delkällstyrkans bidrag)
- $$C_i = 0$$

Specialfall för mycket kortvariga delkällstyrkor



Vi antar att de två utjämningslinjerna skär varandra vid tiden $t_i + \alpha t_i$. Den maximala koncentrationen C_s kan nu bestämmas med villkoret att doseringen bevaras. Doseringen i detta sammanhang definieras enligt följande (för skadeutfallsberäkningar skall en annan användas, se kapitel 9. **Skadeutfallsmodell**):

$$\text{Dosering} = \int_0^{\infty} C \, dt$$

Villkoret för doseringens bevarande ser ut på följande sätt:

$$\int_0^{\infty} C_i dt = C_{ik} \cdot t_i$$

Detta ger oss alltså ett ekvationssystem för delkällstyrkornas doseringar före och efter utjämnningen av bakkanten:

$$\left((t_f + \alpha \cdot t_i) + (t_b + (1 - \alpha) \cdot t_i) \right) \cdot \frac{C_s}{2} = t_i \cdot C_{ik}$$

$$\frac{(t_f + t_b + t_i)}{2} \cdot C_s = t_i \cdot C_{ik}$$

$$C_s = \frac{2 \cdot t_i \cdot C_{ik}}{t_f + t_b + t_i} \quad (7.36)$$

Vi kan då bestämma hur α skall väljas genom att kräva att den andel av dosen som erhålls fram till den tidpunkt då C_s uppnås skall vara densamma som dosen vid motsvarande tidpunkt beräknad från den rektangulära koncentrationsfördelningen:

$$\alpha \cdot t_i \cdot C_{ik} = \frac{C_s}{2} \cdot (t_f + \alpha \cdot t_i)$$

$$\alpha \cdot \left(t_i \cdot C_{ik} - \frac{C_s}{2} \cdot t_i \right) = \frac{C_s}{2} \cdot t_f$$

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\frac{C_s}{2} \cdot t_f}{t_i \cdot C_{ik} - \frac{C_s}{2} \cdot t_i} = \frac{\frac{t_i \cdot C_{ik} \cdot t_f}{(t_f + t_b + t_i)}}{t_i \left(C_{ik} - \frac{t_i \cdot C_{ik}}{(t_f + t_b + t_i)} \right)} \\ &= \frac{t_f}{(t_f + t_b + t_i) \left(1 - \frac{t_i}{(t_f + t_b + t_i)} \right)} = \frac{t_f}{(t_f + t_b)} \end{aligned}$$

Vi får följande två funktioner för utjämnningen av plymens kanter:

$$l_{sf}(t) = \frac{C_s}{t_f + \alpha t_i} \cdot (t - t_{i-} + t_f)$$

$$l_{sb}(t) = \frac{-C_s}{t_b + (1 - \alpha)t_i} \cdot (t - t_{i+} - t_b)$$

Den korta delkällstyrkan Q_i 's bidrag C_i till den totala koncentrationen i punkten vid en viss tid t ges av följande algoritm:

Om $t_i - t_f > t > t_{i+} + t_b$ (Delkällstyrkan kommer att bidra)

Om $t_i + t_f < t$ (Anpassa till framkant)

$$C_i = l_{sf}(t)$$

annars om $t_{i+} - t_b < t$ (Före anpassning till bakkant)

$$C_i = C_{ik}$$

annars (Anpassa till bakkant)

$$C_i = l_b(t)$$

annars (Utanför delkällstyrkans bidrag)

$$C_i = 0$$

Bestämning av b_f och b_b

Det är rimligt att ansätta att för ett givet x gäller $b_f = b_b = b \propto \sigma_y(x)$.

Enligt ekvation (8:21), kapitel 8.4 i *handboken*, kan koncentrationen för ett momentant utsläpp där den skrivs:

$$C_{puff}(x, y, z) = \frac{M_0}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \sigma_x(Ut) \sigma_y(Ut) \sigma_z(Ut)} e^{-\frac{(x-Ut)^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \left[e^{-\frac{(z-H_{eff})^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+H_{eff})^2}{2\sigma_z^2}} \right] \quad (7.37)$$

där H_{eff} är den effektiva utsläppshöjden och M_0 är den utsläppta massan. Motsvarande uttryck för ett kontinuerligt utsläpp (ekvation 8:22, Kap 8.4 i *handboken*) är:

$$C_{kont}(x, y, z) = \frac{Q}{(2\pi)\sigma_y(x)\sigma_z(x)U} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \left[e^{-\frac{(z-H_{eff})^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+H_{eff})^2}{2\sigma_z^2}} \right] \quad (7.38)$$

Från ekvationerna 7.37 och 7.38 kan vi härleda att förhållandet mellan den maximala koncentrationen efter ett momentant utsläpp på avståndet $x = Ut_0$ och koncentrationen i det kontinuerliga fallet (vi antar att $\sigma_x = \sigma_y$):

$$\frac{C_{puff_m}}{C_{kont}} = \frac{M_0 \cdot U}{Q \sqrt{2\pi} \sigma_y} \quad (7.39)$$

och med $M_0 = Q \cdot t_i$ får vi

$$\frac{C_{puff_m}}{C_{kont}} = \frac{t_i \cdot U}{\sqrt{2\pi} \sigma_y} \quad (7.40)$$

För mycket kortvariga delkällstyrkor, ekvation 7.36, får vi:

$$\frac{C_s}{C_{kont}} = \frac{t_i}{t_f + t_b + t_i} \quad (7.41)$$

Med $t_f = t_b = b / U$ får vi:

$$\frac{C_s}{C_{kont}} = \frac{t_i}{\frac{b}{U} + \frac{t_i}{2}} \quad (7.42)$$

Ekvation 7.40 och 7.42 ger:

$$\frac{C_{puff-m}}{C_{top}} = \frac{b + \frac{U \cdot t_b}{2}}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_y} \rightarrow \frac{b}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_y} \text{ när } t_b \rightarrow 0 \quad (7.43)$$

Från ekvation 7.43 ser vi att med valet $b = \sqrt{(2\pi) \cdot \sigma_y(x)}$ kommer vår modell vid mycket korta utsläpp ge samma koncentration som en modell för momentana utsläpp. Notera också att detta inte bara gäller på centralaxeln ($y = 0$) utan i princip för ett godtyckligt värde på y och även på z .

Notera att för ett givet x blir längden på framåt- respektive bakåtspridningen lika stor. För en given tidpunkt däremot blir $b_f > b_b$ eftersom

$$b_f = \sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sigma_y(x_f)$$

$$b_b = \sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sigma_y(x_b)$$

och vi vet att $x_f > x_b$.

Totala koncentrationen

Genom att summera alla delkällstyrkornas bidrag i punkten (x,y) vid tiden t får vi den totala koncentrationen C_{tot} :

$$C_{tot}(t) = \sum_{i=0}^{p-1} C_i(t)$$

8. Inläckning i byggnader

8.1. Allmänt

Kända storheter:

k	Antalet luftväxlingar per sekund (1 / s).
$c_0(t)$	Koncentrationen utomhus som funktion av tiden (kg / m ³).
f_i	Faktor som beskriver den interna filtreringen.
A_j	Areor på N st ytor inomhus (m ²).
a_j	Överföringshastighet mellan luft och yta för N st ytor inomhus (m / s).
v_d	Överföringshastighet mellan luften och ventilationskanalens yta (m / s).
V	Byggnadens volym inomhus (m ³).
V_{ei}	Internt filtreringsflöde. (m ³ / s)
L	Ventilationskanalens längd (m).
d	Ventilationskanalens diameter (m).
b_j	Jämviktsparameter (1 / m).
m_j	Mängd deponerad substans (kg / m ²).
p	Antalet personer som normalt antas befinna sig inomhus i en byggnad.

Detta kapitel baserar sig på tre artiklar skrivna av Edvard Karlsson. Två som publicerades i "Journal of Hazardous Materials volym 38 och volym 49" och rapporten "Inläckning, adsorption och återgivning av giftig gas i vanliga byggnader och skyddsrum".

Med inläckning i byggnader menas att luften utanför en byggnad har en viss koncentration av en kemikalie och denna luft tas in i byggnaden via ventilation, vädring, sprickor, etcetera. Koncentrationen inomhus är lägre än utomhus på grund av att luftväxlingen är relativt långsam, samt på grund av att kemikalien kommer att deponera både i inläckningskanalen och på ytorna inne i byggnaden. Hur mycket som kommer att deponera beror till stor del på vilken kemikalie det är och materialet i de ytor som den skall deponera på. Depositionen kommer att ge upphov till en lägre koncentration av kemikalie inomhus då en viss massa av inläckande kemikalie kommer att vara bunden till ytor inne i byggnaden. Det finns även en motsats till deposition och det är desorptionen, nämligen då massa lämnar ytor i byggnaden för att ge upphov till en koncentrationsökning inomhus. På grund av den relativt långsamma luftväxlingen och desorptionen kommer vi att få en fördröjning av koncentrationssänkningar inomhus jämfört med en koncentrations-sänkning utomhus.

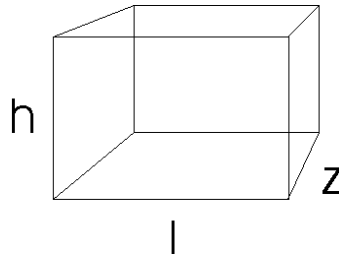
Vid normal luftväxling, cirka ett halvt luftutbyte per timme så kommer koncentrationen efter några timmar att stabilisera sig inomhus till en nivå som är betydligt lägre än utomhus. Detta beror dels på deponeringen men också på definitionen av luftväxling. Till exempel så innebär en halv luftväxling per timme att hälften av rummets volym ventileras ut per timme och inte att all luft byts ut på två timmar.

Den modell som presenteras i detta kapitel kommer från försök med låga till måttliga inomhuskoncentrationer och bör därför endast tillämpas på sådana.

8.2. Beräkning

Den normala byggnaden

För att kunna göra beräkningar om inläckningen i en byggnad måste vi specificera upp ett rum som antas representera alla rum i alla byggnader. Vi väljer följande utseende:



Dimension	
Höjd (h)	2,5 m
Längd (l)	5 m
Djup (z)	4 m

Detta ger oss en volym $V = 50 \text{ m}^3$ och en area på väggar, tak och möbler $A = 2 \cdot V \text{ m}^2$. Vi utgår ifrån att det i varje rum av intresse finns 2 personer. Till dessa rum leder en $L = 5 \text{ m}$ lång ventilationskanal som är $d = 0.1 \text{ m}$ i diameter.

Den normala människan

Vidare så behöver vi specificera upp vad människor antas göra i alla byggnader och hur mycket de andas in (l / min). Vi antar att de har normal andning, det vill säga $V_{ei} = 10 \cdot p$. Vi antar också att deras lungor utgör normal filtrering, det vill säga $f_i = 1$.

Extern filtrering f_0

Ventilationsflödet V_e (m^3 / s) ges av:

$$V_e = k \cdot V$$

Den totala depositionsarean bL för ventilationskanalen:

$$bL = L \cdot \pi \cdot d$$

Då får vi följande filtreringsfaktor:

$$f_0 = 1 - e^{-\left(\frac{v_d \cdot bL}{V_e}\right)}$$

Koncentrationen inomhus c_i ges av följande differentialekvation:

$$\frac{dc_i}{dt} = kc_0(1 - f_0) - kc_i - \sum_j^N \left((A_j / V) \frac{dm_j}{dt} \right) - (V_{ei} / V) f_i c_i$$

där:

$$\frac{dm_j}{dt} = a_j(c_i - c_j^*)$$

$$c_j^* = b_j m_j$$

Denna differentialekvation kan lösas med följande metod:

Antag att vi har följande differentialekvation:

$$y'(x) = f(x, y(x)), a \leq x \leq b$$

$$y(a) = \eta$$

Så kan vi numeriskt lösa den med följande metod:

Initiera villkoren a , b , $\eta=y(a)$ och steglängden h .

$$x = a, y = \eta.$$

Så länge $x < b$

$$y = y + hf(x,y);$$

$$x = x + h.$$

Beräkningen klar och y håller lösningen till ekvationen.

Detta betyder i praktiken att vi sätter $a = 0$, $b = t$, $\eta = 0$ och löser ut c_i enligt metoden ovan. För att kunna göra det så måste vi sätta h till ett värde, detta ges av minvärdet av tre olika sätt att välja tidssteget beroende på:

1. Källstyrkans varaktighet Δt_u (se kapitel **4.9 Varaktighet**):

$$t_1 = \frac{\Delta t_u}{100}$$

2. Ventilationen:

$$t_2 = \frac{1}{10 \cdot k}$$

3. Överföringshastigheten mellan luften och rummets ytor:

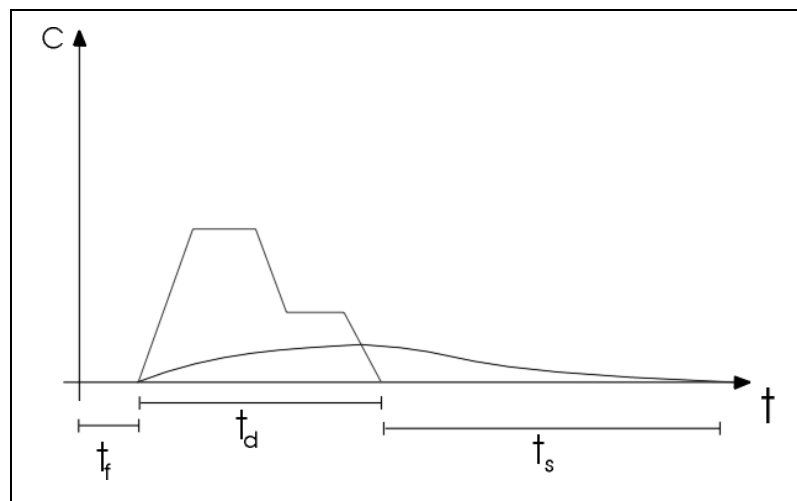
$$t_3 = \frac{V}{10 \cdot \sum_{i=1}^N (A_i \cdot a_i)}$$

4. Dessa tre tiden ger oss slutligen ett lämpligt värde på h :

$$h = \min(t_1, t_2, t_3)$$

8.3. Graf som visar inläckning vid olika tider.

För att grafiskt kunna beskriva förloppet krävs att vi beräknar koncentrationer både inomhus och utomhus för några tider. Sedan förbinder vi dessa punkter i en linje och får därigenom en graf hur koncentrationen är utomhus jämfört med inomhus.



Figur 8.1: Koncentrationer utomhus och inomhus som funktioner av tiden

Vi börjar med att beräkna tiden t_f , det vill säga en förenkling av den tid det tar för plymen att nå fram till den punkt vi är intresserade av:

$$t_f = \frac{x}{U}$$

Vad vi sen behöver veta är hur lång tid vi bör visa efter det att utsläppet upphört. Om vi antar att koncentrationen inomhus har uppnått $c_{i \max}$ när utsläppet upphör så sjunker den enligt följande: (Observera att detta endast är en uppskattning av C_i som bortser från desorption, vid andra tillämpningar än att räkna fram t_s används ovanstående metod.)

$$c_i(t) = c_{i \max} \cdot e^{-\left(k + \frac{a_j \cdot A_j}{V} + \frac{V_{ei}}{V} \cdot f_i\right)t}$$

Om vi antar att koncentrationen $c_i(t)$ sjunker till $c_{i \min}$ under tiden t_s . Här väljer vi en procentsats q som anger hur stor del av $c_{i \max}$ som $c_{i \min}$ motsvarar, det vill säga $q = c_{i \min} / c_{i \max}$. Detta ger:

$$t_s = \frac{-\ln(q)}{k + \frac{a_j \cdot A_j}{V} + \frac{V_{ei}}{V} \cdot f_i}$$

Slutligen så bildar vi oss en uppfattning om de totala tiden som grafen skall visa, det vill säga tiden från det att utsläppet upphör till dess att inomhuskoncentrationen klart har avtagit. Om vi antar att källstyrkan varar under tiden t_d kan vi välja ett antal punkter vi behöver för att beskriva kurvan med önskad noggrannhet, till exempel 100 steg. Detta ger oss följande steglängd dt :

$$dt = \frac{t_f + t_d + t_s}{100}$$

Koncentrationen utomhus i varje tidssteg beräknas med hjälp av tidigare beskriven metod (se kapitel 7.3. **Tidsberoende modell**). Inomhus används följande metod:

Vi är alltså intresserade av att lösa ut 100 inomhuskoncentrationer med ett intervall på dt sekunder mellan varje. Vi antar att vi har M stycken lösningar på differentialekvationen med ett intervall på dt_{diff} .

För varje tid i .

Finn den differentialekvationslösning som motsvarar tiden i , detta är inomhuskoncentrationen i denna tid.

9. Skadeutfallsmodell för inhalation av giftiga gasmoln

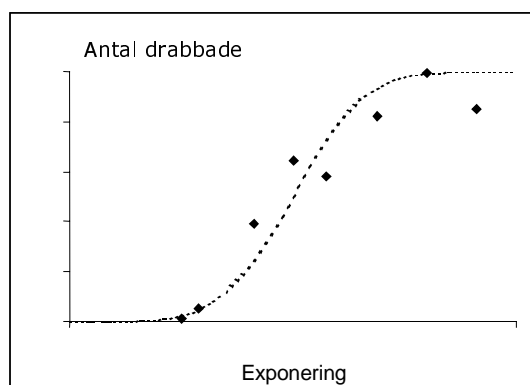
9.1. Allmänt

Detta kapitel baseras på kapitel 9 i *Handboken* samt FOA-rapporten *Giftiga gasmoln, 2:a reviderade upplagan*.

För att kunna bedöma akuta effekter på människor vid exponering för ett giftigt ämne behöver vi känna till ämnets giftighet, exponeringsväg, exponeringstid och koncentration under exponeringstiden. En toxisk effekt av exposition av ett ämne kan beskrivas med en matematisk modell som brukar kallas **probitmodellen**. Parametrar för denna har beräknats med stöd av djurförsök, faktiska olyckshändelser och, främst för de lindrigare skadorna, ibland försök utförda på människor. I många fall gör bristen på toxikologiska grunddata att det är mycket osäkert att beräkna modellens parametrar.

Beräkningar enligt probitmodellen

En graf över andelen drabbade av en viss toxisk effekt vid olika exponering av ett ämne kan se ut så här:



Punkterna kan vara data från experiment eller olyckor och kan anpassas till någon korrelationslinje. Det går ofta bra att beskriva detta samband mellan exponering och effekt med en matematisk funktion enligt följande

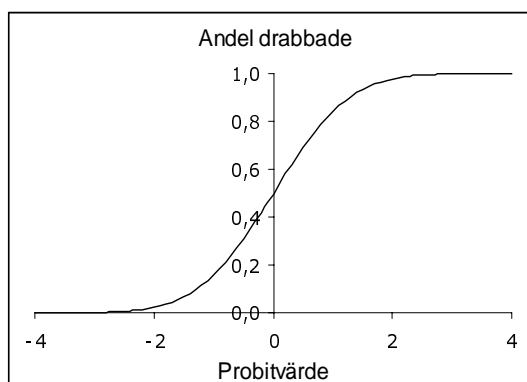
$$\text{Andelen drabbade av en viss toxisk effekt} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{Pr} e^{-u^2/2} du$$

där $Pr = \alpha + \beta_2 \cdot \ln\left(\int_{t_1}^{t_2} C(t)^n dt\right)$ Pr brukar kallas för probitvärde. u är en

integrationsvariabel. α , β_2 och n är parametrar som är relaterade till en viss kemikalie och en viss toxisk effekt. Värdena på n och β_2 , antas vara oberoende av skadetyper medan α -värdet är specifikt för en viss toxisk effekt av en viss kemikalie. $C(t)$ beskriver hur koncentrationen har varierat under det aktuella tidsintervallet $t_1 - t_2$

Uttrycket $\int_{t_1}^{t_2} [C(t)]^n dt$ brukar kallas för dosering (eng. toxic load).

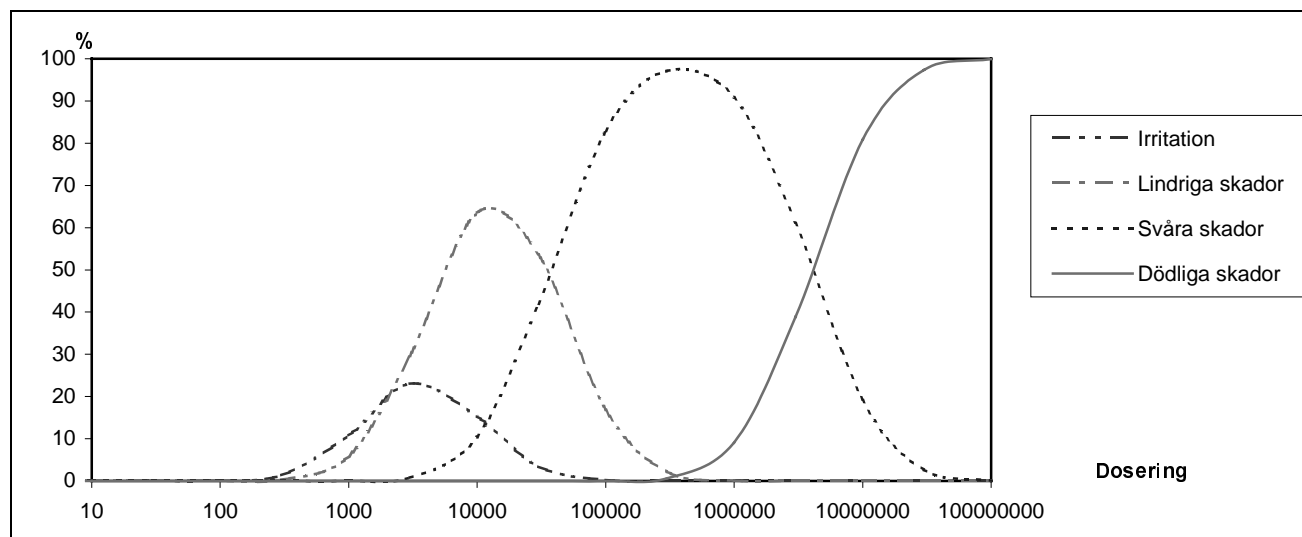
Grafen över andelen drabbade av en viss toxisk effekt som funktion av probit blir då:



För några vanliga industrikemikalier har parametrarna i probitmodellen bestämts för några olika skadekategorier/toxiska effekter, här i stigande vådlighetsgrad:

	<i>Rubricering</i>	<i>Engelsk rubricering</i>	
α_1	Irritation	Trouble	
α_2	Lindriga skador	In need of care	För luktgräns, förnimmelse o.dyl används enbart
α_3	Svåra skador	Emergency case	koncentrationsgränser i BfK
α_4	Dödliga skador	Dead	

För var och en av dessa skadekategorier kan vi räkna ut andelen drabbade. Eftersom den som har fått en exponering som ger exempelvis svåra skador också kommer att rapporteras att ha fått lätta skador enligt modellen för lindriga skador så gäller att göra lite subtraktioner. Resultatet av detta kan exemplifieras i nedanstående diagram där vi kan se andelen av olika skadekategorier. För varje doseringsvärde skall summan av andelarna (andelen icke skadade medräknade) bli 100%.



Figur 9.1: Skadefallsfördelning vid olika doseringar av ammoniak

10. Litteraturreferenser

Grundläggande referens

- (1) 1997. *Vådautsläpp av brandfarliga och giftiga gaser och vätskor. Metoder för bedömning av risker*, FOA-R—97-00490-990--SE, Stockholm

Övriga referenser

- (1) Adams R. A. 1991. *Calculus: a complete course*, Addison-Wesley, Canada
- (2) Bowling S. A. 1985. *Modification necessary to use standard dispersion models at high latitude. Atmospheric Environment Vol 19, No 1*, s 93-97
- (3) Callen, H. B. 1960. *Thermodynamics*, John Wiley & Sons, Inc., USA
- (4) Chroscicki, W. 1971. *Solar Climate of Swedish territory. Selected problems*. Tellus 33, s 232 - 245
- (5) Clarke R. H. 1979. *A model for Short and Medium Range Dispersion of Radionuclides Released to the Atmosphere*. NRPB-R91, National Radiological Protection Board, Harwell,
- (6) Karlsson E. 1994. *Inläckning, adsorption och återgivning av giftig gas i vanliga byggnader och skyddsrum*, FOA-R-94-00027
- (7) Karlsson E. 1994. *Indoor deposition reducing the effect of toxic gas clouds in ordinary buildings*, *Journal of Hazardous Materials* 38, s 313 - 327
- (8) Karlsson E., Huber U. 1994. *Influence of desorption on the indoor concentration of toxic gases*, *Journal of Hazardous Materials* 49, s 15 -27
- (9) Koch Bo, 2001, *Giftiga gasmoln, 2:a reviderade upplagan - Fyra vanliga industrikemikaliers toxikologiska egenskaper och de skadebilder som kan uppkomma i samband med ofrivilliga utsläpp*, FOI-rapport under utgivning
- (10) Nordling C., Österman J. 1987. *Physics Handbook*, Studentlitteratur, Lund
- (11) Wetter E. 1998. *Sektorformad beräkningsmatris för gasspridningsberäkningar. Utformningen av ett gridsystem som ger ett noggrant och effektivt resultat från en gasspridningsmodell*. Umeå Universitet

Appendix A - Lösning av ekvationssystem

Planets ekvation:

$$ax + by + c = K \quad (\text{A.1})$$

Kända punkter i planet:

$$ax_1 + by_1 + c = K_1 \quad (\text{A.2})$$

$$ax_2 + by_2 + c = K_2 \quad (\text{A.3})$$

$$ax_3 + by_3 + c = K_3 \quad (\text{A.4})$$

Ekvation (A.2) och (A.3) ger:

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} ax_1 + by_1 - K_1 = -c \\ ax_2 + by_2 - K_2 = -c \end{array} \right\} \Rightarrow \\ & ax_1 + by_1 - K_1 = ax_2 + by_2 - K_2 \\ & a(x_1 - x_2) = -b(y_1 - y_2) + K_1 - K_2 \\ & a = \frac{-b(y_1 - y_2) + K_1 - K_2}{x_1 - x_2} \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

Ekvation (A.3) och (A.4) ger:

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} ax_2 + by_2 - K_2 = -c \\ ax_3 + by_3 - K_3 = -c \end{array} \right\} \Rightarrow \\ & ax_2 + by_2 - K_2 = ax_3 + by_3 - K_3 \\ & b(y_2 - y_3) = -a(x_2 - x_3) + K_2 - K_3 \\ & b = \frac{-a(x_2 - x_3) + K_2 - K_3}{y_2 - y_3} \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

Ekvation (A.5) och (A.6) ger:

$$\begin{aligned} a &= \frac{(a(x_2 - x_3) + K_2 - K_3)(y_1 - y_2)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3)} + \frac{K_1 - K_2}{x_1 - x_2} \\ a(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) &= a(x_2 - x_3)(y_1 - y_2) + (y_1 - y_2)(K_2 - K_3) + (y_2 - y_3)(K_1 - K_2) \\ a &= \frac{(y_1 - y_2)(K_2 - K_3) + (y_2 - y_3)(K_1 - K_2)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) - (x_2 - x_3)(y_1 - y_2)} \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

Ekvation (A.5) och (A.6) ger även:

$$b = \frac{(b(y_1 - y_2) + K_1 - K_2)(x_2 - x_3)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3)} + \frac{K_2 - K_3}{y_2 - y_3}$$

$$b(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) = b(x_2 - x_3)(y_1 - y_2) + (x_2 - x_3)(K_1 - K_2) + (x_1 - x_2)(K_2 - K_3)$$

$$b = \frac{(x_2 - x_3)(K_1 - K_2) + (x_1 - x_2)(K_2 - K_3)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) - (x_2 - x_3)(y_1 - y_2)} \quad (\text{A.8})$$

Ett uttryck för c får vi genom att skriva om ekvation (A.2) på formen:

$$c = K_1 - ax_1 - by_1 \quad (\text{A.9})$$

Substituerar vi sedan ekvation (A.9) i ekvation (A.1) får vi:

$$K = a(x - x_1) + b(y - y_1) + K_1 \quad (\text{A.10})$$

Ytterligare en substitution av ekvation (A.7) och (A.8) i ekvation (A.10) ger oss den slutgiltiga lösningen på ekvationen:

$$K = \frac{(y_1 - y_2)(K_2 - K_3) + (y_2 - y_3)(K_1 - K_2)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) - (x_2 - x_3)(y_1 - y_2)}(x - x_1) +$$

$$+ \frac{(x_2 - x_3)(K_1 - K_2) + (x_1 - x_2)(K_2 - K_3)}{(x_1 - x_2)(y_2 - y_3) - (x_2 - x_3)(y_1 - y_2)}(y - y_1) + K_1 \quad (\text{A.11})$$

Appendix B - Översättning av konstanter

För att kunna hantera de konstanter som finns i detta dokument så måste vissa av dem, speciellt symboler, ges andra namn så att de kan hanteras i källkod.

B.1. Konstanter för kemikalier

Eftersom konstanterna för kemikalier har en koppling mot en databas måste även dessa ha ett namn för den typen av representation.

<i>I system- beskrivningen</i>	<i>Sida</i>	<i>I källkoden</i>	<i>I databasen</i>	<i>Enhet (endast SI)</i>	<i>Undre gräns</i>	<i>Övre gräns</i>
α_1	69	alfa[0]	skade_alfa0			
α_2	69	alfa[1]	skade_alfa1			
α_3	69	alfa[2]	skade_alfa2			
α_4	69	alfa[3]	skade_alfa3			
β_2	68	beta2	skade_beta2		0	10
b_j	63	bj	inlackn_bj	1 / m	0	$1 \cdot 10^2$
c_f	9	cf	vatske_varme	J / kg K	1	$1 \cdot 10^5$
c_{pg}	9	cpg	gas_varme	J / kg K	0	$1.5 \cdot 10^4$
h_{fgl}	17	hfgl	angvarme	J / kg	$2.5 \cdot 10^5$	$5.5 \cdot 10^8$
M_w	17	Mw	vikt	kg / mol	10	$4 \cdot 10^2$
n	68	n	skade_n		0.1	10
ρ_f	35	rho_f	dens_f	kg / m ³	0	$1 \cdot 10^4$
T_1	17	T1	reftemp	K	0	T_c
T_b	26	Tb	kokpunkt	K	0	$2 \cdot 10^3$
T_c	17	Tc	krit_temp	K	0	$1 \cdot 10^3$

Appendix C - Kemikaliedata

C.1. Allmänt

Alla data begränsas till 5 värdesiffror. Alla enheter skall vara SI-enheter.

För varje kemikalie måste vi känna:

Beteckning	Förklaring
T_1	Referenstemperatur för beräkning av ångbildningsvärme.
A	Konstant i uttrycket för mätnadskurvan.
B	Konstant i uttrycket för mätnadskurvan.
c_f	Specifik värme vätskefas.
v_f	Beräknas som $1/\delta_f$
R	Beräknas som R_A / M_w
h_{fg1}	Ångbildningsvärme vid T_1 .
T_c	Ämnets kritiska temperatur.
T_b	Ämnets kokpunkt.
M_w	Ämnets molekylvikt.
c_{pg}	Gasfasens specifika värme.
δ_f	Densitet hos avdunstande eller kokande vätska [kg/m^3].
a_j	Inläckning: Finns som defaultvärde i BfK
b_j	Inläckning: Jämviktsparameter.
n	Dosering: Exponent i uttrycket för dos.
β_2	Dosering: Faktor i uttrycket för probit.
α_1	Dosering: Alfavärde för "Irritation".
α_2	Dosering: Alfavärde för "Lindriga skador".
α_3	Dosering: Alfavärde för "Svåra skador".
α_4	Dosering: Alfavärde för "Död".
L	Anslutningsrörets längd. Finns som defaultvärde i BfK
<i>small</i>	Mindre behållare för hantering av kemikalien i liten skala.
<i>d_small</i>	- Rördiameter för densamma
<i>medium</i>	Typisk tankstorlek vid lastbilstransport.
<i>d_medium</i>	- Rördiameter för densamma
<i>large</i>	Typisk tankstorlek vid järnvägstransport.
<i>d_large</i>	- Rördiameter för densamma
<i>unnummer</i>	UN-nummer
<i>faronummer</i>	Faronummer
<i>Oxiderande</i>	Etikett(5): Ja/Nej
<i>Giftigt</i>	Etikett (6.1): Ja/Nej.
<i>Frätande</i>	Etikett (8): Ja/Nej.
<i>Brandfarligt</i>	Etikett (3): Ja/Nej.

Index

A

Absorption	37
Adiabatiska förångning	39
Advektionshastighet	48
Avdunstningsavkylning	31
Avkokning, E	35
Avkokningen, E	34

B

Bakåtspridning	57
Bouyancy, L_b	52

C

Cirkelsektor	41
--------------------	----

D

Delkällstyrka	56, 57
Deposition	63
Desorbition	63
Dokument	8
Dosering	36

E

Effektiv molvikt, m_{ge}	52
Ekvidistant matris	41
Equilibrium Rate Model, ERM	25
Exponering	68
Extern padding	19

F

Fil	8
Filtrering	64
Flyktigheten, χ_s	31
Framåtspridning	57
Friktion	25

G

Gasfasvolumiteten, v_{g0}	24
Gaskonstanten, R	7
Gaspym	41, 50
Gaussmodell	50
Geometrisk serie	44
Giftighet	68
Gravitationsaccelerationen, g	7
Gravitationseffekt	50
Gridpunkt	43
Gummikudde	38

I

Initial utspädning	51
Inläckning i byggnader	63
Intern padding	19
Interpolering	46, 49
Invallning	28, 32, 40

K

Kemikaliedata	74
Klimatzon	12
Komprimerad gas	20
Koncentration	56
Konstanter för kemikalier	73
Kontinuerlig modell	50
Kontinuerligt utsläpp	61
Kontraktionsfaktor	26
Kontraraktionsfaktor	23
Koordinatsystem	41, 48
Korrektionsfaktor för atmosfärens stabilitet, K_s	53
Korrektionsfaktor för en ytas skrovlighet, K_r	52
Korrektionsfaktor för samplingstid, K_{yt}	54
Korrigerig för underlagets skrovlighet, K_{rp}	54
Kort utströmningskanal	23
Kritisk strömning	21, 23
Kryogen	16
Källpunkt	48

L

Luftens densitet, ρ_a	7
Luftens molvikt, M_a	7
Lufttryck, P_a	11
Luftutbyte	63
Luftväxling	63
Lång utströmningskanal	23

M

Massflödesreduktionsfaktor, η_λ	26
Massöverföringstal	31
Molnbas	12
Molnmängd	12
Momentant utsläpp	61
Människa	64
Mättnadstryck	17

N

Nettostrålningsindex	13
----------------------------	----

P

Padding	19
Pasquillklass	11
Passiv spridningsmodell	54
Primärkälla	42
Primärmoln	48
Punktering	23
Pöl	27
Pölarea, A	34
Pöllängd, D	33
Pölmedeldjup, d_p	34

R

Reduktionsfaktor	25
Rörfriktionskoefficient	26

S

Scenario	8
Sektorformad beräkningsmatris.....	41
Skadebegränsande åtgärd	37
Skadekategori	69
Snömängd.....	12
Solhöjd	13
Solinstrålning	31, 34
Solinstrålning, q_s	15
Specifikt värme för luft, c_{pa}	7
Spridningsmodell	50
Spridningsområde.....	54
Stabilitetsklass	11
Standardavvikelse.....	48, 50, 53, 56
Superkritisk gas	16
Superkritiskt tillstånd	18

T

Tidsberoende modell	56
Tryckkondenserad gas.....	16
Träkil	38
Tunggasmodell	52
Tömningstid	29

U

Underkyld vätska.....	16
-----------------------	----

Underlag	30
Universella gaskonstanten, R_u	7
Uppsamling	39

V

Varaktighet	33, 37
Vattenbad	37
Ventilation.....	63
Ventilationskanal.....	64
Virtuell källa.....	55
Väder	50
Värmediffusivitet, α_G	30
Värmeledning, K_G	30
Värmetillförsel	39
Vätskepelare	20

Å

Ångbildningsvärme	23
Återkondensering	39

Ö

Öppningsvinkel	43
Överhettad gas.....	16
Övertäckning	39