

**Weiterentwicklung Screening- und  
Risikoermittlungsmethodik**

**Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung  
von brennbaren schweren Gasen**

Bericht Nr. Z16734-1a

Zürich, 15. Januar 2018

# Inhaltsverzeichnis

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 1     | Einleitung .....  | 5  |
| 2     | Vorgehen .....  | 6  |
| 2.1   | Stand der Technik.....  | 6  |
| 2.2   | Software-Tools .....  | 8  |
| 2.3   | Vergleichsrechnungen .....  | 9  |
| 3     | Module Stand der Technik, Software-Tools.....                                       | 11 |
| 3.1   | Modul 1: Freisetzung .....  | 11 |
| 3.1.1 | Fazit Modul 1 (Freisetzung) .....   | 19 |
| 3.2   | Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig.....                                      | 21 |
| 3.2.1 | Fazit Modul 2 (Phasenübergang flüssig/gasförmig) .....                              | 29 |
| 3.3   | Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke .....                              | 32 |
| 3.3.1 | Fazit Modul 3 (Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke) .....                       | 42 |
| 3.4   | Modul 4a: Zündung.....  | 45 |
| 3.4.1 | Fazit Modul 4a (Zündung) .....  | 49 |
| 3.5   | Modul 4b: Abbrand .....   | 51 |
| 3.5.1 | Fazit Modul 4b (Abbrand) .....  | 64 |
| 3.6   | Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzeabstrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf) ..... | 71 |
| 3.6.1 | Fazit Modul 5 (Wirkung auf den Menschen) .....                                      | 81 |
| 4     | Ergebnisse Vergleichsrechnungen .....   | 83 |
| 4.1   | Berechnung mit Phast Standard Tröpfchenmodell (Default) .....                       | 83 |
| 4.2   | Phast-Berechnungen mit dem Purple Book Tröpfchenmodell.....                         | 83 |
| 4.3   | Effects .....   | 84 |
| 4.4   | Vergleich Effects-Phast.....  | 84 |
| 5     | Schlussfolgerungen .....  | 86 |
| 5.1   | Modelle .....   | 86 |
| 5.1.1 | Gasausbreitung .....  | 86 |
| 5.1.2 | Gaswolkenexplosion.....   | 86 |
| 5.2   | Software-Tools .....  | 87 |
| 5.3   | Vergleichsrechnungen .....  | 88 |
| 5.4   | Empfehlungen Software-Tools .....   | 88 |
| 5.4.1 | Modul 1: Freisetzung .....  | 89 |
| 5.4.2 | Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig inkl. Lachenbildung .....                 | 89 |
| 5.4.3 | Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke .....                              | 89 |
| 5.4.4 | Modul 4a: Zündung.....  | 90 |

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 5.4.5 | Modul 4b: Abbrand .....   | 90 |
| 5.4.6 | Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzeabstrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf) ..... | 90 |

## **Anhang**

|   |                                    |
|---|------------------------------------|
| A | Ereignisbaum HART                  |
| B | Parameter Phast ATEX               |
| C | Parameter Phast UDM                |
| D | Parameter Phast PVAP               |
| E | Parameter Phast BWM                |
| F | Inputparameter Phast BLEVE Blast   |
| G | Outputvariablen FLACS              |
| H | Vergleichsrechnungen Phast-Effects |
| I | Grundlagen und Literatur           |

## Zusammenfassung

Der Transport von brennbaren schweren Gasen auf der Bahn ist mit Risiken für die Bevölkerung in der Umgebung behaftet. Die methodische Basis für die Beurteilung der Risiken aus dem Gefahrguttransport mit der Bahn aus dem Jahr 1998 soll aktualisiert und weiterentwickelt werden. Dazu sollen auch die Rechenmodelle für die Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von brennbaren schweren Gasen auf den Menschen aktualisiert werden. Als Modellsubstanz für die brennbaren schweren Gase wird Propan verwendet.

Im Rahmen dieser Abklärungen wurde zuerst der Stand der Technik für die Modellierung der Freisetzung, der Ausbreitung und des Abbrands von brennbaren schweren Gasen, insbesondere Propan, sowie der Wirkung solcher Brand- und Explosionsszenarien auf den Menschen ermittelt. Aufbauend auf diesem Überblick wurden die drei Software-Tools EFFECTS 10.0.6 (TNO), PHAST 7.2.1.141 (DNV GL) und das CFD Tool FLACS v10.5 (Gexcon AS) hinsichtlich dem Stand der Technik und ihrer Anwendungsmöglichkeiten. Dazu wurden die verwendeten Modelle und Eingangsdaten, die Wahlmöglichkeiten bei der Anwendung und die spezifischen Stärken und Schwächen dokumentiert. Am Beispiel einer grossen instantanen Freisetzung von Propan aus einem Bahnkesselwagen wurden Vergleichsrechnungen mit EFFECTS und PHAST durchgeführt.

Aus den vorliegenden Untersuchungen lassen sich daraus folgende *Schlussfolgerungen* ziehen:

EFFECTS und PHAST verwenden im Bereich der Gasausbreitung Integralmodelle, d.h. einfache empirische Modelle, welche die Gasausbreitung anhand von vergleichsweise wenigen Parametern und unter idealisierten Bedingungen beschreiben. Diese Software Tools sind deshalb für komplexe Geometrien wie überbautes Gebiet, komplexe Topographien und im Nahbereich der Freisetzung ungeeignet. In diesen Situationen sind CFD-Berechnungen vorzuziehen.

Ebenfalls sind CFD-Berechnung für Nahfeld-Explosionsberechnungen (innerhalb oder in der Nähe der abbrennenden Gaswolke), Explosionen in verdämmter Umgebung und in überbauten Gebieten oft die einzige Lösung.

Für komplexe Lachenbrände (Lachen in schlecht belüfteten oder umschlossenen Situationen, Flammenkontakt mit Objekten, Hindernisse in der Flamme) kommt von den drei untersuchten Software-Tools ebenfalls nur FLACS in Frage.

Das CFD Tool FLACS steht aufgrund der Komplexität und des Aufwandes in der Anwendung etwas ausser Konkurrenz, da ein Einsatz in erster Linie in denjenigen Fällen erwogen wird, in denen die anderen untersuchten Tools ungeeignet sind.

Die beiden Tools EFFECTS und PHAST sind insgesamt auf einem üblichen Stand der Technik.

Vorbildlich sind bei PHAST die sehr umfangreiche Dokumentation sowie die Angaben zur Validität. Dies kann im Vergleich der Eignung der beiden Software Tools allenfalls dazu führen, dass bei PHAST Mängel sichtbar werden, die bei EFFECTS aufgrund fehlender Angaben eventuell verborgen bleiben.

Eine Stärke von PHAST sind die gut validierten Modelle für Jet Fires.

EFFECTS ist allenfalls besser geeignet als PHAST bei der Berechnung von Lachenbränden, da in EFFECTS das HSE-Zweizonen-Modell integriert ist. Beim HSE-Zweizonen-Modell handelt es sich um ein gut validiertes Modell, welches die für Zylinder-Strahlungskörper-Modelle typische starke Abhängigkeit von unsicheren Parametern etwas entschärft und das auch von der britischen Behörde HSE eingesetzt wird.

Bei den Explosionsberechnungen ist bei PHAST die Begriffsverwendung im User-Interface und der Dokumentation teilweise widersprüchlich, was zu Missverständnissen und Fehlern bei der Modellwahl und bei der Parametrierung führen kann. Die Umsetzung der Multi Energy Method ist in EFFECTS besser gelöst als in PHAST, da die GAME correlation zur Bestimmung der Blast curve standardmässig in EFFECTS integriert ist. In PHAST scheint dafür eine Zusatzlizenz nötig zu sein. Wir empfehlen sehr, bei Berechnungen mit der Multi Energy Method die GAME correlation zu verwenden, da sonst die Wahl der Blast Curve sehr subjektiv erfolgt.

Die *Vergleichsrechnungen mit PHAST und EFFECTS* für die Gasausbreitung nach einer grossen instantanen Propan-Freisetzung haben zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen geführt. Bei PHAST haben auch die Berechnungen mit zwei verschiedenen innerhalb des Software Tools zur Verfügung stehenden Submodellen für exakt dieselbe Situation sehr unterschiedliche Ergebnisse geliefert. Allenfalls sollte bei PHAST ein anderes Submodell für die Flüssigkeitströpfchen und Bestimmung des Rainouts als das als Default eingestellte Standardmodell verwendet werden. Eventuell lohnt es sich, bei der Verwendung von PHAST für Berechnungen von Gasausbreitungen bei sofortigen Freisetzungen infolge Behälterbersten auf die angekündigte neue Version 8 zu warten. Ob solche Inkonsistenzen bei Effects auch bestehen, ist aufgrund fehlender Unterlagen dazu unbekannt.

Die Abklärungen zu den Vergleichsrechnungen zeigen, dass die Modellrechnungen zur sofortigen Freisetzungen infolge Behälterbersten teilweise mit grossen Unsicherheiten behaftet sind und dass die Ergebnisse der Modellierung stark vom eingesetzten Software Tool und der Wahl der Submodelle abhängig ist. Aufgrund der grossen Differenzen bei den Resultaten der Vergleichsrechnungen empfehlen wir, grosse Sorgfalt bei der Wahl der Modelle, gegebenenfalls in Rücksprache mit dem Hersteller der Software, anzuwenden.

Aufgrund der Erfahrungen im Rahmen der Vergleichsrechnungen mit PHAST und EFFECTS empfehlen wir, das Ausdampfen aus einer Lache entgegen dem Vorgehen bei der holländischen Risikoermittlungsmethodik für Gefahrguttransporte HART in den Modellrechnungen zu berücksichtigen. Die PHAST-Berechnungen haben gezeigt, dass die Lache einen grossen Einfluss auf das Ergebnis haben kann. Hierfür stehen sowohl in Effects als auch in PHAST gut dokumentierte Modelle zur Verfügung, wobei die Dokumentation bei PHAST noch umfassender ist.

## Summary

The rail transport of flammable heavy gases is associated with risks for the population in the surroundings. The methodology used for assessing the risks associated with the rail transport of dangerous goods established in 1998 shall be updated and refined. In this context, also the calculation models for the release, dispersion and the effects of flammable heavy gases on humans shall be updated. Propane is used as a reference for the different flammable heavy gases, which are transported by rail.

In a first step of this study, the state of the art for modelling the release, dispersion and combustion of flammable gases (i.e. propane) as well as the resulting effect on humans, is evaluated. Based on this, the following three software applications are compared in terms of their technical state and their possible application: EFFECTS 10.0.6 (TNO); PHAST 7.2.1.141 (DNV GL) and the CFD tool FLACS v10.5 (Gexcon AS). For this purpose, the models used in the application, input data, different options for the user and the advantages and disadvantages of each software application are documented. Furthermore, comparative dispersion calculations for a large instantaneous release of propane from a rail tank have been made with EFFECTS and PHAST.

The following *conclusions* can be drawn from the results of the study:

EFFECTS and PHAST use for gas dispersion calculations integral models, i.e. comparing to other approaches relatively simple empirical models, which describe gas dispersion using a limited set of parameters and under idealized conditions. Thus, EFFECTS and PHAST are not suitable in cases, which involve complex geometries such as built-up areas, complex topographies and in the near field of the release. In these cases, CFD calculations are the method of choice.

Furthermore, for near field explosion calculations (explosion pressure inside or close to the gas cloud), confined explosions and explosions in built-up areas, CFD calculations are often the only solution.

Also for pool fires, which involve for example poor ventilation conditions, confined situations, flame contact with objects or obstacles inside the flame, only FLACS can be used amongst the three tools, which have been assessed.

Due to its complexity and the considerable work required to set up and run simulations, the CFD Tool FLACS is mainly used in those cases, where other, simpler tools are unsuitable.

The two tools EFFECTS and PHAST are both state of the art.

The very extensive documentation and the information on validation supplied are exemplary at PHAST. This can also lead to the detection of deficits in PHAST, which may not be discovered in EFFECTS due to missing documentation.

An upside of PHAST are the well-validated models for jet fires included in PHAST.

EFFECTS is possibly the better choice when calculating pool fires, because the HSE two-zone model is integrated in EFFECTS. The HSE two-zone model is a well-validated model, which is also used by the British Health and Safety Executive. Comparing to other models which approximate the fire by a radiating cylinder, the HSE two-zone model is less affected by the problem, that one or two very uncertain parameters have a very strong influence on the result.

In case of explosion calculations, there are contradictions in the user interface and documentation of PHAST in the utilization of specific terms, which can lead to misunderstandings and errors with the choice of the models and parameters. The implementation of the Multi-Energy Method is better in EFFECTS than in PHAST, since the GAME correlation for the determination of the blast curve is included in EFFECTS by default. In PHAST, an additional license seems to be necessary. We strongly recommend the use of the GAME correlation when doing explosion overpressure calculations with the Multi-Energy Method. Otherwise, the choice of the blast curve remains quite arbitrary.

The *comparative dispersion calculation* for a large instantaneous release of propane from a rail tank with EFFECTS and PHAST has partly led to very differing results. In PHAST, even the calculation of the same situation with two different submodels available in the tool delivered very different results. Eventually, in PHAST a submodel other than the default standard model for droplets and rainout should be used. In case of dispersion calculations for instantaneous releases due to vessel rupture, it might be worthwhile to wait for the announced new version 8 of PHAST. If such inconsistencies also exist within EFFECTS is unknown due to missing documentation.

The research in the context of the comparative dispersion calculation has shown that the methodology for dispersion calculations for instantaneous releases due to the rupture of a vessel is partly very uncertain and that the results may be strongly dependent on the software tool used and the choice of the submodels. Due to the differing results of the comparative dispersion calculations, the choice of the models must be done very carefully and possibly in consultation with the manufacturer of the software.

Due to the results of the comparative dispersion calculations with EFFECTS and PHAST, we recommend to take the pool evaporation into account in case of gas dispersion calculations, contrary to the Dutch risk assessment method for transport of dangerous goods HART. The calculations with PHAST have shown that pool evaporation may strongly affect the result. Both EFFECTS and PHAST offer well documented models for doing this, whereby the documentation of PHAST is even more exhaustive.

# 1 Einleitung

Die methodische Basis für die Beurteilung der Risiken aus dem Gefahrguttransport mit der Bahn aus dem Jahr 1998 soll aktualisiert und weiterentwickelt werden. Dazu sollen auch die Rechenmodelle für die Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von brennbaren schweren Gasen auf den Menschen aktualisiert werden. Als Modellsubstanz wird Propan verwendet.

Der Güterverkehr auf der Bahn und damit auch die Gefahrguttransporte bewegen sich neben dem nationalen auch in einem internationalen Umfeld, d.h. die verwendete Risikoberechnungs-Methodik muss nicht nur eine möglichst realitätsnahe Berechnung der Risiken ermöglichen, sondern zunehmend auch internationalen Erfordernissen gerecht werden. Dazu muss die Methodik möglichst auf im Ausland bekannten und akzeptierten Grundlagen basieren, damit die Ergebnisse auch im Ausland wirkungsvoll vertreten werden können und akzeptiert werden.

In der vorliegenden Studie wurde in einem ersten Schritt ein Überblick über den Stand der Technik bei der Modellierung des Schadensausmasses einer Propanfreisetzung erarbeitet.

Die Abklärungen wurden systematisch nach den folgenden Modulen gegliedert:

- Modul 1: Freisetzung
- Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig inkl. Lachenbildung
- Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke
- Modul 4a: Zündung
- Modul 4b: Abbrand
- Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzeabstrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)

Diese Module stellen die einzelnen Teilschritte bei der Modellierung des Schadensausmasses dar. Für jeden dieser Teilschritte wurden die verfügbaren Modelle zusammengestellt und wo verfügbar auch qualitative Angaben zur Abstützung, Validität etc. aufgeführt.

Aufbauend auf diesem Überblick über den Stand der Technik wurden drei Software-Tools, ebenfalls gegliedert nach den oben genannten Modulen, dokumentiert. Dabei wurden die in der Software-Tools verwendeten Modelle, verwendete Eingangsdaten, Wahlmöglichkeiten bei der Anwendung sowie Stärken und Schwächen zusammengestellt.

## 2 Vorgehen

### 2.1 Stand der Technik

Um einen Überblick über den Stand der Technik zu bekommen, werden in der vorliegenden Methodik-Studie verschiedene Informationsquellen herangezogen:

- Aktuelle Risikoberechnungsmethoden für Gefahrguttransporte auf der Bahn in anderen Ländern:  
In anderen Ländern wurden neueren Datums standardisierte Risikoberechnungsmethoden für Gefahrguttransporte auf der Bahn erarbeitet oder die Erarbeitung ist noch im Gang (z.B. Niederlande, Belgien, ev. Frankreich). Insbesondere die holländische Methodik (Handleiding Risicoanalyse Transport HART Versie 1.1, 1.4.2015) ist fertiggestellt und vergleichsweise gut dokumentiert. Sie wurde als nationaler Standard in den Niederlanden definiert. Die in HART verwendeten Modelle wurden deshalb in der vorliegenden Studie systematisch zusammengestellt.
- SAPHEDRA Projekt:  
Das SAPHEDRA Projekt hat den Aufbau einer europäischen Plattform zur Evaluation von Konsequenzmodellen im Bereich neu auftretender Risiken zum Ziel. Der Bericht „SAPHEDRA Gap Analysis for Emerging Risk Issues“ analysiert, wo betreffend der neu auftretenden Risiken bei den verfügbaren Konsequenzmodellen Lücken bestehen. Der Bericht „SAPHEDRA Identification of existing tools“ klassifiziert die verschiedenen Phänomene, die modelliert werden müssen und stellt bestehende Modelle zusammen, mit denen diese Modellierungen durchgeführt werden können.
- Rahmenbericht zur standardisierten Ausmasseneinschätzung und Risikoermittlung für Erdgashochdruckanlagen:  
Der Rahmenbericht zur standardisierten Ausmasseneinschätzung und Risikoermittlung für Erdgashochdruckanlagen wurde durch die schweizerische Gaswirtschaft in enger Zusammenarbeit mit den zuständigen Bundesbehörden erstellt und durch das Bundesamt für Energie validiert.
- Analysen, Benchmarks:  
Für ausgewählte Modelle/ Software-Tools, die allenfalls für Teilschritte im Ereignisbaum in Frage kommen, wurden bereits Benchmark-Berechnungen durchgeführt, in denen ermittelt wurde, wie nahe die Modellrechnungen (in der Regel Software-Tool) an im Experiment gemessenen Werten liegen.
- Empfehlungen Behörden anderer Länder, nationale Standards:  
Einige Behörden anderer Länder geben Empfehlungen ab, welche Modelle/Software-Tool verwendet werden können oder erteilen Zulassungen für Modelle/Software-Tool (z.B. das U.S. Departement of Transportation im Bereich der Störfallvorsorge) oder sie legen ein Modell/Software-Tool fest, das verwendet werden muss (z.B. die Niederlande im Bereich der Gefahrguttransporte auf der Bahn). Mit Ausnahme der niederländischen Risikoberechnungsmethodik und allenfalls weiterer national standardisierter

Risikoberechnungsmethoden betreffen diese Empfehlungen in der Regel nur Modelle für einzelne Teilschritte im Ereignisbaum. Ebenfalls führen Behörden anderer Länder, beispielsweise das britische Health and Safety Executive (HSE) Reviews für wichtige Tools durch, bzw. lassen die Reviews durch das Health and Safety Laboratory (HSL) oder durch Dritte erstellen (So existiert beispielsweise für das CFD Tool FLACS ein detailliertes Review durch das britische HSL, welches die Stärken und Schwächen des Software-Tools bzw. der verwendeten Modelle aufzeigt).

## 2.2 Software-Tools

Es wurden die folgenden Software-Tools in den Vergleich aufgenommen:

- Effects 10.0.6 (TNO):  
Effects ist ein Standard-Softwarepaket zur Konsequenzmodellierung für eine Vielzahl verschiedener Szenarien, ausgehend der Methodik im niederländischen Yellow- und Greenbook.
- Phast 7.2.1.141 (DNV GL)  
Phast ist ein Standard-Softwarepaket zur Konsequenzmodellierung für eine Vielzahl verschiedener Szenarien. Vielfach werden andere Modelle als bei Effects eingesetzt, bei einigen handelt es sich um Eigenentwicklungen des norwegischen Herstellers DNV GL.
- FLACS v10.5 (Gexcon AS):  
FLACS ist ein spezialisiertes CFD Tool des norwegischen Herstellers Gexcon AS zur Berechnung von Gasausbreitung und –explosion, Staubexplosionen und mit dem neuen Modul FLACS-Fire auch zur Flammenberechnung. Die Struktur des FLACS Paketes ist relativ komplex. Es besteht vereinfacht dargestellt aus dem CFD Simulator mit verschiedenen Versionen des CFD Codes (Standardversion, HEM-Version, FLACS-Fire etc.), einem im Simulator eingebetteten Pool-Modell in verschiedenen Versionen und externen, nicht in den CFD Simulator integrierten sogenannten Utility Programs zur Berechnung der ersten Phase von Jet- und Flash-Austritten, bevor die weitere Simulation in der CFD Umgebung erfolgt.

Von TNO und DNV GL gibt es je auch ein Software-Tool zur Durchführung von Risikoanalysen. Mit diesen Tools kann nicht nur die Konsequenzmodellierung im Rahmen der Berechnung des Schadensausmasses durchgeführt werden wie mit Effects und Phast, sondern es können eigentliche Risikoberechnungen bis hin zur Summenkurve durchgeführt werden. Da sich diese beiden Software-Tools stark an das jeweilige Konsequenzmodellierungstool Effects bzw. Phast anlehnen, werden sie beim Vergleich der Software-Tools jeweils stellenweise mit erwähnt:

- Riskcurves 10.0.6 (TNO):  
Riskcurves ist ein Software-Tools zur Risikoanalyse (Berechnung Summenkurven kollektives Risiko, individuelles Risiko, Risiko-Beitragskarten etc.), basierend auf der Methodik im niederländischen Yellow-, Green und Purple Book
- Safeti (DNV GL)  
Safeti verfügt über eine vergleichbare Funktionalität wie Riskcurves von TNO

## 2.3 Vergleichsrechnungen

Beim Vergleich der Modelle anhand ihrer Dokumentationen wurde ersichtlich, dass teilweise grosse Unterschiede bezüglich der methodischen Herangehensweise an die Modellierung der physikalischen Prozesse bestehen. Zur Veranschaulichung dieser Unterschiede wurden Vergleichsrechnungen mit den beiden etablierten proprietären Software-Tools Effects (TNO) und Phast (DNV GL) durchgeführt. Das Software-Tool Effects von TNO ist in der Schweiz verbreitet für Risikoanalysen von stationäre Störfallanlagen. Phast von DNV GL hat weltweit eine sehr grosse Verbreitung, wird in der Schweiz gegenwärtig im Bereich der Störfallvorsorge aber eher weniger verwendet.

Mit den beiden Software-Tools Effects und Phast wurde für eine instantane Freisetzung von 42 Tonnen Propan eine Vergleichsrechnung für die Gasausbreitung durchgeführt. Dabei ging es insbesondere darum, an diesem Beispiel zu prüfen, ob sich bei den Ergebnissen der beiden Modelle TNO DENSEGAS (Effects) und UDM (Phast) Differenzen ergeben. Das Beispiel einer grossen instantanen Freisetzung wurde gewählt, weil bei diesem Szenario im Vergleich zu den kontinuierlichen Freisetzungen die grösste Ausdehnung der Gaswolke erwartet wird. Wichtiges Ergebnis ist dabei vor allem die maximale Distanz von der Freisetzung bis zur Gaskonzentration auf der unteren Zündgrenze, d.h. die maximale Reichweite des zündbaren Bereichs der Gaswolke.

Für die Beispielrechnung in Phast wurden die folgenden Parameter gewählt:

| Tab                  | Group                      | Field   | Value         | Units      |
|----------------------|----------------------------|---|---------------|------------|
| Material             | Material                   | Material  | PROPANE       |            |
|                      |                            | Mass inventory  |               | 42000 kg   |
|                      |                            | Volume inventory  |               | 88.8238 m3 |
|                      |                            | Temperature   |               | 15 degC    |
|                      |                            | Pressure (gauge)  |               | 25 bar     |
|                      |                            | Phase to be released  | Liquid        |            |
|                      | Release location           | Elevation   |               | 1 m        |
|                      |                            | Tank head   |               | 0 m        |
| Discharge parameters | Droplet break-up mechanism | Droplet break-up mechanism - instantaneous Use flashing correlation |               |            |
| Dispersion           | Dispersion scope           | Concentration of interest   |               | 17000 ppm  |
|                      | Distances of interest      | Distances of interest   | 10; 100; 1000 | m          |

| Field   | Value | Units   |
|---|-------|---|
| Wind speed                                      |       | 1 m/s   |
| Pasquill stability                              | F     | stable - night with moderate clouds and light/moderate wind |
| Atmospheric temperature                         |       | 15 degC   |
| Relative humidity                               |       | 0.7 fraction  |
| Solar radiation flux                            |       | 0.5 kW/m2   |
| Surface temperature for dispersion calculations |       | 15 degC   |
| Surface temperature for pool calculations       |       | 15 degC   |

Eine weitere Berechnung wurde mit Stabilitätsklasse D und Windgeschwindigkeit 4 m/s durchgeführt. Ebenfalls wurden zwei Varianten mit surface roughness length 10 cm und 1 m berechnet.

Phast verfügt über zwei verschiedene Modelle zur Modellierung der Flüssigkeitströpfchen und Bestimmung des Rainouts bei instantanen Freisetzungen, die sehr unterschiedliche Ergebnisse liefern. Default ist das Phast Standardmodell, welches jedoch den Rainout im vorliegenden Beispiel unterschätzen kann. Bei der Beispielrechnung blieb der Rainout sogar vollständig aus, so dass keine Lache modelliert wurde.

Auf Nachfrage beim Support empfiehlt DNV GL für das vorliegende Beispiel die Verwendung des ebenfalls in Phast enthaltenen Purple Book Modells, welches allerdings

den Mangel aufweist, dass es keine detaillierte Modellierung der Flüssigkeitströpfchen durchführt und sozusagen eine Lachenbildung erzwingt.

Die Berechnungen wurden deshalb für beide Varianten, das Standard-Tröpfchenmodell als Default und das Purple Book Modell als für den vorliegenden Fall geeigneteres Modell, durchgeführt.

In der nächsten Version von Phast (Version 8, besteht zurzeit als Beta-Version) soll ein neues Tröpfchenmodell integriert werden, welches diese Inkonsistenzen beheben soll.

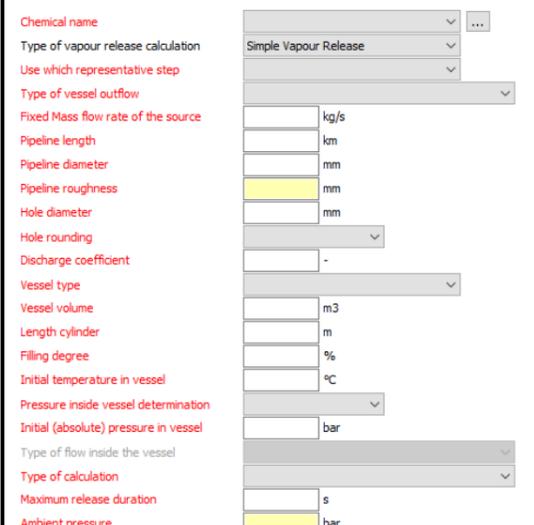
### 3 Module Stand der Technik, Software-Tools

Gelb markiert sind die verschiedenen Modelle

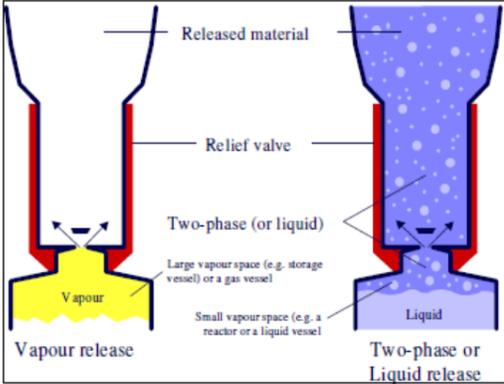
Blau markiert sind mögliche weitere Abklärungen.

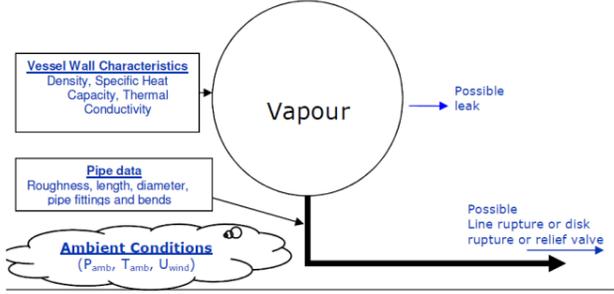
#### 3.1 Modul 1: Freisetzung

| Modul 1: Freisetzung   |  |  |  |  |
|--|--|--|--|--|
| Stand der Technik  |  | Software-Tools   |  |  |
| HART   | Saphedra   | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)  |
| <b>Kontinuierliche Freisetzung</b>   |  |  |  |  |
| <p>Es wird ein horizontaler Austritt auf Bodenniveau in Windrichtung, ohne Hindernisse im Jet angenommen.</p> <p>Es wird mit der Anfangsausstrittsrate gerechnet. Ein Entleeren des Behälters wird nicht berücksichtigt.</p> <p>Berechnung der <u>Anfangsausstrittsrate</u> gemäss <u>Purple Book (Bernoulli-Gleichung)</u>:</p> $m_{rel} = C_d \cdot A_h \cdot (2 \cdot \Delta P \cdot \rho)^{1/2} \text{ [kg/s]}$ <p><math>A_h</math> Leckgrösse [m<sup>2</sup>]<br/> <math>C_d</math> Dischargekoeffizient, 0.62 [-]<br/> <math>\Delta P</math> <math>P_1 - P_a</math> [N/m<sup>2</sup>]<br/> <math>P_a</math> Umgebungsdruck [N/m<sup>2</sup>]<br/> <math>P_1</math> Druck im Behälter [N/m<sup>2</sup>]<br/> <math>\rho_l</math> Dichte der Flüssigphase [kg/m<sup>3</sup>]</p> <p>Parameter:<br/>                     Leckdurchmesser: 75 mm<br/> <math>C_d=0.62</math><br/>                     Die Flüssigkeitssäule über dem Leck wird nicht berücksichtigt</p> | <p><b>Saphedra Gap Analysis:</b><br/>                     Für LNG werden die klassischen Modelle wie <u>Lees 1996</u> oder <u>Yellow Book 3rd Edition</u>, die für andere Substanzen verwendet werden, empfohlen. Für kleine Lecks in einem Tank wird für Flüssigkeiten die <u>Bernoulli-Gleichung</u> empfohlen.<br/>                     -&gt; Anmerkung suisseplan: wenn für LNG empfohlen wird, Modelle zu übernehmen, die unter anderem für Propan verwendet werden, deutet dies darauf hin, dass diese Modelle dem aktuellen Stand entsprechen</p> | <p>Effects und Riskcurves bilden die Modelle des Yellow Book 3<sup>rd</sup> Edition ab und orientieren sich konsequent an dessen Struktur, wobei bei Riskcurves die Parametrisierbarkeit und die manuelle Auswahl der Modelle im Vergleich zu Effects stark eingeschränkt sind.</p> <p>Für die Freisetzung von "liquefied Gas" werden in Effects 6 Szenarien von kontinuierlicher Freisetzung unterschieden. In Riskcurves kann lediglich zwischen „fixed flow rate“, „Release through hole in vessel“ und „Release from vessel through (a hole in pipe)“ gewählt werden.</p> <p>Stoffspezifische Eigenschaften sind in einer Datenbank hinterlegt, denen die Werte von YAWS und DIPPR hinterlegt sind.</p> <p><b>Liquefied Gas Vapour Release (Effects) (Simple vapour release)</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Leck in der Gasphase oberhalb des Niveaus der aufschäumenden Phase ("expanded boiling liquid"); adiabatische Gas-Freisetzung</p> <p><u>Modell</u><br/>                     siehe Yellow Book 2.5.3</p> | <p>Phast verwendet die <u>DISC-Modelle</u> zur Berechnung der Freisetzung. Folgende Formen kontinuierlicher Freisetzung können damit modelliert werden:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Freisetzung aus einem Leck im Behälter</li> <li>2) Freisetzung aus einem kurzen Rohr an einem Behälter, inkl. Freisetzung aus einem Sicherheitsventil oder durch eine Berstscheibe</li> <li>3) Freisetzung der Gasphase aus einem Ventil während dem Befüllen eines Behälters</li> </ol> <p>Bei den ersten beiden Freisetzungformen wird in der Annahme, dass dies konservativ sei, die Anfangsausstrittsrate und die Freisetzungsdauer, wenn die Freisetzung bis am Schluss mit der Anfangsausstrittsrate stattfindet, berechnet.</p> <p>Die auf den Austritt folgende Expansion/Phasenübergang wird mit dem <u>ATEX-Modell</u> berechnet (siehe Modul 2 im vorliegenden Dokument), mit Ausnahme der Freisetzung der Gasphase aus einem Ventil während dem Befüllen eines Behälters.</p> <p>Zusätzlich steht das <u>TVDI-Modell</u> (Time-Varying Discharge Modelling) für zeitlich variable Freisetzung zur Verfügung. <u>TVDI</u> modelliert die zeitliche Variation der Austrittsrate, des Behälterinhalts und der thermo-physikalischen Verhältnisse. Es können dieselben Formen kontinuierlicher Freisetzung wie bei den <u>DISC</u> Modellen modelliert werden.</p> <p><u>TVDI</u> besteht aus zwei Sub-Modellen: <u>TVRGAS</u> für Behälter-Depressurisation in der Gasphase und <u>TVEXEC/TVLEAK</u> für Mehrphasen-Behälter-Depressurisation. Die Modelle berücksichtigen Zufluss, Abfluss (inkl. Abblasen) und Isolierung. Für die Berechnung des Austritts aus dem Leck werden die <u>DISC-Modelle</u> verwendet.</p> <p>Für Freisetzung aus der Flüssigphase kann alternativ auch das <u>Bernoulli</u> Modell gewählt werden.</p> | <p><u>Situation</u><br/>                     Horizontaler Austritt aus der Flüssigphase (nur flüssiges Gas tritt aus)</p> <p><u>Modell</u><br/>                     Der Austrittsvorgang aus einem Flüssiggas-Behälter wird nicht mit dem CFD Code modelliert, sondern mit dem FLASH utility program (Befehlszeilen-Tool, Teil des FLACS Pakets).<br/>                     Der horizontale Austritt aus der Flüssigphase (nur flüssiges Gas tritt aus) wird wie bei HART basierend auf der <u>Bernoulli-Gleichung</u> modelliert. Ein Entleeren des Behälters wird nicht berücksichtigt. Die Austrittsdauer kann jedoch in der nachfolgenden Ausbreitungssimulation begrenzt werden.<br/>                     Im Gegensatz zu HART detailliertere Berechnung des Drucks an der Lecköffnung, basierend auf Dampfdruck des Flüssiggases in Abhängigkeit der Temperatur an der Lecköffnung, hydrostatischem Druck der Flüssigkeitssäule über dem Leck und dem Partialdruck allfälliger anderer Gase in der Gasphase des Behälters (z.B. Stickstoff).<br/>                     Die Bestimmung des Partialdrucks anderer Gase in der Gasphase im Behälter ist schwierig, die Berechnung kann aber auch (wie bei anderen Modellen üblich) ohne Berücksichtigung dieses Parameters durchgeführt werden.<br/>                     Dampfdruckberechnung in Abhängigkeit der Temperatur mit der <u>Riedel-Planck-Miller-Dampfdruckgleichung</u>.<br/>                     Wird das FLASH utility program für stark von der Horizontalen abweichende Austrittsrichtungen verwendet, ergeben sich in erster Linie Fehler bei der Berechnung der Rainout Mengen (in Modul 1 im vorliegenden Dokument nicht relevant, erst Modul 2 im vorliegenden Dokument)</p> |

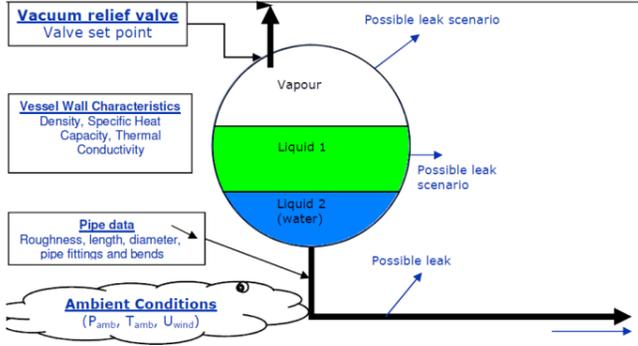
| Modul 1: Freisetzung |  |  |   |  |
|----------------------|--|--|---|--|
| Stand der Technik    |  | Software-Tools   |   |  |
| HART                 | Saphedra   | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
|                      |  | <p><b>Eingabeparameter</b></p>  <p>Austrittsrate <math>q_s</math> [kg/s] kann entweder manuell festgelegt (konstante Austrittsrate) oder abgeschätzt werden (gemäss Gleichung Yellow Book 2.22). Im letzteren Fall wird der Druckabfall infolge der Freisetzung in der Berechnung der Austrittsrate berücksichtigt. Es kann ferner über die Eingabemaske festgelegt werden, ob die Freisetzung nur über einen definierten Zeitraum oder bis zur vollständigen Entleerung des Behälters modelliert werden soll.</p>   |   |  |
|                      | <p><b>Saphedra Identification of existing tools:</b></p> <p><u>Freisetzung aus Flüssigphase</u></p> <p>In der Zusammenstellung der vorhandenen Modelle wird als einziges Modell, das ausschliesslich für die Freisetzungen von Flüssigkeiten verwendet werden kann, das <b>Bernoulli-Modell</b> angegeben. Einschränkungen beim Anwendungsbereich bestehen für superkritische Fluide. Das ebenfalls aufgeführte Modell „<b>Outflow with pipe friction</b>“ aus dem Yellow Book 2005 wird für Flüssiggas-Austritte aus Bahnkesselwagen nicht als relevant betrachtet und deshalb an dieser Stelle nicht weiter berücksichtigt. Mit dem <b>DISC-Modell</b> (Phast) können Freisetzungen aus der Flüssigphase von</p> | <p><b>Liquefied Gas Top Venting (Effects) (DIERS (Top venting))</b></p> <p><u>Situation</u></p> <p>Leck in der Gasphase unterhalb des Niveaus der aufschäumenden Phase oberhalb des Flüssigkeitsspiegels ("expanded boiling liquid")</p> <p><u>Modell</u></p> <p><b>DIERS</b> (siehe Yellow Book 2.5.3.2), wurde für vertikale Tanks entwickelt.</p> <p>Ob sich das Modell auf horizontale Tanks (wie Bahnkesselwagen) anwenden lässt und was der Einfluss auf die Ergebnisse ist, ist in der Dokumentation nicht beschrieben.</p> <p>Das Modell (siehe Yellow Book 2.5.3.3 – 2a/2b; Seiten 2.86 ff.) erlaubt die Unterscheidung zwischen der Freisetzung aus einem Sicherheitsventil und einem Loch in der Seitenwand. In der Eingabemaske für Effects kann jedoch nicht ausgewählt werden, ob die Freisetzung über ein Leck oder ein</p> | <p><b>DISC Freisetzung aus einem Leck im Behälter</b></p> <p><u>Situation</u></p> <p>Anwendbar für Chemikalien in Gas- und Flüssigphase sowie Zweiphasen</p> <p><u>Modell</u></p> <p>Iterative Berechnung unter Verwendung der Gleichungen für isentropische Expansion und dem Energieerhaltungssatz (Gleichungen in der Dokumentation zu Phast dokumentiert). Bei Flüssigkeiten nahe am kritischen Druck gemäss der Entropiekurve kann diese Methode jedoch unphysikalische Ergebnisse liefern. In diesem Bereich wird das <b>Bernoulli-Modell</b> verwendet.</p> <p>Interessant ist, dass der Discharge Koeffizient durch das Modell berechnet werden kann. Manuelle Eingabe ist ebenfalls möglich. Der Discharge Koeffizient ist bei anderen Modellen (<b>Bernoulli</b> etc.) ein sehr unsicherer Eingabeparameter, der bestenfalls mit groben Faustregeln abgeschätzt werden muss. Die Berechnung im <b>DISC</b> basiert auf einem Ansatz von Bragg (1960). Diese theoretische Basis wird in der Phast Dokumentation allerdings als unsicher bezeichnet. Bei Flüssigkeiten wird immer der Wert 0.6 verwendet, basierend auf Experimenten.</p> | <p><u>Eingabeparameter:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Stoff (9 verschiedene möglich, darunter Propan, Butan, Methan)</li> <li>- Leckquerschnitt (<math>m^2</math>)</li> <li>- Temperatur des Flüssiggases an der Lecköffnung (<math>^{\circ}C</math>)</li> <li>- Discharge Koeffizient (Default 0.62)</li> <li>- Temperatur Umgebungsluft (<math>^{\circ}C</math>)</li> </ul> <p>Direkte Eingabe der Austrittsrate (kg/s) oder des Drucks an der Austrittsöffnung (kPa) oder Berechnung anhand zusätzlicher Eingabe von:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Höhe der Flüssigkeitssäule über dem Leck (m)</li> <li>- Partialdruck anderer Gase in der Gasphase im Behälter (kPa)</li> </ul> <p><u>Output</u> (Zwischenwerte, Weiterverarbeitung im FLASH utility program)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Dampfdruck bei der Temperatur an der Austrittsöffnung (kPa)</li> <li>- Druck an der Austrittsöffnung (kPa)</li> <li>- Austrittsrate (kg/s)</li> </ul> |

| Modul 1: Freisetzung |  |  |  |                   |
|----------------------|--|--|--|-------------------|
| Stand der Technik    |  | Software-Tools   |  |                   |
| HART                 | Saphedra   | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS) |
|                      | <p>druckverflüssigten Gasen berechnet werden. Auch hier bestehen Einschränkungen beim Anwendungsbereich für superkritische Fluide.</p> <p><u>Zweiphasen-Austritte</u><br/>                     Für Zweiphasen-Austritte werden 4 mögliche Modelle aufgeführt: <b>TPDIS</b>, <b>LEUNG</b>, <b>Homogeneous Non-equilibrium Model</b>, <b>DISC</b> (Zweiphasen-Modelle zur Berechnung des Flash werden in Modul 2 aufgeführt)</p> <p>Zur Validierung des <b>TPDIS</b> Modells wird im Saphedra Full Spreadsheet auf Kukkonen (1990) verwiesen und zur Validierung des <b>LEUNG</b> Modells auf das „<b>DISC</b> validation document“.</p> <p>Das <b>LEUNG</b>-Modell taucht in den von DNV GL als Teil der Phast-Dokumentation gelieferten Unterlagen zum <b>DISC</b> Model jedoch nur als Drittmodell beim Vergleich mit Experimenten auf. Für weiterführende Angaben zur Validität der Modelle <b>TPDIS</b> und <b>LEUNG</b> wäre allenfalls eine Beschaffung des Dokuments Kukkonen 1990 und eine Klärung/Beschaffung der Angaben zur Validität des <b>LEUNG</b> Modells mit TNO/DNV GL sinnvoll.</p> <p>Das Saphedra full spreadsheet ist gemäss Angabe von TNO nicht vollständig. Ev. sind weitere relevante Dokumente zur Validität nicht darin aufgeführt.</p> <p><u>Austritte aus der Gasphase</u><br/>                     Modelle für Austritte aus der Gasphase (Oberhalb dem Flüssigkeitsspiegel) sind: <b>Vapour release model</b>, <b>DISC</b></p> <p>Spezialfall: Austritt aus der Gasphase aus dem Sicherheitsventil mit Berücksichtigung von Flüssigkeitsaustritten infolge Aufschäumen: <b>Diers vapour release</b></p> | <p>Sicherheitsventil modelliert werden soll. Im Effects Manual werden sowohl die Begriffe „hole“ wie auch „Top Venting“ verwendet.</p> <p>Für die Berechnung der Austrittsrate wird angenommen, dass ausschliesslich Gas austritt.</p> <p><u>Eingabeparameter</u><br/>                     Für die Berechnung der Austrittsrate wird angenommen, dass ausschliesslich ein Austritt der Gasphase stattfindet. Sie berechnet sich über Gleichung (2.22) des Yellow Book.</p> $q_G = C_d \times A_h \times \psi \times \sqrt{(p_0 \times P_0 \times \gamma \times (2/(\gamma + 1))^{(\gamma + 1)/(\gamma - 1)})} \quad (\text{kg/s}) \quad (2.22)$ <p>The factor <math>\psi^2</math> is given by equation (2.24) or (2.25) below, and depends on whether the gas outflow is choked (critical) or not.</p> <p>The outflow is critical or choked when</p> $P_0/P_a \geq ((\gamma + 1)/2)^{\gamma/(\gamma - 1)} \quad (-) \quad (2.23)$ <p>For critical outflow</p> $\psi^2 = 1 \quad (-) \quad (2.24)$ <p>and for sub-critical outflow</p> $\psi^2 = 2/(\gamma - 1) \times ((\gamma + 1)/2)^{\gamma/(\gamma - 1)} \times (P_a/P_0)^{2/\gamma} \times (1 - (P_a/P_0)^{(\gamma - 1)/\gamma}) \quad (-) \quad (2.25)$ <p>with</p> $\gamma = C_p/C_v \quad (-) \quad (2.26)$ <p>where</p> <p><math>q_G</math> = mass flow rate [kg/s]<br/> <math>C_d</math> = discharge coefficient [-]<br/> <math>A_h</math> = cross-sectional area hole [m<sup>2</sup>]<br/> <math>\psi</math> = outflow coefficient [-]<br/> <math>p_0</math> = initial gas density [kg/m<sup>3</sup>]<br/> <math>P_0</math> = initial gas pressure [N/m<sup>2</sup>]<br/> <math>\gamma</math> = Poisson ratio [-]<br/> <math>C_p</math> = specific heat at constant pressure [J/(kg·K)]<br/> <math>C_v</math> = specific heat at constant volume [J/(kg·K)]</p> <p>Für die Eigenschaften des Flusses kann zwischen Churn-turbulent flow (eher für Substanzen mit einer dynamischen Viskosität von &lt; 0.1 Pa x s) und Bubbly flow unterschieden werden (Effects Manual 5.3.340). Bei churn-turbulent oszillierende Ausströmung von Gas und Flüssigkeit. Bei bubbly flow gleichmässige Verteilung der Gasphase in der Ausströmung. (Propan wohl eher "churn-turbulent")</p> | <p><u>Eingabeparameter</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Chemikalie</li> <li>- 2 der folgenden 3 Parameter: Druck im Behälter (an der Flüssigkeitsoberfläche) (Einheit?), Temperatur (K), Massenanteil in der Flüssigphase (-)</li> <li>- Masse Behälterinhalt (Flüssig- + Gasphase) (kg)</li> <li>- Höhe der dem Leck überstehenden Flüssigkeitssäule (m)</li> <li>- Leckdurchmesser (m)</li> <li>- Diverse „Schalter“: Wahl der Austrittsphase (flüssig/unterhalb des Flüssigkeitsspiegels, Gasphase/oberhalb des Flüssigkeitsspiegels, Zweiphasen/aufschäumen im Behälter) bei Zweiphasen-Behälter, Austritt in Flüssigphase „erzwingen“ (kein Flash bereits in der Lecköffnung)</li> <li>- Alternativ: Berechnung des nötigen Leckquerschnitts um über eine bestimmte Zeit eine bestimmte Austrittsrate zu erhalten</li> </ul> <p><u>Output</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Austrittsrate (kg/s)</li> <li>- Austrittsdauer (s)</li> <li>- Druck an der Lecköffnung (Pa)</li> <li>- Temperatur an der Austrittsöffnung (K)</li> <li>- Massenanteil in Flüssigphase</li> <li>- Geschwindigkeit an der Austrittsöffnung (m/s)</li> <li>- Discharge Koeffizient (-)</li> </ul> <p><u>Gültigkeit des Modells</u></p> <p>Nicht für nicht-runde Lecks geeignet. Diese Einschränkung betrifft wahrscheinlich auch die anderen im Stand der Technik aufgeführten Modelle</p> <p>Die unteren und oberen Limiten für die Eingabeparameter sind in der Dokumentation zusammengestellt</p> <p><u>Validierung</u></p> <p>Die Dokumentation für Phast enthält ein Dokument zur Validierung der DISC Modelle. Das Dokument bezieht sich jedoch auf eine ältere Version von Phast (Version 6.5.3). Es werden darin auch Vergleichsrechnungen mit Propan-Freisetzungsexperimenten aufgeführt. Dabei ergibt das <b>Bernoulli</b>-Modell im Durchschnitt die beste Übereinstimmung mit den Experimenten. Im Durchschnitt beträgt beim <b>Bernoulli</b> Modell die Abweichung zu den Messwerten 16%, maximal 54%.</p> |                   |

| Modul 1: Freisetzung                             |                                     |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
|--|-------------------------------------|--|----------------|----------------------|-------------------------------|----------------------|------------------------|----------------------|------------------------------------|---------------------------|-----------------|-------------------------|-------------------|-------------------------|--------------------|-------------------------|---------------|-------------------------|---------------|----------------------|-----------------------|----------------------|--|------------------------|-------------------------------|------------------------|-------------------------------|-------------------------|---------------|-------------------------------------|-------------|----------------------|-----------------|------------------------|----------------|------------------------|----------------|----------------------|---------|----------------------|--------------------------------------|----------------------|---------------------------------------|--------------------------|---------------------|----------------------|--------------------------|------------------------|------------------|--------------------------|--|--|
| Stand der Technik                                |                                     | Software-Tools   |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| HART   | Saphedra                            | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS)    |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
|  |                                     | <p><b>Liquefied Gas Bottom Discharge (Effects)</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Das Leck befindet sich unterhalb des Niveaus der Flüssigphase; Freisetzung durch Leitung – Der Fall einer kurzen Leitung (&lt; 0.1m, resp. Leck im Tank) wird mit der Annahme einer 1-Phasen-Freisetzung der Flüssigphase und Gleichung (2.95 – Yellow Book) für die Freisetzungsrates vereinfacht. Welchen Wert Effects während der Berechnung für P<sub>2</sub> in die Gleichung 2.95 (Yellow Book) einsetzt ist unklar und bei Bedarf mit TNO zu klären.</p> <p><u>Modell</u><br/> <b>TPDIS</b>-Modell (siehe Yellow Book 2.5.3.5 – “Two Phase DIScharge through Pipe”). Das Modell unterteilt den Freisetzungsprozess in drei Phasen, wobei in den ersten beiden Phasen die <b>Bernoulli</b>-Gleichung angewendet wird.</p> <p><u>Parameter</u></p> <table border="1"> <tr><td>Chemical name</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Use which representative step</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Type of vessel outflow</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Fixed Mass flow rate of the source</td><td><input type="text"/> kg/s</td></tr> <tr><td>Pipeline length</td><td><input type="text"/> km</td></tr> <tr><td>Pipeline diameter</td><td><input type="text"/> mm</td></tr> <tr><td>Pipeline roughness</td><td><input type="text"/> mm</td></tr> <tr><td>Hole diameter</td><td><input type="text"/> mm</td></tr> <tr><td>Hole rounding</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Discharge coefficient</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Height difference between pipe entrance and exit</td><td><input type="text"/> m</td></tr> <tr><td>Height leak above tank bottom</td><td><input type="text"/> m</td></tr> <tr><td>Initial temperature in vessel</td><td><input type="text"/> °C</td></tr> <tr><td>Vessel volume</td><td><input type="text"/> m<sup>3</sup></td></tr> <tr><td>Vessel type</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Height cylinder</td><td><input type="text"/> m</td></tr> <tr><td>Filling degree</td><td><input type="text"/> %</td></tr> <tr><td>Expansion type</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>n value</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Pressure inside vessel determination</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Initial (absolute) pressure in vessel</td><td><input type="text"/> bar</td></tr> <tr><td>Type of calculation</td><td><input type="text"/></td></tr> <tr><td>Maximum release duration</td><td><input type="text"/> s</td></tr> <tr><td>Ambient pressure</td><td><input type="text"/> bar</td></tr> </table> <p><b>Liquefied Gas Spray Release</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Freisetzung von Liquefied Gas (wobei Gas mit Siedepunkt &lt; Umgebungstemperatur) aus Tank oder Leitung; 2-Phasen Jet</p> <p>Da die Freisetzungsrates manuell berechnet und als Eingabeparameter in die Eingabemaske von Effects eingetragen werden muss, wird der Liquefied Gas Spray Release erst ab Modul 2 untersucht.</p> | Chemical name  | <input type="text"/> | Use which representative step | <input type="text"/> | Type of vessel outflow | <input type="text"/> | Fixed Mass flow rate of the source | <input type="text"/> kg/s | Pipeline length | <input type="text"/> km | Pipeline diameter | <input type="text"/> mm | Pipeline roughness | <input type="text"/> mm | Hole diameter | <input type="text"/> mm | Hole rounding | <input type="text"/> | Discharge coefficient | <input type="text"/> | Height difference between pipe entrance and exit | <input type="text"/> m | Height leak above tank bottom | <input type="text"/> m | Initial temperature in vessel | <input type="text"/> °C | Vessel volume | <input type="text"/> m <sup>3</sup> | Vessel type | <input type="text"/> | Height cylinder | <input type="text"/> m | Filling degree | <input type="text"/> % | Expansion type | <input type="text"/> | n value | <input type="text"/> | Pressure inside vessel determination | <input type="text"/> | Initial (absolute) pressure in vessel | <input type="text"/> bar | Type of calculation | <input type="text"/> | Maximum release duration | <input type="text"/> s | Ambient pressure | <input type="text"/> bar | <p><b>DISC Freisetzung aus einem kurzen Rohr an einem Behälter:</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Modellierung des Bruchs eines an einen Behälter angeschlossenes kurzes Rohrs, inkl. Freisetzung aus einem Sicherheitsventil oder durch eine Berstscheibe. Bei der Verwendung für Sicherheitsventile/Berstscheiben wird das Ventil/die Berstscheibe als eine Verengung bei der Verbindung der Leitung mit dem Behälter wiedergegeben. Die Leitung entspricht dann dem Abblaserohr des Ventils.</p>  <p>Auf dieses Modell wird im vorliegenden Dokument nicht weiter eingegangen, da es für Bahnkesselwagen als weniger relevant angesehen wird. Es ist in den Unterlagen zu Phast ausführlich dokumentiert.</p> <p><b>DISC Freisetzung der Gasphase aus einem Ventil während dem Befüllen eines Behälters:</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Modellierung des Abblasens der Gasphase aus einem (halb-) leeren Behälter beim Befüllen. Im vorliegenden Dokument nicht weiter behandelt, da nur beim Umschlag relevant.</p> | <p><u>Gültigkeit des Modells</u><br/>                     Nur zwischen Siedepunkt (Propan 231.1 K) und kritischer Temperatur (Propan 369.8 K, oberhalb der kritischen Temperatur ist Propan gasförmig/supercritisch). Es ist davon auszugehen, dass diese Einschränkungen auch bei den anderen Modellen in den anderen Software-Tools vorhanden sind.</p> <p>Gexcon hat ein neues Modell für flashing-releases entwickelt und anhand der INERIS FLIE Freisetzungsexperimente mit Propan und Butan validiert. (Ichard et al. 2009).</p> <p>Die Austrittsrates wird mit dem <b>Modell von Leung</b> (1990) berechnet. Das Modell berechnet, ob es sich um eine stark unterkühlte Flüssigkeit oder eine wenig unterkühlte Flüssigkeit handelt. (Gleichungen siehe: Ichard</p> |
| Chemical name                                    | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Use which representative step                    | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Type of vessel outflow                           | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Fixed Mass flow rate of the source               | <input type="text"/> kg/s           |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Pipeline length                                  | <input type="text"/> km             |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Pipeline diameter                                | <input type="text"/> mm             |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Pipeline roughness                               | <input type="text"/> mm             |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Hole diameter                                    | <input type="text"/> mm             |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Hole rounding                                    | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Discharge coefficient                            | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Height difference between pipe entrance and exit | <input type="text"/> m              |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Height leak above tank bottom                    | <input type="text"/> m              |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Initial temperature in vessel                    | <input type="text"/> °C             |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Vessel volume                                    | <input type="text"/> m <sup>3</sup> |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Vessel type                                      | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Height cylinder                                  | <input type="text"/> m              |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Filling degree                                   | <input type="text"/> %              |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Expansion type                                   | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| n value  | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Pressure inside vessel determination             | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Initial (absolute) pressure in vessel            | <input type="text"/> bar            |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Type of calculation                              | <input type="text"/>                |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Maximum release duration                         | <input type="text"/> s              |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |
| Ambient pressure                                 | <input type="text"/> bar            |  |                |                      |                               |                      |                        |                      |                                    |                           |                 |                         |                   |                         |                    |                         |               |                         |               |                      |                       |                      |  |                        |                               |                        |                               |                         |               |                                     |             |                      |                 |                        |                |                        |                |                      |         |                      |                                      |                      |                                       |                          |                     |                      |                          |                        |                  |                          |  |  |

| Modul 1: Freisetzung |          |  |   |  |
|----------------------|----------|--|---|--|
| Stand der Technik    |          | Software-Tools   |   |  |
| HART                 | Saphedra | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
|                      |          | <p><b>Liquefied Gas From Long Pipeline</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Relevant bei Freisetzung aus einer Pipeline von mindestens 1 km Länge.<br/>                     Nicht relevant für Bahntransport</p> | <p><b>TVDI TVRGAS</b> (Time-Varying Discharge Modelling für Behälter-Depressurisation in der Gasphase)</p> <p><u>Situation</u><br/>                     Wie <b>DISC</b>-Modelle, aber zeitlich variabel<br/>                     Für Gasphase</p> <p><u>Modell</u><br/>                     Schrittweise Reduktion des Drucks im Behälter. Für jeden Schritt werden die isentropische Expansion und dann die Austrittsrate mit <b>DISC</b> berechnet. Die isentropische Expansion wird mit dem <b>TMO (XADIAX0) Modell</b> berechnet. Die thermodynamischen Eigenschaften der Fluide werden mit dem Phast physical property system (<b>XPRP</b>) berechnet. Die Gleichungen sind im Dokument DNV GL AS: Time-Varying Discharge Modelling, Theory, Aug. 2014 dokumentiert.</p>  | <p>et al. 2009, <a href="https://ams.confex.com/ams/89annual/techprogram/paper_147092.htm">https://ams.confex.com/ams/89annual/techprogram/paper_147092.htm</a><br/>                     stark unterkühlte Fälle: Austritt nur in der Flüssigphase, Berechnung der Austrittsrate mit <b>Bernoulli-Modell</b> (In der Gleichung fehlt allerdings der Leckquerschnitt als Parameter, Tippfehler?)<br/>                     wenig unterkühlte Fälle: Zweiphasen-Austritt, Berechnung mit <b>Modell von Leung</b> (1990)<br/>                     Ichard et al. 2009 weisen darauf hin, dass ein komplexeres Modell nötig wäre.<br/>                     Diese Modelle sind nicht im Standard FLACS Paket enthalten.</p> |

| Modul 1: Freisetzung |          |   |   |
|----------------------|----------|---|---|
| Stand der Technik    |          | Software-Tools  |   |
| HART                 | Saphedra | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL) FLACS (Gexcon AS)  |
|                      |          | <p><b>Liquefied Gas Release in 10 min</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Geht davon aus, dass der gesamte Tankinhalt innerhalb von 10 Minuten freigesetzt wird.</p> | <p><b>Eingabeparameter:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Material, inventory and storage state                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Material name</li> <li>o Amount of material [kg]</li> <li>o Storage state: Temperature [K] and pressure [Pa]</li> </ul> </li> <li>Vessel data<sup>xx</sup> <ul style="list-style-type: none"> <li>o Vessel type and orientation</li> <li>o Vessel dimensions: diameter [m], length [m], height [m], width [m]</li> <li>o Orifice diameter [m].</li> </ul> </li> <li>Pipe data                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Pipe diameter [m]</li> <li>o Pipe length [m]</li> <li>o Pipe surface roughness [m]</li> </ul> </li> <li>Pipe fittings and bends                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Frequency (/m) of three valve types: excess flow (<math>f_{EF}</math>), non-return (<math>f_{NR}</math>), and shut-off (<math>f_{SO}</math>) valves</li> <li>o Number of velocity head losses <math>K_{EF}</math>, <math>K_{NR}</math>, <math>K_{SO}</math> for the three valve types</li> <li>o Frequency (/m) of pipe couplings (<math>f_{coupl}</math>), junctions (<math>f_{junc}</math>) and bends (<math>f_{bend}</math>)</li> </ul> </li> <li>Ambient data                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Temperature [K]</li> <li>o Pressure [Pa]</li> <li>o Humidity [-]</li> <li>o Atmospheric molecular weight [kg/kmol]</li> <li>o Atmospheric specific heat [J/kgK]</li> <li>o Wind speed<sup>z</sup> [m/s]</li> </ul> </li> </ul> <p><b>Output</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Storage (stagnation) state                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Tank pressure [Pa]</li> <li>o Tank temperature [K]</li> </ul> </li> <li>Orifice/pipe exit state                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Discharge velocity [m/s]</li> <li>o Flow rate [kg/s]</li> <li>o Liquid fraction [-]</li> <li>o Temperature [K]</li> <li>o Pressure [N/m<sup>2</sup>]</li> <li>o Discharge coefficient [-]</li> </ul> </li> <li>Post-expansion state                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Final velocity [m/s]</li> <li>o Final liquid fraction [-]</li> <li>o Final temperature [K]</li> <li>o Droplet size [m] and (after 6.6) droplet size distribution parameters</li> </ul> </li> <li>Other                             <ul style="list-style-type: none"> <li>o Output time [s]</li> </ul> </li> <li>o Remaining inventory [kg]</li> </ul> <p><b>TVDI TVEXEC/TVLEAK</b> (Time-Varying Discharge Modelling für mehrphasen Behälter-Depressurisation)</p> <p><u>Situation</u><br/>                     Wie <b>DISC</b>-Modelle, aber zeitlich variabel<br/>                     Für Mehrphasen</p> <p><u>Modell</u><br/>                     Das Modell berücksichtigt Erhaltung der Masse (Externer Massentransfer durch Leck/Leitung, berechnet mit <b>DISC</b> und allfälligem Lufteintritt sowie interner Massentransfer durch Evaporation) und Erhaltung der Energie (Transfer durch Evaporation, benetzte Tankwand, freigesetzte Flüssigkeit, Gasphase wird nicht berücksichtigt). Massen- und Energieerhaltung werden mit den Gesetzen von Raoult und Dalton gekoppelt (einfache Pseudokomponenten Gas-Flüssigkeits-Gleichgewichtsberechnungen <b>VLE</b>).</p> <p>Im Gegensatz zum <b>TVRGAS</b> wird die Masse im Behälter schrittweise reduziert, die entsprechenden Bedingungen im Behälter berechnet und mit <b>DISC</b> für die jeweiligen Bedingungen im Behälter die Dauer berechnet, bis diese Masse freigesetzt ist. Es können rechteckige, horizontale und vertikale Zylinder sowie kugelförmige Tanks modelliert werden. Die Gleichungen und</p> |

| Modul 1: Freisetzung |          |   |   |                   |
|----------------------|----------|---|---|-------------------|
| Stand der Technik    |          | Software-Tools  |   |                   |
| HART                 | Saphedra | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS) |
|                      |          | <p><b>Modell</b></p> <p>Keine Angaben zu den verwendeten Modellen – bei Bedarf mit TNO abklären</p> <p>Chemical name <input type="text"/></p> <p>Use which representative step <input type="text"/></p> <p>Type of vessel outflow <input type="text"/></p> <p>Fixed Mass flow rate of the source <input type="text"/> kg/s</p> <p>Pipeline length <input type="text"/> km</p> <p>Pipeline diameter <input type="text"/> mm</p> <p>Pipeline roughness <input type="text"/> mm</p> <p>Hole rounding <input type="text"/></p> <p>Discharge coefficient <input type="text"/></p> <p>Height difference between pipe entrance and exit <input type="text"/> m</p> <p>Height leak above tank bottom <input type="text"/> m</p> <p>Initial temperature in vessel <input type="text"/> °C</p> <p>Vessel volume <input type="text"/> m<sup>3</sup></p> <p>Vessel type <input type="text"/></p> <p>Length cylinder <input type="text"/> m</p> <p>Filling degree <input type="text"/> %</p> <p>Expansion type <input type="text"/></p> <p>n value <input type="text"/></p> <p>Pressure inside vessel determination <input type="text"/></p> <p>Initial (absolute) pressure in vessel <input type="text"/> bar</p> <p>Vessel emptying duration <input type="text"/> min</p> <p>Ambient pressure <input type="text"/> bar</p> <p><b>Eingabe Parameter Riskcurves</b></p> <p>Type of vessel outflow <input type="text"/> Release through hole in vessel</p> <p>Fixed Mass flow rate of the source <input type="text"/> kg/s</p> <p>Pipeline length <input type="text"/> km</p> <p>Pipeline diameter <input type="text"/> mm</p> <p>Pipeline roughness <input type="text"/> mm</p> <p>Hole diameter <input type="text"/> mm</p> <p>Hole rounding <input type="text"/></p> <p>Discharge coefficient <input type="text"/></p> <p>Height difference between pipe entrance and exit <input type="text"/> m</p> <p>Height leak above tank bottom <input type="text"/> m</p> <p>Initial temperature in vessel <input type="text"/> °C</p> <p>Vessel volume <input type="text"/> m<sup>3</sup></p> <p>Vessel type <input type="text"/></p> <p>Length cylinder <input type="text"/> m</p> <p>Filling degree <input type="text"/> %</p> <p>Expansion type <input type="text"/></p> <p>n value <input type="text"/></p> <p>Pressure inside vessel determination <input type="text"/></p> <p>Initial (absolute) pressure in vessel <input type="text"/> bar</p> <p>Type of calculation <input type="text"/></p> <p>Maximum release duration <input type="text"/> s</p> <p>Type of Spray calculation <input type="text"/></p> | <p>Algorithmen sind im Dokument DNV GL AS: Time-Varying Discharge Modelling, Theory, Aug. 2014 dokumentiert.</p>  <p><b>Eingabeparameter:</b><br/>         Wie TVRGAS</p> <p><b>Output</b><br/>         Wie TVRGAS, zusätzlich:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Inventory and containment state             <ul style="list-style-type: none"> <li>Liquid head (liquid height above centre of the hole/exit pipe) and total liquid height [m]</li> <li>Swell height [m]</li> <li>Average void volume fraction in liquid [-]</li> <li>Tank vapour-space pressure [Pa]</li> <li>Pressure at hole inlet [Pa]</li> <li>Volume of vapour in tank [m<sup>3</sup>]</li> <li>Tank wall and fluid temperatures [K]<sup>2008</sup></li> </ul> </li> </ul> <p><b>Validierung</b></p> <p>Die Dokumentation für Phast enthält ein Dokument zur Validierung der TVDI Modelle. Dabei handelt es sich um Vergleichsrechnungen mit anderen Modellen sowie mit Experimenten mit Wasser, Luft, Methan-dominierten Gemischen und einer Propan-Freisetzung durch eine ca. 15 m lange Leitung an einem Propan-Behälter. Bei den Methan-dominierten Gemischen ergeben sich grosse Schwächen bei der Berechnung der Temperatur im Behälter. Dies wird v.a. auf die Verwendung einer groben Pseudo-Komponenten-Mischung-Methodik statt einer Multi-Komponenten-Mischung zurückgeführt. D.h. es scheint sich um ein Problem zu handeln, das v.a. Modellierungen mit Stoffgemischen betrifft. Die Modellierung von Stoffgemischen stellt jedoch eine Spezialfunktion dar, die in vielen anderen Modellen nicht vorhanden ist. Für Propan-Freisetzungen ist diese Funktion wenig relevant.</p> <p>Die Modellierung des Propanbehälters mit der 15 m langen Leitung funktionierte nicht richtig, da eine so lange Leitung bei gleichzeitig sehr kleinem Leckdurchmesser ausserhalb des Gültigkeitsbereichs des Modells liegt. Hier ging es darum, die Grenzen des Modells aufzuzeigen. Für Freisetzungen von Propan aus Bahnkesselwagen sind diese Angaben deshalb wenig aussagekräftig.</p> |                   |

| Modul 1: Freisetzung                |          |   |  |   |
|-------------------------------------|----------|---|--|---|
| Stand der Technik                   |          | Software-Tools  |  |   |
| HART                                | Saphedra | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)   |
| <b>Sofortige Freisetzung "kalt"</b> |          |   |  |   |
| Gesamter Tankinhalt (50 Tonnen)     |          | <p>Keine Vorgabe zur Austrittsmenge, beliebige Menge möglich</p> <p><b>Liquefied Gas Instantaneous Release</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Instantane Freisetzung des gesamten Behälterinhaltes</p> <p><u>Modell</u><br/>                     Modell deckt den Vorgang bis zur Bildung einer Gaswolke, deren Ausdehnung bis zum Umgebungsdruck und die Bildung einer Lache ab. Es findet keine Unterscheidung zwischen „kalter“ und „warmer“ sofortiger Freisetzung statt.</p> <p><u>Parameter:</u></p> <p>Chemical name <input type="text"/></p> <p>Vessel volume <input type="text"/> m<sup>3</sup></p> <p>Filling degree <input type="text"/> %</p> <p>Initial temperature in vessel <input type="text"/> °C</p> <p>Pressure inside vessel determination <input type="text"/></p> <p>Initial (absolute) pressure in vessel <input type="text"/> bar</p> <p>Ambient pressure <input type="text"/> bar</p> <p>Behältergrösse und Füllstand sind frei wählbar.</p> | <p>Keine Vorgabe zur Austrittsmenge, beliebige Menge möglich</p> <p>Keine verschiedenen Modelle für kalte und warme Freisetzung</p> <p><u>Situation</u><br/>                     Instantane Freisetzung des gesamten Behälterinhaltes</p> <p><u>Modell, Parameter</u><br/>                     Berechnung des Drucks im Moment der Freisetzung (Pa) mit dem <b>DISC-Modell</b> in Abhängigkeit vom Druck im Behälter an der Flüssigkeitsoberfläche (Pa), der Temperatur (K) oder dem Massenanteil in der Flüssigphase (-) und der Höhe der Flüssigkeitssäule (m).</p> <p>Die auf den Austritt folgende Expansion/Phasenübergang wird mit <b>ATEX-Modell</b> berechnet (siehe Modul 2 im vorliegenden Dokument)</p> | <p>Keine Vorgabe zur Austrittsmenge, beliebige Menge möglich</p> <p>Berechnung für sofortige Freisetzung infolge Behälterbersten nicht validiert, nur über Workaround möglich: Umrechnung des Behälterinhalts in einen grösseren Behälter mit gleichem Druck und mit gesamtem Inhalt in der Gasphase auf Siedepunkttemperatur</p> |
| <b>Sofortige Freisetzung "warm"</b> |          |   |  |   |
| Gesamter Tankinhalt (50 Tonnen)     |          | <p>Es findet keine Unterscheidung zwischen „kalter“ und „warmer“ sofortiger Freisetzung statt.</p>  | <p>Keine verschiedenen Modelle für kalte und warme Freisetzung</p>   | <p>Keine verschiedenen Modelle für kalte und warme Freisetzung</p>  |

## 3.1.1 Fazit Modul 1 (Freisetzung)

### 3.1.1.1 Kontinuierliche Freisetzung

#### 3.1.1.1.1 Stand der Technik

Für **Freisetzungen von Flüssigkeiten** entspricht das Bernoulli-Modell dem üblichen Stand. Auch die International Association of Oil & Gas Producers IOGP empfiehlt in ihren Guidelines für Risikoanalysen die Verwendung des Bernoulli-Modells für Flüssigkeiten (ferner werden darin Beispielberechnungen mit Phast für Propan aufgeführt. (IOGP International Association of Oil & Gas Producers, OGP Risk Assessment Data Directory, Report No. 434-7, Consequence modelling, March 2010))

Das DISC-Modell ist zwar sehr leistungsfähig, für Freisetzungen von druckverflüssigten Gasen aus der Flüssigphase liegt aber das Bernoulli-Modell näher an den experimentellen Messungen.

Bei den Modellen für **Zweiphasen-Austritte und Austritte aus der Gasphase** gibt es mehrere Ansätze. Mit dem jetzigen Stand der vorliegenden Abklärungen ist jedoch keine Aussage zum Stand der Technik möglich. Bei Zweiphasenaustritten und Austritten aus der Gasphase werden im Vergleich zu Austritten aus der Flüssigphase geringere Mengen freigesetzt. Daher sind die Modelle für Zweiphasen-Austritte und Austritte aus der Gasphase für eine konservative Risikoberechnung weniger relevant.

#### 3.1.1.1.2 Effects / Riskcurves

Mit Effects können 6 unterschiedliche Szenarien für die kontinuierliche Freisetzung modelliert werden. Es steht somit auch eine entsprechende Anzahl von Modellen zur Verfügung. Darin auch enthalten sind das Bernoulli und das DIERS-Modell, welche in den Abklärungen zum Stand der Technik erwähnt sind.

Gemäss Manual werden in Riskcurves die gleichen Modelle wie in Effects verwendet (Yellow Book). Die Fallunterscheidung ist jedoch stark eingeschränkt und beschränkt sich auf die drei Fälle „fixed flow rate“, „Release through hole in vessel“ und „Release from vessel through (a hole in) pipe“. Gemäss Information der TNO (gem. Abklärungen BAV) können in Riskcurves sämtliche Szenarien von Effects gerechnet werden. Für uns als Software-Benutzer blieb aber unklar, wie dies konkret zu bewerkstelligen ist.

Weitere Modelle sind im Manual zu Riskcurves erwähnt, können aber in Riskcurves nicht ausgewählt werden.

Insgesamt entspricht Effects im Modul 1 (Freisetzung) in den wesentlichen Punkten einem üblichen Stand der Technik.

#### 3.1.1.1.3 Phast

Phast verfügt mit den DISC- und TVDI-Modellen über sehr leistungsfähige und flexible, aber auch komplexe Modelle für kontinuierliche Freisetzungen. Für Austritte in der Flüssigphase kann alternativ das Bernoulli Modell verwendet werden, welches bezüglich Validität besser als das DISC Modell abschneidet.

Die DISC- und TVDI-Modelle sind sehr ausführlich dokumentiert. Sehr lobenswert ist auch, dass Angaben zur Validität der verfügbaren Modelle mitgeliefert werden. Allerdings müssten daraus klarere Empfehlungen folgen (Verwendung von DISC oder Bernoulli?).

Insgesamt entspricht Phast im Modul 1 (Freisetzung) in den wesentlichen Punkten einem üblichen Stand der Technik.

#### *3.1.1.1.4 FLACS*

FLACS berechnet die Austrittsparameter für kontinuierliche Austritte aus der Flüssigphase auf Basis einer detaillierten Version des Bernoulli-Modells. Die Parametrierung ist mehrheitlich klar.

Es können keine Austritte aus der Gasphase im Behälter, aus dem aufschäumenden Bereich, kein Zweiphasenaustritt aus an einen Behälter angeschlossene Leitungen etc. berechnet werden.

Alternativ dazu sind ev. mit dem homogeneous equilibrium model von FLACS Berechnung eines Zweiphasenaustritts möglich. Dies geht aus dem Manual aber nicht klar hervor.

Insgesamt entspricht FLACS im Modul 1 (Freisetzung) in den wesentlichen Punkten einem üblichen Stand der Technik.

#### **3.1.1.2 Sofortige Freisetzung „kalt“ und „warm“**

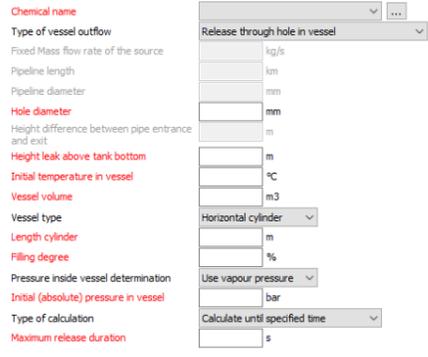
Die untersuchten Software-Tools unterscheiden bezüglich der Freisetzungsmengen und deren Berechnung bei der sofortigen Freisetzung nicht zwischen einem „kalten“ und einem „warmen“ Fall.

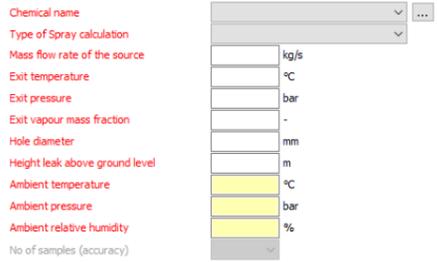
Die sofortige Freisetzung kann mit den untersuchten Software-Tools modelliert werden, wobei sich FLACS nur als beschränkt sinnvoll erwiesen hat, da die Berechnung über einen nicht validierten Workaround erfolgt.

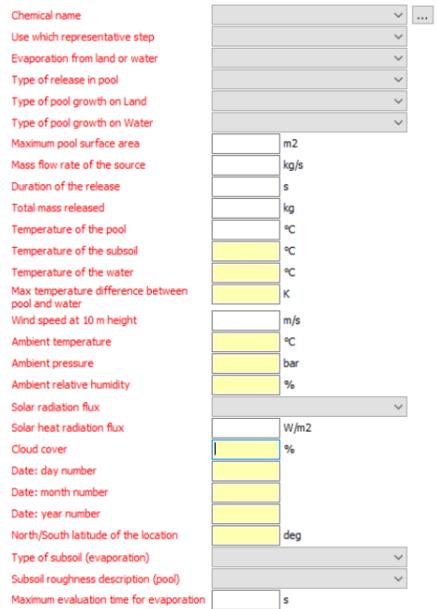
### 3.2 Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig

| Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig   |  |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
|---|--|---------------------------------|----------------|-------------------|----------------|------------------------|----------|---|--|--|----------------------------------|--|--------------|-----------------|------------------------|------------------------------------|------------------|---|---|---|
| Stand der Technik   |  | Software-Tools                  |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| HART  | Saphedra und weitere   | Effects / Riskcurves (TNO)      | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS) |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| <b>Verdampfung beim Austritt</b>  |  |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| <p>Berechnung Rainout bei sofortiger und kontinuierlicher Freisetzung <b>gemäss Purple Book</b> (im Purple Book S. 4.14 für sofortige Freisetzung mit sofortiger Zündung):</p> $X = C_{pl-gem} \cdot T_k / H_v \cdot \ln(T_1 / T_k)$ $T_k = \text{Siedepunkt [K]}$ $T_1 = \text{Temperatur Behälterinhalt [K]}$ $H_v = \text{Verdampfungsenthalpie [J/kg]}$ $C_{pl-gem} = \text{mittlere spezifische Wärme der Flüssigphase [J/kgK]}$ <table border="1"> <thead> <tr> <th>Adiabatische flashfraction X</th> <th>Fractie massa in wolk: (1 - fr)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X &lt; 0.1</td> <td>2.X</td> </tr> <tr> <td>0.1 &lt; X &lt; 0.36</td> <td>(0.8 X - 0.028) / 0.26</td> </tr> <tr> <td>X &gt; 0.36</td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table> $M_b = (1 - f_r) \cdot M_{rel}$ <p><math>M_b</math> = Masse die in die Gaswolke gelangt [kg bei sofortiger Freisetzung bzw. kg/s bei kontinuierlicher Freisetzung]</p> <p><math>f_r</math> = Anteil Rainout</p> <p><math>M_{rel}</math> = gesamte freigesetzte Masse [kg bei sofortiger Freisetzung bzw. kg/s bei kontinuierlicher Freisetzung]</p> | Adiabatische flashfraction X                                       | Fractie massa in wolk: (1 - fr) | X < 0.1        | 2.X               | 0.1 < X < 0.36 | (0.8 X - 0.028) / 0.26 | X > 0.36 | 1 | <p><b>Saphedra Gap Analysis</b></p> <p>Zur Berechnung des Flash-Anteils wird auf das Yellow Book third edition verwiesen (Berechnung im Yellow Book ≠ Berechnung im Purple Book)</p> <p>Erwähnung eines ziemlich vollständigen zweiphasen Jet Dispersionsmodells von Cleary et al. 2007 und Witlox et al. 2007. Es ist davon auszugehen, dass es sich dabei um das <b>ATEX</b>-Modell von Phast handelt.</p> | <p><b>Liquefied Gas Instantaneous Release</b></p> <p><u>Situation</u></p> <p>Instantane Freisetzung des gesamten Behälterinhaltes</p> <p><u>Modell</u></p> <p>Purple Book Tabelle 4.8 ("AMINAL-Belgium, Nieuwe richtlijn voor het berekenen van flash en spray doc.97/001) :</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>adiabatic flash fraction, <math>\chi</math></th> <th>Mass in vapour cloud (fraction of the total inventory of the tank)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><math>\chi &lt; 0.1</math></td> <td><math>2 \times \chi</math></td> </tr> <tr> <td><math>0.1 \leq \chi &lt; 0.36</math></td> <td><math>(0.8 \times \chi - 0.028) / 0.26</math></td> </tr> <tr> <td><math>\chi \geq 0.36</math></td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table> $\chi = C_{pl}(T_{opslag} - T_{kook}) / \lambda$ <p><math>C_{pl}</math> = Wärmekapazität der Flüssigphase im Temperaturintervall <math>[T_{opslag}, T_{kook}]</math></p> <p><math>T_{opslag}</math> = Lagertemperatur</p> <p><math>T_{kook}</math> = Siedetemperatur</p> <p><math>\lambda</math> = latente Verdampfungswärme bei Siedetemperatur</p> <p>Die Einheiten sind aus der erwähnten Publikation nicht ersichtlich.</p> | adiabatic flash fraction, $\chi$ | Mass in vapour cloud (fraction of the total inventory of the tank) | $\chi < 0.1$ | $2 \times \chi$ | $0.1 \leq \chi < 0.36$ | $(0.8 \times \chi - 0.028) / 0.26$ | $\chi \geq 0.36$ | 1 | <p><u>Situation</u></p> <p>Phast verwendet das <b>ATEX Modell</b> zur Berechnung der Depressurisation bei kontinuierlichen und sofortigen Freisetzungen. Ergebnis ist der Zustand des freigesetzten Stoffs nach Expansion auf Umgebungsdruck (Anteil Flüssigphase, Temperatur, Geschwindigkeit). Bei zeitlich variablen Freisetzungen wird das <b>ATEX-Modell</b> jedes Mal bei Änderungen im Freisetzungsverlauf aufgerufen und die <b>ATEX</b>-Berechnungen für den betreffenden Zustand neu durchgeführt.</p> <p><u>Modell</u></p> <p>Das <b>ATEX</b>-Modell berechnet den Endzustand nach der Expansion. Dieser wird beschrieben durch:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Fläche des Fluidstrahls</li> <li>- Geschwindigkeit</li> <li>- Temperatur oder Anteil Flüssigphase</li> <li>- Spezifisches Volumen</li> <li>- Spezifische Enthalpie</li> </ul> <p>Entlang der Expansionszone wird eindimensionale homogene Strömung im thermischen Gleichgewicht angenommen. Ebenfalls wird angenommen, dass während der Expansion keine Luft beigemischt wird. Dies ist eine übliche Annahme, die auch bei anderen Modellen gemacht wird.</p> <p><b>ATEX</b> enthält zwei Modellvarianten: Ein Modell, dass auf der Erhaltung der Energie basiert und ein isentropisches Modell, d.h. Erhaltung der Entropie. Empfehlungen, wann welche Variante verwendet werden soll, sind vorhanden. Die isentropische Modellvariante weist Schwächen auf, die dazu führen, dass am Ende der Expansion des Fluidstrahls eine sehr tiefe Temperatur resultiert. Bei der Modellvariante, die auf der Erhaltung der Energie basiert, kann die Geschwindigkeit des Fluidstroms am Ende der Expansion limitiert werden. Die Angaben dazu, in welchen Fällen dies nötig ist und welche Werte gewählt werden sollen, sind nicht ausreichend.</p> <p>Bei sofortigen Freisetzungen wird die isentropische Modellvariante von <b>ATEX</b> verwendet, mit Ausnahme, dass die Geschwindigkeit des Fluids am Ende der Expansion anhand der Expansionsenergie berechnet wird.</p> | <p><u>Situation</u></p> <p>Horizontaler Austritt aus der Flüssigphase (nur flüssiges Gas tritt aus), Phasenübergang und Rainout beim Austritt.</p> <p><u>Modell</u></p> <p>Der Verdampfungsvorgang beim kontinuierlichen Austritt aus einem Flüssiggas-Behälter wird nicht mit dem CFD Code modelliert, sondern mit dem <b>FLASH utility program</b> (Befehlszeilen-Tool, Teil des <b>FLACS</b> Pakets).</p> <p>Die Berechnung des Jets erfolgt bis zu der Distanz, ab welcher keine Flüssigkeit mehr im Jet vorhanden ist, im <b>FLASH utility program</b>. Ab dem vollständigen Übergang in die Gasphase und ab der aus dem Rainout entstehenden Lache erfolgt die Berechnung im CFD Code.</p> <p>Die Modellierung des sofortigen Verdampfens beim Austritt (Flash), Zweiphasenjet (Gas und Aerosol), Verdampfen des Aerosols und Einmischen der Luft sowie Rainout wird in einem vertraulichen Dokument (Salvesen 1995) beschrieben und müsste bei Gexcon AS beschafft werden.</p> <p>Wird das <b>FLASH utility program</b> für stark von der Horizontalen abweichende Austrittsrichtungen verwendet, ergeben sich Fehler bei der Berechnung der Rainout Mengen.</p> <p>Je höher der Rainoutanteil, umso unsicherer ist die Validität des Modells. Ab einem Rainoutanteil von 0.99 wird die axiale Distanz zum vollständigen Übergang des Jets in die Gasphase nicht mehr berechnet.</p> <p>Das Modell berücksichtigt keine Hindernisse im Jet im Bereich bis zum vollständigen Übergang des Jets in die Gasphase.</p> <p>Gemäss U.S. DOT PHMSA 2011 (Zulassung von <b>FLACS</b> zur Berechnung der exclusion zone für LNG) berechnet das <b>FLASH utility program</b> den Rainoutanteil unabhängig von der Höhe der Austrittsstelle über Boden. Dadurch kann der Rainoutanteil unterschätzt werden. Es werden deshalb Sensitivitätsanalysen für den Rainoutanteil empfohlen. Das Zulassungsdokument bezieht sich zwar auf LNG, es ist aber davon auszugehen, dass es sich dabei um ein grundsätzliches Problem bei der Rainoutberechnung handelt.</p> |
| Adiabatische flashfraction X  | Fractie massa in wolk: (1 - fr)                                    |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| X < 0.1   | 2.X  |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| 0.1 < X < 0.36  | (0.8 X - 0.028) / 0.26   |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| X > 0.36  | 1  |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| adiabatic flash fraction, $\chi$  | Mass in vapour cloud (fraction of the total inventory of the tank) |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| $\chi < 0.1$  | $2 \times \chi$  |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| $0.1 \leq \chi < 0.36$  | $(0.8 \times \chi - 0.028) / 0.26$                                 |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |
| $\chi \geq 0.36$  | 1  |                                 |                |                   |                |                        |          |   |  |  |                                  |  |              |                 |                        |                                    |                  |   |   |   |

| Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig |   |  |   |   |
|---|---|--|---|---|
| Stand der Technik                         |   | Software-Tools   |   |   |
| HART                                      | Saphedra und weitere  | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)   |
|   | <p><b>Saphedra Identification of existing tools</b></p> <p>Modelle zur Berechnung des Flash/Rainout-Anteils: <b>Aminal</b>, <b>Spray release model (Yellow Book)</b>, <b>Statistical Spray release model</b>, <b>ATEX</b> (Phast). Das Spray release model könnte spezifisch für LPG sein (Druckfehler, PLG statt LPG?)</p> <p>Zur Validierung des <b>ATEX</b> Modells gibt das Saphedra Full Spreadsheet den folgenden Artikel an: Witlox, H. et al, Flashing liquid jets and two-phase droplet dispersion. Comparison and validation of droplet size and rainout formulations, Journal of Haz. Mat 142 (2007), 797-809 (siehe dazu auch Spalte Phast)</p> <p>Das Saphedra full spreadsheet ist aber gemäss Angabe von TNO nicht vollständig. Ev. sind relevante Dokumente zur Validität der verschiedenen Modelle darin nicht aufgeführt.</p> | <p><b>Liquefied Gas Vapour Release (Simple vapour release)</b></p> <p><u>Situation</u></p> <p>Leck in der Gasphase oberhalb des Niveaus der "expanded boiling liquid". Es findet weder Lachenbildung noch Verdampfung statt, da ausschliesslich die Gasphase freigesetzt wird</p> <p>Modell: -<br/>Parameter: -</p> <p><b>Liquefied Gas Top Venting (DIERS (Top venting))</b></p> <p>Für die Austrittsrate wird angenommen, dass ausschliesslich eine Freisetzung der Gasphase stattfindet (siehe Yellow Book Seite 2.79).</p> | <p><u>Eingabeparameter und Output</u></p> <p>Siehe Anhang B</p> <p><u>Validierung</u></p> <p>Gemäss Angabe von DNV GL ist das <b>ATEX</b> Modell nicht validiert.</p> <p>Ebenfalls im <b>ATEX</b> Modell enthalten ist ein Modell zur Berechnung der Tröpfchengrösse am Ende des Expansionsvorgangs (Sauter Mean Diameter SMD) für Flüssig- und Zweiphasen-Austritte. Die weitere Verdampfung der Tröpfchen, Rainout und Verdampfung der Lache werden im Dispersionsmodell <b>UDM</b> modelliert.</p> | <p>Gemäss Review des britischen Health and Safety Laboratory (HSL) (im Auftrag des Health and Safety Executive (HSE)) gehören die spezialisierten Quellen-Modelle wie das <b>FLASH utility program</b> zu den Stärken von FLACS im Vergleich zu General-purpose CFD codes (z.B. <b>CFX</b>, <b>Fluent</b>)</p> <p><u>Eingabeparameter:</u></p> <p>Siehe Modul 1 des vorliegenden Dokuments</p> <p><u>Output</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Axiale Distanz ab Lecköffnung, in der sich das gesamte Fluid im Jet in der Gasphase befindet</li> <li>- Querschnittfläche des Jets in dieser Distanz</li> <li>- Geschwindigkeit und Massenfluss an dieser Stelle</li> <li>- Massenanteile Luft und ausgetretener Stoff an dieser Stelle</li> <li>- Massenanteil Rainout, der eine Lache bildet</li> </ul> <p>Sowie eine Menge weiterer Parameter, die für die nachfolgende Ausbreitungsrechnung nicht benötigt werden, z.B.:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Dichte des Jets</li> <li>- Durchschnittliche Tröpfchengrösse des Aerosols</li> <li>- Kritische Tröpfchengrösse für Rainout</li> </ul> <p>etc.</p> <p>Die Modellierung des Phasenübergangs bei sofortiger Freisetzung ist mit <b>FLACS</b> nicht möglich. Siehe Modul 1 im vorliegenden Dokument.</p> |

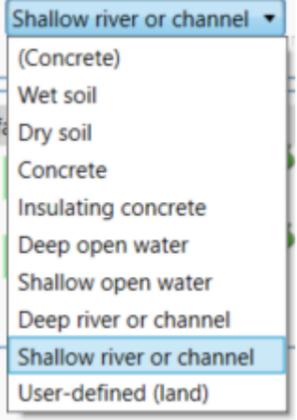
| Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig |                      |  |  |   |
|---|----------------------|--|--|---|
| Stand der Technik                         |                      | Software-Tools   |  |   |
| HART                                      | Saphedra und weitere | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)   |
|   |                      | <p><b>Liquefied Gas Bottom Discharge (TPDIS-Modell)</b></p> <p><u>Situation</u><br/>                     Das Leck befindet sich unterhalb des Niveaus der Flüssigphase; Freisetzung durch Leitung – Der Fall einer kurzen Leitung (&lt; 0.1m, resp. Leck im Tank) wird mit der Annahme einer 1-Phasen-Freisetzung der Flüssigphase und Gleichung (2.95 – Yellow Book) für die Freisetzungsrates vereinfacht.</p> <p><u>Modell</u><br/>                     Es fehlen Ausführungen, wie mit dem TPDIS-Modell („Two-Phase DIScharge of liquefied gases through a pipe“) der Phasenübergang abgebildet wird.</p>  | <p>DNV GL hat zu diesem Bereich umfangreiche Theorie- und Validierungsarbeiten durchgeführt (DNV GL AS: Droplet Size, Theory &amp; Validation, Aug. 2014). Dabei wurden die folgenden Modelle mit verschiedenen Freisetzungsexperimenten, darunter auch einige mit Propan und Butan (STEP, HSL, INERIS) verglichen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Original ATEX (Weber-number, CCPS book)</li> <li>- Yellow Book (Weber, Reynolds number correlation)</li> <li>- George Melhem (modified Weber)</li> <li>- JIP Phase II und Phase III</li> <li>- Modified CCPS</li> </ul> <p>Dabei wurde auch darauf hingewiesen, dass die experimentell ermittelten Werte teilweise mit Vorsicht verwendet werden müssen, da die Messung von Parametern wie der Tröpfchengröße mit Schwierigkeiten verbunden ist.</p> <p>Das <b>modified CCPS – Modell</b> hat am besten abgeschnitten, welches deshalb das default Modell von <b>ATEX</b> und <b>UDM</b> ist.</p> <p>Beim <b>modified CCPS-Modell</b> wird für Flüssigkeiten unter dem Siedepunkt die Tröpfchengröße aufgrund des aerodynamischen Aufbrechens des Flüssigkeitsstrahls und für Flüssigkeiten über dem Siedepunkt aufgrund des Aufbrechens infolge des Flashs berechnet. (Gleichungen in DNV GL AS: Droplet Size, Theory &amp; Validation, Aug. 2014). Diese Angaben beziehen sich auf Phast 6.4. In der aktuellen Version von Phast 7.21 ist das <b>modified CCPS-Modell</b> jedoch nicht das default Modell. Es muss manuell die Wahl zwischen aerodynamischem und Flash-Modell getroffen werden, oder es wird automatisch dasjenige gewählt, das die kleineren Tröpfchengrößen liefert, was dem Original <b>ATEX</b> entspricht. Hier wären klarere Angaben nötig.</p> <p>Für instantane Freisetzungen wird vom DNV GL Support die Verwendung des Modells auf Basis des Aufbrechens infolge des Flashs empfohlen. Dieses Modell wurde jedoch auf Basis von Experimenten mit kontinuierlichen Freisetzungen aus Lecks entwickelt. Möglicherweise ist das Flash-Modell nach Angabe des DNV GL Supports für instantane Freisetzungen nicht geeignet. Es gibt dazu nicht genügend experimentelle Daten.</p> <p>Das aerodynamische Modell ist nach Angabe des DNV GL Supports für instantane Freisetzungen nicht geeignet. Trotzdem kann es im Phast zur Modellierung von instantanen Freisetzungen verwendet werden. Hier wäre zumindest eine klare Warnung im Software-Tool zu begrüssen.</p> <p>Die Modellierung der Tröpfchengröße bei instantanen Freisetzungen ist offensichtlich äusserst unsicher.</p> <p>Eine verbesserte Methode für die Tröpfchenmodellierung ist bei DNV GL für die neue Version 8.0 von Phast in Arbeit.</p> | <p>Gexcon hat ein neues Modell für flashing-releases entwickelt und anhand der INERIS FLIE Freisetzungsexperimente mit Propan und Butan validiert. Mit diesem Modell kann auch der Aufprall des Jets auf ein Hindernis berücksichtigt werden (Ichard et al. 2009).</p> <p>Berechnung des Rainouts und der Parameter des Jets mit einem <b>vereinfachten Ansatz nach Chiang (2000)</b>, Annahme Austritt nur in Flüssigphase. Der Verdampfungsprozess wird in folgende Bereiche unterteilt: Flash, Expansion des Jets, Ablenkung des Jets, Aufprall des Jets. (Gleichungen siehe Ichard et al. 2009) Dieses Modell ist nicht im Standard-FLACS Paket enthalten.</p> <p>Weiterführende Arbeiten (Ichard 2012) führten aber zur Integration des <b>homogeneous equilibrium Model HEM</b> in die aktuelle FLACS Version. Mit dem HEM Code können CFD Berechnungen für Zweiphasen-Strömungen, wie sie beim Phasenübergang in einem Flüssiggas-Jet auftreten, durchgeführt werden. Der HEM Code kann mit dem Pool Model gekoppelt werden, so dass der Rainout des Jets dem Pool Model zugeführt wird.</p> |

| Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig |                      |   |  |                   |
|---|----------------------|---|--|-------------------|
| Stand der Technik                         |                      | Software-Tools  |  |                   |
| HART                                      | Saphedra und weitere | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS) |
|   |                      | <p><u>Liquefied Gas Spray Release (Effects / Riskcurves)</u></p> <p><u>Situation</u><br/>druckverflüssigte Gase mit Siedepunkt &lt; Umgebungstemperatur</p> <p><u>Modell</u><br/>(Modelle Effects und Riskcurves analog)<br/>Yellow Book 2.5.3.7; "AMINAL approach";<br/>Statistical Spray method<br/><i>AMINAL Approach:</i><br/>Spray-Anteil: <math>\delta = \min(4\chi, 1 - \chi)</math><br/>Rain-Out-Anteil: <math>\alpha = 1 - (\delta + \chi)</math><br/>Mit <math>\chi</math> für den adiabatischen Flash-Anteil<br/>gemäss Purple Book Tabelle 4.8 ("AMINAL-<br/>Belgium, Nieuwe richtlijn voor het<br/>bereknen van flash en spray doc.97/001)</p> <p><i>Yellow Book</i><br/>4 Schritte (Yellow Book Seite 2.107)</p> <p><i>Statistical Spray method</i><br/>Das Modell ist im Paper von Hulsbosh-Dam<br/>et al. (2012) beschrieben</p> <p><u>Parameter</u><br/>Die Eingabeparameter sind für alle der drei<br/>obengenannten Modelle dieselben. Die<br/>Mass flow rate ist für alle drei Modelle<br/>manuell einzugeben. Als Standardwert<br/>wählt Effects 120 kg/s – Riskcurves<br/>10 kg/s. Über welches Modell die Mass flow<br/>rate abzuschätzen ist, werden keine<br/>Angaben gemacht.</p>  | <p>Die weitere Modellierung der Flüssigkeitströpfchen und deren Verdampfung nach dem Expansionsvorgang ist Teil des <b>UDM</b>-Modells, welches auch die Ausbreitungsberechnungen durchführt (für Input und Output siehe deshalb Modul 3).</p> <p>Dabei stehen drei verschiedene thermodynamische Modelle zur Verfügung:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Equilibrium Modell (gleiche Temperatur in Flüssig- und Gasphase)</li> <li>- Non-equilibrium Modell (unterschiedliche Temperaturen in Flüssig- und Gasphase möglich)</li> <li>- Equilibrium Modell für Fluorwasserstoff</li> </ul> <p>Ebenfalls kann gewählt werden, ob Rainout stattfinden soll, oder ob erzwungen wird, dass der Rainout-Anteil in der Wolke verbleibt.<br/>Es wird empfohlen, das Non-equilibrium Modell mit Rainout zu verwenden.</p> <p>Für die anfängliche Expansionsphase bei sofortigen Freisetzungen kann zwischen zwei Modellen gewählt werden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Empirisches Phast Standardmodell</li> <li>- Purple Book</li> </ul> <p>Die Purple Book Methode ist ein stark vereinfachter Ansatz zur Bestimmung des Massenanteils in der Flüssigphase nach erfolgter Expansion (siehe dazu Spalte HART). Für Freisetzungen in der Gasphase wird deshalb immer das Standardmodell empfohlen. Für Zweiphasen-Freisetzungen bestehen keine experimentellen Grundlagen, welche eine Beurteilung der beiden Modelle erlaubt. Ev. ergibt sich beim Standardmodell manchmal ein zu tiefer Rainoutanteil. Hingegen ist die physikalische Grundlage beim Standardmodell wahrsch. besser als beim sehr stark vereinfachten Purple Book.</p> <p>suisseplan hat eine beispielhafte Vergleichsrechnung für die Gasausbreitung infolge einer instantanen Freisetzung bei Behälterbersten durchgeführt. Dabei ergaben sich grosse Unterschiede bei den Ergebnissen, je nachdem ob das Phast Standardmodell oder die Purple Book Methode verwendet wurde.</p> <p>In dieser Situation liefert das Standardmodell eher unplausibel erscheinende Ergebnisse. Es wird bei Behälterbersten im Standardmodell angenommen, dass die Tröpfchen aufwärts gerichtet sind und deshalb genügend Zeit haben, um zu verdampfen. So verdampft der gesamte Behälterinhalt innert kürzester Zeit und es ergibt sich kein Rainout und keine Lache.</p> <p>Für sofortige Freisetzungen infolge Behälterbersten wird deshalb vom DNV GL Support die Purple Book Methode empfohlen. Für die nächste Phast Version 8.0 existiert in der Beta Version bereits ein neues Modell für sofortige Freisetzungen, das diesen Mangel beheben soll.</p> |                   |

| Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig   |  |   |   |  |
|---|--|---|---|--|
| Stand der Technik   |  | Software-Tools  |   |  |
| HART  | Saphedra und weitere   | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <b>Modellierung der Lache</b>   |  |   |   |  |
| <p>Bei kontinuierlicher und spontaner Freisetzung keine Berücksichtigung des Ausdampfens aus der Lache. Der Anteil des Austritts, der ausregnet und die Lache bilden würde, wird vernachlässigt (trägt nicht zur Gaswolke bei). Gemäss Angabe des RIVM (Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu), der für HART zuständigen niederländischen Behörde vom 31.3.2017 wird angenommen, dass der Risikobeitrag des Ausdampfens aus der Lache vernachlässigt werden kann.</p> | <p><b>Saphedra Identification of existing tools</b></p> <p>Modelle zur Berechnung der Verdampfung aus der Lache: <b>GASP pool evaporation, Brighton model, Sutton-Pasquill model, Mackay-Matsugu model, Yellow book pool evaporation model, Clancey model, Deutsch model, TÜV Rheinland model, Brötz model, PVAP model</b></p> <p>Das Saphedra full spreadsheet führt einzig zum <b>GASP pool evaporation model</b> ein Dokument zur Validierung auf: Webber, D.M.A. model of spreading vaporising pools.</p> <p>Das Saphedra full spreadsheet ist aber offensichtlich unvollständig, worauf TNO ausdrücklich hinweist.</p> <p>Es fehlen z.B. die in der Spalte „Phast“ aufgeführten Dokumente zur Validierung.</p> <p>Ebenfalls fehlt beispielsweise der folgende Artikel zum Modell <b>PVAP-MC</b>, einer für Multikomponenten-Lachen weiterentwickelten Version des in Phast verwendeten Modells <b>PVAP</b>: Fernandez, M. I. Fernandez et al., An integral model for pool spreading, vaporisation and dissolution of hydrocarbon mixtures, 2012 IChemE. Darin werden unter anderem Vergleichsrechnungen mit Experimenten mit LNG Lachen auf Wasser beschrieben, welche eine mittlere Abweichung der berechneten verdampften Masse von den Messergebnissen von 5% oder 10%, je nach Berechnungsweise ergeben. Bei weiteren Experimenten mit n-Hexan, n-Pentan und weiteren leichtflüchtigen Stoffen ergaben sich Abweichungen von den Messwerten zwischen 13% und 42%. Die Studie wurde von DNV Software und dem University College London finanziell unterstützt.</p> <p>Ebenfalls fehlt beispielsweise der Bericht, den das britische Health and Safety Laboratory HSL im Auftrag der britischen Behörde Health and Safety Executive HSE 2014 zum Modell <b>GASP</b> verfasst hat: Modelling of liquid hydrogen spills, Research Report 985. GASP wird vom britischen HSE zur Modellierung von</p> | <p><b>Liquefied Gas Vapour Release</b></p> <p>Es findet ausschliesslich eine Freisetzung der Gasphase ohne Lachenbildung statt.</p> <p><b>Liquefied Gas Top Venting (DIERS (Top venting))</b></p> <p>Es wird angenommen, dass ausschliesslich eine Freisetzung der Gasphase ohne Lachenbildung stattfindet.</p> <p><b>Liquefied Gas Instantaneous Release, Liquefied Gas Bottom Discharge und Liquefied Gas Spray Release</b></p> <p>Für <b>Liquefied Gas Instantaneous Release, Liquefied Gas Bottom Discharge und Liquefied Gas Spray Release</b> gelangt das Modell von <b>Trijsenaar-Buhre et al. (2009) (TNO)</b> zur Anwendung.</p>  | <p><b>Situation</b></p> <p>Ausbreitung der Lache und Ausdampfungsrate für Lachen auf Land oder Wasser</p> <p><b>Modell</b></p> <p>Phast verwendet das Modell <b>PVAP</b> zur Lachenmodellierung als Teil des <b>UDM</b> Modells (für Parameter siehe deshalb Modul 3). <b>PVAP</b> modelliert Ausbreitung der Lache und Ausdampfungsrate für Lachen auf Land oder Wasser. <b>PVAP</b> kann als Standalone-Modell verwendet werden oder integriert in Dispersionsberechnungen gekoppelt an den Rainout. Zusätzlich steht eine Multikomponenten-Version von <b>PVAP, PVAP-MC</b> zur Verfügung.</p> <p>Für <b>PVAP</b> wurde für die Ausbreitung der Lache das <b>TNO Modell für Lachen</b> auf dem Land integriert. Für Lachen auf dem Wasser wird das <b>Modell von Dodge</b> verwendet.</p> <p><b>PVAP</b> unterscheidet Sieden und Verdampfen bei Lachen. Für siedende Lachen auf dem Land wurde in <b>PVAP</b> die Formel von <b>Shaw und Briscoe</b> verwendet, für verdampfende Lachen die Formel von <b>McKay und Matsugu</b>. Für Verdampfen auf dem Land können alternativ das Modell Phast 6.7 und das Modell von <b>Opschoor</b> gewählt werden. Bei der Validierung ergab jedoch das Modell von <b>McKay und Matsugu</b> die besten Ergebnisse, weshalb dieses als Standard gesetzt ist.</p> <p>Die Gleichungen sind in der <b>PVAP</b>-Dokumentation ausführlich zusammengestellt.</p> <p><b>Eingabeparameter und Output</b></p> <p>siehe Anhang D</p> <p><b>Verifikation, Validation</b></p> <p>In der Phast-Dokumentation ist ein Review und Vergleich mit dem Modell <b>GASP</b> des britischen HSE des Autors von <b>GASP</b>, David Webber, enthalten. Webber kritisiert einige Punkte an <b>PVAP</b> (und auch an <b>GASP</b>). Bei <b>PVAP</b> bemängelt er insbesondere das Ausbreitungsmodell auf dem Land, da ein einzelner Parameter (minimale Tiefe) das Ausbreitungsverhalten völlig bestimmt. Ebenfalls bemängelt wird das Umschalten zwischen Verdampfen und Sieden. Er schlägt den Ersatz von einigen Elementen in <b>PVAP</b> durch das Gegenstück in <b>GASP</b> vor, welches sehr gut validiert ist.</p> <p>Ebenfalls wird mit Phast ein Dokument zur Validation von <b>PVAP</b> mit experimentellen Messungen mitgeliefert. Unter den Experimenten sind mehrere Freisetzungen von LNG an Land und auf dem Wasser. Für LPG jedoch nur eine Freisetzung auf dem Wasser.</p> <p>Es wurde das Ausbreiten, Sieden, Verdampfen sowie getrennt als auch gekoppelt validiert.</p> <p>Für die Modellierung der Ausbreitung der Lache an Land betrug die maximale Abweichung +50%. Sieden an Land ergab eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Modellierung des gekoppelten Ausbreitens und Verdampfens ergab Abweichungen von den experimentellen Daten von bis zu 30%. Weitere Angaben zum Vergleich mit Freisetzungen auf dem Wasser sind ebenfalls vorhanden, werden für das vorliegende Dokument jedoch als weniger relevant betrachtet.</p> | <p>Äusserst detailliert parametrierbare Modellierung der Lache (siehe unten).</p> <p>Der Zufluss zur Lache bei dynamischen Lachen kann über ein Pool Leak File zeitlich variabel definiert oder im HEM-code direkt mit dem Rainout gekoppelt werden.</p> <p>Auch Lachenberechnungen für Stoffgemische sind mit Einschränkungen möglich.</p> <p>Zur Validierung liegen keine Angaben vor.</p> |

| Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig |   |  |   |  |
|---|---|--|---|--|
| Stand der Technik                         |   | Software-Tools   |   |  |
| HART                                      | Saphedra und weitere  | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
|   | Lachen eingesetzt. Im Bericht werden Vergleichsrechnungen mit Freisetzungsexperimenten von Flüssig-Wasserstoff und Flüssig-Sauerstoff beschrieben. Gesamthaft wurde festgestellt, dass die Voraussagen von GASP besser als erwartet sind, dass aber beispielsweise bei windstillen Verhältnissen Inkonsistenzen auftreten. Das HSL kommt zum Schluss, dass für Flüssig-Wasserstoff weitere Validierung nötig ist, bevor das Modell als verlässlich für Flüssig-Wasserstoff-Freisetzungen empfohlen werden kann.   |  |   |  |
| <i>Dimension der Lache</i>                |   |  |   |  |
| --  | Gute Übereinstimmung des mit dem Modell GASP berechneten Lachenradius mit Messwerten bei einer Flüssig-Wasserstoff-Freisetzung gemäss Bericht, den das britische Health and Safety Laboratory HSL im Auftrag der britischen Behörde Health and Safety Executive HSE 2014 zum Modell GASP verfasst hat: Modelling of liquid hydrogen spills, Research Report 985.  | Es wird unterschieden, ob sich die Lache in einer Wanne oder auf einer unbegrenzten Fläche bildet. Bei Freisetzung auf einer unbegrenzten Fläche wird anhand der Dichte der freigesetzten Flüssigphase und der Oberflächenbeschaffenheit die minimale Höhe der Lache abgeschätzt (wie genau ist nicht ersichtlich), bei welcher die Ausbreitung der Lache stoppt.  | Runde Lache, gespiesen durch Flüssigkeit aus einer Punktquelle, entweder Rainout oder direkt aus der Quelle gespiesen.<br>Berechnung Lachenradius auf dem Land gemäss Opschoor im Yellow Book 2nd edition 1997<br>Für Lachen auf dem Wasser Berechnung des Radius gemäss Dodge et al (1983).  | Modellierung statischer (kreis- oder ringförmig) und sich dynamisch ausbreitender Lachen möglich. Für die dynamischen Lachen werden die „shallow-water“ Gleichungen in zwei Dimensionen auf der Oberfläche gelöst. Die Geometrie/Topographie wird dabei vereinfachend berücksichtigt (Gleichungen siehe Manual). |
| <i>Verdampfung aus der Lache</i>          |   |  |   |  |
| --  | Beim Modell PVAP-MC ergaben sich bei Vergleichsrechnungen mit Experimenten mit LNG Lachen auf Wasser eine mittlere Abweichung der berechneten verdampften Masse von den Messergebnissen von 5% oder 10%, je nach Berechnungsweise. Bei weiteren Experimenten mit n-Hexan, n-Pentan und weiteren leichtflüchtigen Stoffen ergaben sich Abweichungen von den Messwerten zwischen 13% und 42% bei der Verdampfungsrate. (Fernandez, M. I. Fernandez et al., An integral model for pool spreading, vaporisation and dissolution of hydrocarbon mixtures, 2012 IChemE).<br>Inkonsistenzen der berechneten Verdampfungsrate beim Modell GASP bei windstillen Verhältnissen bei Flüssig-Wasserstoff und Flüssig-Sauerstoff. Allgemein „some differences“ bei Vergleichsrechnungen mit Flüssig-Wasserstoff- und Flüssig-Sauerstoff-Experimenten, dabei können aber auch | Die Verdampfung einer siedenden Flüssigkeit berechnet sich im Modell wie folgt:<br>$q'_v(t) = \frac{\sum H(t)}{\Delta H_v} \cdot A_p$<br>Wobei<br>$q'_v(t)$ = Verdampfungsrate in [kg/s]<br>$\sum H(t)$ = Summe der Wärmeeinträge aus der Umgebung [W/m <sup>2</sup> ]<br>$\Delta H_v$ = Die Verdampfungswärme aus der Lache bei der jeweiligen Temperatur der Lache [J/kg]<br>$A_p$ = Fläche der Lache in [m <sup>2</sup> ] | Bei Lachentemperatur auf dem Siedepunkt:<br>$E_{vap}(t) = \frac{\max\{Q_{boil}, 0\}}{\Delta H_v(T_{pool})}$<br>$E_{vap}$ = Verdampfungsrate<br>$\Delta H_v$ = Verdampfungswärme<br>$Q_{boil} = Q_{cond} + Q_{conv} + Q_{rad} + Q_{sol} + Q_{spill}$<br>$Q_{cond}$ is the heat flow rate from conduction (W)<br>$Q_{conv}$ is the heat flow rate from convection (W)<br>$Q_{rad}$ is the heat flow rate from solar radiation (W)<br>$Q_{sol}$ is the heat flow rate from dissolution (W)<br>$Q_{spill}$ is the heat flow rate from spilled liquid (W)<br>$Q_{evap}$ is the heat flow rate from evaporation (W)<br><br>Bei Lachentemperatur unter dem Siedepunkt:<br>$E_{vap}(t) = \frac{Q_{evap}}{\Delta H_v(T_{pool})}$ | Berücksichtigung konduktiver und konvektiver Wärmetransfer<br>Für Pools auf glatten Oberflächen (Metall, Wasser) werden die Gleichungen für Blasensieden bzw. Filmsieden anstelle des konduktiven Wärmetransfers verwendet. (Gleichungen siehe Manual)<br>Siehe auch „Umgebungsparameter“ unten.                 |

| <b>Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig</b> |   |   |  |  |
|--|---|---|--|--|
| <b>Stand der Technik</b>                         |   | <b>Software-Tools</b>   |  |  |
| <b>HART</b>                                      | <b>Saphedra und weitere</b>   | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b>   | <b>Phast (DNV GL)</b>  | <b>FLACS (Gexcon AS)</b>   |
|  | Unklarheiten bei den Experimenten eine Rolle gespielt haben. (Bericht, des britische Health and Safety Laboratory HSL im Auftrag der britischen Behörde Health and Safety Executive HSE 2014: Modelling of liquid hydrogen spills, Research Report 985) |   |  |  |
| <i>Umgebungsparameter (Temperatur etc.),</i>     |   |   |  |  |
| --   |   | <p>Es wird der Wärmeeintrag aus der Umgebung berücksichtigt. Dabei kann die Lufttemperatur, die Temperatur des Bodens und der Wärmeeintrag aus der Sonne als Eingabeparameter eingetragen werden.</p> <p>Ferner können die rel. Luftfeuchtigkeit, Umgebungsdruck, die Windgeschwindigkeit und die Oberflächenbeschaffenheit in den Berechnungen berücksichtigt werden.</p> <p>In Riskcurves werden im Gegensatz zu Effects die Umgebungs- und Meteoparameter global für das Projekt eingegeben und gelten für sämtliche Berechnungen welche für diesen Standort durchgeführt werden. In Effects sind diese für jede Berechnung separat zu definieren.</p> | <p>Berücksichtigung des Wärmeeintrags aus der Umgebung (Boden, Luft, Strahlung) und Gasdiffusion.</p> <p>Für berücksichtigte Parameter siehe Anhang D 1, Ambient Data und Substrate Data</p>   | <p>Evaporationsrate berechnet unter Berücksichtigung von:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Wärmetransfer vom Boden</li> <li>- Luftströmung über der Lache</li> <li>- Windgeschwindigkeit und -richtung</li> <li>- Stabilitätsklasse (Pasquill)</li> <li>- Sonneneinstrahlung oder Strahlung von Flammen</li> <li>- Oberflächenrauigkeit</li> <li>- Bodentemperatur</li> <li>- Lufttemperatur</li> <li>- Luftfeuchtigkeit, Nebel</li> <li>- Für den Boden können verschiedene Typen mit unterschiedlichen thermischen Eigenschaften gewählt werden (Concrete, Soil, Plate, Insulate, Water, Benutzerdefiniert). Es ist auch möglich, ein „Patchwork“ aus verschiedenen Bodenoberflächen zu definieren</li> </ul> <p>Ausbreitungsberechnung der Flüssigkeit unter Berücksichtigung von:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Oberflächenrauigkeit</li> <li>- Fliessgeschwindigkeit Wasser bei Freisetzungen auf dem Wasser (in x- und y-Vektoren)</li> </ul> |
| <i>Versickerung, Rückhalt</i>                    |   |   |  |  |
| --   |   | <p>Das Modell nimmt die Lache auf einer ebenen, versiegelten Fläche an.</p> <p>Es kann zwischen der Freisetzung auf einer freien Fläche oder in einer Wanne ausgewählt werden.</p>  | <p>Es kann die Höhe einer Bassin-Mauer definiert werden, welche die weitere Ausbreitung der Lache stoppt. Ebenfalls kann gewählt werden, ob die Lache, sobald das ausgetretene Flüssigkeitsvolumen die Kapazität des Beckens übersteigt, sich ausserhalb des Beckens weiter ausbreiten soll. Zudem wird bei der Modellierung des Rainouts die Höhe der Tröpfchen über Boden berechnet und berücksichtigt, ob der Rainout innerhalb des Beckens oder ausserhalb des Beckens zu Boden fällt.</p> | <p>Bei dynamischen Pools wird auch die Geometrie vereinfachend berücksichtigt (Ausbreitungshindernisse etc.)</p>   |

| Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig |                      |                            |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
|---|----------------------|----------------------------|---|-------------------|---------|-----------------------|---|----------|------|---|----------|---------------------|---|----------|-------|---|---------------------|-------|-----|-------|-----------------------|--|
| Stand der Technik                         |                      | Software-Tools             |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
| HART                                      | Saphedra und weitere | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS) |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
|   |                      |                            | <p>Die folgenden Oberflächentypen können gewählt werden:</p>  <p>Für diese werden die folgenden minimalen Lachentiefen verwendet:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>Surface</th> <th>Minimum thickness (m)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>Wet soil</td> <td>0.01</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Dry soil</td> <td>0.02<sup>vii</sup></td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Concrete</td> <td>0.005</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>Insulating concrete</td> <td>0.005</td> </tr> <tr> <td>5-8</td> <td>Water</td> <td>0.001<sup>viii</sup></td> </tr> </tbody> </table> |                   | Surface | Minimum thickness (m) | 1 | Wet soil | 0.01 | 2 | Dry soil | 0.02 <sup>vii</sup> | 3 | Concrete | 0.005 | 4 | Insulating concrete | 0.005 | 5-8 | Water | 0.001 <sup>viii</sup> |  |
|   | Surface              | Minimum thickness (m)      |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
| 1   | Wet soil             | 0.01                       |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
| 2   | Dry soil             | 0.02 <sup>vii</sup>        |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
| 3   | Concrete             | 0.005                      |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
| 4   | Insulating concrete  | 0.005                      |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |
| 5-8                                       | Water                | 0.001 <sup>viii</sup>      |   |                   |         |                       |   |          |      |   |          |                     |   |          |       |   |                     |       |     |       |                       |  |

## 3.2.1 Fazit Modul 2 (Phasenübergang flüssig/gasförmig)

### 3.2.1.1 Verdampfung beim Austritt

#### 3.2.1.1.1 *Stand der Technik*

Anhand der Abklärungen ist keine Aussage möglich, welches Modell am ehesten dem Stand der Technik entspricht.

Das Spray release model wäre allenfalls noch detaillierter zu prüfen, da dieses spezifisch für LPG sein könnte. Beim ATEX SMD-Modell gibt es wenigstens zur Tröpfchengrösse Angaben zur Validität. Bezüglich Validität schneidet im Bereich der Tröpfchengrösse das modified CCPS-Modell am besten ab (auch im Vergleich mit dem Yellow Book), die Umsetzung in Phast scheint dem aber zu widersprechen.

Zur Berechnung des Flash-Anteils wird in der Saphedra-Tabelle auf das Yellow Book third edition verwiesen. Dieser Ansatz entspricht jedoch nicht jenem im Purple Book.

Bei den instantanen Freisetzungen wird in der Phast Dokumentation darauf hingewiesen, dass experimentelle Grundlagen fehlen, welche eine Beurteilung der Modelle erlauben. Die methodische Situation bei den instantanen Freisetzungen scheint äusserst unsicher zu sein. Dies führt auch dazu, dass in Phast zwei verschiedene Modelle (empirisches Phast-Standardmodell und Purple Book) wählbar sind, die sehr unterschiedliche Ergebnisse liefern können.

#### 3.2.1.1.2 *Effects / Riskcurves*

Ausgehend von den sechs verschiedenen Szenarien für die Freisetzung (siehe Modul 1) wird anhand der entsprechenden Modelle der Phasenübergang modelliert. Die Wahl der Freisetzungsart definiert automatisch auch das Modell für die Modellierung des Phasenübergangs.

Bei Freisetzung als Liquefied Gas Spray Release (Effects / Riskcurves) stehen für die Ausbreitung wiederum drei Modelle (Yellow Book, AMINAL, Statistical Spray Method) zur Verfügung.

#### 3.2.1.1.3 *Phast*

Die Berechnung des Phasenübergangs bis zum Ende des Expansionsvorgangs erfolgt im ATEX Modell (mit Submodell zur Berechnung der Tröpfchengrösse).

Vergleichsweise vorbildlich sind die Angaben zur Validität, bzw. die transparenten Angaben dazu, welche Teile des Modells nicht validiert sind. So ist das ATEX Modell nicht validiert. Für die Submodelle für die Tröpfchengrössen bei kontinuierlichen Freisetzungen hingegen wurden umfangreiche Validierungsstudien durchgeführt. Die Umsetzung in Phast bleibt jedoch widersprüchlich. Hier wären klarere Guidelines wünschenswert.

Bei sofortigen Freisetzungen bestehen keine experimentellen Grundlagen, die eine Beurteilung möglicher Modelle erlauben. Die Anwendbarkeit der Submodelle für die Tröpfchengrössen für instantane Freisetzungen ist nicht gesichert. Die Vorgaben für die Wahl der Submodelle in der Dokumentation sind ungenügend.

Phast ermöglicht weiter die Wahl zwischen zwei Tröpfchen-Modellen, welche zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen führen können: Das Phast Standardmodell und der Purple-Book

Ansatz. Für sofortige Freisetzungen infolge Behälterbersten wird die Verwendung des Phast-Standardmodells nicht empfohlen, da der Rainout-Anteil unplausibel tief erscheint. Stattdessen soll der Purple Book Ansatz verwendet werden. Trotzdem wird für sofortige Freisetzungen infolge Behälterbersten das Phast Standardmodell als Default gesetzt, was einen negativen Eindruck hinterlässt.

Die detaillierteren Informationen, die bei DNV GL eingeholt wurden, zeigen, dass die methodische Situation bei den instantanen Freisetzungen äusserst unsicher ist. Es ist aber davon auszugehen, dass es sich dabei um ein grundsätzliches, nicht Phast-spezifisches Problem bei der Modellierung instantaner Freisetzungen infolge Behälterbersten handelt. Bei Phast sind die Mängel infolge der besser verfügbaren Informationen wohl einfach offensichtlich geworden.

#### *3.2.1.1.4 FLACS*

Der Verdampfungsprozess wird im FLASH utility program modelliert. Diese Modelle sind jedoch nicht offengelegt. Eine Beurteilung ist somit nicht möglich.

Es kann nur ein horizontaler Austritt modelliert werden. Bei Abweichungen von der horizontalen Austrittsrichtung ergeben sich Fehler bei der Berechnung der Rainout Mengen. (Bei den anderen Software-Tools fehlen Angaben, ob solche Fehler auftreten.) Ab einem Rainoutanteil von 0.99 können keine Berechnungen mehr durchgeführt werden (unwesentliche Einschränkung).

Im Jet bis zum vollständigen Übergang des Jets in die Gasphase können - im Gegensatz zu den anschliessenden CFD-Berechnungen - Hindernisse nicht berücksichtigt werden.

Die Möglichkeiten des HEM Modells (für CFD Berechnungen für Zweiphasen-Strömungen, wie sie beim Phasenübergang in einem Flüssiggas-Jet auftreten) sind nicht klar dokumentiert. Mit dem HEM-code ist die Berücksichtigung von Hindernissen vor dem Übergang in die Gasphase wahrscheinlich möglich, Dokumentation sehr knapp.

### **3.2.1.2 Modellierung der Lache**

#### *3.2.1.2.1 Stand der Technik*

Es stellt sich die grundsätzliche Frage, ob die Lache überhaupt modelliert werden soll.

Bei HART wird sie weggelassen. Gemäss Angabe des RBM Helpdesks vom 31.3.2017 wird angenommen, dass der Risikobeitrag des Ausdampfens aus der Lache vernachlässigt werden kann. Auf welcher Basis diese Annahme gemacht wird, ist jedoch unbekannt.

Die Vergleichsrechnungen mit Phast im Kapitel 4 des vorliegenden Berichts zeigen jedoch, dass die Lachenbildung einen sehr grossen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse haben kann.

Dementsprechend scheint beim Weglassen der Lache Vorsicht geboten zu sein.

Von den verschiedenen Modellen zur Modellierung der Lache kann keines eindeutig als Stand der Technik bezeichnet werden.

Beim Modell PVAP wird an Weiterentwicklungen gearbeitet und Untersuchungen zur Validität angestellt.

Beim GASP Modell wird ebenfalls die Validität in neueren Studien für das britische HSE untersucht. Bei beiden Modellen gibt es aber auch teilweise erhebliche Kritikpunkte.

Für beide Modelle spricht aber, dass sie verhältnismässig gut untersucht sind.

Technisch sehr interessant ist das FLACS-Modell. Leider liegen keine Angaben zur Validität vor.

Zu den anderen Modellen waren entsprechende Dokumente nicht verfügbar oder es müsste weiter danach recherchiert werden.

#### *3.2.1.2.2 Effects / Riskcurves*

Das verwendete Modell für die Pool Evaporation (Trijssenaar-Buhre et al. (2009) – TNO) ist sehr gut dokumentiert. Dies beinhaltet sowohl dessen Möglichkeiten, wie auch dessen Grenzen. So nimmt das Modell z.B. die Lache auf einer ebenen, versiegelten Fläche an.

#### *3.2.1.2.3 Phast*

Die Modelle sind umfangreich dokumentiert und Unterlagen zur Validierung werden bereitgestellt. Diese beinhalten auch die Reviews der Peer Reviewer.

Jedoch verteilt sich die Dokumentation über mehrere Dokumente. Dies erschwert den Überblick.

#### *3.2.1.2.4 FLACS*

FLACS verwendet eine vielseitige und technisch komplexe Modellierung von statischen und dynamischen Lachen unter Berücksichtigung sehr vieler Parameter. Eine ausführliche Dokumentation der Gleichungen findet sich in der Technical Reference des Manuals.

Hingegen werden in der Dokumentation keine Angaben zur Validität des Modells gemacht.

### 3.3 Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke   |   |  |  |   |  |
|--|---|--|--|---|--|
| Stand der Technik  |   |  | Software-Tools   |   |  |
| HART   | Saphedra  | Diverse  | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <b>Modellierung</b>  |   |  |  |   |  |
| <p>Berechnung <u>Distanz zur unteren Zündgrenze</u>:</p> <p>Berechnung über vier Phasen der Dispersion (Dokumentation, Beschreibung der Parameter im HART lückenhaft):</p> | <p><b>Saphedra Gap Analysis</b></p> <p>Benchmark mit verschiedenen Schweregas-Experimenten (LNG, Freon, HF, NH3 etc.)</p> | <p><b>U.S. Department of Transportation (DOT) Pipeline and Hazardous Materials Safety Administration (PHMSA):</b></p> <p>Für die Berechnung des Gefährdungsbereichs durch Hitzestrahlung oder Gaswolke (exclusion zone) bei LNG Anlagen werden von der U.S. DOT PHMSA <b>DEGADIS</b> (Integralmodell) und <b>FEM3A</b> (CFD) als Standardmodelle vorgegeben.</p> | <p>Die Anleitung zu Effects (5.2.6 Atmospheric dispersion) ist zur Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke sehr knapp gehalten. Konkrete Hinweise zu den für die Berechnungen eingesetzten Modellen finden sich darin keine.</p> <p>Jedoch wird in der Saphedra-Tabelle erwähnt, dass in Effects (V 10) das <b>TNO-DENSEGAS</b> Modell verwendet wird. Das <b>TNO-DENSEGAS</b> Modell stellt eine Weiterentwicklung des <b>SLAB</b>-Modells dar. Es wurde festgestellt, dass das <b>SLAB</b>-Modell einige Schwachstellen aufweist und in folgenden Situationen keine oder nur unplausible Ergebnisse liefert:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Bei semikontinuierlichen Freisetzungen und hohen Ausflussraten von &gt;1000 kg/s</li> <li>- Bei semikontinuierlichen Freisetzungen mit „time after release“ &gt; „duration of release“</li> <li>- Der Letalitätsplot ist ungenau bei einer Downwind distance von mehr als 3000 m</li> <li>- unter Umständen unzuverlässige Ergebnisse bei „unstable weather classes“</li> <li>- bei Pools mit von mehr als 50'000 m<sup>2</sup> und Freisetzungsraten von mehr als 30'000 kg/s</li> </ul> <p>Ob diese Einschränkungen des Modells auch mit dem <b>TNO-DENSEGAS</b> weiterhin Bestand haben, wäre bei Bedarf mit <b>TNO</b> abzuklären</p> <p>Da die untersuchten Versionen von Effects (10.0.6) und Riskcurves (10.0.6) das gleiche Release-Datum besitzen (November 2016) ist davon auszugehen, dass auch in Riskcurves das <b>TNO-DENSEGAS</b> Modell angewendet wird.</p> | <p>Die Ausbreitungs- und Verdünnungsberechnung erfolgt im <b>UDM</b> Modell. <b>UDM</b> ist ein Integralmodell und besteht aus den folgenden Modulen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Jet dispersion</li> <li>- Tröpfchen-Verdampfung und Rainout</li> <li>- Lachenausbreitung und -verdampfung</li> <li>- Schweregasdispersion</li> <li>- Passive Dispersion</li> </ul> <p>Die UDM Module „Tröpfchen-Verdampfung und Rainout“ sowie „Lachenausbreitung und -verdampfung“ sind bereits in den Modulen 1 und 2 des vorliegenden Dokuments beschrieben.</p> <p>Das UDM kann folgende Freisetzungstypen modellieren:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Kontinuierlich</li> <li>- sofortige Freisetzungen</li> <li>- konstant mit beschränkter Dauer</li> <li>- zeitlich variabel</li> </ul> <p>Für zeitlich variable Freisetzungen wird darauf hingewiesen, dass die Ergebnisse weniger genau sein können.</p> <p>Für die kontinuierliche Freisetzung werden Massenerhaltungsgleichungen, Erhaltung des Impulses, Verhältnis zwischen Geschwindigkeit und Position der Wolke, eine Wärme-Transfer-Beziehung, eine Wasserdampf-Transfer-Beziehung und eine Gleichung zur Ausbreitung quer zum Wind gelöst. Die Temperatur des Gases in der Wolke wird bestimmt unter Voraussetzung der Erhaltung der Enthalpie in der Gaswolke.</p> <p>Bei sofortigen Freisetzungen verhält es sich gleich.</p> | <p>Berechnung mit dem FLACS CFD Code: 3D CFD Code, der die Favre-gemittelten Transportgleichungen für Masse, Impuls, Enthalpie, turbulente kinetische Energie, Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie, Massenanteil des freigesetzten Stoffs und Mischungsverhältnis auf einem strukturierten kartesischen Raster mit einer Finite-Volumen-Methode löst. Die <b>RANS-Gleichungen</b> (RANS = Reynolds-averaged Navier-Stokes) werden unter Verwendung der Zustandsgleichung für ideale Gase und des <b>Standard k-e Modells</b> für die Turbulenz geschlossen. Die Genauigkeit liegt räumlich auf 2. Ordnung und zeitlich auf 1./2. Ordnung. FLACS verwendet den <b>SIMPLE-Algorithmus für die Druckkorrektur</b>.</p> <p>(Gleichungen siehe Manual)</p> |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke  |  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
|---|--|--|--|--|--|----------|-------|-------------------------|---------|-------------------------------|-----|-------------------------|------|-------------|-------|------------------|-----------|---------------|-----|------------------|------|------------------|------|---------------|-----|----------------|---|----------------------------|-------|----------|-------|------|-----|------|------|------------|-------|----------------|-------------|--------------------|---|------------------|---|--------------------|-----|
| Stand der Technik   |  |  | Software-Tools                           |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| HART  | Saphedra   | Diverse  | Effects / Riskcurves (TNO)               | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| <p><b>1. Phase:</b> turbulentes Einmischen von Luft in den freigesetzten Stoff</p> <p>Berechnung der eingemischten Luft für kontinuierliche Freisetzungen (Quelle der Methode im HART nicht angegeben)</p> $Q_{Luft} = k_1 \cdot (\rho_a \cdot I_0)^{0.5} (v - u_w/v)$ <p><math>Q_{Luft}</math> = Menge eingemischter Luft</p> <p><math>I_0</math> = Impuls Flux im Jet (Bestimmung nicht definiert)</p> <p><math>k_1 = 0.282</math></p> <p><math>v</math> = Geschwindigkeit Jet</p> <p><math>u_w</math> = Windgeschwindigkeit</p> <p><math>\rho_a</math> = Dichte Atmosphäre</p> <p>Berechnung der eingemischten Luft für sofortige Freisetzungen gemäss Spray-Releasemodell aus dem <b>Yellow Book 2nd Edition, Ausgabe 1988</b> (Zylinder mit <math>H=2/3R</math>)</p> $Q = 9/8 \cdot \rho_a \cdot V^{1/9} \cdot V_{fac}^{8/9}$ $V_{fac} = 2 \pi/3 \cdot R_{fac}^3$ $R_{fac} = k_3 \cdot E_{exp}^{3/16} \cdot V_{go}^{5/24}$ <p><math>Q</math> = Eingemischte Luft pro Zeiteinheit [kg/s]</p> <p><math>\rho_a</math> = Dichte Atmosphäre [kg/m<sup>3</sup>]</p> <p><math>V</math> = Volumen Gaswolke [m<sup>3</sup>]</p> <p><math>V_{go}</math> = zweimal das Anfangsvolumen bei 273 K und 1 bar</p> <p><math>k_3 = 0,4</math></p> <p><math>E_{exp}</math> wird anhand der thermodynamischen Zustandsveränderung berechnet. Die Berechnungsweise ist im HART nicht dokumentiert (-&gt; Yellow Book 2nd Edition S. 18, 19, 25).</p> <p>Dieses Modell ist in der neuesten Ausgabe des Yellow Book (3rd edition Second revised print 2005) nicht mehr enthalten</p> | <p>Kandidaten:</p> <p><b>AFTOX</b></p> <p><b>DEGADIS</b></p> <p><b>HEGADAS</b></p> <p><b>HGSYSTEM</b></p> <p><b>INPUFF</b></p> <p><b>OB/DG</b></p> <p><b>SLAB</b></p> <p><b>AIRTOX</b></p> <p><b>CHARM</b></p> <p><b>FOCUS</b></p> <p><b>GASTAR</b></p> <p><b>PHAST</b></p> <p><b>TRACE</b></p> <p>Gauss-PLUME Modell</p> <p>Britter and McQuaid Nomogramme</p> <p>Am besten schnitten ab:</p> <p><b>Britter and McQuaid Nomogramme</b></p> <p><b>CHARM</b></p> <p><b>GASTAR</b></p> <p><b>HEGADAS</b></p> <p><b>HGSYSTEM</b></p> <p><b>PHAST</b></p> <p><b>SLAB</b></p> <p><b>TRACE</b></p> | <p><b>FLACS</b> (Version 9.1 Rel. 2) wurde von der DOT PHMSA für LNG als bislang einziges CFD Modell als Alternative zu den Standardmodellen für Dispersionsberechnungen zur Bestimmung der exclusion zone zugelassen, weil es auf neuen technischen Informationen basiert und weil es für bestimmte Situationen besser passen könnte als die Standardmodelle.</p> | <p><b>Effects / Riskcurves (TNO)</b></p> | <p><b>Phast (DNV GL)</b></p> <p>Für die konstanten Freisetzungen mit beschränkter Dauer enthält das UDM zwei verschiedene Modelle: Das Eine ist ein quasi-sofortiges Modell, welches die Anfangsphase der Freisetzung als kontinuierliche Quelle abbildet und dann dazu übergeht, die Gaswolke als eine Gaswolke infolge sofortiger Freisetzung zu behandeln. Das Andere ist ein Modell mit Korrektur für die beschränkte Freisetzungsdauer, basierend auf der <b>HGSYSTEM</b> Formel, welche wiederum von derjenigen, die im <b>SLAB</b>-Modell verwendet wird, abgeleitet ist. Dieses Modell kann nur die maximalen Konzentrationen auf der Achse der Gaswolke an der Bodenoberfläche berechnen, nicht aber die Abmessungen der Gaswolke. Es liefert jedoch die genaueren Ergebnisse.</p> <p>Für die Jet Dispersion kann zwischen zwei Jet Modellen gewählt werden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Morton et al</li> <li>- Emerson (Ricou-Spalding)</li> </ul> <p>Beim Vergleich mit experimentellen Messungen hat das Morton-Modell besser abgeschnitten, weshalb es als Default gesetzt ist.</p> <p>Die Gleichungen sind in der Phast Dokumentation zusammengestellt.</p> <p><u>Eingabeparameter</u></p> <p>Siehe Anhang C 1 und C 2</p> <p><u>Output</u></p> <p>Siehe Anhang C 3</p> <p><u>Validierung</u></p> <p>Für das UDM Modell stellt DNV GL ein umfangreiches Dokument zur Validierung zur Verfügung. Es wurden Vergleiche mit experimentellen Daten für sofortige und kontinuierliche Freisetzungen sowie konstante Freisetzungen mit beschränkter Dauer und zeitlich variable Freisetzungen durchgeführt. Nur bei den kontinuierlichen Freisetzungen waren auch Experimente mit LPG (Maplin Sands Experimente, LNG und LPG) oder Propan (EEC Experimente) vertreten.</p> | <p><b>FLACS (Gexcon AS)</b></p> <p><u>Eingabeparameter</u></p> <p>Anfangsbedingungen:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Property</th> <th>Value</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Characteristic velocity</td> <td>0.1 m/s</td> </tr> <tr> <td>Relative turbulence intensity</td> <td>0.1</td> </tr> <tr> <td>Turbulence length scale</td> <td>0.01</td> </tr> <tr> <td>Temperature</td> <td>20 °C</td> </tr> <tr> <td>Ambient pressure</td> <td>100000 Pa</td> </tr> <tr> <td>Ground height</td> <td>0 m</td> </tr> <tr> <td>Ground roughness</td> <td>0.01</td> </tr> <tr> <td>Reference height</td> <td>10 m</td> </tr> <tr> <td>Canopy height</td> <td>0 m</td> </tr> <tr> <td>Pasquill class</td> <td>F</td> </tr> <tr> <td>Ground roughness condition</td> <td>Rural</td> </tr> </tbody> </table> <p>Randbedingungen:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Property</th> <th>Value</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Name</td> <td>XLO</td> </tr> <tr> <td>Type</td> <td>Wind</td> </tr> <tr> <td>Wind speed</td> <td>2 m/s</td> </tr> <tr> <td>Wind direction</td> <td>1.0 1.0 0.0</td> </tr> <tr> <td>Relative turbul...</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>Turbulence le...</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>Wind buildup ti...</td> <td>0 s</td> </tr> </tbody> </table> <p>Definition der Geometrie</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Geometrie muss anhand von Quadern und Zylindern aufgebaut werden (Tools zur Umrechnung von CAD Import vorhanden, Nachbearbeitung nötig)</li> </ul> <p>Lage der Messpunkte und Messparameter, z.B.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Massenanteil Gas</li> <li>- Äquivalenzverhältnis</li> <li>- Temperatur</li> <li>- Strömungsgeschwindigkeit und -richtung</li> <li>- Turbulenzparameter, z.B. Turbulente Längenskala</li> </ul> <p>Steuerung der Simulation, z.B.:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- CFL-Zahlen</li> <li>- Plotintervalle</li> </ul> <p>Definition und Anpassung des Rasters</p> <p><u>Output</u></p> <p>Diverse Parameter an definierten Messpunkten oder im gesamten Simulationsvolumen aufgelöst in beliebiger zeitlicher Auflösung. (Sehr grosse Datenmengen bei Aufzeichnung über das gesamte Volumen in hoher zeitlicher Auflösung), siehe Anhang B.</p> <p>Diverse Parameter für Explosionsberechnungen und Risikobetrachtungen, wie z.B. Masse Gas im zündbaren Bereich zum betreffenden</p> | Property | Value | Characteristic velocity | 0.1 m/s | Relative turbulence intensity | 0.1 | Turbulence length scale | 0.01 | Temperature | 20 °C | Ambient pressure | 100000 Pa | Ground height | 0 m | Ground roughness | 0.01 | Reference height | 10 m | Canopy height | 0 m | Pasquill class | F | Ground roughness condition | Rural | Property | Value | Name | XLO | Type | Wind | Wind speed | 2 m/s | Wind direction | 1.0 1.0 0.0 | Relative turbul... | 0 | Turbulence le... | 0 | Wind buildup ti... | 0 s |
| Property  | Value  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Characteristic velocity   | 0.1 m/s  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Relative turbulence intensity   | 0.1  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Turbulence length scale   | 0.01   |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Temperature   | 20 °C  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Ambient pressure  | 100000 Pa  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Ground height   | 0 m  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Ground roughness  | 0.01   |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Reference height  | 10 m   |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Canopy height   | 0 m  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Pasquill class  | F  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Ground roughness condition  | Rural  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Property  | Value  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Name  | XLO  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Type  | Wind   |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Wind speed  | 2 m/s  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Wind direction  | 1.0 1.0 0.0  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Relative turbul...  | 0  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Turbulence le...  | 0  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |
| Wind buildup ti...  | 0 s  |  |  |  |  |          |       |                         |         |                               |     |                         |      |             |       |                  |           |               |     |                  |      |                  |      |               |     |                |   |                            |       |          |       |      |     |      |      |            |       |                |             |                    |   |                  |   |                    |     |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke   |   |  |                            |   |  |
|--|---|--|----------------------------|---|--|
| Stand der Technik  |   |  | Software-Tools             |   |  |
| HART   | Saphedra  | Diverse  | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <p><b>2. Phase:</b> Übergang zur Schweregasphase<br/> <b>(Cox und Carpenter 1980)</b><br/> <math>dR/dt, dL/dt = (k_2 \cdot g \cdot H \cdot (\rho_a - \rho_c) / \rho_c)^{0.5}</math><br/> <math>\rho_a</math> = Dichte Atmosphäre [kg/m<sup>3</sup>]<br/> <math>\rho_c</math> = Dichte Gaswolke [kg/m<sup>3</sup>]<br/>                     H = Höhe Wolke [m]<br/>                     g = 9,81 [m/s<sup>2</sup>]<br/>                     R, L = Radius, Breite der Gaswolke [m]<br/>                     k<sub>2</sub> = 1</p> | <p>Weitere Benchmarks in Saphedra Gap Analysis für LNG auf Wasser, im vorliegenden Dokument nicht weiter berücksichtigt.<br/>                     Bei PHAST ist bei beim Übergangskriterium von der Schweregas-Dispersion zur passiven Dispersion ein ungünstiger Default Wert gesetzt, der dazu führt, dass das Modell tiefe Konzentrationen (ca. &lt;3.5% vol.) systematisch zu tief einschätzt</p> | <p>Für das <b>CHARM</b>-Modell gibt es ein Dokument Vergleichsrechnungen mit verschiedenen Schweregas-Experimenten (LNG, HF, NH<sub>3</sub> etc.): Eltgroth, M. W. et al, Validation of the CHARM® Software Module Including Near-Field Dispersion With Varying Roughness 24.6.2005, Minneapolis<br/>                     Als Ergebnis wird festgestellt, dass das Modell maximale Konzentrationen in Windrichtung sehr gut voraussagt. In anderen Windrichtungen erreicht das Modell nicht dasselbe Niveau, wird aber immer noch als gut bezeichnet.<br/>                     Allerdings wird in den dokumentierten Vergleichen mit den Experimenten der für ein akzeptables Modell festgelegte Schwellenwert für die mittlere quadratische Abweichung stets überschritten.</p> |                            | <p>Insgesamt wird die Performance des UDM Modells als sehr gut beurteilt.<br/>                     Beim Vergleich mit den EEC Experimenten wird die Performance als „reasonable“ beurteilt.<br/>                     Bei den Maplin Sands Experimenten unterschätzt das <b>UDM</b> die Konzentration systematisch, mit zunehmendem Trend nach dem Übergang von der Schweregas-Dispersion zur passiven Dispersion.<br/>                     Gemäss Saphedra Gap Analysis ist bei PHAST beim Übergangskriterium von der Schweregas-Dispersion zur passiven Dispersion ein ungünstiger Default Wert gesetzt, der dazu führt, dass das Modell tiefe Konzentrationen systematisch zu tief einschätzt<br/>                     Phast-<b>UDM</b> Version 6.6 und 6.7 wurde von der US DOT PHMSA für LNG Anlagen als Alternative zu den Standardmodellen (Integralmodell <b>DEGADIS</b> und CFD Code <b>FEM3A</b>) für Dispersionsberechnungen zur Bestimmung der „exclusion zone“ zugelassen. Voraussetzung war, dass das Modell die gleichen physikalischen Gegebenheiten berücksichtigen wie die Standardmodelle und mit experimentellen Daten validiert wurde.<br/>                     Es wird davon ausgegangen, dass die Eignung für LNG auch Rückschlüsse auf LPG (Propan) zulässt.<br/>                     Im Rahmen des Model Evaluation Protocols der US DOT PHMSA wurde mit Phast eine grosse Zahl von Freisetzungsexperimenten nachgerechnet und die berechneten Werte mit Messwerten verglichen.<br/>                     Phast wurde zugelassen zur Berechnung der maximalen Konzentration in einer bestimmten Distanz für:<br/>                     - Gasausbreitung ausgehend von kreisförmigen geformten LNG Lachen<br/>                     - Gasausbreitung aus LNG Lachen in Becken<br/>                     - Gasausbreitung ausgehend von LNG Austritten in beliebiger Richtung (horizontal, vertikal und andere)<br/>                     Phast ist gemäss US DOT PHMSA allenfalls ungeeignet im Fall von:</p> | <p>Zeitpunkt, Neu im zündbaren Bereich liegendes Volumen pro Zeitabschnitt, äquivalente stöchiometrische Gaswolke<br/>                     FLACS (Version 9.1 Rel. 2) wurde von der US DOT PHMSA für LNG Anlagen als bislang einziges CFD Modell als Alternative zu den Standardmodellen (Integralmodell <b>DEGADIS</b> und CFD Code <b>FEM3A</b>) für Dispersionsberechnungen zur Bestimmung der „exclusion zone“ zugelassen, weil es auf neuen technischen Informationen basiert und weil es für bestimmte Situationen besser passen könnte als die Standardmodelle.<br/>                     Es wird davon ausgegangen, dass die Eignung für LNG auch Rückschlüsse auf LPG (Propan) zulässt.<br/>                     Im Rahmen des Model Evaluation Protocols der US DOT PHMSA wurde mit FLACS eine grosse Zahl von Freisetzungsexperimenten nachgerechnet und die berechneten Werte mit Messwerten verglichen.<br/>                     FLACS wurde zugelassen zur Berechnung der maximalen Konzentration in einer bestimmten Distanz für:<br/>                     - Gasausbreitung ausgehend von kreisförmigen und unregelmässig geformten LNG Lachen<br/>                     - Gasausbreitung aus LNG Lachen in Becken und Gräben<br/>                     - Gasausbreitung ausgehend von LNG Austritten in beliebiger Richtung (horizontal, vertikal und andere)<br/>                     - Gasausbreitung aus mehreren gleichzeitigen Freisetzungen</p> |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke   |  |   |                            |  |   |
|--|--|---|----------------------------|--|---|
| Stand der Technik  |  |   | Software-Tools             |  |   |
| HART   | Saphedra   | Diverse   | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)   |
| <p><b>3. Phase</b> (Schweregasphase, <b>Cox und Carpenter 1980</b>)</p> <p>Sofortige Freisetzung:<br/> <math>dm/dt = \rho_a \cdot (2nRH \cdot u_e + nR^2 \cdot u_t)</math><br/> <math>dm/dt =</math> Menge beigemischter Luft</p> <p>Für die Einmischgeschwindigkeiten <math>u_e</math> und <math>u_t</math> sowie die kontinuierliche Freisetzung wird auf <b>die COVO Studie 1982</b> und auf <b>Cox und Carpenter 1980</b> verwiesen)</p> | <p>Benchmark mit LNG Experimenten</p> <p>Kandidaten:<br/> <b>CFX</b> (CFD)<br/> <b>SLAB</b> (Integral Model)<br/> <b>DEGADIS</b> (Integral Model)<br/> <b>CFX</b> schnitt am besten ab</p> | <p><b>CT-Analyst Hamburg:</b></p> <p>In Hamburg wurde das CFD Tool <b>Fast3D-CT</b> zur Windfeldberechnung bei der Ausbreitung gefährlicher Substanzen in der Luft im urbanen Gebiet verwendet und validiert.</p> |                            | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Gasausbreitung aus unregelmässig geformten Lachen und Lachen mit länglichen Formen</li> <li>- Gasausbreitung über unregelmässiges oder geneigtes Gelände</li> <li>- Gasausbreitung zwischen grossen Hindernissen</li> <li>- Gasausbreitung aus mehreren gleichzeitigen Freisetzungen</li> </ul> <p>Es wurde festgestellt, dass UDM die Gaskonzentrationen bei tiefen Windgeschwindigkeiten und hoher atmosphärischer Stabilität (Klasse F) um einen Faktor 2 unterschätzen kann.</p> <p>Die US DOT PHMSA empfiehlt aufgrund von bei der Modellevaluation festgestellten Unsicherheiten, Phast mit einem Sicherheitsfaktor 2 zu verwenden. D.h. zur Berechnung der Distanz zur unteren Zündgrenze (LFL) sollte als Schwellenwert die Hälfte der Konzentration der unteren Zündgrenze (Half-LFL) verwendet werden.</p> <p>Im Rahmen der Evaluation durch die US DOT PHMSA wurden auch Vergleichsrechnungen mit anderen Modellen (<b>DEGADIS</b> und den <b>HGSYSTEM-Modellen HEGADAS</b> und <b>AEROPLUME</b>) durchgeführt, welche gute Übereinstimmungen ergaben. Ebenfalls wurde der Übergang von der Schweregasphase zur passiven Dispersion mit <b>HGSYSTEM</b> und <b>SLAB</b> verglichen, ebenfalls mit guter Übereinstimmung.</p> | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Gasausbreitung über geneigtes Gelände mit maximal 10% Neigung</li> <li>- Gasausbreitung über Hindernisse</li> </ul> <p>FLACS ist gemäss US DOT PHMSA allenfalls ungeeignet im Fall von:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Instabiler atmosphärischer Schichtung (Klassen A, B, C)</li> <li>- Tiefem Umgebungsdruck (&lt; 90 kPa)</li> <li>- Gasausbreitung über unregelmässiges Gelände oder bei mehr als 10% Hangneigung</li> </ul> <p>Die US DOT PHMSA empfiehlt aufgrund von bei der Modellevaluation festgestellten Unsicherheiten, FLACS mit einem Sicherheitsfaktor 2 zu verwenden. D.h. zur Berechnung der Distanz zur unteren Zündgrenze (LFL) sollte als Schwellenwert die Hälfte der Konzentration der unteren Zündgrenze (Half-LFL) verwendet werden.</p> <p>Eine neuere Version (v10.3) von FLACS wird derzeit bei der US DOT PHMSA geprüft. Die aktuelle Version v10.5 von FLACS wurde von der US DOT PHMSA noch nicht geprüft.</p> <p>Gemäss Saphedra Gap Analysis besteht eine gute Übereinstimmung von FLACS mit verschiedenen LNG Experimenten</p> |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke   |  |   |                            |   |  |
|--|--|---|----------------------------|---|--|
| Stand der Technik  |  |   | Software-Tools             |   |  |
| HART   | Saphedra   | Diverse   | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <p><b>4. Phase</b><br/>Annahme einer virtuellen Streckenquelle gemäss <b>Emerson 1986</b><br/>Gaussische Dispersion in Abhängigkeit der atmosphärischen Stabilität, Oberflächenrauigkeit und Abstand zur Quelle. Korrelationen aus dem <b>Yellow Book 2nd edition 1988</b><br/>Bestimmung der Wolkenparameter (Dichte, Temperatur) unter Berücksichtigung des Einmischens feuchter Luft und Wärmetransport vom Boden (<b>Gemäss Cox und Carpenter 1982, AVIV 1986</b>)</p> | <p>Benchmark mit LNG Experimenten mit Hindernissen im Ausbreitungspfad:<br/>Kandidaten:<br/><b>Fluent</b> (CFD)<br/><b>DEGADIS</b><br/>Sehr gute Übereinstimmung von <b>FLUENT</b> mit Experiment</p> <p>Gute Übereinstimmung von <b>FLACS</b> mit verschiedenen LNG Experimenten</p> <p>Grundsätzliches: Integral-Modelle (<b>EFFECT, DEGADIS, SLAB, Phast, HEGADAS</b> etc.) sind für komplexe Geometrien ungeeignet</p> <p>Folgende Modelle werden als gut fundierte Literaturmodelle aufgeführt:<br/>Free Jet Modell (Gasaustritt mit hoher Geschwindigkeit):<br/><b>Chen and Rodi 1980</b><br/>Plume Modelle (Frühphase der Dispersion):<br/><b>Hoot, Meroney and Peterka 1973, Briggs 1969</b><br/>Schwergasmodelle:<br/><b>UDM Modell (Phast), DEGADIS, HEGADIS, SLAB</b></p> <p>Nahbereich und komplexes Terrain:<br/><b>CFD wie FLACS, CFX, Fluidyn-PANACHE, FLUENT, OpenFoam, QUIC</b></p> | <p><b>COST Action ES1006:</b><br/>Vergleichsberechnungen mit Messungen und Windtunnelexperimenten zeigten, dass Berechnungen mit einfachen Gauss-Modellen zu tiefe Konzentrationen ergeben können, auch wenn als „Sicherheitsmarge“ Konfidenzlinien für Fluktuationen bei der Windrichtung hinzugenommen werden. Für Anwendungen auf der lokalen Skala werden deshalb Lagrange, CFD oder LES-Modelle empfohlen, welche Hindernisse im Ausbreitungspfad berücksichtigen.</p> |                            | <p>Grundsätzliches in Saphedra Gap Analysis: Integral-Modelle (<b>EFFECT, DEGADIS, SLAB, Phast, HEGADAS</b> etc.) sind für komplexe Geometrien ungeeignet</p> | <p>Im Review des britischen Health and Safety Laboratory (HSL) für FLACS v9.0 werden unter anderem folgende Punkte bemängelt (es sind nur diejenigen Punkte aufgeführt, die wahrscheinlich auch noch bei der aktuellen FLACS Version zutreffen):</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- ungenügende Dokumentation der Validation und bei einzelnen Aspekten der wissenschaftlichen Basis von FLACS und die Benutzer-Dokumentation. Die Benutzerdokumentation wurde seither verbessert, lässt aber immer noch Lücken.</li> <li>- Wie bei der US DOT PHMSA Zulassung wird aufgrund des kartesischen Rasters die Eignung für geneigtes oder unregelmässiges Gelände infrage gestellt.</li> <li>- Ebenfalls bestehen aufgrund des kartesischen Rasters Limiten bei vom Raster abweichenden Gas-Jets.</li> <li>- Das Standard k-e Modell für die Turbulenz ist weit verbreitet und gut dokumentiert in der Wissenschaft. Es hat aber bekannte Schwächen, so dass verschiedene Versionen dieses Modells, welche einige dieser Schwächen nicht aufweisen, zur Verfügung gestellt werden sollten.</li> <li>- Ebenfalls wird auf ein grundsätzlich bei CFD Tools (und auch bei vielen anderen Software-Tools, Anmerkung suisseplan) bestehendes Problem, dass die Qualität der Ergebnisse stark vom Anwender abhängt, hingewiesen.</li> </ul> |

| <b>Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke</b> |   |                |                                   |                       |  |
|---|---|----------------|-----------------------------------|-----------------------|--|
| <b>Stand der Technik</b>                                |   |                | <b>Software-Tools</b>             |                       |  |
| <b>HART</b>   | <b>Saphedra</b>   | <b>Diverse</b> | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b> | <b>Phast (DNV GL)</b> | <b>FLACS (Gexcon AS)</b>   |
|   | <p><b>Saphedra Identification of existing tools:</b><br/>                     Allgemein werden die üblichen Dispersionsmodellierungen auf eine Distanz von maximal 10 km limitiert.</p> <p>Gaussische Modelle sind für neutrale Gase vorgesehen (keine Berücksichtigung gravitativer Effekte, d.h. der Schweregaswirkung, wird bei HART z.B. für die 4. Phase verwendet), sowohl für sofortige als auch kontinuierliche Freisetzungen.</p> <p>Empirische und Gauss-Modelle können nicht mit unregelmässigen Strömungen, lokaler Topographie, Strömungen um grössere Hindernisse umgehen, obwohl diese einen grossen Einfluss auf das Ergebnis haben können. Sie sind nicht geeignet für Windgeschwindigkeiten &lt;1 m/s. Ebenfalls darf die Freisetzung die atmosphärische Strömung nicht stören (Austritte mit hoher Geschwindigkeit).</p> <p>Gauss-Modelle sind die am weitesten verbreiteten Modelle, liefern aber kein realistisches Abbild der Gasausbreitung in überbauten Umgebungen.</p> <p>Gasaustritte mit hoher Geschwindigkeit benötigen spezialisierte Modelle (Turbulent Free Jet für die Berechnung der Phase bis zum expandierten Jet).</p> |                |                                   |                       | <p>Es wird darauf hingewiesen, dass die Kriterien für die Güte eines Modells im Bereich der atmosphärischen Dispersion relativ lasch sind. Ein übliches Kriterium ist, dass die Modellergebnisse in der Hälfte der Fälle nicht mehr als einen Faktor 2 von gemessenen Werten abweichen darf. Dies wird von FLACS weitgehend erreicht. Diese auch bei einem guten Modell zulässige möglicherweise erhebliche Abweichung der Modellergebnisse von der Realität sollte bei deren Interpretation, unabhängig vom verwendeten Modell/ Software-Tool, berücksichtigt werden.</p> |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke |   |         |                            |                |                   |
|--|---|---------|----------------------------|----------------|-------------------|
| Stand der Technik                                |   |         | Software-Tools             |                |                   |
| HART   | Saphedra  | Diverse | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS) |
|  | <p>Schweregasmodelle sollten auch ein thermodynamisches Modell für die Tröpfchenevaporation in der Wolke enthalten.</p> <p>Bei den Integralmodellen (Schweregas) muss die Windrichtung und Geschwindigkeit konstant sein.</p> <p>CFD Codes: Unterschiede bei den Ergebnissen, wenn dasselbe Problem mit demselben Software-Tool durch unterschiedliche (erfahrene) Anwender berechnet wird.</p> <p><b>Erwähnte Modelle für neutrale Gase, nicht für Schweregas:</b><br/>                     VDI 3783/1, ALOHA, Neutral Gas Dispersion model</p> <p>(Diese Modelle berücksichtigen keine Hindernisse, Bereich näher als 100 m vom Austritt sehr unsicher)</p> <p><b>Erwähnte Schweregasmodelle:</b><br/>                     DEGADIS, HEGADIS, SLAB und HGSYSTEM berechnen sofortige und kontinuierliche Freisetzungen, werden nicht weiter unterhalten, kein Support, keine Berücksichtigung von Hindernissen, Bereich näher als 100m vom Austritt sehr unsicher, keine Berechnung explosiver Masse</p> <p>DRIFT (ohne weitere Angaben)</p> <p>UDM model (Phast): Neben Schweregas auch Neutralgas, sofortige Freisetzung, Jet und Lache, Berechnung explosiver Masse, keine Berücksichtigung von Hindernissen, Bereich näher als 100 m vom Austritt sehr unsicher, in bestimmten Fällen inkonsistente Resultate möglich</p> <p>TNO-DENSEGAS: sofortige Freisetzung, horizontaler und vertikaler Jet, Lache, Berechnung explosiver Masse, keine Berücksichtigung von Hindernissen, Bereich näher als 100 m vom Austritt sehr unsicher, in bestimmten Fällen inkonsistente Resultate möglich</p> <p>Britter &amp; McQuaid model: kontinuierliche und sofortige Freisetzung, keine semikontinuierliche Freisetzung, keine Verdampfung aus Tröpfchen berücksichtigt</p> |         |                            |                |                   |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke |   |         |                            |                |                   |
|--|---|---------|----------------------------|----------------|-------------------|
| Stand der Technik                                |   |         | Software-Tools             |                |                   |
| HART   | Saphedra  | Diverse | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS) |
|  | <p><b>VDI 3783/2:</b> Modell im eigentlichen Sinn?<br/>                     Es müssen Fälle, welche am nächsten beim betrachteten liegen, ausgewählt werden.</p> <p><b>ALOHA-DEGADIS:</b> Freisetzung auf Bodenhöhe, keine Jets, keine Berücksichtigung von Hindernissen, Bereich näher als 100 m vom Austritt sehr unsicher, keine Berechnung explosiver Masse</p> <p><b>TRACE:</b> nicht öffentlich dokumentiert, inkl. Freisetzungsmodelle, keine Berücksichtigung von Hindernissen, Bereich näher als 100 m vom Austritt sehr unsicher</p> <p><b>Erwähnte Modelle für kurze Distanzen vom Austritt / komplexes Terrain:</b></p> <p>Separated Windfield: Schweregasfunktion möglich, Berücksichtigung von Hindernissen, Windfeld muss separat validiert werden (?)</p> <p>CFD: stark userabhängige Ergebnisse, Effekt von Dichtegradienten nicht berücksichtigt (?)</p> <p>Lagrange: kein Schweregas</p> |         |                            |                |                   |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke                      |  |         |   |   |   |
|---|--|---------|---|---|---|
| Stand der Technik   |  |         | Software-Tools  |   |   |
| HART  | Saphedra   | Diverse | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)   |
| Meteoszenarien  |  |         |   |   |   |
| Berücksichtigung von Windrichtung und Geschwindigkeit, Pasquillklasse | Allgemein:<br>Windgeschwindigkeit (und Richtung),<br>Atmosphärische Stabilität,<br>Oberflächenrauigkeit, Temperatur etc. bei<br>den meisten Modellen. Limiten bezüglich<br>Windgeschwindigkeit und unregelmässigen<br>Strömungen bei Integralmodellen. |         | <p><u>Effects</u><br/>Pasquill Stability Class,<br/>Windgeschwindigkeit,<br/>Oberflächenrauigkeit</p> <p><u>Riskcurves</u><br/>Riskcurves ermöglicht die Berücksichtigung<br/>umfangreicher Meteoszenarien. Diese<br/>Umgebungsparameter werden in einer<br/>separaten Eingabemaske erfasst und<br/>gelten anschliessend für alle nachfolgend<br/>definierten Szenarien. Dadurch kann<br/>gewährleistet werden, dass alle Szenarien<br/>unter identischen Bedingungen gerechnet<br/>werden. Dies erlaubt einen einfacheren<br/>Vergleich mehrerer Berechnungen.<br/>Zudem kann die Windrichtung für<br/>verschiedene Zeitphasen festgelegt<br/>werden.</p> <p>Parameter:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ambient temperature</li> <li>Subsoil temperature</li> <li>Water temperature</li> <li>Ambient relative humidity</li> <li>Ambient pressure</li> <li>Solar radiation flux</li> <li>Ambient temperature night</li> <li>Subsoil temperature night</li> <li>Water temperature night</li> <li>Ambient relative humidity night</li> <li>Ambient pressure night</li> <li>Solar radiation flux night</li> <li>Fraction CO2 in atmosphere</li> <li>Latitude</li> <li>Cloud cover</li> <li>Meteorological daytime fraction</li> </ul> | Detaillierte Berücksichtigung, siehe dazu<br>Anhang C 1, Ambient Data und Substrate<br>Data | Windgeschwindigkeit<br>Windrichtung<br>Diverse Turbulenzparameter<br>Stabilitätsklasse (Pasquill)<br>Oberflächenrauigkeit<br>Temperatur<br>Luftdruck<br>Windfeld um Hindernisse<br>Fluktuierende Windfelder |

| Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke  |   |           |   |  |                   |                           |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
|---|---|-----------|---|--|-------------------|---------------------------|--|------------------------|--|---------------------------|--|-----|----|-----|----|-----|----|---------------------|---|---|---|---|---|---|------------|---|---|---|---|---|---|----------------------|---------|-----------|----------|-----------|----------|-----------|-----------------------------|---------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------------------|-------|-------|-----------|-------|--------|-------|-------|-----|-----|-----|-----|---|---|---------------------------------|------|---|------|---|------|---|-----------------------|---|-----|---|-----|---|-----|---|--------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------------------------|
| Stand der Technik                                 |   |           | Software-Tools  |  |                   |                           |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| HART  | Saphedra  | Diverse   | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS) |                           |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| <b>Hindernisse bei der Ausbreitung</b>            |   |           |   |  |                   |                           |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| Keine Berücksichtigung von Hindernissen           | Allgemein:<br>Keine Berücksichtigung bei Integral- und Gauss-Modellen,<br>Berücksichtigung bei CFD und Separated Windfield Ansätzen |           | Keine Berücksichtigung von Hindernissen, bzw. pauschale Berücksichtigung z.B. von überbautem Gebiet mit Parameter zur Bodenrauigkeit. Damit werden aber keine Gebäudeumrisse etc. aufgelöst, d.h. das Ergebnis ist wenig aussagekräftig.<br>Das im Phast integrierte SDI Modell von TNO scheint im Effects nicht enthalten zu sein. | <p>Pauschale Berücksichtigung z.B. von überbautem Gebiet mit Parameter zur Bodenrauigkeit. Damit werden aber keine Gebäudeumrisse etc. aufgelöst, d.h. das Ergebnis ist wenig aussagekräftig.</p> <p>Phast verfügt zusätzlich über das <b>Building Wake dispersion Model BWM</b>, welches den Effekt des Wirbelströmungsbereich hinter einem Gebäude abbilden können soll. Das BWM scheint aber vor allem für die Modellierung toxischer Substanzen aus Kaminen oder infolge von Gebäudebrand vorgesehen zu sein. Die abgebildeten Szenarien sind:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Kontinuierliche vertikale Freisetzung aus einem Kamin</li> <li>- Freisetzung vom Dach eines rechteckigen Gebäudes (kontinuierliche und sofortige Freisetzung)</li> <li>- Freisetzung im Wirbelströmungsbereich auf der windabgewandten Seite eines Gebäudes (kontinuierliche und sofortige Freisetzung)</li> </ul> <p>Das Modell für die Freisetzung vom Dach und im Wirbelströmungsbereich basiert auf dem <b>SDI</b>-Modell von TNO. Phast stellt drei verschiedene Parametersets für die Beschreibung der Turbulenzzone hinter einem Gebäude zur Verfügung:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Die Originale gemäss TNO</li> <li>- Parameterset, das den Worst Case abbilden soll (default in Phast)</li> <li>- Parameterset, das eine möglichst genaue Schätzung abgeben soll (default in Safeti)</li> </ul> <table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="2">parameter</th> <th colspan="2">original TNO assumptions</th> <th colspan="2">worst-case assumptions</th> <th colspan="2">best-estimate assumptions</th> </tr> <tr> <th>SDI</th> <th>NH</th> <th>SDI</th> <th>NH</th> <th>SDI</th> <th>NH</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>roof/lee or chimney</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>1</td> <td>2</td> </tr> <tr> <td>model type</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>3</td> </tr> <tr> <td>lee length <math>L_{lee}</math></td> <td>3 <math>h_c</math></td> <td>3 <math>\beta</math></td> <td>Fackrell</td> <td>3 <math>\beta</math></td> <td>Fackrell</td> <td>3 <math>\beta</math></td> </tr> <tr> <td>lee half-width <math>L_{lee,50}</math></td> <td>0.5 <math>K_b h_c</math></td> <td>0.5 <math>K_b</math></td> <td>0.5 <math>h_c</math></td> <td>0.5 <math>K_b</math></td> <td>0.5 <math>h_c</math></td> <td>0.5 <math>K_b</math></td> </tr> <tr> <td>lee height <math>L_{lee}</math></td> <td><math>h_c</math></td> <td><math>h_c</math></td> <td><math>K_b h_c</math></td> <td><math>h_c</math></td> <td><math>2h_c</math></td> <td><math>h_c</math></td> </tr> <tr> <td><math>K_b</math></td> <td>0.2</td> <td>0.2</td> <td>0.2</td> <td>0.2</td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td>near-field linear <math>\sigma(x_c)</math></td> <td>100m</td> <td>-</td> <td>100m</td> <td>-</td> <td>100m</td> <td>-</td> </tr> <tr> <td>NH change of <math>\sigma</math></td> <td>-</td> <td>100</td> <td>-</td> <td>100</td> <td>-</td> <td>100</td> </tr> <tr> <td>averaging time <math>(t_{av} = \text{user-specified})</math></td> <td><math>\min(t_{av}, t_{crit})</math></td> <td><math>t_{av}</math></td> <td><math>t_{av}</math></td> <td><math>t_{av}</math></td> <td><math>t_{av}</math></td> <td><math>t_{av}</math></td> </tr> </tbody> </table> <p>Das <b>BWM</b> Modell berücksichtigt keine Schweregaseffekte. Diese sind je nach Fall nicht so wichtig, bei der Anwendung für Propan ist aber deswegen bestimmt Vorsicht geboten.</p> <p><u>Eingabeparameter und Output</u><br/>                 Siehe Anhang E</p> | parameter         | original TNO assumptions  |  | worst-case assumptions |  | best-estimate assumptions |  | SDI | NH | SDI | NH | SDI | NH | roof/lee or chimney | 1 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 | model type | 1 | 1 | 2 | 2 | 3 | 3 | lee length $L_{lee}$ | 3 $h_c$ | 3 $\beta$ | Fackrell | 3 $\beta$ | Fackrell | 3 $\beta$ | lee half-width $L_{lee,50}$ | 0.5 $K_b h_c$ | 0.5 $K_b$ | 0.5 $h_c$ | 0.5 $K_b$ | 0.5 $h_c$ | 0.5 $K_b$ | lee height $L_{lee}$ | $h_c$ | $h_c$ | $K_b h_c$ | $h_c$ | $2h_c$ | $h_c$ | $K_b$ | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 1 | 1 | near-field linear $\sigma(x_c)$ | 100m | - | 100m | - | 100m | - | NH change of $\sigma$ | - | 100 | - | 100 | - | 100 | averaging time $(t_{av} = \text{user-specified})$ | $\min(t_{av}, t_{crit})$ | $t_{av}$ | $t_{av}$ | $t_{av}$ | $t_{av}$ | $t_{av}$ | Hindernisse werden berücksichtigt |
| parameter   | original TNO assumptions  |           | worst-case assumptions  |  |                   | best-estimate assumptions |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
|   | SDI   | NH        | SDI   | NH   | SDI               | NH                        |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| roof/lee or chimney                               | 1   | 2         | 1   | 2  | 1                 | 2                         |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| model type  | 1   | 1         | 2   | 2  | 3                 | 3                         |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| lee length $L_{lee}$                              | 3 $h_c$   | 3 $\beta$ | Fackrell  | 3 $\beta$  | Fackrell          | 3 $\beta$                 |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| lee half-width $L_{lee,50}$                       | 0.5 $K_b h_c$   | 0.5 $K_b$ | 0.5 $h_c$   | 0.5 $K_b$  | 0.5 $h_c$         | 0.5 $K_b$                 |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| lee height $L_{lee}$                              | $h_c$   | $h_c$     | $K_b h_c$   | $h_c$  | $2h_c$            | $h_c$                     |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| $K_b$   | 0.2   | 0.2       | 0.2   | 0.2  | 1                 | 1                         |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| near-field linear $\sigma(x_c)$                   | 100m  | -         | 100m  | -  | 100m              | -                         |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| NH change of $\sigma$                             | -   | 100       | -   | 100  | -                 | 100                       |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |
| averaging time $(t_{av} = \text{user-specified})$ | $\min(t_{av}, t_{crit})$  | $t_{av}$  | $t_{av}$  | $t_{av}$   | $t_{av}$          | $t_{av}$                  |  |                        |  |                           |  |     |    |     |    |     |    |                     |   |   |   |   |   |   |            |   |   |   |   |   |   |                      |         |           |          |           |          |           |                             |               |           |           |           |           |           |                      |       |       |           |       |        |       |       |     |     |     |     |   |   |                                 |      |   |      |   |      |   |                       |   |     |   |     |   |     |   |                          |          |          |          |          |          |                                   |

## **3.3.1 Fazit Modul 3 (Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke)**

### **3.3.1.1 Modellierung**

#### *3.3.1.1.1 Stand der Technik*

Es gibt eine grosse Anzahl von Modellen zur Berechnung der Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke.

Die grösste Verbreitung haben Gauss- und Integralmodelle. Diese liefern kein realistisches Abbild der Gasausbreitung in überbauten Umgebungen und anderen komplexen Geometrien. Sie sind ungeeignet für Windgeschwindigkeiten  $< 1$  m/s, Austritte mit hoher Geschwindigkeit (vorschalten eines Turbulent Free Jet Modells) und Berechnungen im Umkreis von weniger als 100 m von der Freisetzung. Zur maximalen Windgeschwindigkeit sind keine Einschränkungen bekannt.

In einem Schweregas-Benchmark mit vorwiegend Gauss- und Integralmodellen haben folgende am besten abgeschnitten: CHARM, GASTAR, HEGADAS, HGSYSTEM, PHAST (UDM), SLAB, TRACE, wobei SLAB und HGSYSTEM nicht weiter unterhalten werden. TNO-DENSEGAS basiert jedoch auf SLAB und wird weitergeführt. Von den obigen Modellen werden PHAST (UDM) und SLAB als gut fundierte Literaturmodelle aufgeführt. DEGADIS wird vom U.S. DOT zwar als Standard für LNG-Gasausbreitungsmodellierung vorgegeben, schneidet in den Vergleichstests jedoch nicht am besten ab. TNO-DENSEGAS und PHAST (UDM) dürften deshalb unter den Integralmodellen einem aktuellen Stand der Technik entsprechen, wobei bei beiden Inkonsistenzen bekannt sind. Die Zulassung von Phast (UDM) durch die US DOT PHMSA (U.S. Department of Transportation Pipeline and Hazardous Materials Safety Administration) zur Bestimmung der exclusion zone von LNG Anlagen im Jahr 2011 dürfte ebenfalls als Beleg dafür gelten, dass das Modell auf einem aktuellen Stand der Technik ist. Zu CHARM ist keine klare Aussage möglich, da widersprüchliche Angaben zur Validität vorliegen. Zu GASTAR ist ebenfalls noch keine klare Aussage möglich, Dokumente zur Validität existieren, müssten aber beschafft werden: Hanna S.R. et al 1993: Hazardous gas model evaluation with field observations. Atmos. Environ. 27A, 2265-2285 und Daish N. C. et al 1999: SMEDIS: Scientific Model Evaluation Techniques Applied to Dense Gas Dispersion Models in Complex Situations. Proc. of Int. Conference and Workshop on Modeling the Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials, 1999, San Francisco, CA, USA, pp. 345-371.

In Vergleichs-Benchmarks mit LNG sind CFD Codes (CFX, Fluent) Integralmodellen (SLAB, DEGADIS) überlegen. Ebenfalls gute Übereinstimmung mit LNG Experimenten ist vom CFD Code FLACS bekannt. Alle drei erwähnten CFD Codes werden als gut fundierte Literaturmodelle bezeichnet. Sie dürften deshalb einem aktuellen Stand der Technik entsprechen. Sie sind insbesondere in komplexen Geometrien und im Nahbereich das Mittel der Wahl. Auch bei FLACS dürfte die Zulassung durch die US DOT PHMSA (U.S. Department of Transportation Pipeline and Hazardous Materials Safety Administration) zur Bestimmung der exclusion zone von LNG Anlagen als Beleg dafür gelten, dass das Modell auf einem aktuellen Stand der Technik ist.

Die separated windfield Ansätze könnten interessant sein, da sie 3D Berechnung mit deutlich weniger Rechenaufwand als CFD Codes durchführen können. Es ist jedoch unklar, ob ein Modell dieses Typs mit der gemäss Saphedra grundsätzlich möglichen Schweregasfunktion vorhanden ist. Hierzu wären weitere Abklärungen nötige.

Das Saphedra full spreadsheet gibt nur für das UDM model eine Quelle zur Validierung an (UDM validation document). Es sind aber weitere Dokumente z.B. zu CHARM und GASTAR bekannt. Das Saphedra full spreadsheet ist gemäss Angabe von TNO nicht vollständig. Offensichtlich sind relevante Dokumente zur Validität der verschiedenen Modelle darin nicht aufgeführt. Aufgrund des Saphedra full spreadsheet kann deshalb die Validität eines Modells nur teilweise als Kriterium für den Stand der Technik verwendet werden.

Das in HART verwendete Spray-Releasemodell stammt aus dem Yellow Book 2nd Edition (1988) und wurde wie das Modell nach Cox und Carpenter 1982 aus Gründen der Kontinuität mit früheren Versionen des HART beibehalten. Diese Modelle sind teilweise überholt und entsprechen nicht mehr dem Stand der Technik.

#### *3.3.1.1.2 Effects / Riskcurves*

Effects verwendet in der Version 10 das TNO-DENSEGAS Modell, welches eine Weiterentwicklung des SLAB Codes darstellt. TNO-DENSEGAS ist wie SLAB ein Integral-Modell und verfügt über Einschränkungen in bestimmten Situationen:

- Bei semikontinuierlichen Freisetzungen und hohen Ausflussraten von  $>1000$  kg/s
- Bei semikontinuierlichen Freisetzungen mit „time after release“  $>$  „duration of release“
- Der Letalitätsplot ist ungenau bei einer Downwind distance von mehr als 3000 m
- Unter Umständen unzuverlässige Ergebnisse bei „unstable weather classes“
- Bei Pools mit von mehr als  $50'000$  m<sup>2</sup> und Freisetzungsraten von mehr als  $30'000$  kg/s

Es ist davon auszugehen, dass in Riskcurves ebenfalls das in Effects (Version 10) verwendete TNO-DENSEGAS Modell eingesetzt wird.

Ob die bekannten Inkonsistenzen des SLAB Modells mit dem TNO-DENSEGAS behoben wurden ist unklar und bei Bedarf mit TNO abzuklären.

Aufgrund des guten Abschneidens bei Benchmarks dürfte Effects in diesem Modul „Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke“ auf einem aktuellen Stand der Technik sein.

#### *3.3.1.1.3 Phast*

Phast verwendet das UDM Modell (Integralmodell). Damit kann die Gasausbreitung bei den üblichen Freisetzungsszenarien modelliert werden.

Das UDM Modell ist umfangreich validiert. Allerdings ist in Vergleichsstudien mit experimentellen Daten für LNG und LPG die Situation aufgetreten, dass das UDM Modell tiefe Konzentrationen (ca.  $<3.5$  % vol.) aufgrund eines ungünstig gesetzten Default Wertes für den Übergang von der Schweregas-Dispersion zur passiven Dispersion systematisch unterschätzt. In anderen Studien ergaben sich jedoch gute Übereinstimmungen mit experimentellen Daten. Im model evaluation protocol zum Erhalt der Zulassung von Phast (UDM) durch die US DOT PHMSA (U.S. Department of Transportation Pipeline and Hazardous Materials Safety Administration) zur Bestimmung der exclusion zone von LNG Anlagen im Jahr 2011 wurde eine grössere Zahl von Vergleichsrechnungen mit experimentellen Daten durchgeführt.

Insgesamt dürfte Phast (UDM) deshalb auf einem üblichen Stand der Technik sein.

Vorbildlich ist auch bei diesem Modul „Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke“, dass Validitätsbetrachtungen mitgeliefert werden.

Phast verfügt über ein Modell als Erweiterung des UDM Modell, womit bei der Ausbreitung Hindernisse teilweise berücksichtigt werden können (BWM Modell). Bei der Anwendung für Propan ist jedoch Vorsicht geboten, da das BWM Schweregasereffekte nicht berücksichtigt.

#### *3.3.1.1.4 FLACS*

Mit FLACS kann der Ausbreitungsprozess in 4D (räumlich und zeitlich) modelliert werden. Jedoch erfordert eine korrekte Modellierung viel Know How, Arbeitszeit zum Aufsetzen der Simulation und leistungsfähige Rechner. Die Parametrierung (z.B. Turbulenzparameter etc.) und Steuerung der Simulation sind z.T. schwierig und ohne Rücksprache mit dem Hersteller sind keine verlässlichen Berechnungen möglich.

FLACS entspricht gemäss der Zulassung der US DOT PHMSA dem aktuellen Stand der Technik. Einschränkungen bestehen bei

- atmosphärischer Schichtung der Klassen A, B, C
- Umgebungsdruck < 90 kPa
- Gasausbreitung über unregelmässiges Gelände oder bei mehr als 10% Hangneigung

Die Schwächen von FLACS wurden aufgrund der eingehenden Modellevaluation mit einer grossen Zahl von Vergleichsrechnungen mit Freisetzungsexperimenten sichtbar. Es ist gut vorstellbar, dass bei anderen Modellen bei ähnlich genauer Analyse ebenfalls Schwächen zu Tage treten.

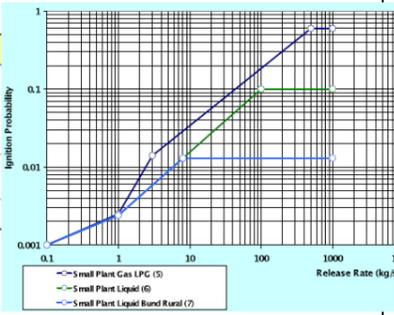
Das Review des britischen Health and Safety Laboratory erweckt den Eindruck, dass die „general purpose CFD Codes“ (z.B. CFX, Fluent) in einigen Punkten der CFD-Technik fortschrittlicher als FLACS sind. Andererseits fehlen diesen „general purpose“ CFD-Tools allerdings die spezifischen Ergänzungen und Anpassungen für Gasausbreitungsberechnungen im Störfall- und Sicherheitsbereich und die einschlägigen Erfahrungen in diesem Bereich, die FLACS auszeichnen.

### 3.4 Modul 4a: Zündung

| Modul 4a: Zündung   |  |  |   |  |   |  |
|---|--|--|---|--|---|--|
| Stand der Technik   |  |  |   | Software-Tools   |   |  |
| HART  | BEVI   | IOGP   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen  | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <b>Sofortige Freisetzung</b>                                    |  |  |   |  |   |  |
| HART relativer Anteil sofortig (an Total Freisetzungen) P = 0.4 | BEVI Speichertanks relativer Anteil sofortig (an Total Freisetzungen) P = 0.045<br>BEVI Druck-Kesselwagen relativer Anteil sofortig (an Total Freisetzungen) P = 0.5 | IOGP LPG Kesselwagen relativer Anteil sofortig (an Total Lecks in der Tankhülle) P = 0.1 | Unterscheidung in sofortige und kontinuierliche Freisetzung bei Erdgashochdruckleitungen unpassend. | Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves wird ein Standardwert von 0.8 für die sofortige Zündung und 0.2 für die verzögerte Zündung vorgeschlagen.<br><br>Wird ein Brandszenario (z.B. BLEVE) ausgewählt – welches eine Zündung voraussetzt, ist manuell eine Basis-Häufigkeit festzulegen. Diese setzt sich zusammen aus der Häufigkeit einer spontanen Freisetzung und der Wahrscheinlichkeit der Zündung. Dieser Wert ist manuell z.B. anhand eines Fehlerbaumes zu berechnen und kann nicht mittels Riskcurves ermittelt werden. | Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. | Verwendung von FLACS zur Modellierung der Zündung einer Gaswolke infolge sofortiger Freisetzung beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround.<br><br>Sind die Eigenschaften der entstehenden Lache oder Gaswolke bekannt, kann in FLACS jedoch eine Lache oder eine Gaswolke definiert und gezündet werden.<br>Zündzeitpunkt und -ort sind frei wählbar. Zündquellen können Punkte, Linien, Flächen oder Volumen sein. Mehrfache Zündquellen sind nicht möglich.<br><br>Die aktuelle Version von FLACS ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. Es ist jedoch bei Gexcon AS das Modul FLACS Risk in Entwicklung, welches auch Wahrscheinlichkeitsbetrachtungen ermöglicht. Release wäre im 2016 vorgesehen gewesen. |

| Modul 4a: Zündung  |  |                           |                                      |                            |                |                   |     |             |     |              |   |  |   |  |
|--|--|---------------------------|--------------------------------------|----------------------------|----------------|-------------------|-----|-------------|-----|--------------|---|--|---|--|
| Stand der Technik  |  |                           |                                      | Software-Tools             |                |                   |     |             |     |              |   |  |   |  |
| HART   | BEVI   | IOGP                      | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS) |     |             |     |              |   |  |   |  |
| <i>Sofortige Zündung, bedingte Wahrscheinlichkeit</i>  |  |                           |                                      |                            |                |                   |     |             |     |              |   |  |   |  |
| Kalter BLEVE: P=0.8<br>(gemäss SAVE 1995 und 2006)<br><br>Warmer BLEVE (nur bei gemischten Zügen): P = 0.8<br>Berechnung des Anteils warmer BLEVE anhand Zuggeschwindigkeit und – zusammensetzung gemäss SAVE 2006 (abweichend vom Purple Book)<br>Parameter Berechnung Anteil warmer BLEVE:<br>Geschwindigkeit<br>Anzahl Wagen mit brennbaren Flüssigkeiten im Zug<br>Anzahl Wagen mit brennbaren Gasen<br>Mittlere Gesamtzahl Wagen<br>Anteil Störfallrelevante Stoffe<br>Mittlere Zuglänge (20 Wagen) | Sofortige Zündung Behälter stationäre Betriebe:<br><table border="1"> <thead> <tr> <th>Source term Instantaneous</th> <th>Probability of direct ignition</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>&lt; 1,000 kg</td> <td>0.2</td> </tr> <tr> <td>1000 – 10,000 kg</td> <td>0.5</td> </tr> <tr> <td>&gt; 10,000 kg</td> <td>0.7</td> </tr> </tbody> </table> Sofortige Zündung Kesselwagen innerhalb stationärem Betrieb: P=0.8<br>Anteil BLEVE bei sofortiger Zündung: Behälter stationäre Betriebe: P=0.7<br>Transportbehälter: P=1 | Source term Instantaneous | Probability of direct ignition       | < 1,000 kg                 | 0.2            | 1000 – 10,000 kg  | 0.5 | > 10,000 kg | 0.7 | Keine Angabe | Sofortige Zündung bei Totalversagen (Zündung innert 20s): P=0.25<br>(verzögerte Zündung: P=0.1875, keine Zündung P= 0.5625) | Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves wird ein Standartwert von 0.8 eingesetzt. Für Anpassung der Werte wird im Manual auf BEVI verwiesen.<br><br>Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves wird ein Standartwert von 0.8 eingesetzt. Für Anpassung der Werte wird im Manual auf BEVI verwiesen. | Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. |  |
| Source term Instantaneous  | Probability of direct ignition   |                           |                                      |                            |                |                   |     |             |     |              |   |  |   |  |
| < 1,000 kg   | 0.2  |                           |                                      |                            |                |                   |     |             |     |              |   |  |   |  |
| 1000 – 10,000 kg   | 0.5  |                           |                                      |                            |                |                   |     |             |     |              |   |  |   |  |
| > 10,000 kg  | 0.7  |                           |                                      |                            |                |                   |     |             |     |              |   |  |   |  |

| Modul 4a: Zündung  |  |  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|--|--|--|---|---|---|---|-----|-------|-----|----------------|-----|---------------|------|------------------|------|-------------|-----------------|------|--------------------------------|-----|-------------------|----------------------|------------|------|-----|-------------------------|------|----------------------|------|--------------|---|---|---|--|
| Stand der Technik  |  |  |   | Software-Tools  |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| HART   | BEVI   | IOGP   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen  | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| <i>Verzögerte Zündung, bedingte Wahrscheinlichkeit</i>   |  |  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| Widersprüchliche Angabe:<br>HART: P=0.2<br>(gemäss SAVE 1995 und 2006)<br>Dokumentation RBM II:<br>P = 0.8 | Zündquellenanalyse, Werte für Expositionszeit der Gaswolke von 1 min:<br><table border="1"> <thead> <tr> <th>Source type</th> <th>Ignition source</th> <th>Probability of ignition</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td rowspan="5">Point source</td> <td>Adjacent process installation</td> <td>0.5</td> </tr> <tr> <td>Flare</td> <td>1.0</td> </tr> <tr> <td>Oven (outside)</td> <td>0.9</td> </tr> <tr> <td>Oven (inside)</td> <td>0.45</td> </tr> <tr> <td>Boiler (outside)</td> <td>0.45</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Line source</td> <td>Boiler (inside)</td> <td>0.23</td> </tr> <tr> <td>high-voltage cable (per 100 m)</td> <td>0.2</td> </tr> <tr> <td rowspan="3">Population source</td> <td>Motor vehicle, train</td> <td>see note 1</td> </tr> <tr> <td>Ship</td> <td>0.5</td> </tr> <tr> <td>Households (per person)</td> <td>0.01</td> </tr> <tr> <td>Offices (per person)</td> <td>0.01</td> </tr> </tbody> </table> Motorfahrzeug: P=0.4 in einer min (Standardwerte für Strassen: Geschwindigkeit 80 km/h, 1500 Fahrzeuge/h)<br>Zug: P=0.8 in einer min (Standardwerte für Bahnlinien: Geschwindigkeit 80 km/h, 8 Züge/h) | Source type  | Ignition source   | Probability of ignition   | Point source  | Adjacent process installation   | 0.5 | Flare | 1.0 | Oven (outside) | 0.9 | Oven (inside) | 0.45 | Boiler (outside) | 0.45 | Line source | Boiler (inside) | 0.23 | high-voltage cable (per 100 m) | 0.2 | Population source | Motor vehicle, train | see note 1 | Ship | 0.5 | Households (per person) | 0.01 | Offices (per person) | 0.01 | Keine Angabe | verzögerte Zündung bei Totalversagen (Zündung innert 20s): P=0.1875<br>(sofortige Zündung: P=0.25, keine Zündung P= 0.5625) | Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves wird ein Standartwert von 0.8 eingesetzt. Für Anpassung der Werte wird im Manual auf BEVI verwiesen. | Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. |  |
| Source type  | Ignition source  | Probability of ignition  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| Point source   | Adjacent process installation  | 0.5  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|  | Flare  | 1.0  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|  | Oven (outside)   | 0.9  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|  | Oven (inside)  | 0.45   |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|  | Boiler (outside)   | 0.45   |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| Line source  | Boiler (inside)  | 0.23   |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|  | high-voltage cable (per 100 m)   | 0.2  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| Population source  | Motor vehicle, train   | see note 1   |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|  | Ship   | 0.5  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
|  | Households (per person)  | 0.01   |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| Offices (per person)   | 0.01   |  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| <b>Kontinuierliche Freisetzung</b>   |  |  |   |   |   |   |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |
| HART relativer Anteil kontinuierlich (zu sofortig) P = 0.6   | BEVI Speichertanks:<br>relativer Anteil Freisetzung gesamter Inhalt innert 10 min (an Total Freisetzungen) P = 0.045<br>relativer Anteil Kontinuierliche Freisetzung aus Leck mit 10mm Durchmesser (an Total Freisetzungen): P=0.91<br>BEVI Druck-Kesselwagen relativer Anteil kontinuierlich durch grössten Anschluss (an Total Freisetzungen) P = 0.5  | IOGP LPG Kesselwagen relativer Anteil kontinuierlich (an Total Lecks in der Tankhülle) P = 0.9 | Unterscheidung in sofortige und kontinuierliche Freisetzung bei Erdgashochdruckleitungen unpassend. | Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves wird ein Standartwert von 0.8 eingesetzt. Für Anpassung der Werte wird im Manual auf BEVI verwiesen. | Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. | Zündzeitpunkt und -ort sind frei wählbar. Zündquellen können Punkte, Linien, Flächen oder Volumen sein. Mehrfache Zündquellen sind nicht möglich. Die aktuelle Version von FLACS ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. Es ist jedoch bei Gexcon AS das Modul FLACS Risk in Entwicklung, welches auch Wahrscheinlichkeitsbetrachtungen ermöglicht. Release wäre im 2016 vorgesehen gewesen. Die FLACS-Rechnungen liefern Outputparameter, welche für die Zündungsanalysen verwendet werden können, z.B. Neu im zündfähigen Bereich liegendes Volumen pro Zeitabschnitt |     |       |     |                |     |               |      |                  |      |             |                 |      |                                |     |                   |                      |            |      |     |                         |      |                      |      |              |   |   |   |  |

| Modul 4a: Zündung  |  |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|--|--|--|---|--|---|---|-----|------------|-----|---|---|---|---|------------------|------|-------------|-----------------|------|--------------------------------|-----|----------------------|------------|-------------------|------|-----|-------------------------|------|--|----------------------|------|---|---|---|---|--|
| Stand der Technik  |  |  |   | Software-Tools   |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| HART   | BEVI   | IOGP                                   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen  | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| <i>Sofortige Zündung, bedingte Wahrscheinlichkeit</i>  |  |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| P=0.5<br>(gemäss SAVE 1995 und 2006)   | Sofortige Zündung Behälter stationäre Betriebe:<br><table border="1"> <thead> <tr> <th>Source term</th> <th>Probability of direct ignition</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>&lt; 10 kg/s</td> <td>0.2</td> </tr> <tr> <td>10 – 100 kg/s</td> <td>0.5</td> </tr> <tr> <td>&gt; 100 kg/s</td> <td>0.7</td> </tr> </tbody> </table> Sofortige Zündung Kesselwagen innerhalb stationärem Betrieb:<br>P=0.1   | Source term                            | Probability of direct ignition  | < 10 kg/s  | 0.2   | 10 – 100 kg/s   | 0.5 | > 100 kg/s | 0.7 | Sofortige Zündung Speicheranlagen<br>LPG: P=0.001 | Sofortige Zündung bei Totalversagen (Zündung innert 20s): P=0.25<br>(verzögerte Zündung: P=0.1875, keine Zündung P= 0.5625) | Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves wird ein Standartwert von 0.8 eingesetzt. Für Anpassung der Werte wird im Manual auf BEVI verwiesen. | Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| Source term  | Probability of direct ignition   |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| < 10 kg/s  | 0.2  |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| 10 – 100 kg/s  | 0.5  |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| > 100 kg/s   | 0.7  |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| <i>Verzögerte Zündung, bedingte Wahrscheinlichkeit</i>   |  |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| P=0.5<br>(gemäss SAVE 1995 und 2006)   | Zündquellenanalyse, Werte für Expositionszeit der Gaswolke von 1 min:<br><table border="1"> <thead> <tr> <th>Source type</th> <th>Ignition source</th> <th>Probability of ignition</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td rowspan="5">Point source</td> <td>Adjacent process installation</td> <td>0.5</td> </tr> <tr> <td>Flare</td> <td>1.0</td> </tr> <tr> <td>Oven (outside)</td> <td>0.9</td> </tr> <tr> <td>Oven (inside)</td> <td>0.45</td> </tr> <tr> <td>Boiler (outside)</td> <td>0.45</td> </tr> <tr> <td rowspan="3">Line source</td> <td>Boiler (inside)</td> <td>0.23</td> </tr> <tr> <td>high-voltage cable (per 100 m)</td> <td>0.2</td> </tr> <tr> <td>Motor vehicle, train</td> <td>see note 1</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Population source</td> <td>Ship</td> <td>0.5</td> </tr> <tr> <td>Households (per person)</td> <td>0.01</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Offices (per person)</td> <td>0.01</td> </tr> </tbody> </table> Motorfahrzeug: P=0.4 in einer min (Standardwerte für Strassen: Geschwindigkeit 80 km/h, 1500 Fahrzeuge/h)<br>Zug: P=0.8 in einer min (Standardwerte für Bahnlinien: Geschwindigkeit 80 km/h, 8 Züge/h) | Source type                            | Ignition source   | Probability of ignition  | Point source  | Adjacent process installation   | 0.5 | Flare      | 1.0 | Oven (outside)                                    | 0.9   | Oven (inside)   | 0.45  | Boiler (outside) | 0.45 | Line source | Boiler (inside) | 0.23 | high-voltage cable (per 100 m) | 0.2 | Motor vehicle, train | see note 1 | Population source | Ship | 0.5 | Households (per person) | 0.01 |  | Offices (per person) | 0.01 | Für kleine LPG Speicher: $0 < P < 0.6$ (Kurve)<br> | verzögerte Zündung bei Totalversagen (Zündung innert 20s): P=0.1875<br>(sofortige Zündung: P=0.25, keine Zündung P= 0.5625) | Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves wird ein Standartwert von 0.8 eingesetzt. Für Anpassung der Werte wird im Manual auf BEVI verwiesen. | Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. |  |
| Source type  | Ignition source  | Probability of ignition                |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| Point source   | Adjacent process installation  | 0.5                                    |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | Flare  | 1.0                                    |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | Oven (outside)   | 0.9                                    |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | Oven (inside)  | 0.45                                   |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | Boiler (outside)   | 0.45                                   |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| Line source  | Boiler (inside)  | 0.23                                   |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | high-voltage cable (per 100 m)   | 0.2                                    |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | Motor vehicle, train   | see note 1                             |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| Population source  | Ship   | 0.5                                    |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | Households (per person)  | 0.01                                   |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
|  | Offices (per person)   | 0.01                                   |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| <b>Umgebungsparameter (Vorhandensein Zündquelle, Temperatur)</b>   |  |  |   |  |   |   |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |
| Umgebungsparameter werden nur beim warmen BLEVE berücksichtigt (Zugszusammensetzung, Geschwindigkeit etc.), sonst generische Werte (siehe sofortige Zündung bedingte Wahrscheinlichkeit) | Abhängig von Austrittsrate, freigesetzter Masse, Zündquellenanalyse, siehe oben  | Abhängig von Austrittsrate, siehe oben | Keine Berücksichtigung der Umgebungsparameter bei Totalversagen von Transportleitungen. | Zündung ist nicht Bestandteil von Effects. In Riskcurves werden Die Umgebungsparameter werden in der Software nicht direkt berücksichtigt. Jedoch können sie durch Anpassung der Zündwahrscheinlichkeiten anhand der BEVI-Zündquellenanalyse in die Berechnungen einfließen. | Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. | FLACS ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. |     |            |     |   |   |   |   |                  |      |             |                 |      |                                |     |                      |            |                   |      |     |                         |      |  |                      |      |   |   |   |   |  |

## **3.4.1 Fazit Modul 4a (Zündung)**

### **3.4.1.1 Modellierung**

#### *3.4.1.1.1 Stand der Technik*

Es ist kein eigentlicher Stand der Technik feststellbar.

Für die sofortige Freisetzung mit sofortiger Zündung gibt es eine gute Übereinstimmung bei den holländischen Ansätzen HART und BEVI bei den Kesselwagen und mit grossen stationären Behältern. Für die sofortige Freisetzung mit verzögerter Zündung liefert BEVI einen interessanten Ansatz zur Zündquellenanalyse. Bei verzögerten Zündungen und sofortiger Zündung nach kontinuierlicher Freisetzung ist die Zündwahrscheinlichkeit sehr situationsspezifisch festzulegen. Daher sind die hierfür eingesetzten Werte nur beschränkt miteinander vergleichbar.

Bei kontinuierlicher Freisetzung mit verzögerter Zündung wird bei IOGP die Zündwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit zur Freisetzungsrates gesetzt. Diese Abhängigkeit wurde z.B. auch bei neueren Ansätzen bei Erdgashochdruckanlagen beobachtet. Der Stand der Technik könnte deshalb in diese Richtung gehen.

#### *3.4.1.1.2 Effects / Riskcurves*

Riskcurves (Zündung ist nicht Bestandteil von Effects) verwendet plausible Standardwerte. Für eine weitergehende Analyse der Zündwahrscheinlichkeit wird auf BEVI verwiesen.

#### *3.4.1.1.3 Phast*

Phast ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen. Das entsprechende Risikoanalysetool ist Safeti von DNV GL (Pendant zu Riskcurves).

#### *3.4.1.1.4 FLACS*

Die aktuelle Version von FLACS ist ein reines Konsequenzmodellierungstool, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen.

### **3.4.1.2 Umgebungsparameter**

#### *3.4.1.2.1 Stand der Technik*

Kein eigentlicher Stand der Technik feststellbar, uneinheitliche Berücksichtigung verschiedener Umgebungsparameter. Eine Berücksichtigung der Austrittsrates taucht sowohl im BEVI wie bei IOGP auf, allerdings bei BEVI bei der sofortigen und bei IOGP bei der verzögerten Zündung

#### *3.4.1.2.2 Effects / Riskcurves*

In Riskcurves (Zündung ist nicht Bestandteil von Effects) können Umgebungsparameter nicht direkt eingegeben werden, wohl aber im Wert der Zündwahrscheinlichkeit berücksichtigt werden.

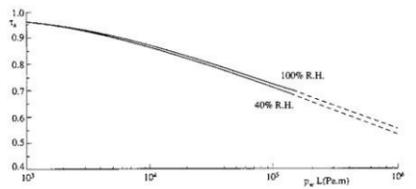
#### *3.4.1.2.3 Phast*

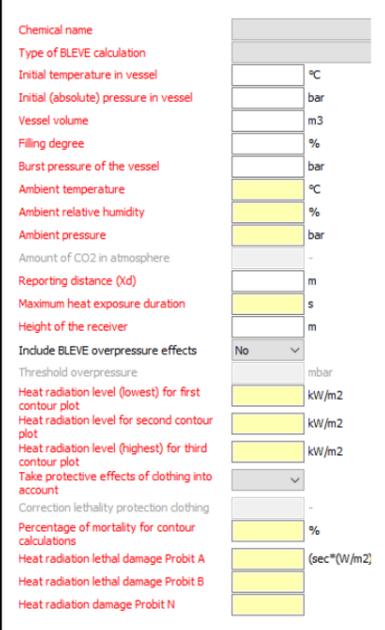
Da Phast ein reines Konsequenzmodellierungstool ist, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen, können dazu auch keine Umgebungsparameter eingegeben werden. Das entsprechende Risikoanalysetool ist Safeti von DNV GL (Pendant zu Riskcurves).

#### *3.4.1.2.4 FLACS*

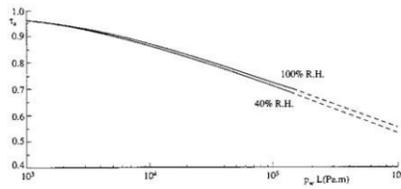
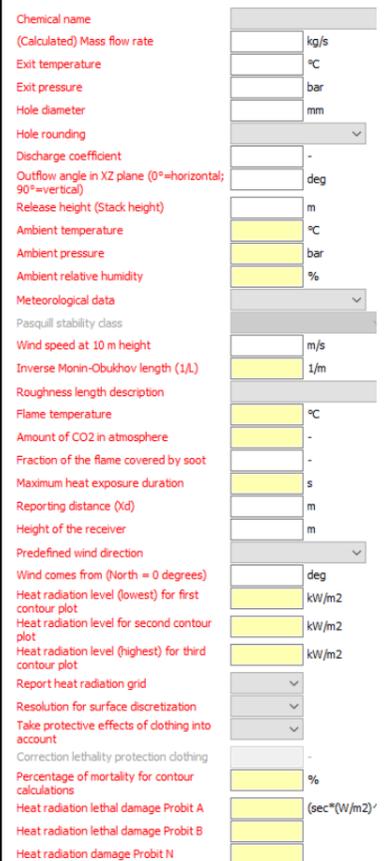
Da die untersuchte Version von FLACS ein reines Konsequenzmodellierungstool ist, in dem Wahrscheinlichkeiten wie die Zündwahrscheinlichkeit keine Rolle spielen, können dazu auch keine Umgebungsparameter eingegeben werden.

### 3.5 Modul 4b: Abbrand

| Modul 4b: Abbrand  |  |  |  |   |  |
|--|--|--|--|---|--|
| Stand der Technik  |  |  | Software-Tools   |   |  |
| HART   | Saphedra und weitere   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen   | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <b>Berechnung Branddimension (Abmessung, Strahlung): BLEVE</b>   |  |  |  |   |  |
| <p>Berechnung mit <b>Feuerballmodell Yellow Book 3rd Edition</b>:</p> <p>Abmessungen Feuerball</p> $R = 3.24 \cdot M^{0.325} \text{ [m]}$<br>$h = 2R$<br>$t = 0.852 \cdot M^{0.26} \text{ [s]}$<br>M = Masse Feuerball [kg]<br>R = Feuerballradius<br>h = Höhe des Feuerballzentrums über Boden<br>t = Abbranddauer Feuerball <p>Der Anteil des Tankinhalts, der in den Feuerball gelangt, entspricht dem dreifachen adiabatischen Flash beim Versagensdruck, max. 100% des Tankinhalts. <b>gemäss Bevi 2009</b>, Bevi verweist auf HSE Research Report 333, 2005, Abweichend vom Purple Book. Berechnung adiabatischer Flash im Bevi nicht dokumentiert)</p> <p>Strahlungsintensität an einem Punkt mit Abstand r zum BLEVE:</p> $q = \tau \cdot E \cdot F \text{ [kW/m}^2\text{]}$ <p>Widersprüchliche Angaben für F = View Factor in HART und RBM II:</p> <p>HART: <math>F = R^2/r^2 \text{ [-]}</math><br/>                     RBM II: <math>F = (2R)^2/r^2 \text{ [-]}</math></p> <p><math>\tau</math> (Transmissivität) gemäss <b>Yellow Book 3rd edition 2005</b> Abb. 6.4:</p>  <p>Berechnung Oberflächenabstrahlung E (Quelle der Methode im HART nicht angegeben):</p> $\Pi \cdot D^2 \cdot E \cdot t = F_s \cdot M \cdot H_c$ | <p><b>Saphedra Gap Analysis</b></p> <p>Es können die Feuerballmodelle gemäss Yellow Book 3rd edition, Lees' handbook oder CCPS Guidelines verwendet werden. Auf die Unterschiede zwischen den Modellen wird nicht eingegangen.</p> <p><b>Saphedra Identification of existing tools</b></p> <p>4 Modelle im full spreadsheet aufgelistet: <b>HSE model</b> (siehe Spalte Phast), <b>TNO model</b> (Yellow Book 3<sup>rd</sup> Edition, siehe Spalte HART), <b>SFPE model</b>, <b>Martinsen and Marx model</b></p> <p><b>HSE, TNO</b> und <b>SFPE</b> sind sehr ähnlich. Es sind statische Feuerballmodelle, d.h. die Variation der Grösse des Feuerball-Strahlungskörpers und der Aufstiegshöhe wird nicht berücksichtigt. Wichtigster Unterschied innerhalb dieser Gruppe ist, dass beim <b>HSE</b> und <b>SFPE</b> Modell der kugelförmige Strahlungskörper des Feuerballs auf der Erdoberfläche steht, während beim <b>TNO Modell</b> die Höhe gemessen zum Mittelpunkt der Kugel dem zweifachen Radius der Kugel entspricht.</p> <p>Das <b>Martinsen und Marx</b> model ist ein dynamisches Modell, welches die Variation der Grösse des Feuerball-Strahlungskörpers und das thermische Aufstiegsverhalten abbildet.</p> <p>Bei allen vier Modellen wird der Anteil des Tankinhalts, der in den Feuerball gelangt, mit dem dreifachen adiabatischen Flash bestimmt.</p> | <p>Ein BLEVE Szenario gibt es bei Erdgashochdruckleitungen nicht.</p> <p>Es wird aber bei Totalversagen von Transportleitungen mit sofortiger Zündung ein Feuerball berechnet. Die Berechnungsweise für diesen Feuerball wurde vom BLEVE-Szenario aus dem Rahmenbericht Flüssiggas-Tankanlagen übernommen.</p> <p>Der Feuerball wird als stehende Kugel auf der Erdoberfläche mit Radius <math>r_f</math> angenommen.</p> $r_f = 2.75M_g^{1/3}$<br>$M_g$ : in den ersten 20s aus der Transportleitung freigesetzte Gasmenge <p>Abbranddauer <math>t_{FE}</math>:</p> $t_{FE} = 0.38M_g^{1/3}$ <p>Zur Berechnung der Strahlungsintensität an einem Punkt mit Abstand r zum Feuerball wird dieselbe Gleichung</p> $q = \tau \cdot E \cdot F \text{ [kW/m}^2\text{]}$ <p>wie bei HART verwendet, allerdings mit anderen Werten für <math>\tau</math>, E, und F. Für E wird ein konstanter Wert von 210 kW/m<sup>2</sup> verwendet.</p> <p>Berechnung von <math>\tau</math>:</p> $T = 0.96 - 0.12 \log(L - r_f)$ <p>L: Entfernung zum Brandzentrum (M)<br/> <math>r_f</math>: Radius des Feuerballs (m)</p> <p>Die Gleichung findet sich fast identisch im Rahmenbericht Flüssiggastankanlagen, statt der Konstanten 0.96 wird aber die Konstante 1 verwendet.</p> <p>F wird gemäss Yellow Book 2nd edition berechnet, Gleichung siehe Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen.</p> | <p>Es kann zwischen dem „Static Mode“ (<b>Yellow Book 3rd Edition</b> Kapitel 6.5.7) und dem „Dynamic“ Modell (<b>Martinsen et Marx, 1999</b>) – welches die Veränderung des Feuerballes mit der Zeit berücksichtigt, gewählt werden.</p> <p><b>Static Mode</b></p> <p>Berechnung für den Feuerballradius analog zu HART:</p> $r_{fb} = 3.24 \cdot M^{0.325} \text{ [m]}$<br>$h = 2R$<br>$t = 0.852 \cdot M^{0.26} \text{ [s]}$<br>M = Masse Feuerball [kg]<br>$r_{fb}$ = Feuerballradius<br>h = Höhe des Feuerballzentrums über Boden<br>t = Abbranddauer Feuerball <p>Es wird davon ausgegangen, dass die gesamte freigesetzte Menge LPG mit dem Feuerball abbrennt.</p> $M = V_{rel} \cdot r_{mat} \text{ [kg]}$<br>M = Masse Feuerball [kg]<br>$V_{rel}$ = Volumen des bei Totalversagen freigesetzten LPG [m <sup>3</sup> ]<br>$r_{mat}$ = Dichte des LPG im Tank [kg/m <sup>3</sup> ] <p>Strahlungsintensität an einem Punkt mit Abstand X zum BLEVE:</p> $q'' = t_a \cdot SEP_{act} \cdot F_{view} \text{ [J/m}^2\text{s]}$<br>$t_a$ entspricht T bei HART<br>$F_{view} = (r_{fb}/X)^2$<br>$SEP_{act} = DH_c \cdot m \cdot F_s / (4 \cdot p \cdot r_{fb}^2 \cdot t)$<br>Unter Berücksichtigung, dass $4 \cdot r_{fb}^2$ im Yellow Book D <sup>2</sup> bei HART entsprechen, ist die Berechnung der Strahlungsintensität identisch mit HART. <p><b>„Dynamic“ Modell</b></p> $t = 0.9 \cdot M^{0.25} \text{ [s]}$ | <p>Phast stellt das <b>statische Yellow-Book-Modell von TNO</b> (siehe Spalte Effects), das britische <b>HSE-Modell</b> sowie eine Kombination der beiden zur Verfügung.</p> <p>Dynamische Modelle stehen in Phast keine zur Verfügung, da die statischen Modelle konservativer sind.</p> <p>Beim <b>HSE Modell</b> wird angenommen, dass der kugelförmige Strahlungskörper auf der Erdoberfläche steht, während beim TNO Modell ein Aufsteigen der Flamme angenommen wird.</p> <p>Im Vergleich zum <b>HSE Modell</b> ergibt das <b>TNO Modell</b> in der Regel grössere Feuerbälle, längere Abbranddauern, höheres Aufsteigen, jedoch eine tiefere Oberflächenabstrahlung. Deshalb steht als konservative Default-Variante eine Kombination der beiden Modelle in Phast zur Verfügung: <b>TNO-Modell</b> mit Oberflächenabstrahlung des <b>HSE-Modells</b></p> <p>Der Anteil des Tankinhalts, der abbrennt, wird gleich wie bei <b>HART</b> bestimmt.</p> <p>Nachfolgend wird nur das HSE Modell beschrieben, das TNO Modell entspricht dem Static Mode bei Effects</p> <p><b>HSE Model</b></p> $r_{Flame} = 2.9M_{Flammable}^{0.333}$<br>$r_{Flame}$ = Feuerballradius $t_{Flame} = \begin{cases} 0.45M_{Flammable}^{0.333} & M_{Flammable} < 37000 \\ 2.59M_{Flammable}^{0.167} & M_{Flammable} \geq 37000 \end{cases}$<br>$t_{Flame}$ = Abbranddauer des Feuerballs<br>$H_{Flame} = r_{Flame}$<br>$H_{Flame}$ = Höhe des Feuerballzentrums über Boden <p>Für beide Modelle, TNO und HSE gilt:</p> | <p>Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround</p> |

| Modul 4b: Abbrand  |  |  |  |   |  |
|--|--|--|--|---|--|
| Stand der Technik  |  |  | Software-Tools   |   |  |
| HART   | Saphedra und weitere   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen   | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <p><math>M \cdot H_c</math> = Verbrennungsenergie (im HART nicht weiter dokumentiert)</p> <p><math>F_s = 0.00325 \cdot p^{0.32}</math></p> <p><math>F_s</math> = Anteil der als Strahlung freigesetzten Energie</p> <p><math>P</math> = Dampfdruck in Pa</p> <p><math>P</math> beim kalten BLEVE = Dampfdruck bei der normalen Umgebungstemperatur.</p> <p><math>P</math> [bar] beim warmen BLEVE = <math>1.4 \cdot [P_v(T=308\text{ K}) + 1.7]</math></p> <p><math>P_v(T=308\text{ K})</math> = Überdruck bei 308 K</p> |  |  | <p><math>D = 5.8 \cdot M^{1/3}</math> [m]</p> <p><math>D(t) = 8.664 \cdot M^{1/4} \cdot t^{1/3}</math></p> <p><math>q_s = 0.0133 \cdot f \cdot H_c \cdot M^{1/12}</math> [kW/m<sup>2</sup>]</p> <p>t = Abbranddauer Feuerball</p> <p>D = maximaler Durchmesser des Feuerballs</p> <p><math>q_s</math> = SEP<sub>act</sub> des statischen Modells</p> <p>f entspricht <math>F_s</math> des statischen Modells</p>   | $E_f = \frac{f_s M_{flame} \Delta H_c}{4\pi r_{flame}^2 t_{flame}}$ <p>Where:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><math>E_f</math> = Surface emissive power of the flame [W/m<sup>2</sup>]</li> <li><math>f_s</math> = Fraction of total available heat energy radiated by the flame [-]</li> <li><math>\Delta H_c</math> = Net available heat for radiation [J/kg]</li> </ul> $f_s = 0.27 \left( \frac{P_{Sat}}{10^6} \right)^{0.32}$ <p>Beim HSE Modell gilt:</p> $\Delta H_c = \Delta H_{Comb}$ <p>Beim TNO Modell gilt:</p> $\Delta H_c = \Delta H_{Comb} - [\min(1, f_{vapour} f_{correction}) - f_{vapour}] [\Delta H_{vap} + C_{p,liq} (T_{flame} - T_{amb})]$ <p>Where:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><math>\Delta H_{Comb}</math> = Heat of combustion of the fuel [J/kg]</li> <li><math>\Delta H_{vap}</math> = Latent heat of vaporisation of the fuel at its boiling point [J/kg]</li> <li><math>C_{p,liq}</math> = Specific heat capacity of the fluid at constant pressure [J/kg/K]</li> <li><math>T_{flame}</math> = Flame temperature (~2250K) [K]</li> <li><math>T_{amb}</math> = Ambient temperature [K]</li> </ul> |  |
| Berechnung Branddimension (Abmessung, Strahlung): Gaswolkenbrand   |  |  |  |   |  |
| <p>Gaswolkenbrand <math>P = 0.6</math> (Anteil an verzögerter Zündung)</p> <p>Umfang des Brandes: Distanz zur unteren Zündgrenze, keine Berechnung der Hitzestrahlung ausserhalb der Gaswolke</p>  | <p><b>Saphedra Gap Analysis:</b></p> <p>Für detailliertere Modelle zur Berechnung der Hitzestrahlung ausserhalb der Flamme wird auf Lees 1995 verwiesen.</p> <p>Benchmark-Berechnungen mit Experimenten mit unverdämmten Erdgaswolken und dem CFD Code CFX 5.7 ergaben ziemlich gute Übereinstimmungen</p> | <p>Berechnung Branddimension Gaswolkenbrand im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht definiert.</p> | <p>Laut Manual von Effects wird in der Funktion „Flash Fire“, die den Gaswolkenbrand beschreibt, das <b>Modell des Purple Books</b> (ohne exaktere Referenzierung) angewendet. Die Berechnungsschritte sind aus dem Purple Book aber nicht ersichtlich.</p> <p>Für die Berechnungen wird in Effects davon ausgegangen, dass nach einer sofortigen Freisetzung eine verzögerte Zündung stattfindet. Eine kontinuierliche Freisetzung mit Gaswolkenbrand wird in Effects nicht direkt berücksichtigt, jedoch kann alternativ die Distanz zur unteren</p> | <p><b>LFL Footprint Methode:</b></p> <p>Umfang des Brandes: Distanz zur unteren Zündgrenze, keine Berechnung der Hitzestrahlung ausserhalb der Gaswolke</p> <p>Zusätzliche Berechnung eines Immediate Flash Fire, d.h. bei kurzen oder sofortigen Freisetzungen wird der Zustand der Gaswolke bestimmt, wenn die durchschnittliche Konzentration unter die obere Zündgrenze absinkt und theoretisch die gesamte Wolke zündbar wird.</p>   | <p>Berechnung mit dem FLACS CFD Code mit Flammenmodell für vorgemischten Brennstoff und Abbrandgeschwindigkeitsmodell für laminare und turbulente Abbrandgeschwindigkeit (Gleichungen siehe Manual).</p> <p><b>Input</b></p> <p>Die sich aus einer Gasausbreitungsberechnung ergebende Gaswolke kann zu einem beliebigen Zeitpunkt an einem beliebigen Ort gezündet werden und der Abbrandvorgang in 4D (räumlich und zeitlich dynamisch) beobachtet werden. Geometrie/Hindernisse</p> |

| Modul 4b: Abbrand  |  |  |  |   |  |
|--|--|--|--|---|--|
| Stand der Technik  |  |  | Software-Tools   |   |  |
| HART   | Saphedra und weitere   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen   | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
|  | <p><b>Saphedra Identification of existing tools</b></p> <p>Modelle: LFL footprint model (wie bei HART), CCPS model (berücksichtigt Hitzestrahlung)</p> |  | <p>Zündgrenze nach einer kontinuierlichen Freisetzung berechnet werden.</p> <p><u>Input</u></p> <p>Chemical name <input type="text"/></p> <p>Initial temperature in equipment <input type="text"/> °C</p> <p>Initial (absolute) pressure in vessel <input type="text"/> bar</p> <p>Vessel volume <input type="text"/> m3</p> <p>Ambient temperature <input type="text"/> °C</p> <p>Ambient pressure <input type="text"/> bar</p> <p><u>Output</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Temperatur des freigesetzten Stoffes nach dessen Ausdehnung</li> <li>- Radius des Feuerballs</li> </ul>   |   | <p>werden berücksichtigt und müssen definiert werden (bzw. von der Gasausbreitungsberechnung übernommen werden). Alternativ zur vorgängigen Durchführung einer Gasausbreitungsberechnung kann eine Gaswolke definiert (Ausdehnung, Brennstoff, Mischungsverhältnis) und gezündet werden.</p> <p><u>Output</u></p> <p>Diverse Parameter an definierten Messpunkten oder an jedem Punkt im gesamten Simulationsvolumen aufgelöst in beliebiger zeitlicher Auflösung, z.B.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Temperatur</li> <li>- Massenanteil Abbrandprodukt</li> <li>- Abbrandrate</li> </ul> <p>Die Temperatur und der Massenanteil Abbrandprodukt können als Hinweis auf die Abmessung der Flamme verwendet werden.</p> |
| Berechnung Branddimension: UVCE (unconfined vapor cloud explosion)   |  |  |  |   |  |
| <p>UVCE P = 0.4 (Anteil an verzögerter Zündung, unabhängig von Umgebung)</p> <p>Berechnung Branddimension wie Gaswolkenbrand</p> |  | <p>Berechnung Branddimension UVCE im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht definiert.</p> | <p>Laut Manual von Effects wird in Effects (und Riskcurves) das <b>Modell des Purple Books</b> (ohne exaktere Referenzierung) angewendet. Die Berechnungsschritte sind aus dem Purple Book aber nicht ersichtlich.</p> <p>Anhand dieses Modells kann die Distanz zu unteren Zündgrenze errechnet werden. Das Multi-Energy Modell ist bestimmt für die Berechnung des Druckes und liefert keine Angaben zu den Branddimensionen.</p> <p>Chemical name <input type="text"/></p> <p>Initial temperature in equipment <input type="text"/> °C</p> <p>Initial (absolute) pressure in vessel <input type="text"/> bar</p> <p>Vessel volume <input type="text"/> m3</p> <p>Ambient temperature <input type="text"/> °C</p> <p>Ambient pressure <input type="text"/> bar</p> | <p>Keine explizite Berechnung der Branddimension für eine UVCE (die Modelle, die für UVCE verwendet werden können, berechnen nur den Druck). D.h. es muss die Abmessung des Gaswolkenbrands verwendet werden (LFL Footprint).</p> | <p>Wie Gaswolkenbrand</p>  |

| Modul 4b: Abbrand   |  |  |  |   |   |
|---|--|--|--|---|---|
| Stand der Technik   |  |  | Software-Tools   |   |   |
| HART  | Saphedra und weitere   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen   | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)   |
| <b>Berechnung Branddimension: Jet Fire</b>  |  |  |  |   |   |
| <p>Horizontale Fackel in Zylinderform<br/>                     Berechnung der Fackellänge gemäss <b>VROM LPG Integraal 1983</b><br/> <math>L = 18.8 \cdot m^{1/3}</math> [m]<br/> <math>L/D = 8</math><br/> <math>L =</math> Fackellänge<br/> <math>D =</math> Fackeldurchmesser<br/> <math>m =</math> Austrittsrate abzüglich Rainout [kg/s]<br/>                     Berechnung des Wärmeflusses q:<br/> <math>q = \tau \cdot E \cdot F</math><br/> <math>E = 180 \text{ kW/m}^2</math><br/> <math>\tau</math> gemäss Yellow Book 3rd edition 2005 Abb. 6.4</p>  <p>View Factor F abweichend vom Yellow Book (Grund?), Berechnung komplex, deshalb hier nicht wiedergegeben (siehe HART Bijlagen 2014 80ff, RBM II Achtergronddocument 2.0 2011 90ff)<br/>                     Parameter:<br/>                     - Durchmesser und Länge der Flamme<br/>                     - Ablenkungswinkel<br/>                     - Abstand Flamme-Objekt<br/>                     - Orientierung des Objekts zur Flamme</p> | <p><b>Saphedra Identification of existing tools:</b><br/>                     Standard-<b>Chamberlain-Modelle</b> (<b>Chamberlain model</b> für Gas Jet Fires, <b>Cook Model</b> für Gas- und Zweiphasen Jet fires) können bei horizontalen Flammen den thermischen Auftrieb nicht abbilden. Dafür sind spezialisierte Modelle nötig, z.B. <b>Barker model</b> (<b>Barker model</b>: Nur anwendbar für horizontale LPG-Zweiphasen-Jet-Fires (wahrsch. Druckfehler, PLG statt LPG))<br/>                     Weitere Modelle:<br/>                     - <b>Johnson model</b>: für horizontale Gas-Jet fires<br/>                     - <b>API 521</b>: Punktquellenmodell nur für weit entfernte, vertikale Gas-Jet-Fires<br/>                     - <b>Cracknell model</b>: für Gas-, Flüssigphasen- und Zweiphasen Jet Fires.<br/>                     Das Saphedra full spreadsheet gibt nur für das <b>Cook Model</b> (Bennet, Selby &amp; Toloczko 1995) und das <b>Johnson model</b> (Johnson 1990) eine Quelle zur Validierung an. Das Saphedra full spreadsheet ist gemäss Angabe von TNO nicht vollständig. Allenfalls sind relevante Dokumente zur Validität der verschiedenen Modelle darin nicht aufgeführt. Aufgrund des Saphedra full spreadsheet muss deshalb die Validität eines Modells als Kriterium für den Stand der Technik sehr vorsichtig verwendet werden.</p> | <p>Gemäss Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen werden keine eigentlichen Jet Fires berechnet. Es wird bei verzögerter Zündung bei einem Totalversagen erdverlegter Transportleitungen ein Fackelbrand berechnet, der senkrecht auf der Leckstelle steht. Dabei kommt ein Zylinder-Flammenstrahl-Modell zum Einsatz, Gleichungen siehe Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen</p> | <p>Es werden die Modelle von <b>Chamberlain</b> angewendet. Das Modell nach Cook ist zwar im Manual erwähnt, kann aber in der Software nicht ausgewählt werden.</p>  | <p>In Phast stehen 3 semi-empirische Modelle für Jet Fires zur Verfügung:<br/>                     - <b>Chamberlain</b> (für vertikal bis max. 45° geneigte Austritte in der Gasphase)<br/>                     - <b>Cook</b> (Variante des Chamberlain Modells für Austritte in der Flüssigphase und Zweiphasen-Austritte)<br/>                     - <b>Johnson</b> (für (nahezu) horizontale Austritte in der Gasphase)<br/>                     Alle drei Modelle berücksichtigen den Einfluss der Windgeschwindigkeit, Seitenwind und der Luftmischung in den Fluidstrahl.<br/>                     Alle drei Modelle modellieren die Flamme als konischen Strahlungskörper. Die Berechnung des Austritts erfolgt in Phast mit dem <b>DISC</b> Modell und die nachfolgende Expansion mit dem <b>ATEX</b> Modell.</p> <p><b>Eingabeparameter</b><br/>                     Wie <b>DISC</b> Modell<br/>                     Zusätzlich im Standalone Modus:<br/>                     - Neigung des Jets in Bezug zur Horizontalen<br/>                     - Winkel zum Wind</p> <p><b>Output</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Flame emissive power</li> <li>Fraction of emissivity</li> <li>Jet velocity</li> <li>Flame length</li> <li>Frustum length</li> <li>Frustum base width</li> <li>Frustum tip width</li> <li>Frustum lift off distance</li> <li>Flame length in still air</li> <li>Hole to flame angle</li> <li>Expanded Diameter</li> <li>Plane angular rotation</li> </ul> <p>Sowie diverse Werte zur Strahlungsintensität, Distanz zu bestimmter Strahlungsintensität, Strahlungsdosis, Letalität</p> | <p>CFD-Berechnung mit dem FLACS –Fire Simulator. Zurzeit können mit dem FLACS-Fire Simulator nur einphasige Austritte in der Gasphase simuliert werden. Simuliert werden können:<br/>                     - Jet fires im Freien<br/>                     - Jet fires im Seitenwind<br/>                     - Auf Hindernisse aufprallende Jet fires<br/>                     - Jet-Austritte mit verzögerter Zündung (Brand nach vorangegangener Gasausbreitung)<br/>                     - Jet fires in verdämmter Umgebung<br/>                     - Brände in Räumen (inkl. über- und unterbelüftete Situationen)<br/>                     Der Abbrandvorgang kann in 4D (räumlich und zeitlich dynamisch) beobachtet werden. Geometrie/Hindernisse werden berücksichtigt und müssen definiert werden.</p> |

| Modul 4b: Abbrand |                      |                                      |                            |  |   |
|-------------------|----------------------|--------------------------------------|----------------------------|--|---|
| Stand der Technik |                      |                                      | Software-Tools             |  |   |
| HART              | Saphedra und weitere | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)   |
|                   |                      |                                      |                            | <p><u>Validierung</u><br/>                     Die Modelle wurden umfangreich mit experimentellen Daten validiert, davon ein grosser Teil Propan.<br/>                     Die Modelle Cook und Chamberlain ergaben für vertikale Austritte in der Gasphase eine maximale Abweichung von den experimentellen Daten von 12.5% (mittlere Abweichung 5%). Beim Cook Modell weichen die Ergebnisse für die Flammenlänge und die Oberflächenabstrahlung bei Flüssig- und Zweiphasen-Austritten in der Regel nicht mehr als 30% von den experimentellen Daten ab. Das Johnson Modell weicht bei horizontalen Austritten in der Gasphase nicht bei der Flammenlänge nicht mehr als 10% von den Messwerten ab.<br/>                     Die Strahlungswerte weichen bei allen drei Modellen in der Regel nicht mehr als 40% von den Messungen ab.</p> <p>Zusätzlich steht im Standalone Modus ein API-Modell zur Verfügung, welches die Flamme als durch den Wind gebogene „Banane“ wiedergibt. Das Modell ist aber nicht weiter dokumentiert.</p> | <p><u>Gleichungen, Modelle:</u><br/>                     - Gleichungslöser für kompressible und inkompressible Strömung (Vereinfachende Annahme inkompressibler Strömung zur Reduktion der Berechnungszeit, zulässig bei Strömungen mit tiefer Machzahl &lt;0.3)<br/>                     - Standard k-e Turbulenzmodell<br/>                     - Abbrand (Turbulenz-Chemie-Interaktion):<br/>                     2 Modelle : Eddy Dissipation Concept (EDC, default/empfohlen), Mixed is Burnt (Annahme, dass Gemisch sobald es im zündbaren Bereich ist, verbrennt)<br/>                     - Zwei verschiedene Strahlungsmodelle : Discrete Transfer Model (DTM) und six-flux model. DTM ist das genauere Modell, hat aber lange Rechenzeiten. Das six-flux model ist sehr grob, dafür rascher berechnet.<br/>                     - 3 Strahlungseigenschaftenmodelle (Modelle für Absorption und Emission der von der Strahlung durchgangenen Gase): Hottel (1954), Yin et al (2013), Johansson</p> |

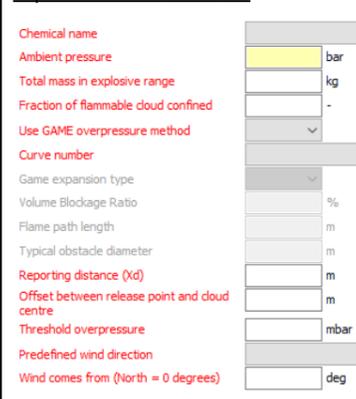
| Modul 4b: Abbrand |                      |                                      |                            |                |   |
|-------------------|----------------------|--------------------------------------|----------------------------|----------------|---|
| Stand der Technik |                      |                                      | Software-Tools             |                |   |
| HART              | Saphedra und weitere | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS)   |
|                   |                      |                                      |                            |                | <p>et al (2011). Das Hottel Modell ist ungekoppelt, bei den beiden anderen kann zwischen gekoppelt und ungekoppelt gewählt werden. Bei der gekoppelten Variante wird die effektive Länge, die ein Strahl durch das Gas zurücklegt, berücksichtigt. Bei der ungekoppelten Variante wird eine konstante mittlere Länge verwendet. Es wird die Verwendung des Modells von Yin et al (2013) empfohlen, für DTM-Berechnungen in der gekoppelten Variante und für six-flux-Berechnungen in der ungekoppelten Variante</p> <p>- 2 Russ-Modelle: Oxidation-Formation soot model (FOX) und fixe Konversionsrate. Bei der fixen Konversionsrate wird stoffspezifisch ein fixer Anteil des enthaltenen Kohlenstoffs als Russ angenommen (Tabelle siehe Manual). Das FOX-Modell (default, empfohlen) kombiniert Modelle für die Bildung (Khan&amp;Greeves 1974) und die Verbrennung (Magnussen&amp;Hjertager 1976) des Russes (Gleichungen siehe Manual)</p> <p><u>Input:</u><br/>                     Es muss eine grosse Zahl von Parametern zur Steuerung der Berechnung gesetzt werden (z.B. Wahl der Modelle oder z.T. automatisches Umschalten, Wahl der Berechnungsweise der konstanten mittleren Strahlenlänge bei den ungekoppelten Modellvarianten, Anzahl Iterationen/Zeitschritte, Auflösung der Strahlenberechnung, Definition des Rasters, technische Parameter wie RAM und Buffer auf der Festplatte) Definition der Randbedingungen, Anfangsbedingungen, Definition der Geometrie, Messpunkte und -parameter ist ähnlich wie bei Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke</p> <p><u>Output:</u><br/>                     Werte für Messpunkte oder in 3D Auflösung im zeitlichen Verlauf<br/>                     - Flammenform<br/>                     - Flammenlänge<br/>                     - Gastemperatur</p> |

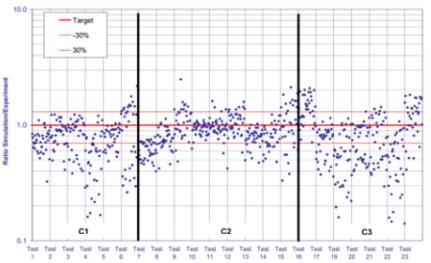
| Modul 4b: Abbrand                      |   |   |  |   |   |
|--|---|---|--|---|---|
| Stand der Technik                      |   |   | Software-Tools   |   |   |
| HART                                   | Saphedra und weitere  | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen                      | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)   |
|  |   |   |  |   | - Mischungsverhältnis<br>- Ausbreitung der Flamme<br>- Strömungsgeschwindigkeiten<br>- Stoffe: O <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, Russ<br>- Wärmefluss Strahlung, konvektiv und gesamter Wärmefluss<br>- Hitzestrahlungsdosis<br><br>Die Methode ist im Manual ausführlich dokumentiert. Dort wo verschiedene (Teil-)modelle zur Verfügung stehen, wird teilweise auf die Vor- und Nachteile der verschiedenen Modelle eingegangen. Hier wäre aber etwas mehr Information zum Teil wünschenswert. Zum Teil wird nur angegeben, welches Modell default ist und zur Verwendung empfohlen wird, aber nicht, wann der Einsatz der alternativen Modelle sinnvoll ist.<br>Unter anderem wurde von Gexcon AS ein Experiment mit einem Propan-Jetfire, das auf ein Hindernis aufprallt (SINTEF experiment, Wighus&Drangshot 1993), nachmodelliert.<br>Es soll eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten erreicht worden sein.<br>Sonst sind keine Angaben zur Validierung bei Jet Fires verfügbar. Beim Hersteller wären wahrscheinlich weitere Angaben erhältlich. |
| Berechnung Branddimension: Lachenbrand |   |   |  |   |   |
| Lachenbrand nicht berücksichtigt       | <b>Saphedra Gap Analysis</b><br>Punktquellenmodelle sind bei Lachenbränden allgemein (nicht nur für LNG) nur für erste Grobabschätzungen brauchbar<br><br>Mögliche CFD Modelle: FDS, VULCAN, experimentelle Validierung noch ungenügend | Bei Erdgashochdruckanlagen treten keine Lachenbrände auf. | Lachenbrände werden laut Manual von Effects gemäss Yellow Book Kapitel 6.5.4 modelliert. Im entsprechenden Kapitel von Yellow Book wird auf verschiedene Modelle eingegangen:<br>- Point Source Modell<br>- Conical flame<br>- Cylindrical flame<br><br>Welches Modell dann Eingang in Effects gefunden hat lässt sich daraus aber nicht herleiten.<br>Alternativ kann auch das Modell nach Rew and Hulbert für die Berechnungen verwendet werden. | Phast verwendet das POLF Modell. Die Flamme wird als zylindrischen, allenfalls geeigneten Strahlungskörper wiedergegeben.<br>Eingabeparameter<br>Wind speed [m/s]<br>Pasquill stability<br>Atmospheric temperature [degC]<br>Relative humidity [fraction]<br>Solar radiation flux [kW/m2] | CFD-Berechnung mit dem FLACS –Fire Simulator.<br>Lachenbrand mit statischer oder dynamischer Lache (d.h. sich ausbreitender Lache). Die Validation der Simulation von Lachenbränden mit dynamischer Lache ist noch nicht abgeschlossen.<br>Der Abbrandvorgang kann in 4D (räumlich und zeitlich dynamisch) beobachtet werden. Geometrie/Hindernisse werden bei der Flamme und bei der Ausbreitung der dynamischen Lache berücksichtigt und müssen definiert werden.<br>Bei Simulation des Lachenbrandes mit statischer Lache wird die Lache als „area leak“, d.h. als flächenhafter Gasaustritt, der abbrennt, modelliert. Dazu werden für verschiedene Stoffe, darunter auch   |

| Modul 4b: Abbrand |   |                                      |  |   |   |
|-------------------|---|--------------------------------------|--|---|---|
| Stand der Technik |   |                                      | Software-Tools   |   |   |
| HART              | Saphedra und weitere  | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)   |
|                   |   |                                      | <p><b>Input Parameter-Effects</b></p> <p>Chemical name</p> <p>Type of pool fire calculation</p> <p>Pool size determination</p> <p>Total mass released [kg]</p> <p>Mass flow rate of the source [kg/s]</p> <p>Duration of the release [s]</p> <p>Type of pool (poolfire)</p> <p>Max. pool surface poolfire [m<sup>2</sup>]</p> <p>Diameter of the rim [m]</p> <p>Width of rim [m]</p> <p>Width of rectangle [m]</p> <p>Length of rectangle [m]</p> <p>Rotation rectangle (North = 0 degrees) [deg]</p> <p>Shape Of Pool [Edit]</p> <p>Height of the receiver [m]</p> <p>Height of the confined pool above ground level [m]</p> <p>Temperature of the pool [°C]</p> <p>Fraction combustion heat radiated [-]</p> <p>Soot Fraction</p> <p>Fraction of the flame covered by soot [-]</p> <p>Wind speed at 10 m height [m/s]</p> <p>Ambient temperature [°C]</p> <p>Ambient pressure [bar]</p> <p>Ambient relative humidity [%]</p> <p>Amount of CO<sub>2</sub> in atmosphere [-]</p> <p>Reporting distance (Xd) [m]</p> <p>Maximum heat exposure duration [s]</p> <p>Predefined wind direction</p> <p>Wind comes from (North = 0 degrees) [deg]</p> <p>Heat radiation level (lowest) for first contour plot [kW/m<sup>2</sup>]</p> <p>Heat radiation level for second contour plot [kW/m<sup>2</sup>]</p> <p>Heat radiation level (highest) for third contour plot [kW/m<sup>2</sup>]</p> <p>Report heat radiation grid</p> <p>Resolution for surface discretization</p> <p>Take protective effects of clothing into account</p> <p>Correction lethality protection clothing</p> <p>Percentage of mortality for contour calculations [%]</p> <p>Heat radiation lethal damage Probit A [sec<sup>0.18</sup>(W/m<sup>2</sup>)]</p> <p>Heat radiation lethal damage Probit B</p> <p>Heat radiation damage Probit N</p> <p><b>Riskcurves</b></p> <p>Riskcurves verwendet die identischen Modelle wie Effects. Allerdings ist die Parametrisierbarkeit bei Riskcurves eingeschränkt. So kann die Form der Lache nur bedingt editiert werden: Es kann zwischen einer kreisrunden (Circular) und einer ringförmigen Lache (Rim) ausgewählt werden.</p> | <p>Pool diameter</p> <p>Calculate flame length and angle?</p> <p>Elevation</p> <p>Base surface</p> <p>Calculate flame emissivity?</p> <p><b>Pool Fire Parameters</b></p> <p>Number of input radiation levels</p> <p>Intensity levels</p> <p>Pool fire maximum exposure duration</p> <p>Radiative fraction for general fires</p> <p><b>Output</b></p> <p>Pool fire flame length</p> <p>Flame Angle</p> <p>Flame emissive power</p> <p>Total burn rate</p> <p>Radiative fraction</p> <p>Downwind distance of pool fire centre</p> <p>Sowie diverse Werte zur Strahlungsintensität, Distanz zu bestimmter Strahlungsintensität, Strahlungsdosis, Letalität</p> <p><b>Validierung</b></p> <p>In der Phast Dokumentation sind einige Vergleiche mit experimentellen Daten von LNG- und Hexan-Lachenbränden enthalten. Die berechneten Strahlungswerte weichen maximal 40% von den Messwerten ab. Tendenziell sind die mit <b>POLF</b> berechneten Werte konservativ.</p> | <p>Propanlachen auf Land und Wasser typische Verdampfungs- und Abbrandraten angegeben. Es wird dann mit dieser fixen Rate gerechnet. Das Modell ist ungekoppelt, d.h. die Verdampfungs- und Abbrandrate wird nicht laufend in Abhängigkeit der Hitzestrahlung der Flamme und des Wärmeflusses vom Untergrund berechnet. Die Simulation des Lachenbrandes mit dynamischer Lache kann gekoppelt durchgeführt werden, d.h. die Verdampfungs- und Abbrandrate wird laufend in Abhängigkeit der Hitzestrahlung der Flamme und des Wärmeflusses vom Untergrund neu berechnet.</p> <p>Zur Modellierung der dynamischen Lache siehe „Modellierung der Lache“ in Modul 2 der vorliegenden Publikation.</p> |
|                   | <p><b>Saphedra Identification of existing tools:</b></p> <p>Bei den Modellen, welche die Flamme als <b>zylindrischen Strahlungskörper</b> abbilden,</p> |                                      |  |   |   |

| Modul 4b: Abbrand |  |                                      |                            |                |   |
|-------------------|--|--------------------------------------|----------------------------|----------------|---|
| Stand der Technik |  |                                      | Software-Tools             |                |   |
| HART              | Saphedra und weitere   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen | Effects / Riskcurves (TNO) | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS)   |
|                   | <p>müssen in der Regel zwei sehr unsichere Parameter vom Anwender festgelegt werden, die das Ergebnis stark beeinflussen: Anteil der Wärmeenergie, die als Strahlung abgegeben werden und Anteil Russ, welcher die Flamme abschattet (POLF model, Yellow book model, Mudan &amp; Groce model, SAVE II model). Das SAVE II model kann die Flamme nur als vertikalen Zylinder wiedergeben. Die anderen Modelle können auch eine Neigung der Flamme abbilden (infolge Wind).</p> <p>Beim Zweizonen-Modell (HSE, Rew&amp;Hulbert) werden für die Oberflächenabstrahlung des klaren Flammenbereichs und des russenden Flammenbereichs je Werte für ca. 20 Substanzen angegeben, so dass für diese Substanzen die starke Parameterabhängigkeit reduziert wird.</p> <p>In der <b>Dokumentation des Zweizonenmodells in Rew, P. J., Hulbert W. G. (1996)</b>: Development of pool fires thermal radiation model. HSE Contract Research Report No. 96/1996, Health and Safety Executive HSE. UK; W S Atkins Safety and Reliability, sind die benötigten Parameter für Propan-Lachenbrände detailliert zusammengestellt. Ebenfalls sind Vergleichsberechnungen mit Experimenten dokumentiert. Es werden auch die Grenzen der Validität aufgezeigt. Das Modell ist valide für Pooldurchmesser von 0.6 m bis 35 m und Windgeschwindigkeiten bis 10 m/s. Bei kleinen Lachendurchmessern ist das Zweizonenmodell leicht unkonservativ, bei grösseren eher konservativ. Das Modell kann nur für Lachen im Freien, nicht aber für Lachen in schlecht belüfteten oder umschlossenen Situationen oder für Tankbrände verwendet werden. (Anmerkung suisseplan: Gilt für alle Modelle mit zylindrischem Strahlungskörper.) Wird das Modell verwendet, um einen Flammenkontakt abzuschätzen, ist grosse Vorsicht geboten, da das Modell die starken Fluktuationen und Turbulenzen eines Lachenbrandes</p> |                                      |                            |                | <p>Zu Gleichungen/Modellen, Input, Output des FLACS Fire Simulators etc. siehe Branddimension Jetfire. (in Modul 4b des vorliegenden Dokuments)</p> <p>Es wird eine Modellierung eines LNG Pool Fire Tests (U.S. CG China Lake Test) auf Wasser mit einem statischen Modell in Form eines „area leak“ beschrieben, welche eine gute Übereinstimmung von berechneten und gemessenen Werten ergab, ohne dass weitere Details dazu angegeben werden. Weitere Angaben zur Validierung sind nicht verfügbar, aber allenfalls beim Hersteller erhältlich.</p> |

| Modul 4b: Abbrand                          |  |   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
|--|--|---|---|----------------|----------------------|--|---------------|----------------------|----|----------------|----------------------|---|----------------------------------|----------------------|----|---------------------------------------|----------------------|-----|---------------------|----------------------|----|------------------|----------------------|-----|------------------------|----------------------|------|-------------------------|----------------------|---|--|---|
| Stand der Technik                          |  |   | Software-Tools  |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| HART                                       | Saphedra und weitere   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen  | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL) | FLACS (Gexcon AS)    |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
|  | nicht wiedergeben kann. (Anmerkung suisseplan: Gilt für alle Modelle mit zylindrischem Strahlungskörper.)  |   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Berechnung Explosionsdruck: BLEVE          |  |   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Explosionsdruck BLEVE nicht berücksichtigt | <p><b>Saphedra Gap Analysis</b><br/>                     Zur Berechnung der Expansionsenergie wird auf passende Modelle im <b>Yellow Book</b> (Ausgabe wird nicht angegeben) und auf <b>Baker 1997</b> (oder 1977, Angabe unklar) verwiesen.</p> <p><b>Saphedra Identification of existing tools:</b><br/>                     Die meisten Literaturmodelle basieren auf <b>TNT Äquivalenz Methode: Prugh 1991, Birk 1997, Planas-Cuchi 2004</b>, weitere Modelle gibt es von <b>Baker, CCPS, van den Berg</b> (wahrscheinlich BLEVE blast model, <b>Yellow Book</b>).</p> <p>Das BLEVE blast model ist spezifisch für BLEVE's, berechnet keine Trümmer.</p> <p>Das Baker model kann für das Zerreißen eines Behälters infolge äusserer Einwirkung, Durchgehen einer Reaktion, Zerfall des Behälters und interner Explosion den Druck und Trümmerimpakt berechnen. Ob ein warmer BLEVE damit berechnet werden kann, ist unklar. Die Berechnung der freigesetzten Energie beim Baker model wird als komplex bezeichnet.</p> <p>Das Saphedra full spreadsheet macht keine Angaben zur Validierung.</p> | Bei Erdgashochdruckanlagen tritt kein BLEVE Szenarium auf. Beim Feuerball infolge Totalversagens einer erdverlegten Transportleitung mit sofortiger Zündung wird die Druckentwicklung vernachlässigt. | <p>Der Überdruck bei einem BLEVE kann mit dem Modell nach <b>van der Berg („BLEVE blast" calculation method)</b> berücksichtigt werden.</p> <p><u>Input-Parameter Effects</u></p> <table border="0"> <tr><td>Chemical name</td><td><input type="text"/></td><td></td></tr> <tr><td>Vessel volume</td><td><input type="text"/></td><td>m3</td></tr> <tr><td>Filling degree</td><td><input type="text"/></td><td>%</td></tr> <tr><td>Initial temperature in equipment</td><td><input type="text"/></td><td>°C</td></tr> <tr><td>Initial (absolute) pressure in vessel</td><td><input type="text"/></td><td>bar</td></tr> <tr><td>Ambient temperature</td><td><input type="text"/></td><td>°C</td></tr> <tr><td>Ambient pressure</td><td><input type="text"/></td><td>bar</td></tr> <tr><td>Threshold overpressure</td><td><input type="text"/></td><td>mbar</td></tr> <tr><td>Reporting distance (Xd)</td><td><input type="text"/></td><td>m</td></tr> </table> | Chemical name  | <input type="text"/> |  | Vessel volume | <input type="text"/> | m3 | Filling degree | <input type="text"/> | % | Initial temperature in equipment | <input type="text"/> | °C | Initial (absolute) pressure in vessel | <input type="text"/> | bar | Ambient temperature | <input type="text"/> | °C | Ambient pressure | <input type="text"/> | bar | Threshold overpressure | <input type="text"/> | mbar | Reporting distance (Xd) | <input type="text"/> | m | <p>In Phast ist das <b>CCPS Modell</b> umgesetzt. Es kann für Druckbehälter mit Gas, Flüssigkeit oder einem Gemisch von Gas und Flüssigkeit verwendet werden. Es kann zwischen der <b>Fist und der Second Edition des CCPS Modells</b> gewählt werden.</p> <p><u>Eingabeparameter</u><br/>                     Siehe Anhang F<br/>                     Mit dem Parameter Air or ground burst kann gewählt werden, ob die Reflexion der Druckwelle am Boden (ground burst) mit speziellen Korrekturfaktoren berücksichtigt werden soll.</p> <p><u>Output</u><br/>                     Specific internal energy at failure conditions<br/>                     Specific internal energy at final conditions<br/>                     Explosion energy<br/>                     Final temperature</p> <p>Weiterer Output: Druck in bestimmten Distanzen zum Behälter</p> <p><u>Validität</u><br/>                     Keine Angaben zur Validität</p> | Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround |
| Chemical name                              | <input type="text"/>   |   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Vessel volume                              | <input type="text"/>   | m3  |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Filling degree                             | <input type="text"/>   | %   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Initial temperature in equipment           | <input type="text"/>   | °C  |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Initial (absolute) pressure in vessel      | <input type="text"/>   | bar   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Ambient temperature                        | <input type="text"/>   | °C  |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Ambient pressure                           | <input type="text"/>   | bar   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Threshold overpressure                     | <input type="text"/>   | mbar  |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |
| Reporting distance (Xd)                    | <input type="text"/>   | m   |   |                |                      |  |               |                      |    |                |                      |   |                                  |                      |    |                                       |                      |     |                     |                      |    |                  |                      |     |                        |                      |      |                         |                      |   |  |   |

| Modul 4b: Abbrand   |   |   |   |   |  |
|---|---|---|---|---|--|
| Stand der Technik   |   |   | Software-Tools  |   |  |
| HART  | Saphedra und weitere  | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen  | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)  | FLACS (Gexcon AS)  |
| <b>Berechnung Explosionsdruck: UVCE (unconfined vapor cloud explosion)</b>  |   |   |   |   |  |
| <p>UVCE P = 0.6 (zu Gaswolkenbrand)</p> <p>Berechnung mit dem Korrelationsmodell aus der <b>COVO Studie 1982</b> anhand Masse in der Gaswolke oberhalb der Zündgrenze. Berechnung kreisförmiger Bereiche mit 0.3 und 0.1 bar Überdruck. Zentrum der Radien bei kontinuierlichem Austritt ist die halbe Distanz zur unteren Zündgrenze in Windrichtung. Bei sofortiger Freisetzung ist das Zentrum der Radien der Mittelpunkt der Gaswolke bei deren grösster Ausdehnung. Das COVO Korrelationsmodell basiert auf drei Versuchen mit Gaswolkenexplosionen und soll dieselben Werte ergeben wie die <b>Multi Energy Methode</b> mit blast strength 10 und einem Obstruktionsfaktor von 0.08 (Obstruktion = Hindernisse im Abbrandpfad der Gaswolke)</p> $R_{0.3bar} = 0.03 \cdot (0.1 M \cdot H_c)^{1/3}$ $R_{0.1bar} = 0.06 \cdot (0.1 M \cdot H_c)^{1/3}$ <p><math>R_{0.3bar}</math> = Radius Überdruck 0.3 bar [m]<br/> <math>R_{0.1bar}</math> = Radius Überdruck 0.1 bar [m]<br/> M = Masse in der Gaswolke oberhalb LFL [kg]<br/> <math>H_c</math> = Verbrennungsenthalpie [J/kg]</p> | <p><b>Saphedra Gap Analysis</b><br/>Semi-empirische Modelle wie die <b>Multi-Energy Method</b> und die <b>Baker and Strehlow Method</b> sind nur zur Berechnung im far-field Bereich akzeptabel (far-field = Bereich weit ausserhalb der Gaswolke)</p> <p>Für near-field (Bereich in der Nähe oder innerhalb der Gaswolke) und sonstige detailliertere Analysen sind CFD codes die einzige Lösung. Als Beispiele werde genannt: <b>FLACS, AUTOREAGAS, CFX, CFD-ACE+, STAR-CD, EXSIM, COBRA, FLUENT</b></p> <p><b>Saphedra Identification of existing tools</b><br/><b>TNT-Äquivalenz-Modelle</b> sind schlecht geeignet für Gaswolkenexplosionen (konträres Verhalten Amplitude/Dauer der Druckwelle bei TNT und Gaswolkenexplosion, Ergebnisse statistisch sehr wenig zuverlässig)</p> <p><b>Baker Strehlow Tang</b> und <b>Multi Energy</b> Method sind besser für Gaswolkenexplosionen zugeschnitten. Von den Blast-Curve-Methoden sind dies die beiden verbreitetsten Modelle. Beide Modelle benötigen Experteneinschätzung zur Wahl der Blast-Curve (Hindernisse in der Gaswolke, Reaktivität, Verdämmung). Für die Multi Energy Method gibt es die <b>GAME correlation</b>. Diese ermöglicht die Quantifizierung der Wahl der Blast-Curve, benötigt aber genaue Kenntnisse der Hindernisse in der Gaswolke.</p> <p>Weitere erwähnte Modelle: <b>Congestion Assessment Method</b> (kalibriert mit einer grossen Zahl von Tests, benötigt detaillierte Kenntnisse der Hindernisse in der Gaswolke), <b>CFD</b></p> <p>Das Saphedra full spreadsheet enthält keine Angaben zur Validierung von Modellen.</p> | <p>Berechnung Explosionsdruck bei UVCE im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht definiert.</p> | <p>In Effects wird das <b>Multi-Energy Model</b> verwendet.</p> <p><u>Input-Parameter Effects</u></p>  | <p>Phast ermöglicht die Verwendung von drei verschiedenen Modellen:<br/> - <b>Multi Energy</b><br/> - <b>Baker Strehlow Tang</b><br/> - <b>TNT</b></p> <p><b>Multi Energy</b> und <b>Baker Strehlow Tang</b> können als aktueller Stand der Technik bei den einfachen, semi-empirischen (nicht CFD) Ansätzen betrachtet werden, TNT Modelle gelten als veraltet und sollten vermieden werden.</p> <p>Unschön bei der Umsetzung in Phast ist die irreführende und widersprüchliche Verwendung der Begriffe „obstructed“ und „confined“ beim Multi Energy Modell. Obstructed bei Gaswolkenexplosionen bedeutet, dass eine Gaswolke mit Hindernissen durchsetzt ist, während confined bedeutet, dass sie verdämmt, d.h. umschlossen ist, z.B. im Innern eines Gebäudes. Während in der Dokumentation korrekt von „Obstructed Region“ die Rede ist, wird im Phast Programm stets der Begriff „confined“ verwendet. Das Multi Energy Modell ist jedoch für verdämmte Explosionen ungeeignet. Anscheinend ist in Phast die sehr hilfreiche <b>GAME correlation</b> für das <b>Multi Energy Modell</b> nicht enthalten, bzw. es ist eine Lizenz für das extended explosion Modelling in Phast nötig.</p> <p><u>Eingabeparameter</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Flammable mass in cloud</li> <li>Unconfined explosion strength</li> <li>Unconfined explosion efficiency</li> <li>Number of confined sources</li> <li>Option for specifying size of confined sources</li> </ul> <p><u>Output</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Unconfined energy</li> <li>Confined energies</li> </ul> <p>Sowie Überdruck in wählbaren Distanzen etc.</p> | <p>Wie Branddimension Gaswolkenbrand im vorliegenden Dokument</p> <p>Ergänzende Informationen:</p> <p>Es können z.B. in Gebäuden Druckentlastungspanels definiert werden, welche bei einem bestimmten Druck nachgeben. Schwellenwerte Druck (in + und – Richtung), Masse des Panels, Grösse und Grad der Zerstörung beim Überschreiten des Schwellenwerts können parametrisiert werden. Mit diesen Panels kann auch auf eine grobe Art eine allfällige Zerstörung der Geometrie im Verlauf der Explosion teilweise berücksichtigt werden.</p> <p><u>Outputparameter zum Explosionsdruck</u></p> <p>Diverse Parameter an definierten Messpunkten in der Luft, auf Hindernissen (z.B. auf Fassaden) oder im gesamten Simulationsvolumen aufgelöst in beliebiger zeitlicher Auflösung, z.B.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Druck statisch, dynamisch (total und aufgelöst nach x, y und z Richtung, Maxima)</li> <li>- Impuls statisch, dynamisch (total und aufgelöst nach x, y und z Richtung, Maxima)</li> <li>- Strömungsgeschwindigkeitsvektoren (total und aufgelöst nach x, y und z Richtung)</li> </ul> <p><u>Validierung:</u></p> <p>Zur Validierung liegen keine umfassenden Reviews o.ä. vor. Es wurden für FLACS jedoch umfangreiche experimentelle Validationsarbeiten vorgenommen (vertraulich). Angaben dazu könnten ev. beim Hersteller angefragt werden. Gexcon AS betreibt ein eigenes Testgelände. FLACS wird schon sehr lange für Gaswolkenexplosionsberechnungen eingesetzt.</p> <p>Zusammenstellung Ergebnisse FLACS Validation mit Full-Scale Experimenten 1997-98</p> |

| Modul 4b: Abbrand  |  |   |  |  |   |
|--|--|---|--|--|---|
| Stand der Technik  |  |   | Software-Tools   |  |   |
| HART   | Saphedra und weitere   | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen  | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)   |
|  |  |   |  | <p><u>Validierung</u><br/>                     Die Ergebnisse der <b>Multi Energy Method</b> und des Baker Strehlow Tang Modells werden oft mit experimentellen Daten und CFD Berechnungen verglichen. Beispiele davon, unter anderem auch mit Propan, werden mit Phast mitgeliefert.</p> <p>Die <b>Multi Energy Method</b> ist tendenziell konservativer als <b>Baker Strehlow Tang</b>, wobei insgesamt <b>Multi Energy</b> besser mit den Messungen übereinstimmt als <b>Baker Strehlow Tang</b>. Im Fernbereich stimmen <b>Multi Energy</b> und <b>Baker Strehlow Tang</b> gut mit Messungen überein, insbesondere bei mittleren und grossskaligen Fällen.</p> |  <p><u>Einschränkungen:</u><br/>                     FLACS kann keine Detonationen rechnen, nur Deflagrationen. D.h. wenn ein Übergang zur Detonation auftritt, sind die berechneten Drücke zu tief. Deshalb wurden bei Test 4, 19 und 22 in der obigen Abbildung die Drücke massiv unterschätzt. Es gibt jedoch einen Outputparameter, der als Hinweis für die Wahrscheinlichkeit, dass eine Detonation im Verlauf des Abbrands auftritt, verwendet werden kann.</p> <p>Ein bekanntes Problem bei FLACS ist, dass im Fernbereich die Druckwellen zu stark geglättet werden. Kann mit spezieller Parametrierung abgebildet werden.</p> |
| Berechnung Explosionsdruck VCE (vapor cloud explosion, verdämmt) |  |   |  |  |   |
| Keine Angaben  | Keine Angaben  | Im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen ist keine Berechnungsweise für den Explosionsdruck bei verdämmt VCE's definiert.<br><br>Es wurden jedoch für das Erläuterungspapier Stationen Beispielberechnungen für eine VCE im Innern einer typischen Station mit FLACS durchgeführt. | Wird nicht abgedeckt.  | Phast enthält zwei Indoor explosion model Varianten:<br>- <b>NFPA 68 (2007)</b><br>- <b>NFPA 68 (2013)</b><br>NFPA 68 (2007) ist für Gebäude vorgesehen, die weniger als 0.1 bar Überdruck aushalten.<br>Die Modelle sind nicht weiter dokumentiert.   | Mit FLACS gut möglich.<br>Zerstörung der Verdämmung (z.B. Gebäudehülle) kann stark vereinfacht berücksichtigt werden.<br>Übrige Angaben wie "Berechnung Explosionsdruck: UVCE (unconfined vapor cloud explosion)" im vorliegenden Dokument  |
| Berechnung Trümmerwurf: BLEVE                                    |  |   |  |  |   |
| Trümmerwurf nicht berücksichtigt                                 | <b>Saphedra Gap Analysis:</b><br>Für Methoden zur Berechnung von Fragmentgeschwindigkeiten und Trajektorien wird auf das <b>Yellow Book 3rd edition</b> verwiesen. | Im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen gibt es kein BLEVE Szenario. Trümmerwurf z.B. infolge eines Leitungsbruchs wird nicht berücksichtigt.   | Mit Effects lassen sich die Trümmerbildung und der Trümmerwurf, der beim BLEVE gebildeten Trümmer grundsätzlich berücksichtigen. Jedoch muss der massgebende Parameter manuell eingegeben werden („Fraction of liberated energy going to kinetic energy“) und dieser ist äusserst schwer abzuschätzen. Diese | Wird nicht abgedeckt.  | FLACS simuliert keinen Trümmerwurf  |

| <b>Modul 4b: Abbrand</b> |   |   |  |                       |                          |
|--------------------------|---|---|--|-----------------------|--------------------------|
| <b>Stand der Technik</b> |   |   | <b>Software-Tools</b>  |                       |                          |
| <b>HART</b>              | <b>Saphedra und weitere</b>   | <b>Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen</b> | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b>  | <b>Phast (DNV GL)</b> | <b>FLACS (Gexcon AS)</b> |
|                          | <p><b>Saphedra Identification of existing tools:</b><br/>                     Methode von Baker wird am häufigsten zur Berechnung des Trümmerwurfs verwendet.<br/>                     Vorbehalte: Verlässliche Annahmen zur Fragmentierung des Behälters aufgrund der Variabilität der relevanten Parameter nicht möglich.</p> |   | <p>Betrachtung ist somit nur sehr bedingt brauchbar.<br/>                     Zudem kann manuell anhand der Trümmermasse und –geschwindigkeit die Mortalität bei einem Treffer untersucht werden.<br/>                     In der Dokumentation zu Riskcurves und auch in der Software selbst konnten keine Angaben zum Trümmerwurf gefunden werden.</p> |                       |                          |

## **3.5.1 Fazit Modul 4b (Abbrand)**

### **3.5.1.1 Branddimension BLEVE**

#### *3.5.1.1.1 Stand der Technik*

Zu Lees' handbook und CCPS Guidelines ergaben die vorliegenden Abklärungen keine weiteren Informationen. Ebenfalls fehlen Angaben zur Validität. Die drei statischen Modelle HSE, TNO und SFPE sind wahrscheinlich etwa gleichwertig.

Die Bestimmung des Anteils des Tankinhalts, der in den Feuerball gelangt, mit dem dreifachen adiabatischen Flash scheint üblich zu sein.

Es stellt sich die Frage, ob die statischen Modelle genügen oder eher ein dynamisches Modell dem Stand der Technik entspricht. Gemäss Effects Manual sind die Ergebnisse jedoch ähnlich.

#### *3.5.1.1.2 Effects / Riskcurves:*

Gemäss Manual von Effects sollen das statische und das dynamische Modell ähnliche Ergebnisse liefern. Das dynamische Modell berücksichtigt die Grössenänderung des Feuerballs mit der Zeit. Das statische Modell entspricht dem Modell nach HART.

#### *3.5.1.1.3 Phast*

Positiv: Wahl zwischen TNO und HSE Modell sowie konservative Kombination der beiden.

Negativ: kein dynamisches Modell, gemäss Manual von Effects sollen das statische und dynamische TNO Modell jedoch ähnliche Ergebnisse liefern.

### **3.5.1.2 Branddimension Gaswolkenbrand**

#### *3.5.1.2.1 Stand der Technik*

Distanz zur unteren Zündgrenze (LFL footprint) zur Bestimmung der Aussengrenzen der Flamme ist eine gebräuchliche, wenn auch einfache und grobe Methode. Aufgrund der Hitzestrahlung können auch ausserhalb der Gaswolke Personen betroffen sein. Komplexere Modelle zur Berücksichtigung der Hitzestrahlung ausserhalb der Gaswolke sind vorhanden (Lees 1995, CCPS). Technisch am fortschrittlichsten aber auch am aufwändigsten sind CFD-Berechnungen.

#### *3.5.1.2.2 Effects / Riskcurves:*

Da aus der Dokumentation des Purple Books die Modelle und Berechnungsschritte nicht abgeleitet werden können, kann bezüglich der Einhaltung des Standes der Technik keine Aussage gemacht werden.

#### *3.5.1.2.3 Phast*

LFL Footprint ist übliche, wenn auch grobe Methode

#### *3.5.1.2.4 FLACS:*

Der Abbrandvorgang einer Gaswolke kann zeitlich und räumlich dynamisch unter Berücksichtigung der Umgebung/Hindernisse aufgezeigt werden.

Zur Validität der Abschätzung der Abmessungen der Flamme liegen keine Reviews vor. Beim Hersteller wären wahrscheinlich Angaben dazu vorhanden.

Die Simulation von Gaswolkenbränden und –explosionen in verschiedensten Umgebungen (verdämmt, unverdämmt, mit Hindernissen etc.) mit Fokus auf die Druckentwicklung ist das ursprüngliche Einsatzgebiet für welches FLACS entwickelt wurde und wo FLACS eine grosse Verbreitung insbesondere in der Erdgas- und Erdölindustrie hat. In diesem Zusammenhang wurden umfangreiche Validierungsanstrengungen unternommen (siehe Modul 4b Berechnung Explosionsdruck: UVCE (unconfined vapor cloud explosion) im vorliegenden Dokument)  
Gexcon betreibt dazu ein eigenes Testgelände auf der Insel Sotra vor Bergen in Norwegen. Es ist deshalb davon auszugehen, dass FLACS einem hohen Stand der Technik entspricht.

### **3.5.1.3 Branddimension UVCE**

#### *3.5.1.3.1 Stand der Technik*

Bei Verwendung der LFL footprint Methode ist Verwendung der gleichen Branddimension für Gaswolkenbrand und UVCE naheliegend. Bei Berechnung des Abbrandes mit komplexeren Modellen (d.h. CFD) sind jedoch je nach Abbrandgeschwindigkeit unterschiedliche Ausbreitungen der Flammen zu erwarten.

#### *3.5.1.3.2 Effects / Riskcurves:*

Da aus der Dokumentation des Purple Books die Modelle und Berechnungsschritte nicht abgeleitet werden können, kann bezüglich der Einhaltung des Standes der Technik keine Aussage gemacht werden.

#### *3.5.1.3.3 Phast*

Keine explizite Berechnung der Branddimension für eine UVCE. Es muss deshalb die Branddimension des Gaswolkenbrands verwendet werden. Dies ist bei Software-Tools dieser Art so üblich.

#### *3.5.1.3.4 FLACS*

Gaswolkenbrand und UVCE gehen fließend ineinander über. Eine UVCE zeichnet sich einfach durch einen schnelleren Abbrand und somit eine höhere Druckentwicklung aus, wobei keine klare Abgrenzung zwischen Gaswolkenbrand und UVCE besteht. Für die Modellierung in einem CFD-Tool besteht kein Unterschied, ob ein Gaswolkenbrand oder eine UVCE oder etwas dazwischen modelliert wird. Es gelten deshalb dieselben Angaben wie beim Gaswolkenbrand (Kap. 3.5.1.2.4)

### 3.5.1.4 Branddimension Jetfire

#### 3.5.1.4.1 *Stand der Technik*

Das Jet Fire ist vom Ausmass her nicht das entscheidende Szenario in der Risikoanalyse für Gefahrguttransporte auf der Bahn.

Es ist eine grössere Anzahl Modelle im Umlauf, z.T. mit eng begrenztem Einsatzbereich (z.B. nur LPG-Zweiphasen, nur horizontale Jets etc.)

Punktquellenmodelle entsprechen nicht mehr dem Stand der Technik.

Einige Modelle können bei horizontalen Flammen den thermischen Auftrieb nicht wiedergeben.

Das Chamberlain model, das Cook model und das Johnson model sind gemäss Phast-Dokumentation zumindest in der in Phast implementierten Form gut validiert. Zum Cook model und zum Johnson model sind gemäss Saphedra full spreadsheet weitere Dokumente zur Validität verfügbar. Das Chamberlain model wird gemäss Saphedra full spreadsheet im Risikoanalysetool MISHAP der britischen Behörde HSE verwendet. Das Cook model ist eine zusätzlich für Zweiphasenaustritte angepasste Version des Chamberlain models. Das Chamberlain-Modell ist in den weit verbreiteten Software-Tools Effects und Phast implementiert und wird häufig gebraucht.

Interessant ist auch das Cracknell model, da dieses Flüssig- Zweiphasen- und Gasphasenaustritte wiedergeben kann und anscheinend keine Einschränkungen bei der Austrittsrichtung bestehen. Das Modell ist aber proprietär und deshalb nicht öffentlich zugänglich dokumentiert.

Mit den vorliegenden Unterlagen lässt sich kein klarer Favorit bezüglich Stand der Technik identifizieren. Das Chamberlain, das Cook model und das Johnson model sind aber gut validiert und breit akzeptiert.

#### 3.5.1.4.2 *Effects / Riskcurves:*

Effects verwendet das gebräuchliche Chamberlain-Modell.

Das Chamberlain Modell (und das in der Dokumentation erwähnte Cook-Modell) können gemäss SAPHEDRA bei horizontalen Flammen den thermischen Auftrieb nicht abbilden.

#### 3.5.1.4.3 *Phast*

Phast verwendet drei einfache, aber gebräuchliche Modelle, die für Propan gut validiert sind. Es werden Angaben zur Validierung mitgeliefert.

#### 3.5.1.4.4 *FLACS*

Sehr neues, erst kürzlich fertiggestelltes Modul zur detaillierten Wiedergabe und Beobachtung des Abbrandprozesses in 4D (räumlich und zeitlich).

Auch Berechnung spezieller Fälle wie Aufprall des Jet Fires auf Hindernisse, Abbrand in geschlossenen Umgebungen mit unterschiedlichen Belüftungssituationen etc. sind möglich.

Leider sind zurzeit nur Austritte aus der Gasphase möglich.

Hohe Komplexität des Modells mit Wahlmöglichkeiten für verschiedene Teilmodelle

Hoher Aufwand bei Modellierung, Wahl einzelner Parameter z.T. schwierig

Ausführlich dokumentiert, mit gewissen Lücken

Das FLACS Fire Modul wurde erst kürzlich fertiggestellt. Dies weist darauf hin, dass es sich auf einem aktuellen Stand der Technik befindet. Unabhängige Reviews oder sonstige Angaben dazu sind aber nicht verfügbar.

Eine positive Verifikation des Modells mit einem Propan-Jet-Fire Experiment wurde durchgeführt. Nähere Angaben dazu sind nicht verfügbar, könnten aber allenfalls beim Hersteller angefragt werden.

### **3.5.1.5 Branddimension Lachenbrand**

#### *3.5.1.5.1 Stand der Technik*

Punktquellenmodelle entsprechen nicht mehr dem Stand der Technik.

Bei den meisten Zylinder-Strahlungskörper-Modellen müssen zwei sehr unsichere Parameter gewählt werden, die das Ergebnis stark beeinflussen.

Beim HSE-Zweizonenmodell von Rew&Hulbert ist dieses Problem etwas entschärft. Das HSE Zweizonenmodell markiert sicher einen sehr guten Stand der Technik. Viele der in anderen Modellen sehr unsicheren Parameter wurden für Propan bereits in der Dokumentation des Modells bestimmt und können verwendet werden. Ebenfalls wurden Validierungsberechnungen durchgeführt. Das Modell wird von der britischen Behörde HSE unter dem Namen POOLFIRE6 für ihre eigenen Risikobetrachtungen verwendet.

Weitere Abklärungen könnten Recherchen zur Validität der anderen erwähnten Modelle zum Gegenstand haben.

#### *3.5.1.5.2 Effects / Riskcurves*

Neben den Modellen des Yellow Books steht in Effects auch das Modell nach Rew and Hulbert zur Verfügung.

#### *3.5.1.5.3 Phast*

Phast verwendet das POLF Modell.

Es werden Validierungsstudien mit LNG und Hexan gezeigt, mit relativ gutem Ergebnis.

Allerdings muss auch beim POLF der Anteil der Strahlung, die durch Russ abgeschirmt wird, angegeben werden. Dieser Wert ist sehr unsicher.

#### *3.5.1.5.4 FLACS*

Sehr neues, erst kürzlich fertiggestelltes Modul zur detaillierten Wiedergabe und Beobachtung des Abbrandprozesses in 4D (räumlich und zeitlich).

Bei dynamischen Lachen ist die Validierung noch nicht abgeschlossen.

Hohe Komplexität des Modells mit Wahlmöglichkeiten für verschiedene Teilmodelle

Hoher Aufwand bei Modellierung, Wahl einzelner Parameter z.T. schwierig

Ausführlich dokumentiert, mit gewissen Lücken

Das FLACS Fire Modul wurde erst kürzlich fertiggestellt. Dies weist darauf hin, dass es sich auf einem aktuellen Stand der Technik befindet. Unabhängige Reviews oder sonstige Angaben dazu sind aber nicht verfügbar.

Eine positive Verifikation des Modells mit einem LNG-Lachenbrand-Experiment wurde durchgeführt. Allerdings nur mit einer statischen Lache in Form eines „area leak“. Nähere Angaben dazu sind nicht verfügbar, könnten aber allenfalls beim Hersteller angefragt werden.

### **3.5.1.6 Explosionsdruck BLEVE**

#### *3.5.1.6.1 Stand der Technik*

Der Stand der Technik kann mit den berücksichtigten Unterlagen nicht klar definiert werden.

TNT Äquivalenz-Modelle gelten für Gaswolken allgemein als veraltet. Ob dies für den BLEVE auch zutrifft, müsste weiter abgeklärt werden.

Das BLEVE blast model, das Modell nach Baker und das CCPS-Modell scheinen gebräuchlich zu sein, wobei beim Baker-Modell nicht ersichtlich ist, ob es für warme BLEVE verwendet werden kann.

Angaben zur Validität der Modelle (BLEVE blast, Baker, CCPS) liegen keine vor.

#### *3.5.1.6.2 Effects / Riskcurves*

Das zugrundeliegende Modell ist nicht frei zugänglich und kann damit nicht nachvollzogen werden. Es scheint aber üblich zu sein.

#### *3.5.1.6.3 Phast*

Phast verwendet das CCPS Modell. Dessen Parametrierung ist teilweise unklar.

#### *3.5.1.6.4 FLACS*

Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround

### **3.5.1.7 Explosionsdruck UVCE**

#### *3.5.1.7.1 Stand der Technik*

TNT-Äquivalenzmodelle entsprechen für Gaswolken nicht dem Stand der Technik.

Semi-empirische Modelle eignen sich nur für die Berechnung der Drücke in Bereichen weit ausserhalb der Gaswolke. Die verbreitetsten Modelle aus dieser Gruppe sind die Multi-Energy Method und die Baker Strehlow Method. Bei deren Anwendung müssen für die Parametrierung Experteneinschätzungen gemacht werden, die sich stark auf das Ergebnis auswirken (v.a. Wahl der Blast Curve). Gemäss Phast-Dokumentation schneidet die Multi Energy Method bezüglich Validität etwas besser als Baker-Strehlow abt.

Im Nahbereich und innerhalb der Gaswolke sind CFD Codes die einzige Lösung.

Zur Congestion Assessment Method könnten weitere Abklärungen interessant sein. Sie ist mit einer grossen Anzahl Tests kalibriert.

#### *3.5.1.7.2 Effects / Riskcurves*

Das in Effects verwendete Multi-Energy Model ist gemäss SAPHEDRA im far-field Bereich akzeptabel. Zusätzlich verfügt Effects über die GAME correlation zur Wahl der Blast-Curve.

Für Betrachtungen im near-field wären CFD-Berechnungen unumgänglich.

#### *3.5.1.7.3 Phast*

Die beiden verbreiteten Semi-empirischen Modelle Multi Energy Method und Baker Strehlow Tang sind in Phast integriert. Allerdings ist die Umsetzung etwas unsorgfältig gelöst, mit widersprüchlichen oder irreführenden Begriffsverwendungen. Multi Energy schneidet betr. Validität etwas besser ab als Baker Strehlow Tang und ist im far-field Bereich akzeptabel. Die GAME correlation zur Wahl der Blast-Curve in der Multi Energy Method scheint in Phast nicht integriert zu sein.

Für Betrachtungen im near-field wären CFD-Berechnungen unumgänglich.

#### *3.5.1.7.4 FLACS*

FLACS erlaubt eine räumlich und zeitlich detaillierte Berechnung des Abbrand- und Explosionsprozesses mit Berücksichtigung der lokalen Geometrie und der Hindernisse im Abbrandpfad. Dies ist für eine einigermaßen realistische Einschätzung der Explosionsdrücke unerlässlich. Für eine realistische Einschätzung der Explosionsdrücke ist aber eine detaillierte Erfassung der Hindernisse im Abbrandpfad (inkl. z.B. Gestänge, Bäume und Buschwerk etc.) unerlässlich.

Die Validierung ist nur teilweise offengelegt. Es wurden jedoch viele Vergleiche mit experimentellen Messwerten durchgeführt. Es ist davon auszugehen, dass kaum für ein anderes CFD-Tool im vorliegenden Anwendungsbereich ähnlich umfangreiche Validierungsarbeiten vorgenommen wurden, wie für FLACS. FLACS wird in grossem Umfang in der Erdgas- und Erdölindustrie eingesetzt.

Bekannte Schwächen sind:

- Keine Möglichkeit zur Berechnung von Detonationen. Bei Ereignissen, bei denen Detonationen auftreten können, werden deshalb die Drücke unter Umständen massiv unterschätzt. Es gibt jedoch einen Parameter, der als Hinweis auf eine mögliche Detonation verwendet werden kann.
- Drücke im Fernbereich werden zu stark geglättet und fallen zu tief aus. Dies kann mit entsprechender Parametrierung abgemildert werden.

### **3.5.1.8 Explosionsdruck VCE**

#### *3.5.1.8.1 Stand der Technik*

In den vorliegenden Abklärungen sind keine Angaben zum Stand der Technik enthalten.

Nach Erfahrung von suisseplan ist für verdämmte Umgebungen in der Regel der Einsatz von CFD Tools nötig.

#### *3.5.1.8.2 Effects / Riskcurves*

Berechnung nicht möglich

#### *3.5.1.8.3 Phast*

Enthält indoor explosion model NFPA 68 (2007) und NFPA 68 (2013), die jedoch nicht weiter dokumentiert sind.

#### *3.5.1.8.4 FLACS*

Berechnung mit FLACS gut möglich.

Zerstörung der Verdämmung (z.B. Gebäudehülle) kann stark vereinfacht berücksichtigt werden.

Übrige Angaben wie Kap. 3.5.1.7.4, Explosionsdruck UVCE im vorliegenden Dokument

### **3.5.1.9 Trümmerwurf BLEVE**

#### *3.5.1.9.1 Stand der Technik*

Es herrscht generell ein tiefer Stand der Technik, da das Ereignis sehr unberechenbar ist, in der Regel vom Ausmass her anderen Einwirkungen, z.B. der Hitzewirkung beim BLEVE, untergeordnet ist.

#### *3.5.1.9.2 Effects / Riskcurves*

Berücksichtigung des Trümmerwurfes ist in Effects grundsätzlich möglich, jedoch ist das Verfahren wegen der zu wählenden Inputparameter wenig praxistauglich. Zu Riskcurves fehlen entsprechende Angaben.

#### *3.5.1.9.3 Phast*

Berechnung nicht möglich

#### *3.5.1.9.4 FLACS*

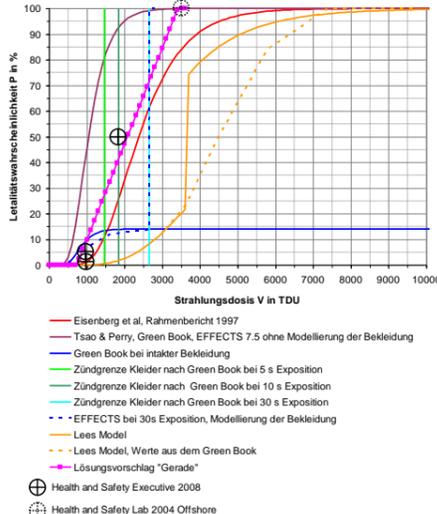
Berechnung nicht möglich

### 3.6 Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)

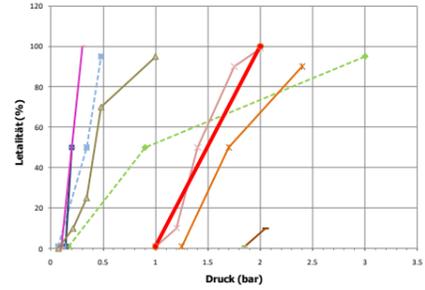
| Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf) |               |   |   |                                      |  |
|---|---------------|---|---|--------------------------------------|--|
| Stand der Technik   |               |   | Software-Tools  |                                      |  |
| HART  | Saphedra      | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen                          | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)                       | FLACS (Gexcon AS)  |
| <b>Betrachtete Wirkung (Letalität, Verletzung)</b>                          |               |   |   |                                      |  |
| <i>BLEVE</i>  |               |   |   |                                      |  |
| Nur Letalität, keine Verletzten   | Keine Angaben | (Feuerball: Nur Letalität, keine Verletzten)                  | <u>Effects:</u><br>Letalität, sowie Verbrennung 1. und 2. Grades<br><br><u>Riskcurves:</u><br>Letalität, sowie Verbrennung 1., 2. Und 3. Grades   | Letalität, beliebige Strahlungswerte | Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround  |
| <i>Jet Fire</i>   |               |   |   |                                      |  |
| Nur Letalität, keine Verletzten   | Keine Angaben | (Fackelbrand: Nur Letalität, keine Verletzten)                | Letalität, Verbrennung 1., 2. und 3. Grades   | Letalität, beliebige Strahlungswerte | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter wie Wärmestromdichte und Wärmedosis, Massen- und Volumenanteil CO, CO <sub>2</sub> , Russ |
| <i>Lachenbrand</i>  |               |   |   |                                      |  |
| Nicht berücksichtigt  | Keine Angaben | Kein Lachenbrand bei Erdgashochdruckanlagen                   | Letalität, Verbrennung 1., 2. und 3. Grades   | Letalität, beliebige Strahlungswerte | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter wie Wärmestromdichte und Wärmedosis, Massen- und Volumenanteil CO, CO <sub>2</sub> , Russ |
| <i>Gaswolkenbrand</i>   |               |   |   |                                      |  |
| Nur Letalität, keine Verletzten   | Keine Angaben | Im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht berücksichtigt. | <u>Effects</u><br>Nicht berücksichtigt ausserhalb der Wolke<br><br><u>Riskcurves</u><br>Nur Letalität   | Keine Angabe zur Wirkung             | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Temperatur im zeitl. Verlauf)   |
| <i>UVCE (unconfined vapor cloud explosion)</i>                              |               |   |   |                                      |  |
| Nur Letalität, keine Verletzten   | Keine Angaben | Im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht berücksichtigt. | <u>Effects</u><br>Nicht berücksichtigt,<br>Anhaltspunkte zu Letalitäten infolge des Überdruckes sind möglicherweise in den Resultaten der Berechnungen unter „Damage (general description)“ zu finden. Um dies zu überprüfen, müsste eine Lizenz für Effects beschafft werden.<br>Folgender Workaround ist möglich: Effects kann (Modell Green Book p 10-22) anhand des Überdrucks eine Aussage zur Letalität machen. Der Überdruck muss dazu zuvor über das Multi-Energy berechnet werden.<br><br><u>Riskcurves</u><br>Nur Letalität | Keine Angabe zur Wirkung             | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Druck, Temperatur im zeitl. Verlauf)  |

| <b>Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)</b>                                  |  |   |   |  |  |
|---|--|---|---|--|--|
| <b>Stand der Technik</b>  |  |   | <b>Software-Tools</b>   |  |  |
| <b>HART</b>   | <b>Saphedra</b>  | <b>Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen</b>                   | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b>   | <b>Phast (DNV GL)</b>  | <b>FLACS (Gexcon AS)</b>   |
| <i>VCE (vapor cloud explosion, verdammt)</i>  |  |   |   |  |  |
| Nicht berücksichtigt  | Keine Angaben  | (Explosion Stationen: Nur Letalität, keine Verletzten)        | Nicht berücksichtigt  | Nicht berücksichtigt   | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Druck, Temperatur im zeitl. Verlauf)  |
| <b>Für letale Wirkung verwendete Parameter</b>  |  |   |   |  |  |
| <i>BLEVE</i>  |  |   |   |  |  |
| Hitzestrahlung<br>Druck, Trümmerwurf nicht berücksichtigt   | Keine Angaben  | (Feuerball: Hitzestrahlung)                                   | Hitzestrahlung, direkte Druckwirkung<br><br><u>Effects</u><br>Über das Damage Model Mortalität durch Glasscherben und Gebädefragmente infolge der Druckwirkung<br><br><u>Riskcurves</u><br>Trümmerwurf nicht berücksichtigt   | Hitzestrahlung<br>Für Druckwirkung wird keine Letalität berechnet  | Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround  |
| <i>Jet Fire</i>   |  |   |   |  |  |
| Hitzestrahlung<br>Rauch, toxische Brandgase, Sekundärbrände und -explosionen nicht berücksichtigt                   | Keine Angaben  | (Fackelbrand: Hitzestrahlung)                                 | Hitzestrahlung<br>Rauch, toxische Brandgase, Sekundärbrände und -explosionen nicht berücksichtigt   | Hitzestrahlung   | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter wie Wärmestromdichte und Wärmedosis, Massen- und Volumenanteil CO, CO <sub>2</sub> , Russ |
| <i>Lachenbrand</i>  |  |   |   |  |  |
| Nicht berücksichtigt  | Keine Angaben  | Kein Lachenbrand bei Erdgashochdruckanlagen                   | Hitzestrahlung<br>Rauch, toxische Brandgase, Sekundärbrände und -explosionen nicht berücksichtigt   | Hitzestrahlung<br>Das POLF Modell kann in einer erweiterten Version (nicht in der Standard Phast Version enthalten) an das UDM Modell gekoppelt werden. Ev. ist eine Ausbreitungsberechnung der Brandgase möglich. | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter wie Wärmestromdichte und Wärmedosis, Massen- und Volumenanteil CO, CO <sub>2</sub> , Russ |
| <i>Gaswolkenbrand</i>   |  |   |   |  |  |
| Innerhalb-ausserhalb Gaswolke (LFL)<br>(Unterscheidung innerhalb-ausserhalb Gaswolke ist ein gebräuchlicher Ansatz) | Beschränkung auf Parameter Innerhalb-ausserhalb der Gaswolke wird in Frage gestellt, da ein grosser Gaswolkenbrand infolge der Hitzestrahlung auch ausserhalb der Gaswolke beträchtliche Schäden zur Folge haben kann. Die Verwendung der unteren Zündgrenze als Flammengrenze wird aber gutgeheissen. | Im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht berücksichtigt. | <u>Effects</u><br>Bei Verwendung des Multi Energy Modells kann für die Berechnungen eine „Reporting distance Xd“ eingegeben werden. Möglicherweise können in den Resultaten unter „Damage (general description) at Xd“ Angaben hierzu gefunden werden. Um dies zu überprüfen, wäre eine Effects Lizenz notwendig.<br><br><u>Riskcurves</u><br>Berücksichtigt<br>Wie die Berechnung erfolgt ist aber aufgrund der vorliegenden Grundlagen nicht nachvollziehbar. | Keine Berechnung der Letalität<br>Unterscheidung innerhalb-ausserhalb Gaswolke (LFL) ist möglich   | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Temperatur im zeitl. Verlauf)   |

| Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)  |               |  |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
|--|---------------|--|--|--|---|------|---------------------------------------|------|------|---------------------------------------|---|----------------------------|---------------|---|---|--|---|
| Stand der Technik  |               |  | Software-Tools   |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| HART   | Saphedra      | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen                         | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)   | FLACS (Gexcon AS)   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| <i>UVCE (unconfined vapor cloud explosion)</i>   |               |  |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| Innerhalb-ausserhalb Gaswolke (LFL)<br>Überdruck ausserhalb der Gaswolke<br>Trümmerwurf nicht berücksichtigt   | Keine Angaben | Im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht berücksichtigt | <u>Effects</u><br>Nicht direkt berücksichtigt, Über das Damage Modell kann dem Überdruck eine Letalität zugeordnet werden.<br><br><u>Riskcurves</u><br>Berücksichtigt<br>Wie die Berechnung erfolgt ist aber aufgrund der vorliegenden Grundlagen nicht nachvollziehbar. | Keine Letalitätsberechnung für Überdruck                     | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Druck, Temperatur im zeitl. Verlauf) |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| <i>VCE (vapor cloud explosion, verdammt)</i>   |               |  |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| Nicht berücksichtigt   | Keine Angaben | (Explosion Stationen: maximaler statischer Überdruck)        | Nicht berücksichtigt   | Keine Letalitätsberechnung für Überdruck                     | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Druck, Temperatur im zeitl. Verlauf) |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| <b>Berechnung Letalität (mit Probit-Funktion, Bereiche mit unterschiedlicher Letalität etc.)</b>   |               |  |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| <i>BLEVE Hitzestrahlung</i>  |               |  |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| Letalität Hitzestrahlung Kollektives Risiko (Bei individuellem Risiko teilweise Abweichungen) <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Ort</th> <th>In Gebäuden</th> <th>im Freien</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>In der Flamme (Jet, Projektion Feuerball in die Horizontale)</td> <td>100%</td> <td>100%</td> </tr> <tr> <td>Hitzestrahlung &gt; 35 kW/m<sup>2</sup></td> <td>100%</td> <td>100%</td> </tr> <tr> <td>Hitzestrahlung &lt; 35 kW/m<sup>2</sup></td> <td>0</td> <td>0.14 · P<sub>b</sub><br/>*</td> </tr> </tbody> </table> <p>* Schutzfaktor Bekleidung = 0.14<br/>                     P<sub>b</sub>: Letalität gemäss Probit <math>Pr = -36.48 + 2.56 \cdot \ln(q^{4/3} \cdot t)</math><br/>                     Q = Wärmefluss am betreffenden Ort [W/m<sup>2</sup>]<br/>                     T = Expositionszeit = Abbranddauer Feuerball t, max. 20s<br/>                     Identisch mit Purple Book und Tsao &amp; Perry/Green Book (bis auf Nachkommastelle bei der Probit)</p> | Ort           | In Gebäuden  | im Freien  | In der Flamme (Jet, Projektion Feuerball in die Horizontale) | 100%  | 100% | Hitzestrahlung > 35 kW/m <sup>2</sup> | 100% | 100% | Hitzestrahlung < 35 kW/m <sup>2</sup> | 0 | 0.14 · P <sub>b</sub><br>* | Keine Angaben | <b>Erläuterungen Letalitäten bei Brandszenarien (Feuerball und Fackelbrand bei Erdgashochdruckleitungen):</b><br>Es wurden verschiedene Hitzestrahlungs-Letalitäts-Beziehungen evaluiert, die zur Bestimmung der Letalität infolge der Hitzestrahlung eines Feuerballs oder Fackelbrands verwendet werden sollten, vor allem basierend auf zwei Publikationen des britischen HSE (Hockey and Rew 1996 und Rew 1997): Eisenberg Vulnerability Model, Tsao&Perry/Green Book, Lees Model, HSE dangerous dose und significant likelihood of death. Dabei wurden grosse Abweichungen zwischen den verschiedenen Modellen festgestellt, siehe nachfolgende Abbildung. | Berechnung mit frei wählbaren Probit-Parametern. Standardwerte sind analog HART | Berechnung mit frei wählbaren Probit-Parametern.<br>Standardwerte:<br>$Pr = -36.38 + 2.56 \cdot \ln(q^{1.3333} \cdot t)$<br>(praktisch identisch wie HART) | Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround |
| Ort  | In Gebäuden   | im Freien  |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| In der Flamme (Jet, Projektion Feuerball in die Horizontale)   | 100%          | 100%   |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| Hitzestrahlung > 35 kW/m <sup>2</sup>  | 100%          | 100%   |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |
| Hitzestrahlung < 35 kW/m <sup>2</sup>  | 0             | 0.14 · P <sub>b</sub><br>*                                   |  |  |   |      |                                       |      |      |                                       |   |                            |               |   |   |  |   |

| Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzebestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf) |                      |  |   |   |   |
|---|----------------------|--|---|---|---|
| Stand der Technik   |                      |  | Software-Tools  |   |   |
| HART  | Saphedra             | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen   | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)                                  | FLACS (Gexcon AS)   |
|   |                      |  <p>Ein klarer Favorit konnte nicht festgestellt werden. Das Modell von Eisenberg wird gelegentlich kritisiert, da es auf Daten zu den Atombombenabwürfen in Hiroshima und Nagasaki basiert. Dabei trat vor allem Strahlung im kurzwelligen UV-Bereich auf, während es sich bei den Kohlenwasserstoffbränden um Strahlung im langwelligen Infrarotbereich handelt. Es wurde schliesslich für den Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen ein Ansatz basierend auf den Schwellenwerten des HSE gewählt, da diese nach den Modellen Eisenberg Vulnerability Model und Tsao&amp;Perry/Green Book entwickelt wurden. Allerdings handelt es sich dabei nicht um kontinuierliche Probit Funktionen, sondern um Schwellenwerte. Die Schwellenwerte und Probit-Gleichungen der verschiedenen Ansätze können den Erläuterungen zum Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen „Letalitäten bei Brandszenarien“ S. 16 bis 27 entnommen werden.</p> |   |   |   |
| <i>BLEVE Druckwelle</i>   |                      |  |   |   |   |
| Nicht berücksichtigt  | Nicht berücksichtigt | Kein BLEVE Szenarium im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen<br>Beim Feuerballszenarium wird die Druckentwicklung vernachlässigt.  | <u>Effects</u><br>Nicht berücksichtigt<br>Manuell kann über der Überdruck bei einer wählbaren Reporting Distance Xd berechnet werden und anhand des | Für Druckwirkung wird keine Letalität berechnet | Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround |

| <b>Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)</b>   |  |  |   |  |  |
|--|--|--|---|--|--|
| <b>Stand der Technik</b>   |  |  | <b>Software-Tools</b>   |  |  |
| <b>HART</b>  | <b>Saphedra</b>  | <b>Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen</b>  | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b>   | <b>Phast (DNV GL)</b>  | <b>FLACS (Gexcon AS)</b>   |
|  |  |  | Überdrucks Abschätzungen zu Schäden gemacht werden.<br><br><u>Riskcurves</u><br>Berechnet den Peak Overpressure. Über das Damage Modell kann dann eine Abschätzung zur Letalität gemacht werden.  |  |  |
| <i>BLEVE Trümmerwurf</i>   |  |  |   |  |  |
| Nicht berücksichtigt   | Nicht berücksichtigt   | Kein BLEVE Szenarium im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen<br>Trümmerwurf (z.B. infolge Leitungsbruchs) wird nicht berücksichtigt. | <u>Effects</u><br>Möglicherweise kann über das Modell zur Berechnung des Trümmerwurfes über den Output „Damage (general description) at Xd“ eine Aussage getroffen werden. Hierzu würde eine Lizenz für Effects notwendig.<br><br><u>Riskcurves</u><br>Nicht berücksichtigt | Berechnet keinen Trümmerwurf   | Berechnet keinen Trümmerwurf   |
| <i>Jet Fire Hitzestrahlung</i>   |  |  |   |  |  |
| Letalität Hitzestrahlung<br>Kollektives Risiko wie BLEVE,<br>Expositionszeit t = 20 s<br><b>Identisch mit Purple Book und Tsao &amp; Perry/Green Book (bis auf Nachkommastelle bei der Probit)</b> | Keine Angaben  | Siehe BLEVE Hitzestrahlung   | Berechnung über frei wählbare Probit-Parameter  | Berechnung über frei wählbare Probit-Parameter   | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter wie Wärmestromdichte und Wärmedosis |
| <i>Lachenbrand Hitzestrahlung</i>  |  |  |   |  |  |
| Nicht berücksichtigt   | Keine Angaben  | Kein Lachenbrand bei Erdgashochdruckanlagen  | Berechnung über frei wählbare Probit-Parameter  | Berechnung über frei wählbare Probit-Parameter   | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter wie Wärmestromdichte und Wärmedosis |
| <i>Gaswolkenbrand Hitzestrahlung</i>   |  |  |   |  |  |
| 100% Letalität innerhalb Gaswolke, 0% ausserhalb Gaswolke, gilt für Personen in Gebäuden und ausserhalb<br><b>Identisch mit Purple Book</b>  | <b>Saphedra Gap Analysis</b><br>Beschränkung auf Parameter Innerhalb-ausserhalb der Gaswolke wird in Frage gestellt, da ein grosser Gaswolkenbrand infolge der Hitzestrahlung auch ausserhalb der Gaswolke beträchtliche Schäden zur Folge haben kann. Die Verwendung der unteren Zündgrenze als Flammengrenze wird aber gutgeheissen.<br><br><b>Saphedra Identification of existing tools:</b><br>Gaswolkenbrand verursacht in der Regel ausserhalb der Gaswolke aufgrund der kurzen Abbranddauer keine Schäden. (Widerspruch zu Saphedra Gap Analysis) | Das Gaswolkenzenarium wird im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht berücksichtigt.   | <u>Effects</u><br>Nicht berücksichtigt.<br><br><u>Riskcurves</u><br>Berücksichtigt<br>Wie die Berechnung erfolgt, ist aber aufgrund der vorliegenden Grundlagen nicht nachvollziehbar.  | Keine Berechnung der Letalität<br>Unterscheidung innerhalb-ausserhalb Gaswolke (LFL) ist möglich | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Temperatur im zeitl. Verlauf) |

| Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)   |               |   |  |  |   |
|---|---------------|---|--|--|---|
| Stand der Technik   |               |   | Software-Tools   |  |   |
| HART  | Saphedra      | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen  | Effects / Riskcurves (TNO)   | Phast (DNV GL)                           | FLACS (Gexcon AS)   |
| <i>UVCE (unconfined vapor cloud explosion) Explosionsdruck</i>  |               |   |  |  |   |
| Letalität Personen im Freien:<br>$P_{\bar{U}} > 0.3 \text{ bar}$ : 100%<br>$P_{\bar{U}} < 0.3 \text{ bar}$ : 0%<br>Letalität Personen in Gebäuden:<br>$P_{\bar{U}} > 0.3 \text{ bar}$ : 100%<br>$0.3 \text{ bar} > P_{\bar{U}} < 0.1 \text{ bar}$ : 2.5%<br>$P_{\bar{U}} < 0.1 \text{ bar}$ : 0%<br>Identisch mit Purple Book | Keine Angaben | UVCE's werden im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht berücksichtigt.   | Bei Verwendung des <b>Multi-Energy Modells</b> kann für die Berechnungen eine „Reporting distance $X_d$ “ eingegeben werden. Möglicherweise können in den Resultaten unter „Damage (general description) at $X_d$ “ Angaben hierzu gefunden werden. Um dies zu überprüfen, wäre eine Effects Lizenz notwendig. | Keine Letalitätsberechnung für Überdruck | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Druck im zeitl. Verlauf) |
| <i>VCE (Vapor cloud explosion, verdämmt) Explosionsdruck</i>  |               |   |  |  |   |
| Nicht berücksichtigt  | Keine Angaben | <b>Erläuterungen Stationen (verdämte Explosionen in Stationsgebäuden):</b><br>Es wurde für den Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen für verdämte Explosionen eine grobe Übersicht über bestehende Letalitätskriterien für Explosionsdrücke erstellt, siehe untenstehende Abbildung.  <p>Dabei ergaben sich grosse Unterschiede. Es konnte nicht festgestellt werden, welcher Ansatz der Realität am besten entspricht. Für den Rahmenbericht wurden die folgenden Letalitätskriterien festgelegt.</p> Letalität Personen im Freien:<br>$P_{\bar{U}} < 1 \text{ bar}$ : 0%<br>$P_{\bar{U}} > 1 \text{ bar}$ : 1%<br>$P_{\bar{U}} > 2 \text{ bar}$ : 99% | Nicht berücksichtigt   | Keine Letalitätsberechnung für Überdruck | Berechnet keine Effekte auf Menschen, liefert aber verwendbare Parameter (v.a. Druck im zeitl. Verlauf) |

| Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzeabstrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)  |               |  |   |                      |   |
|--|---------------|--|---|----------------------|---|
| Stand der Technik  |               |  | Software-Tools  |                      |   |
| HART   | Saphedra      | Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen   | Effects / Riskcurves (TNO)  | Phast (DNV GL)       | FLACS (Gexcon AS)   |
|  |               | Letalität Personen in Gebäuden:<br>P <sub>ü</sub> > 0.4 bar: 20-50%<br>P <sub>ü</sub> < 0.4 bar: 0%  |   |                      |   |
| Berücksichtigung Schutzmassnahmen (Gebäude)  |               |  |   |                      |   |
| BLEVE  |               |  |   |                      |   |
| Vollständiger Schutz vor Hitzeabstrahlung für Personen in Gebäuden bei Hitzeabstrahlungsintensität < 35 kW/m <sup>2</sup> , sonst keine Schutzwirkung<br>Identisch mit Purple Book | Keine Angaben | Keine BLEVE-Szenarien im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen<br>-> zum Vergleich Szenarium Feuerball im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen:<br><b>Erläuterungen Letalitäten bei Brandszenarien:</b><br>Keine Berücksichtigung einer allfälligen Druckwelle bei einem Feuerball bei einer Erdgashochdruckleitung<br>Für Letalitäten infolge Druckwelle siehe VCE (vapor cloud explosion)<br>Schutzwirkung Gebäude vor der Hitzeabstrahlung beim Feuerball bei einer Erdgashochdruckleitung wird berücksichtigt.<br>Letalitäten für Personen in Gebäuden festgelegt aufgrund grober Betrachtungen zur Zündung von Materialien infolge Hitzeabstrahlung und Verhalten der Fenster bei Hitzeeinwirkung (Dauer bis zum Bersten). Auf dieser Basis wird geschätzt, wie viele Personen ins Freie fliehen müssen und dort der Hitzeabstrahlung des Brandes an der Erdgashochdruckleitung ausgesetzt sind. Die Letalitäten für Personen in Gebäuden ergeben sich dann vereinfacht betrachtet aus dem Prozentsatz der Personen, die ins Freie fliehen müssen und deren Letalität im Freien.<br>Die Letalitäten für Personen in Gebäuden sind somit abhängig von der Distanz zur Flamme<br>Ursprünglich wurden verschiedene Letalitäten für normale Gebäude (Wohn-, kleine und mittlere Gewerbebetriebe) und für grosse Industrie und Gewerbegebäude mit Tiefgarage definiert. Der Einfachheit halber wurden diese dann aber gemittelt und auf alle Gebäude angewandt. | <u>Effects</u><br>Bezüglich der Wärmestrahlung nicht berücksichtigt. Jedoch kann berechnet werden, welche Wirkung die Druckwelle auf Gebäude (Brick Houses, American-Style Houses) hat, wodurch die Schutzwirkung beeinflusst wird.<br><u>Riskcurves</u><br>Standardmässig 100% Letalität bei mehr als 35 kW/m <sup>2</sup><br>Dem manuell festgelegten „Peak pressure total destruction zone“ kann eine Letalität zugeordnet werden. (Standardwerte: 1.0 bei 300mbar)<br>Ebenso für „Peak pressure inside (glass) damage“ (Standardwerte: 0.025 bei 100mbar) | Nicht berücksichtigt | Verwendung von FLACS beschränkt sinnvoll, da nicht validierter Workaround |

| <b>Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)</b>   |                 |  |                                   |                       |  |
|--|-----------------|--|-----------------------------------|-----------------------|--|
| <b>Stand der Technik</b>   |                 |  | <b>Software-Tools</b>             |                       |  |
| <b>HART</b>  | <b>Saphedra</b> | <b>Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen</b>  | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b> | <b>Phast (DNV GL)</b> | <b>FLACS (Gexcon AS)</b>   |
| <i>Jet Fire</i>  |                 |  |                                   |                       |  |
| Vollständiger Schutz vor Hitzestrahlung für Personen in Gebäuden bei Hitzestrahlungsintensität <35 kW/m <sup>2</sup> , sonst keine Schutzwirkung<br><b>Identisch mit Purple Book</b> | Keine Angaben   | Keine Jet Fire-Szenarien im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen<br>-> zum Vergleich Szenarium Fackelbrand im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen<br><b>Erläuterungen Letalitäten bei Brandszenarien:</b><br>Prinzip der Herleitung gleich wie beim Szenarium Feuerball, siehe Modul 5 Wirkung auf den Menschen, Berücksichtigung Schutzmassnahmen Gebäude, BLEVE im vorliegenden Dokument. | Keine Angaben                     | Nicht berücksichtigt  | Die Simulation mit FLACS Fire berücksichtigt Hindernisse wie z.B. Wände von Gebäuden sowohl bezüglich Ablenken der Flamme als auch als Strahlungshindernis. Es können vereinfacht thermisch aktive Wände (Wände, die sich materialspezifisch erwärmen und Wärme leiten) definiert werden. So kann stark vereinfacht z.B. der Temperaturverlauf in einem Gebäude berechnet werden.<br>Zur Validität spezifisch bezüglich der Wirkung von Wänden liegen keine Angaben vor.   |
| <i>Gaswolkenbrand</i>  |                 |  |                                   |                       |  |
| Keine Schutzwirkung berücksichtigt<br><b>Identisch mit Purple Book</b>   | Keine Angaben   | Das Gaswolkenzenarium wird im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen nicht berücksichtigt.   | Keine Angaben                     | Nicht berücksichtigt  | Simulation der abbrennenden Gaswolke unter Berücksichtigung von Hindernissen wie Wänden möglich. Mit den „Panels“ kann auch stark vereinfacht eine Zerstörung infolge Druckeinwirkung berücksichtigt werden. So kann z.B. sehr grob das Eindringen von heissen Brandgasen in ein Gebäude simuliert werden. Folgebrände werden aber nicht abgebildet. Ebenfalls können Berechnungen zu den Druckverhältnissen im Gebäude durchgeführt werden. Eine allfällige (teilweise) Zerstörung des Gebäudes muss sehr stark vereinfacht wiedergegeben werden, so dass die Übertragbarkeit der Ergebnisse auf die Realität sehr gut geprüft werden muss.<br>Für Gaswolkenimulationen wurden bei Gexcon AS umfangreiche Validierungsanstrengungen unternommen, allerdings mit Fokus auf die Druckentwicklung. Wie gut die Validität aber im Detail z.B. beim Eindringen des abbrennenden Gemischs in eine Geometrie oder bei den Panels ist, kann mit vorliegenden Unterlagen nicht festgestellt werden.<br>Grobe Simulation z.B. des Eindringens von heissen Brandgasen in ein Gebäude möglich (ohne Folgebrände).<br>Validität im Detail unbekannt, zur Druckentwicklung beim Abbrand von |

| <b>Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzeabstrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)</b>  |                 |   |  |   |   |
|---|-----------------|---|--|---|---|
| <b>Stand der Technik</b>  |                 |   | <b>Software-Tools</b>  |   |   |
| <b>HART</b>   | <b>Saphedra</b> | <b>Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen</b>   | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b>  | <b>Phast (DNV GL)</b>   | <b>FLACS (Gexcon AS)</b>  |
|   |                 |   |  |   | Gaswolken umfangreiche Validierungsanstrengungen  |
| <i>Lachenbrand</i>  |                 |   |  |   |   |
| Szenario wird nicht berücksichtigt  | Keine Angaben   | Keine Lachenbrand-Szenarien im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen<br>Für Analogie siehe Jet Fire  | Keine Angaben<br>Möglicherweise werden die gleichen Annahmen, wie bei der Schutzwirkung vor der Wärmestrahlung des BLEVE ausgeführt, eingesetzt.   | Nicht berücksichtigt  | Wie Modul 5 Berücksichtigung Schutzmassnahmen (Gebäude), Jet Fire im vorliegenden Dokument  |
| <i>UVCE (unconfined vapor cloud explosion)</i>  |                 |   |  |   |   |
| Bei Explosion keine Schutzwirkung sondern: Im Bereich $0.3 \text{ bar} > P_{\bar{u}} < 0.1 \text{ bar}$ höhere Letalität für Personen in Gebäuden (2.5%) als im Freien (0%)<br><b>Identisch mit Purple Book</b><br><br>(Üblicherweise wird bei Personen in Gebäuden die Letalität infolge Explosionsdruck höher angesetzt als im Freien, da Personen in Gebäuden durch Gebäudeeinsturz gefährdet sind.) | Keine Angaben   | Keine UVCE-Szenarien im Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen<br>Für Letalitäten infolge Druckwelle siehe VCE (vapor cloud explosion)  | <u>Effects</u><br>Bezüglich der Wärmestrahlung nicht berücksichtigt. Jedoch kann berechnet werden, welche Wirkung die Druckwelle auf Gebäude (Brick Houses, American-Style Houses) hat, wodurch die Schutzwirkung beeinflusst wird.<br><br><u>Riskcurves</u><br>Keine Angaben - Es kann berechnet werden, welche Wirkung die Druckwelle auf Gebäude (Brick Houses, American-Style Houses) hat, wodurch die Schutzwirkung beeinflusst wird. | Nicht berücksichtigt  | Wie Modul 5 Berücksichtigung Schutzmassnahmen (Gebäude), Gaswolkenbrand im vorliegenden Dokument  |
| <i>VCE (vapor cloud explosion)</i>  |                 |   |  |   |   |
| Szenario wird nicht berücksichtigt  | Keine Angaben   | Für Explosionsdruck keine Schutzwirkung, sondern Erhöhung der Letalität gegenüber Personen im Freien (Einsturz von Gebäuden)<br>Letalität Personen in Gebäuden bei Überdruck von:<br>$P_{\bar{u}} > 0.4 \text{ bar}$ : 20-50%<br>$P_{\bar{u}} < 0.4 \text{ bar}$ : 0% | Nicht berücksichtigt   | Nicht berücksichtigt  | Wie Modul 5 Berücksichtigung Schutzmassnahmen (Gebäude), Gaswolkenbrand im vorliegenden Dokument  |
| <i>Sekundäre Wirkung Brand (Rauchgase etc.)</i>   |                 |   |  |   |   |
| Nicht berücksichtigt  | Keine Angaben   | Nicht berücksichtigt  | Nicht berücksichtigt   | Ev. Berechnung der Rauchgasausbreitung bei Lachenbrand mit erweiterter Version (nicht in der normalen Lizenz enthalten) des POLF Modells möglich. | Bei Simulationen des Abbrands von Gaswolken kann die Konzentration von Abbrandprodukten (nicht nach Stoff aufgelöst, nur insgesamt) wiedergegeben werden.<br>Bei Simulationen mit FLACS Fire kann die Konzentration von Russ, CO und CO <sub>2</sub> berechnet werden.<br>Folgebrände können nicht berücksichtigt werden. |

| <b>Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzeabstrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)</b> |                 |   |                                   |                       |                                      |
|--|-----------------|---|-----------------------------------|-----------------------|--------------------------------------|
| <b>Stand der Technik</b>   |                 |   | <b>Software-Tools</b>             |                       |                                      |
| <b>HART</b>  | <b>Saphedra</b> | <b>Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen</b>   | <b>Effects / Riskcurves (TNO)</b> | <b>Phast (DNV GL)</b> | <b>FLACS (Gexcon AS)</b>             |
| <i>Berücksichtigung Massnahmen zur Selbst- und Fremdrettung</i>                      |                 |   |                                   |                       |                                      |
| Nicht berücksichtigt   | Keine Angaben   | Grobe, ansatzweise Berücksichtigung, pauschal für alle Personen:<br>Begrenzung der Expositionszeit<br>Hitzeabstrahlung wird dadurch begründet, dass betroffene Personen vom Brand davonrennen<br><br>Annahme beim Szenarium Feuerball infolge Totalversagen, dass die Personen in einem Gebäude die Feuerballphase überdauern können, nachher aus dem brennenden Gebäude fliehen und bei der weiteren Flucht vom Brand weg im Freien der Hitzeabstrahlung des auf den Feuerball folgenden Fackelbrands ausgesetzt sind. | Nicht berücksichtigt              | Nicht berücksichtigt  | Berechnet keine Effekte auf Menschen |

## 3.6.1 Fazit Modul 5 (Wirkung auf den Menschen)

### 3.6.1.1 Betrachtete Wirkungen

Typischerweise werden in den Modellen alle direkt von den untersuchten Brand- und Explosionsszenarien ausgehenden Wirkungen auf den Menschen untersucht. Diese beinhalten sowohl die Hitzestrahlung, wie auch der Explosionsdruck. Sekundäre Wirkungen wie Trümmerwurf und die Wirkung sekundärer Brandereignisse oder Brandgase können in den untersuchten Software-Tools allerdings höchstens rudimentär abgebildet werden.

Die Wirkung auf den Menschen wird über die Letalität als Indikator quantifiziert. Bei den Software-Tools von TNO (Effects und Riskcurves) können zudem bei einigen Brandszenarien Verbrennungen 1., 2. und 3. Grades betrachtet werden.

FLACS liefert im Gegensatz zu den anderen Ansätzen keine direkten Angaben zur Wirkung auf den Menschen, wohl aber Resultate bezüglich der physikalischen Grössen, aus welchen sich Letalitäten ableiten lassen.

### 3.6.1.2 Letalität Hitzestrahlung

Die Letalität durch Hitzestrahlung wird bei den untersuchten Modellen (mit Ausnahme von FLACS) mittels frei wählbarer Probitparameter bestimmt. Als Default-Werte sind die folgenden Probitwerte üblich, teilweise mit Abweichungen im Nachkommabereich:

$$Pr = -36.48 + 2.56 \cdot \ln(q^{4/3} \cdot t)$$

Dabei handelt es sich um die Probitfunktion von Tsao&Perry, die auch im Purple Book und im Green Book enthalten ist.

Beim Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen wurde jedoch ein Ansatz basierend auf den Schwellenwerten des HSE für die dangerous dose und die significant likelihood of death gewählt.

Beim Gaswolkenbrand wird gemäss HART für Personen innerhalb der Gaswolke 100 % Prozent Letalität, ausserhalb der Gaswolke 0 % Letalität angenommen.

### 3.6.1.3 Letalität Druckwelle

Die Letalität infolge Druckwelle eines BLEVEs wird in den untersuchten Modellen nicht berücksichtigt.

Der Ansatz von HART für die Betrachtung der Druckwelle bei einem Gaswolkenbrand entspricht jenem des Purple Books.

Bei der Erarbeitung des Rahmenberichts Erdgashochdruckanlagen wurden grosse Unterschiede bei den Letalitätskriterien festgestellt. Es wurde für verdämmte Explosionen (VCE) ein Ansatz gewählt, der etwa in der Mitte des durch die verschiedenen Ansätze aufgespannten Feldes liegt.

#### **3.6.1.4 Berücksichtigung Schutzmassnahmen (Gebäude)**

Gemäss HART wird vollständiger Schutz vor Hitzestrahlung für Personen in Gebäuden bei Hitzestrahlungsintensität  $<35 \text{ kW/m}^2$  angenommen.

Für den Rahmenbericht Erdgashochdruckanlagen wurden für die Einwirkung von Hitzestrahlung Betrachtungen zur Entzündung von Materialien aussen und im Innern von Gebäuden und zum Verhalten von Fensterscheiben (Dauer bis zum Bersten) vorgenommen und darauf basierend grobe Überlegungen zur Schutzwirkung und Fluchtmöglichkeiten für zwei verschiedene Gebäudekategorien angestellt.

Es wurde geschätzt, wie viele Personen zu welchem Zeitpunkt ins Freie fliehen müssen und dort der Hitzestrahlung des Brandes an der Erdgashochdruckleitung ausgesetzt sind. Die Letalitäten für Personen in Gebäuden ergeben sich dann vereinfacht betrachtet aus dem Prozentsatz der Personen, die ins Freie fliehen müssen und deren Letalität im Freien.

Die Letalitäten für Personen in Gebäuden sind somit abhängig von der Distanz zur Flamme

Ursprünglich wurden verschiedene Letalitäten für normale Gebäude (Wohn-, kleine und mittlere Gewerbebetriebe) und für grosse Industrie und Gewerbegebäude mit Tiefgarage definiert. Der Einfachheit halber wurden diese dann aber gemittelt und auf alle Gebäude angewandt.

Bei den übrigen untersuchten Modellen wird die Schutzwirkung von Gebäuden nicht berücksichtigt.

#### **3.6.1.5 Berücksichtigung Massnahmen zur Selbst- und Fremdrettung**

Ausser im Rahmenbericht für Erdgashochdruckanlagen, wo eine grobe Berücksichtigung umgesetzt wurde, wird die Selbst- und Fremdrettung nicht berücksichtigt.

## 4 Ergebnisse Vergleichsrechnungen

Die Berechnungsergebnisse sind im Anhang H zusammengestellt.

### 4.1 Berechnung mit Phast Standard Tröpfchenmodell (Default)

Bei den Phast-Berechnungen mit dem Phast Standard Tröpfchenmodell (Default) ergibt sich bei der Variante mit 4 m/s Windgeschwindigkeit und Pasquill Klasse D (nachfolgend Variante 4D genannt) eine deutlich höhere Reichweite des zündbaren Bereichs in Windrichtung als bei 1 m/s Windgeschwindigkeit und Pasquill Klasse F (nachfolgend Variante 1F genannt). Der Unterschied liegt etwa bei einem Faktor 2.

Die Auswertungen zeigen, dass im Modell der Aerosolanteil in der Wolke innert weniger Sekunden verdampft, so dass sich kein Rainout und keine Lache bilden. Dies ist eine mögliche Erklärung dafür, dass sich bei der Variante 4D höhere Reichweiten des zündbaren Bereichs ergeben: Durch die sehr rasche Verdampfung gelangt ein grosser Teil der Freisetzung sofort in die Wolke und wird vom Wind mitgetragen. Die Verdünnung erfolgt dann während dem die Wolke davongetragen wird. Weht der Wind schneller, legt die Wolke einen grösseren Weg zurück während dem sie verdünnt wird.

Die Fläche, die während dem gesamten Ausbreitungsvorgang irgendwann im zündbaren Bereich zu liegen kommt und die maximale Reichweite des zündbaren Bereichs sind bei den beiden Varianten mit 10 cm bzw. 1 m Surface Roughness sehr ähnlich.

### 4.2 Phast-Berechnungen mit dem Purple Book Tröpfchenmodell

Bei den Phast-Berechnungen mit dem Purple Book Tröpfchenmodell (nicht Default, vom DNV GL Support für den vorliegenden Fall empfohlen) ergeben sich massiv grössere Ausbreitungsdistanzen und Abmessungen des zündbaren Bereichs als beim Phast Standard Tröpfchenmodell (mindestens Faktor 2, quer zur Windrichtung sogar mehr als Faktor 7 im Vergleich zum Phast Standard Tröpfchenmodell).

Das Verhalten bezüglich Windgeschwindigkeit ist genau umgekehrt als beim Phast Standard Tröpfchenmodell: Bei der Variante 1F reicht der zündbare Bereich weiter als bei der Variante 4D.

Der Phasenübergang von der Flüssig- in die Gasphase verläuft bei der Berechnung mit dem Purple Book Tröpfchenmodell viel langsamer als beim Phast Standard Tröpfchenmodell, da im vorliegenden Fall beim Purple Book Tröpfchenmodell die Verdampfung aus der Lache stattfindet und beim Phast Standard Tröpfchenmodell die Tröpfchen direkt in der Luft verdampfen. Die Verdampfungsrates aus der Lache und die

Ausdehnung der Lache erreichen bei der Berechnung mit dem Purple Book Tröpfchenmodell nach ca. 40 s das Maximum.

Eine mögliche Erklärung für das im Vergleich zum Phast Standard Tröpfchenmodell umgekehrte Verhalten der Varianten 1F und 4D ist, dass mit dem Purple Book Tröpfchenmodell die Verdampfung deutlich langsamer als mit dem Standard Tröpfchenmodell erfolgt. Bei stärkerem Wind wird deshalb beim Purple Book die freigesetzte Gasphase laufend stärker verdünnt als bei schwächerem Wind.

Im Gegensatz zur Berechnung mit dem Phast Standard Tröpfchenmodell fallen mit dem Purple Book Tröpfchenmodell die maximalen Ausbreitungsdistanzen zur unteren Zündgrenze bei 1 m Surface Roughness deutlich tiefer aus als bei 10 cm Surface Roughness.

### **4.3 Effects**

Bei Effects ergibt die Variante 4D minim grössere Ausbreitungsdistanzen zur unteren Zündgrenze als die Variante 1F. Somit verhalten sich die Ergebnisse bei Effects bezüglich Windgeschwindigkeit im gleichen Sinn wie bei der Berechnung mit dem Phast Standard Tröpfchenmodell, allerdings viel weniger deutlich.

Mit dem Purple Book Tröpfchenmodell fällt die maximalen Ausbreitungsdistanzen zur unteren Zündgrenze bei 1 m Surface Roughness tiefer aus als bei 10 cm Surface Roughness.

### **4.4 Vergleich Effects-Phast**

Die Berechnungsergebnisse von Effects unterscheiden sich teilweise stark von den beiden Phast Varianten, wobei die Ergebnisse der beiden Phast Varianten ebenfalls weit auseinander liegen.

Im Vergleich mit der Berechnung mit dem Phast Standard Tröpfchenmodell sind die Ausbreitungsdistanzen zur unteren Zündgrenzen bei Effects bis zu einem Faktor 4 in Windrichtung und Faktor 5 quer zum Wind grösser.

Tendenziell liegen die Effects-Ergebnisse näher bei den Phast Berechnungen mit dem Purple Book Tröpfchenmodell als bei den Phast Berechnungen mit dem Standard Tröpfchenmodell.

Die Ausbreitungsdistanz zur unteren Zündgrenze ist bei der Phast Berechnung mit dem Purple Book Tröpfchenmodell bei Surface Roughness 10 cm und bei Windgeschwindigkeit 1 m/s ca. ein Faktor 1.5 grösser als bei Effects. Bei der Variante 4D ist die Ausbreitungsdistanz bei der Berechnung mit dem Purple Book Tröpfchenmodell von Phast und bei der Effects-Berechnung ähnlich.

Bei Surface Roughness 1 m ist die Ausbreitungsdistanz zur unteren Zündgrenze bei der Phast Berechnung mit dem Purple Book Tröpfchenmodell bei Windgeschwindigkeit 1 m/s ebenfalls bis zu einem Faktor 1.5. Bei der Variante 4D und Surface Roughness 1 m ist die Ausbreitungsdistanz bei der Berechnung mit dem Phast Purple Book Tröpfchenmodell und bei der Effects-Berechnung ähnlich.

## 5 Schlussfolgerungen

### 5.1 Modelle

#### 5.1.1 Gasausbreitung

Im Bereich der Gasausbreitung sind Integralmodelle für komplexe Geometrien wie überbautes Gebiet, komplexe Topographien und im Nahbereich der Freisetzung ungeeignet. In diesen Situationen sind CFD-Berechnungen vorzuziehen. Bei komplexen Topographien stossen aber auch diese rasch an ihre Grenzen, beispielsweise dass sie nur bei relativ geringen Hangneigungen einsetzbar sind.

#### 5.1.2 Gaswolkenexplosion

Bei den Explosionsberechnungen für Gaswolken sind folgende Punkte wichtig:

- Für *Nahfeld*-Explosionsberechnungen (innerhalb oder in der Nähe der abbrennenden Gaswolke) sind CFD-Berechnungen die einzige Lösung, da semi-empirische Modelle für diese Bereiche nicht geeignet sind.
- Für Explosionen in *verdämmter Umgebung* sind CFD-Berechnungen oft die einzige Lösung. Das verbreitete semi-empirische Multi Energy Modell berücksichtigt keine Verdämmungen (confinement). Es eignet sich nur für UVCE (Unconfined Vapor Cloud Explosion).
- Explosionen in *überbauten Gebieten* mit teilweiser Verdämmung durch Gebäudefassaden, v.a. aber mit möglichem Eindringen von Gas in verdämmte Bereiche (offene Fenster in Häusern, Tiefgaragen, unter Brücken, Unterführungen, überdachte Bereiche, Parkgaragen, Autoabstellflächen (Verdämmung zwischen Asphalt und Fahrzeugunterboden), zwischen Gebäude etc.) können mit semi-empirischen Modellen in der Regel nicht realistisch wiedergegeben werden. Für realistische Berechnungen der zu erwartenden Drücke sind CFD-Berechnungen nötig.
- Bei Explosionen in *unverdämmten, aber mit Hindernissen durchsetzten Bereichen* (Gehölz, Büsche, Gesteine etc.) eignet sich die Multi Energy Method in Kombination mit der GAME correlation zur Bestimmung einer groben Grössenordnung der zu erwartenden Drücke. Für die GAME correlation müssen die Hindernisse aber unbedingt detailliert erfasst werden.
- Bei Explosionen *im freien Feld* kann die Multi Energy Method (mit GAME correlation) ebenfalls verwendet werden.
- Bei CFD Berechnungen muss darauf geachtet werden, dass die Druckwellen im Fernbereich (sofern von Interesse) nicht durch „Versmieren“ unterschätzt werden (siehe Modul 4b, Spalte FLACS).

## 5.2 Software-Tools

Der Vergleich der drei untersuchten Software-Tools Effects, Phast und FLACS ergibt folgendes Bild:

Das CFD Tool FLACS steht aufgrund der Komplexität und des Aufwandes in der Anwendung etwas ausser Konkurrenz, da ein Einsatz in erster Linie in denjenigen Fällen erwogen wird, in denen die anderen Software-Tools ungeeignet sind.

Die beiden Software-Tools Effects und Phast sind insgesamt auf einem üblichen Stand der Technik. Diesbezüglich sind sie etwa vergleichbar. Beide Software-Tools haben ihre Inkonsistenzen und in manchen Bereichen spezifische Stärken und Schwächen.

Vorbildlich sind bei Phast die sehr umfangreiche Dokumentation sowie die Angaben zur Validität. Dies kann allenfalls auch dazu führen, dass bei Phast Mängel sichtbar werden, die bei Effects aufgrund fehlender Angaben eventuell verborgen bleiben.

Vorsicht ist bei Phast bei der Berechnung von Gasausbreitungen bei sofortiger Freisetzung infolge Behälterbersten geboten, da hier allenfalls ein anderes Modell als das als Default eingestellte Standardmodell verwendet werden sollte. Die Methodik zur Modellierung der Gasausbreitung bei einer spontanen Freisetzung infolge Behälterbersten ist äusserst unsicher, was aber wahrscheinlich nicht ein spezifisches Problem von Phast ist. Ev. lohnt es sich, bei der Verwendung von Phast für Berechnungen von Gasausbreitungen bei sofortigen Freisetzungen infolge Behälterbersten auf die angekündigte neue Version 8 zu warten. Ebenfalls gibt es bei den Explosionsberechnungen widersprüchliche Begriffsverwendungen, die zu Missverständnissen und Fehlern führen können.

Eine Stärke von Phast sind die gut validierten Modelle für Jet Fires.

Effects ist allenfalls etwas besser geeignet als Phast bei der Berechnung von Lachenbränden, da in Effects das HSE-Zweizonen-Modell integriert ist. Ebenfalls ist die Umsetzung der Multi Energy Method in Effects etwas besser gelöst als in Phast, da die GAME correlation zur Bestimmung der Blast curve standardmässig in Effects integriert ist. In Phast scheint dafür eine Zusatzlizenz nötig zu sein.

### 5.3 Vergleichsrechnungen

Die *Vergleichsrechnungen* mit Phast und Effects (Gasausbreitung nach instantaner Freisetzung von 42'000 kg Propan aus einem Bahnkesselwagen) haben teilweise zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen geführt. Bei Phast haben auch die Berechnungen mit zwei verschiedenen im Software-Tool zur Verfügung stehenden Modellen für exakt dieselbe Situation sehr unterschiedliche Ergebnisse geliefert. Dies zeigt, dass die Modellrechnungen teilweise mit grossen Unsicherheiten behaftet sind. Die Ergebnisse der Modellierung sind stark vom eingesetzten Software-Tool, und innerhalb eines Software-Tools auch stark von der Wahl der zur Verfügung stehenden Modelle oder Submodelle abhängig. Die Ergebnisse der Modellrechnungen dürfen wegen dieser Unsicherheiten nur als Angabe einer groben Grössenordnung verstanden werden. Dies zeigen auch die Modellevaluationen durch die US DOT PHMSA, die stets einen Sicherheitsfaktor 2 aufgrund Modellunsicherheiten empfehlen.

Ebenfalls hat es sich gezeigt, dass die Wahl der Modelle sehr sorgfältig und ggf. in Rücksprache mit dem Hersteller der Software erfolgen muss. Es kann nicht davon ausgegangen werden, dass das Default Modell eines Software-Tools auch das für den zu modellierenden Fall passende Modell ist.

### 5.4 Empfehlungen Software-Tools

Eine grundsätzliche Empfehlung für ein bestimmtes Software-Tool kann auf Basis der im Rahmen der vorliegenden Studie gesammelten Erkenntnisse nicht abgegeben werden. Die untersuchten Tools Effects, Phast und FLACS haben in verschiedenen Gebieten ihre Stärken und Schwächen, so dass sich die Wahl danach richtet, was im konkreten Fall modelliert werden soll.

Die nachfolgenden Empfehlungen zu Modul 2 und 3 sind stark von den Erfahrungen mit den Vergleichsrechnungen Phast-Effects für eine sofortige Freisetzung von 42 Tonnen Propan in Kap. 4 geprägt, in deren Rahmen vertiefte Abklärungen zu Phast mit dem Hersteller DNV GL nötig waren. Von TNO lagen zu Effects keine ähnlich detaillierte Angaben vor.

Für kontinuierliche Freisetzungen sowie die verschiedenen Abbrandmodelle wurden keine Vergleichsrechnungen und damit verbundene Abklärungen durchgeführt. Diese unterschiedliche Informationstiefe sollte bei den nachfolgenden Empfehlungen beachtet werden.

### **5.4.1 Modul 1: Freisetzung**

Bezüglich der Modellierung der Freisetzung bieten Effects und Phast ähnliche Möglichkeiten auf einem aktuellen Stand. Für Phast spricht hier die Dokumentation der Validität. Bei FLACS ist die Auswahl der Freisetzungsarten, die modelliert werden können, gegenüber Effects und Phast eingeschränkt, so dass FLACS bei manchen Freisetzungsarten wegfällt.

### **5.4.2 Modul 2: Phasenübergang flüssig/gasförmig inkl. Lachenbildung**

Zur Modellierung der Verdampfung bis zum Rainout ist keine klare Empfehlung möglich. Die Abklärungen haben gezeigt, dass die methodische Situation insbesondere bei der Modellierung sofortiger Freisetzungen infolge Behälterbersten sehr unbefriedigend ist. Der methodische Stand der Modellierung scheint hier noch wenig ausgereift zu sein. Dies führt zu Inkonsistenzen bei der Modellierung, die sich insbesondere bei den Berechnungen mit Phast sehr deutlich gezeigt haben, und die sich massiv auf das Ergebnis auswirken. Ob solche Inkonsistenzen bei Effects auch bestehen, ist aufgrund fehlender Unterlagen dazu unbekannt. Bei der Modellierung sofortiger Freisetzungen infolge Behälterbersten ist deshalb grundsätzlich grösste Vorsicht geboten.

Bei den kontinuierlichen Freisetzungen stehen bei Phast im Gegensatz zu Effects transparente Angaben zur Validität zur Verfügung. Die Umsetzung in Phast ist jedoch widersprüchlich, so dass keine klare Empfehlung abgegeben werden kann.

Wir empfehlen, das Ausdampfen aus einer Lache entgegen dem Vorgehen bei HART in den Modellrechnungen zu berücksichtigen. Die Phast-Berechnungen haben gezeigt, dass die Lache einen grossen Einfluss auf das Ergebnis haben kann. Hier stehen sowohl in Effects als auch in Phast gut dokumentierte Modelle zur Verfügung, wobei die Dokumentation bei Phast noch umfassender ist. Ob man die Verwendung von Phast vorzieht, zu dessen Modell auch Peer Reviews mit entsprechender Kritik sowie Angaben zur Validität vorliegen, oder Effects, zu dessen Modell diese Informationen nicht zur Verfügung standen und somit auch keine Mängel bekannt sind, bleibt letztlich Ansichtssache.

Für komplexere Lachensituationen bleibt nur die Verwendung von FLACS. Es liegen dazu aber keine Angaben zur Validität vor.

### **5.4.3 Modul 3: Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke**

Im Bereich Ausbreitung und Verdünnung der Gaswolke verwenden sowohl Phast als auch Effects bewährte und anerkannte Modelle. Sie sind wahrscheinlich gleichwertig. Auch hier steht man vor der Situation, dass zu Phast mehr Angaben zur Validität verfügbar waren (wie z.B. die Zulassung durch das US Department of Transportation), so dass auch eher Mängel bekannt sind. Diesbezüglich bleibt auch hier die Wahl des Modells letztlich Ansichtssache. Falls Phast verwendet wird, sollte eine Anpassung des in Kapitel 3.3.1.1.3 erwähnten Default Parameters geprüft werden.

FLACS wird für diejenigen Fälle empfohlen, für welche Phast und Effects ungeeignet sind: Modellierung der Gasausbreitung in komplexen Geometrien wie überbautem Gebiet, komplexen Topographien und im Nahbereich der Freisetzung

#### **5.4.4 Modul 4a: Zündung**

Die Zündwahrscheinlichkeiten sind nicht Bestandteil der drei untersuchten Software-Tools. Es wird deshalb keine Empfehlung abgegeben.

#### **5.4.5 Modul 4b: Abbrand**

Bei der Modellierung der Branddimension eines BLEVE sind Effects und Phast wohl gleichwertig (Stärke von Effects: dynamischer BLEVE, Stärke von Phast: Integration HSE Modell).

Bei der Branddimension eines Gaswolkenbrands und einer UVCE kann sowohl Effects als auch Phast zur Berechnung der Distanz zur unteren Zündgrenze verwendet werden.

Bei der Jetfire-Modellierung kann sowohl Effects als auch Phast verwendet werden. Es wird eher Phast empfohlen, da an verschiedene Situationen angepasste Modelle verfügbar sind, die für Propan gut validiert sind.

Für die Lachenbrand-Modellierung sind ebenfalls sowohl Effects als auch Phast eine gute Wahl. Beide Modelle sind gut dokumentiert inkl. Vergleichsrechnungen mit Experimenten. Es wird aber eher die Verwendung von Effects mit dem HSE-Zweizonenmodell empfohlen, da bei diesem die Probleme bei der Parametrierung etwas entschärft sind. Für komplexe Lachenbrände (Lachen in schlecht belüfteten oder umschlossenen Situationen, Flammenkontakt mit Objekten, Hindernisse in der Flamme) kommt von den drei Software-Tools nur FLACS in Frage.

Zur Berechnung des Explosionsdrucks eines BLEVE kann keine Empfehlung abgegeben werden.

Für Berechnungen von Explosionsdrücken bei UVCE mit der Multi-Energy Method ist Effects die bessere Wahl als Phast, da in Effects die GAME correlation implementiert ist, die sehr zur Verwendung empfohlen wird.

Bei der Verwendung des indoor explosion models von Phast zur Berechnung des Explosionsdrucks von verdämmten Explosionen wird zu grosser Vorsicht geraten. Für solche Berechnungen sollte ein CFD Tool wie FLACS verwendet werden. In Effects ist keine Methode zur Berechnung verdämmter Explosionen enthalten. Die Multi-Energy Method sollte für verdämmte Explosionen nicht verwendet werden.

Für Explosionsberechnungen innerhalb oder in der Nähe der abbrennenden Gaswolke, in verdämmten Situationen und in überbauten Gebieten kommt nur FLACS in Frage.

#### **5.4.6 Modul 5: Wirkung auf den Menschen (Hitzestrahlung, Druckwelle, Trümmerwurf)**

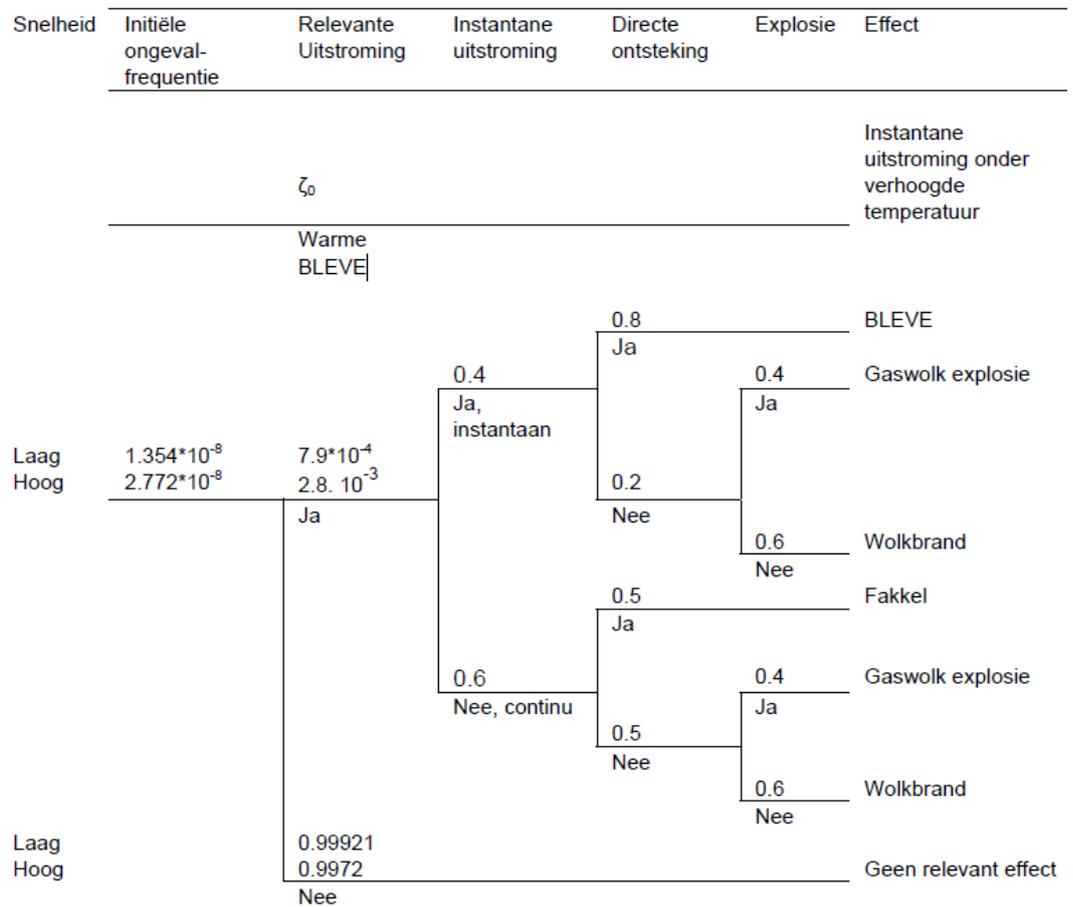
Bezüglich der Berechnung der Wirkung auf den Menschen sind zwischen den untersuchten Softwaretools keine ausschlaggebenden Unterschiede aufgefallen, die eine Empfehlung für ein bestimmtes Tool rechtfertigen würden.

## Anhang

- A Ereignisbaum HART
- B Parameter Phast ATEX
- C Parameter Phast UDM
- D Parameter Phast PVAP
- E Parameter Phast BWM
- F Inputparameter Phast BLEVE Blast
- G Outputvariablen FLACS
- H Vergleichsrechnungen Phast-Effects
- I Grundlagen und Literatur

## A Ereignisbaum HART

Quelle: AVIV Adviseurs externe veiligheid en risicoanalisten: Achtergronddocument RBM II, Versie 2.0, November 2011



## B Parameter Phast ATEX

| MDE_Test ATEX: Atmospheric Expansion                          |  |         |        |       |
|---|--|---------|--------|-------|
| Inputs  |  |         |        |       |
| Input Index   | Description  | Units   | Limits |       |
|   |  |         | Lower  | Upper |
| <b>Testbed</b>  |  |         |        |       |
| <b>Material</b>   |  |         |        |       |
| N   | Stream name  | -       |        |       |
| <b>Storage state (only used for flash droplet model)</b>      |  |         |        |       |
| 2   | Specification flag (0 - P&T&LF, 1 - P&T, 6 - P&LF, 7 - T&LF)   | -       | 0      | 7     |
| 3   | Pressure   | Pa      |        |       |
| 4   | Temperature  | K       |        |       |
| 5   | Liquid fraction (MOLE basis)   | mol/mol |        |       |
| <b>Exit state</b>   |  |         |        |       |
| 6   | Specification flag (0 - P&T&LF, 1 - P&T, 6 - P&LF, 7 - T&LF)   | -       | 0      | 7     |
| 7   | Pressure   | Pa      |        |       |
| 8   | Temperature  | K       |        |       |
| 9   | Liquid fraction  | -       |        |       |
| 10  | Is Exit flowrate supplied as input or exit velocity? TRUE - Exit Flowrate supplied as input  | -       |        |       |
| 11  | Input discharge coefficient  | -       | 0      | 1     |
| 12  | Input Measured/Actual flowrate   | kg/s    | 0      |       |
| 13  | Velocity   | m/s     |        |       |
| 14  | Diameter   | m       |        |       |
| 15  | Ratio of length to diameter  | -       | 0      | 100   |
| <b>Atmospheric data</b>                                       |  |         |        |       |
| 16  | Atmospheric pressure   | Pa      |        |       |
| 17  | Atmospheric temperature  | K       |        |       |
| 18  | Atmospheric humidity   | -       |        |       |
| 19  | Wind speed   | m/s     | 0      |       |
| <b>Expansion method</b>                                       |  |         |        |       |
| 20  | Expansion method (0 - min change, 1 - isentropic, 2 - cons moment, 3 - instantaneous)  | -       | 0      | 3     |
| <b>PARAMETERS (values to be changed by expert users only)</b> |  |         |        |       |
| 21  | Multi-component flag (1 - MC, 0 - PC)  | -       | 0      | 1     |
| 22  | Droplet correlation (0-original CCPS, 1- JIPII, 2-TNO, 3-Tilton, 4- Melhem, 5-JIPIII, 6-modified CCPS, 7-modified CCPS excl. 2PH pipe) | -       | 0      | 7     |
| 23  | Force mechanical or flashing breakup (0 - No, 1 - force mechanical, 2 - force flashing)  | -       | 0      | 2     |
| 24  | Atmospheric molecular weight   | kg/kmol |        |       |
| 25  | Maximum velocity capping method (0 - user input, 1 - sonic velocity)   | -       | 0      | 1     |
| 25  | Maximum velocity   | m/s     |        |       |
| 26  | Critical Weber number (for PHAST mechanical correlation)   | -       |        |       |
| 27  | Minimum droplet size   | m       |        |       |
| 28  | Maximum droplet size   | m       |        |       |
| <b>Outputs</b>  |  |         |        |       |
| Output Index  | Description  | Units   |        |       |
| <b>ERROR STATUS</b>   |  |         |        |       |
| <b>Storage state</b>  |  |         |        |       |
| 1   | Pressure   | Pa      |        |       |
| 2   | Temperature  | K       |        |       |
| 3   | Liquid fraction (MASS basis)   | kg/kg   |        |       |
| <b>Exit state</b>   |  |         |        |       |
| 4   | Pressure   | Pa      |        |       |
| 5   | Temperature  | kg/kg   |        |       |
| 6   | Liquid fraction (MASS basis)   | -       |        |       |
| <b>Final (post-expansion) state</b>                           |  |         |        |       |
| 7   | Temperature  | K       |        |       |
| 8   | Liquid fraction (MASS basis)   | kg/kg   |        |       |
| 9   | Velocity   | m/s     |        |       |
| <b>Droplet data</b>   |  |         |        |       |
| 10  | Droplet diameter   | m       |        |       |
| 11  | Flashing or mechanical (1 - mechanical, 2 - flash, 3 - transition)   | -       |        |       |
| 12  | JIP Rossin-Rammler 'b' coefficient   | -       |        |       |
| <b>Other data</b>   |  |         |        |       |
| 13  | ATEX expansion method (1 - isentropic, 2 - cons moment, 3 - instantaneous)   | -       |        |       |
| 14  | Expanded diameter  | m       |        |       |
| 15  | Expansion energy   | J/kg    |        |       |
| 16  | Partial expansion energy   | J/kg    |        |       |
| 17  | Superheat at exit  | K       |        |       |
| 18  | Velocity at vena contracta   | m/s     |        |       |
| 19  | Corrected velocity at exit (i.e. dVenaVelocity * discharge Coefficient)  | m/s     |        |       |
| 20  | Actual/measured flowrate   | kg/s    |        |       |

## C Parameter Phast UDM

### C 1. Üblicherweise verwendete Inputparameter

| INPUT                               |  |                        |          |            |
|-------------------------------------|--|------------------------|----------|------------|
| Input Index                         | Description  | Units                  | Limits   |            |
|                                     |  |                        | Lower    | Upper      |
| <b>RELEASEDATA</b>                  |  |                        |          |            |
|                                     | <b>duration/segments</b>   |                        |          |            |
| A                                   | Flag: instantaneous (1), continuous (2)  |                        | 1        | 2          |
| A                                   | Number of release segments (time-varying release only)                                     |                        | 1        | 11         |
| A                                   | Duration of release segments (for non-instantaneous only)                                  |                        | 0        |            |
| <b>material/mass/thermodynamics</b> |  |                        |          |            |
| N                                   | Released material name (from material database)  |                        |          |            |
| A                                   | Initial released mass  | kg (inst) or kg/s (st) | 1.00E-06 | 1.00E+09   |
| A                                   | Initial mass of air mixed in   | kg (inst) or kg/s (st) | 0        | 1000000000 |
| A                                   | Initial state descriptor [<0 liquid mass fraction (2-phase), >0 temperature (v vapour)]    | (fraction) or K        | -1       | 900        |
| A                                   | Droplet size   | m                      | 0        | 1          |
| A                                   | <b>Droplet size distribution parameter brr</b>   | -                      | 2        | 6          |
| <b>release location/speed</b>       |  |                        |          |            |
| A                                   | Release height   | m                      | 0        |            |
| A                                   | Release angle [0 = horizontal, pi/2 = vertical upwards; cont.only]                         | radians                | -1.571   | 1.571      |
| A                                   | Expansion energy (instantaneous only)  | (J/kg)                 | 0        | 12500      |
| A                                   | Release velocity (continuous only)   | m/s                    | 0        | 500        |
| 7                                   | Component of interest  |                        |          |            |
| A                                   | Impingement flag (0 -horizontal, 1 - angled, 2 - vertical, 3 - along ground, 4 - impinged) |                        | 0        | 4          |
| <b>AMBIENT DATA</b>                 |  |                        |          |            |
| A                                   | Pasquill stability class (1-A,2-A/B,3-B,4-B/C,5-C,6-C/D,7-D,8-E,9-F,10-G)                  |                        | 1        | 10         |
| A                                   | Wind speed at reference height   | m/s                    | 0.1      | 50         |
| A                                   | Reference height for windspeed   | m                      | 0.1      | 100        |
| A                                   | Temperature at reference height  | K                      | 200      | 350        |
| A                                   | Pressure at reference height   | N/m2                   | 50000    | 120000     |
| A                                   | Reference height for temperature and pressure  | m                      | 0        | 100        |
| A                                   | Atmospheric humidity (fraction)  | -                      | 0        | 1          |
| <b>SUBSTRATEDATA</b>                |  |                        |          |            |
| A                                   | Surface roughness length   | m                      | 0.0001   | 3          |
| A                                   | Dispersing surface type (1-land,2-water)   |                        | 1        | 2          |
| A                                   | Temperature of dispersing surface  | K                      | 200      | 500        |
| <b>POOL DATA</b>                    |  |                        |          |            |
| A                                   | Pool surface type (1-wet soil, 2-dry soil, 3 - concrete, 4 - insulated concrete, 5 - deep) |                        | 1        | 9          |
| A                                   | Temperature of pool surface  | K                      | 10       | 10000      |
| A                                   | Bund diameter (<=0: no bund)   | m                      | 0        |            |
| <b>AVERAGING TIME</b>               |  |                        |          |            |
| 101                                 | Averaging time   | s                      | 1        | 3600       |
| <b>TERMINATION CRITERION</b>        |  |                        |          |            |
| A                                   | Min. concentration of interest   | mole %                 | 0        | 100        |
| A                                   | Max. distance of interest  | m                      | 0        | 1.00E+08   |

## C 2. Inputparameter nur für expert users

| PARAMETERS (not to be changed by users)                           |  |         |          |          |
|---|--|---------|----------|----------|
| <b>MODEL CONTROL FLAGS</b>  |  |         |          |          |
| A   | Jet Model Flag (1 - Emerson, 2 - Morton et al)   |         | 1        | 2        |
| A   | Number of droplet parcels (0 - use single parcel diameter as specified)  |         | 0        | 10       |
| A   | Flag for heat/water vapour transfer (1 - none, 2 - heat only, 3 - heat and water)  |         | 1        | 3        |
| A   | Thermodynamic model flag: -1 (no rainout, equilibrium), 1(rainout, equil.), 2 (rainout)  |         | -1       | 2        |
| A   | Mixing height flag (1=yes,2=no)  |         | 1        | 2        |
| A   | Quasi-instantaneous transition allowed (1 - no, 2 - yes)   |         | 1        | 2        |
| A   | Duration adjustment (1 - no, 2 - yes)  |         | 1        | 2        |
| 103   | Finite Duration Correction (1 - no, 2 - yes)   |         | 1        | 2        |
| 104   | Averaging time correction [1 - no, no use of RPRO; 2 - yes]  |         | 1        | 2        |
| A   | Pressurised instantaneous expansion model (0-Purple book, 1 - advanced)  | -       | 0        | 1        |
| A   | Output level (1 - old files, 2 - plus commentary, 3 - all)   | -       | 1        | 6        |
| <b>MODEL ACCURACY, LIMITS, INPUT AND OUTPUT CONTROL</b>           |  |         |          |          |
| <b>model accuracy</b>   |  |         |          |          |
| A   | Kutta-Merson accuracy for cloud integration  |         | 1.00E-06 | 1        |
| A   | Kutta-Merson accuracy for droplet evaporation integration (Version 1 solver only)  |         | 1.00E-06 | 1        |
| A   | Initial step size for cloud integration (instantaneous; 0 = solver determined)   | s       | 0        | 10       |
| A   | Maximum allowed step size for cloud integration (instantaneous)  | s       | 1        | 1000     |
| A   | Initial step size for cloud integration (continuous; 0 = solver determined)  | m       | 0        | 10       |
| A   | Maximum allowed step size for cloud integration (continuous)   | m       | 1        | 10000    |
| <b>limits</b>   |  |         |          |          |
| A   | Minimum effective cloud height (Version 1 solver only)   | m       | 0        | 1        |
| A   | Minimum temperature  | K       | 0        | 300      |
| A   | Maximum temperature  | K       | 300      | 5000     |
| A   | Minimum release height for continuous release  | m       | 0        |          |
| A   | Minimum velocity (continuous and instantaneous)  | m/s     | 0.01     | 100      |
| A   | Maximum duration for a release   | s       | 0        | 1.00E+08 |
| <b>termination criterion</b>                                      |  |         |          |          |
| A   | Absolute maximum distance for dispersion   | m       | 1        | 1.00E+06 |
| A   | Absolute maximum height for dispersion   | m       | 10       | 10000    |
| A   | Stop flag (1-Risk based, 2-Conc/Dist based, 3-Dist based, 4-Conc risk based)   | -       | 1        | 2        |
| A   | Minimum probability of death   | -       | 0        | 1        |
| A   | Toxic calculation flag (used for toxic-load calculations for mixtures only)  | -       | 1        | 4        |
| A   | User selected flammable/ toxic flag (1-flam,0-both, 1-toxic, 2 - inert)  | -       | -2       | 1        |
| A   | Probit Methodology (1-Prefer Probit, 2-Prefer Dose, 3-Use Probit, 4-Use Dose)  | -       | 1        | 4        |
| <b>AMBIENT</b>  |  |         |          |          |
| A   | Wind profile flag (1-const,2-log)  |         | 1        | 2        |
| A   | Cut off height for power law wind profile  | m       | 0.1      | 1        |
| A   | Air temperature/pressure profile (1-const,2 lin,3-log)   |         | 1        | 3        |
| A   | Atmospheric specific heat  | J/kg/K  | 800      | 1200     |
| A   | Atmospheric molecular weight   | kg/kmol | 10       | 100      |
| A   | Height of mixing layer for each stability class  | m       | 0        | 5000     |
| A   | Pool sources: spreading over pool (1 - Van Ulden, 2 - Force to pool width, 3 - mass average (cloud mass), 4 - Multicomponent flag (0 - PC, 1 - Single aerosol, 2 - Multiple aerosol) |         | 1        | 4        |
| A   |  |         | 0        | 3        |
| <b>PHYSICAL MODEL PARAMETERS</b>                                  |  |         |          |          |
| <b>expansion zone</b>   |  |         |          |          |
| A   | Expansion length \ source diameter   | -       | 0.01     | 100      |
| <b>jet dispersion</b>   |  |         |          |          |
| A   | Jet entrainment coefficient ALPHA1   | -       | 0.01     | 2        |
| A   | Cross-wind entrainment coefficient ALPHA2  | -       | 0.01     | 2        |
| A   | Plume/air drag coefficient   | -       | 0        | 1        |
| <b>heavy dispersion</b>   |  |         |          |          |
| A   | Dense cloud side entrainment parameter GAMMA (continuous)  | -       | 0        | 2        |
| A   | Dense cloud side entrainment parameter GAMMA (instantaneous)   | -       | 0        | 2        |
| A   | Dense cloud spreading parameter CE (continuous)  | -       | 0        | 2        |
| A   | Dense cloud spreading parameter CE (instantaneous)   | -       | 0        | 2        |
| <b>passive dispersion</b>   |  |         |          |          |
| A   | near-field passive entrainment parameter   |         | 0.00     | 1.00     |
| A   | core averaging time  | s       | 1        | 3600     |
| A   | Ratio of instantaneous \ continuous sigma y  | -       | 0.10     | 10.00    |
| A   | Ratio of instantaneous \ continuous sigma z  | -       | 0.10     | 10.00    |
| <b>ground</b>   |  |         |          |          |
| A   | Plume/ground drag coefficient (for old UDM drag model only, Version 1 solver only)   | -       | 0        | 2        |
| <b>liquid component (droplets/rainout/pool)</b>                   |  |         |          |          |
| A   | Coefficient of initial rainout   |         | 0.00     | 1.00     |
| A   | Ratio drop to expansion velocity for instantaneous release   |         | 0        | 1        |
| A   | Expansion energy for maximum droplet angle   | J/m2    | 0        | 100000   |
| A   | Pool vapourisation entrainment parameter   |         | 0        | 2        |
| A   | Flag to indicate vapour from pool source (0=Not vapour, 1=vapour from pool or gas at)  | -       | 0        | 1        |
| A   | Droplet size distribution parameter arr  | -       | 0        | 1        |
| A   | Critical droplet diameter for rainout  | m       | 0        | 1        |
| <b>TRANSITION CONTROL</b>   |  |         |          |          |
| <b>transition to passive</b>                                      |  |         |          |          |
| A   | max. cloud/ambient velocity difference, RU [ lucld/ua - 1<RU]  |         | 0        |          |
| A   | max. non-passive entrainment fraction, RE [1-Epas/Etot< RE ]   |         | 0        | 1        |
| A   | max. Richardson number R1CR [Ri < R1CR]  |         | 0        |          |
| A   | max. cloud/ambient density difference, RR [rhoctd/rhoa-1<RR]   |         | 0        |          |
| A   | distance multiple for phasing in full passive entrainment  |         | 0.00     |          |
| A   | JIP pool modelling flag (0 - v6.53, 1 - JIP pool source, 2 - JIP pool & trailing)  |         | 0        | 2        |
| <b>pool re-evaporation</b>  |  |         |          |          |
| A   | Richardson number for passive transition above pool  |         | 0        |          |
| A   | Cut-off for evaporation rate   | kg/s    | 0        | 100      |
| A   | Power to use in pool rate calculations (for segments division)   |         | 0        |          |
| <b>other transitions (quasi-instantaneous, lift-off, rainout)</b> |  |         |          |          |
| A   | Quasi-instantaneous transition parameter   |         | 0.1      | 10       |
| A   | Richardson number for lift-off criterion   |         | 0        | 0        |
| A   | Flag to reset rainout position for instantaneous releases: 1 - no, 2 - yes [after rainout]   |         | 1        | 2        |
| <b>POOL-MODEL PARAMETERS</b>                                      |  |         |          |          |
| A   | Solar radiation flux   | W/m2    | 0        | 1200     |
| A   | User defined thermal conductivity [used in pool model, only if user-defined bund sur   | W/mK    |          |          |
| A   | User defined minimum pool thickness  | m       | 0.001    | 0.3      |
| A   | User defined surface roughness factor  | -       | 1        | 5        |
| A   | User defined thermal diffusivity   | m2/s    | 1.00E-08 | 1.00E-06 |
| A   | Default bund height  | m       | 0        | 100      |
| A   | Bund overspill switch (0-Off, 1-On)  |         | 0        | 1        |
| A   | Maximum number of pool vapourisation rates   |         | 1        | 10       |
| <b>SPREADSHEET OUTPUT CONTROL</b>                                 |  |         |          |          |
| 201   | Position for off-centre concentrations: crosswind distance y   | m       | 0        | 1000     |
| 202   | Position for off-centre concentrations: height z above ground  | m       | 0        | 1000     |
| N   | Cloud half-width of interest [1 - Weff (effective half-width), 2 - Hanna's definition, 3 -   |         | 1        | 3        |
| N   | Pool Segment to be used for validation   |         | 0        | 10       |
| A   | Fixed output step size (Version 1 solver only)   | m       | 0        | 10       |
| A   | Maximum number of fixed output step sizes  | -       | 0        | 1000     |
| A   | Multiplier for output step sizes   | -       | 0        | 10       |
| 203   | Concentration for Width and Height Calculations  | mol%    | 0        | 100      |
| 204   | Mass (=0) or mole (=1) output for component of interest  |         | 0        | 1        |

### C 3. Outputparameter

| OUTPUT                                |  |                    |     |
|---------------------------------------|--|--------------------|-----|
| Output Index                          | Description  | Units              |     |
| <b>ERROR STATUS</b>                   |  |                    |     |
| <b>Pool Model Results</b>             |  |                    |     |
| 1                                     | Bund hit flag (1 - Bund hit, 2 - Bund not hit)   |                    |     |
| 2                                     | Number of pool segments  |                    |     |
| 3                                     | Array of pool radii  | m                  |     |
| 4                                     | Array of pool vapourisation rates  | kg/s               |     |
| 5                                     | Array of pool segment durations  | s                  |     |
| 6                                     | Array of pool temperatures   | K                  |     |
| 7                                     | Maximum pool radius  | m                  |     |
| 8                                     | Array of segment pool vapourisation flags  |                    |     |
| 9                                     | Bund overspill flag (0-Bund did not overspill, 1 - Bund overspilled)                               |                    | 0 1 |
| <b>Droplet Modelling and Rainout</b>  |  |                    |     |
| 21                                    | Rainout possible flag (1 - Rainout possible, 2 - Rainout not possible)                             |                    |     |
| 22                                    | Rainout flag (1 - Rainout occurred, 2 - Rainout did not occur)                                     |                    |     |
| 23                                    | Time to rainout  | s                  |     |
| 24                                    | Rainout distance   | m                  |     |
| 25                                    | Cloud centre x-co-ordinate at rainout  | m                  |     |
| 26                                    | Rainout fraction   | %                  |     |
| 27                                    | Aerosol Fraction after rainout   | -                  |     |
| 27                                    | x-co-ordinate at which drops fall below lower edge of the plume                                    | m                  |     |
| 28                                    | Distance at which droplets evaporate in the plume  | m                  |     |
| 29                                    | Array of segment rainout flags   |                    |     |
| <b>Pool re-evaporation</b>            |  |                    |     |
| 40                                    | Pool evaporation flag (1 - Pool evaporates, 2 - No pool evaporation)                               |                    |     |
| 41                                    | Pool left behind flag (1 - Pool left behind, 2 - Pool not left behind)                             |                    |     |
| 42                                    | Time at which liquid pool is left behind   | s                  |     |
| 43                                    | Pool limited duration flag (1 - Pool of limited duration, 2 - Pool does not have limited duration) |                    |     |
| 44                                    | Time at which vapourisation stops  | s                  |     |
| 45                                    | Mass left of instantaneous cloud after rainout   | kg                 |     |
| 46                                    | Array of segment type flags  |                    |     |
| 47                                    | Array of segment durations   | s                  |     |
| 48                                    | Array of segment flow rates  | kg/s               |     |
| <b>Ambient Conditions</b>             |  |                    |     |
| 61                                    | Friction velocity  | m/s                |     |
| 62                                    | Exponent in the wind speed profile   |                    |     |
| 63                                    | Temperature at ground level  | K                  |     |
| <b>Quasi-instantaneous transition</b> |  |                    |     |
| 71                                    | Quasi-instantaneous transition flag (1-Occured, 2-Did not occur)                                   |                    |     |
| 72                                    | Time to quasi-instantaneous transition   | s                  |     |
| 73                                    | Distance to quasi-instantaneous transition   | m                  |     |
| 74                                    | Quasi-instantaneous before rainout flag (1-Occured, 2-Did not occur)                               |                    |     |
| <b>Initial Expansion</b>              |  |                    |     |
| 81                                    | Expanded diameter  | m                  |     |
| 82                                    | Expansion zone length  | m                  |     |
| 83                                    | End time for instantaneous energetic expansion   | s                  |     |
| 84                                    | Array of initial cloud states  | -                  |     |
| <b>Dispersion data</b>                |  |                    |     |
| 101                                   | Number of output step sizes  |                    |     |
| 102                                   | Downwind step size   | m or s             |     |
| 103                                   | Downwind distance  | m                  |     |
| 104                                   | Centreline height  | m                  |     |
| 105                                   | Cloud centreline angle   | Rad                |     |
| 106                                   | Centre-line concentration (core)   | Mol%               |     |
| 107                                   | Cloud density (core)   | kg/m <sup>3</sup>  |     |
| 108                                   | Centre-line mass concentration (core)  | kg/m <sup>3</sup>  |     |
| 109                                   | Component mass (flowrate)  | kg or kg/s         |     |
| 110                                   | Effective width (core)   | m                  |     |
| 111                                   | Cloud cross-wind radius RADY (core)  | m                  |     |
| 112                                   | Effective depth  | m                  |     |
| 113                                   | Cloud vertical radius RADZ   | m                  |     |
| 114                                   | Crosswind concentration profile exponent   |                    |     |
| 115                                   | Vertical concentration profile exponent  |                    |     |
| 116                                   | Liquid temperature of release component  | K                  |     |
| 117                                   | Cloud Vapour temperature   | K                  |     |
| 118                                   | Liquid mass fraction of release component  |                    |     |
| 119                                   | Time   | s                  |     |
| 120                                   | Centroid velocity  | m/s                |     |
| 121                                   | Instantaneous/continuous flag  |                    |     |
| 122                                   | Passive transition distance  | m                  |     |
| 123                                   | Touchdown flag   |                    |     |
| 124                                   | Off centreline concentration at the given averaging time   | mol%               |     |
| 125                                   | Cloud half-width of interest at the given averaging time   | m                  |     |
| 126                                   | Droplet X-coordinate   | m                  |     |
| 127                                   | Droplet Z coordinate   | m                  |     |
| 128                                   | Centre-line concentration (averaged)   | mol%               |     |
| 129                                   | Cross-wind radius RADY (averaged)  | m                  |     |
| 130                                   | Duration-adjusted Concentration (averaged)   | mol%               |     |
| 131                                   | Finite-duration concentration (averaged)   | mol%               |     |
| 132                                   | Cloud half-width to concentration of interest (core)   | m                  |     |
| 133                                   | Cloud height to concentration of interest  | m                  |     |
| 134                                   | Mass / mole fraction of component of interest in vapour phase                                      | kmol/kmol or kg/kg |     |
| 135                                   | Mass / mole fraction of component of interest in liquid phase                                      | kmol/kmol or kg/kg |     |
| 136                                   | Droplet diameter   | m                  |     |

## D Parameter Phast PVAP

### D 1. Üblicherweise verwendete Inputparameter

| Description  | Units  | Limits   |          |
|--|--------|----------|----------|
|  |        | Lower    | Upper    |
| <b>RELEASE DATA</b>  |        |          |          |
| Number of components   |        | 1        | 5        |
| Mole (=1) or Mass (=0) based composition   |        | 0        | 1        |
| Component name 1 or stream name  | -      |          |          |
| Spill fraction   | kg/kg  | 0        | 1        |
| Component name 2   | -      |          |          |
| Spill fraction   | kg/kg  | 0        | 1        |
| Component name 3   | -      |          |          |
| Spill fraction   | kg/kg  | 0        | 1        |
| Component name 4   | -      |          |          |
| Spill fraction   | kg/kg  | 0        | 1        |
| Component name 5   | -      |          |          |
| Spill fraction   | kg/kg  | 0        | 1        |
| Name of component of interest in the stream  |        |          |          |
| Instantaneous/continuous flag  | -      | 1        | 2        |
| Release rate segment   | -      | 1        | 11       |
| Number of release rates  | -      | 1        | 11       |
| <b>Instantaneous</b>   |        |          |          |
| Instantaneous spill mass   | kg     | 0        | 1.00E+07 |
| Duration of instantaneous spill  | s      |          |          |
| Temperature of instantaneous spill   | K      | 10       | 10000    |
| <b>Continuous</b>  |        |          |          |
| Array of spill rates   | kg/s   | 0        | 1.00E+07 |
| Array of spill durations   | s      | 0        |          |
| Array of spill temperatures  | K      | 10       | 10000    |
| <b>AMBIENT DATA</b>  |        |          |          |
| Pasquill stability class (1-A, 2-AB, ....., 7-D, 8-E, 9-F, 10-G)   | -      | 1        | 10       |
| Solar Radiation Flux   | W/m2   | 0        | 1200     |
| Atmospheric temperature  | K      | 200      | 350      |
| Atmospheric Pressure   | N/m2   | 50000    | 120000   |
| Atmospheric humidity   | -      | 0        | 1        |
| Atmospheric Molecular weight   | -      | 10       | 100      |
| Atmospheric heat capacity at constant pressure   | J/kg K | 800      | 1200     |
| Wind speed profile flag (1-Constant, 2-Linear)   | -      | 1        | 2        |
| Wind speed at reference height   | m/s    | 0.1      | 50       |
| Reference height for windspeed   | m      | 0        | 100      |
| Cut-off height for windspeed   | m      | 0.1      | 1        |
| <b>SUBSTRATE DATA</b>  |        |          |          |
| Surface roughness length   | m      | 0.001    | 3        |
| Bund diameter  | m      | 0        |          |
| Bund height  | m      | 0        |          |
| Surface temperature  | K      | 10       | 10000    |
| Surface type (1-dry soil,2-wet soil, 3 - concrete, 4 - insulated concrete, 5 - deep open water, 6 - shallow open water, 7 - deep river or channel, 8 - shallow river or channel,9 - user-defined type) | -      | 1        | 9        |
| User-Defined surface roughness factor  | -      | 1        | 5        |
| User-Defined thermal conductivity  | W/mK   | 0.1      | 5        |
| User-Defined thermal diffusivity   | m2/s   | 1.00E-08 | 1.00E-06 |
| User-Defined minimum thickness   | m      | 0.001    | 0.3      |
| <b>MODEL PARAMETERS</b>  |        |          |          |
| Bund overspill switch (0-Off, 1-On)  | -      | 0        | 1        |
| Cut-off rate for pool evaporation  | kg/s   | 0        | 100      |
| Minimum temperature  | K      | 0        | 300      |
| Maximum duration   | s      | 0        | 1.00E+08 |
| Concentration power for toxic load calculation   | -      | 0        |          |
| Maximum number of pool evaporation rates   | -      | 1        | 10       |

## D 2. Inputparameter nur für expert users

| <b>Parameters to be changed by Expert Users Only</b>                  |   |          |          |
|---|---|----------|----------|
| Pool model debug flag   |   |          |          |
| Record length of results file   |   |          |          |
| Index of next results file record to write to                         |   |          |          |
| Solver flag (1= RK4, 2= non-stiff, 3= adaptive)                       | - | 0        | 3        |
| Solver tolerance  | - | 1.00E-06 | 1.00E-01 |
| Evaporation on land flag (1=MacKay&Matsugu 2=Phast 6.7<br>3=Opschoor) |   | 1        | 3        |
| Pseudo-component / Multi-component flag (0= PC; 1= MC)                | - | 0        | 1        |
| <b>OUTPUT LIMIT-To be changed by Expert Users Only</b>                |   |          |          |
| Maximum array size for variable output arrays                         | - | 100      | 8000     |

## D 3. Outputparameter

| Output Index                              | Description   | Units |  |  |
|---|---|-------|--|--|
| <b>ERROR STATUS</b>                       |   |       |  |  |
|   | 1 Array of output integers  | -     |  |  |
|   | 2 Array of output doubles   | -     |  |  |
| A   | Bund overspill flag (0-Bund did not overspill, 1-Bund<br>overspilled) | -     |  |  |
| A   | Bund hit flag (1-Bund hit, 2-Bund not hit or Undefined)               | -     |  |  |
| A   | Maximum pool radius   | m     |  |  |
| A   | Pool temperature at maximum pool radius                               | K     |  |  |
| A   | Remaining mass in the pool  | kg    |  |  |
| <b>Pool segment data</b>                  |   |       |  |  |
|   | 3 Number of rates   | -     |  |  |
|   | 4 Array of pool radius  | m     |  |  |
|   | 5 Array of pool rates   | kg/s  |  |  |
|   | 6 Array of pool times   | s     |  |  |
|   | 7 Array of pool temperatures  | K     |  |  |
| <b>POOL SPREAD AND VAPOURISATION DATA</b> |   |       |  |  |
|   | 8 Number of output step sizes   | -     |  |  |
|   | 9 Step number   | -     |  |  |
|   | 10 Time since release   | s     |  |  |
|   | 11 Total mass spilt   | kg    |  |  |
|   | 12 Total mass vapourised  | kg    |  |  |
|   | 13 Total mass of fluid vaporised, due to dissolution only,            | kg    |  |  |
|   | 14 Total mass dissolved   | kg    |  |  |
|   | 15 Total mass of entrained water during dissolution                   | kg    |  |  |
|   | 16 Remaining mass   | kg    |  |  |
|   | 17 Vapourisation rate   | kg/s  |  |  |
|   | 18 Solution rate  | kg/s  |  |  |
|   | 19 Water entrainment rate   | kg/s  |  |  |
|   | 20 Pool radius  | m     |  |  |
|   | 21 Pool depth   | m     |  |  |
|   | 22 Pool Temperature   | K     |  |  |
|   | 23 Bubble point temperature   | K     |  |  |
|   | 24 Net heat transfer rate   | W     |  |  |
|   | 25 Conductive heat transfer rate                                      | W     |  |  |
|   | 26 Convective heat transfer rate                                      | W     |  |  |
|   | 27 Radiative heat transfer rate                                       | W     |  |  |
|   | 28 Heat of solution   | W     |  |  |
|   | 29 Heat added from spill  | W     |  |  |
|   | 30 Heat of evaporation  | W     |  |  |
|   | 31 Sensible heat rate   | W     |  |  |
|   | 32 Model Flag (1-Boiling, 2-Evaporating)                              | W     |  |  |
|   | Spreading flag (1-Normal spreading, 2-Bund hit, 3-<br>Minimum depth)  | -     |  |  |
|   | 33  |       |  |  |
| <b>RESULTS FOR COMPONENT OF INTEREST</b>  |   |       |  |  |
|   | 34 Vaporisation rate of component of interest                         | kg/s  |  |  |
|   | 35 Remaining mass of component of interest                            | kg    |  |  |
|   | 36 Solution rate of component of interest                             | kg/s  |  |  |
|   | 37 Total mass vaporised of component of interest                      | kg    |  |  |
|   | 38 Total mass dissolved of component of interest                      | kg    |  |  |

## E Parameter Phast BWM

### E 1. Üblicherweise verwendete Inputparameter

|                                    | D                     | E  | F            | J          | L              | M            |
|------------------------------------|-----------------------|--|--------------|------------|----------------|--------------|
| 2                                  | <b>Inputs</b>         |  |              |            |                |              |
| <b>DNV BUILDING WAKE MODEL BWM</b> |                       |  |              |            |                |              |
| 3                                  | <b>Input</b>          | <b>Description</b>                                   | <b>Units</b> | <b>Dim</b> | <b>Limits</b>  |              |
| 4                                  | <b>Index</b>          |  |              |            | 2 <b>Lower</b> | <b>Upper</b> |
| 14                                 | <b>Release data</b>   |  |              |            |                |              |
| 15                                 |                       | <b>Type of release</b>                               |              |            |                |              |
| 16                                 | A                     | from roof/lee (1) or chimney (2)                     | -            |            | 1              | 2            |
| 17                                 | A                     | continuous (2) or instantan. (1)                     | -            |            | 1              | 2            |
| 18                                 |                       | <b>Properties</b>                                    |              |            |                |              |
| 19                                 | N                     | Material name  | -            |            |                |              |
| 20                                 | 5                     | Material CAS nr. (undefined=0)                       | -            |            |                |              |
| 21                                 | A                     | Specific heat (if undefined CAS)                     | J/kg/K       |            | 0.001          | 10000        |
| 22                                 | A                     | Mole weight (if undefined CAS)                       | kg/kmole     |            | 0.001          | 500          |
| 23                                 |                       | <b>Mass rate and temperature</b>                     |              |            |                |              |
| 24                                 | A                     | Pollutant mass                                       | kg/s or kg   |            | 1.00E-06       | 1.00E+09     |
| 25                                 | A                     | Initial mass of air mixed in (must be 0 for chimney) | kg/s or kg   |            | 0              | 1.00E+09     |
| 26                                 | A                     | Duration   | s            |            | 0.001          | 1.00E+08     |
| 27                                 | A                     | Pollutant temperature                                | K            |            | 1              | 1000         |
| 28                                 |                       | <b>Stack data (chimney only)</b>                     |              |            |                |              |
| 29                                 | A                     | Stack height   | m            |            | 0              | 2000         |
| 30                                 | A                     | Top-inside stack diameter                            | m            |            | 0              | 2.00E+02     |
| 31                                 | <b>Ambient Data</b>   |  |              |            |                |              |
| 32                                 | A                     | Stability class (A,A/B,B,B/C,C,C/D,D,E,F,G=1,...10)  | -            |            | 1              | 10           |
| 33                                 | A                     | Wind Speed   | m/s          |            | 0.1            | 50           |
| 34                                 | A                     | Reference height for wind speed                      | m            |            | 0.1            | 100          |
| 35                                 | A                     | Temperature  | K            |            | 200            | 350          |
| 36                                 | A                     | Pressure   | N m-2        |            | 50000          | 120000       |
| 37                                 | A                     | Reference height for temp./press.                    | m            |            | 0              | 100          |
| 38                                 | A                     | Humidity   | fraction     |            | 0              | 1            |
| 39                                 | <b>Terrain data</b>   |  |              |            |                |              |
| 40                                 | A                     | Surface roughness length                             | m            |            | 1.00E-04       | 3            |
| 41                                 | <b>Averaging time</b> |  |              |            |                |              |
| 42                                 | A                     | Averaging time                                       | s            |            | 1              | 3600         |
| 43                                 | <b>Building data</b>  |  |              |            |                |              |
| 44                                 | A                     | Height   | m            |            | 0.001          | 500          |
| 45                                 | A                     | Length   | m            |            | 0.001          | 500          |
| 46                                 | A                     | Width  | m            |            | 0.001          | 500          |
| 47                                 | A                     | Clockw. Angle N to length axis                       | degrees      |            | 0              | 180          |
| 48                                 | A                     | Clockw. angle N to wind-dir.                         | degrees      |            | 0              | 180          |

## E 2. Inputparameter nur für expert users

|    | D   | E  | F                           | J   | L        | M        |
|----|---|--|-----------------------------|-----|----------|----------|
| 2  | Inputs  |  | DNV BUILDING WAKE MODEL BWM |     |          |          |
| 3  | Input   | Description  | Units                       | Dim | Limits   |          |
| 4  | Index   |  |                             | 2   | Lower    | Upper    |
| 49 | <b>PARAMETERS (values to be changed by expert users only)</b> |  |                             |     |          |          |
| 50 | <b>Ambient Data</b>   |  |                             |     |          |          |
| 51 | A   | Specific heat  | J/kg/K                      |     | 800      | 1200     |
| 52 | A   | Molecular weight   | kg/kmole                    |     | 10       | 100      |
| 53 | A   | wind profile (1-constant,2-power)  | -                           |     | 1        | 2        |
|    |   | cut-off height for power-law wind profile  |                             |     |          |          |
| 54 | A   |  | m                           |     | 0.1      | 1        |
|    |   | temperature/pressure profile (1-constant,2-linear,3-log)   |                             |     |          |          |
| 55 | A   |  | -                           |     | 1        | 3        |
| 56 | A   | Mixing height flag (1=yes,2=no)  | -                           |     | 1        | 2        |
|    |   | Height of mixing layer [=0, use hard-wired values]   |                             |     |          |          |
| 57 | A   |  | m                           |     | 0        | 1000     |
| 58 | <b>Model assumptions</b>                                      |  |                             |     |          |          |
| 59 | A   | TNO (1), worst-case(2), best-est.(3)   | -                           |     | 1        | 3        |
| 60 | A   | lee length [0: use default]  | m                           |     | 0        | 10000    |
| 61 | A   | lee half-width [0: use default]  | m                           |     | 0        | 10000    |
| 62 | A   | lee height [0: use default]  | m                           |     | 0        | 1000     |
| 63 | A   | K-factor [0: def.]   | -                           |     | 0        | 5        |
|    |   | downwind distance after which to use normal Gaussian model (chimney only)  |                             |     |          |          |
| 64 | A   |  | m                           |     | 0        | 1000     |
| 65 | <b>Control of output: step size</b>                           |  |                             |     |          |          |
| 66 | A   | Max. size init.fixed downw.step  | m                           |     | 0.1      | 100.0    |
|    |   | min. number fixed downw.steps along each model zone  |                             |     |          |          |
| 67 | A   |  | -                           |     | 1        | 1000     |
|    |   | Factor for step increase after fixed steps   |                             |     |          |          |
| 68 | A   |  | -                           |     | 1        | 10       |
| 69 | <b>Control of output: termination criterion</b>               |  |                             |     |          |          |
|    |   | Termination criterion: 1 - min. prob. (toxic) and/or min. conc. (flammable), 2 - min.conc. and max.dist., 3 - max.dist., 4 - min.conc. |                             |     |          |          |
| 70 | A   |  | -                           |     | 1        | 4        |
| 71 | A   | minimum probability of death (toxic)   | -                           |     | 1.00E-10 | 1        |
| 72 | A   | minimum concentration  | mole %                      |     | 1.00E-10 | 10       |
| 73 | A   | maximum distance   | m                           |     | 10       | 100000   |
| 74 | A   | Absolute maximum distance  | m                           |     | 10       | 100000   |
| 75 | A   | Maximum plume height   | m                           |     | 1        | 10000    |
|    |   | Material/result type (-2: inert, -1: toxic, 1: flammable, 0: both)   |                             |     |          |          |
| 76 | A   |  |                             |     | -2       | 1        |
|    |   | Toxic-load calculations flag for mixture (1 - mixture probit, 2 - most toxic probit, 3 - combination probit)                           |                             |     |          |          |
| 77 | A   |  |                             |     | 1        | 3        |
| 78 | A   | Maximum duration for a release   | s                           |     | 0        | 1.00E+08 |
| 79 | 6   | Maximum nr. of output steps  | -                           |     | 2        | 10000    |

### E 3. Outputparameter

|     | D   | E  | F     | J   | L | M |
|-----|---|--|-------|-----|---|---|
| 80  | <b>Outputs</b>  |  |       |     |   |   |
| 81  | Output  | Description  | Units | Dim |   |   |
| 82  | Index   |  |       | 2   |   |   |
| 83  |   | <b>ERROR STATUS</b>  |       |     |   |   |
| 84  | <b>Also output data on ASCII Output File and/or .TMP temporary results file</b> |  |       |     |   |   |
| 85  | <b>Effective building dimensions</b>  |  |       |     |   |   |
| 86  | 1   | effective building length  | m     |     |   |   |
| 87  | 2   | effective building width   | m     |     |   |   |
| 88  | <b>Lee data and model assumptions</b>   |  |       |     |   |   |
| 89  | 3   | lee length   | m     |     |   |   |
| 90  | 4   | lee half-width   | m     |     |   |   |
| 91  | 5   | lee height   | m     |     |   |   |
| 92  | 6   | lee concentration  | kg/m3 |     |   |   |
| 93  | 7   | lee residence time(inst.SDI only)  | s     |     |   |   |
| 94  | 8   | K-factor   | m     |     |   |   |
| 95  | 9   | downwind distance after which to use normal Gaussian model                         | m     |     |   |   |
| 96  | <b>Output data for chimney release</b>  |  |       |     |   |   |
| 97  | 10  | vertical exit velocity   | m     |     |   |   |
| 98  | 11  | reduced release height   | m     |     |   |   |
| 99  | 12  | plume-correction parameter [full (<0), partial (0-0.2),lower(0.2-1.5), none(>1.5)] | -     |     |   |   |
| 100 | 13  | downwind distance for plume height correction                                      | m     |     |   |   |
| 101 | 14  | height before correction   | m     |     |   |   |
| 102 | 15  | height after correction  | m     |     |   |   |
| 103 | 16  | downwind distance to achieve final plume height                                    | m     |     |   |   |
| 104 | <b>Dispersion data</b>  |  |       |     |   |   |
| 105 | 17  | Number of output steps   | -     |     |   |   |
| 106 | 18  | Downwind distance  | m     |     |   |   |
| 107 | 19  | Groundlevel concentration (y=z=0)  | kg/m3 |     |   |   |
| 108 | 20  | Crosswind dispersion coefficient (SIGMAY)  | m     |     |   |   |
| 109 | 21  | Vertical dispersion coefficient (SIGMAZ)   | m     |     |   |   |
| 110 | 22  | Centre-line height   | m     |     |   |   |
| 111 | 23  | Centre-line concentration  | kg/m3 |     |   |   |
| 112 | 24  | Centre-line mole fraction  | -     |     |   |   |
| 113 | 25  | Centre-line temperature  | K     |     |   |   |
| 114 | 26  | Centre-line cloud density  | kg/m3 |     |   |   |
| 115 | 27  | Downwind dispersion coefficient (SIGMAX)   | m     |     |   |   |
| 116 | 28  | Time   | s     |     |   |   |
| 117 | 29  | Profile type (2-TNO,3-tophat)  | -     |     |   |   |
| 118 | 30  | Cloud downwind radius - RADX   | m     |     |   |   |
| 119 | 31  | Cloud crosswind radius - RADY  | m     |     |   |   |
| 120 | 32  | Cloud vertical radius - RADZ   | m     |     |   |   |
| 121 | 33  | Transition distance to passive   | m     |     |   |   |

## F Inputparameter Phast BLEVE Blast

| Tab                    | Group                  | Field                     |
|------------------------|------------------------|---------------------------|
| Storage conditions     | Vessel                 | Shape                     |
|                        |                        | Elevation                 |
|                        |                        | Radius                    |
|                        | Phase                  | Length                    |
|                        |                        | Specified condition       |
|                        |                        | Temperature               |
|                        |                        | Pressure (gauge)          |
|                        |                        | Fluid state               |
|                        |                        | Liquid fraction (mass)    |
|                        |                        | Material                  |
| Distances              | Distances of interest  | Specify volume inventory? |
|                        |                        | Mass inventory            |
|                        |                        | Volume inventory          |
|                        |                        | Max. distance option      |
|                        |                        | Minimum distance          |
| BLEVE blast parameters | BLEVE blast parameters | Maximum distance          |
|                        |                        | Step size                 |
|                        |                        | No. of points             |
|                        |                        | Air or ground burst       |
|                        |                        | Ideal gas modelling       |
|                        |                        | CCPS method               |

## G Outputvariablen FLACS

| Name      | Units                             | Description                                  |
|-----------|-----------------------------------|--|
| H         | (J/kg)                            | Enthalpy                                     |
| FUEL      | (-)                               | Fuel mass fraction                           |
| FUEL_MAX  | (-)                               | Maximum fuel mass fraction                   |
| FMIX      | (-)                               | Mixture fraction                             |
| FMIX_MAX  | (-)                               | Maximum mixture fraction                     |
| FVAR      | (-)                               | Mixture variance                             |
| K         | (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ) | Turbulent kinetic energy                     |
| EPK       | (1/s)                             | Turbulence ratio                             |
| EPS       | (m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ) | Dissipation rate of turbulent kinetic energy |
| GAMMA     | (-)                               | Isentropic gas constant                      |
| LT        | (m)                               | Turbulence length scale                      |
| MU        | (kg/(m*s))                        | Effective dynamic viscosity                  |
| OX        | (-)                               | Oxygen mass fraction                         |
| P         | (barg)                            | Pressure                                     |
| P_MAX     | (barg)                            | Maximum pressure                             |
| PMIN      | (barg)                            | Minimum pressure                             |
| DPDT      | (bar/s)                           | Rate of pressure rise                        |
| P_IMP     | (Pa*s)                            | Pressure impulse                             |
| P_IMP_MAX | (Pa*s)                            | Maximum pressure impulse                     |
| PROD      | (-)                               | Combustion product mass fraction             |
| PROD_MAX  | (-)                               | Maximum combustion product mass fraction     |
| RFU       | (kg/(m <sup>3</sup> *s))          | Combustion Rate                              |
| RET       | (-)                               | Turbulent Reynolds number                    |

|           |                                     |                                    |
|-----------|-------------------------------------|------------------------------------|
| FMOLE     | (m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> )   | Fuel mole fraction                 |
| FMOLE_MAX | (m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> )   | Maximum fuel mole fraction         |
| FDOSE     | (m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> *s) | Fuel mole fraction DOSE            |
| RHO       | (kg/m <sup>3</sup> )                | Density                            |
| T         | (K)                                 | Temperature                        |
| TURB      | (m/s)                               | Turbulence velocity                |
| TURBI     | (-)                                 | Relative turbulence intensity      |
| UVW       | (m/s)                               | Velocity value                     |
| UDRAG     | (Pa)                                | Drag component x-direction         |
| VDRAG     | (Pa)                                | Drag component y-direction         |
| WDRAG     | (Pa)                                | Drag component z-direction         |
| DRAG      | (Pa)                                | Drag value                         |
| DRAG_MAX  | (Pa)                                | Maximum drag value                 |
| UD_IMP    | (Pa*s)                              | Drag-impulse component x-direction |
| VD_IMP    | (Pa*s)                              | Drag-impulse component y-direction |
| WD_IMP    | (Pa*s)                              | Drag-impulse component z-direction |
| D_IMP     | (Pa*s)                              | Drag-impulse value                 |
| D_IMP_MAX | (Pa*s)                              | Maximum drag-impulse value         |
| UFLUX     | (kg/(m <sup>2</sup> *s))            | Flux component x-direction         |
| VFLUX     | (kg/(m <sup>2</sup> *s))            | Flux component y-direction         |
| WFLUX     | (kg/(m <sup>2</sup> *s))            | Flux component z-direction         |

|           |                                   |  |
|-----------|-----------------------------------|--|
| FLUX      | (kg/(m <sup>2</sup> *s))          | Flux value                                       |
| UMACH     | (-)                               | Mach number component<br>x-direction             |
| VMACH     | (-)                               | Mach number component<br>y-direction             |
| WMACH     | (-)                               | Mach number component<br>z-direction             |
| MACH      | (-)                               | Mach number value                                |
| CS        | (m/s)                             | Sound velocity                                   |
| TAUWX     | (-)                               | Wall shear force tauwx                           |
| TAUWY     | (-)                               | Wall shear force tauwy                           |
| TAUWZ     | (-)                               | Wall shear force tauwz                           |
| NUSSN     | (-)                               | Nusselt number                                   |
| RESID     | (-)                               | Mass residual in continuity<br>equation          |
| ER        | (-)                               | Equivalence ratio                                |
| ER_MAX    | (-)                               | Maximum equivalence ratio                        |
| ERLFL     | (-)                               | Equivalence ratio as %LFL                        |
| ERLFL_MAX | (-)                               | Maximum equivalence ratio<br>as %LFL             |
| ERNFL     | (-)                               | Equivalence ratio,<br>normalised flammable range |
| EQ        | (-)                               | Equivalence ratio, finite<br>bounded             |
| EQLFL     | (-)                               | Equivalence ratio, finite<br>bounded, as %LFL    |
| EQNFL     | (-)                               | Equivalence ratio,<br>normalised flammable range |
| TMOLE     | (m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ) | Toxic mole fraction                              |

|        |   |   |
|--------|---|---|
| TCONS  | (mg/m <sup>3</sup> )                    | Toxic concentration                                 |
| TDOSE  | (mg/m <sup>3</sup> *minute)             | Toxic dose  |
| PROBIT | (-)                                     | Toxic probit  |
| PDEATH | (-)                                     | Probability of death as<br>function of toxic probit |
| DPDX   | (-)                                     | Spatial pressure gradient                           |
| DDTLS  | (-)                                     | Detonation length scale ratio                       |
| TWALL  | (K)                                     | Wall temperature                                    |
| SOOT   | (-)                                     | Mass fraction of soot                               |
| H2O    | (-)                                     | Mass fraction of H2O                                |
| CO2    | (-)                                     | Mass fraction of CO2                                |
| CO     | (-)                                     | Mass fraction of CO                                 |
| VFSOOT | (-)                                     | Volume fraction of soot                             |
| VFH2O  | (-)                                     | Volume fraction of H2O                              |
| VFCO2  | (-)                                     | Volume fraction of CO2                              |
| VFCO   | (-)                                     | Volume fraction of CO                               |
| ABSCOF | (1/m)                                   | Absorption coefficient                              |
| RADSRC | (kW/m <sup>3</sup> )                    | Radiation source                                    |
| QRAD   | (kW/m <sup>2</sup> )                    | Radiative heat flux                                 |
| QCONV  | (kW/m <sup>2</sup> )                    | Convective heat flux                                |
| Q      | (kW/m <sup>2</sup> )                    | Total heat flux                                     |
| QWALL  | (kW/m <sup>2</sup> )                    | Wall incident heat flux                             |
| QDOSE  | ((kW/m <sup>2</sup> ) <sup>4/3</sup> s) | Heat dose   |

| <b>Name</b> | <b>Units</b> | <b>Description</b>                        |
|-------------|--------------|---|
| VVEC        | (m/s)        | Velocity vector (dim=3)                   |
| U           | (m/s)        | Velocity component<br>x-direction (dim=0) |
| V           | (m/s)        | Velocity component<br>y-direction (dim=0) |
| W           | (m/s)        | Velocity component<br>z-direction (dim=0) |

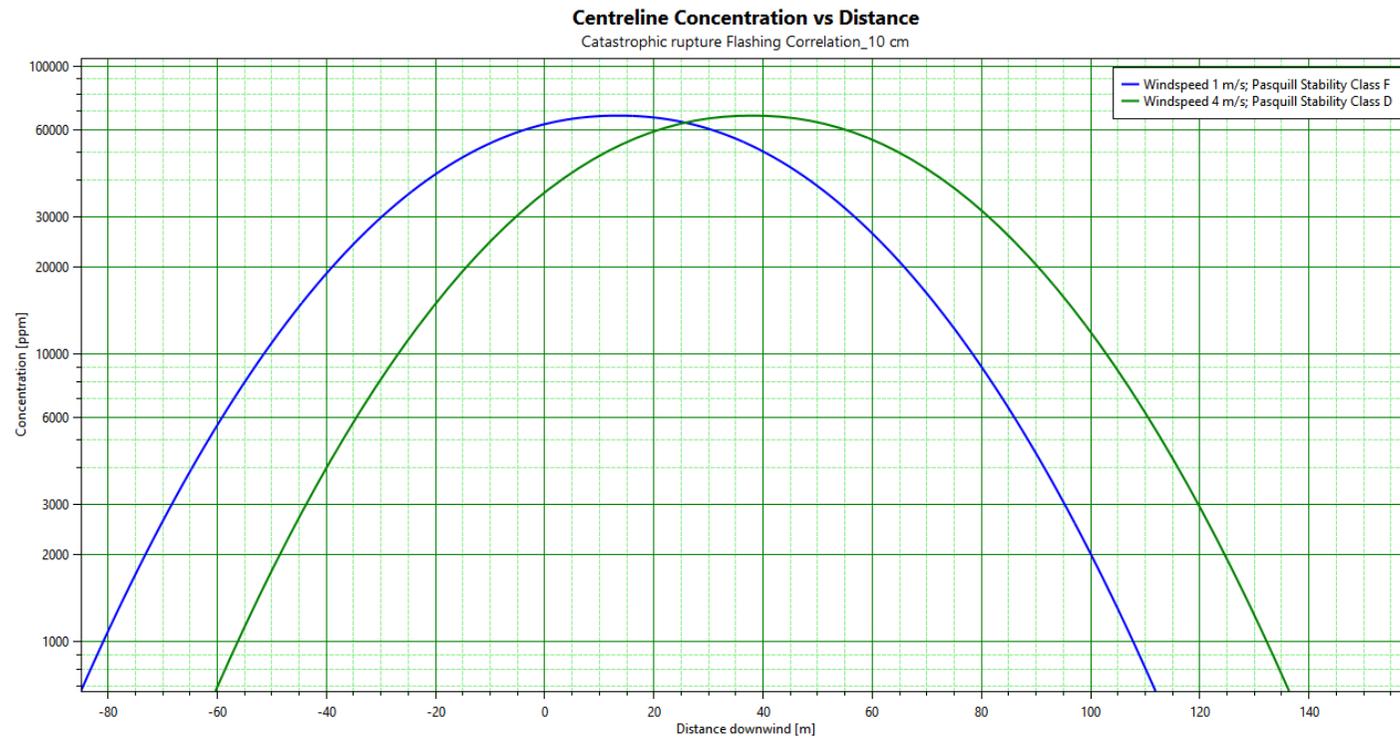
| <b>Name</b> | <b>Units</b> | <b>Description</b>                |
|-------------|--------------|-----------------------------------|
| PPOR        | (-)          | Panel average area porosity       |
| PP          | (Pa)         | Panel average pressure            |
| PP_IMP      | (Pa*s)       | Panel average pressure<br>impulse |
| PDRAG       | (Pa)         | Panel average drag                |
| PDRAG_IMP   | (Pa*s)       | Panel average drag impulse        |

## H Vergleichsrechnungen Phast-Effects

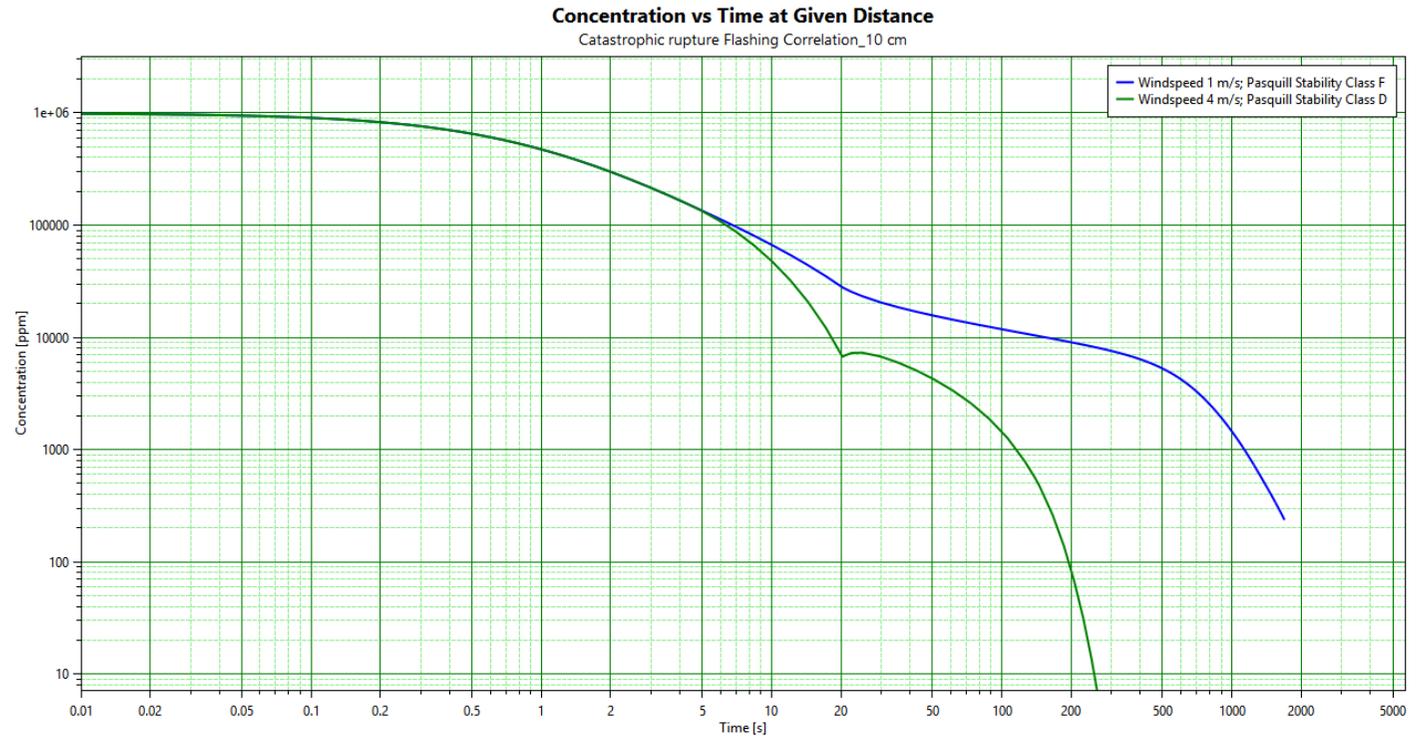
### H 1. Resultate Phast, Variante mit Phast Standard Tröpfchenmodell (Default)

#### H 1.1 Berechnung mit Surface Roughness 10 cm (mit Windgeschwindigkeiten 1 und 4 m/s und Pasquill-Klassen D und F)

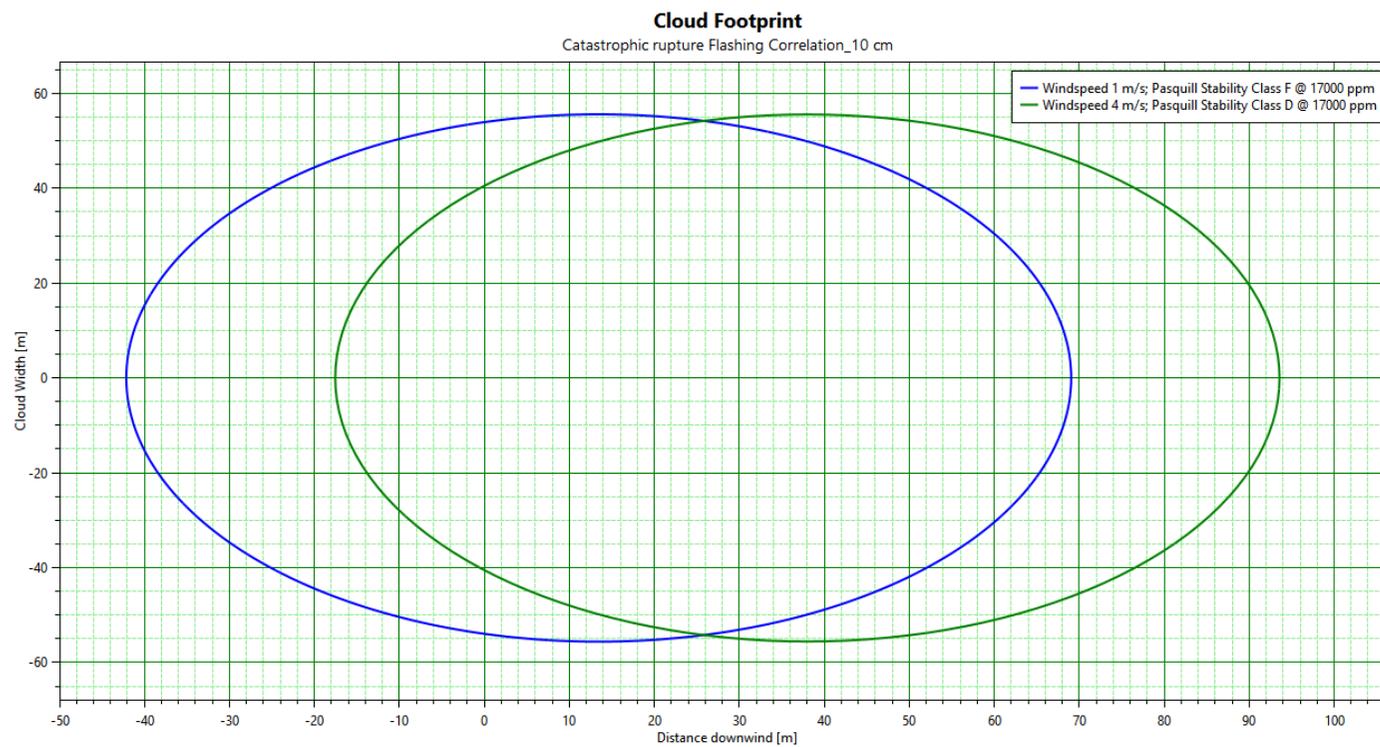
|  |  |
|--|--|
| Audit Number   | 4492   |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                    |
| Material   | PROPANE  |
| Reference  | PROPANE  |
| Program  | Phast 7.21   |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 10.0307 s  |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 10.0307 s  |
| Weather  | Multiple Weather                                   |
| Workspace  | LPG_Release  |



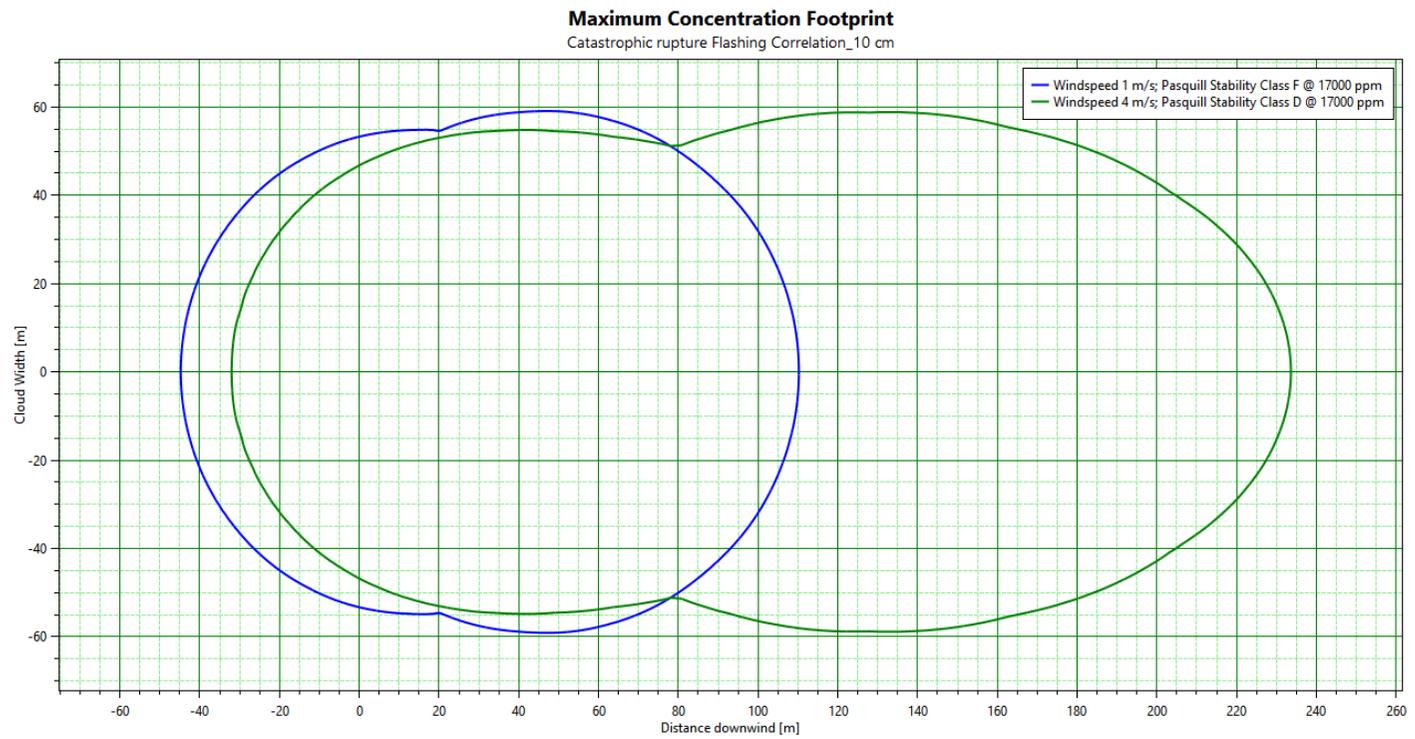
|                    |  |   |
|--------------------|--|---|
| Audit Number       | 4492   | ✕ |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                |   |
| Downwind Distance  | 9.26718 m  |   |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                    |   |
| Height of Interest | 0 m  |   |
| Material           | PROPANE  |   |
| Reference          | PROPANE  |   |
| Offset Distance    | 0 m  |   |
| Program            | Phast 7.21   |   |
| Reference Time     | ERPG (3600 s)                                      |   |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |   |
| Weather            | Multiple Weather                                   |   |
| Workspace          | LPG_Release  |   |



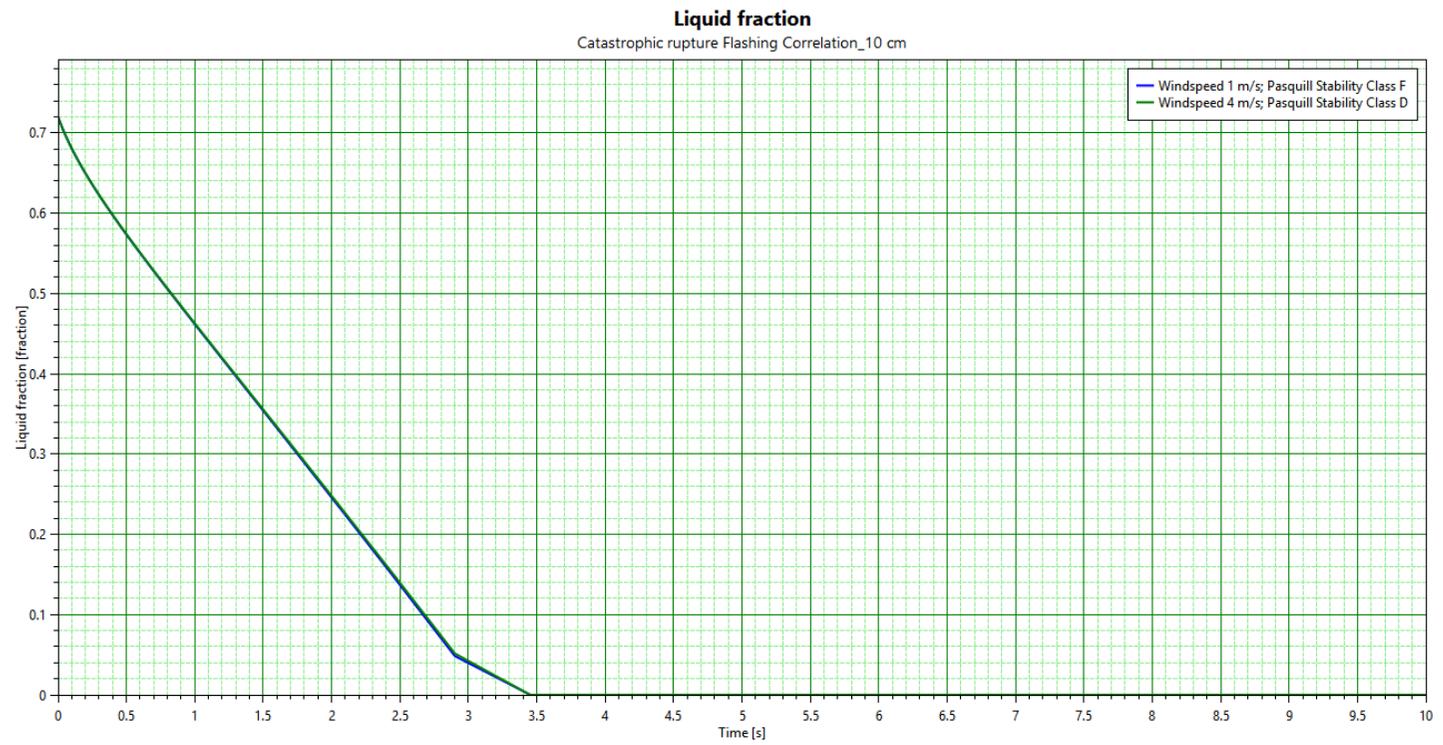
|  |  |   |
|--|--|---|
| Audit Number   | 4499   | ✕ |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                |   |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                    |   |
| Height of Interest   | 0 m  |   |
| Material   | PROPANE  |   |
| Reference  | PROPANE  |   |
| Program  | Phast 7.21   |   |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |   |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 10.0307 s  |   |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 10.0307 s  |   |
| Weather  | Multiple Weather                                   |   |
| Workspace  | LPG_Release  |   |



|                    |  |   |
|--------------------|--|---|
| Audit Number       | 4492   | ✕ |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                |   |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                    |   |
| Height of Interest | 0 m  |   |
| Material           | PROPANE  |   |
| Reference          | PROPANE  |   |
| Program            | Phast 7.21   |   |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |   |
| Weather            | Multiple Weather                                   |   |
| Workspace          | LPG_Release  |   |



|              |  |   |
|--------------|--|---|
| Audit Number | 4492   | ✕ |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                    |   |
| Material     | PROPANE  |   |
| Program      | Phast 7.21   |   |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |   |
| Workspace    | LPG_Release  |   |



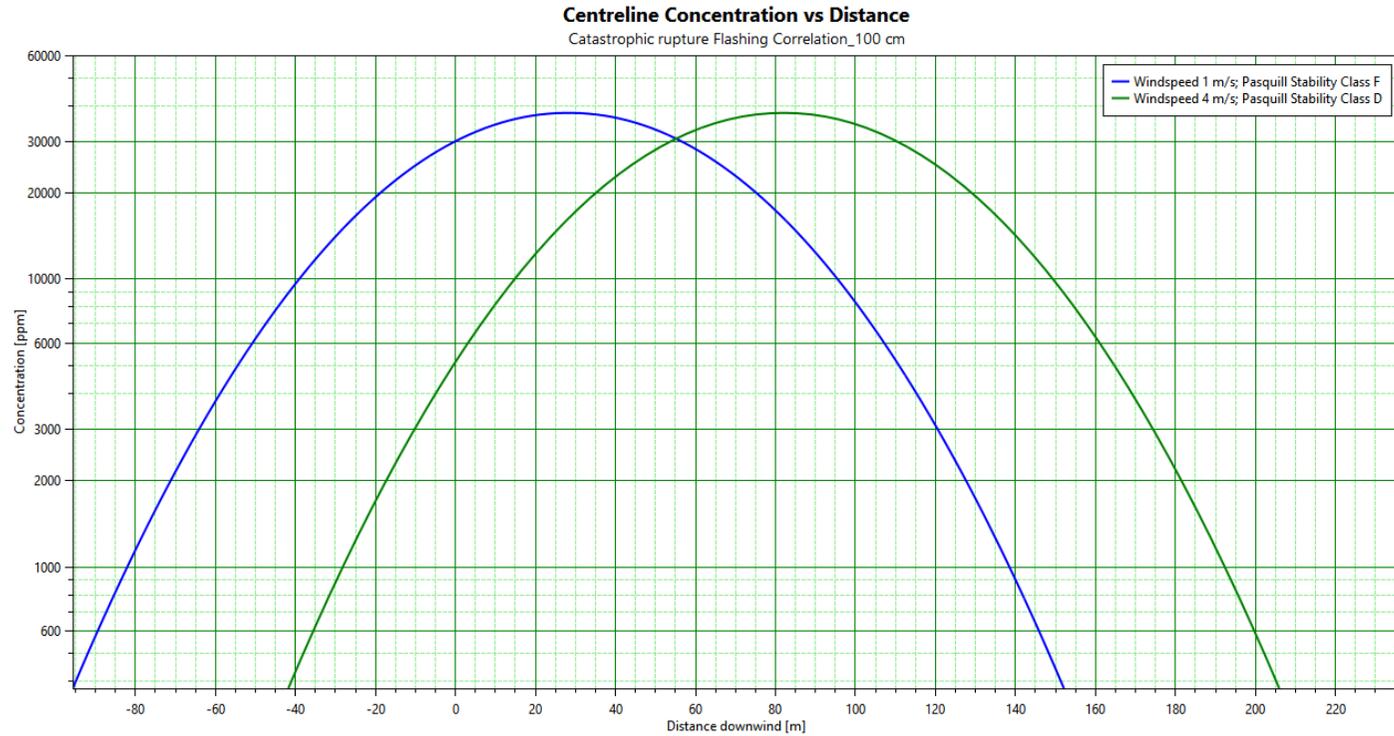
| <b>Input Report</b>                           |                            |  |                                       |              |
|---|----------------------------|--|---------------------------------------|--------------|
| <b>Workspace: LPG_Release</b>                 |                            |  |                                       |              |
| <b>Flashing Correlation_10 cm</b>             |                            |  |                                       |              |
| <b>Study</b>                                  |                            |  |                                       |              |
| <b>LPG_Release</b>                            |                            |  |                                       |              |
| <b>Tab</b>                                    | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                          | <b>Units</b> |
| Context of calculations                       | Selection of context       | Weathers to use for this study               | Weather folder                        |              |
|   |                            | Parameters to use for this study             | Parameter set                         |              |
| Bund, building and terrain                    | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 10 cm |              |
|   | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                    |              |
| Dispersion                                    | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                         | m            |
| <b>Bahnkesselwagen</b>                        |                            |  |                                       |              |
| <b>Pressure vessel</b>                        |                            |  |                                       |              |
| <b>LPG_Release\Flashing Correlation_10 cm</b> |                            |  |                                       |              |
| <b>Tab</b>                                    | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                          | <b>Units</b> |
| Material                                      | Material                   | Material                                     | PROPANE                               |              |
|   |                            | Specify volume inventory?                    | No                                    |              |
|   |                            | Mass inventory                               |                                       | 42000 kg     |
|   |                            | Volume inventory                             |                                       | 82.9022 m3   |
|   |                            | Material to track                            | PROPANE                               |              |
|   | Phase                      | Specified condition                          | Pressure/temperature                  |              |
|   |                            | Temperature                                  |                                       | 15 degC      |
|   |                            | Pressure (gauge)                             |                                       | 25 bar       |
|   |                            | Fluid state                                  | Liquid                                |              |
|   |                            | Liquid mole fraction                         |                                       | 1 fraction   |
|   |                            | Phase to be released                         | Liquid                                |              |
| Scenario                                      | Pipe dimensions            | Pipe length                                  |                                       | m            |
|   | Release location           | Elevation                                    |                                       | 1 m          |
|   |                            | Tank head                                    |                                       | 0 m          |
|   |                            | Release height from vessel bottom            |                                       | m            |
|   | Direction                  | Outdoor release direction                    | Horizontal                            |              |
| Discharge parameters                          | Model settings             | Atmospheric expansion method                 | Closest to initial conditions         |              |
|   |                            | Is flashing allowed to the orifice?          | No flashing in the orifice            |              |
|   | Droplet break-up mechanism | Droplet break-up mechanism - instantaneous   | Use mechanical correlation            |              |
|   |                            | Droplet break-up mechanism - continuous      | Do not force correlation              |              |
| Dispersion                                    | Dispersion scope           | Concentration of interest                    |                                       | 17000 ppm    |
|   |                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                             |              |
|   |                            | Specify user-defined averaging time          | No                                    |              |
|   |                            | User defined averaging time                  |                                       | s            |
|   | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                         | m            |
|   | Averaging time for reports | ERPG [1 hr]                                  | No                                    |              |
|   |                            | IDLH [30 mins]                               | No                                    |              |
|   |                            | STEL [15 mins]                               | No                                    |              |
| Bund, building and terrain                    | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 10 cm |              |
|   | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                    |              |

| Group                      | Field  | Value                                 | Units     |
|----------------------------|--|---------------------------------------|-----------|
| Release location           | Elevation                                    |                                       | 1 m       |
|                            | Tank head                                    |                                       | 0 m       |
| Material                   | Material characteristics                     | Flammable only                        |           |
|                            | Material to track                            | PROPANE                               |           |
| Phase                      | Phase to be released                         | Liquid                                |           |
| Droplet break-up mechanism | Droplet break-up mechanism - instantaneous   | Use mechanical correlation            |           |
| Dispersion scope           | Concentration of interest                    |                                       | 17000 ppm |
|                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                             |           |
|                            | Specify user-defined averaging time          | No                                    |           |
| Distances of interest      | User defined averaging time                  |                                       | s         |
|                            | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                         | m         |
| Averaging time for reports | ERPG [1 hr]                                  | No                                    |           |
|                            | IDLH [30 mins]                               | No                                    |           |
|                            | STEL [15 mins]                               | No                                    |           |
| Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 10 cm |           |
| Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                    |           |

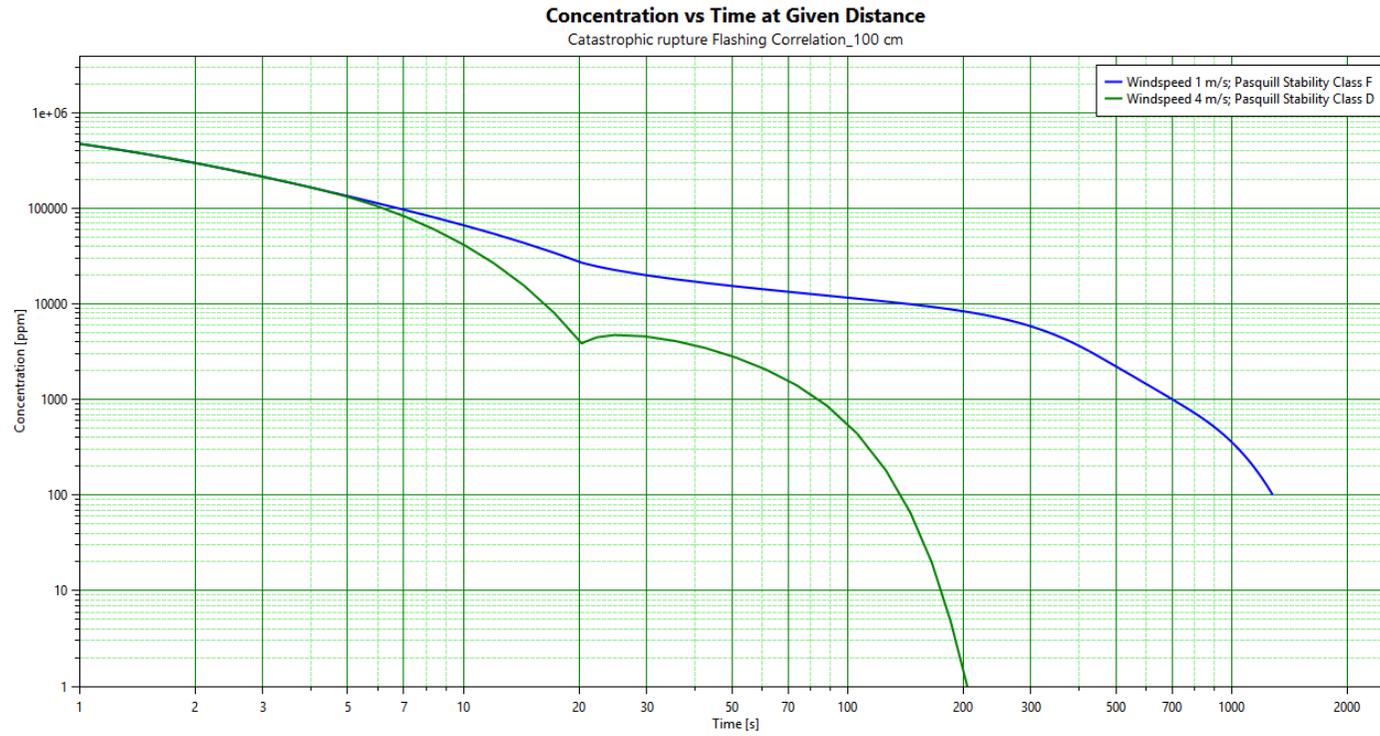
Phast zeigt in der Tabelle nur die globalen Einstellungen an. Parameteränderungen im „study tree“ zeigt Phast in der Tabelle nicht an. Im „study tree“ wurde der Parameter „Droplet break-up mechanism – instantaneous“ auf „Use flashing correlation“ geschaltet.

## H 1.2 Berechnung mit Surface Roughness 1 m (mit Windgeschwindigkeiten 1 und 4 m/s und Pasquill-Klassen D und F)

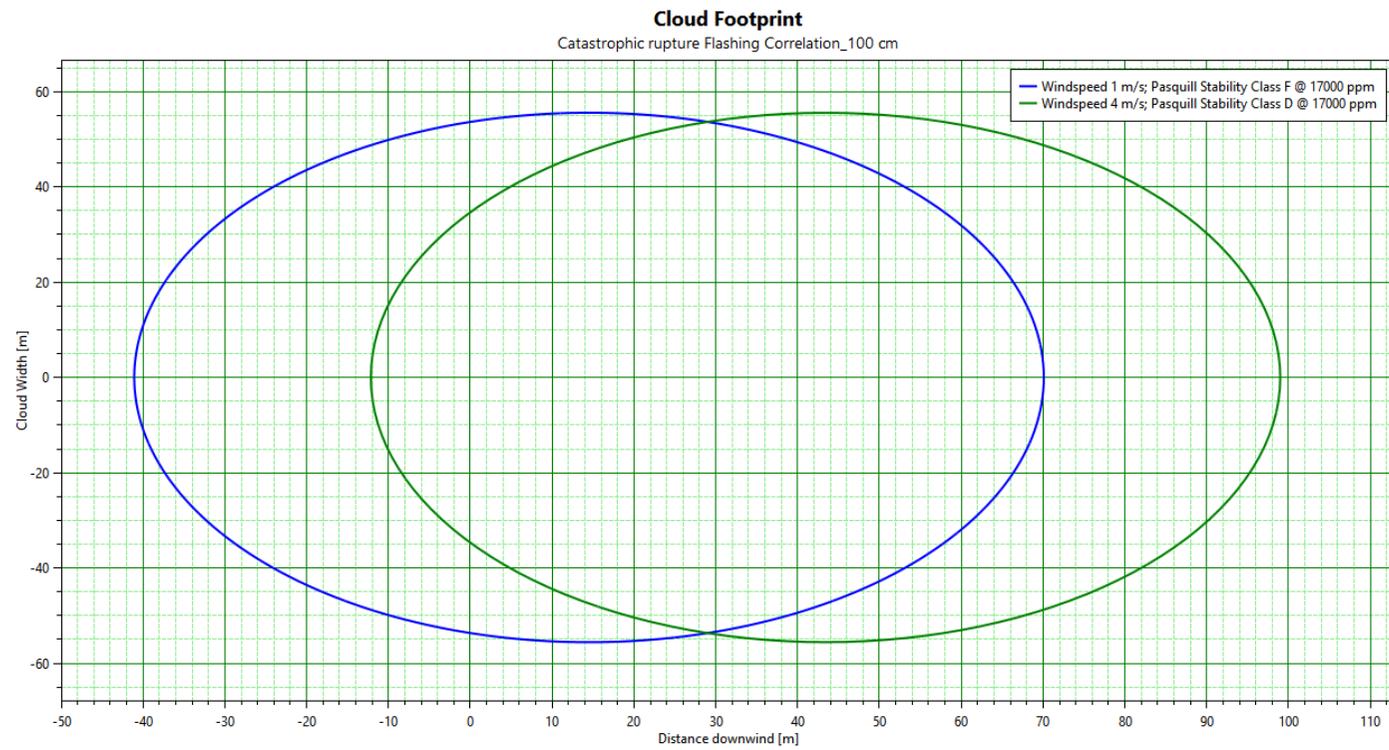
|  |   |   |
|--|---|---|
| Audit Number   | 4492  | ✕ |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                 |   |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                     |   |
| Material   | PROPANE   |   |
| Reference  | PROPANE   |   |
| Program  | Phast 7.21  |   |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |   |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 17.2311 s   |   |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 17.2311 s   |   |
| Weather  | Multiple Weather                                    |   |
| Workspace  | LPG_Release   |   |



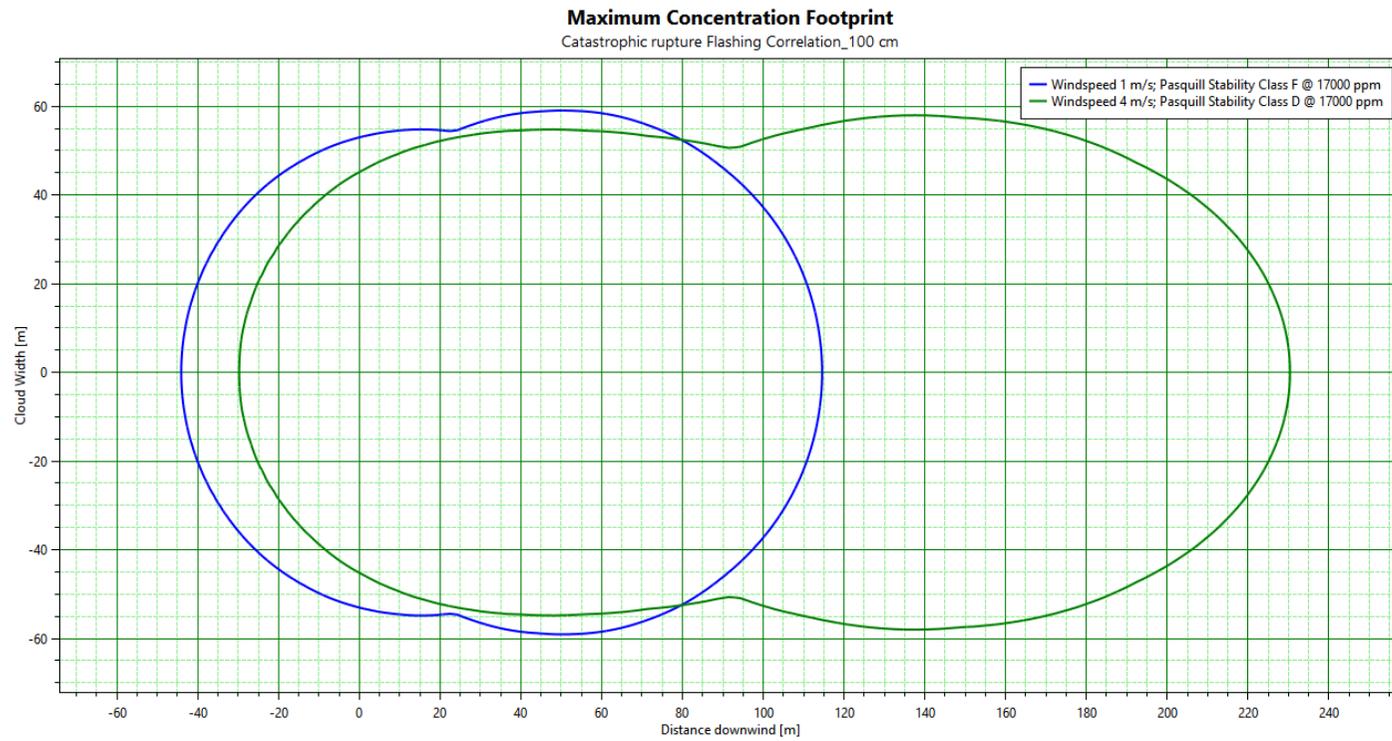
|                    |   |
|--------------------|---|
| Audit Number       | 4492  |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                 |
| Downwind Distance  | 9.65133 m   |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                     |
| Height of Interest | 0 m   |
| Material           | PROPANE   |
| Reference          | PROPANE   |
| Offset Distance    | 0 m   |
| Program            | Phast 7.21  |
| Reference Time     | ERPG (3600 s)                                       |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |
| Weather            | Multiple Weather                                    |
| Workspace          | LPG_Release   |



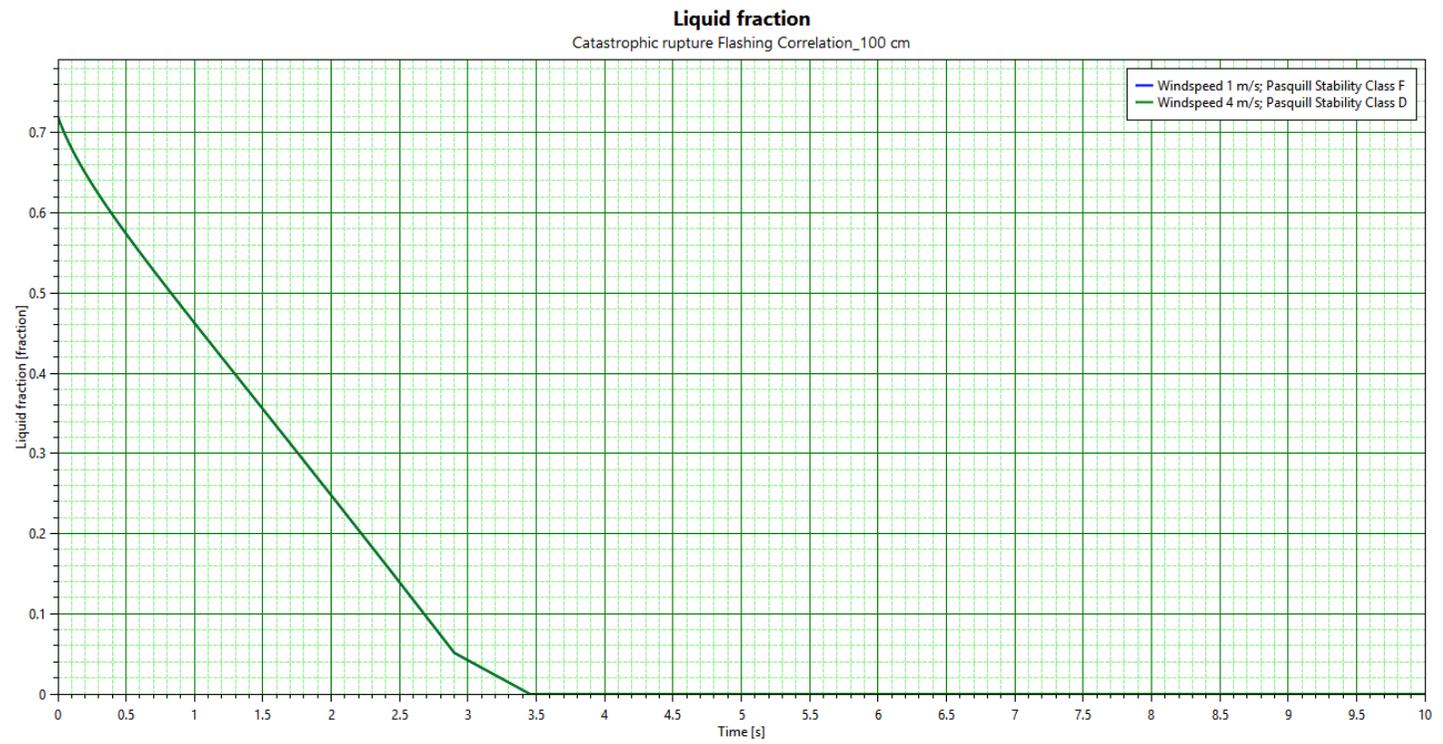
|  |   |
|--|---|
| Audit Number   | 4499  |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                 |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                     |
| Height of Interest   | 0 m   |
| Material   | PROPANE   |
| Reference  | PROPANE   |
| Program  | Phast 7.21  |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 10.0307 s   |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 10.0307 s   |
| Weather  | Multiple Weather                                    |
| Workspace  | LPG_Release   |



|                    |   |
|--------------------|---|
| Audit Number       | 4492  |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                 |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                     |
| Height of Interest | 0 m   |
| Material           | PROPANE   |
| Reference          | PROPANE   |
| Program            | Phast 7.21  |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |
| Weather            | Multiple Weather                                    |
| Workspace          | LPG_Release   |



|              |   |   |
|--------------|---|---|
| Audit Number | 4492  | ✕ |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                     |   |
| Material     | PROPANE   |   |
| Program      | Phast 7.21  |   |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |   |
| Workspace    | LPG_Release   |   |



| <b>Input Report</b>                            |                            |  |                                     |              |
|--|----------------------------|--|-------------------------------------|--------------|
| <b>Workspace: LPG_Release</b>                  |                            |  |                                     |              |
| <b>Flashing Correlation_100 cm</b>             |                            |  |                                     |              |
| <b>Study</b>                                   |                            |  |                                     |              |
| <b>LPG_Release</b>                             |                            |  |                                     |              |
| <b>Tab</b>                                     | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                        | <b>Units</b> |
| Context of calculations                        | Selection of context       | Weathers to use for this study               | Weather folder                      |              |
|  |                            | Parameters to use for this study             | Parameter set                       |              |
| Bund, building and terrain                     | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 1 m |              |
|  | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                  |              |
| Toxic parameters                               | Indoor toxic calculations  | Specify the downwind building type           | Unselected                          |              |
|  |                            | Building type (downwind building type)       | Buildings\Building type             |              |
| Dispersion                                     | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                       | m            |
| <b>Bahnkesselwagen</b>                         |                            |  |                                     |              |
| <b>Pressure vessel</b>                         |                            |  |                                     |              |
| <b>LPG_Release\Flashing Correlation_100 cm</b> |                            |  |                                     |              |
| <b>Tab</b>                                     | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                        | <b>Units</b> |
| Material                                       | Material                   | Material                                     | PROPANE                             |              |
|  |                            | Specify volume inventory?                    | No                                  |              |
|  |                            | Mass inventory                               |                                     | 42000 kg     |
|  |                            | Volume inventory                             |                                     | 82.9022 m3   |
|  |                            | Material to track                            | PROPANE                             |              |
|  | Phase                      | Specified condition                          | Pressure/temperature                |              |
|  |                            | Temperature                                  |                                     | 15 degC      |
|  |                            | Pressure (gauge)                             |                                     | 25 bar       |
|  |                            | Fluid state                                  | Liquid                              |              |
|  |                            | Liquid mole fraction                         |                                     | 1 fraction   |
|  |                            | Phase to be released                         | Liquid                              |              |
| Scenario                                       | Pipe dimensions            | Pipe length                                  |                                     | m            |
|  | Release location           | Elevation                                    |                                     | 1 m          |
|  |                            | Tank head                                    |                                     | 0 m          |
|  |                            | Release height from vessel bottom            |                                     | m            |
|  | Direction                  | Outdoor release direction                    | Horizontal                          |              |
| Discharge parameters                           | Model settings             | Atmospheric expansion method                 | Closest to initial conditions       |              |
|  |                            | Is flashing allowed to the orifice?          | No flashing in the orifice          |              |
|  | Droplet break-up mechanism | Droplet break-up mechanism - instantaneous   | Use mechanical correlation          |              |
|  |                            | Droplet break-up mechanism - continuous      | Do not force correlation            |              |
| Dispersion                                     | Dispersion scope           | Concentration of interest                    |                                     | 17000 ppm    |
|  |                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                           |              |
|  |                            | Specify user-defined averaging time          | No                                  |              |
|  |                            | User defined averaging time                  |                                     | s            |
|  | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                       | m            |
|  | Averaging time for reports | ERPG [1 hr]                                  | No                                  |              |
|  |                            | IDLH [30 mins]                               | No                                  |              |
|  |                            | STEL [15 mins]                               | No                                  |              |
| Bund, building and terrain                     | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 1 m |              |
|  | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                  |              |

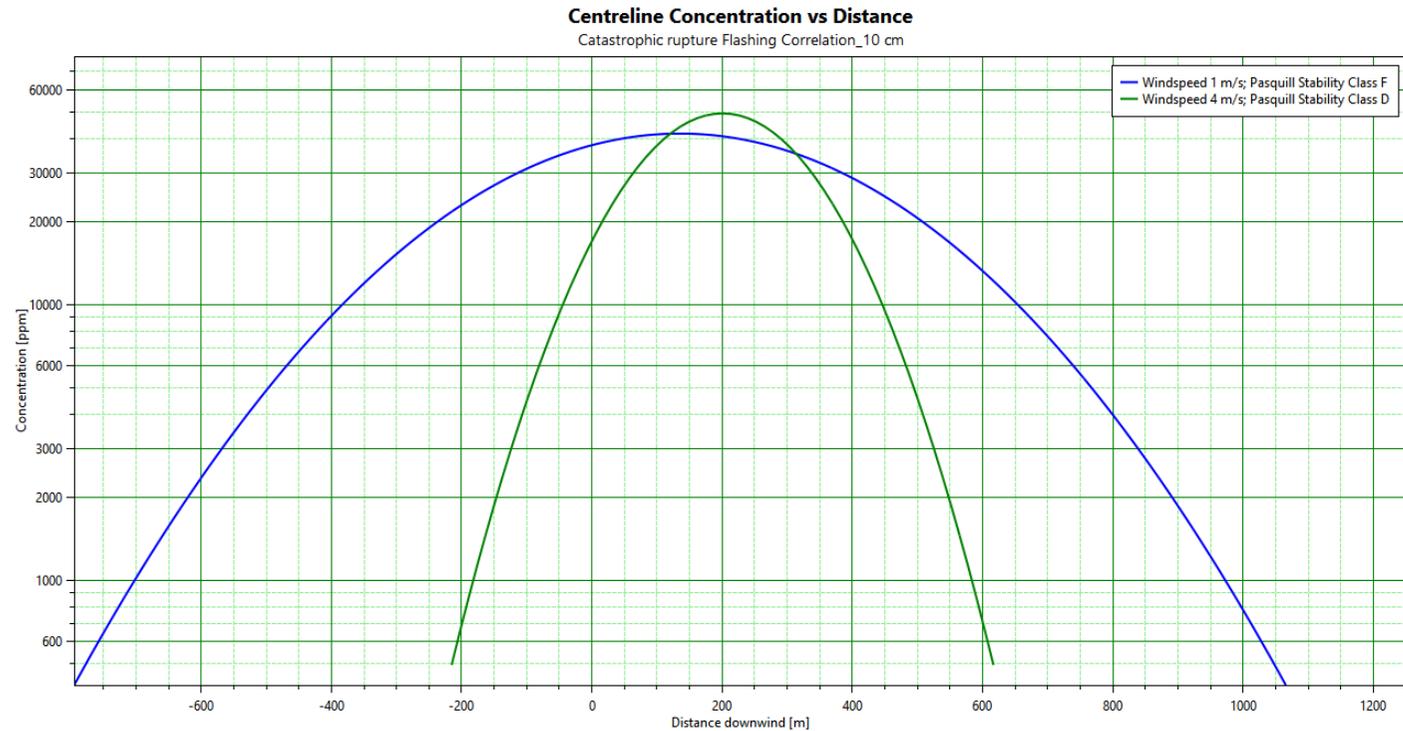
| <b>Catastrophic rupture Flashing Correlation_100 cm</b>        |                            |  |   |                                     |                    |  |
|--|----------------------------|--|---|-------------------------------------|--------------------|--|
| <b>Catastrophic rupture</b>                                    |                            |  |   |                                     |                    |  |
| <b>LPG_Release\Flashing Correlation_100 cm\Bahnkesselwagen</b> |                            |  |   |                                     |                    |  |
| <b>Tab</b>   | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                              | <b>Units</b>                        |                    |  |
| Scenario   | Release location           | Elevation                                    |   | 1 m                                 |                    |  |
|  |                            | Tank head                                    |   | 0 m                                 |                    |  |
| Material   | Material                   | Material characteristics                     | Flammable only                            |                                     |                    |  |
|  |                            | Material to track                            | PROPANE                                   |                                     |                    |  |
|  |                            | Phase to be released                         | Liquid                                    |                                     |                    |  |
| Discharge parameters   | Droplet break-up mechanism | Droplet break-up mechanism - instantaneous   | Use mechanical correlation                |                                     |                    |  |
|  |                            | Dispersion scope                             | Concentration of interest                 | 17000 ppm                           |                    |  |
| Dispersion   |                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                                 |                                     |                    |  |
|  |                            | Specify user-defined averaging time          | No  |                                     |                    |  |
|  |                            | User defined averaging time                  |   | s                                   |                    |  |
|  |                            | Distances of interest                        | Distances of interest                     | 10; 100; 1000                       | m                  |  |
|  |                            | Averaging time for reports                   | ERPG [1 hr]                               | No                                  |                    |  |
|  |                            |  | IDLH [30 mins]                            | No                                  |                    |  |
|  |                            |  | STEL [15 mins]                            | No                                  |                    |  |
|  |                            |  | Type of terrain for dispersion turbulence | Terrain types\Surface Roughness 1 m |                    |  |
|  |                            |  | Bund definition                           | Bund and type of surface for pools  | Bund types\No bund |  |
|  |                            |  |   |                                     |                    |  |

Phast zeigt in der Tabelle nur die globalen Einstellungen an. Parameteränderungen im „study tree“ zeigt Phast in der Tabelle nicht an. Im „study tree“ wurde der Parameter „Droplet break-up mechanism – instantaneous“ auf „Use flashing correlation“ geschaltet.

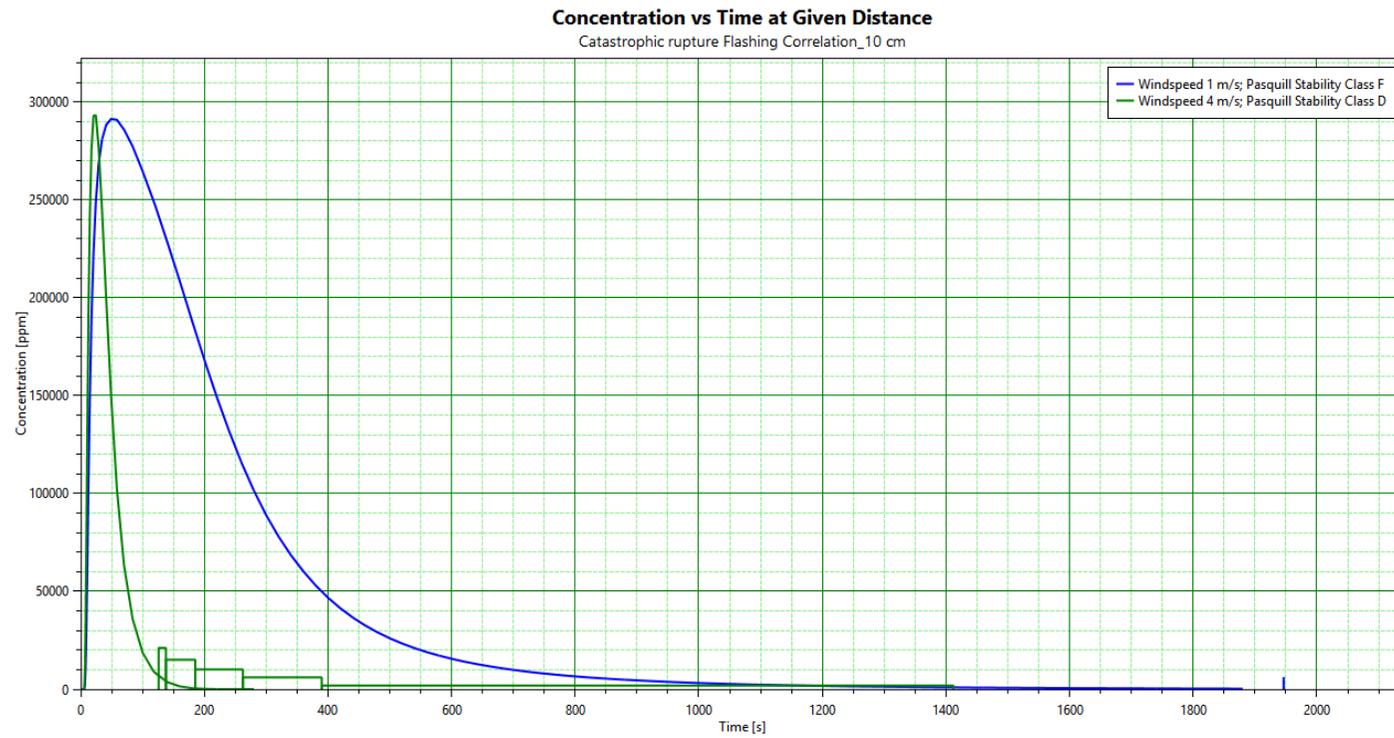
## H 2. Resultate Phast, Variante mit Purple Book Tröpfchenmodell

### H 2.1 Berechnung mit Surface Roughness 10 cm (mit Windgeschwindigkeiten 1 und 4 m/s und Pasquill-Klassen D und F)

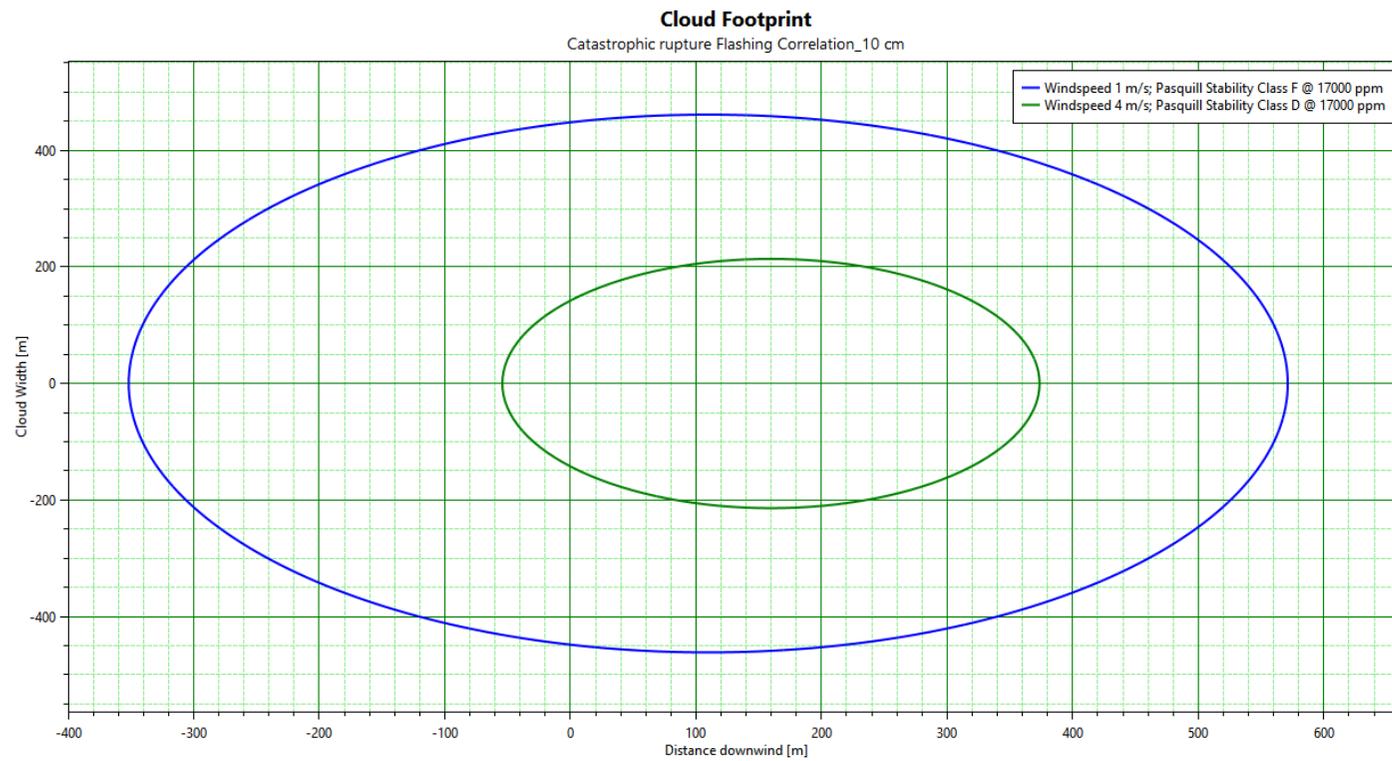
|  |  |
|--|--|
| Audit Number   | 4492   |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                    |
| Material   | PROPANE  |
| Reference  | PROPANE  |
| Program  | Phast 7.21   |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 420.088 s  |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 83.8223 s  |
| Weather  | Multiple Weather                                   |
| Workspace  | LPG_Release_mit Pool                               |



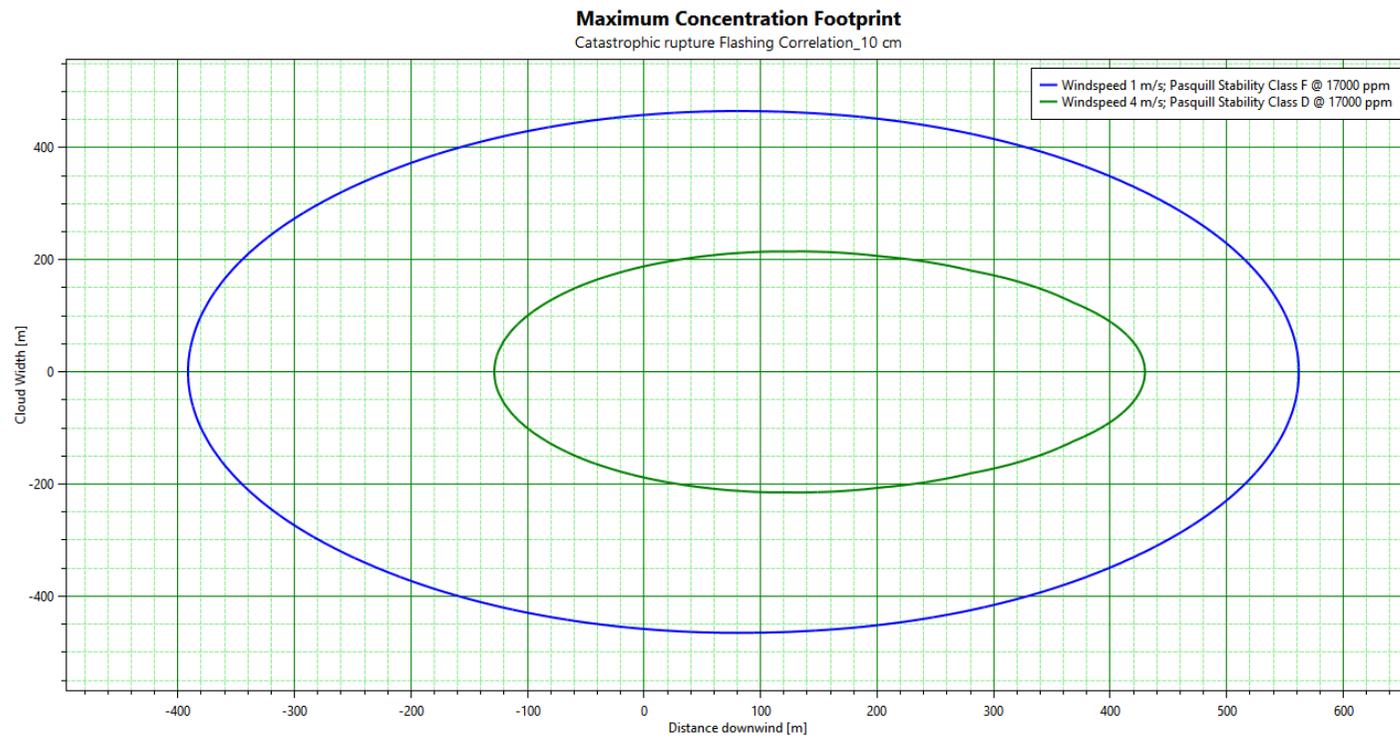
|                    |  |
|--------------------|--|
| Audit Number       | 4492   |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                |
| Downwind Distance  | 91.1422 m  |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                    |
| Height of Interest | 0 m  |
| Material           | PROPANE  |
| Reference          | PROPANE  |
| Offset Distance    | 0 m  |
| Program            | Phast 7.21   |
| Reference Time     | ERPG (3600 s)                                      |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |
| Weather            | Multiple Weather                                   |
| Workspace          | LPG_Release_mit Pool                               |



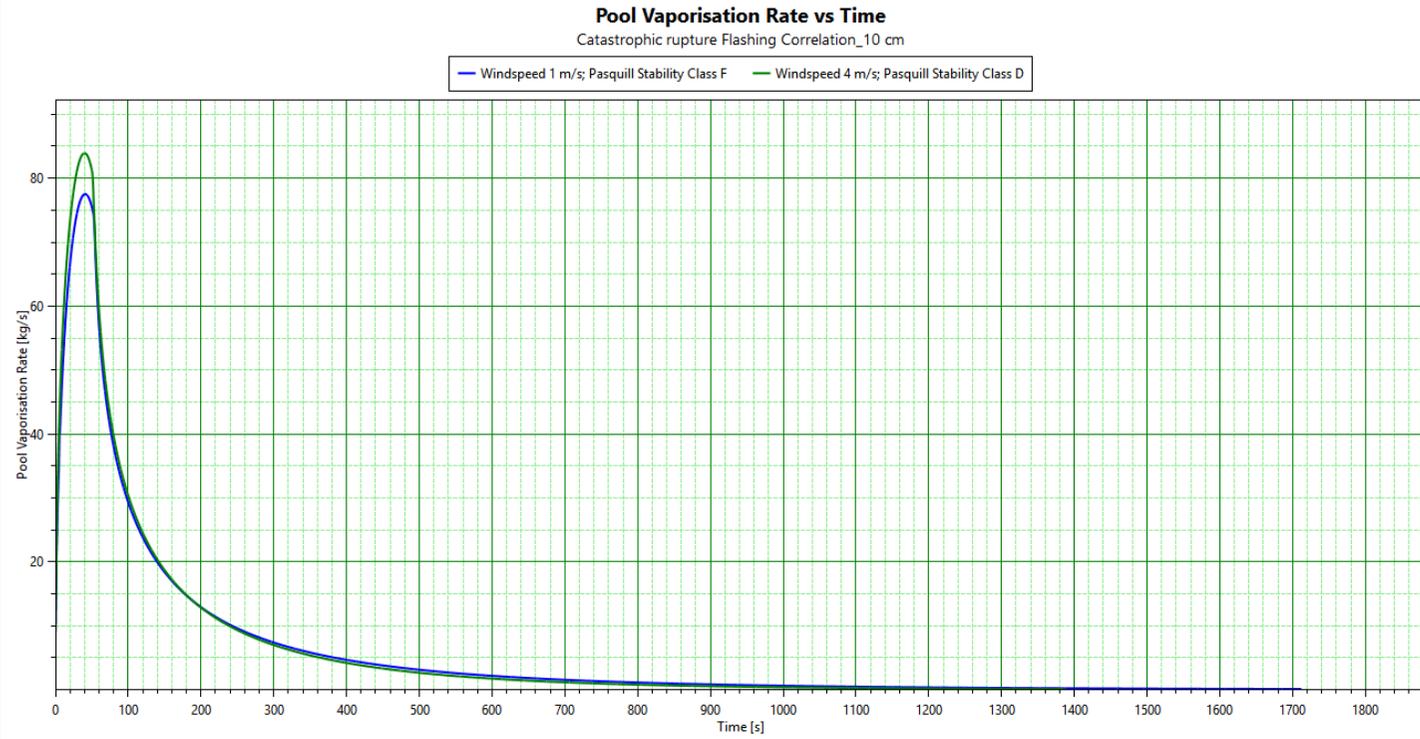
|  |  |
|--|--|
| Audit Number   | 4495   |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                    |
| Height of Interest   | 0 m  |
| Material   | PROPANE  |
| Reference  | PROPANE  |
| Program  | Phast 7.21   |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 340.088 s  |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 70.0853 s  |
| Weather  | Multiple Weather                                   |
| Workspace  | LPG_Release_mit Pool                               |



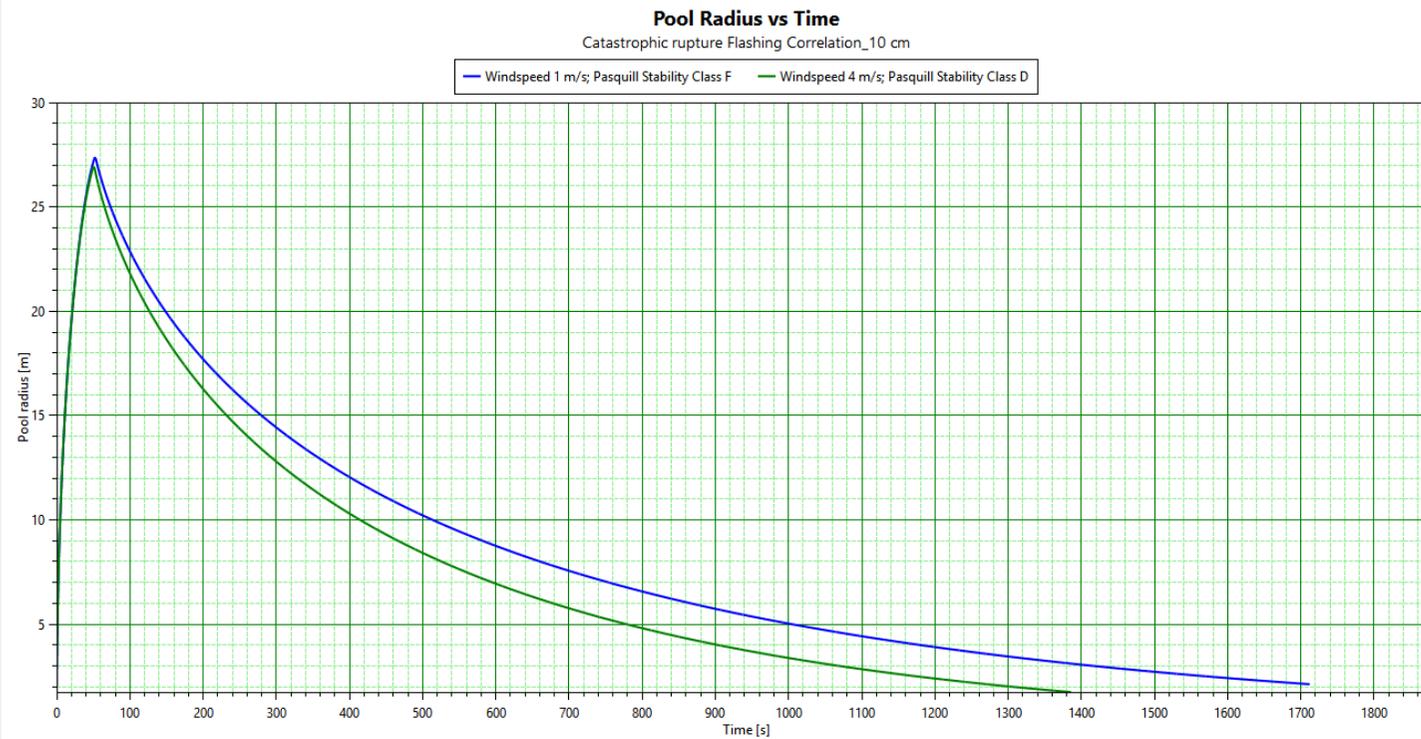
|                    |  |   |
|--------------------|--|---|
| Audit Number       | 4492   | ✕ |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                |   |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                    |   |
| Height of Interest | 0 m  |   |
| Material           | PROPANE  |   |
| Reference          | PROPANE  |   |
| Program            | Phast 7.21   |   |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |   |
| Weather            | Multiple Weather                                   |   |
| Workspace          | LPG_Release_mit Pool                               |   |



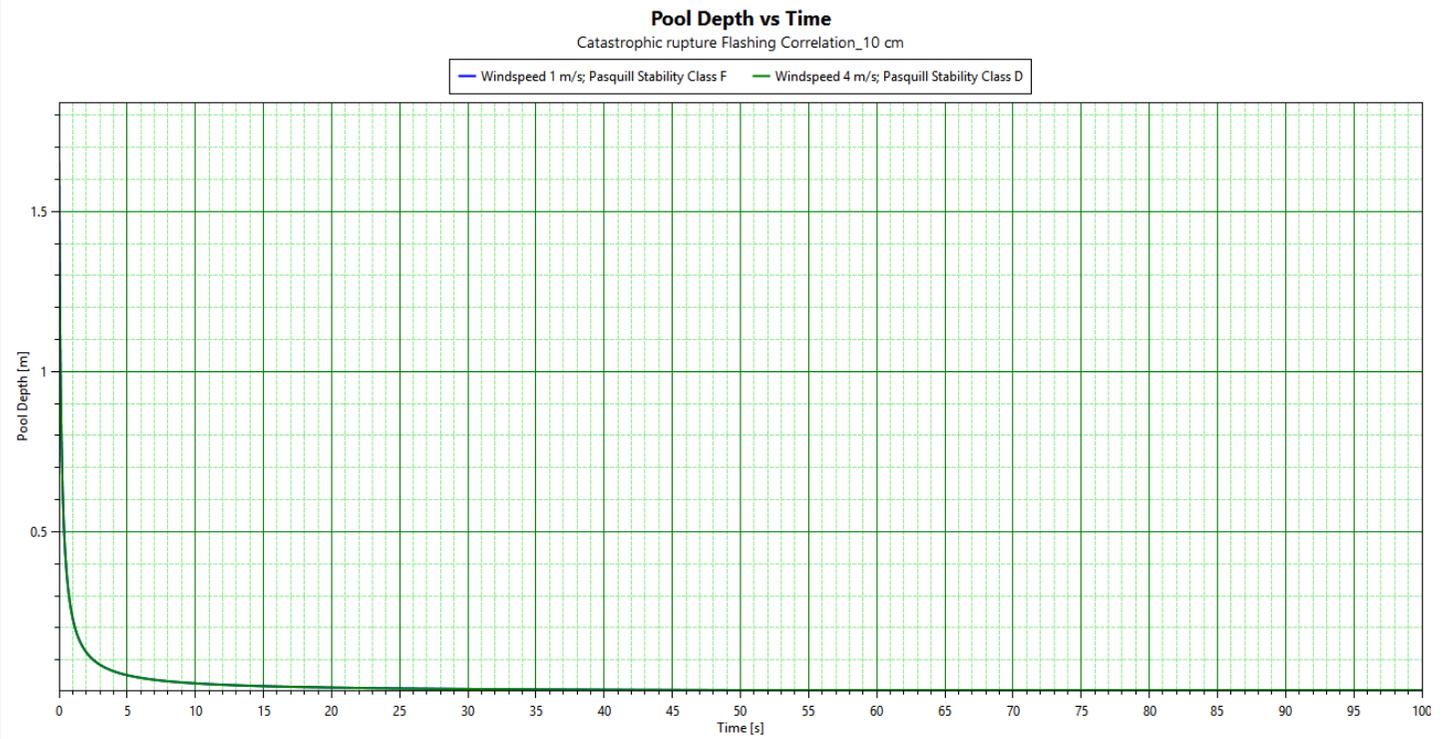
|              |  |
|--------------|--|
| Audit Number | 4492   |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                    |
| Material     | PROPANE  |
| Program      | Phast 7.21   |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |
| Workspace    | LPG_Release_mit Pool                               |



|              |  |
|--------------|--|
| Audit Number | 4492   |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                    |
| Material     | PROPANE  |
| Program      | Phast 7.21   |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |
| Workspace    | LPG_Release_mit Pool                               |



|              |  |
|--------------|--|
| Audit Number | 4492   |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                    |
| Material     | PROPANE  |
| Program      | Phast 7.21   |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_10 cm |
| Workspace    | LPG_Release_mit Pool                               |



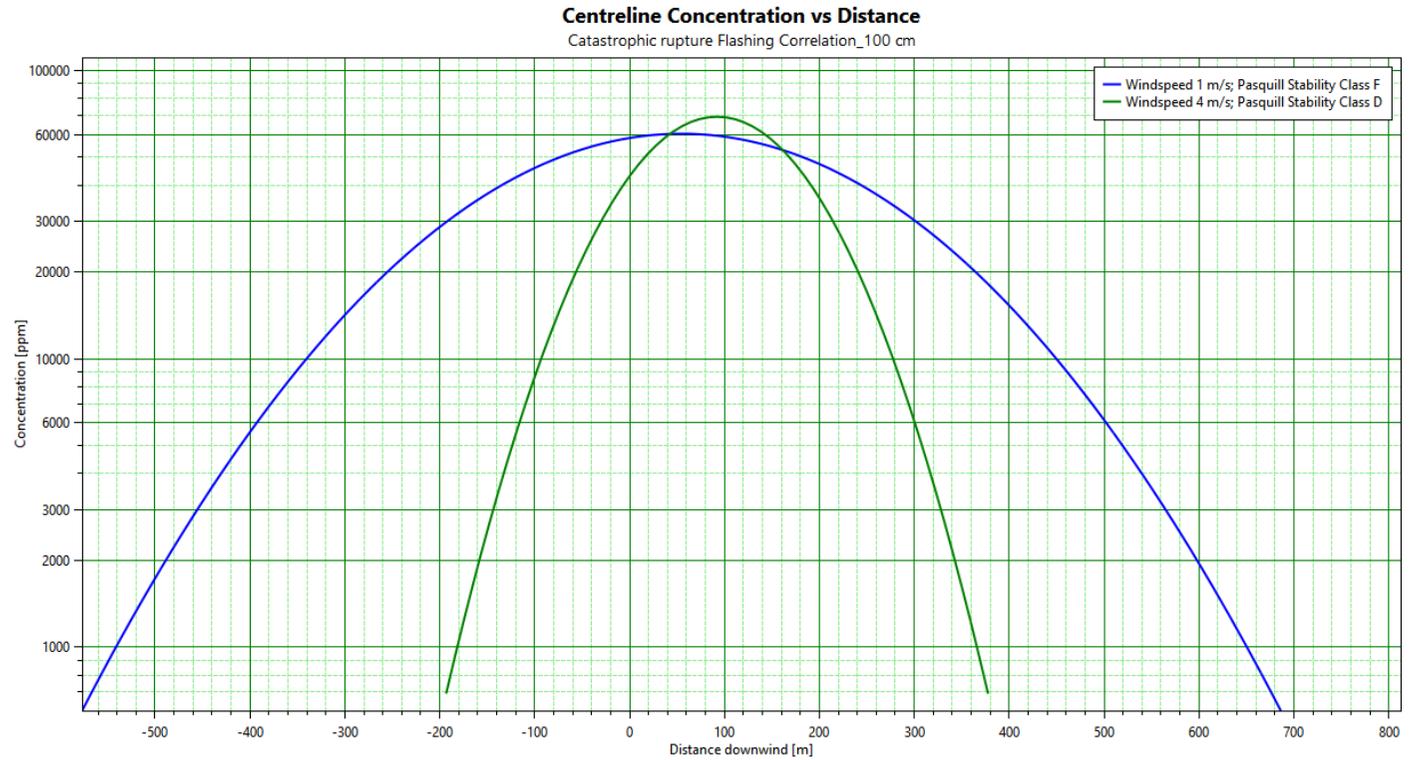
| <b>Input Report</b>                                    |                            |  |                                       |              |
|--|----------------------------|--|---------------------------------------|--------------|
| <b>Workspace: LPG_Release_mit Pool</b>                 |                            |  |                                       |              |
| <b>Flashing Correlation_10 cm</b>                      |                            |  |                                       |              |
| <b>Study</b>   |                            |  |                                       |              |
| <b>LPG_Release_mit Pool</b>                            |                            |  |                                       |              |
| <b>Tab</b>   | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                          | <b>Units</b> |
| Context of calculations                                | Selection of context       | Weathers to use for this study               | Weather folder                        |              |
|  |                            | Parameters to use for this study             | Parameter set                         |              |
| Bund, building and terrain                             | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 10 cm |              |
|  | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                    |              |
| Dispersion   | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                         | m            |
| <b>Bahnkesselwagen</b>                                 |                            |  |                                       |              |
| <b>Pressure vessel</b>                                 |                            |  |                                       |              |
| <b>LPG_Release_mit Pool\Flashing Correlation_10 cm</b> |                            |  |                                       |              |
| <b>Tab</b>   | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                          | <b>Units</b> |
| Material   | Material                   | Material                                     | PROPANE                               |              |
|  |                            | Specify volume inventory?                    | No                                    |              |
|  |                            | Mass inventory                               |                                       | 42000 kg     |
|  |                            | Volume inventory                             |                                       | 82.9022 m3   |
|  |                            | Material to track                            | PROPANE                               |              |
|  | Phase                      | Specified condition                          | Pressure/temperature                  |              |
|  |                            | Temperature                                  |                                       | 15 degC      |
|  |                            | Pressure (gauge)                             |                                       | 25 bar       |
|  |                            | Fluid state                                  | Liquid                                |              |
|  |                            | Liquid mole fraction                         |                                       | 1 fraction   |
|  |                            | Phase to be released                         | Liquid                                |              |
| Scenario   | Pipe dimensions            | Pipe length                                  |                                       | m            |
|  | Release location           | Elevation                                    |                                       | 1 m          |
|  |                            | Tank head                                    |                                       | 0 m          |
|  |                            | Release height from vessel bottom            |                                       | m            |
|  | Direction                  | Outdoor release direction                    | Horizontal                            |              |
| Discharge parameters                                   | Model settings             | Atmospheric expansion method                 | Closest to initial conditions         |              |
|  |                            | Is flashing allowed to the orifice?          | No flashing in the orifice            |              |
|  |                            | Droplet break-up mechanism - instantaneous   | Use mechanical correlation            |              |
|  | Droplet break-up mechanism | Droplet break-up mechanism - continuous      | Do not force correlation              |              |
| Dispersion   | Dispersion scope           | Concentration of interest                    |                                       | 17000 ppm    |
|  |                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                             |              |
|  |                            | Specify user-defined averaging time          | No                                    |              |
|  |                            | User defined averaging time                  |                                       | s            |
|  | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                         | m            |
|  | Averaging time for reports | ERPG [1 hr]                                  | No                                    |              |
|  |                            | IDLH [30 mins]                               | No                                    |              |
|  |                            | STEL [15 mins]                               | No                                    |              |
| Bund, building and terrain                             | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 10 cm |              |
|  | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                    |              |

| <b>Catastrophic rupture Flashing Correlation_10 cm</b>                 |                            |  |  |                            |
|--|----------------------------|--|--|----------------------------|
| <b>Catastrophic rupture</b>  |                            |  |  |                            |
| <b>LPG_Release_mit Pool\Flashing Correlation_10 cm\Bahnkesselwagen</b> |                            |  |  |                            |
| <b>Tab</b>   | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                               | <b>Units</b>               |
| Scenario   | Release location           | Elevation                                    |  | 1 m                        |
|  |                            | Tank head                                    |  | 0 m                        |
| Material   | Material                   | Material characteristics                     | Flammable only                             |                            |
|  |                            | Material to track                            | PROPANE                                    |                            |
| Discharge parameters   | Phase                      | Phase to be released                         | Liquid                                     |                            |
|  |                            | Droplet break-up mechanism                   | Droplet break-up mechanism - instantaneous | Use mechanical correlation |
| Dispersion   | Dispersion scope           | Concentration of interest                    |  | 17000 ppm                  |
|  |                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                                  |                            |
|  |                            | Specify user-defined averaging time          | No   |                            |
|  |                            | User defined averaging time                  |  | s                          |
|  | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                              | m                          |
|  | Averaging time for reports | ERPG [1 hr]                                  | No   |                            |
|  |                            | IDLH [30 mins]                               | No   |                            |
|  |                            | STEL [15 mins]                               | No   |                            |
| Bund, building and terrain   | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 10 cm      |                            |
|  |                            | Bund definition                              | Bund and type of surface for pools         | Bund types\No bund         |

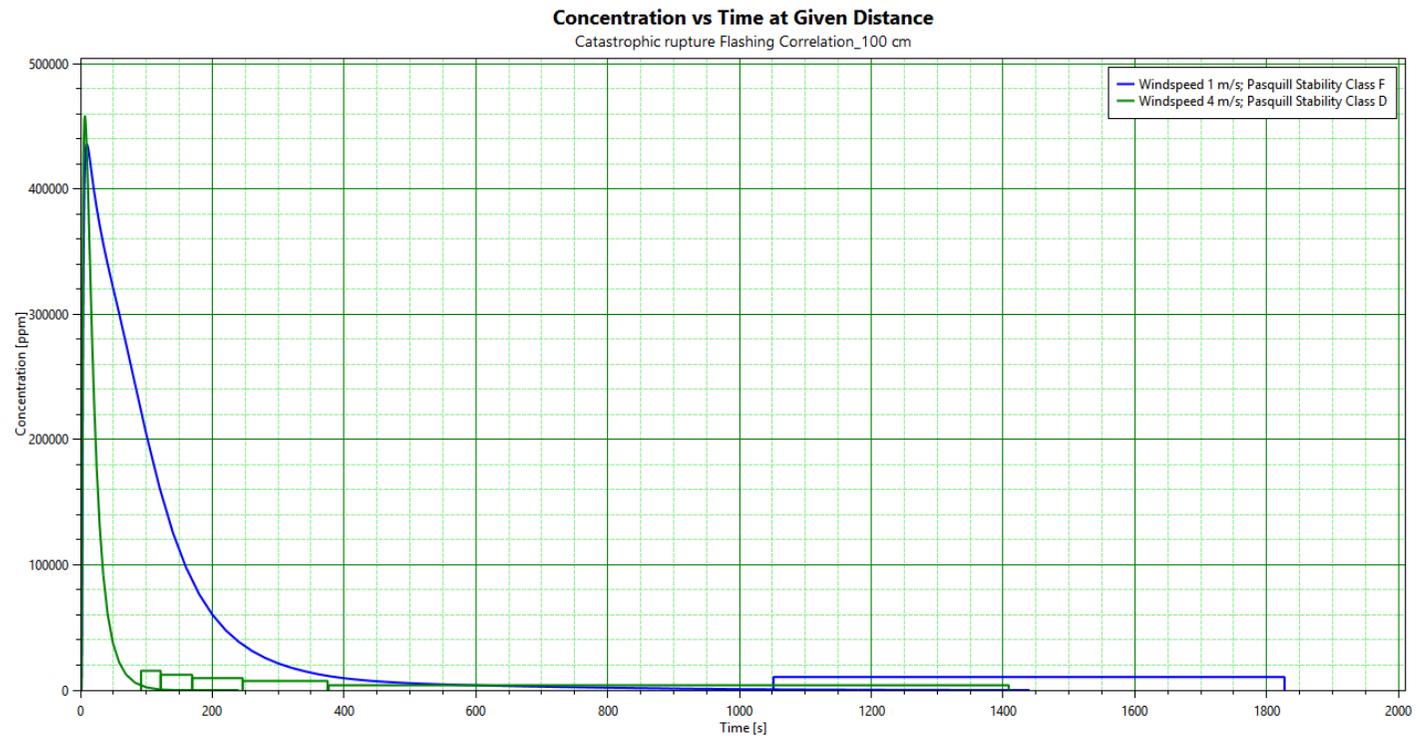
Phast zeigt in der Tabelle nur die globalen Einstellungen an. Parameteränderungen im „study tree“ zeigt Phast in der Tabelle nicht an. Im „study tree“ wurde der Parameter „Droplet break-up mechanism – instantaneous“ auf „Use flashing correlation“ geschaltet.

## H 2.2 Berechnung mit Surface Roughness 1 m (mit Windgeschwindigkeiten 1 und 4 m/s und Pasquill-Klassen D und F)

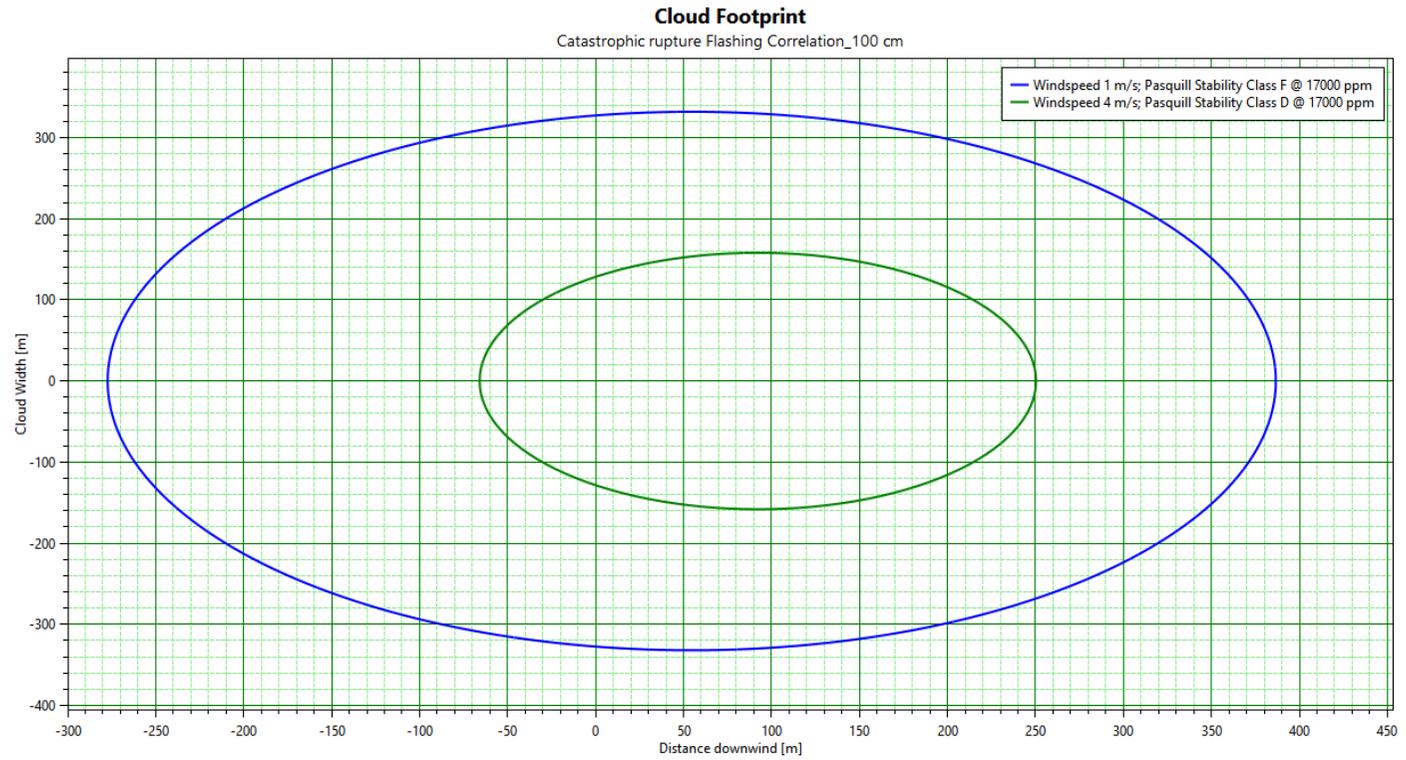
|  |   |   |
|--|---|---|
| Audit Number   | 4495  | ✕ |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                 |   |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                     |   |
| Material   | PROPANE   |   |
| Reference  | PROPANE   |   |
| Program  | Phast 7.21  |   |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |   |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 200.088 s   |   |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 41.1484 s   |   |
| Weather  | Multiple Weather                                    |   |
| Workspace  | LPG_Release_mit Pool                                |   |



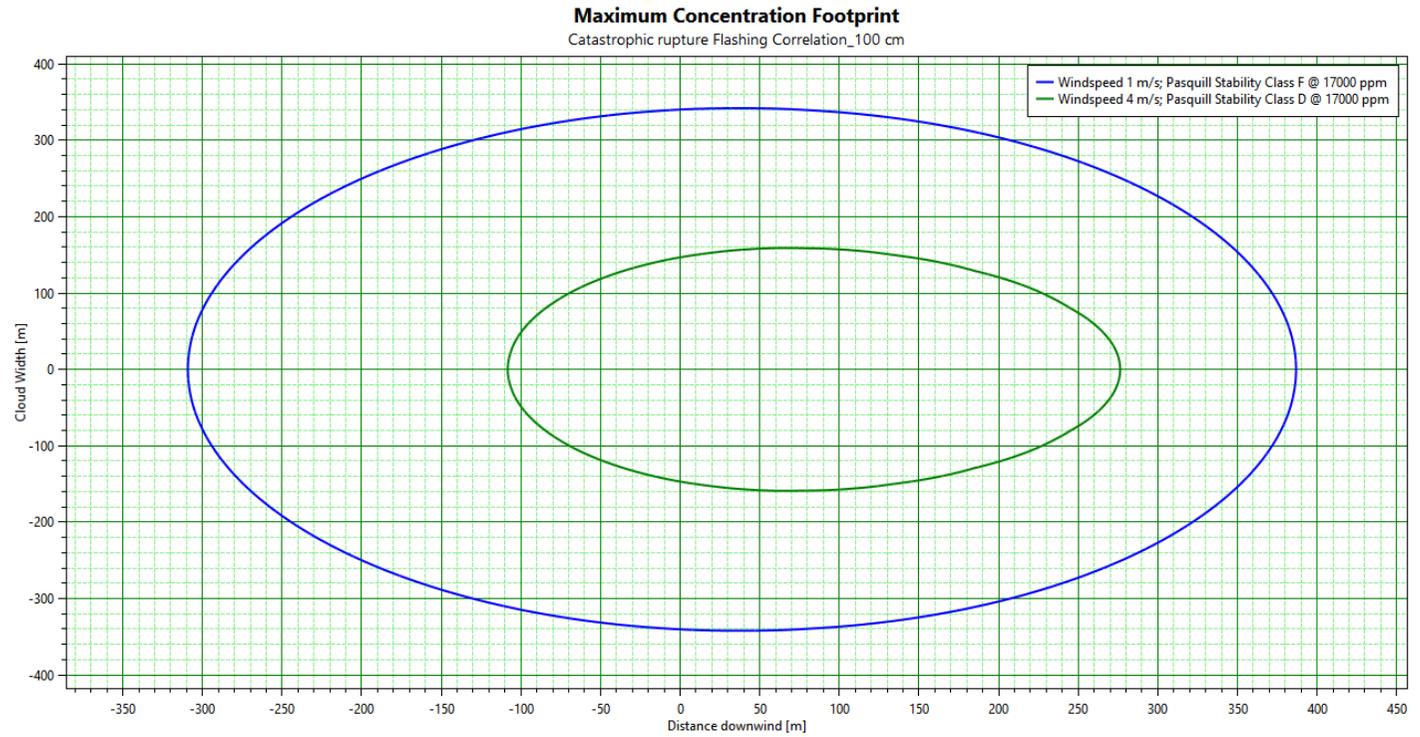
|                    |   |
|--------------------|---|
| Audit Number       | 4492  |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                 |
| Downwind Distance  | 43.5474 m   |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                     |
| Height of Interest | 0 m   |
| Material           | PROPANE   |
| Reference          | PROPANE   |
| Offset Distance    | 0 m   |
| Program            | Phast 7.21  |
| Reference Time     | ERPG (3600 s)                                       |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |
| Weather            | Multiple Weather                                    |
| Workspace          | LPG_Release_mit Pool                                |



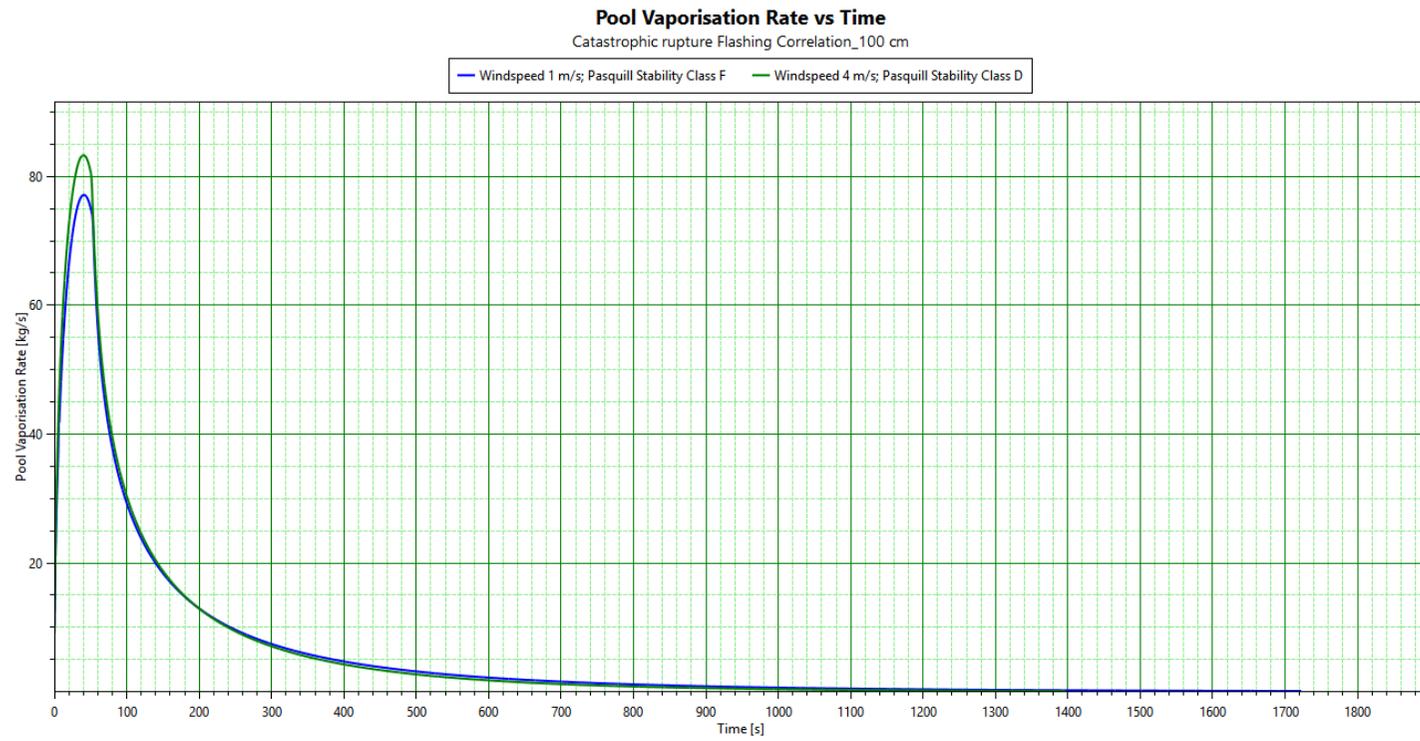
|  |   |   |
|--|---|---|
| Audit Number   | 4495  | * |
| Averaging time   | Flammable (18.75 s)                                 |   |
| Equipment  | Bahnkesselwagen                                     |   |
| Height of Interest   | 0 m   |   |
| Material   | PROPANE   |   |
| Reference  | PROPANE   |   |
| Program  | Phast 7.21  |   |
| Scenario   | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |   |
| Time<br>(Windspeed 1 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class F) | 200.088 s   |   |
| Time<br>(Windspeed 4 m/<br>s; Pasquill<br>Stability Class D) | 41.1484 s   |   |
| Weather  | Multiple Weather                                    |   |
| Workspace  | LPG_Release_mit Pool                                |   |



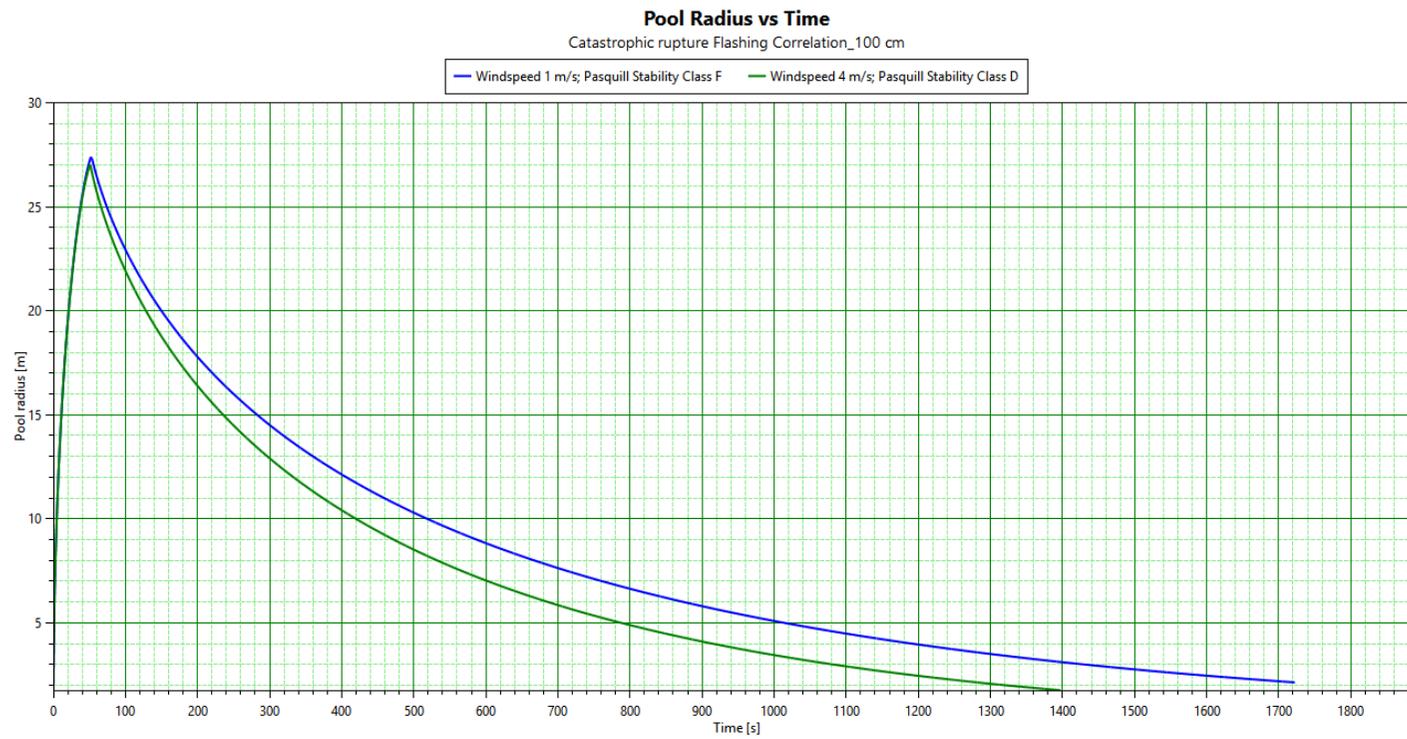
|                    |   |
|--------------------|---|
| Audit Number       | 4492  |
| Averaging time     | Flammable (18.75 s)                                 |
| Equipment          | Bahnkesselwagen                                     |
| Height of Interest | 0 m   |
| Material           | PROPANE   |
| Reference          | PROPANE   |
| Program            | Phast 7.21  |
| Scenario           | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |
| Weather            | Multiple Weather                                    |
| Workspace          | LPG_Release_mit Pool                                |



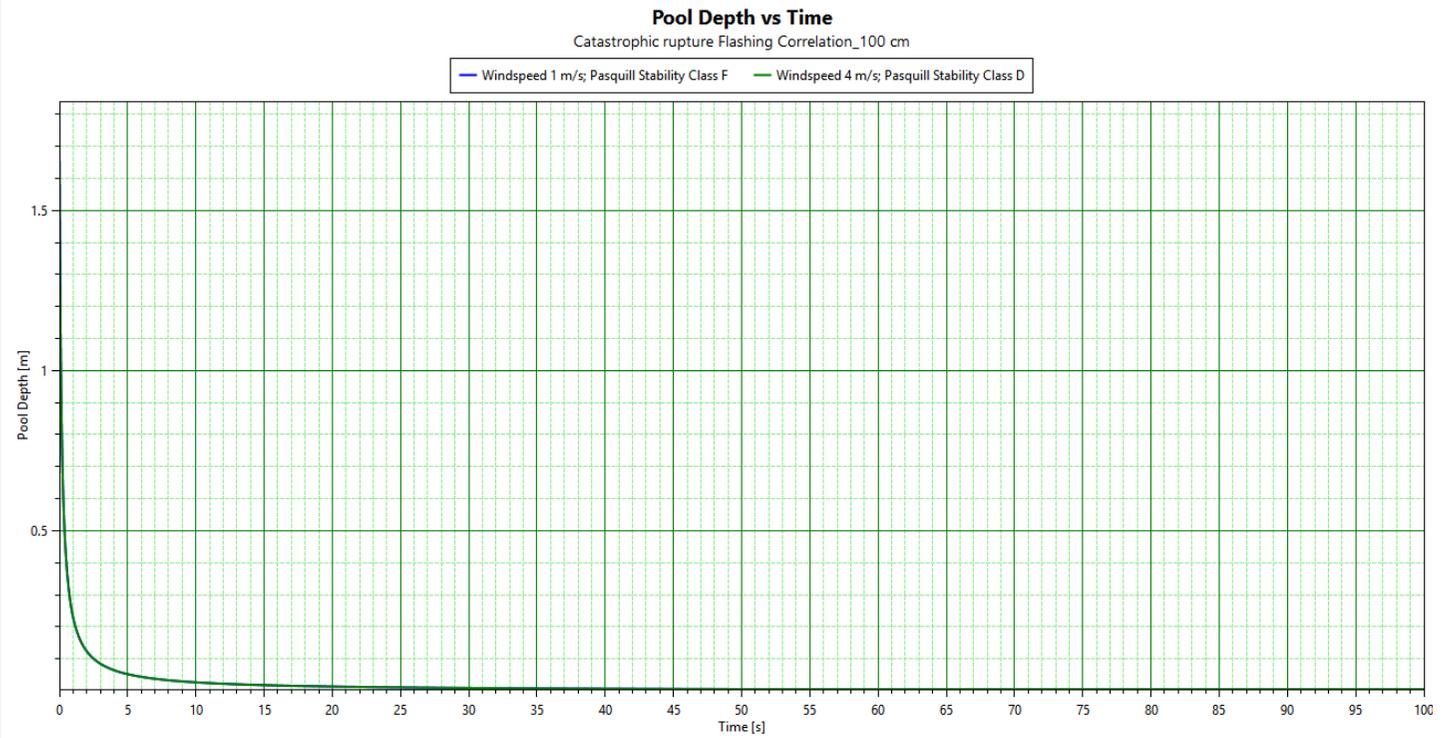
|              |   |   |
|--------------|---|---|
| Audit Number | 4492  | ✕ |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                     |   |
| Material     | PROPANE   |   |
| Program      | Phast 7.21  |   |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |   |
| Workspace    | LPG_Release_mit Pool                                |   |



|              |   |
|--------------|---|
| Audit Number | 4492  |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                     |
| Material     | PROPANE   |
| Program      | Phast 7.21  |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |
| Workspace    | LPG_Release_mit Pool                                |



|              |   |
|--------------|---|
| Audit Number | 4492  |
| Equipment    | Bahnkesselwagen                                     |
| Material     | PROPANE   |
| Program      | Phast 7.21  |
| Scenario     | Catastrophic rupture<br>Flashing Correlation_100 cm |
| Workspace    | LPG_Release_mit Pool                                |

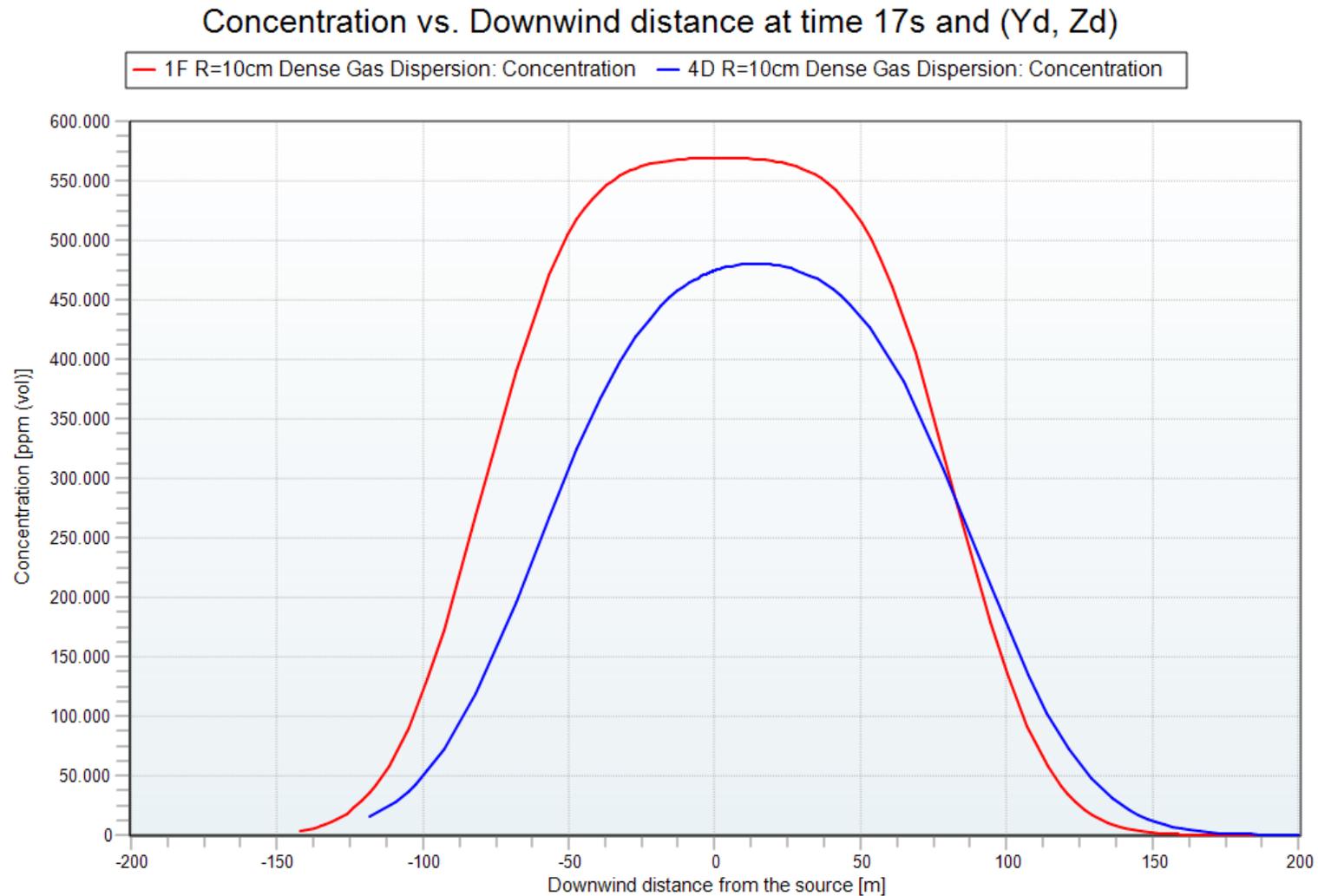


| <b>Input Report</b>                                     |                            |  |                                     |              |
|---|----------------------------|--|-------------------------------------|--------------|
| <b>Workspace: LPG_Release_mit Pool</b>                  |                            |  |                                     |              |
| <b>Flashing Correlation_100 cm</b>                      |                            |  |                                     |              |
| <b>Study</b>  |                            |  |                                     |              |
| <b>LPG_Release_mit Pool</b>                             |                            |  |                                     |              |
| <b>Tab</b>  | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                        | <b>Units</b> |
| Context of calculations                                 | Selection of context       | Weathers to use for this study               | Weather folder                      |              |
|   |                            | Parameters to use for this study             | Parameter set                       |              |
| Bund, building and terrain                              | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 1 m |              |
|   | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                  |              |
| Dispersion  | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                       | m            |
| <b>Bahnkesselwagen</b>                                  |                            |  |                                     |              |
| <b>Pressure vessel</b>                                  |                            |  |                                     |              |
| <b>LPG_Release_mit Pool\Flashing Correlation_100 cm</b> |                            |  |                                     |              |
| <b>Tab</b>  | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                        | <b>Units</b> |
| Material  | Material                   | Material                                     | PROPANE                             |              |
|   |                            | Specify volume inventory?                    | No                                  |              |
|   |                            | Mass inventory                               |                                     | 42000 kg     |
|   |                            | Volume inventory                             |                                     | 82.9022 m3   |
|   |                            | Material to track                            | PROPANE                             |              |
|   | Phase                      | Specified condition                          | Pressure/temperature                |              |
|   |                            | Temperature                                  |                                     | 15 degC      |
|   |                            | Pressure (gauge)                             |                                     | 25 bar       |
|   |                            | Fluid state                                  | Liquid                              |              |
|   |                            | Liquid mole fraction                         |                                     | 1 fraction   |
|   |                            | Phase to be released                         | Liquid                              |              |
| Scenario  | Pipe dimensions            | Pipe length                                  |                                     | m            |
|   | Release location           | Elevation                                    |                                     | 1 m          |
|   |                            | Tank head                                    |                                     | 0 m          |
|   |                            | Release height from vessel bottom            |                                     | m            |
|   | Direction                  | Outdoor release direction                    | Horizontal                          |              |
| Discharge parameters                                    | Model settings             | Atmospheric expansion method                 | Closest to initial conditions       |              |
|   |                            | Is flashing allowed to the orifice?          | No flashing in the orifice          |              |
|   | Droplet break-up mechanism | Droplet break-up mechanism - instantaneous   | Use mechanical correlation          |              |
|   |                            | Droplet break-up mechanism - continuous      | Do not force correlation            |              |
| Dispersion  | Dispersion scope           | Concentration of interest                    |                                     | 17000 ppm    |
|   |                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                           |              |
|   |                            | Specify user-defined averaging time          | No                                  |              |
|   |                            | User defined averaging time                  |                                     | s            |
|   | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                       | m            |
|   | Averaging time for reports | ERPG [1 hr]                                  | No                                  |              |
|   |                            | IDLH [30 mins]                               | No                                  |              |
|   |                            | STEL [15 mins]                               | No                                  |              |
| Bund, building and terrain                              | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 1 m |              |
|   | Bund definition            | Bund and type of surface for pools           | Bund types\No bund                  |              |

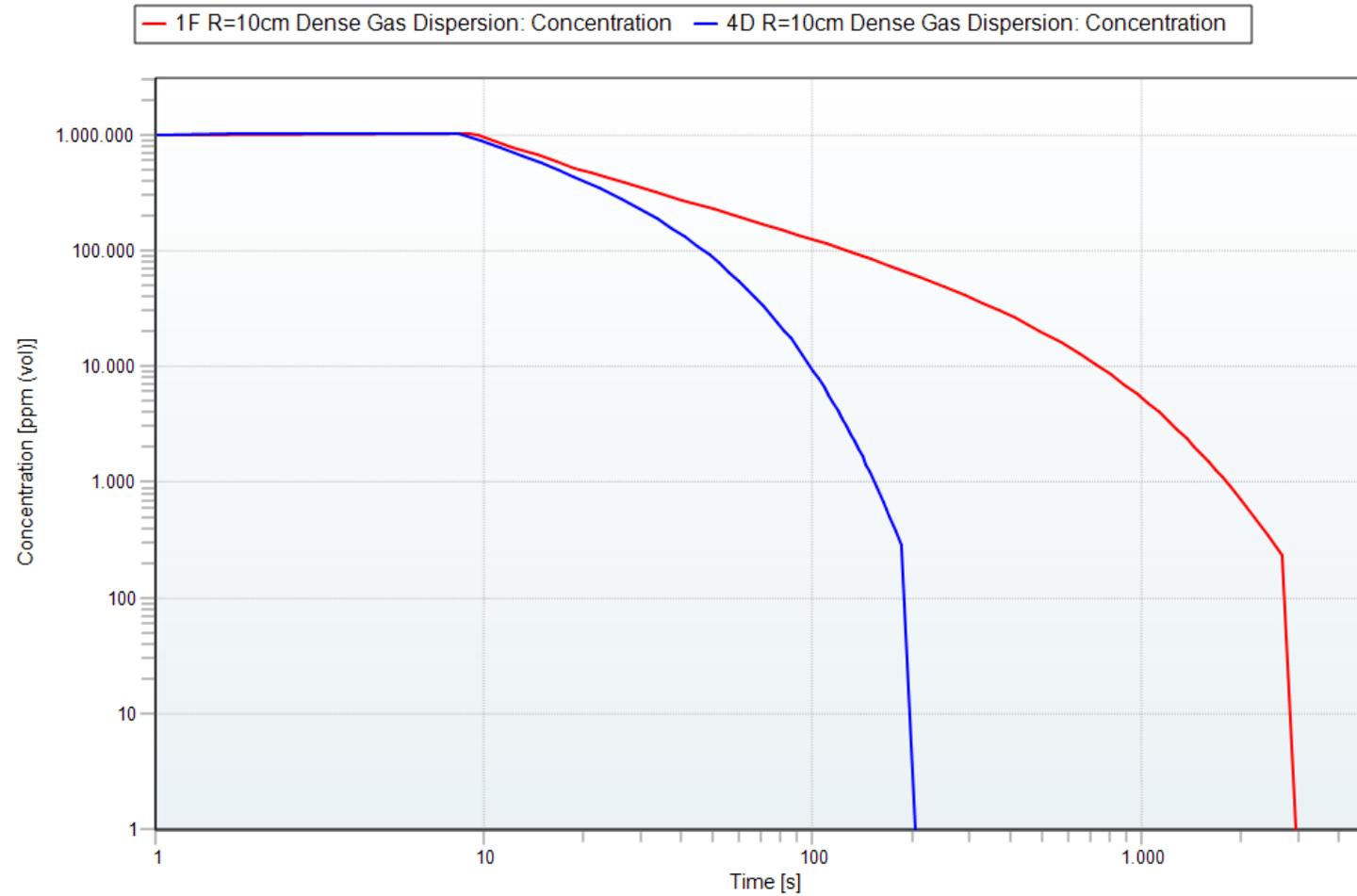
| <b>Catastrophic rupture Flashing Correlation_100 cm</b>                 |                            |  |                                     |              |
|---|----------------------------|--|-------------------------------------|--------------|
| <b>Catastrophic rupture</b>   |                            |  |                                     |              |
| <b>LPG_Release_mit Pool\Flashing Correlation_100 cm\Bahnkesselwagen</b> |                            |  |                                     |              |
| <b>Tab</b>  | <b>Group</b>               | <b>Field</b>                                 | <b>Value</b>                        | <b>Units</b> |
| Scenario  | Release location           | Elevation                                    |                                     | 1 m          |
|   |                            | Tank head                                    |                                     | 0 m          |
| Material  | Material                   | Material characteristics                     | Flammable only                      |              |
|   |                            | Material to track                            | PROPANE                             |              |
| Discharge parameters  | Phase                      | Phase to be released                         | Liquid                              |              |
|   |                            | Droplet break-up mechanism                   | Use mechanical correlation          |              |
| Dispersion  | Dispersion scope           | Concentration of interest                    |                                     | 17000 ppm    |
|   |                            | Averaging time for concentration of interest | Flammable                           |              |
|   |                            | Specify user-defined averaging time          | No                                  |              |
|   |                            | User defined averaging time                  |                                     | s            |
|   | Distances of interest      | Distances of interest                        | 10; 100; 1000                       | m            |
|   | Averaging time for reports | ERPG [1 hr]                                  | No                                  |              |
|   |                            | IDLH [30 mins]                               | No                                  |              |
|   |                            | STEL [15 mins]                               | No                                  |              |
| Bund, building and terrain  | Terrain definition         | Type of terrain for dispersion turbulence    | Terrain types\Surface Roughness 1 m |              |
|   |                            | Bund definition                              | Bund types\No bund                  |              |

### H 3. Resultate Effects (Berechnet durch BAV)

#### H 3.1 Berechnung mit Surface Roughness 10 cm (mit Windgeschwindigkeiten 1.5 und 4 m/s und Pasquill-Klassen D und F)



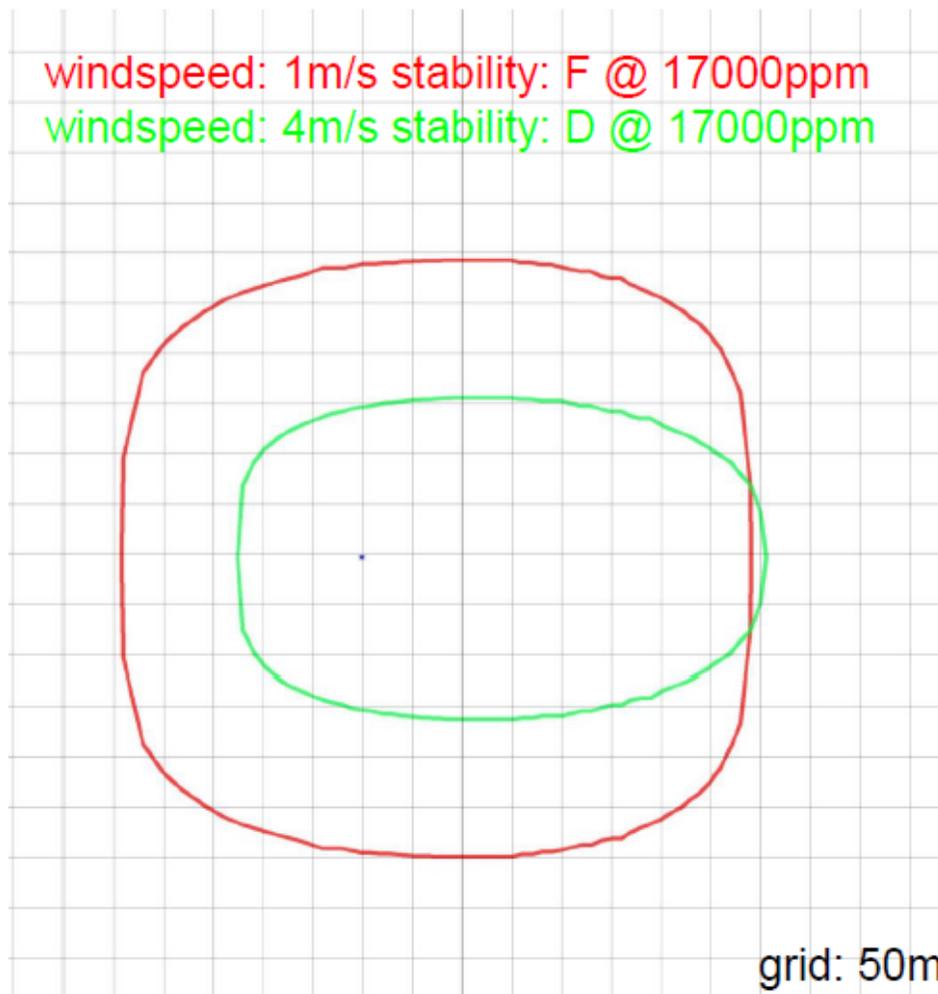
### Concentration vs. Time at (10m, 0m, 0m)



## Maximum Concentration Footprint surface roughness 10cm

windspeed: 1m/s stability: F @ 17000ppm

windspeed: 4m/s stability: D @ 17000ppm



Comparison Set report

Seite 1 von 1

## Comparison Set

### Model: Dense Gas Dispersion: Concentration

version: v2017.07.10898 (18.07.2017)

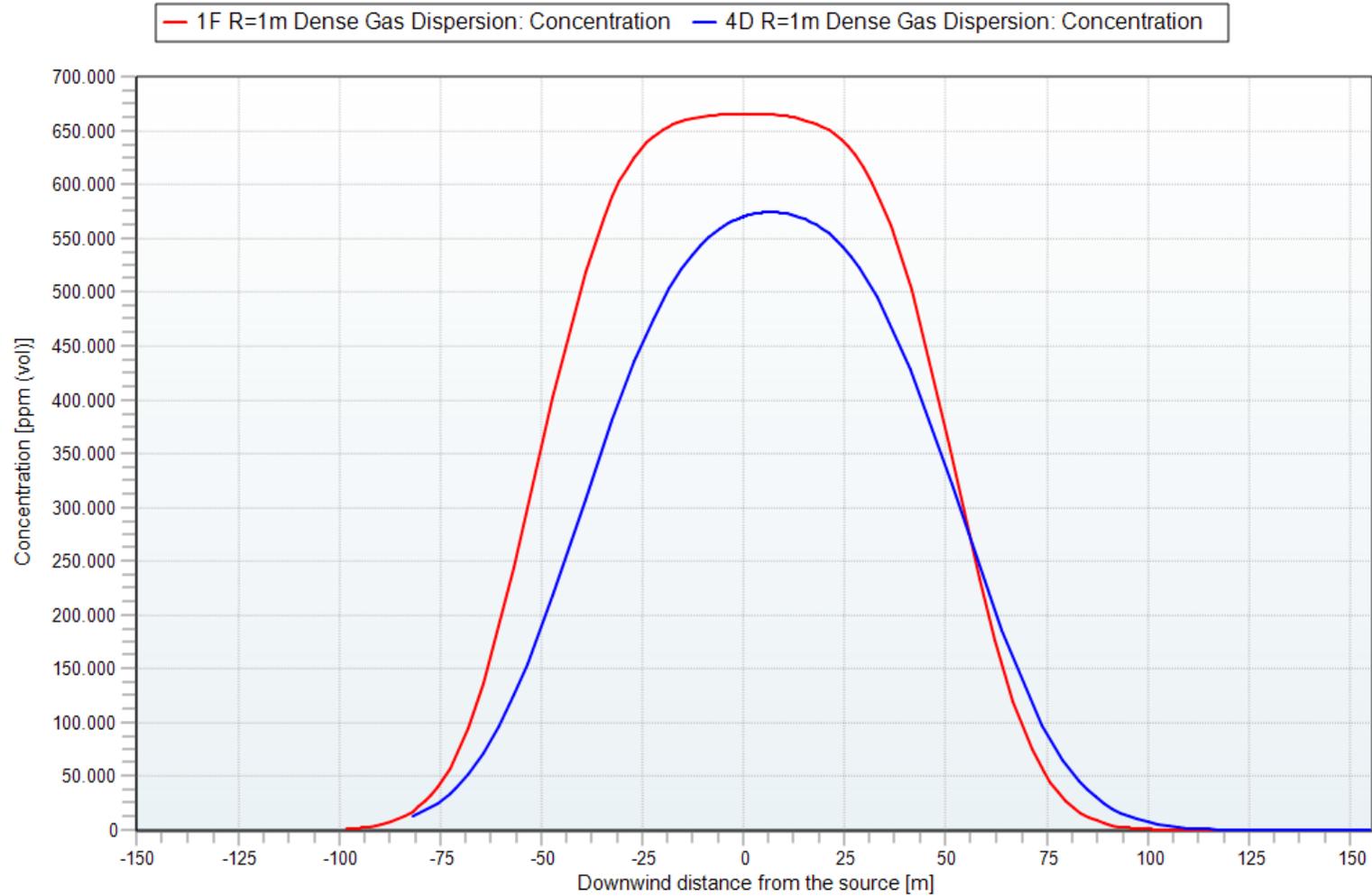
Reference: Yellow Book 3rd edition 1997 chapter 4; Ermak, D.L. User manual for SLAB Lawrence Livermore National Laboratory, June 1990

#### Parameters

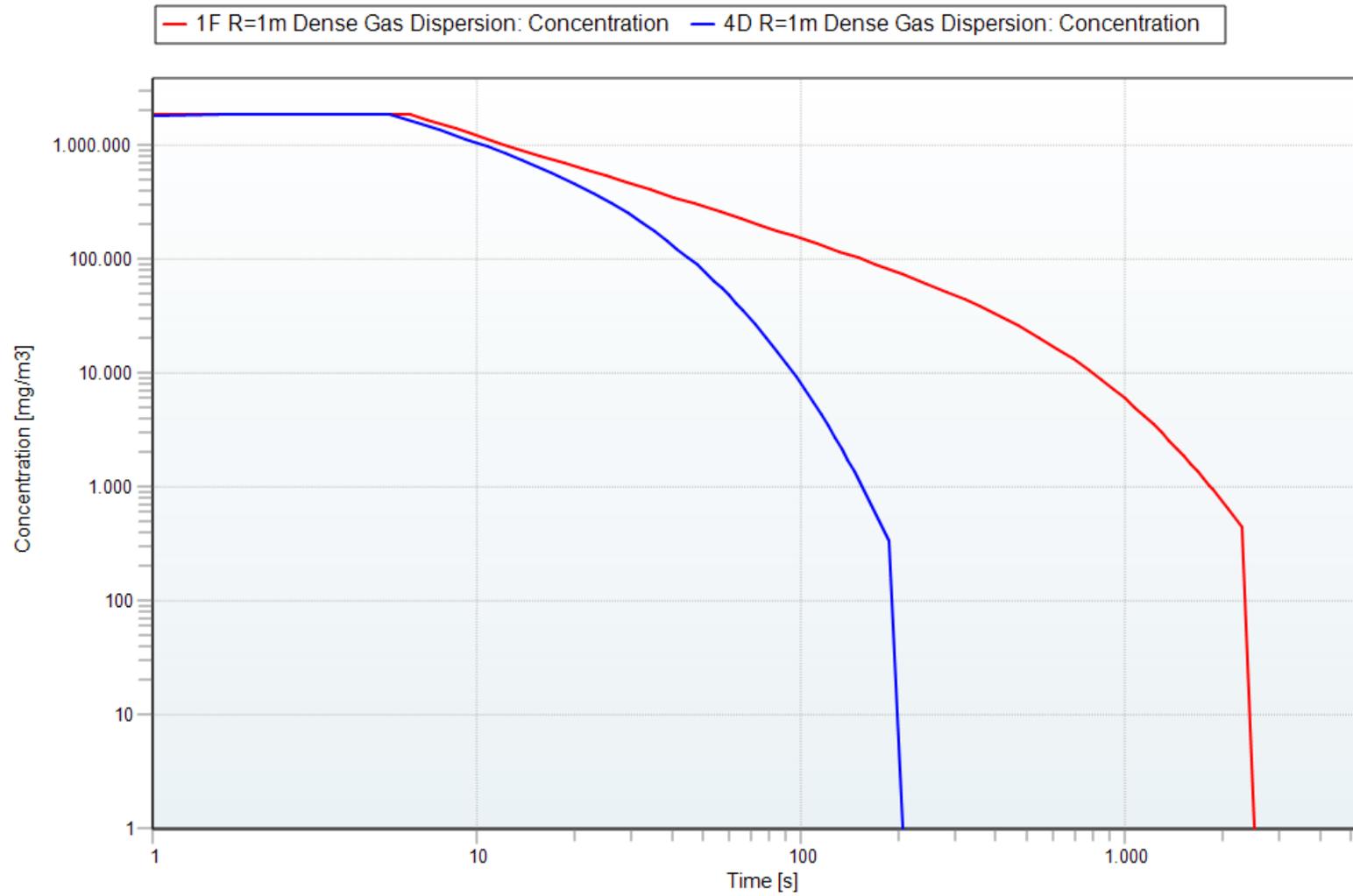
|  | 1F R=0,1m<br>Dense Gas<br>Dispersion:<br>Concentration       | 4D R=0,1m<br>Dense Gas<br>Dispersion:<br>Concentration       |
|--|--|--|
| <b>Inputs</b>  |  |  |
| Chemical name  | PROPANE (DIPPR)  | PROPANE (DIPPR)  |
| Type of heavy gas release                              | Instantaneous  | Instantaneous  |
| Total mass released (kg)                               | 42000  | 42000  |
| Mass flow rate of the source (kg/s)                    |  |  |
| Duration of the release (s)                            |  |  |
| Initial liquid mass fraction (-)                       | 0,71972  | 0,71972  |
| Fixed pool surface (m <sup>2</sup> )                   |  |  |
| Diameter of expanded jet (m)                           |  |  |
| Temperature after release (°C)                         | -42,25   | -42,25   |
| Height of release (Z-coordinate) (m)                   |  |  |
| Offset X direction (distance) start dispersion (m)     |  |  |
| Offset Z direction (height) start dispersion (m)       |  |  |
| Ambient temperature (°C)                               | 15   | 15   |
| Ambient pressure (bar)                                 | 1,0151   | 1,0151   |
| Ambient relative humidity (%)                          | 70   | 70   |
| Meteorological data                                    | Pasquill   | Pasquill   |
| Pasquill stability class                               | F (Very Stable)  | D (Neutral)  |
| Wind speed at 10 m height (m/s)                        | 1  | 4  |
| Inverse Monin-Obukhov length (1/L) (1/m)               |  |  |
|  | Low crops;<br>occasional<br>large<br>obstacles, x/h<br>> 20. | Low crops;<br>occasional<br>large<br>obstacles, x/h<br>> 20. |
| Roughness length description                           | 17,231   | 17,231   |
| Time t after start release (s)                         |  |  |
| Concentration averaging time (s)                       |  |  |
| Reporting distance (Xd) (m)                            | 10   | 10   |
| Distance perpendicular to wind direction (Yd) (m)      | 0  | 0  |
| Height (Zd) (m)  | 0  | 0  |
| Predefined concentration                               | User defined   | User defined   |
| Threshold concentration (ppm (vol))                    | 17000  | 17000  |
| Contour plot accuracy (%)                              | 1  | 1  |
| Predefined wind direction                              | User defined   | User defined   |
| Wind comes from (North = 0 degrees) (deg)              | 270  | 270  |
| Use dynamic concentration presentation                 | No   | No   |
| Resolution of the time consuming graphs                | High   | High   |
| <b>Results</b>   |  |  |
| Concentration at (Xd, Yd, Zd, t) (mg/m <sup>3</sup> )  | 1,0431E06  | 8,8009E05  |
| Maximum concentration at (Yd, Zd) (mg/m <sup>3</sup> ) | 1,8649E06  | 1,8649E06  |
| ...at distance (m)                                     | 35,046   | 31,899   |
| Maximum distance to User defined concentration (m)     | 390,85   | 405,81   |
| Width of User defined outer contour (m)                | 592,03   | 318,01   |
| Inverse Monin-Obukhov length (1/L) used (1/m)          | 0,057143   | 0  |

### H 3.2 Berechnung mit Surface Roughness 1 m (mit Windgeschwindigkeiten 1.5 und 4 m/s und Pasquill-Klassen D und F)

Concentration vs. Downwind distance at time 10s and (Yd, Zd)



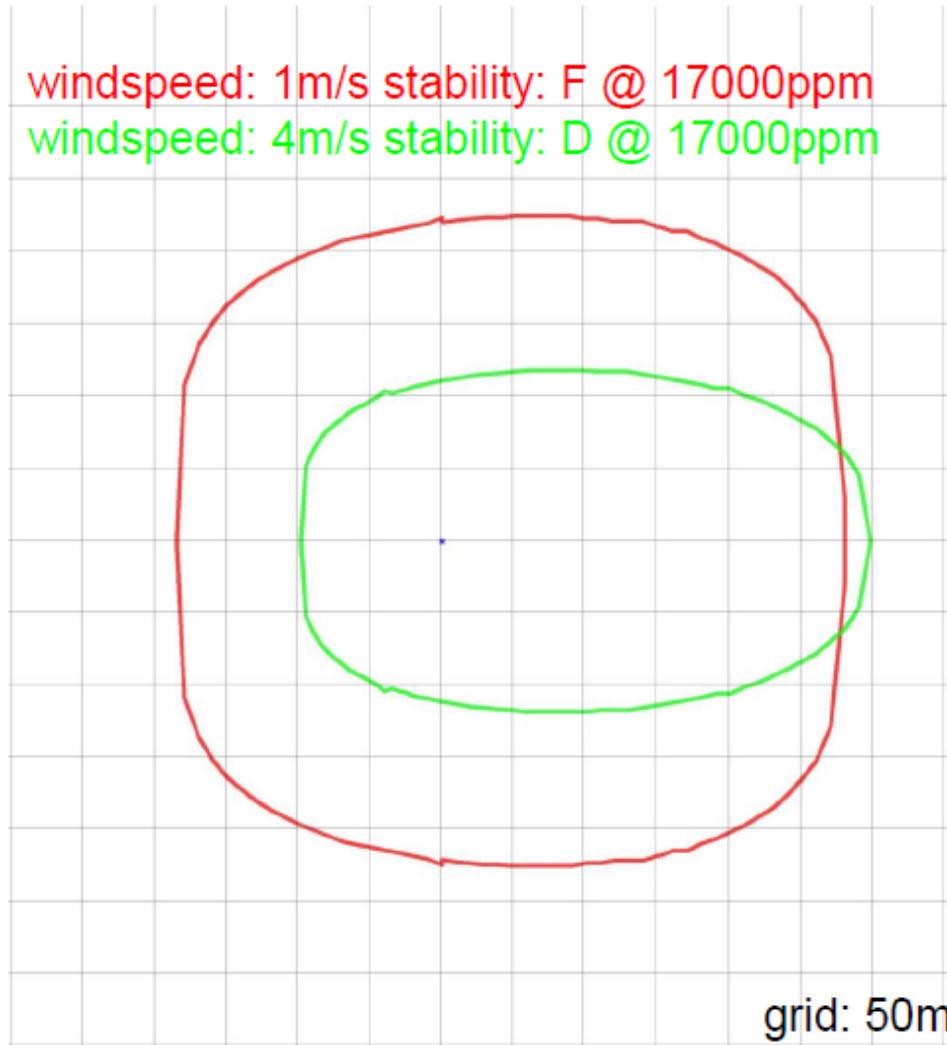
### Concentration vs. Time at (10m, 0m, 0m)



## Maximum Concentration Footprint surface roughness 1m

windspeed: 1m/s stability: F @ 17000ppm

windspeed: 4m/s stability: D @ 17000ppm



## Comparison Set

### Model: Dense Gas Dispersion: Concentration

version: v2017.07.10898 (18.07.2017)  
 Reference: Yellow Book 3rd edition 1997 chapter 4; Ermak, D.L. User manual for SLAB Lawrence Livermore National Laboratory, June 1990

#### Parameters

|  | <b>1F R=1m<br/>Dense Gas<br/>Dispersion:<br/>Concentration</b> | <b>4D R=1m<br/>Dense Gas<br/>Dispersion:<br/>Concentration</b> |
|--|--|--|
| <b>Inputs</b>  |  |  |
| Chemical name  | PROPANE (DIPPR)  | PROPANE (DIPPR)  |
| Type of heavy gas release                              | Instantaneous  | Instantaneous  |
| Total mass released (kg)                               | 42000  | 42000  |
| Mass flow rate of the source (kg/s)                    |  |  |
| Duration of the release (s)                            |  |  |
| Initial liquid mass fraction (-)                       | 0,71972  | 0,71972  |
| Fixed pool surface (m <sup>2</sup> )                   |  |  |
| Diameter of expanded jet (m)                           |  |  |
| Temperature after release (°C)                         | -42,25   | -42,25   |
| Height of release (Z-coordinate) (m)                   |  |  |
| Offset X direction (distance) start dispersion (m)     |  |  |
| Offset Z direction (height) start dispersion (m)       |  |  |
| Ambient temperature (°C)                               | 15   | 15   |
| Ambient pressure (bar)                                 | 1,0151   | 1,0151   |
| Ambient relative humidity (%)                          | 70   | 70   |
| Meteorological data                                    | Pasquill   | Pasquill   |
| Pasquill stability class                               | F (Very Stable)  | <b>D (Neutral)</b>   |
| Wind speed at 10 m height (m/s)                        | 1  | <b>4</b>   |
| Inverse Monin-Obukhov length (1/L) (1/m)               |  |  |
|  | Regular large obstacle coverage (suburb or forest).            | Regular large obstacle coverage (suburb or forest).            |
| Roughness length description                           | 10   | 10   |
| Time t after start release (s)                         |  |  |
| Concentration averaging time (s)                       |  |  |
| Reporting distance (Xd) (m)                            | 10   | 10   |
| Distance perpendicular to wind direction (Yd) (m)      | 0  | 0  |
| Height (Zd) (m)  | 0  | 0  |
| Predefined concentration                               | User defined   | User defined   |
| Threshold concentration (ppm (vol))                    | 17000  | 17000  |
| Contour plot accuracy (%)                              | 1  | 1  |
| Predefined wind direction                              | User defined   | User defined   |
| Wind comes from (North = 0 degrees) (deg)              | 270  | 270  |
| Use dynamic concentration presentation                 | No   | No   |
| Resolution of the time consuming graphs                | High   | High   |
| <b>Results</b>   |  |  |
| Concentration at (Xd, Yd, Zd, t) (mg/m <sup>3</sup> )  | 1,217E06   | <b>1,0512E06</b>   |
| Maximum concentration at (Yd, Zd) (mg/m <sup>3</sup> ) | 1,8649E06  | 1,8649E06  |
| ...at distance (m)                                     | 24,47  | <b>21,687</b>  |
| Maximum distance to User defined concentration (m)     | 280,11   | <b>297,72</b>  |
| Width of User defined outer contour (m)                | 449,67   | <b>236,23</b>  |
| Inverse Monin-Obukhov length (1/L) used (1/m)          | 0,0385   | <b>0</b>   |

## **I Grundlagen und Literatur**

AVIV Adviseurs externe veiligheid en risicoanalisten: Achtergronddocument RBM II, Versie 2.0, November 2011

Baker, W. E. (1977). Workbook for predicting pressure wave and fragment effects of exploding propellant tanks and gas storage vessels. Washington, D. C. : NASA Scientific and Technical Information Office

CCPS, 2012, Guidelines for Evaluating Process Plant Buildings for External Explosions and Fires, Wiley, New York.

DNV GL AS: Discharge Scenarios, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: DISC Model, Validation, Aug. 2014

DNV GL AS: Time-Varying Discharge Modelling, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Time-Varying Discharge Modelling, Verification & Validation, Aug. 2014

DNV GL AS: Atmospheric Expansion, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Droplet Size, Theory & Validation, Aug. 2014

DNV GL AS: Unified Dispersion Model, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Unified Dispersion Model, Validation, Aug. 2014

DNV GL AS: Unified Dispersion Model, Technical Reference, Aug. 2014

DNV GL AS: Pool Vaporisation, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Pool Vaporisation, Verification, Aug. 2014

DNV GL AS: Pool Vaporisation, Validation, Aug. 2014

DNV GL AS: Building Wake Dispersion, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: BLEV (Fireball), Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Jet Fire, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Pool Fire Model, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: BLEVE Blast, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Obstructed Region Explosion Model, Theory, Aug. 2014

DNV GL AS: Obstructed Region Explosion Model, Validation, Aug. 2014

Dodge, F.T. et al. (1983) : Revision and experimental verification of the hazard assessment computer system models for spreading, movement, dissolution and dissipation of insoluble chemicals spilled onto water, US Coast Guard Report

Gexcon AS: FLACS v10.5 User's Manual, 27.5.2016

Gant, Simon; Hoyes, James; Health and Safety Laboratory: Review of FLACS version 9.0, Dispersion modelling capabilities, Health and Safety Executive HSE Research Report RR779, 2010

Hockey, S. M. and Rew, P. J. (1996): Review of Human Response to Thermal Radiation, HSE Contract Research Report No. 97/1996. Health and Safety Executive HSE.

- Ichard et al. (2009): Modelling of flashing releases around buildings, The 89<sup>th</sup> American Meteorological Society Annual Meeting, Phoenix AZ USA  
[https://ams.confex.com/ams/89annual/techprogram/paper\\_147092.htm](https://ams.confex.com/ams/89annual/techprogram/paper_147092.htm)
- Ichard, Mathieu (2012): Numerical computations of pressurized liquefied gas releases into the atmosphere, DiSSERTATION Universität Bergen, Norwegen
- IOGP International Association of Oil & Gas Producers, OGP Risk Assessment Data Directory, Report No. 434-6, Ignition probabilities, March 2010
- IOGP International Association of Oil & Gas Producers, OGP Risk Assessment Data Directory, Report No. 434-7, Consequence modelling, March 2010
- IOGP International Association of Oil & Gas Producers, OGP Risk Assessment Data Directory, Report No. 434-9, Land transport accident statistics, March 2010
- Leitl, B. et al. (2016): Local-Scale Hazmat Dispersion Modelling for First Responders Based on High-Resolution Computational Fluid Dynamics – an Overview of CT-Analyst Hamburg, Chemical Engineering Transactions Vol. 48
- Rahmenbericht Flüssiggas-Tankanlagen, Arbeitsgruppe Flüssiggas-Tankanlagen und Basler&Hofmann, 1. Ausgabe 11.12.1992
- Rew, P. J. (1997): LD50 equivalent for the effect of thermal radiation on humans. Contract Research Report 129/1997, Health and Safety Executive HSE. UK.
- Rew, P. J., Hulbert W. G. (1996): Development of pool fires thermal radiation model. HSE Contract Research Report No. 96/1996, Health and Safety Executive HSE. UK; W S Atkins Safety and Reliability
- RIVM (Rijkswaterstaat, Ministerie van Infrastructuur en Milieu), Niederlande: Handleiding Risicoanalyse Transport (HART), 1.4.2015, versie 1.1
- RIVM (Rijkswaterstaat, Ministerie van Infrastructuur en Milieu), Niederlande, 2014: Handleiding Risicoanalyse Transport (HART) Bijlagen, 17.6.2014, versie 1.0
- Salvesen, H.-C. (1995). Modelling of jet release of liquefied gas under high pressure. Report Christian Michelsen Research, CMR-95-F20062 (Confidential)
- VROM, Ministerie van Binnenlandse Zaken en Koninkrijksrelaties, SZW, Ministerie van Verkeer en Waterstaat (2003): Publicatiereeks Gevaarlijke Stoffen 1: Deel 1A: Effecten van brand op personen, "green book". The Hague.
- U.S. DOT PHMSA (U.S. DEPARTMENT OF TRANSPORTATION PIPELINE AND HAZARDOUS MATERIALS SAFETY ADMINISTRATION) FINAL DECISION GexCon US Inc. petition for approval of FLACS Version 9.1 Release 2 under 49 C.F.R §§ 190.9 and 193.2059(a) PHMSA Docket No. 2011-0101, Washington DC, 7.10.2011
- COVO study, Risk Analyses of six potentially hazardous industrial objects in the Rijnmond area, a pilot study, D. Reidel Publishing Company, 1982
- C.A. Cox, R. J. Carpenter, Further development of a dense vapour cloud model for hazard analysis, in: S. Hartwig (ed), Heavy gas and risk assessment, 1980

M.C. Emerson: Dense cloud behaviour in momentum jet dispersion, IMA Conference Mathematics in major accident risk assessment, 1986

AVIV: De onzekerheid van effectberekeningen in risicostudies. 1986

Lees F. P., 1995. Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification, Assessment and Control, 2. Rev. ed., ISBN 0 7506 1547 8, Butterworth\_Heinemann, Linacre House, Jordan Hill, Oxford

OX2 8DP, 16/179-182.

VROM, LPG Integraal, Rapport 1225, Schadebepaling transport van LPG over de binnenwateren, Apeldoorn mei 1983.

Ministerie VROM, BZK, SZW en V&W, Methods for the calculation of physical effects: Due to releases of hazardous materials (liquids and gases) (Yellow Book), Publicatiereeks gevaarlijke stoffen 2 (PGS 2), third edition, Den Haag, 2005.

P.A.M. Uijt de Haag, L. Gooijer, H.I. Beerens, A.A.C. van Vliet, W.J.N. Langenbach, P.J.M.G. Frijns, Handleiding Risicoberekeningen Bevi (HRB), versie 3.2, RIVM Centrum voor Externe Veiligheid, Bilthoven, 1 juli 2009.

SAVE, Rekenprotocol Vervoer Gevaarlijke Stoffen per Spoor. Concept Rapport 060333-Q53, april 2006.

SAVE, Rekenprotocol Vervoer Gevaarlijke Stoffen per Spoor. Concept Rapport 060333-Q53, april 2006

Ingenieurs/adviesbureau SAVE, Basisfaalfrequenties voor het transport van gevaarlijke stof over de vrije baan, rapport 95675-556, Apeldoorn, mei 1995

Schweizerische Erdgaswirtschaft und suisseplan Ingenieure AG, 2010: Sicherheit von Erdgashochdruckanlagen, Stationen, Erläuterungen zum „Rahmenbericht zur standardisierten Ausmasseinschätzung und Risikoermittlung“, 1.12.2010

Schweizerische Erdgaswirtschaft und suisseplan Ingenieure AG, 2010: Sicherheit von Erdgashochdruckanlagen, Letalitäten bei Brandszenarien, Erläuterungen zum „Rahmenbericht zur standardisierten Ausmasseinschätzung und Risikoermittlung“, 1.12.2010

Mannan S., "Lees' Loss Prevention in the Process Industries" (3rd edition). Elsevier. Oxford (UK), 2005.

W.A. Atherton. An experimental investigation of bund wall overtopping and dynamic pressures on the bund wall following catastrophic failure of a storage vessel. HSE Research Report 333, 2005.

SAPHEDRA. Gap Analysis for Emerging Risk Issues, Bologna 2016

SAPHEDRA Identification of existing tools for the modelling of hazardous phenomena, Report D1, TNO, 10.12.2015

SAPHEDRA Identification of existing tools for the modelling of hazardous phenomena, Report D1, full spreadsheet, TNO, Stand Nov. 2015

Hulsbosh-Dam C., Spruijt M., Necci A., Cozzani V., 2012: An approach to carbon dioxide particle distribution in accidental releases, *Chemical Engineering Transactions*, 26, 543-548

Trijssenaar-Buhre I.J.M., Sterkenburg R.P., Wijnant-Timmerman S.I., 2009: An advanced model for spreading and evaporation of accidentally released hazardous liquids on land, Joint ESREL (European Safety and Reliability) and SRA-Europe (Society for Risk Analysis Europe) Conference, 22 September 2008 through 25 September 2008, Valencia.

Martinsen W.E. and Marx J.D., 1999: An improved model for the prediction of radiant heat from fireballs, Presented At 1999 International Conference and Workshop on Modeling Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials San Francisco, California September 28 - October 1, 1999

van den Berg A.C., Blast Charts for Explosive Evaporation of Superheated Liquids, *Process Safety Progress* (2008) Volume 27, Issue 3