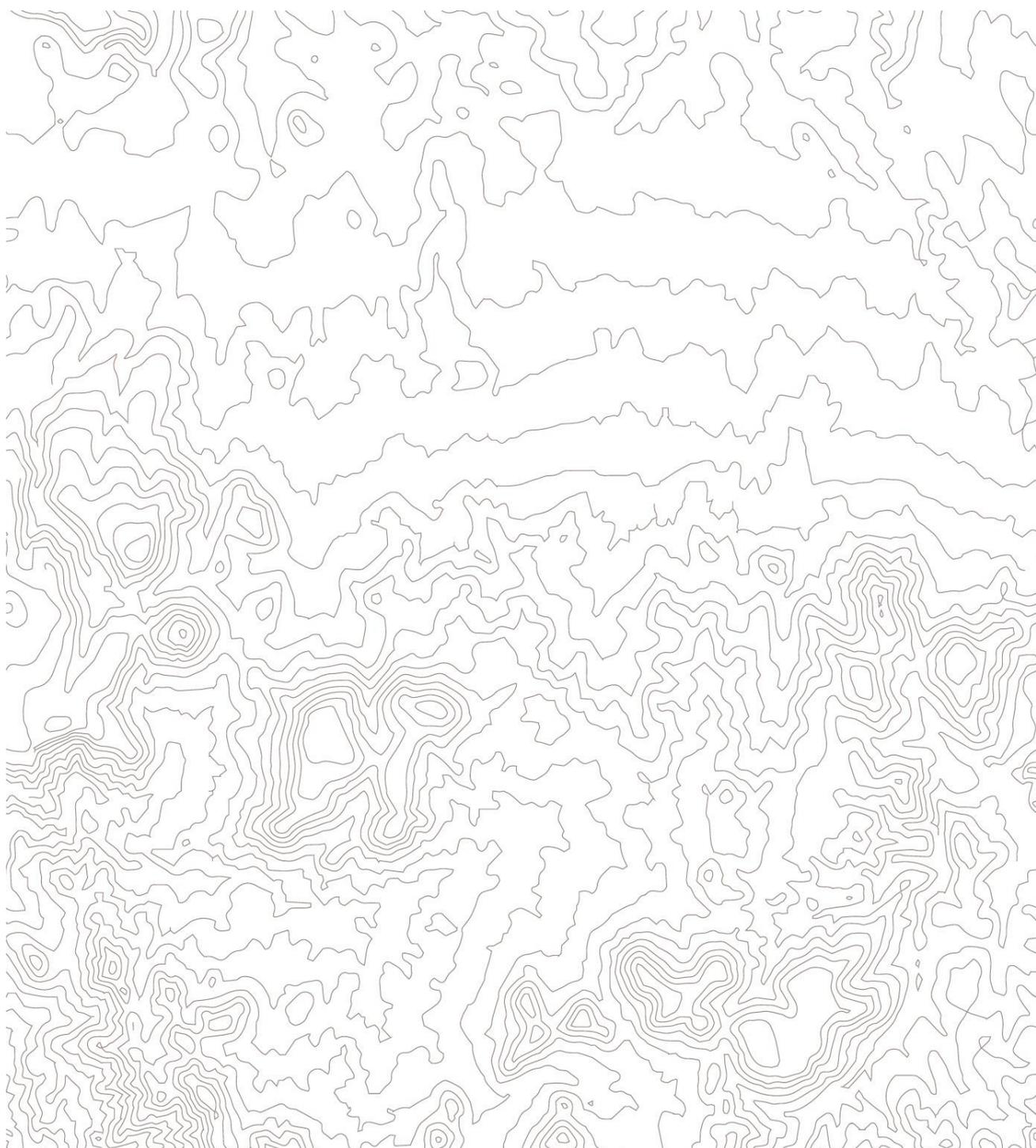


Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von toxischen schweren Gasen

26. April 2018



Projektteam

Vinicius Ambrogi
Peter Locher
Lukas Vonbach

EBP Schweiz AG
Zollikerstrasse 65
8702 Zollikon
Schweiz
Telefon +41 44 395 11 11
info@ebp.ch
www.ebp.ch

Druck: 26. April 2018
20180426_Bericht_FAW_Chlor.docx

Zusammenfassung

Gefährliche Güter und insbesondere Chlor werden in der Schweiz vorwiegend auf dem Schienenweg transportiert. Die Transportrouten führen teilweise durch dicht besiedelte Regionen. Zur Abschätzung der damit verbundenen Risiken werden derzeit verschiedene Annahmen, Modelle und EDV-Applikationen verwendet. Das vorliegende Projekt hat zum Ziel, basierend auf Unfallereignissen und Literaturangaben den Stand der Technik zur Modellierung der Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von Chlor darzustellen und Empfehlungen zur Anwendung von Annahmen, Modellen und EDV-Applikationen abzugeben.

Unfallgeschehen

In der Schweiz und auch in Europa sind seit den Anfängen des Transports von Chlor auf der Schiene keine Bahnunfälle bekannt, bei denen bedeutende Mengen an Chlor freigesetzt wurden. In den Jahren 1970 bis 2015 sind weltweit 6 Ereignisse mit insgesamt 46 Todesopfern aufgetreten. Dabei sind zwei Ereignisse bezüglich der Zahl der Opfer von besonderer Bedeutung: Das Ereignis von 1981 in Mexiko mit 29 Todesopfern und das Ereignis von 2005 in Graniteville (USA) mit 9 Todesopfern.

Modellierung: Stand der Technik

Freisetzung: Unfallereignisse aus den USA zeigen, dass sich häufig grosse Lecks mit Durchmessern von mehreren Dezimetern bilden, wenn Kesselwagen bei einem Unfall (Entgleisung, Zusammenstoss) aufgerissen werden. Da bei einem gefüllten Kesselwagen der grösste Teil der Kesselwagenwandung in Kontakt mit der flüssigen Phase ist, ist eine Freisetzung als Flüssigkeit (bzw. als 2-Phasen-Gemisch mit einem beträchtlichen Anteil an Tropfen) deutlich wahrscheinlicher als eine reine Gasfreisetzung. Freisetzungen von total ca. 30 – 40 Tonnen mit Raten von ca. 100 – 1'500 kg/s dürften eher die Regel als die Ausnahme sein. Auch wenn die Anzahl der beobachteten Freisetzungen gering ist, so ist doch bei allen drei untersuchten Ereignissen ein Leck > 10 cm aufgetreten. Inwieweit die Unfallereignisse aus den USA auf die Schweiz (bzw. den Raum, indem das RID gültig ist) übertragbar ist, hängt stark von den jeweils gültigen technischen Anforderungen an die verwendeten Kesselwagen ab; entsprechende Abklärungen sind derzeit beim BAV noch im Gange. Hinweise für die Bildung einer grösseren Lache mit flüssigem Chlor gibt es nicht.

Ausbreitung: Angesichts der beträchtlichen Unschärfen und um Aufwand und Komplexität der Modellierung zu beschränken, genügt es, nur diejenigen meteorologischen und Umgebungs-Parameter im Sinne von Szenarien zu variieren, die einen grossen Einfluss auf die Ausbreitung haben. Es sind dies primär die Windgeschwindigkeit und die atmosphärische Stabilität (wobei letztere von ersterer abhängt). Für die Temperatur, die Luftfeuchtigkeit und die Umgebungsrauigkeit genügt die Verwendung von Mittelwerten¹.

Wirkung: Die Verwendung von Probit-Werten zur Ableitung von Letalitätswerten aus einer zeitlichen variablen Konzentration via Dosiswert entspricht dem Stand der Technik und ist in der Anwendung nutzerfreundlich. Es wird die Verwendung der Werte von TNO (in der aktuellen Version von Effects) oder von DNV (dito für

1 Die Annahme eines Temperaturmittelwerts führt bei Situationen mit tiefen Temperaturen zu konservativen Ergebnissen. Tiefe Temperaturen von deutlich unter 0°C treten in der Schweiz nicht oft auf und werden daher als nicht massgebend eingestuft.

Phast) empfohlen. Bei den Letalitäten ist zwingend zu unterscheiden zwischen Freifeldwerten und Werten im Inneren eines Gebäudes.

Modellierung: Einsatz von EDV-Applikationen

Als Modelle, die entsprechend dem jeweiligen Stand des Wissens methodisch weiterentwickelt und bzgl. IT auf einem modernen Stand sind (z. B. Nutzung unter einem modernen Betriebssystem) stehen derzeit nur EFFECTS (derzeit in Version 10.0) und Phast (derzeit in Version 7.2) zur Verfügung. Führt die Annahme von plausiblen Parametern zur Bildung einer Lache, so sollten diese im realistischen Rahmen angepasst werden, so dass nicht eine bedeutende Lachenbildung modelliert wird.

Zur Modellierung der Freisetzung und der Ausbreitung verwenden Phast und EFFECTS unterschiedliche Modelle. Die Berechnung der Freisetzungsraten bzw. -mengen basieren bei beiden EDV-Applikationen auf etablierten physikalischen Modellen; entsprechend vergleichbar sind daher die Ergebnisse. Die Ausbreitungsmodelle unterscheiden sich stärker und verwenden teilweise sehr unterschiedliche Parametrisierungen, insbesondere in Bezug auf die Koeffizienten, welche die Ausbreitung sowie Verdünnung in die x-, y- oder z-Richtung in Abhängigkeit der massgeblichen Parameter wie Windstärke oder atmosphärische Stabilitätsklasse beschreiben. Einzig aufgrund der im Modell berücksichtigten Parameter kann nicht beurteilt werden, wie gut ein Modell die Realität abzubilden vermag. Zentral ist für beide Modelle (Phast von DNV und EFFECTS von TNO) die Validierung anhand von realen Daten resp. realen Ausbreitungsversuchen. Beide Modelle sind derzeit nur ungenügend mit solchen Daten validiert. Das Dense Gas Dispersion Model von TNO wurde mit experimentellen Daten aus Desert Tortoise, Goldfish, Burro, FLADIS und Thorney Island validiert. Es handelt sich hierbei nicht explizit um Ausbreitungen von Chlor. Entsprechende Bestrebungen sind jedoch derzeit für beide Modelle in Umsetzung. Eine Beurteilung, welches der beiden Modelle die Realität besser beschreiben kann, ist deshalb derzeit nicht möglich. Es ist sinnvoll, damit zuzuwarten, bis die Modellvalidierung anhand von Versuchen erfolgt ist und allfällige Anpassungen an den beiden Modellen vorgenommen worden sind.

Summary

In Switzerland, dangerous goods and chlorine in particular are mainly transported by rail. The transport routes lead partly through densely populated areas. Various assumptions, models and IT applications are currently used to estimate the associated risks. The aim of this project is to compile the state of the art in modelling the release, dispersion and effects of chlorine based on past chlorine accidents and literature and to provide recommendations for the use of assumptions, models and IT applications.

Accident occurrence

Since the beginning of the transport of chlorine by rail, there have been no known railway accidents involving significant amounts of chlorine in Switzerland and Europe. Between 1970 and 2015, 6 events occurred worldwide with a total of 46 fatalities. Two events are particularly significant in terms of the number of victims: the events of 1981 in Mexico with 29 fatalities and the event of 2005 in Graniteville (USA) with 9 fatalities.

Modelling: State of the art

Release: Accident experience from the USA shows that large leaks with diameters of several decimetres often form when tank-wagons are ruptured in an accident (disruption, collision). Since for a filled tank-wagon the bulk of its wall is in contact with the liquid phase, release as a liquid (or as a two-phase mixture with a considerable number of droplets) is significantly more likely than a pure gas release. Releases of a total of approx. 30 - 40 tons with rates of approx. 100 - 1,500 kg/s should be the rule rather than the exception. Even if the number of observed releases is low, a leak > 10 cm has nevertheless occurred in all three events investigated. The extent to which the accident experience from the US can be transferred to Switzerland (resp. the area in which the same transport regulations are valid) depends largely on the respective technical requirements for the tank-wagons used; corresponding clarifications are currently still underway at the FOT. There are no indications for the formation of a larger pool of liquid chlorine.

Dispersion: Considering the considerable fuzziness in modelling chlorine dispersion and to limit the modelling complexity, it is sufficient to vary only those meteorological and environmental parameters using scenarios that have a considerable influence on the dispersion. These are primarily wind speed and atmospheric stability (where the first depends on the latter). For temperature, humidity and ambient roughness, it is sufficient to use average values².

Effects: The use of probit values to derive lethality from time dependent concentrations via dose values corresponds to the state of the art and is user-friendly in application. It is recommended to use the values of TNO (in the current version of Effects) or DNV (implemented in Phast). For lethality, it is mandatory to distinguish between free-field values and values inside a building.

Modelling: Use of IT applications

Among all models that have been further developed methodically in line with the current state of knowledge and are on a modern IT level (e. g. use within a modern operating system) only EFFECTS (currently in version 10.0) and Phast (currently

2 The assumption of a temperature mean value leads to conservative results in situations with low temperatures. Low temperatures of well below 0°C do not often occur in Switzerland and are therefore classified as irrelevant.

in version 7.2) are still available. If the assumption of plausible parameters leads to the formation of a pool, these should be adjusted within a realistic framework so that a significant pool formation is not modeled.

Phast and EFFECTS use different physical models to calculate the release and dispersion of chlorine. The calculation of the release rates and amounts is based on established physical models for both applications; the results are therefore comparable. The dispersion models differ more strongly and sometimes use very different parameterizations, especially regarding the coefficients describing the dispersion and dilution in the x-, y- and z-direction (which depend on the relevant parameters such as wind force or atmospheric stability class). Based solely on the parameters considered in the model, it cannot be judged how well a model is able to describe reality. For both models (Phast of DNV and EFFECTS of TNO) the validation based on real data from dispersion experiments is of crucial importance. Both models are currently insufficiently validated with such data. However, corresponding efforts are currently being made for both models. At present, it is therefore not possible to judge which of the two models can better model reality. It is necessary to wait for final conclusions until the models have been validated and possible adjustments to them made.

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung	1
	1.1 Ausgangslage	1
	1.2 Aufgabenstellung	1
2.	Ereignisse	2
	2.1 Weltweite Unfälle mit Chlor	2
	2.2 Bahnunfälle mit Chlor	3
3.	Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von Chlor	6
	3.1 Stand der Technik bzgl. Freisetzung und Ausbreitung	6
	3.2 Stand der Technik bzgl. der Toxizität von Chlor	9
	3.3 Reaktion von Chlor mit der Umgebung	11
	3.4 Vorgehen zur Modellierung	11
	3.5 Unterfeuerung von Chlor-Kesselwagen	17
	3.6 Letalitäten in Gebäuden	17
4.	EDV-Applikationen	18
	4.1 EDV-Applikationen und Modelle	18
	4.2 Vergleich von EDV-Applikationen	19
	4.3 CFD/FDS-Modelle	22
5.	Folgerungen	29
	5.1 Stand der Technik zur Analyse von Chlorfreisetzungen	29
	5.2 Einsatz von Modellen	30
	5.3 Umgang mit Unsicherheiten	31
	Literaturverzeichnis	33

Anhang

A1	Modellgrundlagen	36
----	------------------	----

1. Einleitung

1.1 Ausgangslage

Gefährliche Güter und insbesondere Chlor werden in der Schweiz vorwiegend auf dem Schienenweg transportiert. Die Transportrouten führen teilweise durch dicht besiedelte Regionen mit entsprechenden Risiken. Zum Schutz der Bevölkerung unterstehen Transportrouten, auf denen bedeutende Mengen an Gefahrgütern transportiert werden, der Verordnung über den Schutz vor Störfällen (Störfallverordnung, StFV) [1]. In regelmässigen Zeitabständen werden die Risiken abgeschätzt und anhand der Beurteilungskriterien zur Störfallverordnung [2] beurteilt.

In Abhängigkeit von der Höhe der Störfallrisiken verfügt das Bundesamt für Verkehr BAV auf der Basis der StFV Massnahmen zum Schutz der Bevölkerung und der Umwelt. Dies kann bis hin zur Einstellung des Transports von spezifischen Stoffen auf bestimmten Streckenabschnitten gehen. Zudem kann die Umsetzung von Projekten in der Nähe von stark mit Gefahrgut befahrenen Strecken erschwert werden, indem z.B. einschränkende planerische oder kostenintensive bauliche Massnahmen als Kompensation erforderlich werden.

Einschränkungen beim Gefahrguttransport auf der Schiene haben einen bedeutenden Einfluss auf die davon betroffenen Wirtschaftseinheiten. Entsprechend ist es von zentraler Bedeutung, dass die Störfallrisiken zuverlässig abgeschätzt werden.

Zur Abschätzung der Störfallrisiken werden derzeit verschiedene Annahmen, Modelle und EDV-Applikationen verwendet. Im Rahmen des vorliegenden Projektes werden für den Gefahrenstoff Chlor der Stand der Technik und die zur Anwendung kommenden Modelle und EDV-Applikationen in Bezug auf die Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung untersucht.

1.2 Aufgabenstellung

Die Aufgabenstellung kann wie folgt zusammengefasst werden:

- Übersicht zu Ereignissen mit Chlor (weltweit und nicht auf Bahnunfälle begrenzt).
- Zusammenstellen des Stands der Technik zur Modellierung der Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von Chlor. Der Fokus liegt dabei auf der Modellierung von Freisetzungen aus Bahnkesselwagen.
- Identifikation von EDV-Applikationen, welche zur Umsetzung der Modellierung der Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von Chlor sinnvollerweise angewendet werden können.

Die Analyse fokussiert wie bereits eingangs erwähnt auf den Gefahrenstoff Chlor. Wo sinnvoll werden Hinweise zur Anwendung bei weiteren druckverflüssigten, toxischen, schweren Gasen gemacht.

2. Ereignisse

2.1 Weltweite Unfälle mit Chlor

Eine Übersicht von weltweiten Unfallereignissen mit Chlor wurde von Greenpeace International [3] zusammengestellt. Darin sind weltweite Unfallereignisse von 1970 bis 1991 aufgeführt. Ab 1991 gibt es keine vergleichbare, weltweite Datengrundlage. Eine Zusammenstellung von Unfallereignissen ab 1992, beschränkt auf die USA, findet sich in der Unfalldatenbank des U.S. Department of Transportation [4]. Ausgehend von diesen beiden Datenquellen zeigen die beiden nachfolgenden Abbildungen die Anzahl Ereignisse und die Anzahl der Todesopfer in den vergangenen rund 50 Jahren (1970 – 2015).

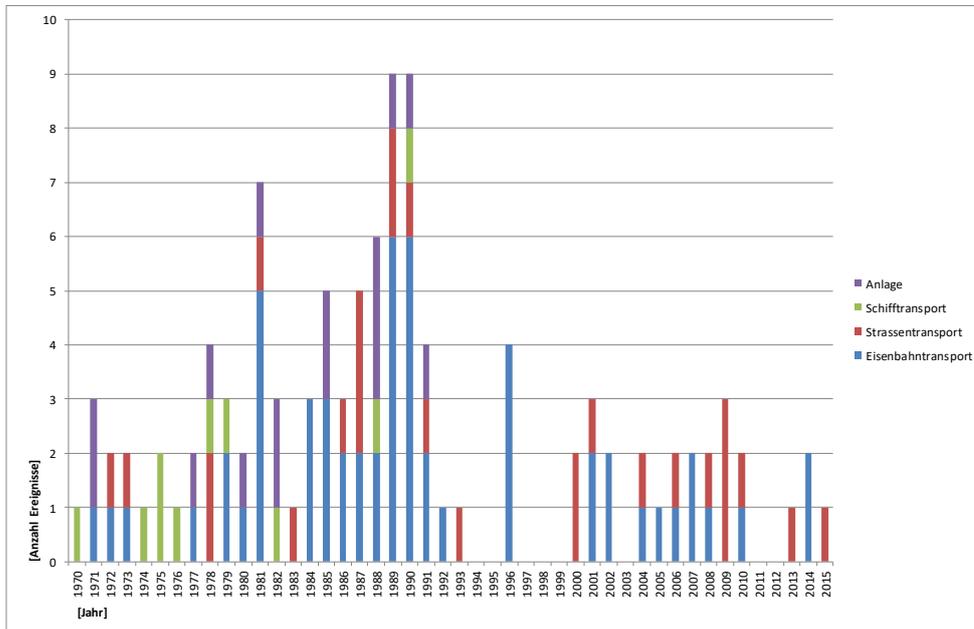


Abbildung 1: Anzahl Ereignisse mit Chlor 1970 bis 2015 (weltweit, nicht vollständig).

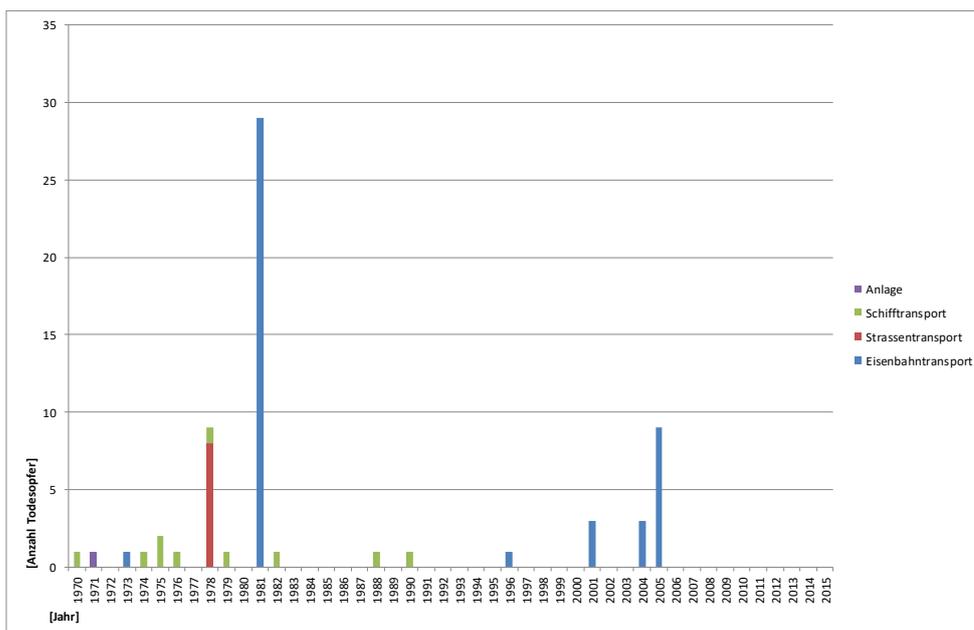


Abbildung 2: Anzahl Todesopfer durch Chlor 1970 bis 2015 (weltweit, nicht vollständig).

Bei der Interpretation ist zu beachten, dass sich die Daten ab 1992 ausschliesslich auf die USA und den Transport auf der Bahn und auf der Strasse beziehen.

Das bedeutendste Ereignis in Bezug zur Anzahl Todesopfer ist im Jahr 1981 aufgetreten. Am 1. August 1981 entgleist in Mexiko, Montanas ein Güterzug. Zwei mit Chlor beladene Kesselwagen schlugen leck und rund 100 Tonnen Chlor wurden in kurzer Zeit freigesetzt. Dabei werden 29 Personen getötet und ca. 1'000 Personen verletzt (Beschreibung aus [3], Details zum Unfall wie Bevölkerungsdichte in der Umgebung etc. sind aus dieser Quelle nicht ersichtlich).

2.2 Bahnunfälle mit Chlor

In der Schweiz und auch in Europa sind seit den Anfängen des Transports von Chlor auf der Schiene keine Bahnunfälle bekannt, bei denen bedeutende Mengen an Chlor freigesetzt wurden. Weltweit sind einzelne Ereignisse aufgetreten und in der Literatur detailliert beschrieben. In der folgenden Zusammenstellung sind die bisher bekannten und hinsichtlich der massgebenden Parameter gut dokumentierten Ereignisse aufgeführt. Von besonderer Bedeutung sind dabei die Ereignisse von Alberton, Macdona und Graniteville. Dabei handelt es sich um Ereignisse, die durch einen Bahntransportunfall (Entgleisung, Zusammenstoss) ausgelöst wurden. Die Ereignisse von Festus und Glendale geben Hinweise für eine Modellierung, sind jedoch aus der Sicht der Transportrisiken wenig relevant, da es sich um Ereignisse beim Umschlag von Bahnkesselwagen mit Chlor handelt. Solche sind z.B. durch deutlich geringere Freisetzungsraten charakterisiert als unfallbedingte Freisetzungen.

ACCIDENTS	Alberton, Montana – USA [5]	Macdona, Texas – USA [6] [22]	Graniteville, South Carolina – USA [7] [22]	Festus, Missouri – USA [8] [22]	Glendale, Arizona – USA [9]			
IDENTIFICATION								
Accident	Derailment of Montane Rail Link Train and hazardous materials release (chlorine).	Collision of Union Pacific Railroad Train with BNSF Railway Company Train with Subsequent Derailment and Hazardous Materials Release (chlorine).	Collision of Norfolk Southern Freight Train with Standing Norfolk Southern Local Train with Subsequent Hazardous Materials Release (chlorine).	Chlorine release over a 3-hour period during a railroad tank car unloading operation.	Chlorine release during a railroad tank car unloading operation.			
Consequences	1 Fatality	0 Fatalities	9 Fatalities	0 Fatalities	0 Fatalities			
Location	Alberton, Montana, USA L Lat 47° 01' 05" W Lon 114° 31' 28" Open land, forest	Macdona, Texas, USA N Lat 29° 19' 40" W Lon 98° 40' 20" Open land, forest	Graniteville, South Carolina, USA L Lat 33° 34' 00" W Lon 81° 48' 30" Sparsely populated region	Festus, Missouri, USA N Lat 38° 10' 45" W Lon 90° 23' 15" Open land, forest, sparsely populated region	Glendale, Arizona, USA L Lat 33° 30' 40" W Lon 112° 09' 53" Densely populated region			
Date and Time	11 April 1996 4:19 am CDT	28 June 2004 5:03 am CDT	6 January 2005 2:45 am	14 August 2002 9:20 am CDT	17 November 2003 11:30 am CDT			
RELEASE PARAMETERS								
Inventory in railcar		80'000kg	80'000kg	80'000kg				
Upstream pressure in tank	6.2bar	6.2bar	6.2bar	12bar	-			
Temperature in tank	4°C	25°C	13°C	20°C	21°C			
Equivalent hole size (diameter)	61cm	13.4cm	26.8cm					
Equivalent hole size (description)	Actual hole was jagged rectangle	Actual hole was jagged rectangle	Actual hole was jagged rectangle	Actual hole was constricted. Assumed to equal what would give the desired 2kg/s release rate	Release through scrubber			
Release height	1m	1m	1m	3.5m	3m			
Discharge rate	1650kg/s (liquid & vapor)	0.2kg/s (vapor only)	390kg/s (liquid & vapor)	0.2kg/s (vapor only)	1'565kg/s (liquid & vapor)	0.2kg/s (vapor only)	2kg/s (liquid & vapor)	0.1kg/s (vapor only)
Duration	27s	3600s (vapor only, starting after the two-phase release ceases)	136s	3'600s (vapor only, starting after the two-phase release ceases)	34s	3'600s (vapor only, starting after the two-phase release ceases)	10'800s (3h)	9'000s
Release	44'550kg	720kg	53'040kg	720kg	53'210kg	720kg	21'600kg	871kg
Total release	45'360 kg		54'480 kg		54'480 kg		21'792 kg	871 kg
Initial Velocity (after expansion)	100m/s	0.01m/s	100m/s	0.01m/s	100m/s	0.01m/s	100m/s	0.01m/s
Aerosol Size (after expansion, prior to dilution)	20µm	-	20µm	-	20µm	-	20µm	-
Initial Density (after expansion and prior to dilution)	22kg/m ³	3kg/m ³	22kg/m ³	3kg/m ³	22kg/m ³	3kg/m ³	22kg/m ³	3kg/m ³
PHASE TRANSITION								
Gaseous (g) and droplets (d)		100% (g/d: 0.2/0.8)	100% (g/d: 0.2/0.8)	100% (g/d: 0.2/0.8)				

ACCIDENTS	Alberton, Montana – USA [5]	Macdona, Texas – USA [6] [22]	Graniteville, South Carolina – USA [7] [22]	Festus, Missouri – USA [8] [22]	Glendale, Arizona – USA [9]
Liquid (pool)		No pool formation	No pool formation	No pool formation	
DISPERSION					
Wind direction					
Wind speed at z = 10m	1.1m/s	3m/s	3m/s	1.3-2.2m/s	2.2m/s
Atmospheric stability	Pasquill: E	Pasquill: D	Pasquill: E	Pasquill: D	Pasquill: B
Ambient relative humidity	100%	100%	100%	100%	100%
Surface Roughness	2.0m (TNO-Scale)	1.0m (TNO-Scale)	1.0m (TNO-Scale)	2.0m (TNO-Scale)	1.0m (TNO-Scale)
Characteristics of Surroundings	Forest area between mountains, small city down to east	Rural river bottom land, flat terrain, mix of fields and woods, a few houses	Small-town industrial park, in midst of parking lots, trees and residences; slightly hilly with slope up to north	Small chemical processing plant in midst of rural fields, trees, and some houses; flat terrain in vicinity	Small chemical processing plant at small industrial park, in midst of parking lots and residences
Weather conditions	Overcast, scattered rain	Overcast, scattered rain	Clear skies but low-lying haze and fog	Overcast, some drizzle	Overcast
Soil		Damp	Damp	Damp	

Aus den Unfallereignissen lassen sich mit Blick auf die Modellierung die folgenden Feststellungen ableiten:

- Unfallbedingte Leckdurchmesser können beträchtliche Grössen von bis zu mehreren Dutzend cm erreichen.
- Bei einer unfallbedingten Freisetzung (Entgleisung, Zusammenstoss, etc.) treten grosse Freisetzungsraten mit bis zu rund 1'500 kg/s relativ häufig auf.
- Das austretende Chlor verdampft sehr rasch. Die Bildung einer tiefkalten Lache (pool) tritt praktisch nicht auf bzw. kann vernachlässigt werden.

Die aufgeführten Unfälle sind alle in den USA aufgetreten. Es stellt sich daher die Frage, ob diese Szenarien auf andere Weltregionen übertragbar sind. In erster Linie ist dies Abhängig vom Transportbehälter.

In Europa und auch in der Schweiz sind die Anforderungen an die Transportbehälter in der Ordnung für die internationale Eisenbahnbeförderung gefährlicher Güter (RID) [10] geregelt. Demnach wird Chlor in Behältern mit der Typenbezeichnung (Tankcodierung) P22DH(M) transportiert. Der Bemessungsdruck entsprechender Tanks ist mit 22 bar festgelegt. Der Mindestprüfdruck liegt bei 19 bar.

Die Anforderungen an die Transportbehälter in den USA sind in der Grundlage [11] dokumentiert. Demnach ist für Transportbehälter für Chlor die «Test pressure» mit 34 bar und die «Burst pressure» mit 86 bar angegeben.

Diese Grundlagen legen nahe, dass die Anforderungen an die Transportbehälter in den USA im Vergleich zu Europa zumindest nicht schwächer sind. Ein Übertrag von Szenarien aus den USA auf Verhältnisse in Europa scheint demnach durchaus möglich.

3. Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von Chlor

3.1 Stand der Technik bzgl. Freisetzung und Ausbreitung

Der aktuelle Stand der Technik zur Modellierung der Freisetzung, der Ausbreitung und der Wirkung von Chlor kann aus verschiedenen Literaturquellen und Anwendungsfällen (durchgeführte Risikoanalysen) abgeleitet werden. In der folgenden Tabelle sind sechs Risikoanalysen zu Chlor und die darin verwendeten Parameter zusammengestellt. Die Zusammenstellung umfasst Risikoanalysen beim Bahntransport, beim Strassentransport und bei stationären Anlagen.

Auf Europäischer Ebene werden derzeit bedeutende Anstrengungen unternommen, um auftretende Risiken im Zusammenhang mit Gefahrgütern einheitlich beurteilen zu können. Im Vordergrund steht dabei das Projekt mit der Bezeichnung «SAPHEDRA – Building a European platform for evaluation of consequence models dedicated to emerging risks» [26], [27], [28], [29]. Die bisher in diesem Projekt erarbeiteten Produkte WP1 bis WP4 beschreiben bestehende Modelle und allgemeine Vorschläge zum Vorgehen bei Risikoanalysen. Konkrete Empfehlungen im Zusammenhang mit der Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung von Chlor sind in den bisher erarbeiteten Produkten lediglich auf einer sehr generellen Ebene enthalten.

RISIKOANALYSEN / LITERATUR	QRA of rail transport of dangerous goods through Basel. TNO 2013. [12]	Road risk analysis due to the transportation of chlorine in Rosario city. 2004. [13]	Modelling and Assessing Risk analysis of Chlorine Gas in Water Treatment Plants. 2012. [14]	Individual und societal risk analysis on industrial area. 2010. [15]	CABB AG. Risikoermittlung gemäss Störfallverordnung. 2016. [16]		PRA Bahn. 1998. [17]
FREISETZUNG							
System	rail	road	storage	storage	rail	storage	rail
Volumen des Behälters	43m ³			take into account	54m ³	85m ³	
Druck im Behälter	5.4bar		7bar		4.9bar	3.7bar	4.9bar
Temperatur im Behälter	12°C		Below -8°C	take into account	9°C	0°C	9°C
Füllgrad	85%		90%		80%	50%	70%
Aggregatzustand			Liquid and gas	take into account	Liquid and gas		Liquid and gas
Stoffmenge	53'000kg			50'000kg	60'000kg	41'500kg	55'000kg
Freisetzung	Instantaneous release Continuous release	Continuous release	Continuous release	Instantaneous release Continuous release	Continuous release	Instantaneous release	Instantaneous release Continuous release
Leck (kont. Freisetzung)	7.62cm (3inch) connection point		2.54cm (1inch) connection point	2.54cm (1inch) 5.08cm (2inch)	5cm		≥ 25cm -> instantaneous 5cm 1cm
Lecktyp (kont. Freisetzung)				take into account	rund		
Leckhöhe (kont. Freisetzung)				take into account			1m
Freisetzungsrates (kont. Freisetzung)		Emission flowrates 0.1, 1, 3kg/s instantaneous practically negligible	2.5kg/s (maximum mean rate)		3.2kg/s		917kg/s (25cm Leck, inst.) 41kg/s (5cm Leck, cont.) 1.7kg/s (1cm Leck, cont.)
Freisetzungsdauer (kont. Freisetzung)		60min	10min		15min		1min (25cm Leck, inst.) 11min (5cm Leck, cont.) 90min (1cm Leck, cont.)
Freisetzungsmenge	Instantaneous: 53'000kg		803.76kg		2'880kg	41'500kg	55'000kg (25cm Leck, inst.) 27'060kg (5cm Leck, cont.) 9'180kg (1cm Leck, cont.)

RISIKOANALYSEN / LITERATUR	QRA of rail transport of dangerous goods through Basel. TNO 2013. [12]	Road risk analysis due to the transportation of chlorine in Rosario city. 2004. [13]	Modelling and Assessing Risk analysis of Chlorine Gas in Water Treatment Plants. 2012. [14]	Individual und societal risk analysis on industrial area. 2010. [15]	CABB AG. Risikoermittlung gemäss Störfallverordnung. 2016. [16]	PRA Bahn. 1998. [17]
PHASENÜBERGANG						
Anteil gasförmig (g) inkl. Tropfen (d)					2'880kg (g/d: 0.5/0.5) 9'000kg (g/d: 0.5/0.5)	100% (g/d: 0.5/0.5)
Anteil flüssig (Lache)					0kg (top venting) 32'500kg	0%
AUSBREITUNG						
Windrichtung	meteorological data	meteorological data	meteorological data	meteorological data	meteorological data	
Windgeschwindigkeit	1.9, 1.8, 3.8, 7.1, 2.0, 1.5m/s		1.0m/s	take into account	1, 5m/s 1, 5m/s	1.0, 4.0m/s
Atmosphärische Stabilität	Pasquill: B, D, D, D, E, F		Pasquill: F	take into account	Pasquill: E Pasquill: E	Pasquill: E, D
Relative Luftfeuchtigkeit	71%	60%, negligible (Argentina)	40% (Teheran)	take into account	83% (Europe) 83% (Europe)	83% (Europe)
Umgebungstemperatur	Day: 14.4°C, Night: 10.8°C	20°C, negligible (Argentina)	15°C (Teheran)		9°C (CH) 9°C (CH)	9°C (CH)
Bodentemperatur	13°C				9°C (CH) 9°C (CH)	9°C (CH)
Atmosphärendruck		1 atm, negligible (Argentina)				
Solarkonstante	302W/m ²					
Umgebungsrauigkeit	1.0m (gem. TNO-Skala)		Urban zone	take into account	0.25m (TNO) 0.25m (TNO)	3.0m (TNO)
Bewölkung				take into account		
WIRKUNG						
Expositionszeit		60min			30min 30min	30min
Expositionshöhe		1.6m			1m 1m	1m
Letalität	Probit: a = -4.86, b = 0.5, n = 2.75 (ppm*min)	Probit: a = -8.29, b = 0.92, n = 2 (ppm*min)		Probit	Probit: a = -4.86, b = 0.5, n = 2.75 (ppm*min)	Probit: a = -4.86, b = 0.5, n = 2.75 (ppm*min)
IDLH			10ppm			
AEGL			AEGL-1(60min) 0.5ppm AEGL-2(60min) 2.0ppm AEGL-3(60min) 20ppm			

Ein wesentlicher Bestandteil der untersuchten Risikoanalysen bildet jeweils die Ausbreitungsrechnung. Dazu wird je nach Situation eine gängige oder verfügbare EDV-Applikation eingesetzt. Diese wiederum bedingt die Eingabe von verschiedenen Parametern wie Stoffmenge, Leckgrösse, Freisetzungsrate und Dauer, meteorologische Daten und Umgebungsdaten. Die in den Risikoanalysen verwendeten Parametern sind stark von den Anforderungen der eingesetzten EDV-Applikation beeinflusst. Die Risikoanalysen orientieren sich daher stark an den Vorgaben bzw. Anforderungen der EDV-Applikationen. Konkret heisst das, dass aktuell bei der Erarbeitung von Risikoanalysen eine in der jeweiligen Situation verfügbare EDV-Applikation abgestützt wird. Ein einheitlicher Stand der Technik in Bezug auf die verwendeten Modelle existiert in diesem Sinne nicht.

3.2 Stand der Technik bzgl. der Toxizität von Chlor

Bei der Abschätzung der Wirkung von Chlor auf Menschen wird i.d.R. auf Probit-Funktionen abgestützt. Die Probit-Funktion beschreibt den Bezug von Dosis und Wirkung (Letalität). Die Grundlagen dazu wurden von Eisenberg [18] vor rund 40 Jahren erarbeitet. Die für Chlor massgebenden Probitparameter wurden immer wieder angepasst. Die Euro Chlor [19] hält, fest, dass es derzeit keinen breit abgestützten Konsens in Bezug auf zu verwendende Probitparameter für Chlor gibt.

In der folgenden Tabelle sind verschiedene Vorschläge für Probitparameter dargestellt.

	Konstante A [mg/m ³ · min]	Konstante B [-]	Konstante n [-]
Eisenberg (75)	-19.59	1.69	2.75
Wither&Lees (85)	-10.78	0.92	2.00
van_Heemst (90)	-12.59	1.45	2.00
ADCS (92)	-6.89	0.52	2.75
TNO (96)	-14.30	1.00	2.30
TNO (Effects)	-6.35	0.5	2.75
DNV GL (Phast)	-6.30	0.5	2.75

Tabelle 1: Probitparameter für Chlor.

In den beiden folgenden Abbildungen sind die Letalitäten in Abhängigkeit einer als zeitlich konstant angenommenen Konzentration auf Basis dieser Probitfunktionen für die Expositionszeiten von 5 und 30 Minuten graphisch dargestellt.³

3 Bei der Modellierung der Wirkung entspricht es dem Stand der Technik, einen über die Zeit sich ändernden Konzentrationsverlauf abzubilden. Für die vergleichende Darstellung der Ansätze ist dies jedoch nicht zweckmässig.

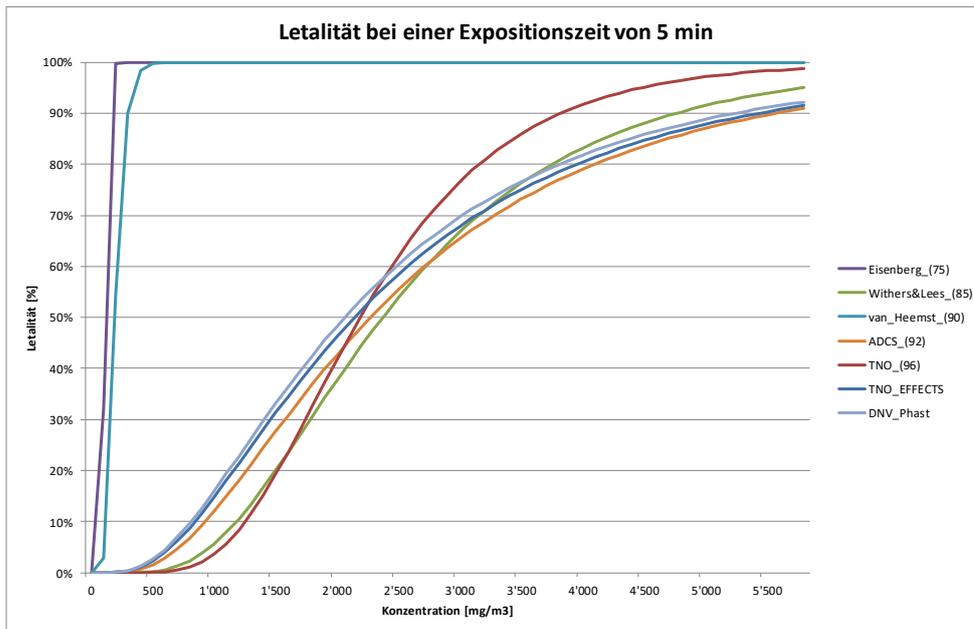


Abbildung 3: Probitfunktionen für Chlor bei einer Expositionszeit von 5 Minuten.

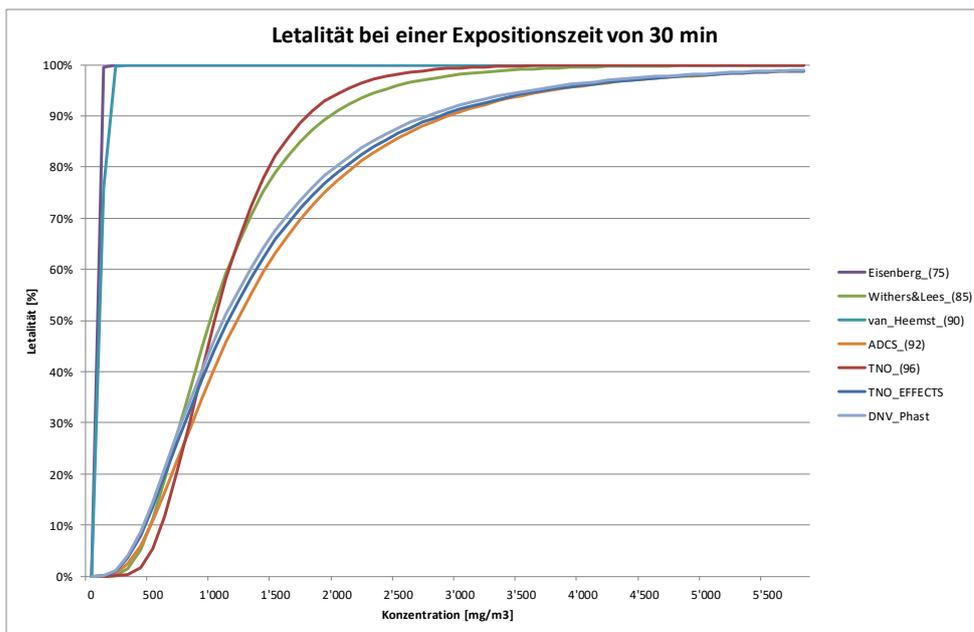


Abbildung 4: Probitfunktionen bei einer Expositionszeit von 30 Minuten.

Aus den Abbildungen ist ersichtlich, dass in einzelnen, weiter zurückliegenden Arbeiten (Eisenberg, van Heemst) konservative Werte angegeben sind. Abgesehen davon liegen die anderen Vorschläge in etwa in einer vergleichbaren Größenordnung. Insbesondere verwenden die Institutionen TNO (EFFECTS) und DNV (Phast) praktisch identische Werte.

Für die Modellierung wird daher empfohlen, auf die derzeit von TNO und DNV verwendeten Werte abzustützen. Dabei ist zu beachten, dass es sich bei diesen Parameterwerten um die aktuell verwendeten und nicht um die «richtigen» Werte handelt. Eine künftige Anpassung dieser Werte auf der Basis weiterer Erkenntnisse ist daher nicht ausgeschlossen.

3.3 Reaktion von Chlor mit der Umgebung

Im Jahre 2013 wurde im Journal of Hazardous Materials die Studie «Deposition of Cl₂ on soils during outdoor releases» [21] publiziert. Darin wird beschrieben, dass bei einer Freisetzung von Chlor ein bedeutender Anteil des Chlors im Boden absorbiert wird. Zitat aus dem Abstract: «The analysis revealed up to 50% of a 1814 kg release could be deposited within 20 m from the release point for soil with high organic (43%) and/or water content (29%).» Der in der Studie beschriebene Absorptionseffekt wird in bisherigen Modellierungen in der Regel nicht berücksichtigt.

Die Folgerungen der Studie «Deposition of Cl₂ on soils during outdoor releases» stützen sich auf Versuche mit Chlorfreisetzungen ab. Dabei wurden auf einer tieferliegenden, ebenen Fläche mit einem Radius von rund 25 m zwischen 907 kg und 1'814 kg Chlor freigesetzt und anschliessend die Chlormasse (Cl⁻) in vorgängig auf der Fläche angeordneten, zylindrischen Bodenproben von 20 cm Durchmesser und 20 cm Höhe ermittelt. Aufgrund der Versuchsanordnung hat keine relevante Verfrachtung des Chlors durch den Wind stattgefunden.

Anhand der Messresultate zur Masse an Chlor (Cl⁻) in den Bodenproben vor und nach der Freisetzung wurde gefolgert, dass rund 50% des Chlors im Boden absorbiert wird.

Inwiefern unter realistische Freisetzungen (grosse Freisetzung, Windeinfluss, etc.) die Konzentration durch Absorption im Boden beeinflusst wird, kann anhand dieser Versuchsergebnisse kaum beantwortet werden. Solange keine breiter und auf effektiven Messungen der Konzentration abgestützten und akzeptierten Ergebnisse vorliegen, kann dieser Effekt nicht adäquat in der Modellierung berücksichtigt werden.

3.4 Vorgehen zur Modellierung

Ausgehend von den Ausführungen zum Stand der Technik und zum Stand des Wissens können die für eine Modellierung massgebenden Parametern sowie sinnvollerweise einzusetzende Werte präzisiert und konkretisiert werden. Die nachfolgende Tabelle beschreibt dieses Vorgehen zur Modellierung.

Parameter	Modellierung	Anmerkungen
Freisetzung		
Volumen [m ³]	– Effektives Volumen der Transportbehälter.	– Chlor wird aktuell in Transportbehältern von 50 bis 55 m ³ transportiert.
Füllgrad [%]	– Transport ausschliesslich in gefülltem Zustand (leerer Zustand nicht relevant, wird über Rechnung anhand Transportmenge und Tonnage pro Kesselwagen automatisch ausgeschlossen)	– Gefüllter Zustand für Chlor entspricht einem Füllgrad von ca. 70 bis 85%.
Temperatur im Behälter [°C]	– Mittlere Jahrestemperatur.	<ul style="list-style-type: none"> – Es darf davon ausgegangen werden, dass die Temperatur im Behälter in etwa der angenommenen Umgebungstemperatur entspricht. – Der Parameter hat einen Einfluss auf die Freisetzungsrage (je höher die Temperatur, desto höher der Druck im Behälter bzw. die Freisetzungsrage im Falle einer Leckage). – Die Annahme einer mittleren Jahrestemperatur stellt eine Vereinfachung dar (Mittelwertbetrachtung). – Die mittlere Jahrestemperatur wird von MeteoSchiweiz seit 1864 gemessen. Z. B. Area-mean temperatures of northern Switzerland < 1000 m a.s.l (ca. 6°C bis 10°C).
Druck [bar]	– Entspricht bei druckverflüssigten Gasen dem Dampfdruck bei der entsprechenden Temperatur	– Dampfdruck ist stark vom Stoff abhängig.
Stoffmenge pro Kesselwagen [kg]	– abhängig vom Kesselwagen-Volumen und vom Füllgrad	– Maximale Nettotonnage bei Chlor beträgt ca. 65 t.
Leckdurchmesser [cm]	<ul style="list-style-type: none"> – Können in starkem Masse variieren – Annahmen in Form von Szenarien notwendig – Berücksichtigen von kleinen (wenige cm) bis grossen (mehrere Dutzend cm) Lecks. 	<ul style="list-style-type: none"> – Bei Unfallereignissen mit Chlor [5] - [9] wurden Leckdurchmesser bis rund 60 cm gemessen (vgl. Kapitel 2.2). Entsprechend grosse Lecks bzw. Freisetzungen sind daher in der Modellierung zu berücksichtigen. – Die Annahmen zum Leckdurchmesser haben einen bedeutenden Einfluss auf die Freisetzungsrage.
Leckhöhe (über Boden) [m]	– Annahme einer Freisetzung in der flüssigen Phase im unteren Bereich des Behälters als häufigster und bzgl. der Freisetzungsrage relevantester Fall.	– Primär geht es hier um die Frage, ob ein Leck im Bereich der gasförmigen Phase (Vapour Venting) oder in der flüssigen Phase (Bottom Discharge) des Behälters auftritt. Aufgrund des hohen Flüssigkeitsstandes (weitgehend gefüllte Behälter) und der Tatsache, dass tiefer liegende Behälterpartien bei Unfällen eher mit Objekten (Bo-

Parameter	Modellierung	Anmerkungen
		<p>den, Infrastruktur, Rollmaterial) zusammenstossen, ist die Annahme eines Lecks in einem tiefen Bereich des Behälters (und damit im Bereich der flüssigen Phase) am wahrscheinlichsten.</p> <ul style="list-style-type: none"> – Bei Unfallereignissen mit Chlor [5] - [9] wurden Leckhöhen im Bereich von 1 m bis 3.5 m ab Boden gemessen (vgl. Kapitel 2.2). – Je nach Höhe des Lecks wird eine unterschiedliche Stoffmenge freigesetzt. Restmengen von Chlor, die im Behälter tiefer als das Leck liegen, bleiben mehrheitlich in Form einer tiefkalten Flüssigkeit im Behälter zurück, welche nur allmählich verdampft und austritt
<p>Freisetzungsrates [kg/s]</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Ansatz 1: Berechnung der sich über die Zeit ändernden Freisetzungsrates auf der Basis der oben beschriebenen Parameter (Volumen, Füllgrad, Temperatur, Leckgrösse etc.). Daraus als Vereinfachung Abschätzen einer repräsentativen Freisetzungsrates (konstante Freisetzungsrates über die gesamte Freisetzungsdauer). – Ansatz 2: Annahme einer konstanten Freisetzungsrates auf der Basis von bisherigen Unfallereignissen. 	<ul style="list-style-type: none"> – Bei Unfallereignissen [5] - [9] wurden grosse Freisetzungsrates mit bis zu rund 1'500 kg/s festgestellt (vgl. Kapitel 2.2). Unabhängig vom Ansatz ist es daher sinnvoll, Szenarien mit entsprechend hohen Freisetzungsrates und einer kurzen Dauer («spontane Freisetzung») zu berücksichtigen. – Aussagen, ob bzw. in welchem Masse kleinere Lecks («kontinuierliche Freisetzung») häufiger vorkommen als grosse, lassen sich aus den vorhandenen Unfalldaten [5] - [9] nicht zuverlässig ableiten. Dazu ist man auf Annahmen angewiesen. Die untersuchten Unfallereignisse deuten jedoch darauf hin, dass grössere Freisetzung tendenziell häufiger vorkommen als kleinere Freisetzung. – Eine zeitliche Abnahme der Freisetzungsrates hat man primär bei länger andauernden Freisetzung im Bereich der Gasphase (wegen der Abkühlung der flüssigen Phase im Kesselwagen). Diese stellen aber eher die Ausnahme dar. – Die Berücksichtigung von Szenarien, die über das einfache Schema «konstante Freisetzungsrates von x kg/s über eine fixe Zeit t» hinausgehen, bringen angesichts der breiten Streuung bei diesem wichtigen Parameter keinen Mehrwert (sondern lediglich eine Verkomplizierung der Berechnungen).
<p>Freisetzungsmenge [kg]</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Ansatz 1: Berechnung der Freisetzungsmenge auf der Basis der oben beschriebenen Parameter (Volumen, Füllgrad, Temperatur, etc.). – Ansatz 2: Annahme einer totalen Freisetzungsmenge auf der Basis von bisherigen Unfallereignissen. 	<ul style="list-style-type: none"> – Die totale Freisetzungsmenge ist von verschiedenen Parametern, insb. von der Leckposition bzw. Leckhöhe abhängig. Auf der Basis von Unfallereignissen [5] - [9] (vgl. Kapitel 2.2) kann angenommen werden, dass in der Regel rund 2/3 der im Behälter vorhandenen Stoffmenge austritt (insbesondere bei Freisetzung im Bereich der flüssigen Phase).

Parameter	Modellierung	Anmerkungen
Anzahl leckschlagende Kesselwagen pro Störfall	<ul style="list-style-type: none"> – Annahmen notwendig – Annahme einer Freisetzung aus nur einem lecken Kesselwagen ist vertretbar, solange auch konservative Freisetzungsmengen angenommen werden (z.B. gesamte Menge statt 2/3) 	<ul style="list-style-type: none"> – Die Möglichkeit einer Freisetzung aus mehreren Kesselwagen, insbesondere wenn diese hintereinander eingereiht sind, ist grundsätzlich möglich, dürfte angesichts der beschränkten Leckwahrscheinlichkeit und der Möglichkeit von nur einem Chlorwagen im Unfallzug aber eher die Ausnahme darstellen – Die Streuung bzgl. der gesamten Freisetzungsmenge pro Unfall wird zwar erhöht, aber nicht in hohem Masse. – Freisetzungsmengen in Mengen > 1 voller Kesselwagen sind aus Erfahrung wenig wahrscheinlich und müssen nicht betrachtet werden, solange man nicht bewusst sehr konservative Szenarien berücksichtigen will.
Freisetzungsdauer [sec]	<ul style="list-style-type: none"> – Die Freisetzungsdauer ergibt sich aus der (sinnvollerweise als konstant angenommenen) Freisetzungsrate und der Freisetzungsmenge. 	<ul style="list-style-type: none"> –
Phasenübergang		
Aggregatzustand nach Austritt	<ul style="list-style-type: none"> – Literatur [12] - [17] und Unfallereignisse [5] - [9] deuten darauf hin, dass die gesamte, austretende Stoffmenge mit dem Wind verfrachtet wird (gasförmig und in Tropfen). – Der Anteil von mitgerissenen Tropfen in der Gaswolke ist zu Beginn relativ hoch, reduziert sich jedoch rasch durch die Durchmischung mit der wärmeren Umgebungsluft. 	<ul style="list-style-type: none"> – Je nach Quelle (Literatur [12] - [17], Unfallereignisse [5] - [9]) variiert der Anteil Tropfen in der Gaswolke unmittelbar nach Austritt zwischen 50% und 80%. (vgl. Kapitel 2.2 und Kapitel 3.1). – Der Parameter ist stark abhängig von Stoffeigenschaften und kann nicht ohne Weiteres von Chlor auf andere Stoffe übertragen werden.
Lachenbildung	<ul style="list-style-type: none"> – Literatur [12] - [17] und Unfallereignisse [5] - [9] deuten darauf hin, dass bei einer Chlorfreisetzung im Unterschied zu toxischen, leicht flüchtigen Flüssigkeiten keine oder zumindest keine bedeutende Lache gebildet wird (kein signifikantes «Ausregnen» von tropfenförmigem Chlor). Auch der Eintrag von Wärme aus dem Boden, insbesondere bei nicht versiegelten Flächen (Normalfall), verhindert eine beginnende Lachenbildung. 	<ul style="list-style-type: none"> – Der Parameter ist stark abhängig von Stoffeigenschaften wie Dampfdruck und Verdampfungswärme und kann nicht ohne Weiteres von Chlor auf andere Stoffe übertragen werden.
Ausbreitung		
Atmosphärische Stabilität	<ul style="list-style-type: none"> – Abbilden von verschiedenen atmosphärischen Stabilitäten über Szenarien. – Berücksichtigen von ungünstigen, atmosphärischen Stabilitäten. 	<ul style="list-style-type: none"> – Weit verbreitete Stabilitätsskalen sind «Pasquill» und «Monin Obukhov». – Der Parameter hat einen sehr hohen Einfluss auf die Wirkdistanz.

Parameter		Modellierung	Anmerkungen
Windgeschwindigkeit	[m/s]	– Abbilden von verschiedenen Windgeschwindigkeiten über Szenarien.	<ul style="list-style-type: none"> – Der Parameter hat einen sehr hohen Einfluss auf die Wirkdistanz. – In der Literatur [12] - [17] werden hierzu Werte im Bereich von rund 1 m/s bis 5 m/s verwendet (vgl. Kapitel 3.1).
Umgebungsrauigkeit	[m]	– Abbilden von Turbulenzen, die durch Unregelmässigkeiten in der Umgebung wie Objekte, Häuser, etc. in die Strömung induziert werden, mittels eines pauschalen Korrekturfaktors im Rahmen der Ausbreitungsmodellierung.	– Der Parameter hat einen mittleren Einfluss auf die Wirkdistanz (je höher die Rauigkeit, desto geringer die Wirkdistanz wegen verstärktem Eintrag von Frischluft in die Wolke). Berücksichtigung als Mittelwert genügt in der Regel.
Relative Luftfeuchtigkeit	[%]	– Kann bei üblichen Ausbreitungsmodellen berücksichtigt werden. Berücksichtigung als Mittelwert genügt	<ul style="list-style-type: none"> – Der Parameter hat einen geringen Einfluss auf die Wirkdistanz. – Mittelwert von 70% bis 85% (Quelle: Standardnormwerte 1961 – 1990: Relative Luftfeuchtigkeit 2m, MeteoSchweiz, Stand: 2016).
Umgebungstemperatur	[°C]	– Kann bei üblichen Ausbreitungsmodellen berücksichtigt werden.	<ul style="list-style-type: none"> – Der Parameter hat einen moderaten Einfluss auf die Wirkdistanz (je höher die Temperatur, desto mehr Wärme steht von der Umgebung zur Verdampfung von Tropfen zur Verfügung. – Die Annahme einer mittleren Jahrestemperatur stellt eine zulässige Vereinfachung dar (Mittelwertsbetrachtung). – Die Annahme eines Temperaturmittelwerts führt bei Situationen mit tiefen Temperaturen zu konservativen Ergebnissen. Tiefe Temperaturen von deutlich unter 0°C treten in der Schweiz nicht oft auf und werden daher als nicht massgebend eingestuft. – Die mittlere Jahrestemperatur wird von MeteoSchweiz seit 1864 gemessen. Z. B. Area-mean temperatures of northern Switzerland < 1000 m a.s.l (ca. 6°C bis 10°C).
Wirkung			
Expositionszeit	[min]	– Maximale Expositionszeit von Personen im Wirkungsbereich (Abbruchkriterium bei lang andauernden Freisetzungen).	<ul style="list-style-type: none"> – Bei bedeutenden Freisetzungen von untergeordneter Bedeutung, da in der Regel die Freisetzungsdauer und damit auch die Expositionszeit klein ist. – In der Literatur [12] - [17] (vgl. Kapitel 3.1) werden hierzu Werte im Bereich von 30 min bis 60 min verwendet. Relevanz ist insgesamt klein. Es sollen jedoch keine Werte <15 min eingesetzt werden.
Expositionshöhe	[m]	– Höhe über Boden, auf welcher der Konzentrationsverlauf modelliert wird.	<ul style="list-style-type: none"> – In der Literatur [12] - [17] (vgl. Kapitel 3.1) werden hierzu Werte im Bereich von 1 m bis 1.5 m verwendet. – Der Parameter ist für kleine Werte von untergeordneter Bedeutung.

Parameter	Modellierung	Anmerkungen
Konzentration (Zwischenergebnis) [ppm]	<ul style="list-style-type: none"> – Konzentrationsverlauf von Chlor in der Luft (hier in ppm) (sich ändernde Konzentration im Zeitverlauf an einem definierten Ort). – Durch Vergleich mit relevanten Konzentrationsgrenzwerten (IDLH, AEGL-3, etc.) lässt sich eine grobe Aussage zu den möglichen Wirkungen machen (unter Vernachlässigung der Expositionsdauer) 	<ul style="list-style-type: none"> – Wird in der Regel verwendet, wenn es um Fragen von sicheren Abständen zu Gefahrenbetrieben geht. – Für die Risikoberechnung von untergeordneter Bedeutung.
Letalität (Ergebnis, Basis für Ausmasseschätzung) [%]	<ul style="list-style-type: none"> – Abschätzung mittels Probitfunktion über eine Dosis 	<ul style="list-style-type: none"> – In der Literatur [12] - [17] (vgl. Kapitel 3.1) sind derzeit verschiedene Probitfunktionen aufgeführt. Ein Konsens hinsichtlich der «richtigen» Werte besteht mangels klarer Daten nicht. – Konkrete Werte siehe Kapitel 3.2.

3.5 Unterfeuerung von Chlor-Kesselwagen

Chlor kann zusammen mit brennbaren Flüssigkeiten transportiert werden (aneinandergekoppelte Bahnkesselwagen mit Chlor und brennbaren Flüssigkeiten). Bei einem Unfall mit Zündung der brennbaren Flüssigkeit im Bereich von Chlorkesselwagen ist eine Unterfeuerung von Chlorkesselwagen möglich. Durch die Erhitzung steigt der Druck im Behälter. Übersteigt der Druck die Widerstandskraft des Behälters, kommt es zu einer spontanen Freisetzung von Chlor (Freisetzung des gesamten Inhalts innert sehr kurzer Zeit). Mehrere Faktoren führen dazu, dass entsprechende Szenarien in der Regel vernachlässigt werden können:

- Die gesamte Freisetzungsmenge ist vergleichbar wie bei einer Freisetzung über ein bedeutendes, untenliegendes Leck.
- Die Wahrscheinlichkeit, dass eine Chlorfreisetzung durch Unterfeuerung auftritt ist kleiner als im Falle eines grossen, untenliegenden Lecks durch direkte mechanische Einwirkung beim Unfall, u. A. deshalb, da in den meisten Fällen nicht ein Kesselwagen mit brennbaren Gefahrgutflüssigkeiten in unmittelbarer Nähe eingereicht ist. Im Methodikbericht zum Screening der Personenrisiken 2014 [31] ist festgehalten, dass die Häufigkeit einer spontanen Freisetzung durch die Berücksichtigung von sekundären Freisetzungen (insb. aufgrund durch Brände von Benzin oder Propan) um den Faktor 1.2 resp. um 20% zunimmt.
- Die Temperatur des freigesetzten Chlors ist hoch. Die Chlormoleküle verhalten sich eher wie ein Neutral- oder Leichtgas.
- Die Temperatur der Umgebung ist sehr hoch (Brandfall). Dadurch besteht ein zusätzlicher, starker Vektor in vertikale Richtung nach oben.

Aus diesen Überlegungen kann gefolgert werden, dass die Risiken infolge Unterfeuerung bei Risikoanalysen einen eher untergeordneten Stellenwert einnehmen.

3.6 Letalitäten in Gebäuden

Die Letalitäten in Gebäuden lassen sich ausgehend von den Konzentrationen im Zeitverlauf innerhalb eines Gebäudes und über die oben beschriebenen Probit-Funktionen ableiten. Eine entscheidende Grösse ist dabei der Konzentrationsverlauf im Innern von Gebäuden, welche von verschiedenen Faktoren wie der Ausenkonzentration im Verlaufe der Zeit und der Luftwechselrate des Gebäudes abhängig ist. In der nachfolgenden Tabelle ist beispielhaft eine entsprechende Abschätzung zu den Letalitäten im Gebäude bzw. zum Schutz von Gebäuden dargestellt.

Probit-Konstanten:

Stoff = Chlor (Todesopfer)	für ideale Gase: $C [mg/m^3] = C[ppm] \cdot (p \cdot M) / (R \cdot T)$
n = 2.75	p [Pa] = 101300 atmosphärischer Druck
a = -6.35	M [g/mol] = 70.900000 Molmasse
b = 0.5	R [J/(mol*K)] = 8.31451 molare Gaskonstante

Konzentration im Freien zu Letalitätswerten

$$C [mg/m^3] = (e^{(Pr-a)/n})^{1/n} \quad (\text{Green Book, S. 19})$$

	Innerhalb R ₉₉	Zwischen R ₉₉ – R ₇₅	Zwischen R ₇₅ – R ₅₀	Zwischen R ₅₀ – R ₂₅	Zwischen R ₂₅ – R ₁
Anteil Tote =	99.0%	85.0%	60.0%	35.0%	10.0%
Probit =	7.33	6.04	5.25	4.61	3.72
t [min] =	20	20	20	20	20
T [K] =	293	293	293	293	293
C [mg/m ³] =	7043	2756	1552	974	510
C [ppm] =	2389	935	526	330	173

Wohngebäude mit natürlicher Lüftung						
Luftwechselrate pro Stunde		0.3	0.3	0.3	0.3	0.3
Mittlere Konzentration im Gebäude nach 20 min	[mg/m ³]	704	276	155	97	51
Probit	Pr =	4.16	2.87	2.08	1.44	0.55
Mittlere Letalität im Gebäude		20.0%	1.5%	0.1%	0.1%	0.1%
Gebäudeschutz		80%	98%	100%	100%	99%

Ca. 50% mit natürliche Lüftung und 50% mit mechanischer Lüftung						
Luftwechselrate pro Stunde		1	1	1	1	1
Mittlere Konzentration im Gebäude nach 20 min	[mg/m ³]	2348	919	517	325	170
Probit	Pr =	5.82	4.53	3.74	3.10	2.21
Mittlere Letalität im Gebäude		80.0%	32.0%	10.0%	3.0%	0.1%
Gebäudeschutz		19%	62%	83%	91%	99%

100% mechanische Lüftung (z.B. Industrielle Nutzung)						
Luftwechselrate pro Stunde		2	2	2	2	2
Mittlere Konzentration im Gebäude nach 20 min	[mg/m ³]	4695	1837	1034	649	340
Probit	Pr =	6.77	5.48	4.69	4.05	3.16
Mittlere Letalität im Gebäude		96.0%	68.0%	38.0%	17.0%	3.0%
Gebäudeschutz		3%	20%	37%	51%	70%

Aus den Ergebnissen ist ersichtlich, dass der Gebäudeschutz sehr stark von der Luftwechselrate der Gebäude abhängig ist. Bei tiefen Luftwechselraten (< 0.3 pro Stunde) und einer Dauer der Freisetzung von 20 Minuten ist der Gebäudeschutz sehr hoch (R₉₉ (Aussenletalität = 99%) => Gebäudeschutz von 80%, R_{<99} (Aussenletalität < 99%) => Gebäudeschutz von annähernd 100%). Bei zunehmender Luftwechselrate oder gar bei Gebäuden mit offenen Stellen (Fenster, Türen) sinkt der Gebäudeschutz rasch ab.

4. EDV-Applikationen

4.1 EDV-Applikationen und Modelle

EDV-Applikationen zur Abschätzung der Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung basieren auf Modellen. Dabei können in einer EDV-Applikation verschiedene Modelle zur Anwendung kommen. Die EDV-Applikation EFFECTS von TNO basiert z.B. zur Abschätzung der Ausbreitung auf dem SLAB-Modell (mit Anpassungen durch TNO ab Version 8). Die EDV-Applikation Phast basiert über weite Teile auf dem Unified Dispersion Model UDM.

Modelle zur Abschätzung der Freisetzung, Ausbreitung und Wirkung sind in der Vergangenheit in grosser Zahl entwickelt worden. Das United States Department of Energy hat im Jahre 1995 die damals verfügbaren Modelle aufgelistet und kurz beschrieben [24]. In dieser Zusammenstellung sind rund 100 Modelle aufgeführt. Die allermeisten Modelle wurden für einen spezifischen Zweck erstellt und seither nicht mehr angepasst.

Im Hinblick auf die breite Anwendung zur Modellierung von Chlorereignissen sind die folgenden Aspekte der verwendeten EDV-Applikation von zentraler Bedeutung:

- Umfassende technische Dokumentation.
- Einarbeiten von neuen Erkenntnissen.
- Validierung und Verifikation der Modelle. Das Modell soll die realen Abläufe soweit bekannt möglichst gut abbilden.
- Aktualität in Bezug zur EDV (z.B. Betriebssystem, Schnittstellen zu Standardsoftware) und Benutzerfreundlichkeit.

Diese Anforderungen werden derzeit lediglich von den EDV-Applikationen EFFECTS / TNO (inkl. Riskcurves von TNO, welches ebenfalls auf EFFECTS basiert) und Phast / DNV mehrheitlich erfüllt. Die technische Dokumentation zu den Modellen ist jeweils in den entsprechenden Modellen enthalten. Im Folgenden werden daher diese beiden EDV-Applikationen detaillierter betrachtet.

4.2 Vergleich von EDV-Applikationen

Die beiden EDV-Applikationen EFFECTS / TNO und Phast / DNV sind hinsichtlich der möglichen Eingabeparameter vergleichbar. In beiden EDV-Applikationen können die in Kapitel 3.4 als massgebend aufgeführten Parameter berücksichtigt werden.

In den folgenden Kapiteln werden die beiden EDV-Applikationen hinsichtlich der Ergebnisse verglichen.

4.2.1 Freisetzung

Mit beiden EDV-Applikationen wird eine Freisetzung von Chlor aus einem Bahnkesselwagen modelliert. Dabei werden die folgenden Parameter eingegeben: Behälter = horizontaler Zylinder, Volumen = 50m³, Füllgrad = 80%, Stoffmenge = 58 Tonnen, Temperatur im Behälter = 10°C, Druck = 5 bar, Leckdurchmesser = 250mm, Leckhöhe = 1m über Tankboden. Die Ergebnisse sind in der nachfolgenden Tabelle zusammengefasst.

Modell	Freisetzungsrate [kg/s]	Freisetzungsdauer [s]
EFFECTS / TNO	1'027	56
Phast / DNV	1'045	55

Tabelle 2: Modellergebnisse zu Freisetzungsraten und Freisetzungsdauer.

Die Eingabemöglichkeiten der beiden EDV-Applikationen sind z. T. leicht verschieden. Insgesamt resultieren jedoch bei gleichen Szenarien in etwa die gleichen Ergebnisse.

4.2.2 Ausbreitung

Der Vergleich der Modellergebnisse in Bezug zur Ausbreitung ist in der Literatur detailliert beschrieben. Insbesondere in der Arbeit von Steven Hanna [22] sind die Ergebnisse von verschiedenen Modellen, darunter auch Phast und SLAB, im Vergleich dargestellt. In den folgenden Abbildungen sind diese Ergebnisse, ergänzt

mit den Ergebnissen von EFFECTS, welches ursprünglich auf SLAB basiert, dargestellt. Basis dazu sind die Unfallereignisse von Festus, Macdona und Graniteville.

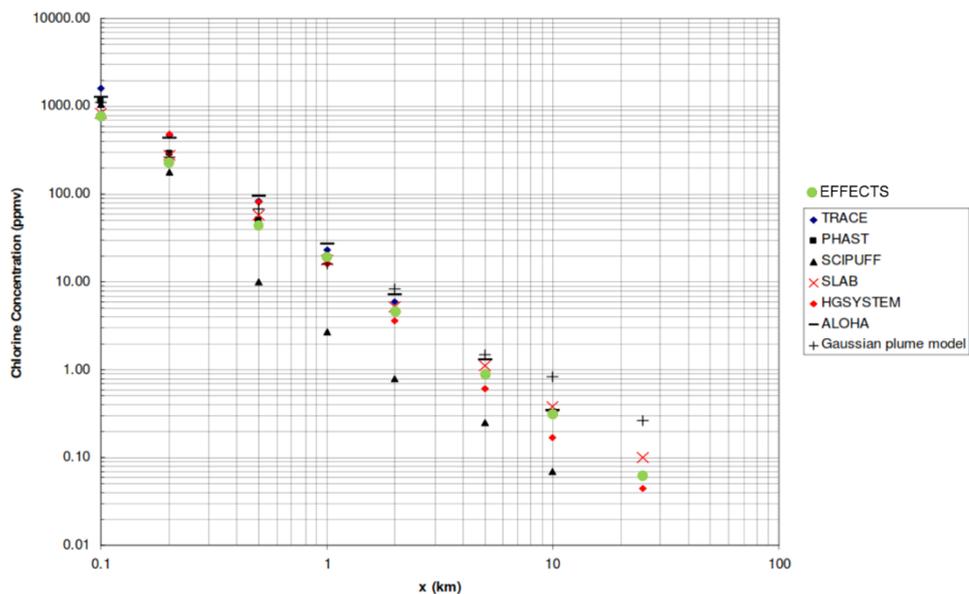


Abbildung 5: Verlauf der Chlor-Konzentration (Maximum der über 10 Min. gemittelten Werte) in Windrichtung basierend auf Freisetzungs- und Ausbreitungsparametern, die den Unfall in Festus beschreiben. Die Freisetzungen wurden mit 7 verschiedenen Modellen gemäss umrandeter Legende berechnet und stamm aus [22]. Die entsprechenden Ergebnisse für das Modell «Effects», welches seinerseits auf dem Modell SLAB basiert, wurden durch EBP berechnet und ergänzt.

	EFFECTS	TRACE	PHAST	SCIPUFF	SLAB	HG-SYS-TEM	ALOHA
x (km)	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
0.1	650	1'605	1'137	1'050	836	770	1'250
0.2	223	468	293	180	280	481	433
0.5	49	84	50	10	58	80	95
1	15	23	14.1	2.7	17.7	15.9	27
2	4.7	6	4.1	0.8	5.2	3.64	7.2
5	1.0		0.84	0.25	1.1	0.61	1.3
10	0.3		0.27	0.07	0.38	0.17	0.34
25	0.06				0.1	0.045	

Tabelle 3: Quantitative Werte zu Abbildung 5.

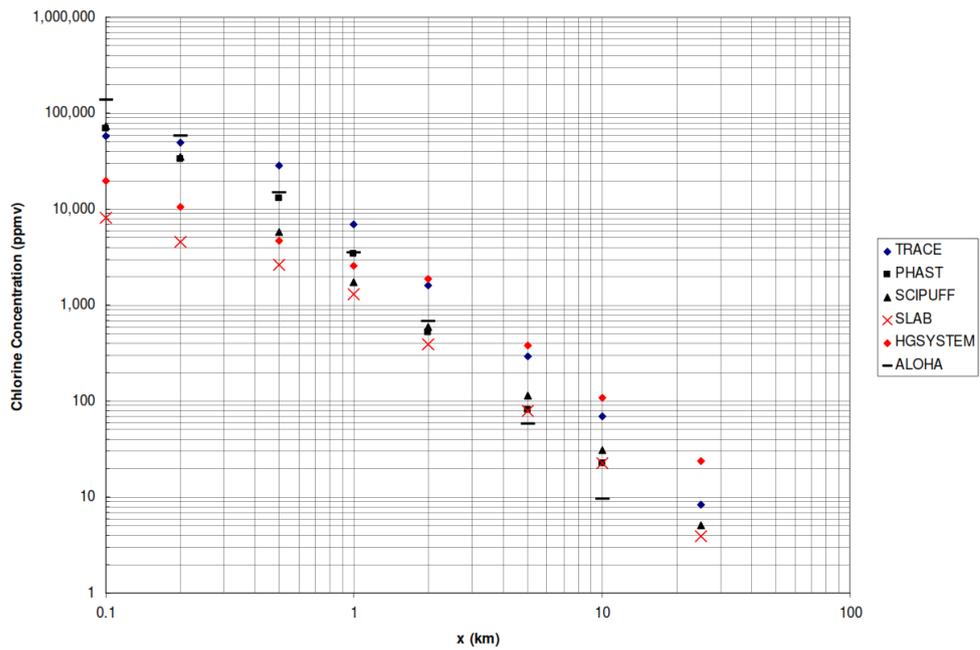


Abbildung 6: Wie Abbildung 5, jedoch für den Unfall in Macdona (die Werte bei Anwendung von Effects wurden hier nicht berechnet, dürften aber sehr ähnlich zu denjenigen für SLAB sein)

	TRACE	PHAST	SCIPUFF	SLAB	HG-SYS- TEM	ALOHA
x (km)	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
0.1	57'080	69'000	73'600	8'100	20'000	138'000
0.2	49'340	33'000	34'900	4'600	10'500	58'000
0.5	28'170	13'100	5'700	2'600	4'640	15'000
1	6'900	3'460	1'720	1'300	2'580	3'550
2	1'590	516	597	392	1'870	670
5	296	81.4	115	78.8	384	57
10	69	22.3	31	22.4	108	9.5
25	8.3		5	3.94	24	

Tabelle 4: Quantitative Werte zu Abbildung 6.

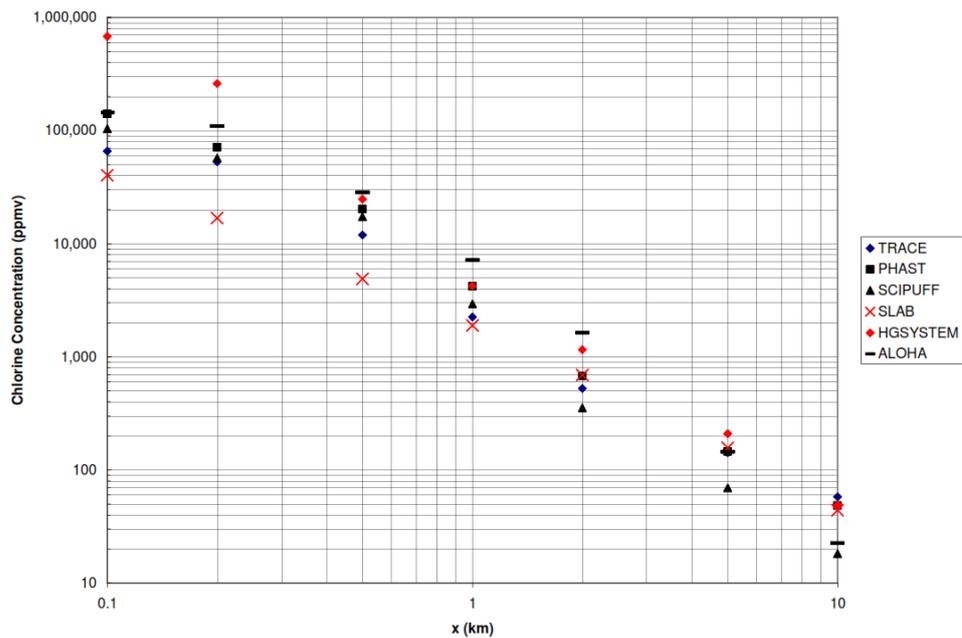


Abbildung 7: Wie Abbildung 5, jedoch für den Unfall in Graniteville (die Werte bei Anwendung von Effects wurden hier nicht berechnet, dürften aber sehr ähnlich zu denjenigen für SLAB sein)

	TRACE	PHAST	SCIPUFF	SLAB	HG-SYS-TEM	ALOHA
x (km)	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm
0.1	65'971	141'000	104'000	40'400	681'000	145'000
0.2	53'153	71'500	57'300	16'900	261'000	110'000
0.5	11'960	20'300	17'300	4'900	24'800	28'500
1	2'250	4'220	2'940	1'900	4'240	7'200
2	525	678	354	690	1'160	1'630
5	142	146	69.6	157	209	145
10	58	48.4	18.2	44.1	49	22.5
25	14			7.71		

Tabelle 5: Quantitative Werte zu Abbildung 7.

Aus diesen Ergebnissen lässt sich ableiten, dass SLAB bzw. EFFECTS insbesondere bei geringeren Distanzen bis ca. 100 m tendenziell tiefere Konzentrationen ausweist als Phast (und weitere Modelle). Die Unterschiede sind jedoch je nach Situation relativ gering. Eine klare Präferenz für eine EDV-Applikation geht nicht aus diesen Ergebnissen hervor.

Die Transportation Security Administration (TSA) of the Department of Homeland Security (DHS) der USA führen derzeit ein Projekt mit der Bezeichnung « 2016 Jack Rabbit Phase II » [23] durch. Dabei wurden reale Chlorausbreitungen vorgenommen und die auftretenden Konzentrationen gemessen. Sobald die Ergebnisse dazu vorliegen, können die Modellergebnisse der EDV-Applikationen hinsichtlich der real auftretenden Konzentrationen beurteilt bzw. verifiziert werden.

4.3 CFD/FDS-Modelle

Nebst den oben beschriebenen Modellen können Ausbreitungen von Stoffen auch mittels CFD-Modellen (Computational Fluid Dynamics) modelliert werden. Ein

entsprechendes Modell ist FDS (Fire Dynamics Simulator) des NIST (National Institute of Standards and Technology, U. S. Department of Commerce) [25]. Entsprechende Modelle weisen die folgenden Eigenschaften auf:

- FDS ist frei verfügbar
(Download: <https://pages.nist.gov/fds-smv/downloads.html>)
- Die Anwendung erfordert ein bedeutendes Know-how. Der User's Guide von FDS umfasst rund 300 Seiten.
- Die Modelle sind mathematisch vollständig beschrieben.
Hydrodynamic Model: "FDS solves numerically a form of the Navier-Stokes equations" and "Turbulence is treated by means of Large Eddy Simulations (LES)".
- Ortsspezifische Gegebenheiten wie Gelände und Objekte (Gebäude) können berücksichtigt bzw. abgebildet werden. Der Aufwand dazu ist jedoch erheblich.
- Die Berechnungen nehmen sehr viel Zeit in Anspruch. Werden Konzentrationen bis in Distanzen von rund 200 m ab der Freisetzungsquelle modelliert, so dauert eine einzige Modellberechnung ohne weiteres mehr als 20 Stunden (reine Rechenzeit des PC). Ergebnisse für grössere Distanzen sind nicht in ert nützlicher Frist Modellierbar.
- Der Fokus der Modelle liegt in der Modellierung der Ausbreitung bzw. der Konzentrationswerte an einem bestimmten Ort in Abhängigkeit der Zeit.

Eine zentrale Frage ist auch, wie die Ergebnisse der Ausbreitung von z. B. EFFECTS-Berechnungen mit den Ergebnissen von CFD/FDS-Modellen übereinstimmen. Anhand einer Vergleichsrechnung von EFFECTS und FDS können hierzu ein paar Anhaltspunkte abgeleitet werden.

Vergleichsrechnung: Auf einem Industrieareal werden in einem Gebäude (Gebäude 423) 40 Tonnen Chlor freigesetzt. Ein Teil verdampft sehr rasch. Der Rest verbleibt als tiefkalte Flüssigkeitslache im Raum und verdampft sehr langsam weiter. EFFECTS-Berechnungen zeigen, dass rund 9'000 kg Chlor sofort (Annahme im EFFECTS-Modell: innert 60 Sekunden) gasförmig freigesetzt werden. Dies entspricht einer Freisetzungsrate von 150 kg/s während 60 Sekunden. Die auftretenden Konzentrationen werden mittels FDS und EFFECTS ermittelt und verglichen.

FDS-Simulation der Freisetzung:

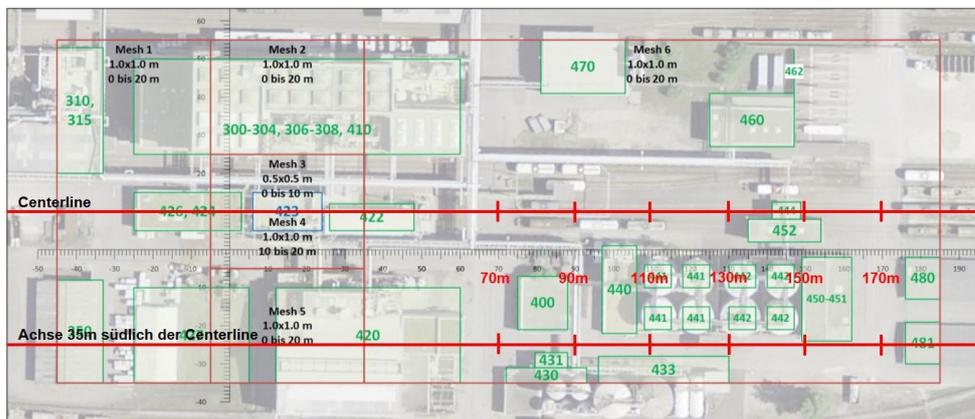


Abbildung 8: Industrieareal mit Bau 423 (blau umrandetes Gebäude auf der Centerline).

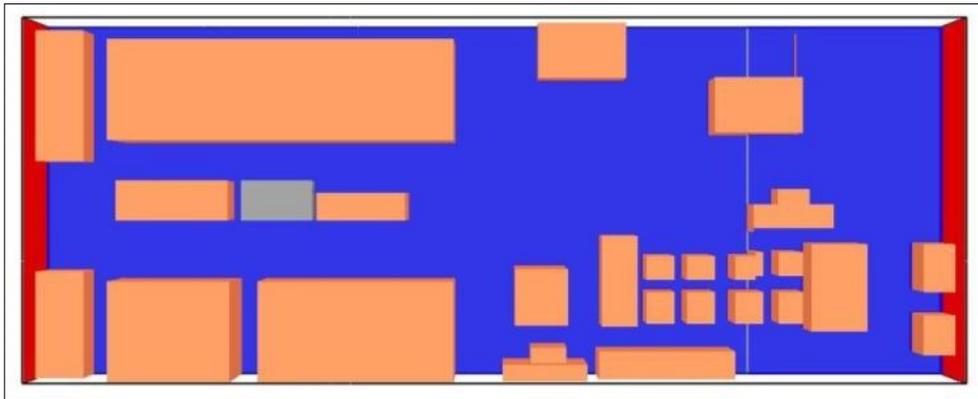


Abbildung 9: Modell im Umfeld des Gebäudes 423 für die FDS-Simulation.



Abbildung 10: Beginn der Freisetzung von Chlor aus dem Gebäude (Türe). Wind: 1 m/s von links (im Modell).



Abbildung 11: Situation nach 20 Sekunden ab Austritt aus dem Gebäude. Chlor tritt auch aus der zweiten Türe im Westen des Gebäudes aus.



Abbildung 12: Situation nach 25 Sekunden.

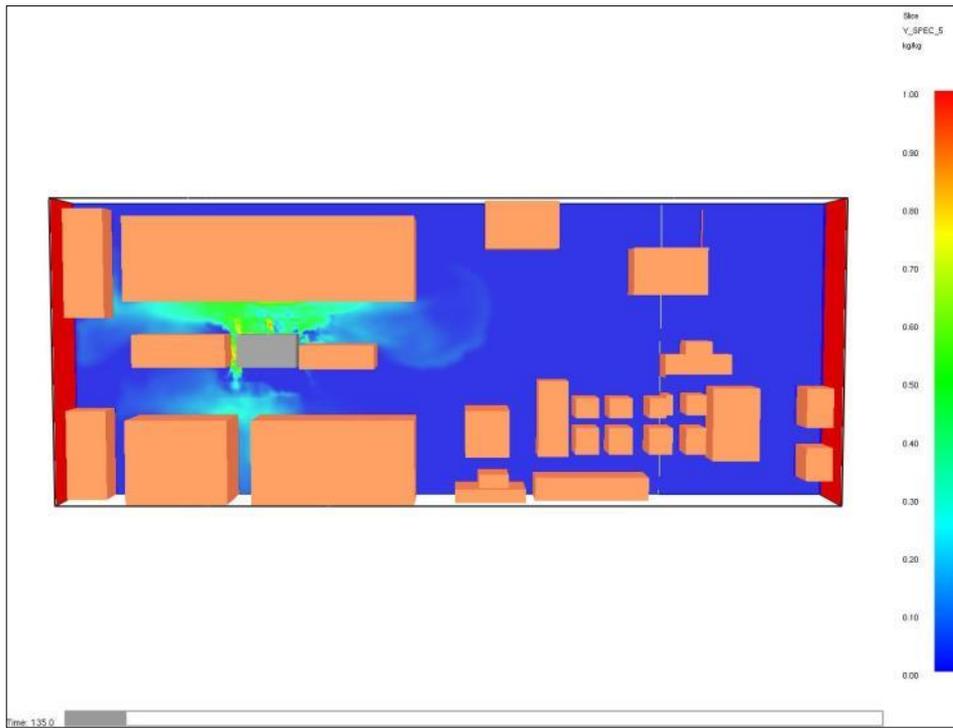


Abbildung 13: Situation nach 35 Sekunden.



Abbildung 14: Situation nach 45 Sekunden.

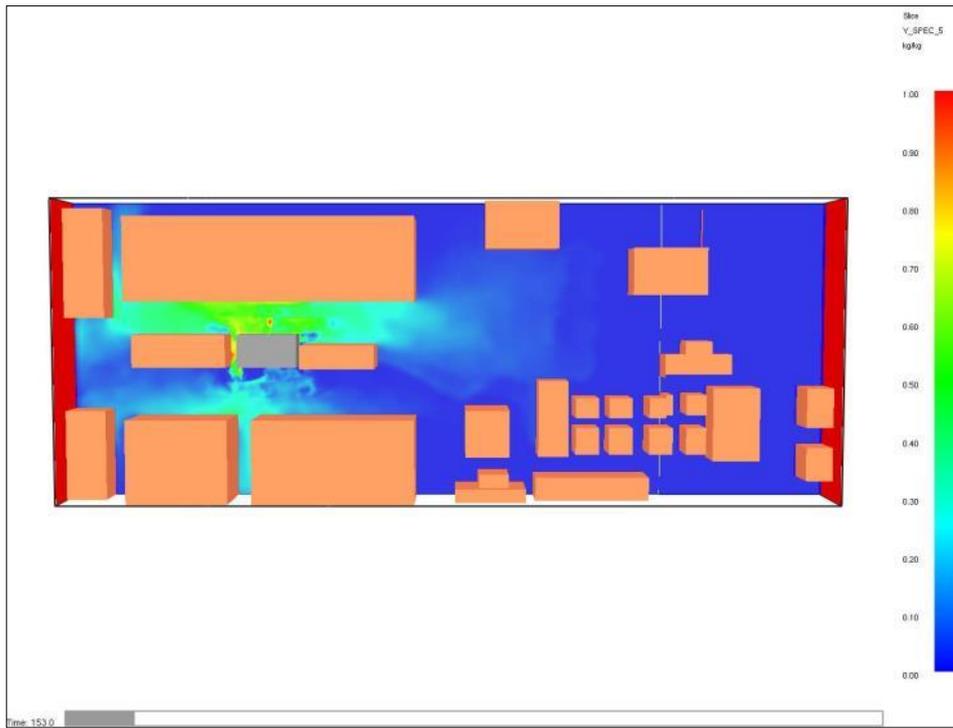


Abbildung 15: Situation nach 55 Sekunden.



Abbildung 16: Situation nach 125 Sekunden.



Abbildung 17: Situation nach 10 Minuten.

In der folgenden Tabelle sind die auftretenden Konzentrationen (Maximalwerte der auftretenden Konzentrationen) der Modellrechnung (FDS = blaue und rote Werte) mit den Ergebnissen der EFFECTS-Ergebnisse (EFFECTS = schwarze Werte) aufgeführt. Dabei ist die Linie Y = 10 m (Centerline) die Linie, welche im Modell von links nach rechts durch das Gebäude 423 verläuft und die Linie Y = -25 m (Achse 35 m südlich der Centerline) die Linie, welche im Modell 35 m unter (südlich) dem Gebäude 423 von links nach rechts verläuft.

	X = 70m	X = 90m	X = 110m	X = 130m	X = 150m	X = 170m	
Y = 10	0.15	0.14	0.09	0.08	0.04	0.03	[kg/kg]
(H = 2m)	184'000	171'000	110'000	98'000	49'000	37'000	[mg/m ³]
EFFECTS	167'000	138'000	117'000	96'000	89'000	73'000	[mg/m ³]
Y = -25m	0.07	0.055	0.04	0.035	0.015	0.005	[kg/kg]
(H = 2m)	86'000	67'000	49'000	43'000	18'000	6'000	[mg/m ³]
EFFECTS	75'000	96'000	96'000	86'000	80'000	75'000	[mg/m ³]

Tabelle 6: Vergleich der Modellergebnisse FDS versus EFFECTS.

Für die Centerline stimmen die Werte einigermaßen überein. Die mit EFFECTS berechneten Konzentrationen sind im Nahbereich (bis X = 130 m) tendenziell etwas tiefer. Ab X = 150 m sind die mit EFFECTS berechneten Konzentrationen um rund einen Faktor zwei grösser. Der Einfluss von Gebäuden ist auf der Centerline eher gering.

Auf der Achse 35 m südlich der Centerline stimmen die Werte im Nahbereich (bis X = 90 m) einigermaßen überein. Ab X = 110 m weist EFFECTS deutlich höhere

Konzentrationen aus (Faktor 10 bei $X = 170$ m). Die Unterschiede können durch die umliegenden Gebäude verursacht sein, welche hier einen bedeutenden Einfluss aufweisen können. Entsprechende Effekte werden mit EFFECTS nicht abgebildet.

5. Folgerungen

Die wichtigsten Folgerungen, die aus den obigen Kapiteln gezogen werden können, werden nachfolgend kurz zusammengefasst.

5.1 Stand der Technik zur Analyse von Chlorfreisetzungen

Freisetzungsszenarien

- Unfallereignisse aus den USA zeigen, dass sich häufig grosse Lecks mit Durchmessern von mehreren Dezimetern bilden, wenn Kesselwagen bei einem Unfall (Entgleisung, Zusammenstoss) aufgerissen werden. Dies dürfte auch für Unfälle in Europa zutreffen, auch wenn sich dort keine Chlorereignisse zugetragen haben (aber vergleichbare Ereignisse wie die Freisetzung von Propan in Viareggio). Die Anzahl der beobachteten Unfälle ist jedoch gering.
- Da der grösste Teil der Kesselwagenwandung in Kontakt mit der flüssigen Phase ist, ist eine Freisetzung als Flüssigkeit (bzw. als 2-Phasen-Gemisch mit einem beträchtlichen Anteil an kleinen Tropfen) deutlich wahrscheinlicher als eine reine Gasfreisetzung.
- Freisetzungen von total ca. 30 - 40 t mit Raten von ca. 100 – 1'500 kg/s dürften eher die Regel als die Ausnahme sein. Auch wenn die Anzahl der beobachteten Freisetzungen gering ist, so ist doch bei allen drei untersuchten Ereignissen ein Leck > 10 cm aufgetreten. Geht man von den Szenarien gemäss Pilotrisikoanalyse aus, so ist die bedingte Wahrscheinlichkeit für spontane und grosse kontinuierliche Freisetzungen (41 kg/s entsprechend 50 mm Leckdurchmesser) höher einzusetzen (in der Summe >50%) als bisher.⁴
- Bei keinem Unfallereignis gibt es klare Hinweise auf eine Bildung einer grösseren Lache mit flüssigem Chlor, welche die Ausbreitung signifikant verzögert. Einerseits zeigen Chlortropfen in der Luft wegen ihrer Kleinheit und dem raschen Verdampfen wenig Tendenz auszuregen. Andererseits ist eine Lachenbildung bei nicht-versiegeltem Untergrund (Schotter, natürliche Böden) wegen dem Energieeintrag (grosse Kontaktfläche mit Chlor) und dem heftig ablaufenden Phasenübergang (Bildung von Spritzern) unwahrscheinlich bzw. nur kurzlebig.

Hinweis: Es ist nicht das Ziel dieser Untersuchung, Aussagen zur Häufigkeit von Unfällen bzw. zur bedingten Wahrscheinlichkeit einer Chlorfreisetzung, wenn ein Chlorkesselwagen von einem solchen betroffen ist, zu machen.

⁴ Bisher wird angenommen, dass 75% der Freisetzungen auf kleine kontinuierliche Freisetzungen (1.7 kg/s während 30 Min.) entfallen.

Ausbreitungsszenarien

- Um Aufwand und Komplexität der Modellierung zu beschränken, genügt es, nur diejenigen meteorologischen und Umgebungs-Parameter im Sinne von Szenarien zu variieren, die einen grossen Einfluss auf die Ausbreitung haben. Es sind dies primär die Windgeschwindigkeit und die atmosphärische Stabilität (wobei letztere von ersterer abhängt). Sinnvolle Annahmen sind eine Kombination von hoher Stabilität (Pasquill E) und tiefen Windgeschwindigkeiten (2.0 m/s) sowie mittlerer Stabilität (Pasquill D) und mittlerer Windgeschwindigkeit (4.0 m/s).
- Für Temperatur (Umgebungstemperatur = Chlortemperatur), Luftfeuchtigkeit und Umgebungsrauigkeit genügt die Verwendung von Mittelwerten, wie sie in Kapitel 3.4 aufgeführt sind. Da sich die meisten Personen in einem Bereich mit erhöhter Umgebungsrauigkeit aufhalten (Vorhandensein von Gebäuden), sind diesbezüglich eher hohe Werte einzusetzen.

Toxische Wirkung

- Die Verwendung von Probit-Werten zur Ableitung von Letalitätswerten aus einer zeitlich variablen Konzentration via Dosiswert entspricht dem Stand der Technik und ist in der Anwendung nutzerfreundlich. Insbesondere ist so beispielsweise klar festgelegt, wie die Wirkung ansteigt, wenn die doppelte Konzentration während der halben Dauer einwirkt. Bei alleiniger Verwendung von Konzentrationsgrenzwerten für einen vorgegebenen Zeithorizont ist dies nicht ohne weitere Annahmen gegeben.
- Es wird die Verwendung der Werte von TNO (in der aktuellen Version von Effects) oder von DNV (dito für Phast) zur Verwendung empfohlen.
- Bei den Letalitäten ist zwingend zu unterscheiden zwischen Freifeldwerten und Werten im Inneren eines Gebäudes. Idealerweise lässt das verwendete Modell eine Ableitung von Letalitäten basierend auf einer Berechnung von Innenraumkonzentrationen (abgeleitet aus dem Verlauf der Aussenkonzentration und i.A. basierend auf einer zeitlich konstanten Luftwechselrate, die als Annahme festzulegen ist) zu. Ist dies nicht der Fall, so sind im Sinne von Expertenschätzungen pro Szenario und Abstandsbereich Innenraumletalitäten abzuschätzen, die im Vergleich zu den Aussenwerten plausibel sind.

5.2 Einsatz von Modellen

- Als Modelle, die entsprechend dem jeweiligen Stand des Wissens methodisch weiterentwickelt und bzgl. IT auf einem modernen Stand sind (z.B. Nutzung unter einem modernen Betriebssystem) stehen derzeit nur folgende zur Verfügung: Effects (derzeit in Version 10.0) bzw. Phast (derzeit in Version 7.2).
- Bei der Anwendung ist u.a. auf folgende Punkte zu achten:
 - Führt die Annahme von plausiblen Parametern zur Bildung einer Lache, so sollten diese im realistischen Rahmen angepasst werden, so dass nicht eine bedeutende Lachenbildung modelliert wird, was – wie oben erwähnt – der Erfahrung widerspricht und zu tiefen Konzentrationen in Windrichtung führen kann.

- Zur Modellierung der Freisetzung und der Ausbreitung verwenden Phast und EFFECTS unterschiedliche Modelle.
 - Die Modelle der Freisetzung basieren bei beiden EDV-Applikationen auf physikalischen Gegebenheiten. Entsprechend vergleichbar sind daher die Ergebnisse.
- Die Modelle der Ausbreitung sind verschieden und basieren auf sehr abstrakten Ansätzen. Wesentliche Bestandteile sind Koeffizienten, welche eine die Ausbreitung und Verteilung in alle Richtungen beschreiben und welche von Modell zu Modell verschieden sind. Einzig aufgrund der im Modell berücksichtigten Parameter kann nicht darauf geschlossen werden, wie gut ein Modell die Realität abzubilden vermag. Zentral ist für beide Modellansätze (Phast und EFFECTS) die Validierung anhand von realen Daten resp. realen Ausbreitungsversuchen.
- Sämtliche Modelle (EFFECTS, Phast, FDS, etc.) sind derzeit nicht mit Daten von realen Freisetzungen von Chlor verifiziert.⁵ DNV (Phast) und auch TNO (EFFECTS) sind derzeit daran, das Modell anhand der Daten zum Projekt «Jack Rabbit» zu verifizieren. Nach Abschluss dieser Arbeiten werden neue Versionen der EDV-Applikationen veröffentlicht. Es ist daher sinnvoll, neue Berechnungen mit den verifizierten, überarbeiteten Modellen durchzuführen (Phast von DNV oder EFFECTS von TNO).

5.3 Umgang mit Unsicherheiten

- Es ist nicht zielführend, bei der Vielzahl von notwendigen Annahmen bzw. Rechenschritten generell konservative Werte bzw. Ansätze zu verwenden, da das Ergebnis dann unrealistisch konservativ werden kann.
- Mit den derzeit im Rahmen des Screenings ausgewiesenen Ergebnissen (Schadenausmasse) werden die Risiken vermutlich überschätzt. Dies lässt sich zwar nicht ohne Weiteres sauber belegen. Ein Indiz, dass dies vermutlich der Fall ist, ergibt sich aus der Erfahrung, dass trotz teilweise grossen Freisetzungsmengen an Chlor nur in ganz wenigen Fällen (gemäss Abbildung 2 nur 1 Ereignis weltweit) eine schwere Schädigung (≥ 10 Todesopfer) eintrat. Gemäss Screening ist auch bei geringer Personenexposition im Fernbereich (Abstand von > 500 m), keinen Personen im Nahbereich (Abstand bis 500 m) und keinen exponierten Reisenden (Einspurstrecke) eine schwere Schädigung möglich. Zudem wird in $> 10\%$ aller Ereignisse, bei welchen Todesopfern auftreten, eine schwere Schädigung (mehr als 10 Todesopfer) ausgewiesen (flach verlaufende Summenkurve). Mögliche Gründe für systematisch konservative Ergebnisse in Bezug auf das Schadenausmass sind:
 - Vorsichtige Probit-Werte, die sich kaum an realen Daten eichen lassen
 - Konservative Ausbreitungsmodelle, welche die Verdünnung von Chlor in Windrichtung unterschätzen und/oder die Breite der Chlorwolke überschätzen
 - Ungenügende Berücksichtigung Gebäudeschutz

5 Das Dense Gas Dispersion Model von TNO wurde mit experimentellen Daten aus Desert Tortoise, Goldfish, Burro, FLADIS und Thorney Island validiert (vgl. [32]).

- Genügend Zeit für Evakuierung gefährdeter Personen bei Schwachwindsituationen und stärkere Turbulenz als modelliert bei Situationen mit Wind in Bereichen, wo sich Personen aufhalten (hohe Umgebungsrauigkeit durch Gebäude).
- In verschiedenen Fällen kann man möglicherweise konservativen Ansätzen mangels nachweisbar besseren Alternativen kaum ausweichen (z.B. Probit-Werte, Ausbreitungsmodelle). Umso wichtiger ist es, nicht systematisch und wiederholt konservative Ansätze bzw. Annahmen zu pflegen, wo dies nicht gilt.

Literaturverzeichnis

- [1] Verordnung über den Schutz vor Störfällen (Störfallverordnung, StfV) vom 27. Februar 1991 (Stand am 1. Juni 2015), SR 814.012.
- [2] Ehem. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft BUWAL (heute BAFU), Beurteilungskriterien zur Störfallverordnung StfV, Richtlinien für Verkehrswege, August 2001.
- [3] S. Lees, et al. (1991). A Dossier of Chlorine Accidents. Greenpeace International.
- [4] U.S. Department of Transportation. Pipeline and Hazardous Materials Safety Administration PHMSA. Incident Reports for Chlorine.
- [5] National Transportation Safety Board. Washington, D.C. Railroad accident brief report. LAX 96 FR 010. Derailment and hazardous materials release with fatality. April 11, 1996.
- [6] National Transportation Safety Board. Washington, D.C. Railroad Accident Report NTSB/RAR-06/03. Collision of Union Pacific Railroad Train, Macdona, Texas, June 28, 2004. PB2006-916303. Notation 7675D. July 6, 2006.
- [7] National Transportation Safety Board. Washington, D.C. Railroad Accident Report NTSB/RAR-05/04. Collision of Norfolk Southern Freight Train, Graniteville, South Carolina, January 6, 2005. PB2005-916304. Notation 7710A. November 29, 2005
- [8] U.S. Chemical Safety and Hazard Investigation Board. Investigation Report. Chlorine Release. DPC Enterprises, L. P. Festus, Missouri. August 14, 2002. Report No. 2002-04-I-MO. Mai 2003.
- [9] U.S. Chemical Safety and hazard Investigation Board. Investigation Report. Chlorine Release. DPC Enterprises, L.P. Glendal, Arizona. November 17, 2003. Report No. 2004-02-I-AZ. February 2007.
- [10] Übereinkommen über den internationalen Eisenbahnverkehr (COTIF) Anhang B – Einheitliche Rechtsvorschriften für den Vertrag über die internationale Eisenbahnbeförderung von Gütern (CIM). Anlage I. Ordnung für die internationale Eisenbahnbeförderung gefährlicher Güter (RID). Gültig ab 1. Juli 2001.
- [11] U.S. Government. 49 CFR Ch. I (10-1-11 Edition) §179.100-18.
- [12] C.C. Domingo, I. Raben. TNO. QRA of rail transport of dangerous goods through Basel. 2013.
- [13] N.J. Scenna, A.S.M. Santa Cruz. Road risk analysis due to the transportation of chlorine in Rosario city (Argentina). 2004.
- [14] J. Alehi Artimani, M Arjmand, M. Reza Kalaei. Modeling and Assessing Risk analysis of Chlorine Gas in Water Treatment Plants. European Journal of Experimental Biology. 2012.
- [15] V.R. Renjith, G. Madhu. Individual and societal risk analysis and mapping of human vulnerability to chemical accidents in the vicinity of an

- industrial area. International journal of applied engineering research. 2010.
- [16] CABB AG. Risikoermittlung nach Störfallverordnung. Elektrolyseanlage. 2016.
- [17] Unterarbeitsgruppe „Beurteilungskriterien Verkehrswege“. Pilotrisikoermittlung für den Transport gefährlicher Güter. Fallbeispiel Bahn. 1998.
- [18] Eisenberg N. A., et al. (1975). Vulnerability model. A simulation system for assessing damage resulting from marine spills. Final report, AD/AO15/245.
- [19] Arts J. (2011). Euro Chlor Technology Conference Budapest 2011. Accidental release of Chlorine: acute health effects, emergency limits values and concentration-response relationships.
- [20] The Chlorine Institute
Pamphlet 74 – Guidance on Estimating the Area Affected by a Chlorine Release”, Edition 6, June 2015
- [21] John D. Hearn, Richard Weber, Robert Nichols, Michael V. Henley, Shannon Fox; Deposition of Cl₂ on soils during outdoor releases, Journal of Hazardous Materials, 252–253 (2013) 107–114
- [22] Steven Hanna, Seshu Dharmavaram, John Zhang, Ian Sykes, Henk Witlox, Shah Khajehnajafi, Kay Koslan
Comparison of Six Widely-Used Dense Gas Dispersion Models for Three Recent Chlorine Railcar Accidents
- [23] Transportation Security Administration (TSA) of the Department of Homeland Security (DHS). 2016 Jack Rabbit II.
<http://www.uvu.edu/esa/jackrabbit/>
- [24] United States Department of Energy. Atmospheric Dispersion Modeling Resources. March 1995
- [25] National Institute of Standards and Technology (NIST) des U.S. Department of Commerce and VTT Technical Research Centre of Finland (VTT). NIST Special Publication 1019. Fire Dynamics Simulator. User's Guide. 2012.
- [26] SAPHEDRA WP1: Identification of existing tools for the modelling of hazardous phenomena. 2015.
- [27] SAPHEDRA WP2: Gap Analysis for Emerging Risk Issues. 2016.
- [28] SAPHEDRA WP3: Review and analysis of previous model evaluation protocols. 2016.
- [29] SAPHEDRA WP4: List of experimental campaigns and information available to be used to evaluate existing tools or new tools. 2015.
- [30] U.S. Environmental Protection Agency EPA. Evaluation of dense gas simulation models. EPA-450/4-90-018. 1991.
- [31] Bundesamt für Verkehr BAV. Risiken für die Bevölkerung beim Transport gefährlicher Güter auf der Bahn. Methodik & Datenaufbereitung

Screening Personenrisiken 2014 (Methodikbericht Screening Personenrisiken 2014). Februar 2015

- [32] The Netherlands Organisation of Applied Scientific Research (TNO)
Methods for the calculation of physical effects, CPR 14E 2005

A1 Modellgrundlagen

Die EDV-Applikationen Phast und EFFECTS verwenden zur Modellierung der Freisetzung von druckverflüssigten Gasen und der Ausbreitung von Schwergasen unterschiedliche Modelle. Die Modelle der beiden EDV-Applikationen sind in den entsprechenden technischen Dokumentationen beschrieben. Im Folgenden sind im Sinne eines Auszugs aus diesen technischen Dokumentationen die Basismodelle und die massgebenden Inputparameter kurz dargestellt.

EDV-Applikation EFFECTS

Technische Dokumentationen:

- Methods for the calculation of physical effects; Yellow Book; CPR 14E (Part 1); Chapter 2, Outflow and Spray release; TPDIS model
- Methods for the calculation of physical effects; Yellow Book; CPR 14E (Part 1); Chapter 4, Vapour cloud dispersion; Dense Gas Dispersion.
- An atmospheric dispersion model for denser-than-air releases; Donald L. Ermak, June 1990.

Modell der Freisetzung:

Two-phase outflow through a hole: Champagne outflow

The standard relations for liquid flow through orifices can be applied; see paragraph 2.5.4.2. However the fluid is assumed to have a density as a function of the vapour mass fraction [WorldBank, 1988].

So the mass flow rate can be estimated by

$$q_S = C_d \times A \times \sqrt{(2(P_0 - P_a) \times \rho_F)} \quad (\text{kg/s}) \quad (2.91)$$

with

$$\rho_F = 1 / (\Phi_m / \rho_V + (1 - \Phi_m) / \rho_L) \quad (\text{kg/m}^3) \quad (2.92)$$

Φ_m = quality or vapour mass fraction in the two-phase flow [-]

ρ_F = average fluid density (kg/m^3)

q_S	mass flow (discharge rate) (2.14)	kg/s
C_d	discharge coefficient (2.22)	-
A_h	cross-sectional area hole (2.22)	m^2
P_0	initial pressure (2.95)	N/m^2
P_a	ambient (atmospheric) pressure (2.1b)	N/m^2

Modell der Ausbreitung (basierend auf SLAB):

The cross-wind-averaged conservation equations

For a plume the conservation equations of chemical compound material, total mass and energy are:

$$d(m \rho u A) / dx = 0 \quad (\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}) \quad (4.113),$$

$$d(\rho u A) / dx = 2 \rho_a (b_y w_{e,t} + b_z w_{e,e}) \quad (\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}) \quad (4.114),$$

$$d(\rho u A c_p T) / dx = 2 \rho_a (b_y w_{e,t} + b_z w_{e,e}) c_{p,a} T_a + E_{pc} + E_{gh} \quad (\text{J m}^{-1}\text{s}^{-1}) \quad (4.115).$$

The conservation equations of momentum are the equation for the down-wind plume velocity u :

$$d(\rho u^2 A) / dx = -\rho_a d(g' A b_z) / dx + 2\rho_a u_a (b_y w_{e,t} + b_z w_{e,e}) + f_x \quad (\text{N m}^{-1}) \quad (4.116),$$

and the equation for lateral gravity slumping u_y :

$$d(\rho u u_y A) / dx = 2 g' \rho_a b_z^2 + f_y \quad (\text{N m}^{-1}) \quad (4.117),$$

For a lofted plume, the descent of plume height h is described with the momentum equation

$$d(\rho u u_z A) / dx = -g' \rho_a A + f_z \quad (\text{N m}^{-1}) \quad (4.118),$$

		Equation
x, y, z	Spatial coordinates in down-wind direction and the horizontal and vertical cross-wind directions.	
ρ, ρ_a	The densities in the plume and in ambient air.	4.138
T, T_a	The temperatures in the plume and in ambient air.	4.115, 4.136, 4.144b
m	The mass concentration of the chemical compound.	4.113
u	The down-wind plume velocity.	4.116
u_y, u_x ¹⁾	The velocities of plume spreading in the cross-wind directions.	4.117
u_z	Vertical velocity of the lofted plume	4.118
b_y, b_z, A	The half-width, height and area ($= 2b_y b_z$) of the plume.	4.114, 4.117, 4.152
$c_p, c_{p,a}$	The specific heats of the gas in the plume and of ambient air.	
$w_{e,e}, w_{e,t}$	The entrainment velocities at the edges and at the upper surface of the plume.	4.124-4.131
E_{pc}	The phase change energy per unit plume length.	4.144b
E_{gh}	The ground heat flux per unit plume length.	4.136-4.137
f_x, f_y, f_z	The friction terms in the 3 spatial directions.	4.132-4.135
g'	The effective gravity $g' = g\{(\rho_o - \rho_a)/\rho_a\}$.	

¹⁾ u_x appears in the instantaneous release model (4.163).

EDV-Applikation PHAST

Technische Dokumentation:

— DNV-GL: Technical documentation DISC/ATEX model: Theory; Discharge Scenarios; August 2014.

— DNV-GL: Technical documentation Unified Dispersion Model; Theory; August 2014.

Modell der Freisetzung

For liquids, or 2-phase storage to be released as liquid, any liquid head is added to the storage pressure. In these circumstances the initial pre-release state is:

$$P_{st} = P_{st}^s + \rho_L(P_{st}, T_{st})g\Delta H, T_{st}, \eta_{st} \quad (1)$$

The liquid density ρ_L is taken to be that at the top of the liquidⁱⁱⁱ. The following equations are used to determine the orifice conditions. By conservation of energy assuming initially the material is stagnant:

$$h(P_{st}, T_{st}, \eta_{st}) = h(P_o, T_o, \eta_o) + \frac{u_o^2}{2} \quad (2)$$

By conservation of entropy:

$$s(P_{st}, T_{st}, \eta_{st}) = s(P_o, T_o, \eta_o) \quad (3)$$

The orifice pressure P_o equals the ambient pressure in case of unchoked flow, and is determined from the choke pressure in case of choked flow

$$P_o = \max[P_a, P_c] \quad (4)$$

Here P_c is the choke pressure at the orifice and is defined as the pressure at which the mass flux, G_o , through the orifice is maximised^v:

$$G_o = \frac{u_o}{v_o} \quad (5)$$

The specific volume is calculated as:

$$v_o = \frac{\eta_o}{\rho_{Lo}} + \frac{(1-\eta_o)}{\rho_{Vo}} \quad (6)$$

The mass release rate, Q^* (kg/s) is then^{vi}:

$$Q^* = A_o G_o \quad (7)$$

The inputs required by the orifice model are as follows:

- vessel storage data:
 - two of the following: storage pressure P_{st}^{*i} ; storage temperature T_{st} (K); mass liquid fraction η_{st} (-)
 - inventory M_{st} (kg); this is the total chemical mass (vapour + liquid) stored in the vessel
 - scenario flag (used for 2-phase releases only: preferred liquid leak, preferred vapour leak, 2-phase leak)
- (case of liquid storage) sum (ΔH ; m) of liquid head (vertical height between the orifice and the top of the liquid) and pump headⁱⁱ.
- orifice area A_o (m²)
- flags
 - flashing suppression flag (to force no change in phase)
 - release phase for 2-phase storage (liquid, vapour, 2-phase)
- (case of > 0) fixed duration (s). Allows a fixed-duration run where orifice diameter is scaled to match required mass release rate

The model returns the following outputs:

- release rate Q (kg/s)
- release duration t_{rel} (s)
- orifice pressure P_o (Pa)
- orifice temperature T_o (K)
- orifice mass liquid fraction (η_{Lo})
- orifice velocity u_o (m/s)
- discharge coefficient C_D (-)

Modell der Ausbreitung (Steady-state release)

The profile form assumed here generalises on the original concepts of Ooms et al. (1974)¹² as suggested by Webber et al. (1992)¹³. The concentration profile is given by

$$c(x, y, \zeta) = c_o(x) F_v(\zeta) F_h(y) \quad (1)$$

$$F_v(\zeta) = \exp\left\{-\left|\frac{\zeta}{R_z(x)}\right|^{n(x)}\right\} \quad (2)$$

$$F_h(y) = \exp\left\{-\left|\frac{y}{R_y(x)}\right|^{m(x)}\right\} \quad (3)$$

The scaling coefficients in the above equations are:

$$R_y = \sqrt{2} \sigma_y \quad (4)$$

$$R_z = \sqrt{2} \sigma_z \quad (5)$$

At each downwind position x the UDM cloud can be characterised by a 'equivalent' cloud with effective height $H_{eff}(x)$, an effective cloud half-width W_{eff} and cloud speed u_{clid} , and equivalent top-hat concentration equal to the centre-line concentration c_0^v . Using Equations (1), (2), (3), the effective cloud data can be expressed as follows,

$$H_{eff} = \frac{I}{c(x, y, 0)} \int_0^{\infty} c(x, y, \zeta) d\zeta = \int_0^{\infty} F_v(\zeta) d\zeta = \Gamma(1 + \frac{1}{n}) R_z(x) \tag{ 6 }$$

$$W_{eff} = \frac{I}{c(x, 0, \zeta)} \int_0^{\infty} c(x, y, \zeta) dy = \int_0^{\infty} F_h(y) dy = \Gamma(1 + \frac{1}{m}) R_y(x) \tag{ 7 }$$

where the gamma function $\Gamma(z)$ is defined by

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \tag{ 8 }$$

plume variable	symbol	unit (instant.)	unit (cont.)
mass of the cloud	m_{clid}	kg	kg/s
excess downwind momentum	$I_{x2} = I_x - m_{clid}u_0(z_c) = m_{clid}u_x - m_{clid}u_0(z_c)$	kg m/s	kg m/s ²
vertical momentum	$I_z = m_{clid} u_z$	kg m/s	kg m/s ²
downwind position	x_{clid}	m	m
vertical position	z_{clid}	m	m
heat conduction from substrate	q_{gnd}	J	J/s
water evaporated from substrate	m_{wv}^{gnd}	kg	kg/s
cross-wind dispersion coefficient*	$R_y = 2^{1/2} \sigma_y$	m	m

Anmerkungen zu den Modellen

- Die Modelle zur Freisetzung sind vergleichbar und basieren auf physikalischen Gegebenheiten. Entsprechend liefern die beiden Modelle vergleichbare Ergebnisse.
- Die Modelle der Ausbreitung basieren auf sehr abstrakten Ansätzen. Wesentliche Bestandteile sind sogenannte Koeffizienten, welche eine Ausbreitung in die x-, y- oder z-Richtung beschreiben. Einzig aufgrund der im Modell berücksichtigten Parameter kann nicht darauf geschlossen werden, wie gut ein Modell die Realität abzubilden vermag. Zentral ist für beide Modellansätze die Validierung anhand von realen Daten resp. realen Ausbreitungsversuchen.