

**Ein numerisk studie av ammoniakkspreiing i eit  
urbant område ved bruk av simuleringsverktøyet  
FLACS**

Sigrid Skipenes Kissner



Ei masteroppgåve levert som ein del av arbeidskrava til ei mastergrad i prosessteknologi,  
retning sikkerheitsteknologi

Institutt for fysikk og teknologi  
Universitetet i Bergen  
Bergen, Noreg  
juni 2018



# Forord

For å komme i hamn med eit slikt produkt, er det fleire personar i kulissane som fortunar heider og ære!

Eg vil starte med å takke rettleiaren min, Bjørn Arntzen, for rettleiing og drøfting under prosessen. Det var i tillegg han som sette meg i kontakt med Erlend Wangsholm, som på det tidspunktet var tilsett i Ålesund brannvesen. Takk for at du introduserte meg for dette interessante prosjektet, samt for tilrettelegging for besøk hos bedrifter i Ålesund som nyttar ammoniakk i sitt daglege virke. Eg ønskjer òg å takke bedrifta Tyrholm & Farstad for omvising på anlegget samt deira interesse for å delta som studieobjekt i denne oppgåva. Dessutan fortunar brukastøtta til FLACS hjå Gexcon ei takkehelsing då dei har forsøkt å hjelpe til med dei ulike problema programvara har bydd på.

Vidare vil eg rette ei stor takk til fantastiske Rebecca som har bidrige med gode drøftingar, samt problemløysingar til tider då programvara ikkje har fungert som ønska. Eveline fortunar òg ei ekstra merksemeld då studietida ved UiB ikkje hadde vore det same utan våre interessante samtalar, hennar gode humør og vennskap.

Eg vil takke mine foreldre som alltid har stilt opp for meg, støtta meg, og motivert meg til å nå måla mine. Det er dei som har inspirert meg til å ta høgare utdanning, som har leia til at eg no kan levere ei masteroppgåve som ein del av mastergraden min. Ein ekstra takk rettast til min kjære pappa for korrekturlesing av oppgåva.

Sist, men ikkje minst, vil eg takke min aller største støttespelar, sambuaren min, Kim. Tusen takk for at du har halde ut med meg gjennom alle opp- og nedturar som det å skrive masteroppgåve har bydd på. Tusen takk for at du legg til rette for at eg skal få dei beste rammene til å utfolde meg.

Bergen, 1. juni 2018

---

Sigrid Skipenes Kissner



## **Samandrag**

Ammoniakk er eit giftig stoff som kan føre til skade på menneske og dyr som vert utsett for det. Då store mengder ammoniakk vert frakta og lagra i urbane områder som væske under trykk, vil det uggjere ei stor fare for befolkninga om ei utsleppsulykke skulle intrefje.

Målsetjinga med denne oppgåva var å modellere spreiing av ammoniakk i eit urbant område innanfor bygrensene til Ålesund for å kartlegge spreiing ved eit eventuelt utslepp. Analyseobjektet var logistikkbedrifta Tyrholm & Farstad som ligg sør på Aspøya, ei avøyene som utgjer Ålesund sentrum. Det vart òg lagt vekt på å undersøkje POOL-modellen for ammoniakk i FLACS.

Simuleringane vart utført ved hjelp av programvara FLACS, eit numerisk fluid dynamikk (CFD) verktøy, som løyser dei tre-dimensjonale Navier-Stokes likningane supplert med modellar for turbulens for å skildre utbreiinga av ammoniakkgass.

Ein modell av Ålesund beståande av terreng og eit utval bygningar vart lagt inn i FLACS. Ei rekke simuleringar vart utført for å undersøkje korleis ammoniakkgassen vil spreie seg ved ulike vindretningar og vindhastigheitar.

Det kjem fram at den mest dominerande vindretninga frå SSØ på 150 ° òg er den som spreiar ammoniakkgassen lengst. Ammoniakkgassen vil spreie seg på tvers av Aspøya, og kan føre til at dei som bur på vestsida av utsleppspunkta kan verte isolert når innsatspersonell etablerer eit tryggleiksområde rundt utsleppsstaden for å hindre at uforvarande kjem inn i faresona.



# Innhald

<b>Forord</b>	<b>iii</b>
<b>Samandrag</b>	<b>v</b>
<b>Nomenklatur</b>	<b>ix</b>
<b>1 Innleiing</b>	<b>1</b>
1.1 Motivasjon . . . . .	1
1.2 Målsetjing . . . . .	2
1.3 Tidlegare arbeid . . . . .	2
1.4 Avgrensing . . . . .	3
1.5 Oversikt over avhandlinga . . . . .	3
<b>2 Teori</b>	<b>4</b>
2.1 Ammoniakk . . . . .	4
2.1.1 Eigenskapar . . . . .	4
2.1.2 Helsefare og skadepotensial . . . . .	5
2.1.3 Bruksområde . . . . .	7
2.2 Kjøleteknisk anlegg . . . . .	8
2.3 Spreiing . . . . .	9
2.3.1 Faktorar som påverkar spreiing . . . . .	10
2.3.2 Modellar . . . . .	11
2.4 Numerisk fluiddynamikk (CFD) . . . . .	12
2.4.1 Dei grunnleggjande likningane . . . . .	12
2.4.2 Grensevilkår . . . . .	14
2.4.3 Turbulensmodellering . . . . .	14
2.4.4 Diskretisering . . . . .	14
2.5 FLACS . . . . .	15
<b>3 Metode</b>	<b>17</b>
3.1 Skildring av tenkt uønska hending . . . . .	17
3.2 POOL-simulering . . . . .	17
3.2.1 Grid . . . . .	18
3.2.2 Geometri . . . . .	18
3.2.3 Scenario . . . . .	18
3.2.4 Monitor Points . . . . .	18
3.2.5 Single field 3D output . . . . .	20
3.2.6 Simulation and output control . . . . .	20
3.2.7 Boundary conditions . . . . .	20
3.2.8 Initial conditions . . . . .	20
3.2.9 Gas composition and volume . . . . .	20
3.2.10 Pool . . . . .	20
3.2.11 Pool leak . . . . .	20
3.2.12 Leaks . . . . .	21
3.2.13 Ignition . . . . .	21
3.2.14 Species . . . . .	21

3.3	Sensitivitetsanalysar . . . . .	21
3.3.1	Gridsensitivitetsanalyse . . . . .	21
3.3.2	Lekkasjesensitivitet . . . . .	22
3.3.3	Pasquill-sensitivitet . . . . .	23
3.3.4	Temperatursensitivitet . . . . .	23
3.3.5	Sensitivitet for simulering med og utan bygningar og terrenge . . . . .	23
3.3.6	Fjellformasjonsensitivitet . . . . .	23
3.4	Spreiingssimulering . . . . .	23
3.4.1	Grid . . . . .	24
3.4.2	Geometri . . . . .	24
3.4.3	Scenario . . . . .	24
3.4.4	Monitor points . . . . .	26
3.4.5	Singled field 3D output . . . . .	26
3.4.6	Simulation and output control . . . . .	26
3.4.7	Boundary conditions . . . . .	26
3.4.8	Initial conditions . . . . .	27
3.4.9	Gas composition and volume . . . . .	27
3.4.10	Leaks . . . . .	27
3.4.11	Ignition . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Resultat og diskusjon</b>	<b>30</b>
4.1	POOL-simulering . . . . .	30
4.2	Sensitivitetsanalyse . . . . .	31
4.2.1	Gridsensitivitet . . . . .	31
4.2.2	Lekkasjesensitivitet . . . . .	32
4.2.3	Pasquill-sensitivitet . . . . .	33
4.2.4	Temperatursensitivitet . . . . .	34
4.2.5	Sensitivitet for simulering med og utan bygningar og terrenge . . . . .	34
4.2.6	Fjellformasjonsensitivitet . . . . .	37
4.3	Spreiingssimulering . . . . .	38
4.4	Uvisse . . . . .	42
<b>5</b>	<b>Konklusjon</b>	<b>48</b>
5.1	Vidare arbeid . . . . .	48
<b>Bibliografi</b>		<b>49</b>
<b>Vedlegg A</b>	<b>Definisjon av ammoniakk i FLACS</b>	<b>53</b>
<b>Vedlegg B</b>	<b>Utrekning av entalpikonstant</b>	<b>54</b>
<b>Vedlegg C</b>	<b>Vêrdata</b>	<b>57</b>
<b>Vedlegg D</b>	<b>Fjellformasjonsensitivitet for låg masserate</b>	<b>58</b>
<b>Vedlegg E</b>	<b>Figurar frå overlappande vindretningar og vindhastigkeit</b>	<b>59</b>
<b>Vedlegg F</b>	<b>Figurar frå simuleringane med høgare lekkasjerate</b>	<b>64</b>
<b>Vedlegg G</b>	<b>Figurar frå simuleringane med lågare lekkasjerate</b>	<b>71</b>

# Nomenklatur

## Latinske symbol

$c_p$	Spesifikk varmekapasitet ved konstant trykk	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}\text{kg}^{-1}$
$h$	entalpi	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
$k$	Turbulent kinetisk energi	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$
$M$	Molekylvekt	$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$
$p$	Trykk	$\text{Pa}$
$R$	Ideell gasskonstant $\approx 8.314$	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \text{mol}^{-1}$
$t$	Tid	$\text{s}$
$T$	Temperatur	$^{\circ}\text{C}/\text{K}$
$\mathbf{V}$	Lokal hastigheitsvektor	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$Y_F$	Massefraksjon av brensel	
$z_0$	Ruleikslengd	$\text{m}$

## Greske symbol

$\xi$	Blandingsfraksjon	
$\varepsilon_g$	Gjennomsnittleg høgd av overflateruleik	$\text{m}$
$\epsilon$	Dissipasjon	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}\text{s}^{-1}$
$\rho$	Tettleik	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$

## Andre symbol

$\nabla \cdot$	Divergens
$\partial$	Partiell derivert

## Forkortinger

ACGIH	The American Congress of Governmental Industrial Hygienists
AIHA	American Industrial Hygiene Association
CASD	Computer Aided Scenario Design
CFD	Computational Fluid Dynamics / Numerisk fluidodynamikk
CFL	Courant-Friedrichs-Lowy number
DNS	Direkte numerisk simulering
EEGL	Emergency Exposure Guidance Level
ERPG	Emergency Response Planning Guidelines
FLACS	FLame ACceleration Simulator
IDLH	Immediately Dangerous to Life and Health
IIAR	International Institute of Ammonia Refrigeration
KFK	Klor Fluor Karbon
LES	Large-Eddy Simulering
moh	Meter over havnivå
NFPA	National Fire Protection Association
NIOSH	National Institute for Occupational Safety and Health
NIST	National Institute of Standards and Technology
ppm	Parts per million
RANS	Reynolds-averaged Navier-Stokes
S	Sør
SN	Dei sameinte nasjonane
SSV	Sør-sørvest
SSØ	sør-søraust
TNT	Trinitotoluene
V	Vest
VSV	Vest-sørvest
ØNØ	Aust-nordaust
ØSØ	Aust-søraust

# Kapittel 1

## Innleiing

### 1.1 Motivasjon

Store mengder ammoniakk vert frakta og lagra i urbane områder som væske under trykk. Dette utgjer ei stor fare for befolkninga om ei ulykke skulle intrefje. Prosedyrane som innsatspersonell nyttar ved ei ulykke, som å etablere evakueringssoner, er basert på generell forståing av oppførselen til materialet under eit storskala utslepp, utleia av modellar. Ulike evakueringssavstandar, slik som dei nemnt i *Emergency Response Guidebook* [1], er meint til å gjelde kvar som helst, og er dermed utvikla ved å nytte enkle modellar utan omsyn til topografi. Sonene er difor romslege for å ha tryggleiksmargin.

Kvart år førekjem det fleire ammoniakklekksjar verda over. Fleire av ulykkene har krevd liv. Tilbake i 1992 i Dakar, Senegal, revna ein 22 tonn lagingstank med ammoniakk. Dette resulterte i 129 dødsfall og meir enn 1100 personar vart skadd [2]. I Mexico omkom 7 personar og 40 blei forgifta etter at vegarbeidarar stakk hol på ein rørleidning som inneholdt ammoniakk tilbake i 2013 [3]. Også i Norge har det oppstått dødsulykke knytt til ammoniakk. Dette hendte i 2002 då ein ammoniakk tank eksploderte på ein gard i Larvik. Ein person mista livet, medan 14 personar vart frakta til sjukehus. Ulykka tok i tillegg livet av 170 dyr [4].

Ålesund, ein kystby som er etablert over fleire øyar på Nordvestlandet, er den byen i Norge som har høgst koncentrasjon av bedrifter som nyttar, og lagrar ammoniakk. Mange av fiskeribedriftene som nyttar ammoniakk som kjølemedium i kjøleanlegg sine ligg tett ved bykjerna. Dette fører til at byen kan bli sperra av dersom lekkasjer oppstår, og øya Hessa vert då isolert. Brannvesenet i Ålesund rykker årleg ut til minst éin lekkasje i byen [5]. Studieobjektet i denne oppgåva er bedrifta Tyrholm & Farstad i Møre og Romsdal. Logistikkelskapet har store kjøle- og fryselager sør på Aspøya, ei av øyane som utgjer Ålesund sentrum. Det er kjøle- og fryselagera som vert vurdert som interessante sidan dei nyttar ammoniakk som kjølemedium i anlegget. Då den dominande vindretninga bles nordover, har denne bedrifta ei ugunstig plassering med tanke på spreiling av ammoniakk ved ein eventuell lekkasje. Samfunnskritiske funksjonar som operasjonssentralane til politiet og brannvesenet ligg i umiddelbar nærleik til bedrifta. Det er derfor av stor interesse å undersøkje korleis ammoniakkgassen vil spreie seg for å sjå utstrekninga og kor store områder av byen som vil verte råka.

Bedrifter som handterar og nyttar ammoniakk må dessutan vurdere utslepp og førebygging av desse som ein del av si risikoanalyse. Her er det viktig å vurdere risikoen for tredjeperson i tillegg til risiko for eigne tilsette. Tredjeperson er personar utanfor anlegget som kan verta påverka av anleggets aktivitet. Det vert viktig å kjenne til kva risiko ammoniakk utgjer for tredjeperson i framtida dersom ammoniakk vert utbredt som ein energibærar. Ved å utbreie ammoniakk som ein energibærar, kan større mengder ammoniakk bli tilgjengeleg for fleire føremål og i andre anlegg, og enda fleire kan dermed bli utsatt for uønska utslepp av stoffet.

## 1.2 Målsetjing

Målsetjinga med denne oppgåva er å modellere spreiling av ammoniakk i eit urbant område innanfor bygrensene til Ålesund ved å nytte FLACS som eit CFD simuleringsverktøy. Ulike spreilingsscenario vil verta produsert og analysert ved å variere vindhastigkeit og vindretning. Dette vil danne eit bilet på kva område som vil verte påverka av ein eventuell lekkasje av ammoniakk. Det er i tillegg ynskjeleg å undersøkje POOL-modellen for ammoniakk i FLACS.

## 1.3 Tidlegare arbeid

Både eksperimentelle og numeriske studiar har vorte utført for å undersøkje korleis utslepp og spreiling av ammoniakk vil te seg. Dei eksperimentelle forsøka har vore utført på ulike testområde, langt unna folk, for å unngå at uskulige forbipasserande skal bli skada som fylgje av eksperimenta. For numeriske studiar kan ulike simuleringsprogram basert på CFD nyttast. Dei studiane undersøkt her har brukt CFD programmet FLACS.

Greulich og Hansen [6] har offentleggjort ein liknande studie ved at dei har simulert ammoniakkutslepp frå ein tank plassert på eit tak. Ved å nytte CFD modellen FLACS har dei undersøkt effekten av vindhastigkeit, vindretning samt høgd på utslepp. Vidare såg dei på korleis ammoniakken spreidde seg i eit urbant område for å fastslå den individuelle- og samfunnsrisikoen knytt til eit ammoniakkutslepp for personar utandørs.

Gavelli m.fl. [7] har brukt CFD modellen, FLACS, for å vurdere verknaden av landskap (som topografi, bygningar og andre hindringar) på spreiling av ei gassky med giftig andedrettsfarleg materiale ved utslepp i eit fiktivt urbant område. Her har dei laga ei hending der eit køyretøy kolliderer med ein tankbil som fraktar ammoniakk. Kollisjonen fører til ei hurtig frigjering av tankinnhaldet, og ved bruk av simuleringsverktøyet FLACS, har dei utført simuleringar for ammoniakkutslepp i ulike vindretningar både for eit realistisk spreilingsscenario, og for ei identisk hending utan topografiske hindringar. Dei kom fram til at det er stor forskjell på spreilingsscenarioa. For eit scenario utan hindringar er det berre utsleppskarakteristikken og dei atmosfæriske forholda som temperatur, vindhastigkeit og atmosfærisk stabilitet som påverkar spreilinga. Når detaljane rundt det urbane landskapet vert inkludert, spelar parametrar som plassering av utslepp og vindretning òg inn. Dette gjer at for dei fleste vindretningar vil forsøka der ein ser vekk frå landskapsdetaljar overvurdere det aktuelle fareområdet. Det kan igjen føre til lite effektiv utnytting av ressursar i samband med evakuering av personell. Dersom vinden får ein kanaliseringseffekt, som Gavelli m.fl oppdaga for vindretninga som gjekk parallelt med hovudgata der utsleppet hende, kan det føre til at den forenkla modellen undervurderar konsekvensen. Slik kan det oppstå farar som i verste fall kan føre til skadar eller dødsfall.

*Jack Rabbit testserien* består av ein serie med eksperiment som tek føre seg utslepp av ammoniakk og klor frå trykksette tankar. Føremålet med testane var å gje eksperimentelle data for å betre forståinga av åtferda til eit flashande jetutslepp. I tillegg skulle testane vere med på å validere atmosfæriske spreatingsmodellar som kan nyttast til å føreseie konsekvensane av eit utilsikta utslepp. Gavelli m.fl [8] har nytta CFD verktøyet FLACS til å simulere Jack Rabbit forsøka. To-fase modellen i FLACS er nytta då denne tillat modellen å føreseie spreilinga samt bassenget som vert donna på bakken som eit resultat av eit flashande jetutslepp. Deira analyse er fokusert på korleis bassengdanning vil påverke utviklinga av dampskya. Dei nemner òg skilnadane mellom klor og ammoniakkutslepp, samt effekten av vindhastigheita på spreiling av dampskya.

*Desert Tortoise series* var ein serie med fire storskala utslepp av tryksett ammoniakk. Hovudmålet med testserien var å måle atmosfærisk spreiling av materialet under ulike meteorologiske

føresetnadar. Storleiken, forma, og temperaturen til ammoniakkskya, samt kor lang utstrekning den farlege konsentrasjonen ville ha i vindretninga var til undersøking. Goldwire m.fl [9] legg fram hendingsgangen og resultata frå testserien.

Ichard m.fl [10] har nytta FLACS for å simulere *Desert Tortoise test series*. Dei fire storskala utsleppa av trykksatt ammoniakk i væskefase vart simulert. Nedfallset var estimert under eksperimentet. CFD modellen sine resultat var innanfor 30% av observert verdi for tre av dei fire testane. Ytinga til modellen i samband med føreseiing om maksimal gasskonsentrasjon ved 100 og 800m vart vurdert, og modellen gav ein over-estimering på 25 % der 94% av prognosane var innanfor ein faktor på to for observasjonane.

Ein artikkel utgjeven av Bouet m.fl [11] tek føre seg eit program der storskala eksperiment for atmosfærisk spreiing vart utført. Målsetjinga med testingane var å måle konsentrasjonen av ammoniakk i ein avstand opp til 2 km frå utslepp for å generere data som kan forbetre to-fase utslepp og spreingsmodellering. Dei kom mellom anna fram til at ammoniakkskya oppførte seg som ein tung gass der skyen ikkje steig, samt at faste objekt plassert nokre meter frå utsleppspunktet har ein betrakteleg effekt på konsentrasjonsverdiane målt i same vindretning. Konsentrasjonane var omlag halvparten av målt konsentrasjon utan hindring.

## 1.4 Avgrensing

Dette arbeidet avgrensar seg til å sjå på korleis ammoniakk vil spreie seg ved ein eventuell lekkasje hjå Tyrholm & Farstad i Ålesund. Då hovudfokuset vil vere på korleis tredjeperson kan bli utsett for ammoniakk, har ikkje simuleringane vorte strekt lenger for å ta omsyn til korleis ammoniakken vil spreie seg vidare utover vatnet. Modellane er dessutan ikkje rett kopi av Ålesund, då berre eit utval av dei bygningane næra lokasjonen for lekkasje er lagt inn. Det er i tillegg ei avgrensing når det kjem til modellen nytta for Pool-simulering. Her er det berre teke omsyn til dei største objekta i maskinrommet, medan røyr og mindre gjenstandar vart utelatt.

Når det kjem til vindretning og hastigkeit, er det utført simuleringar for alle observasjonar med relativ frekvens over 2%. Dei retningane og hastigkeitene som har mindre enn relativ frekvens på 2% har ikkje blitt vurdert.

På grunnlag av omfattande simuleringstid under analyse av fjellformasjonssensitivitet, har ikkje fjellet Hessa vorte teken omsyn til i dei vidare spreiingssimuleringane.

## 1.5 Oversikt over avhandlinga

I kapittel 2 vert noko av den naudsynte bakgrunnsteorien for oppgåva presentert. Kapittelet er delt inn i 5 delar. Det startar med ein presentasjon av ammoniakk, der eigenskapane, bruksområde og faren den utgjer for helsa vert introdusert. Vidare blir kjøleteknisk anlegg kort presentert, før spreiingsfaktorar og modellar vert omtala. Etter dette vert CFD og dei grunnleggjande likningane introdusert saman med turbulensmodellering og diskretisering. Til slutt vert programvara FLACS skildra i korte trekk.

Kapittel 3 skildrar dei ulike modellane og parametra nytta i den numeriske studien. Resultata vert presentert og diskutert i kapittel 4. Til slutt vert konklusjonen presentert i kapittel 5, der òg forslag til vidare arbeid basert på denne oppgåva vert nemnt.

# Kapittel 2

## Teori

Dette kapittelet skildrar grunnleggjande teori om ammoniakk, kjøleteknisk anlegg, gasspreiing samt numerisk fluiddynamikk og FLACS. Målsetjinga er ikkje å presentere teorien i full detalj, men framheve viktige konsept som trengs for å forstå korleis ammoniakk vil spreie seg ved eit utslepp. Lesaren er derfor referert til dei originale bøkene og artiklane for fleire detaljar.

### 2.1 Ammoniakk

#### 2.1.1 Eigenskapar

Ammoniakk,  $\text{NH}_3$ , er ein naturleg samanbinding bygd opp av eit nitrogenatom og tre hydrogenatom. Samanbindinga er fargelaus som gass og væske, som er vanlegaste forma for ammoniakk, medan ammoniakk i fast form har kvit farge. Det er trykket og temperaturen som avgjer kva tilstand ein finn stoffet i. Ved standardvilkåra, 1 bar og  $0^\circ\text{C}$ , har ammoniakk i gass og væskefase lågare tettleik enn luft og vatn.

På grunn av høg termisk konduktivitet, varmekapasitet og fordampingsevne, har ammoniakk gode varmeoverføringskarakteristikkar i faseendringssituasjonar [12]. Saman med at det er billig, og at det ikkje gjev miljømessige skadeverknadar, er det eit gunstig kjølemedium [13].

Sjølv om ammoniakk vert sett på som ein relativt stabil samanbinding, kan den likevel delta i farlege reaksjonar med andre materiale. National Fire Protection Association (NFPA) har publisert *Fire Protection Guide to Hazardous Materials*, som listar opp fleire reaksjonar som kan vere farlege.

Dei sameinte nasjonane (SN) og U.S Department of Transportation har kategorisert ammoniakk som ein ikkje-brennbar gass til sendingsføremål, sjølv om den er brennbar i luft innanfor eit konsentrasjonsområde. Dette er fordi desse konsentrasjonane er høge, og det vil vere vanskeleg å oppnå dette utandørs då ammoniakkgassen vanlegvis er lettare enn luft. Gassen vil stige og fortynnast ved utslepp ute, og ein brennbar situasjon vil vere vanskeleg å oppnå [12].  $\text{NH}_3$  bør likevel handsamast som ein brennbar gass [14].

Utilsikta utslepp av ammoniakk i væskefase kan føre til at det blir danna eit basseng på bakken, samstundes som ein del vil gå over til damp omgåande. Fordampingsraten er mellom anna avhengig av temperaturen før utsleppet, kor lett væska kan absorbere varme frå omgjevnadane, mengde fri overflate for fordamping og omfanget av luft i bevegelse over overflata. Ved eit utslepp av varm væske, vil fordampingsraten vere høg i starten, for så å minke etterkvart som fordampingsrata kjøler ned resterande væske.

Nokre av dei fysiske eigenskapane til ammoniakk er lista opp i tabell 2.1, som er henta frå International Institute of Ammonia Refrigeration (IIAR) [12].

**Tabell 2.1:** Eit utval av fysiske eigenskapar til ammoniakk frå IIAR [12]. Verdiane for øvre og nedre grense for brenneevne er dei nyaste verdiane oppgjeven av NFPA.

Eigenskap	Føresetnad	Verdi
Molekylvekt		17.03 g/mol
Farge		Ingen
Fysisk tilstand	Romtemperatur	Gass
Frysepunkt	$p = 1 \text{ atm}$	-78 °C
Kokepunkt <sup>1</sup>	$p = 1 \text{ atm}$	-33.3 °C
Kritisk trykk		11410 kPa
Kritisk temperatur		133 °C
Relativ tettleik	0°C/1 atm/ gass	0.596
Relativ tettleik	15.5°C/væske	0.62
Spesifikt volum	0°C/1 atm/ gass	1.30 m <sup>3</sup> /kg
Luktterskel		5-50 ppm
Øvre grense for brenneevne		28 vol-%
Nedre grense for brenneevne		15 vol-%
Tenningstemperatur	Utan katalysator	651 °C

<sup>1</sup> Kokepunktet til ammoniakk varierer med ein desimal i ulike kjelder. Datapage for ammoniakk nyttar -33.4 °C som kokepunkt.

### 2.1.2 Helsefare og skadepotensial

NFPA har utvikla eit klassifiseringssystem, NFPA 704, for kjemiske farar. Systemet nyttar ein fargekoda diamant med fire kvadrantar for å framstille fare knytt til helse(blå), brennbarheit(raud) og reaktivitet(gul). Den nedste kvadranten(kvit) er reservert for å indikere spesielle farar. I ammoniakk sitt tilfelle kan ein føre opp ”ALK” for å nemne materialets alkaliske natur i denne kvadranten. Farane rangerast frå 0 til 4, der 0 er minimal fare, medan 4 er alvorleg fare. Figur 2.1 og tabell 2.2 syner dei fareverdiane NFPA har tildelt ammoniakk. Tabellen gjev òg ei forklaring til fastsetjing av verdiane [12].

Denne figuren syner at ammoniakk utgjer ei stor fare for helsa. Ammoniakk er ein giftig substans som kan føre til skade på menneske og dyr som vert utsett for det. Stoffet er giftig for kroppen via innanding og inntak, og ved innanding er den særslig irritante for slimhinner og lungevev. Sår hals, hoste og andenaud kan òg oppstå. Sjølv om ammoniakk er akta som ein svak base, reagerer den veldig korrosivt med alt kroppsvev. Dersom ein svel flytande ammoniakk, som ved atmosfærisk trykk er lågare enn kokepunktet på -33.3 °C , vil ein med ein gong oppleve smerter og brannskadar i munn og spiserøyr. Flytande ammoniakk kan dessutan føre til frostskadar, brannsår og permanent blindheit ved kontakt med hud eller auge. Ettersom ammoniakk har ein skarp og irritante lukt, med luktterskel mellom 5-50 parts per million (ppm), vil folk som har moglegheit til det, forsøke å flykte før dei blir utsett for konsentrasjonar som har irreversible skadeeffekt. Ulike konsentrasjonar gjev ulik respons. Ved ein konsentrasjon på 400 ppm vil øyeblikkeleg irritasjonar i hals og svelg oppstå, medan hoste førekjem ved 1700 ppm.



**Figur 2.1:** Klassifisering av kjemisk fare for ammoniakk. Bilete er attgjeven frå IIAR [12].

Konsentrasjonar på 2400 ppm er livstrugande etter 30 minutt, medan kort eksponering for verdiar mellom 5000 og 10000 ppm gjev høg sannsyn for dødsfall [12, 15].

**Tabell 2.2:** Fareverdiar for ammoniakk [12].

Fare	Vurdering	Forklaring til vurdering
Helse	3	Hovudsakleg på grunn av korrosive effektar på hud og irreversible augeskadar
Brann	1	Fordi det er vanskeleg å få gassen til å brenne sjølv om den har eit brennbarheitsområde
Reaktivitet	0	Fordi ammoniakk ikkje reagerer valdsamt med mange stoff

Fleire instansar har fastsett ulike terskelverdiar knytt til eksponering av ammoniakk.

Immediately Dangerous to Life and Health (IDLH) er ein verdi fastsett av The National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH), som gjev den konsentrasjonen som ein person kan flykte frå innan 30 minutt utan å oppleve irreversible helseeffektar. For ammoniakk er IDLH 300 ppm [12]. Over dette nivået er det naudsynt å nytte pusteapparat for personell, til dømes brannfolk, som kan utsetjast for slike nivå.

American Industrial Hygiene Association(AIHA) har definert Emergency Response Planning Guidelines (ERPG) for ammoniakk. Dette er retningslinjer for beredskapsplanlegging som skal gje innsatspersonell ein felles oppfatning av korleis dei skal opptre ved eit eventuell utslepp av ammoniakk. Tre nivå er bestemt ut i frå kva helseeffektar som kan oppstå ved eksponering. Dei er definert som [16]:

1. ERPG-1: Maksimal luftboren konsentrasjon som nesten alle individ kan utsetjast for i 1 time utan å oppleve eller utvikle effekt av konsentrasjonen.
2. ERPG-2: Maksimal luftboren konsentrasjon som nesten alle individ kan utsetjast for i 1 time utan å oppleve eller utvikle irreversible eller andre seriøse skadelege helseeffektar.
3. ERPG-3: Maksimal luftboren konsentrasjon som nesten alle individ kan utsetjast for i 1 time utan å oppleve eller utvikle livstrugande helseeffektar.

Eit utval av terskelverdiar med forklaring er lista opp i tabell 2.3.

**Tabell 2.3:** Terskelverdiar for eksponering av ammoniakk [12, 16].

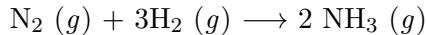
	Terskelverdi	Forklaring til fastsett verdi
ACGIH <sup>2</sup>	25 ppm	Tidsvekta terskelverdi. Dampkonsentrasjonen arbeidrarar kan vere utsett for i ein normal 40 timars arbeidsveke utan biverknad.
	35 ppm	Terskelverdi for korttidseksposering. Arbeidrarar kan tolle 15 minutt utsett for denne verdien utan negative effektar.
EEGL <sup>3</sup>	100 ppm	Konsentrasjonen militært personell kan vere utsett for i opptil 24 timer under nødtilstand.
IDLH	300 ppm	Konsentrasjonen ein person kan flykte frå innan 30 min for å unngå irreversible helseeffektar.
AIHA	1000 ppm	Akutt giftig konsentrasjon.
ERPG-1	25 ppm	Maksimal luftboren konsentrasjon som nesten alle individ kan utsetjast for i 1 time utan å oppleve eller utvikle effekt av konsentrasjonen.
ERPG-2	150 ppm	Maksimal luftboren konsentrasjon som nesten alle individ kan utsetjast for i 1 time utan å oppleve eller utvikle irreversible eller andre seriøse skadelege helseeffektar.
ERPG-3	1500 ppm	Maksimal luftboren konsentrasjon som nesten alle individ kan utsetjast for i 1 time utan å oppleve eller utvikle livstrugande helseeffektar.

<sup>2</sup> The American Congress of Governmental Industrial Hygienists

<sup>3</sup> Emergency Exposure Guidance Level, utvikla av The National Research Council (NRC)

### 2.1.3 Bruksområde

Ammoniakk kan framstillast industrielt ved Haber-Bosch-metoden som står for 75 % av produksjonen på verdsbasis. Metoden får nitrogen i lufta til å reagere med hydrogen etter reakjonslikninga:



Framstillinga føregår ved høge trykk og temperaturar i nærvær av ein katalysator [17].

Kommersiell utvikling av ammoniakksyntese er rekna for å vere ein av dei mest betydelege teknologiske framstega som heile menneskeheita har drege nytte av [12]. Det vart mogleg å masseprodusere landbrukskjødsel som førte til ein massiv auke i avlingar [18] og gav kraftig befolkningsvekst i verda [19]. I 2015 vart tilnærma 88% av produsert ammoniakk nytta til gjødsel i USA [20].

Ettersom tilgang på brensel kan vere avgrensa under strid, har det amerikanske forsvaret utført studiar knytt til ammoniakk som eit brensel. Ved tilgang på riktig utstyr kan brensel produserast frå dei naturlege elementa, nitrogen og hydrogen, som høvesvis er å finne i luft og vatn. Dersom ein kan dra nytte av dette, vil ein ikkje vere like avhengig av forsyningar av brensel under kamphandlingar. Studien kom fram til at bruk av ammoniakk som brensel er mogleg å gjennomføre, sjølv om det har sine feil og manglar. Ein av avgrensingane var at produktivitetten

til eit fly som var driven på ammoniakk var mindre enn ein fjerdedel samanlikna med eit fly som nytta hydrokarbon som brensel [21]. Før dette var ammoniakk allereie nytta som brensel i bussar i Belgia under andre verdskrig [22]. Forskinga på ammoniakk har likevel helde fram då fleire ser på ammoniakk som ein energiberar for framtida sidan det ikkje slepp ut karbondioksid. Afff m.fl. [23] gjev eit innblikk i fleire måtar å nytte ammoniakk på i brenselceller.

Ammoniakk kan dessutan nyttast som ein hydrogenberar. Hydrogen er eit anna brensel som ikkje inneheld karbon. Det eksisterar ikkje naturleg, og er i tillegg vanskeleg å lagre og transportere på grunnlag av låg volumetrisk energitettleik. Dette gjer at det har vore utfordrande å utnytte potensialet til hydrogen som brensel. Ved å nytte ein hydrogenberar, vil lagringa og transporteringsa av hydrogen verte meir gunstig. Samanlikna med andre hydrogenberarar er ammoniakk godt eigna. Eit mol ammoniakk inneheld 1.5 mol hydrogen som svarer til  $108 \text{ kg/m}^3$ , og er vesentleg meir enn dei  $25 \text{ kg/m}^3$  lagra i metallhydrid som er det mest avanserte hydrogenlagringssystemet. Dette gjev ein høg hydrogentettleik. Ammoniakk er dessutan det rimelegaste alternativ når ein ser på kostnadane knytt til transporteringseigenskapane til dei ulike hydrogenberarane. Og ved allereie etablert infrastruktur i samband med lagring, distribuering og transporterung er det mange føremonar knytt til bruken av ammoniakk som ein hydrogenberar [24, 25].

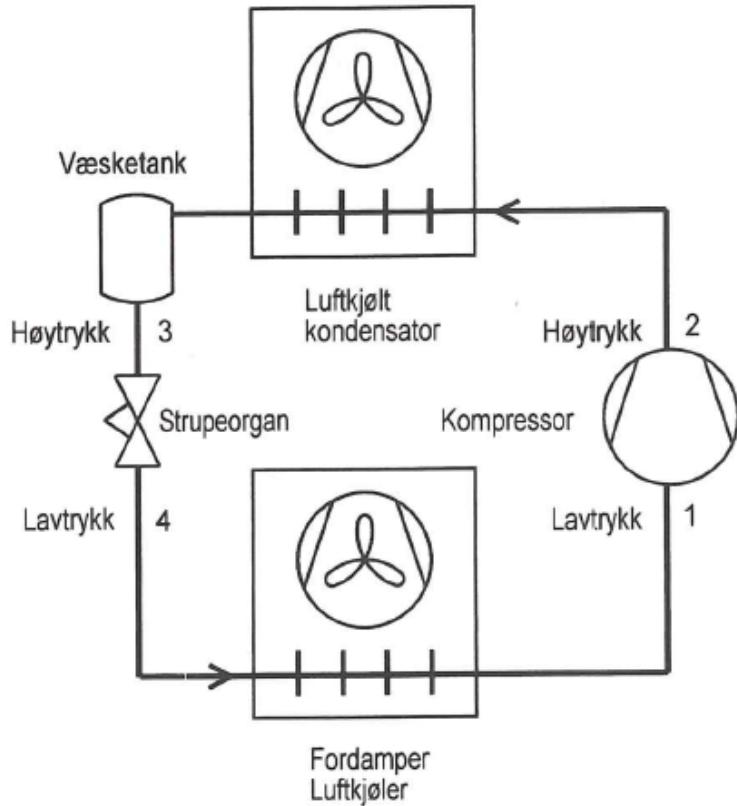
Som nemnt tidlegare har ammoniakk mange eigenskapar som gjer det til eit gunstig kjølemedium. På grunn av dette har det vore eit leiande kjølemedium i over 100 år. I kjølemiddelinseindustrien går ammoniakk under namnet R717, som det har blitt tildelt då det er ein uorganisk samanbinding. Ein stor føremon med ammoniakk er at det er eit naturleg kjølemedium som ikkje utøver effekt på verken ozonnedbryting eller drivhuseffekt. Som ein følgje av Montreal-avtalen og Kyoto-avtalen, der det vart vedtatt å redusere utslepp av gassar med ozonnedbrytande effekt samt gassar som er med på å auke drivhuseffekten, har mange av dei tidlegare kjølemedia som inneheldt Klor Fluor Karbon (KFK) blitt forbodde eller utfasa. Dette har vore med på å gjere ammoniakk til eit endå meir utbreidd kjølemedium [13, 26, 27].

Ammoniakk, som med sine mange bruksområde, er i tillegg nytta til produksjon av fargestoff, gummi, fiber og plast, samt i eksplosivar som ammoniumnitrat, trinitotoluene (TNT) og nitroglyserin. Det er dessutan brukt til reining av vatn og behandling av mat og drikke. Folk flest er mest eksponert for ammoniakk nytta i reingjeringsmiddel i hushaldninga [23, 28].

## 2.2 Kjøleteknisk anlegg

I høve fysiske lover vil varmeenergi naturleg strøyme frå ein høgare temperatur i retning ein lågare i eit forsøk på å utjamne temperaturskilnadar. Dersom ein ynskjer å hindre dette må ein nytte ein teknisk innretning som eit kuldeanlegg. Dette vil ha som føremål å løfte varmeenergi vekk frå den låge temperaturen og til eit høgare nivå slik at den ynskte lågare temperaturen kan oppretthaldast. Denne tilstanden har ein så lenge kuldeanlegget er i drift, dersom det stansar vil temperaturutjamning bli resultatet.

Figur 2.2 syner eit flytskjema av eit enkelt kretsløp i eit kjøleanlegg. Dei synlege komponentane som dannar kjøleanlegget er; kompressor, kondensator, strupeorgan, fordampar og røyrleidningar. I tillegg til desse er det eit kjølemedium inne i systemet. Væska som vert nytta som kjølemedium endrar aggregatilstand og bind varmeenergi ved fordamping og frigjer energien igjen ved kondensering. Dersom ein lekkasje skulle oppstå i eit anlegg, vil væska fordampe og strøyme ut i atmosfæren. Kjølemediet nytta i denne oppgåva er R 717, betre kjend som ammoniakk med kjemisk betegning  $\text{NH}_3$ . Ettersom ammoniakkdampen har mindre massettelleik enn luft, vil den stige opp. Dette gjer at utluftinga frå eit maskinrom må liggje i takhøgde [13].



**Figur 2.2:** Flytskjema av eit enkelt kretsløp i eit kjøleanlegg. Komponentane er teikna i samsvar med NS-EN 1861, og figuren er henta frå Nydalen [13].

Kompressoren i eit kjøleanlegg har i oppgåve å komprimere og løfte kjølemediedampen danna i fordamparen opp til ein så høg metningstemperatur at den kan gje frå seg varmeenergi og kondenserast. Gassen med høgt trykk vert vidare leia over til kondensatoren der varmeenergien vert fjerna frå gassen. Dette skjer ved at gassen vert kjølt ned til ein kondenseringstemperatur slik at den vil endre aggregattilstand og gå over til væske. Eit kjølemedium, vatn eller luft, tar opp varmeenergien og fører den vekk. Strupeorganet er eit skilje mellom høgtrykksida og lågtrykksida som skal sørge for at trykket i kondensatoren oppretthaldast slik at kjølemediet held fram med kondenseringa til væske. Samstundes må trykket i fordamparen haldast lågt nok til at anlegget har ynskt temperatur. Når kjølemediet passerer struveventilen, og strøymer inn i fordamparen, må trykkfallet vere så stort at væska startar å koke. Fordamparen tar så opp varmeenergien som førekjem ved fordampinga. Kompressoren sug inn damp frå fordamparen, noko som òg er med på å halde trykket lågt i fordamparen slik at meir væske kan fordampe. Slik held den enkle syklusen i kretsløpet i figur 2.2 fram [13].

## 2.3 Spreiing

I denne delen er informasjonen henta frå boka *Lees' Loss Prevention in the Process Industries* [29], med mindre noko anna er oppgjeve.

Spreiing av gass frå ein lekkasje på eit anlegg vert bestemt av hastigheita og oppdrifta til gassen. Dersom momentumkretene er dominerande, vil 'fluidet' danne ein jet, medan ein plume vert danna når oppdriftskretene er dominerande. Ein jet er ein straum av væske, gass eller små faste partiklar som vert raskt sleppt ut frå ei dyse eller ein opning. Ein plume er derimot ei søyle med eit fluid som bevegar seg gjennom eit anna fluid. Det er fleire faktorar som spelar inn på

sjølve spreiinga av gassen, der både ibuande eigenskapar og ytre faktorar har stor innverknad.

### 2.3.1 Faktorar som påverkar spreiing

#### Ibuande eigenskapar

Gass som spreiar seg kan ha positiv, nøytral eller negativ tettleik samanlikna med omgjevande luft i det den vert frigjeven. Ved positiv tettleik vil gassen vere lettare enn luft, og vil dermed stige. Dette kan skuldast låg molekylvekt eller ein høg temperatur på gassen. Fuktigheita i lufta kan òg føre til ein lettare gass då kondenseringa av vassdropane er med på å auke temperaturen til gassen. Mange av dei farlege gassane har derimot ein negativ tettleik og oppfører seg som tunge gassar. Dette fører til at gassen vert liggjande som eit teppe på bakken. Faktorar som høg molekylvekt eller ein låg temperatur på gassen kan forklare den negative tettleiken. Dessutan kan fordamping av væskedråpar vere med på å fjerne varme frå gassen, slik at den vert kaldare og oppfører seg som ein tung gass.

Storleiken og høgda på kjelda, uansett om det er ei punktkjelde, linjekjelde eller områdekjelde vil påverke spreiingssituasjonen saman med den kinetiske energien til den frigjevne gassen. Dei farlegaste utsleppa vert handsama som ei kjelde ved bakkenivå. Den kinetiske energien, dvs. momentum, vil ha ein monaleg effekt på omfangset av innblanda luft. Ved høg kinetisk energi, vil store mengder luft vere blanda inn, noko som fører til at gassen vert fortynna og konsentrasjonen vert lægre.

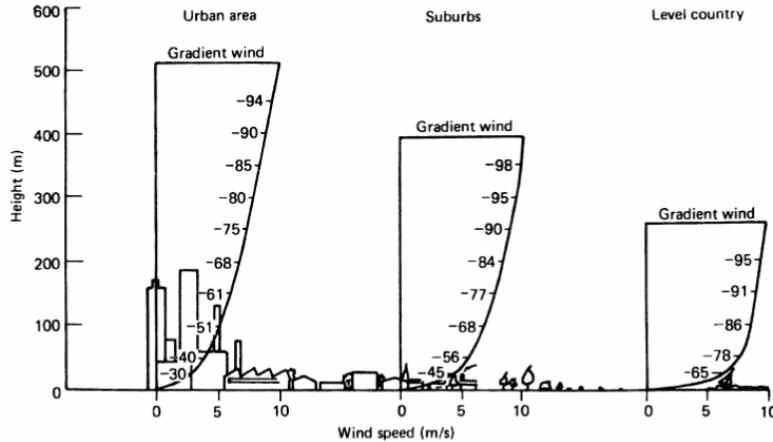
Sett vekk frå faktorane som involverar gassen sjølv, og måten den vert frigjeven på, er det ytre faktorar som tilhøve knytt til meteorologi, samt topografin som påverkar spreiing mest.

#### Ytre påverknad

Meteorologiske høve som har innverknad på spreiing av gass, er vindretning og hastigkeit, samt stabilitetsforholda til atmosfæren. Når ein ser på desse forholda, er fokuset på det atmosfæriske grenselaget, den nedre delen av atmosfæren som vert påverka av jorda si overflate. Topografin påverkar spreiinga av gass ved at ulike terrenget har forskjellig overflateruleik, som vil verke inn på spreiinga.

Vind er rørsle av luft forårsaka av Corioliseffekten og trykkdirferansar, som fører til at vind strøymar frå eit område med høgare trykk til eit område med lågare trykk for å utlikne trykkdirferansane. Vinden er karakterisert av vindhastigkeit og vindretning. Vindretninga er definert som den retninga vinden kjem frå. Saman med informasjon om vindhastigheita, vert vindretninga for ein gitt lokasjon presentert i ei vindrose. Vindhastigheita varierer med høgd og ulike terrengeoverflater. Den vert redusert av friksjonseffektar i omgjevnaden, og figur 2.3 syner ein hastigheitsprofil for vind over ulike områder. Dette er ein av grunnane til at gradientvinden, som er der friksjonen ikkje lenger verkar inn på vinden, er høgare for eit urbant område enn for eit landleg område. Vindhastigheita er i tillegg lågare i byområde då bygningane er til hinder for luftstraumen, noko som igjen fører til uroleg luft, kjent som turbulens.

Samstundes vert vindprofilen påverka av overflata si ruleikslengd,  $z_0$ . Ved ein aerodynamisk grov overflate, ein overflate der strøyminga er turbulent ved overflata, vert hastigheitsprofilen bestemt av ruleikslengda. Den er avhengig av høgd og fordeling av objekt. Ruleikslengda til is er veldig låg, medan skog og urbane område har ein mykje høgare verdi. Dersom ein ikkje kjenner til denne verdien, kan den reknast ut ved å nytte det enkle forholdet der den er relatert



**Figur 2.3:** Effekten av terreng på vindhastighet. Biletet er henta frå Mannan [29].

til den gjennomsnittlege høgda av overflateruleiken,  $\varepsilon_g$

$$z_0 = \frac{\varepsilon_g}{30} \quad (2.1)$$

FLACS sin brukarmanual [30] nyttar dette forholdet som ein tommelfingeregel når det kjem til fastsetting av ruleikslengd.

Stabiliteten til det atmosfæriske grenselaget kan delast i tre ulike kategoriar, avhengig av korleis ein luftpakke vert flytta vertikalt. Dette er relatert til den vertikale temperaturgradienten, lapse rate, som skildrar kor mykje temperaturen minkar med høgda. Ein luftpakke nær jordoverflata vert varma opp og vil dermed stige. Oppførselet til luftpakken vil vere avhengig av temperaturgradienten til omkringliggjande fluid. Kategoriane er definert som:

1. Ustabil: Ustabile forhold førekjem når omkringliggjande luft vert avkjøla raskare enn luftlomma, slik at sistnemte alltid er varmare relativt til omgjevnadane. Dette fører til at luftlomma vedlikeheld oppdrifta, og held fram med å stige.
2. Nøytral: Ved ein nøytral atmosfære vil luftlomma avkjølast like raskt som omgjevnadane.
3. Stabil: Ein stabil atmosfære oppstår når luftlomma vert avkjølt raskare enn lufta rundt. Dette fører til at den stigande luftlomma mister oppdrifta, og vil falle tilbake til den opphavelege lokasjonen.

Ustabile forhold er forbunde med solrike dagar medan stabile forhold vanlegvis førekjem på klare netter og kjølige rolige haustdagar. Nøytrale forhold er knytt til dagar og netter som er overskya. Dessutan fører auka vindhastigkeit til nøytrale forhold. Ein ustabil atmosfære fører til meir turbulens. Dette gjer at meir luft vert fanga i den frigjevne gassen, slik at den vil verte fortynna og spreie seg. Dette er grunnen til at spreiing er størst ved ustabile forhold, og minst ved stabile forhold. På bakgrunn av stabiliteten til atmosfæren har Pasquill definert seks ulike klasser som varierer frå veldig ustabil til veldig stabil. Ytterlegare informasjon om desse klassene kan finnast i boka til Mannan [29].

### 2.3.2 Modellar

Ettersom spreiing av gass er kompleks i form av mange faktorar som verkar inn, vert spreingsmodellar nytta for å føresjå korleis konsentrasjonen av gassen oppfører seg under ulike føresetnadnar. Resultat frå modellane kan nyttast til å fastslå om eksisterande eller planlagde industrielle anlegg samsvarar med nasjonale standardar, og om eventuelle tryggleikstiltak må

setjast i verk for å redusere risikoen for, eller hindre farlege utslepp. Det er eit stort utval av modellar for spreiling som strekker seg frå lette å rekne på som *Gaussian plume models* til krevjande modellar basert på numerisk fluid dynamikk, CFD [31].

*Gaussian plume models* vert ofte nytta for lettare gassar med positiv oppdrift. Denne modellen baserer seg på at spreilinga vil følgje ein gaussisk distribusjon. For tyngre gassar kan *box model* nyttaast. Her vert det antatt at gasskya har form som ei pannekake, med like eigenskapar både i vertikal retning samt i kryssvindretninga. Felles for desse to modellane er at dei ikkje er eigna for anna enn flate terreng. Ved kupert terren, område med bygningar og andre spesielle spreingssettingar, er det naudsynt med andre modellar. Mange av dei eksisterande spreulingsmodellane er gjeldande for svært avgrensa situasjonar. Ein type modellar som kan simulere komplekse og meir realistiske situasjonar, er derimot CFD baserte modellar [29, 31].

## 2.4 Numerisk fluiddynamikk (CFD)

Målsetjinga med CFD er å studere rørsla til fluid. Det fysiske aspektet til fluidstrømming er styrt av tre fundamentale prinsipp:

1. Massa er bevart.
2. Newton si andre lov (kraft = masse x akselrasjon).
3. Energi er bevart.

Desse fundamentale fysiske prinsippa kan uttrykkjast ved grunnleggjande matematiske likningar, enten som ei integral likning eller som ei partiell differensial likning, avhengig av kva strømmingsmodell som vert nytta. Numerisk fluiddynamikk er kunsten å bytte integrala eller partiell deriverte i desse likningane med diskretiserte algebraisk form, som vidare kan løysast for å skaffe tall for strømmingsfeltet ved diskrete punkt i tid og/eller rom [32].

### 2.4.1 Dei grunnleggjande likningane

#### Kontinuitetslikninga

Kontinuitetslikninga er utleia ved å bruke prinsippet *masse er bevart* på ein vald strømmingsmodell. I boka *Unit operations of Chemical Engineering* [33] uttrykkjer McCabe m.fl dette på følgjande måte:

$$\text{Masse akkumulert} = \text{masse som strøymar inn} - \text{masse som strøymar ut}.$$

Dersom ein nyttar eit infinitesimalt lite fluidelement fast i rommet, vil ein få kontinuitetslikninga som ei differensial likning på konservert form [32], som ein kan sjå i likning (2.2):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0, \quad (2.2)$$

der  $\rho$ ,  $t$  og  $\mathbf{V}$  er tettleik, tid og den lokale hastigheitsvektoren.  $\nabla \cdot$  er vektor operatoren, divergens, definert som:

$$\nabla \cdot (\mathbf{V}) = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}.$$

## Momentumlikninga

Det grunnleggjande konseptet med momentumbalanse på eit volumelement er i fylgje McCabe m.fl [33]:

$$\text{Momentum} = \text{momentum inn} - \text{momentum ut} + \text{summen av krefter som verkar på systemet.}$$

Kreftene som verkar på systemet er ein kombinasjon av fjernkrefter og overflatekrefter, der fjernkrefter inkluderer gravitasjons-, elektriske- og magnetiske krefter. Overflatekreftene er tilstades i form av trykk, skjær- og normalkraft.

Ved å nytte Newtons 2. lov på ein strømningsmodell av ein infinitesimalt lite fluidelement fast i rommet, kan ein uttrykkje momentumlikninga i x-retning som fylgjer [32]:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho u \mathbf{V}) - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (2.3)$$

Tilsvarande likningar gjeld for y- og z-retning.

## Energilikninga

Det siste fysiske prinsippet som energilikninga utleiastr frå, energi er konservert, er termodynamikkens første lov. Når denne vert brukt på ein fluidstrømmingsmodell der fluidelementet bevegar seg med strømminga, seier lova at:

*Endringa av energi inni fluidelementet svarar til netto flux av varme inni elementet og arbeid utført på elementet på grunn av overflatekrefter og fjernkrefter.*

Ettersom energilikninga er svært lang, er det berre prinsippet som vert omtala her. Sjølve likninga er presentert i Anderson [32] si bok om CFD.

## Oppsummering av dei grunnleggjande likningane

Navier-Stokes likningar er eit omgrep som ofte er nytta i CFD. Tidlegare var det dei tre momentumlikningane som utgjorde Navier-Stokes likningar, men i moderne litteratur om CFD har omgrepet vorte utvida til å inkludere kontinuitetslikninga og energilikninga. Det gjer at systemet no består av fem likningar med seks ukjente variablar ( $\rho, p, u, v, w, e$ ). For å lukke systemet er det naudsynt med like mange likningar som ukjente variablar. Tilstandslikninga for den ideelle gasslova kan innførast som ei sjette likning:

$$pM = \rho RT, \quad (2.4)$$

der  $p$  er trykk,  $M$  er molekylær vekt,  $\rho$  er tettleik,  $R$  er den ideelle gasskonstanten, tilnærma  $8.314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$  og  $T$  er temperatur. Denne likninga introduserer ein ny ukjend variabel, temperatur, som kan løysast ved eit termodynamisk forhold. Dette forholdet kan uttrykkjast ved:

$$dh = c_p dT \quad (2.5)$$

der  $h$  er entalpi og  $c_p$  er varmekapasiteten. Systemet består no av sju likningar med sju ukjente, og kan dermed lukkast [32].

## 2.4.2 Grensevilkår

Dei grunnleggjande likningane kan løysast for mange ulike strøymingsfelt, inkludert spreiingssimuleringar. Ulike grensevilkår gjer at likningane kan nyttast for fleire situasjonar. Grensevilkåra, og nokre gongar startvilkåra, gjev den bestemte løysinga frå likningane. Ein fysisk føresetnad for eit viskøst fluid som strøymer forbi ein stasjonær overflate, er at hastigheita ved overflata vil vere null. Det same gjeld for temperatur ved at fluidlaget som er i direkte kontakt med ein vegg, vil halde same temperatur som veggen. Den riktige numeriske utføringa av desse grensevilkåra er eit av hovudområda i CFD [32].

## 2.4.3 Turbulensmodellering

Turbulente straumar er karakterisert ved kontinuerlege fluktusjonar i hastigkeit. Desse fluktusjonane er eit resultat av virvlar danna av skjær i straumen. Ein betydeleg del av den kinetiske energien er knytt til dei større virvlane, og energien som vert tilført straumen avtek ved minkande storleik på virvlane. Ulike turbulensmodellar eksisterer for å ta i betraktning energien som vert tilført strøymminga på grunn av turbulens. Modellane tar for seg ulike skalaer der den finaste inkluderer alle virvlane, medan den grovaste ser vekk frå desse.

Direkte numerisk simulering (DNS) inkluderer alle dei turbulente virvlane. Då den òg tar for seg dei minste virvlane er det naudsint med fleire grid punkt, noko som fører til ein uoverkommeleg berekningstid med ein tilsvarande overveldande mengde med detaljar i tid og rom. Hadde det ikkje vore for dette, ville DNS vore nyttta for alle utrekningar.

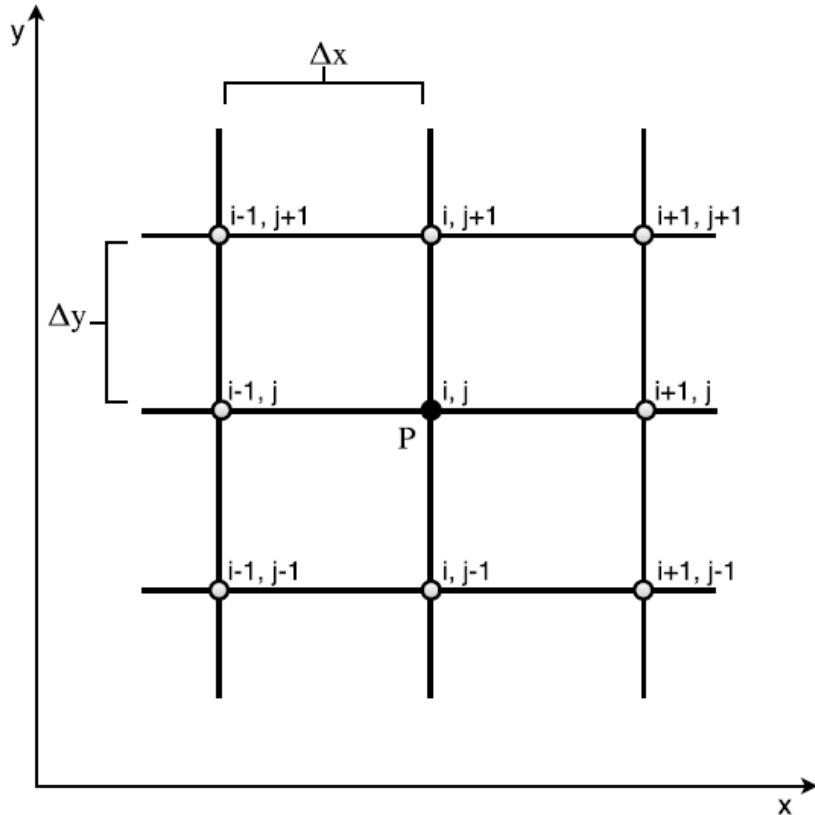
Large-Eddy simulering (LES) er ein anna modell der dei finaste virvlane vert sett vekk i frå for å redusere berekningstida. Navier-Stokes likningar vert løyst numerisk for virvlar over ein gitt storleik, medan turbulensmodellar som  $k-\epsilon$  vert nyttta for virvlar under. Bruken av desse turbulensmodellane er basert på tanken om at under ein gitt skala kan turbulens skildrast ved ein isotropisk modell.

I FLACS vert turbulensmodellar basert på Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) likningar, som  $k-\epsilon$  nyttta. Likningane er Favremidla, som vil sei at dei er tettleiksvekta gjennomsnitt. Ein vilkårleg strømmingseigenskap er delt inn i ein gjennomsnitt og ein fluktusjonskomponent, der fluktusjonen utgjer turbulensen [34]. Turbulensmodellar er naudsint fordi ein ikkje har fint nok grid som kan ta for seg dei minste virvlane.

## 2.4.4 Diskretisering

Analytiske løysingar av partielle differensiallikningar inneber lukka uttrykk som gjev løysingar av dei avhengige variablane kontinuerleg gjennom domenet. I numeriske utrekningar treng ein grid-punkt gjennom domenet for å oppnå ei numerisk løysing. For å få dette til, krevjast det ein numerisk teknikk innan CFD, kalla diskretisering. Det er tre ulike metodar dette kan utførast ved, endeleg differansemetode, elementmetode og volummetode. Sistnemnte er metoden nyttta i simuleringsverktøyet FLACS.

Diskretisering gjev verdiar til den kontinuerlege funksjonen på eit endeleg tal av punkt eller volum i domenet. Figur 2.4 syner eit todimensjonalt grid nyttta for numerisk løysing av partielle differensiallikningar ved diskrete grid-punkt, der punktet P nyttar verdiar frå nabopunkta til å oppnå ei løysing [32].



**Figur 2.4:** Illustrasjon av eit todimensjonalt grid brukt for numerisk løysing av partielle differensiallikningar ved diskrete grid-punkt. Basert på figur frå Anderson [32].

## 2.5 FLACS

Informasjonen i dette delkapittelet som handlar om FLACS, er henta frå brukarmanualen til programvara [30].

FLACS (FLame ACcelaration Simulator) er eit spesialisert CFD-verktøy eigd av Gexcon AS. Verktøyet vart i hovudsak utvikla for å undersøke ulike moment ved prosessikkerheit som spreying av brennbar eller giftig gass, gass- og støveksplosjonar, forplanting av trykk- og sjokkbølgjer samt basseng og jet-brannar.

Programvara inkluderer ein tredimensjonal (3D) CFD-kode som løyer Favremidla transportlikningar for masse, momentum, entalpi( $h$ ), turbulent kinetisk energi ( $k$ ), dissipasjon ( $\epsilon$ ), massefraksjonen av brensel ( $Y_F$ ) og blandingsfraksjon ( $\xi$ ) på eit strukturert kartesisk grid ved å nytte volummetoden. Dei vert løyst ved bruk av SIMPLE ordninga for komprimerbare strøymar og SIMPLEC for ikkje-komprimerbare strøymar. Ved å inkludere den ideelle gasslikninga og standard  $k-\epsilon$  turbulensmodell sørger FLACS for at RANS- likningane er lukka.

FLACS består av ein preprosessor, CASD (Computer Aided Scenario Design) der ein definerer ulike scenario. Her er det mogleg å kople seg til ein database der ein kan lage ein geometri ved bruk av boksar og sylinderar, eller ein kan opne ein eksisterande geometri. I tillegg er det mogleg å importere terrengfiler. I CASD definerer brukaren input informasjon om grid, samt scenario settinga som er naudsynt for dei ulike simuleringane. Vidare vert RunManager nytta til å starte og overvake simuleringane. Resultata frå simuleringane kan til slutt framstillast ved å bruke postprosessoren Flowvis.

## **Validering**

FLACS har blitt omfattande validert for spreiingssimuleringar. Hanna m.fl [35] og Hansen m.fl [36] har mellom anna nytta eksperimentelle data for validering av FLACS og funne ut at programmet eignar seg til spreiingssimuleringar. Terrengimportfunksjonen i FLACS har derimot berre blitt validert for eit veldig avgrensa tal på scenario og gridsensitiviteter, og resultata bør dermed evaluerast med ekstra forsiktigkeit [30]. For føremålet med følgjande studie er FLACS likevel sett på som eit passande verktøy. Når det kjem til bruk av ammoniakk i POOL-simuleringar, er ikkje dette validert i FLACS. På trass av dette er det forsøkt å nytte POOL i vidare arbeid.

# Kapittel 3

## Metode

I dette kapittelet som handlar om metoden nytta i oppgåva, vil den tenkte uønska hendinga som ligg til grunne for ein ammoniakklekkasje bli presentert. I tillegg vert oppsettet for dei ulike simuleringane som er nytta i arbeidet skildra. Dette inneber både POOL-simulering og spreingssimulering. Det har òg vorte utført ulike sensitivitetsanalysar som vil nemnast i dette kapittelet.

I gjennomføring av oppgåva har eg vald å behalde den faglege terminologien tilhøyrande FLACS for klarheits skuld for lesaren og difor er ein del av uttrykka behelde på engelsk då dei ikkje direkte let seg ovesetje til nynorsk. Uttrykka er i staden godt innarbeidde som terminologisk faguttrykk.

### 3.1 Skildring av tenkt uønska hending

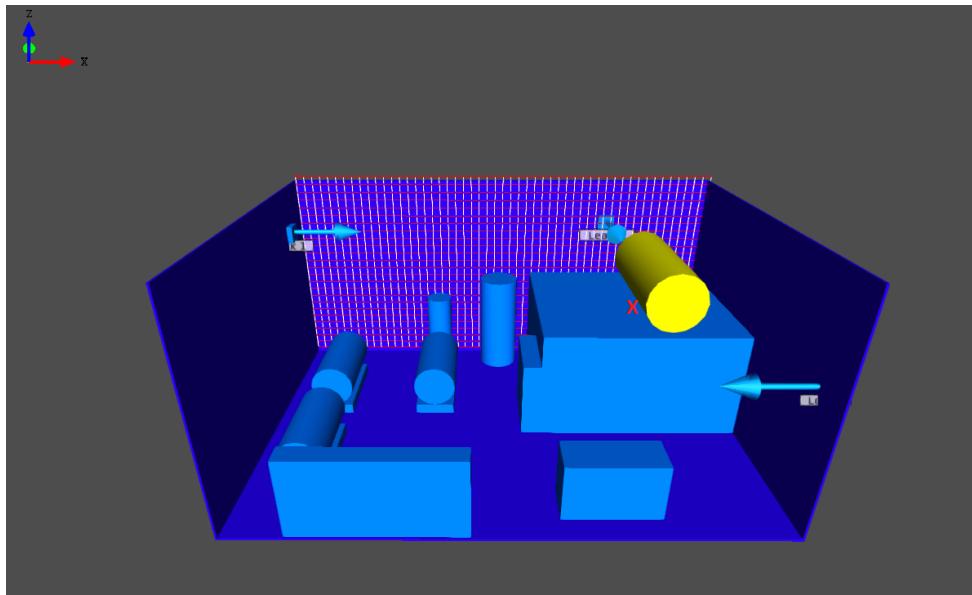
Den tenkte hendinga som leiar til eit lekkasjeutslepp er eit røyrbrot i overgangen mellom røyr og væskeutskiljar i kjoleanlegget til firmaet Tyrholm & Farstad i Ålesund. Væskeutskiljaren rommar 5400 liter, der fyllingsmengda er på 1050 liter ammoniakk ved ein temperatur mellom -38 °C og -40 °C. Utskiljaren ligg oppå ein mesanin i maskinrommet til Tyrholm & Farstad. Hendinga i denne oppgåva er eit '*worst case scenario*', der det er tenkt at heile innhaldet i tanken vil leka ut og bli spreidd til omgjevnadane via nødventilasjonsanlegget i maskinrommet.

### 3.2 POOL-simulering

Ved å nytte FLASH, eit verktøy i FLACS, vart nokre av dei fysiske eigenskapane til eit flashande utslepp av ammoniakk innhenta. Flashing er eit uttrykk som ofte er nytta for å skildre danning av damp som følgje av endring i trykk. Storleiken på røyrbrotet vart sett til å vera 5 cm. Temperaturen på ammoniakken vart sett til -33 °C, rett over kokepunktet, då FLASH ikkje kan handtere lågare temperaturar. Høgda på ammoniakken vart sett til å vere lik høgda på væskesøyla inne i væskeutskiljaren, som svarar til 0.3366 m ut i frå fyllingsmengda. Frå FLASH vart ein massestrøymingshastigkeit på 2.8875 kg/s innhenta. Denne verdien vart så nytta til å rekne ut kor lang tid det vil ta å tömme væskeutskiljaren. Ved ein temperatur på -33°C, er tettleiken til ammoniakk lik 681.57 kg/m<sup>3</sup>. Dette gjev 715.65 kg med ammoniakk som lek ut av tanken iløpet av 248 sekund ved konstant massestrøymingshastigkeit.

På bakgrunn av dette vert POOL-simulering køyrd for å undersøke korleis fordampinga av ammoniakk vil gå føre seg ved lekkasje frå væskeutskiljaren. Dette skal vidare brukast i spreingssimuleringane for å vite kor mykje ammoniakk som strøymer ut av nødventilasjonsanlegget og kan spreie seg til omgjevnaden.

Oppsettet til POOL-simuleringa vert forklart i dei neste delkapitla.



**Figur 3.1:** Framstilling av maskinrommet til Tyrholm & Farstad. Vald grid er vist for x-retning. Raud X markerer tenkt plassering av røyrbrot i overgang frå væskeutskiljaren.

### 3.2.1 Grid

Eit grid delar simuleringsområdet inn i eit sett med kontrollvolum ved tre gridplan, ein for kvar akseretning. Kvart kontrollvolum vert kalla for ei gridcelle. Inni kvar av desse cellene vert dei ulike variablane som ein ønskjer å undersøke rekna ut. I POOL-simuleringane vart heile rommet dekka med eit uniformt grid med cellestorleik 0.25m. Figur 3.1 syner gridet i x-retning i maskinrommet.

### 3.2.2 Geometri

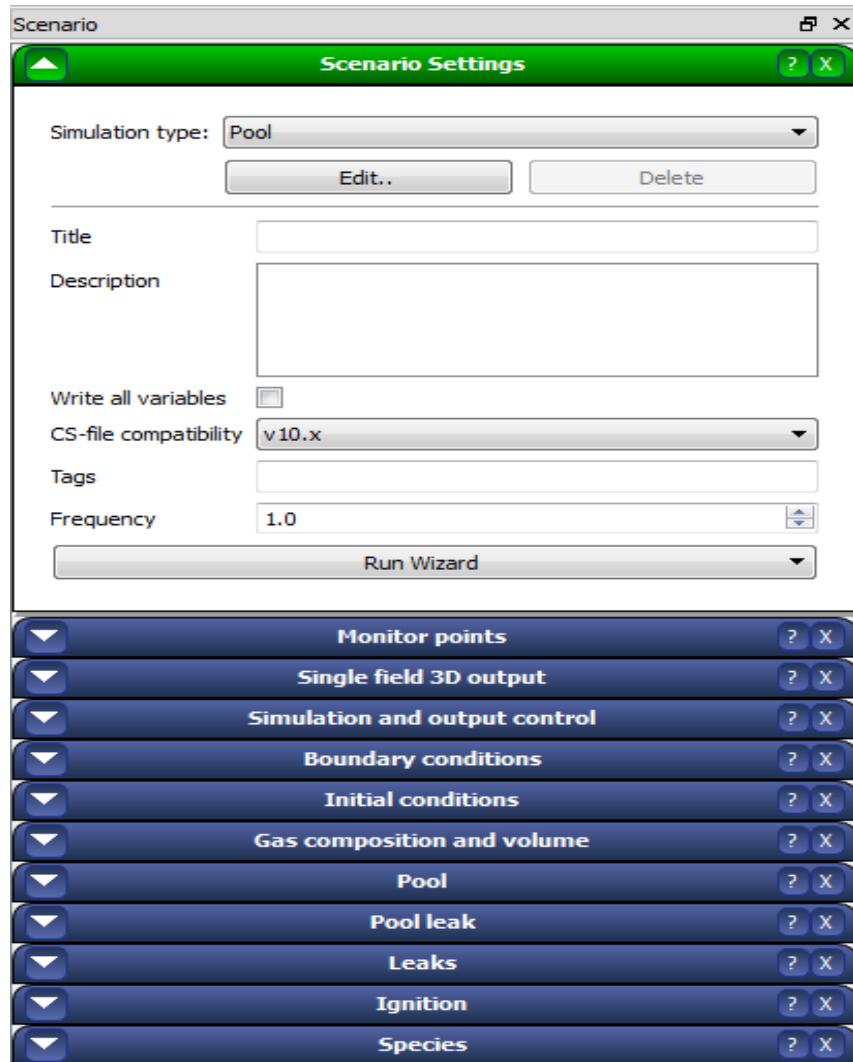
Ein modell av maskinrommet til analyseobjektet, Tyrholm & Farstad, vart laga i FLACS. Basert på tilsendte mål og skisser vart dei ulike objekta lagt til som boksar og sylinderar. Figur 3.1 syner modellen av maskinrommet. Det var berre dei største objekta i maskinrommet som vart lagt til. Væskeutskiljaren er markert i gult på mesaninen, og det raude krysset markerer tenkt plassering av røyrbrot i overgang frå væskeutskiljaren.

### 3.2.3 Scenario

Scenario for POOL vart definert i CASD ved å bruke scenarioinnstillingane vist i figur 3.2. Programmet vel standardinnstillingane for det bestemte scenarioet, og ved å gå igjennom kvar fane vart rammene rundt simuleringa fastsett. Dei følgjande avsnitta vil systematisk gå igjennom dei ulike fanene og skildre dei ulike parametrane.

### 3.2.4 Monitor Points

Monitor points er punkt i rommet der ein eller fleire variablar vert overvaka under simuleringa. Eit utval punkt vart arrangert i gridet for å halde oppsyn med dei ulike variablane. Ved å bruke funksjonen ”arrange grid”, vil punkta plasserast i midten av gridcella. Området rundt



**Figur 3.2:** Menyen for scenario innstilling i FLACs sin pre-prosessor CASD. Simuleringstypen er satt til POOL.

nødviftene var spesielt av interesse då det var ynskjeleg å vite konsentrasjonen av ammoniakk som vert ført ut av viftene. Variablar som vart overvaka var:

- Temperatur (T)
- Trykk (P)
- Hastigheitsvektor (VVEC)
- Massefraksjon av brensel (FUEL)
- Molfraksjon av brensel (FMOLE)
- Absoluttverdi av hastigkeit (UVW)
- Djupna på bassenget (POOL\_D)
- Hastigheitsvektoren til bassenget (POOL\_S)
- Temperatur til bassenget(POOL\_T)
- Hastigkeit i x-retning for bassenget (POOL\_U)
- Hastigkeit i y-retning for bassenget (POOL\_V)

### **3.2.5 Single field 3D output**

Dei same variablane nytta i monitor points kan òg overvakast i tre dimensjonar for å tillate brukaren å lage plott av romleg fordeling av variablar, som plott av 2D-cut plane eller eit 3D plott. I dette arbeidet vart same variablar som for monitor points nytta, sjå lista i førre avsnitt.

### **3.2.6 Simulation and output control**

Ulike inngangsverdiar som mellom anna omhandlar varigheita på simuleringa veljast her. I dette arbeidet vart TMAX endra medan dei resterande variablane beheldt standardverdien. TMAX er maksimumstida simuleringa kører. Denne vart sett til 600 s for å innhente nok verdiar knytt til fordampinga av bassenget.

### **3.2.7 Boundary conditions**

Grensevilkåra vart ikkje endra i dette arbeidet, slik at standardverdien for POOL simulering, NOZZLE, vart nytta for alle grensene.

### **3.2.8 Initial conditions**

Startvilkåra fastset verdiar for turbulensfelt, temperatur og trykk i starten av simuleringa. I tillegg er informasjon om gravitasjonsvilkår, parameter for atmosfærisk grensesjikt og luft-samansetjinga inkludert i denne delen. Samlege av desse verdiane beheldt standardverdiane.

### **3.2.9 Gas composition and volume**

For å definere ammoniakk i POOL samanheng var det naudsynt å leggje til ein eigendefinert art i databasen. Volumfraksjonen for userspec 1 vart dermed satt til 1. Den eigendefinerte arten er forklart nærmare under avsnittet "Species".

### **3.2.10 Pool**

Pooldelen i scenariomenyen tillèt å definere eigenskapane til eit væskesøl på bakken. Ettersom bassenget i dette tilfellet rører på seg, vart modellen dynamisk(PM3) nytta. Starttida vart satt til 0 sekund. På bakgrunn av resultata frå FLASH, vart lekkasjeraten til bassenget, DMDT, sett til 2.8875 kg/s. Lekkasjepunktet nytta i denne oppgåva er basert på eit tenkt røyrbrot frå væskeutskiljar plassert på mesaninen. Røyret er festa under tanken, slik at heile innhaldet vil leka ut. Ytre radius for bassenget er satt til 2 m.

### **3.2.11 Pool leak**

Ei lekkasjefil kan spesifiserast for å definere kor lenge lekkasjen held fram. Basert på mengd ammoniakk i tanken og lekkasjeraten, vil det ta 248 sekund å tømme væskeutskiljaren. Dette vart spesifisert i lekkasjefila ved å leggje inn ulike tidsintervall for lekkasjerata. Ein konstant lekkasjerate vart nytta fram til 240 sekund, før den minka lineært til 250 sekund og tanken var tømd.

### 3.2.12 Leaks

Nødviftene hjå Tyrholm & Farstad er styrt av romtemperatur og går over på full drift ved aktivering av gassalarm/sensor montert i maskinrommet. Denne alarmen slår ut ved konsentrasjon på 1000 ppm. Dei to nødviftene vart plassert på sine respektive plassar som synt i figur 3.1. Dei er definert som suction, som er ein negativ punktkjelde der gass/luft vil verte fjerna. Nødventilasjonen bles ut eventuell ammoniakk-gass gjennom to utsleppspunkt plassert på taket til maskinrommet. Luftinntaket til rommet er også lagt inn, definert som air, dvs. at det er luft som strøymer inn i rommet. Kapasiteten til nødviftene er frå leverandør oppgitt til å vere 1.4208 kg/s, som gjev total utstrøymingskapasitet på 2.8416 kg/s. Lekkasjeareala er satt til å vere 0.03 m<sup>2</sup>.

### 3.2.13 Ignition

Då det ikkje er ynskjeleg med tenning, setjast tid for tenning lik 999999s.

### 3.2.14 Species

Ettersom ammoniakk ikkje ligg inne som ein definert art for POOL-simulering, var det naudsynt å definere denne som ein eigendefinert art. Det har vore uklart kva verdiar som burde nyttast då brukarstøtta hjå Gexcon har operert med to ulike datasett med verdiar. Her er det vald å nytte det nyaste tilsendte datasettet. Verdiane som er lagt inn er å finne i vedlegg A.

## 3.3 Sensitivitetsanalysar

Det er naudsynt å utføre sensitivitetsanalysar for å undersøkje kva inngangsparametre som vil påverke simulatingsresultatet. Ved å endre dei ulike parametrane kan ein finne ut i kva grad resultatet endrar seg med dei bestemte faktorane. Dette gjer ein for å finne ut kva ein må ta omsyn til i simuleringane, og kva faktorar som ikkje påverkar resultatet slik at ein kan sjå vekk i frå desse. I denne oppgåva er det utført ulike sensitivitetsanalysar som vil bli skildra i dei følgjande delane.

### 3.3.1 Gridsensitivitetsanalyse

Det er naudsynt å bruke ein optimal gridstorleik for simuleringane, slik at resultatet er tilstrekkeleg nøyaktig utan at det tar for lang tid å utføre den einskilde simuleringa. Dette vart oppnådd ved å variere gridstorleiken frå grov til finare, optimalt fram til resultatet ikkje endra seg og ein har eit resultat som ikkje er avhengig av gridet. FLACS brukarmanualen [30] anbefalar den følgjande prosedyren for å setje opp grid for spreieingssimulering:

1. Dekk berekningsområdet med eit uniformt grid.
2. Refine gridet i nærområdet til ein jet vinkelrett på jet-aksen. Dersom jeten strøymer i x- og y-retning, må refine grid brukast i z-retning rundt jeten.
3. Strekk gridet utanfor hovudområdet av interesse mot grensene.

Denne prosedyren var utført i FLACS for geometrien nytta i spreingssimuleringane. Sensitivitet-analysen starta med eit grovt uniformt grid før celeststorleiken vart redusert, refine funksjonen nytta og uniformt grid vart endra til at gridcellene i z-retning var mindre enn høvesvis cellene i x- og y-retning. Dei ulike testane er summert i tabell 3.1.

For å best mogleg kunne samanlikne dei ulike resultata, er core domain og stretch domain lik for alle simuleringane. Max celeststorleik er sett til 4 for å unngå for stor max percent difference i dei ulike retningane, då dette vil føre til at simuleringa ikkje verkar, eller at ein ikkje kan stole på resultatet.

**Tabell 3.1:** Skilnad av grid brukt i gridsensitivitetsanalysen i FLACS, med gridstorleik, grad av refinement og totalt tal på celler.

Grid nr.	Celeststorleik [m]	Kjerneområde	Refined grid storleik [m]	Strekking av grid	Max celeststorleik	Totalt tal gridceller
1	2	$\pm 10$ m frå lekkasjane	-	$\pm 150$ m frå lekkasjane	4	110925
2	1.25	$\pm 10$ m frå lekkasjane	-	$\pm 150$ m frå lekkasjane	4	230280
3	1.25 i x- og y-retning, 0.75 i z-retning	$\pm 10$ m frå lekkasjane	-	$\pm 150$ m frå lekkasjane	4	316635
4	1	$\pm 10$ m frå lekkasjane	0.245	$\pm 150$ m frå lekkasjane	4	400248
5	0.75, 0.5 i z-retning	$\pm 10$ m frå lekkasjane	0.245	$\pm 150$ m frå lekkasjane	4	653676
6	0.75, 0.3 i z-retning	$\pm 10$ m frå lekkasjane	-	$\pm 150$ m frå lekkasjane	4	876204
7	0.5, 0.3 i z-retning	$\pm 10$ m frå lekkasjane	-	$\pm 150$ m frå lekkasjane	2	2812992

Gridsimuleringane er basert på eit scenario der nødviftene opererer ved full kapasitet, og det er tenkt at berre ammoniakk strøymer ut. Dette gjev ei total utsleppsrat på 2.8416 kg/s. Lekkasjane er satt til å gå i 100 sekund, og total simuleringstid er 200 sekund. Vindretninga og hastigheita er satt til SSV på 210 ° med 3 m/s.

### 3.3.2 Lekkasjesensitivitet

Då resultata frå POOL-modellen ikkje vart ferdig i tide til å nytte desse, er utsleppsraten av ammoniakk frå nødviftene ukjend. Det vart derfor utført ein lekkasjesensitivitetsanalyse for å undersøkje om kor raskt maskinrommet vert tømt for ammoniakk har noko å sei for grad av spreing. Her vart det tatt utgangspunkt i 10 % av total masse på væsketuskilleren, dvs. 71,565 kg ammoniakk, med 10 % av massestrømningshastigheita, lik 0,28875 kg/s. Det vil ta 248 sekund før all ammoniakken lekk ut ved denne hastigheita. I tillegg vart det testa å sleppe ut same mengd, men med ein utsleppsrat på 30%. Dette gav ein massestrømningshastigheit på 0,86625 kg/s og total utslepptid 83 sekund. Total tid på simuleringane vart sett til høvesvis 400 og 200 sekund. Då det er to nødvifter vert den totale massestrømningshastigheita fordelt på desse. Vindretninga og hastigheita nytta her var SSV på 210 ° og 3 m/s.

### **3.3.3 Pasquill-sensitivitet**

Det er av interesse å undersøkje om val av atmosfærisk stabilitetsklasse vil påverke spreieninga av ammoniakk. Her vart det utført undersøkingar for pasquillklasse D-F. A-C vart vald å sjå vekk i frå då brukarmanualen til FLACS presiserer at desse klassene kan føre til stabilitetsproblem i simuleringa. Det kan også hende at resultata frå desse simuleringa ikkje er optimale, og at ukontrollerte turbulente ”eksplooderande” lekkasjar kan oppstå. Pasquill-sensitivitetsanalysane vart køyrd på simuleringar med vindretning VSV på  $240^{\circ}$  og 7 m/s.

### **3.3.4 Temperatursensitivitet**

Temperatursensitivitetsanalyse vart utført for å undersøkje om temperaturen til ammoniakkgassen som kjem ut av maskinrommet vil påverke spreieninga. Dette vart undersøkt fordi det ikkje var kjennskap til kva temperatur ammoniakkgassen heldt. Det vart undersøkt tre ulike temperaturar,  $-20^{\circ}\text{C}$ ,  $0^{\circ}\text{C}$  og  $20^{\circ}\text{C}$ . Simuleringsane vart utført ved vindretning VSV på  $240^{\circ}$  og 7 m/s.

### **3.3.5 Sensitivitet for simulering med og utan bygningar og terreng**

For å undersøkje korleis bygningar og terreng er med på å påverke spreieninga av ammoniakk, er det utført ein sensitivitetsanalyse. To simuleringar med bygningar i terrenget vert samanlikna med same simulatingsoppsett, men for tilfelle utan bygningar i terrenget og med eit oppsett utan terreng og bygning. Dei ulike simuleringane er utført ved vindretning og hastigkeit SSØ på  $150^{\circ}$  og 3 m/s, samt VSV på  $240^{\circ}$  og 7 m/s.

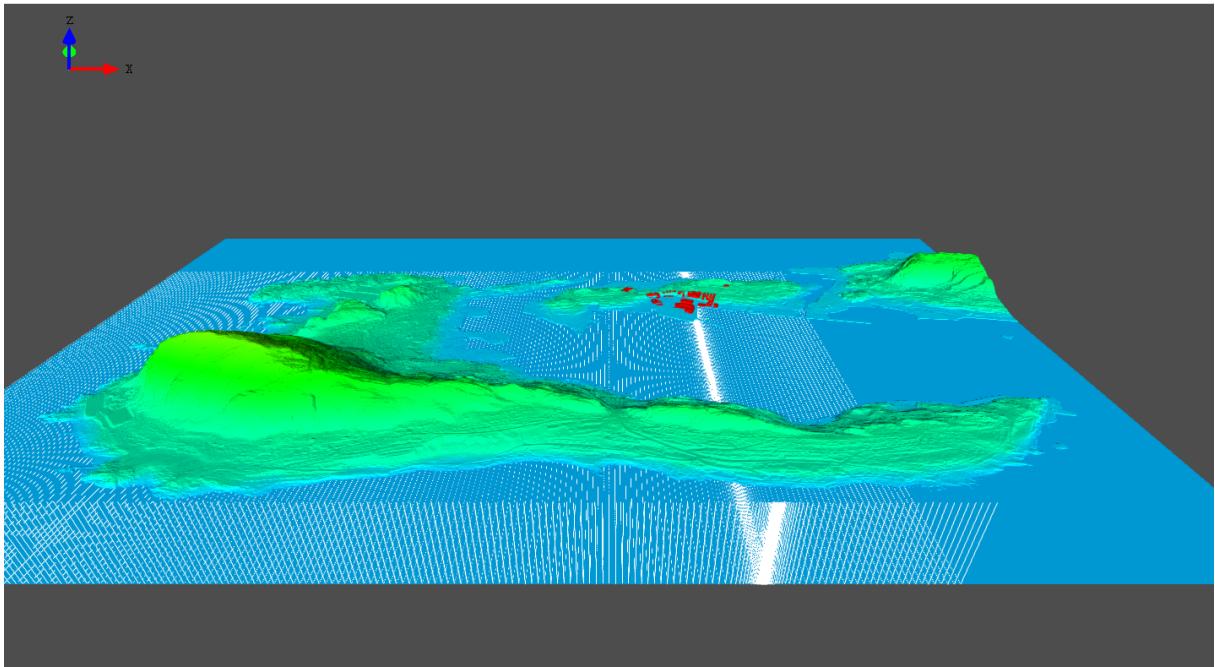
### **3.3.6 Fjellformasjonsensitivitet**

Ålesund ligg ved fjellet Hessa, som på folkemunne går under namnet ”Sukkertoppen”. Fjellet reiser seg 314 meter over havnivå (moh), og det er derfor av interesse å undersøkje korleis fjellet vil påverke spreiening av ammoniakk ved ein eventuell lekkasje. Simuleringscenarioet er som for hovudsimuleringsane, som er definert i neste avsnitt, men terrenget er utvida slik at fjellet vert inkludert i geometrien. Figur 3.3 syner geometrien der fjellet Hessa er inkludert. På grunn av dei store områda og dei mange cellene, har max-cellestorleik blitt sett til 20 m, i staden for 4 m som hovudsimuleringsane har. Vindretninga VSV på  $240^{\circ}$  er vald, då det såg ut som at denne retninga kan passere igjennom kløfta ved fjellet og truleg danne ein vindkanaliseringseffekt. Vindhastigheita vart vald til 7 m/s, då dette er den vanlegaste hastigheita for denne vindretninga.

## **3.4 Spreiingssimulering**

Hovudsimuleringsane går ut på å undersøkje korleis spreieninga av ammoniakk vil variere med vindhastigkeit og vindretning. Dette er i utgangspunktet òg ei form for sensitivitetsanalyse, men då dette er dei parametrane av hovudinteresse å undersøkje, vil dei ikkje bli omtala saman med dei andre sensitivitetsanalysane, men som ei sjølvstendig analyse. Fleire av inngangsverdiane i spreiingssimuleringsane kjem frå resultatet til dei ovannemnte sensitivitetsanalysane.

I dette arbeidet er det utført 32 ulike spreiingssimuleringsar ut i frå dei vanlegaste vindhastigheitene og retningane i Ålesund, henta frå Meteorologisk institutt [37], med to forskjellege strømningshastigheitar for utslepp av ammoniakk. Simuleringsoppsettet vert her skildra.



**Figur 3.3:** Geometrien til sensitivitetsanalysane som inkluderer fjellet Hessa.

### 3.4.1 Grid

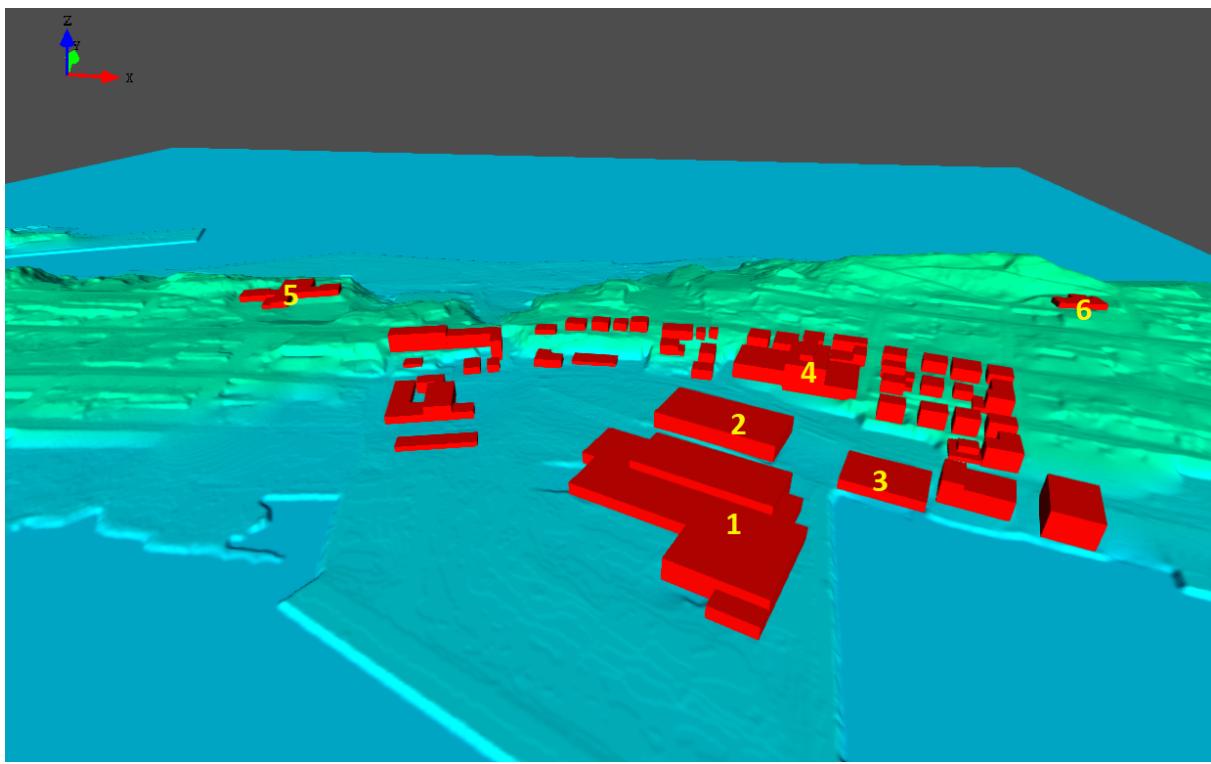
Eit grid med cellestorleik 1.25 m vart vald frå gridsensitivitetsanalysen. Core domain er framleis definert som  $\pm 10$  m frå lekkasjene i dei ulike retningane. Ettersom graden av gridutstrekkinga er avhengig av kva vindretning som er den dominerande, vil denne variere frå simulering til simulering, slik at totalt tal på gridceller har variert frå 197 568 celler til 753 060.

### 3.4.2 Geometri

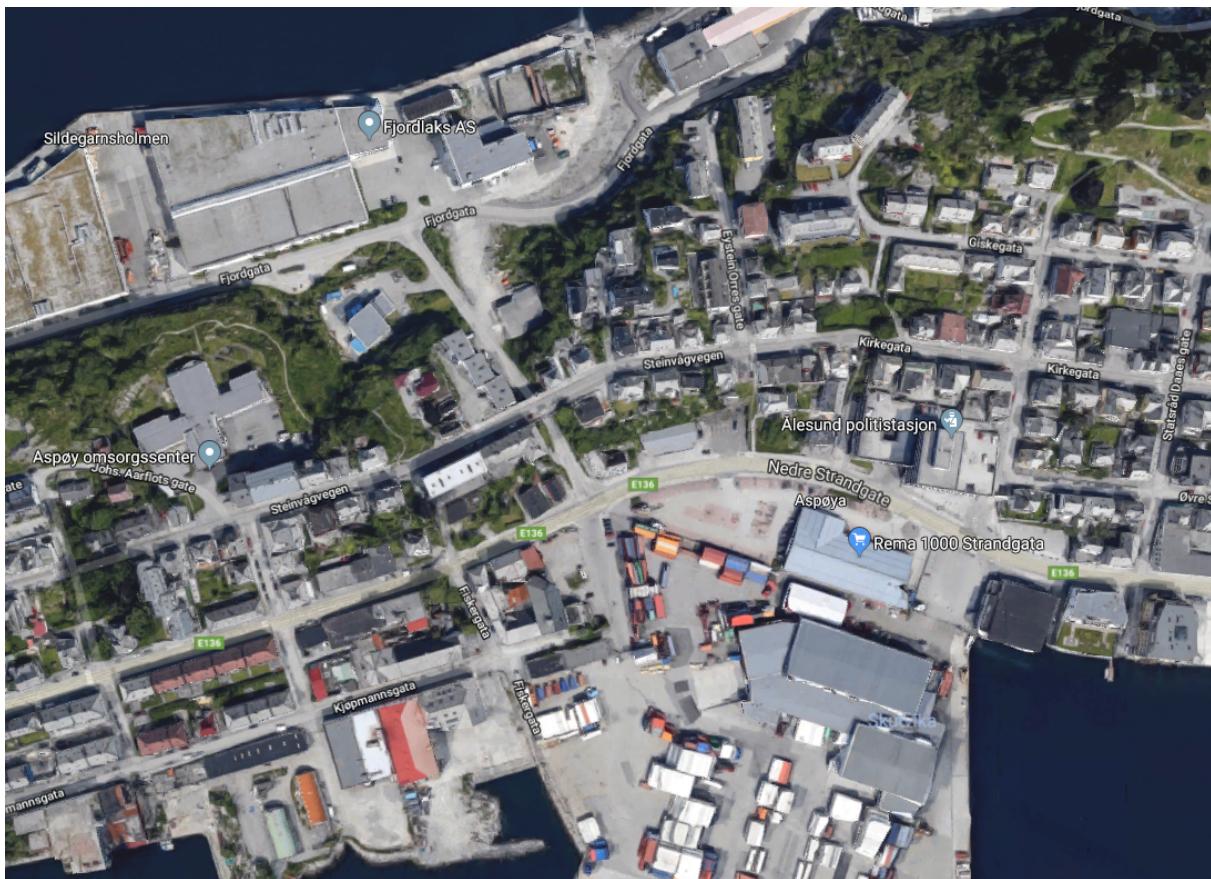
Geometrien som representerer terrenget til Ålesund vart importert til FLACS som *.dem* filer. Originalt var fila større, men for å redusere berekningstid, vart det tatt eit mindre utsnitt som dekka det området som var ønskeleg å undersøke. Bygningane skulle opphavleg bli lagt inn i ein database frå *.dgn* filer, men sidan desse vart tolka som todimensjonale boksar, måtte dei leggjast inn manuelt i staden. Då dette var tidkrevjande, vart eit utval av bygg i nærområdet til analyseobjektet, samt interessante bygg som ein sjukeheim og ein barnehage lagt inn. 'Mål avstand' funksjonen på Google Maps vart nytta for å finne storleiken på bygningane som vart lagt inn i modellen. Bygningane vart lagt inn som roterte boksar for å få dei til å samstemme med plasseringa i terrenget. Figur 3.4 syner modellen over Ålesund som har vorte laga til denne oppgåva. Bygning markert som nr 1 er analyseobjektet, Tyrholm & Farstad, nr 2 er Rema 1000, nr 3 er Kiwi, nr 4 er operasjonssentralen til politiet og brannvesenet, nr 5 er gamleheimen og nr 6 er barnehagen. Frå figur 3.5 er satellittbilete av området lagt inn i modellen synt.

### 3.4.3 Scenario

Scenarioet for spreieingssimuleringsane vart definert i menyen til scenario setting. Simuleringstypen vart sett til dispersion and ventilation.



**Figur 3.4:** Modell av delar av Ålesund. 1) Tyrholm & Farstad, 2) Rema 1000, 3) Kiwi, 4) Operasjonssentralen til politiet og brannvesenet, 5) Gamleheimen, 6) Barnehagen.



**Figur 3.5:** Satellittbilete av delar av Ålesund frå Google Maps. Geometrimodellen laga i oppgåva stammar frå dette biletet.

### 3.4.4 Monitor points

Eit utval av punkt vart arrangert i gridet rundt analyseobjektet og i nærområdet. Desse punkta held oppsyn med dei variablane som var ynskjeleg å undersøke. Dei variablane som vart overvaka var:

- Molfraksjonen av brenselet (FMOLE)
- Temperatur (T)
- Absoluttverdi av hastighet (UVW)
- Hastigheitsvektor (VVEC)
- Massefraksjon av brensel (FUEL)
- Molfraksjonen til dosen brensel (FDOSE)
- Sannsyn for død som funksjon av toxic probit (PDEATH)
- Toxic probit (PROBIT)
- Toxic concentration (TCONS)
- Toxic dose (TDOSE)
- Toxic molfraction (TMOLE)

### 3.4.5 Singled field 3D output

I dette arbeidet vart same variablar som for monitor points nytta til å overvake desse i tre dimensjonar. Sjå lista i førre avsnitt for dei utvalde variablane.

### 3.4.6 Simulation and output control

Då brukarmannualen til FLACS anbefaler å nytte CFLC = 20 og CFLV = 2, vart desse vald. CFLC er Courant-Friedrich-Levy number basert på lydhastigheita medan CFLV er Courant-Friedrich-Levy number basert på strømningshastigheita. CFL tilstanden uttrykkjer at avstanden som kva som helst informasjon bevegar seg i løpet av tidslinjelengda i gridet, må vere lågare enn avstanden mellom gridelementa. Dette gjer at informasjonen frå ei gitt celle berre kan forplante seg til sine nærmaste naboceller.

TMAX vart òg definert for spreiingssimuleringa. Maksimumstida var ulik for dei to ulike lekkasjeratane nytta i simuleringane. Den vart sett til ein verdi der det ikkje lenger var ammoniakk tilstades. For simuleringane med høgast lekkasjerate vart TMAX satt til 800 sekund, medan den lågare lekkasjeraten hadde simuleringstid på 1300 sekund. For nokre tilfelle vart simuleringstida forlenga då det framleis var ammoniakk tilstades etter at simuleringa var stoppa. Då vart simuleringstid forlenga til høvesvis 1000 sekund og 1500 sekund.

Dei resterande variablane under simulation and output control beheldt standardverdiane.

### 3.4.7 Boundary conditions

Grensevilkåra vart endra då vindkarakteristikken for simuleringane vart lagt til kvar enkelt simulering. Dette resulterte i at øvre grense i x- og y-retning, samt nedre grense i z-retning beheldt sin standard som er NOZZLE, medan nedre grense i x- og y-retning, samt øvre grense

i z-retning endra grenseverdi til å gjelde vind. Grensevilkåret vind modellerer eit ytre vindfelt, og oppsettet vil bli forklart vidare.

## Vind

For å legge til vindfeltet på enklast mogeleg måte, vart wind wizard i FLACS nytta. Her vart dei ulike vindretningane og vindhastigheitene som er dei mest dominerande i Ålesund lagt til [37]. Full oversikt over vinden i Ålesund i perioden 01.07.1958-31.12.2017 som er grunnlaget for val av vindretning og hastigkeit i denne oppgåva, er lagt ved i vedlegg C. Dei utvalde vindhastigheitane og retningane er attgjeven i tabell 3.2 som er i synkande rekjkjefølgje ut i frå den relative frekvensen. Her er det vald å utføre simuleringar for samlede vindretningar og hastigheetar som har relativ frekvens på 2 % og over. I tillegg vart ei vindhastigkeit på 17 m/s undersøkt, sjølv om den relative frekvensen var under 2 %. Dette var for å få eit breiare spekter for å undersøkje korleis vindhastigheita spelar inn på spreininga. Vindrosa for same periode er vist i figur 3.6, der vindretningane er delt inn i sektorar på 30 °. I denne oppgåva er vindretninga midt i sektoren vald. Når det gjeld vindhastigheitane er dei oppgitt i intervall som strekkjer seg over 5 m/s. Det har her blitt vald å sjå på vindhastigheitane 3, 7, 12 og 17 m/s.

Temperaturen på vinden er satt til 10 °C, som er eit par grader varmare enn den årlege gjennomsnittstemperaturen i Ålesund. Den samsvarar med gjennomsnittstemperaturen som er å finne mellom april-november [38].

Pasquillklasse er ikkje vald for spreingssimuleringane basert på resultat frå sensitivitetsanalyse utført. Ground roughness er satt til å vere 0.5 m. Dette valet er tatt på bakgrunn av opplysningar i brukarmanualen der 0.5 m svarar til område som består av parkar, busker eller fleire hindringar. Ettersom simuleringane vert utført for eit urbant område, vil det vere fleire hindringar i geometrien, og dermed falt valet på 0.5 m.

### 3.4.8 Initial conditions

Dei ulike startvilkåra for simuleringa som characteristic velocity, temperatur, ground roughness og pasquillklasse vart definert ved bruk av wind wizard forklart i førre avsnitt. Resterande startvilkår vart ikkje endra frå sine standardinnstillingar.

### 3.4.9 Gas composition and volume

For spreingssimulering er ammoniakk ein forhandsdefinert giftig gass i FLACS. Denne vart vald, og volumfraksjonen for toxic vart sett til 1.

### 3.4.10 Leaks

Utløpet til Tyrholm & Farstad sin nødventilasjon er plassert på taket til maskinrommet. Dei har to nødvifter som kvar har ein kapasitet på 1.4208 kg/s. Det har derfor blitt lagt til to lekkasjepunkt på taket, som vist i figur 3.7. Desse har blitt flytta nokre centimeter frå original posisjon for å hindre feilmeldinga 'mass residual error'. Denne feilmeldinga ført til at simuleringane krasja som følgje av at lekkasjene, definert i både x- og y-retning, stod rett på ein vegg då bygningane er roterte, og det ført til ei opphoping av ammoniakk i cellene ved veggjen. Ved å sørge for at lekkasjen ikkje vert sleppt ut direkte på ei bygningsflate vil simuleringane kunne utførast utan feilmelding.

### Vindrose, frekvensfordeling av vind

Vindretning deles i sektorer på  $30^\circ$

Frekvensfordeling av vindhastighet i prosent %

**60990 VIGRA**

#### Vindhastighet ( m/s )

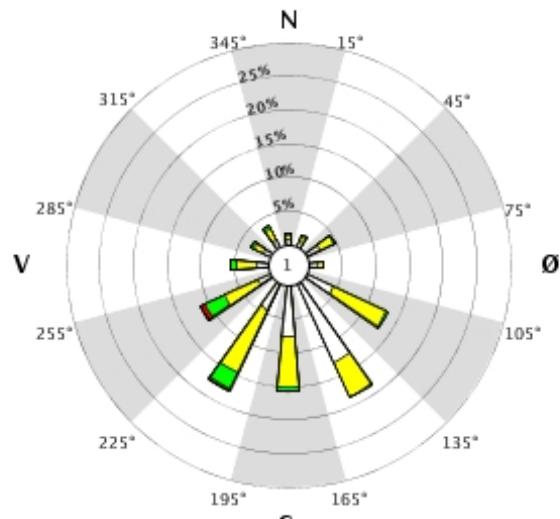
- >21
- 15.8-21
- 10.6-15.8
- 5.4-10.5
- 0.1-5.2

#### Stille (%)

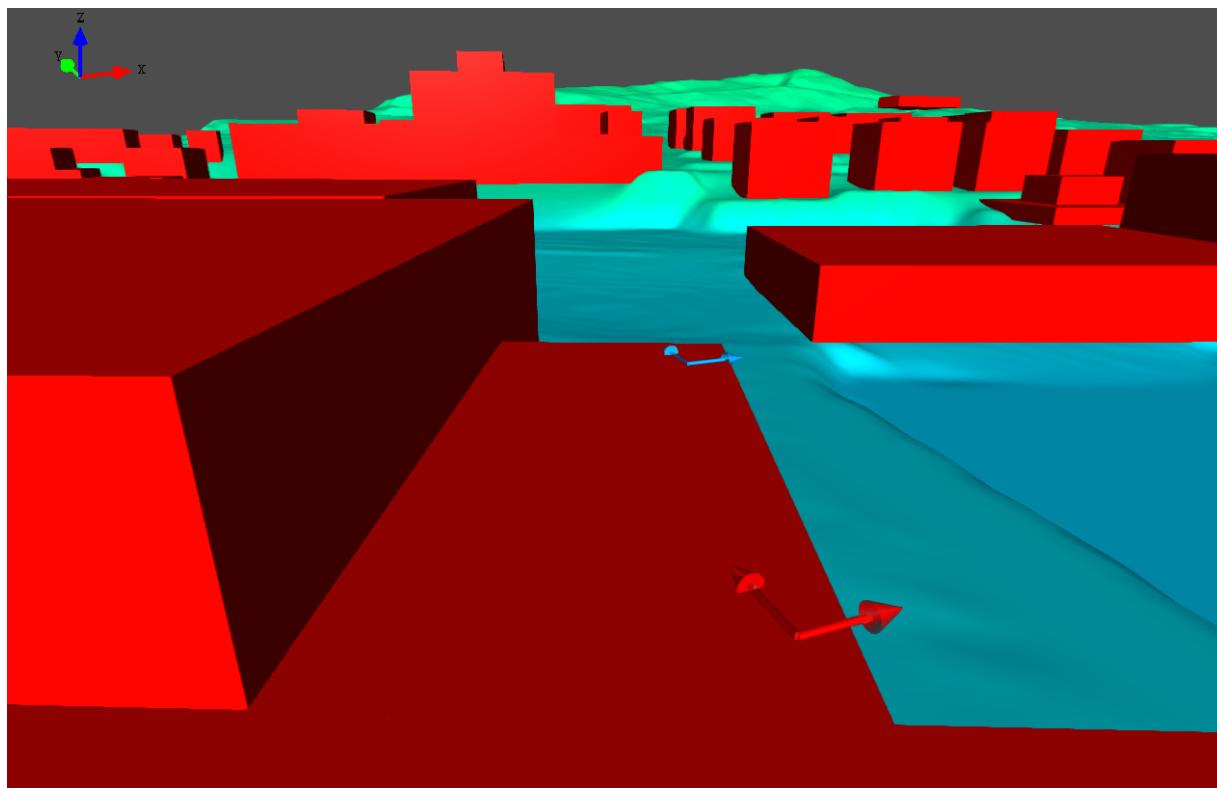


År: 1958 - 2017  
des

Tidspunkt: 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23 (NMT)



**Figur 3.6:** Vindrose for Ålesund, målt ved målestasjonen på Vigna. Figuren er henta fra Meteorologisk institutt [37].



**Figur 3.7:** Figuren syner utsleppspunkta plassert på taket til Tyrholm & Farstad.

**Tabell 3.2:** Frekvensfordeling av vindretningane og vindhastigheitane i Ålesund som er nytta i oppgåva. Vindataane er frå perioden 1958-2017 og er henta frå Meteorologisk institutt [37].

Vindretning [°]	Vindhastigkeit [m/s]	Relativ frekvens [%]
150 (SSØ)	3	13,0
210 (SSV)	7	10,3
120 (ØSØ)	7	8,8
180 (S)	3	7,7
180 (S)	7	7,4
150 (SSØ)	7	5,5
240 (VSV)	7	5,5
120 (ØSØ)	3	4,3
210 (SSV)	3	4,3
240 (VSV)	12	3,0
270 (V)	7	3,0
210 (SSV)	12	2,8
60 (ØNØ)	3	2,2
60 (ØNØ)	7	2,2
240 (VSV)	3	2,0
240 (VSV)	17	0,7

På bakgrunn av lekkasjesensitivitetsanalysen vart det vedtatt å køyre simuleringane for to ulike lekkasjerater då dette hadde mykje å sei for spreininga av ammoniakk-gassen. Dei to lekkasjeratene nytta i denne oppgåva er 0.7104 kg/s og 0.3552 kg/s. Desse er halvparten av kapasiteten til nødvifta, og ein fjerdedel av kapasiteten til nødvifta. Det er vald å nytte desse lekkasjeratene då det er ukjend kva den eigentlege lekkasjerata vil vere. Det kan tenkjast at det vil vere ei blanding av luft og ammoniakk som lek ut av nødviftene, dermed vil ikkje den totale kapasiteten til viftene sleppe ut rein ammoniakk-gass, og ein lågare mengd er vald for utslepp av ammoniakk.

Lekkasjane er definert som jet, med lekkasje outlet på  $0.03 \text{ m}^2$ . Temperaturen til gassen idet den forlét nødventilasjonen er ukjend, og ut i frå sensitivitetsanalysen utført, har ein temperatur på  $0 \text{ }^\circ\text{C}$  blitt vald for dei ulike simuleringane.

### 3.4.11 Ignition

Då det ikkje er ynskjeleg med tenning i desse spreiningssimuleringane, vert tid for tenning sett til 999999 s.

# Kapittel 4

## Resultat og diskusjon

Resultata frå dei ulike spreilingssimuleringane for ammoniakkgassen vert lagt fram og diskutert her. Hovudfokuset vil vere på dei vindretningane som gjev lengst utstrekks av ammoniakkgassen. I tillegg vert overlappande bilete for alle vindretningane og vindhastigheitane presentert. Dei resterande resultata vert lagt ved i vedlegg. Dette inneberer òg resultata for simuleringane utført ved den lågare lekkasjeraten. Resultata vert illustrert ved hjelp av både bilete frå 2D-cut plane og 3D plott som viser ammoniakkspreiinga på overflata av området som vert eksponert.

### 4.1 POOL-simulering

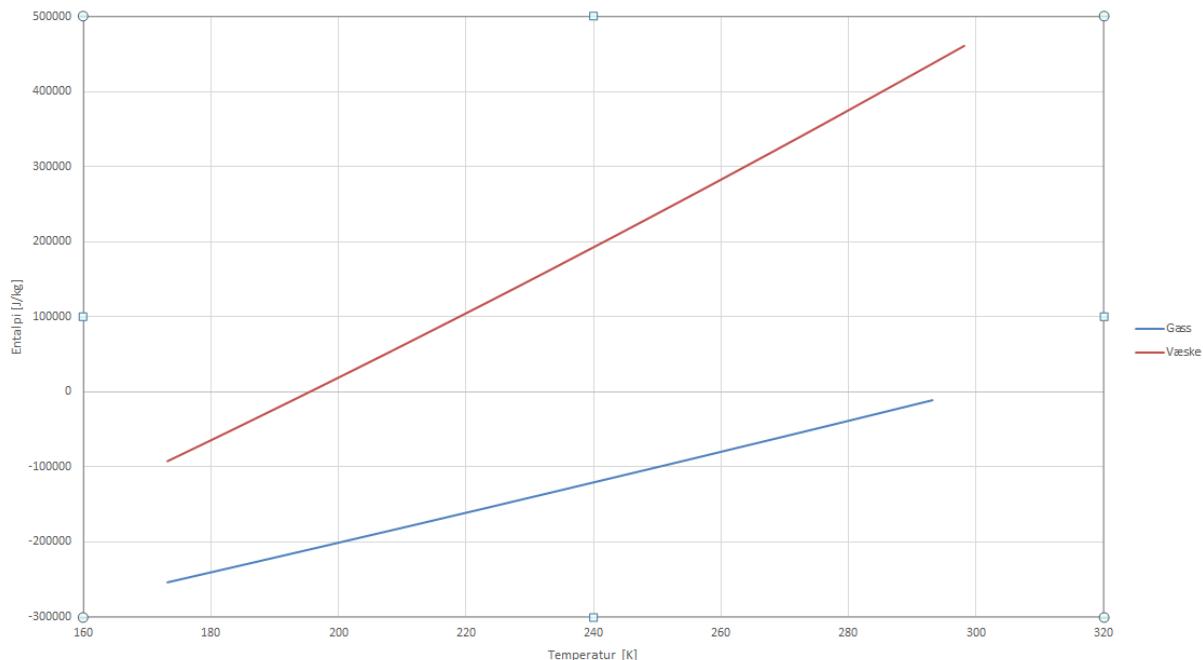
Verdiane nytta for spesifisering av ammoniakk som ein brukardefinert art i POOL-simulering stammar frå tilsendte verdiar frå brukarstøtta til FLACS hjå Gexcon. Det er verdiar dei har nytta til testsimuleringar, og av den grunn var det naudsynt å vurdere desse opp mot andre kjelder. Rettleiar innhenta dermed informasjon frå nokre som hadde nytta ammoniakk i FLACS. Han vart fortald at dei tre entalpikonstantane for gassfase avveik i noko grad, spesielt den tredje entalpikonstanten var svært lågt anslått. Dei nye innhenta entalpikonstantane vart dermed nytta i simuleringa. Dette resulterte i at det ikkje vart danna brensel under simuleringa, og inga informasjon om oppførselen til ammoniakken vart tilgjengeleg. På grunn av tidsbegrensing vart det avgjort at spreilingssimuleringane skulle utførast utan kjennskap til korleis fordampinga av ammoniakken ville føregå. Det vart i staden utført ulike sensitivitetsanalyser for å finne ut kva variablar det var naudsynt å ta hensyn til i spreilingssimuleringane. Arbeidet med å finne ut kvifor POOL-simuleringa ikkje gav noko resultat vart likevel vidareførd.

For å undersøkje kvifor det ikkje vart danna brensel under simuleringa ved dei nye entalpikonstantane, vart fokuset retta mot termodynamikken til systemet. Ammoniakk i væskefase treng tilførsel av energi for å fordampe. Denne endotermiske reaksjonen indikerer at gassfasa må ha ein høgare entalpi enn væskefasa. I FLACS vert entalpien til ein substans rekna ut ved bruk av formelen

$$h = A \cdot T + \frac{1}{2}B \cdot T^2 - D \quad (4.1)$$

der  $A$ ,  $B$  og  $D$  er dei tre entalpikonstantane, som Gexcon kaller  $A_{ent}$ ,  $B_{ent}$  og  $D_{ent}$  for gassfase og  $A_{lent}$ ,  $B_{lent}$  og  $D_{lent}$  for væskefase, der den numeriske verdien varierer med tilstand og temperatur til stoffet. Figur 4.1 syner entalpi plotta mot temperatur for gass- og væskefase for variablane innhenta av rettleiar. Det kjem her fram at tilhøvet mellom entalpien til dei to fasane ikkje er som forventa. Væskefasa har ein mykje høgare entalpi enn gassfasa, slik at gass ikkje vil verte danna. Dette er truleg grunnen til at det ikkje vart danna brensel i simuleringane.

På grunn av denne skilnaden i entalpi vart entalpikonstantane for væskefase òg vurdert. Både entalpikonstantane for væske- og gassfase vart rekna ut ved hjelp av *NIST-JANAF Thermochemical Tables* [39] og datapage for ammoniakk[43]. Framgangsmåten for å rekne ut entalpikonstantane er vist i vedlegg B, saman med dei ulike verdiane som var føreslegne å nytta. Desse kan finnast i tabell B.3. Då dei nye verdiane for entalpikonstantane for både væske- og gassfase var rekna ut, vart eit nytt plott for entalpi mot temperatur danna. Den nye relasjonen er vist i



**Figur 4.1:** Entalpi er plotta mot temperatur for entalpikonstantane som rettleiar har framskaffa. Entalpien er høgare for væskefase enn for gassfase, og dermed vil ikkje gass dannast.

figur 4.2. Då gassfasa har høgare entalpi enn væskefasa, er det no fysisk mogleg å få væskefasa til å gå over til gass. Dei nye verdiane for entalpikonstantane resulterte i danning av brensel i POOL-simuleringane, men desse nye resultata vart ikkje prosessert sidan spreiingssimuleringane allereie var sett i gong.

## 4.2 Sensitivitetsanalyse

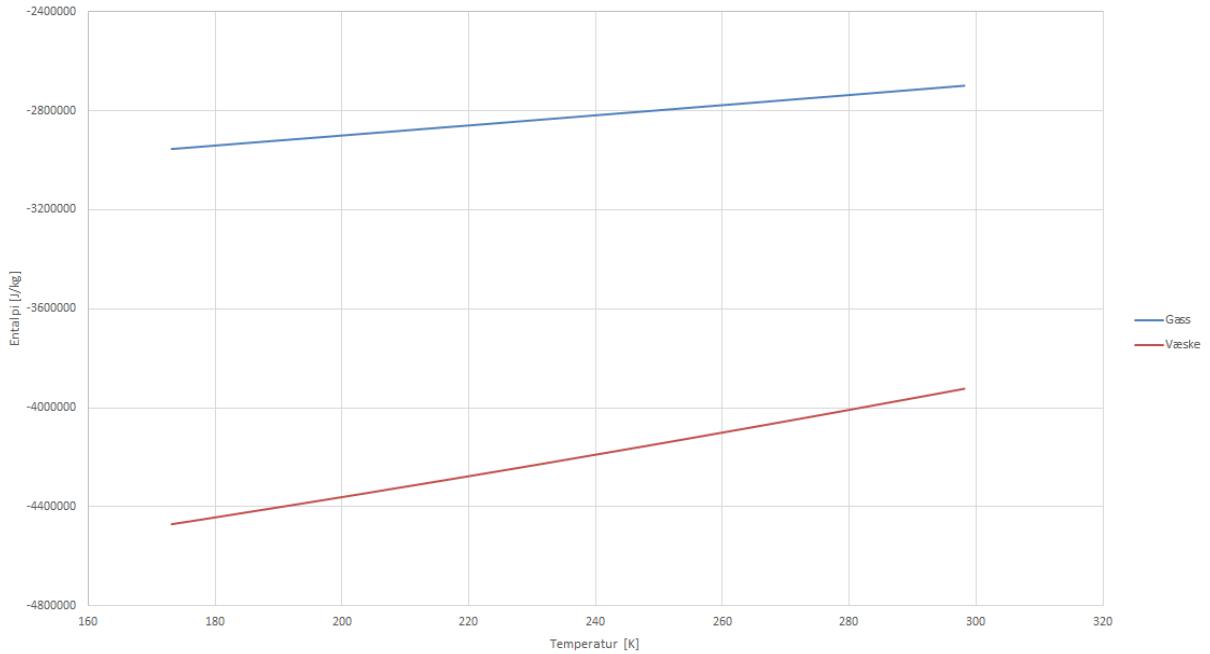
For dei ulike sensitivitetsanalysene er det tatt utgangspunkt i scenario med høgast lekkasjerate då det viser seg under lekkasjeanalyse at denne sprer seg lengre enn tilfellet ved lågare lekkasjerate.

### 4.2.1 Gridsensitivitet

Ein gridsensitivitetsanalyse vart utført på dei ulike grida lista opp i tabell 3.1 for å undersøkje korleis spreiinga av ammoakk varierer ved ulik gridstorleik. Resultata frå grid nr 1-5 er gitt i figur 4.3, der grid nr 1 svarar til biletet i a), grid nr 2 til b), osv. Grid nr 6 gav mass residual error, truleg på grunn av for smale gridceller, medan grid nr 7 vart stansa før den var fullført på grunn av ein alt for lang berekningstid, og vil derfor ikkje vere gunstig å nytte innanfor den tidsramma som var tilgjengeleg.

Grid nr 1 skil seg ut frå dei resterande grida ved at spreiinga synes å vere meir oppstykka og kaotisk. Dette er truleg på grunn av at cellestorleiken er tilnærma dobbelt så stor her. Ettersom den skil seg ut, er det derfor vurdert at dette gridet ikkje vil vere optimalt å nytte i vidare arbeid.

Dei resterande grida ser ut til å følgje samme tendens, og har tilnærma lik utstrekking når det kjem til spreiing. Det er noko variasjon i konsentrasjonsnivået, men det kan også skuldast at biletet er tatt frå litt ulike høgder då cellestorleikane er av ulik storleik.



**Figur 4.2:** Entalpi er plotta mot temperatur for utrekna entalpikonstantar. Entalpien er høgare for gassfase enn væskefase, og dermed kan gass dannast.

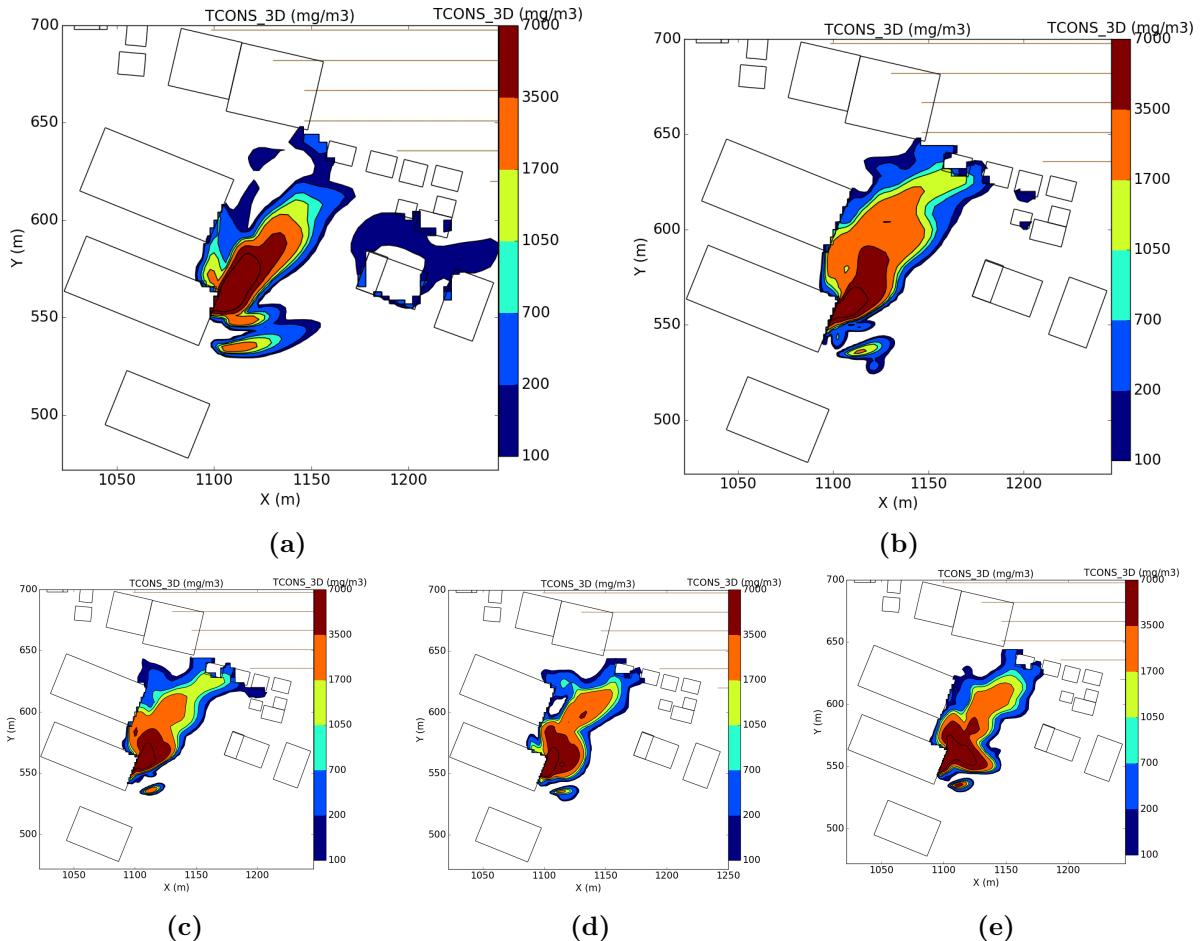
For grid nr 2 og 3, har det blitt undersøkt om storleiken på cellene i z-retning har stor innverknad på spreininga. Dette har vore utført fordi FLACS anbefaler å nytte eit finare grid i z-retning når ein har skråande terreng. Resultatet syner at det er ein liten variasjon i utstrekkinga, der grid nr 3 med mindre celler i z-retning ser ut til å spre seg nokre meter lenger. Dei ser likevel ut til å samstemme godt med kvarandre, og ettersom terrenget er flatt dei første 100 metrane i y-retning frå lekkasjepunkta, har det blitt vurdert at det ikkje er naudsynt å ha ulik cellestorleik i z-retning.

Det har i tillegg vorte undersøkt i kva grad eit refined grid spelar ei rolle på spreingssumleringa. Grid nr 4, vist i figur 4.3 d), er refined i y-retning. Samanlikna med grid 3, ser det ikkje ut til at refine spelar ei stor rolle. Det er noko forskjell i konsentrasjonen, men dette kan igjen skuldast at høgdene på dei to biletene ikkje er identiske, dessutan er det skilnad i cellestorleiken, som også kan spele inn på konsentrasjonsfordelinga.

På bakgrunn av at sjølve utstrekkinga av ammoniakkspreiinga for grid 2-5 ser ut til å vere ganske like, har grid nr 2 med cellestorleik på 1.25 m blitt vald for vidare simulering. Dette vil gje ei lågare berekningstid, som vil vere gunstig for å rekke fleire simuleringar, samstundes som det vil gje eit tilstrekkeleg godt bilet på korleis ammoniakken vil spreie seg. På grunn av ulike vindretningar og hastigheitar i dei vidare simuleringane, vil det vere naudsynt å justere stretch domain for kvart enkelt tilfelle. Dette er for å sørge for at berekningsområdet er stort nok, slik at spreininga ikkje vil gå utanfor grensene.

### 4.2.2 Lekkasjesensitivitet

Lekkasjesensitiviteten utført for å undersøkje om utsleppsrata på ammoniakk-gass frå nødventilasjonen har noko å sei for spreininga, er vist i figur 4.4. Her kan ein sjå at med ein høgare lekkasjerate, som vist i b), vil spreininga strekke seg mykje lengre. Det er dessutan høgare konsentrasjon, sidan meir ammoniakk vert sleppt ut per sekund. Figuren syner maksimalt utsrekk for dei to lekkasjeratene.



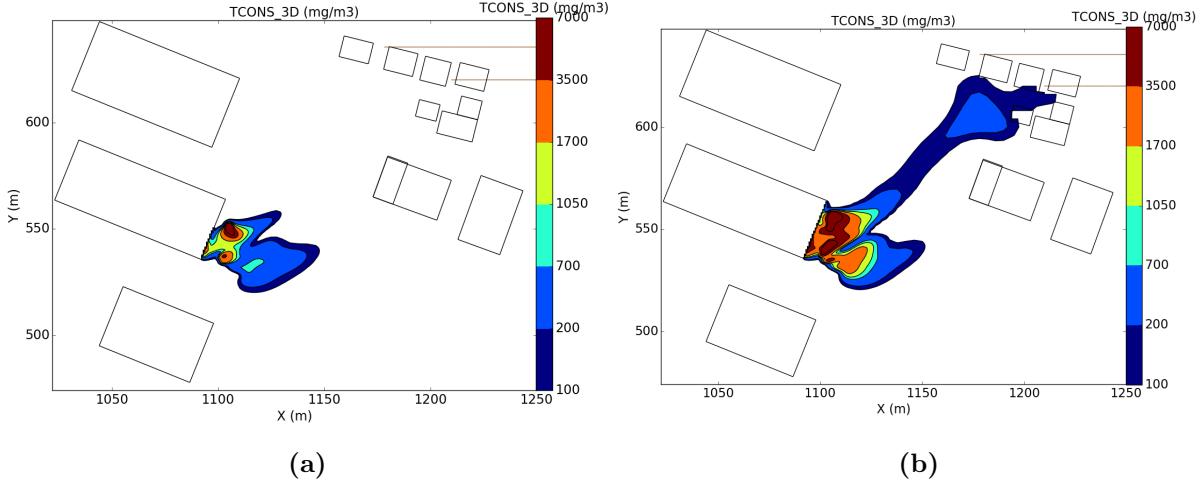
**Figur 4.3:** Gridanalyse utført for grid 1-5 fra tabell 3.1. a) syner grid nr 1, b) syner nr 2, c) syner nr 3, d) syner nr 4 og e) syner nr 5.

Då det viste seg å ha mykje å sei for spreiinga, vart dei vidare simuleringane simulert for to ulike lekkasjelerter.

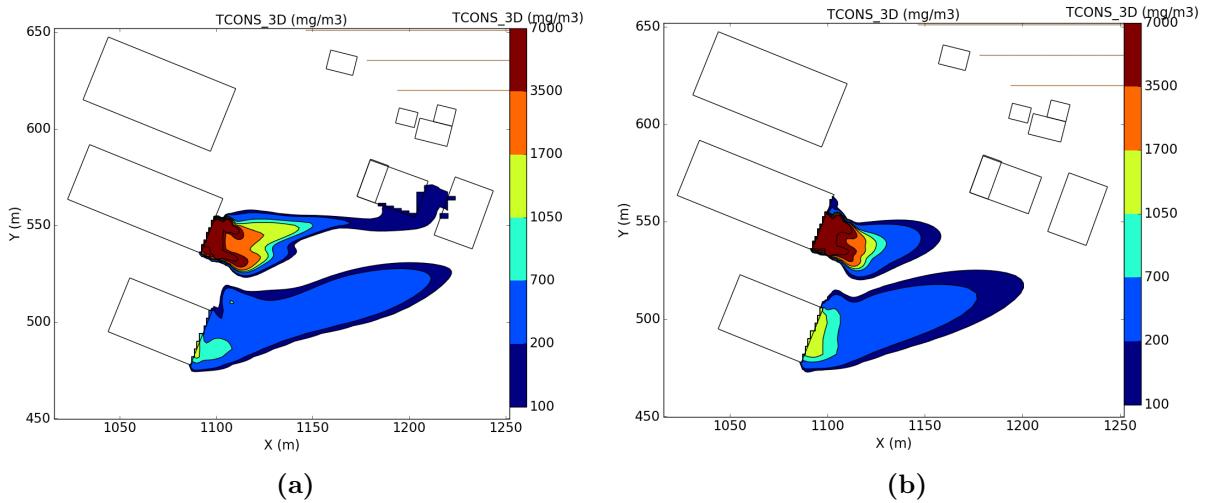
#### 4.2.3 Pasquill-sensitivitet

Ved å undersøke sensitiviteten knytt til bruk av Pasquillklasse resulterte simuleringane med klassane D og E i mass residual error. I brukarmanualen til FLACS vert det føreslege å nytte klasse F i staden, for å bli kvitt dette problemet. Resultata frå klasse F er samanlikna med same tilfelle utan pasquillklasse i figur 4.5. Her syner a) spreiinga av ammoniakksgass utan pasquillklasse, medan b) viser spreiinga med pasquillklasse F. Her kan det observerast at gassgass vert spreidd litt lenger når pasquillklasse ikkje er vald.

Mannan [29] skriv at stabil luft frå omkringliggende landlege område vert endra idet den nærmar seg byområde. Stabiliteten nær ein by har ein tendens til å vere nesten nøytral, uansett kor stabilt det er i landlege områder. Derfor er dei meir stabile forholda knytt til pasquillkategori F ikkje tilstades i byområde. Av den grunn vart det vald å ikkje nytte pasquillklasse under dei vidare spreiingssimuleringane. Det kan dermed hende at nokre av dei vidare spreiingsresultata er noko lengre enn kva resultatet ville vore ved bruk av pasquillklasse.



**Figur 4.4:** Spreiing av ammoniakk-gass ved to ulike utslepps-rater. Lågast utslepps-rate er synt i a), medan høgast utslepps-rate er synt i b).



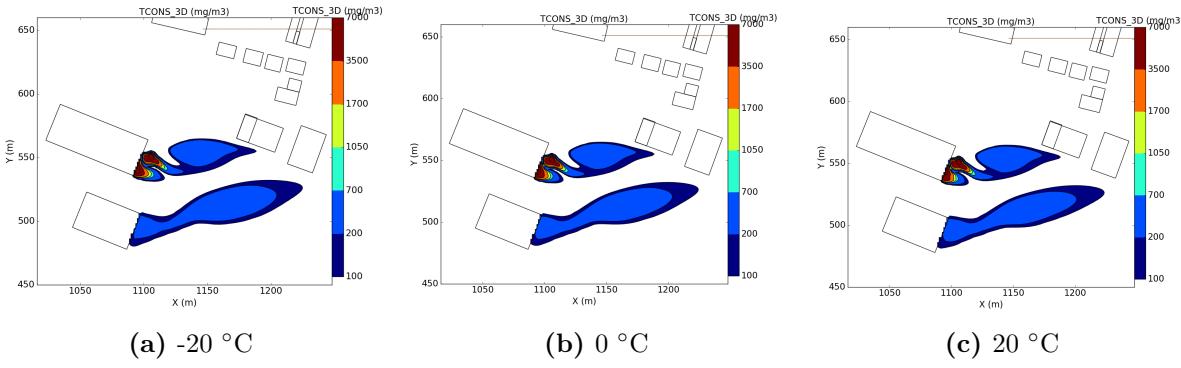
**Figur 4.5:** Spreiing av ammoniakk-gass der a) er utan pasquillklasse, og b) er med pasquillklasse F.

#### 4.2.4 Temperatursensitivitet

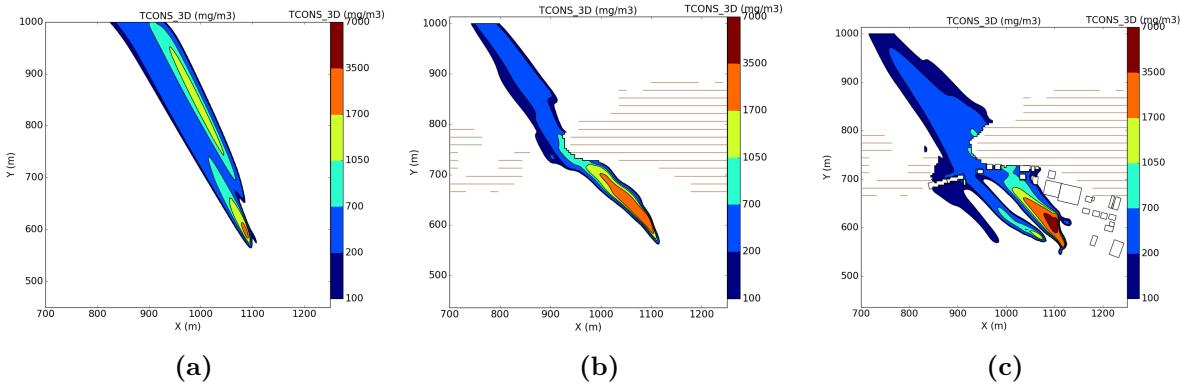
Då POOL-simuleringane ikkje var fullstendige ved start av spreieingssimuleringane, førelåg det ikkje kjennskap til kva temperatur ammoniakk heldt når gassen vart frakta ut av nødviftene. Det vart dermed naudsynt å utføre ei sensitivitetsanalyse for temperaturen til ammoniakk-gassen. Resultata frå denne analysa føreligg i figur 4.6, der temperaturen held  $-20^{\circ}\text{C}$  i a),  $0^{\circ}\text{C}$  i b), og  $20^{\circ}\text{C}$  i c). Figuren syner at det ikkje er noko merkbar endring i verken konsentrasjon eller kor langt ammoniakk-gassen vil spreie seg ved dei ulike temperaturane. Det er vidare vald å nytte temperaturen  $0^{\circ}\text{C}$  for ammoniakk-gassen i spreieingssimuleringane.

#### 4.2.5 Sensitivitet for simulering med og utan bygningar og terreng

Ved å utføre sensitivitetsanalyse for simuleringar knytt til terreng og bygningar kan ein undersøke korleis topografien spelar inn på spreieing av ammoniakk. For simuleringane utført for vind med retning og hastigheit frå SSØ på  $150^{\circ}$  og  $3\text{ m/s}$  kan ein tydleg sjå at topografien har innverknad på ammoniakk-spreiinga. Dette er synt i figur 4.7. Bilete i figur a) syner utsleppet utan bygning og terreng, i b) er terrenget tilstades, men ikkje bygningar, medan c) syner spreieing



**Figur 4.6:** Temperaturanalyse for ammoniakk-gass med temperaturane - 20°C, 0°C og 20 °C.

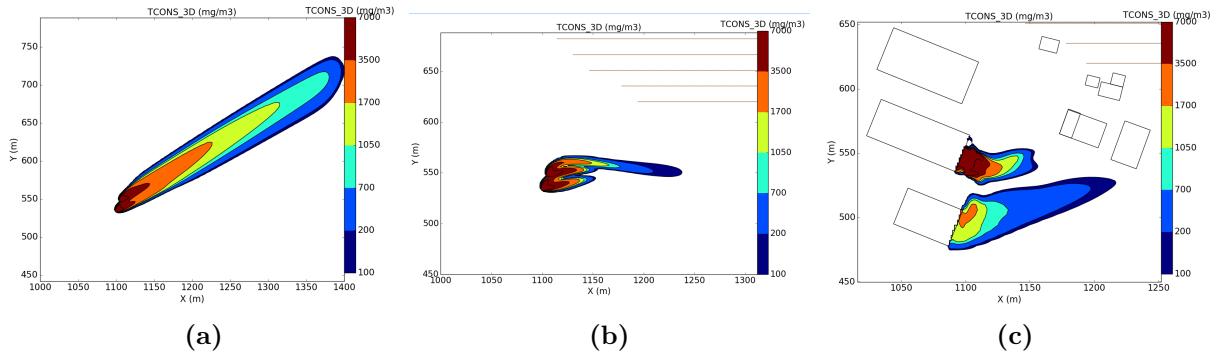


**Figur 4.7:** Sensitivitet knytt til bygning og terreng. Her syner a) verken terreng eller bygg, b) innehold terrenget, medan c) har både bygg og terrenget. Spreiinga syner vind frå SSØ på 150 ° og hastigheita 3 m/s. Bileta er tatt på høgda 15.73 m.o.h.

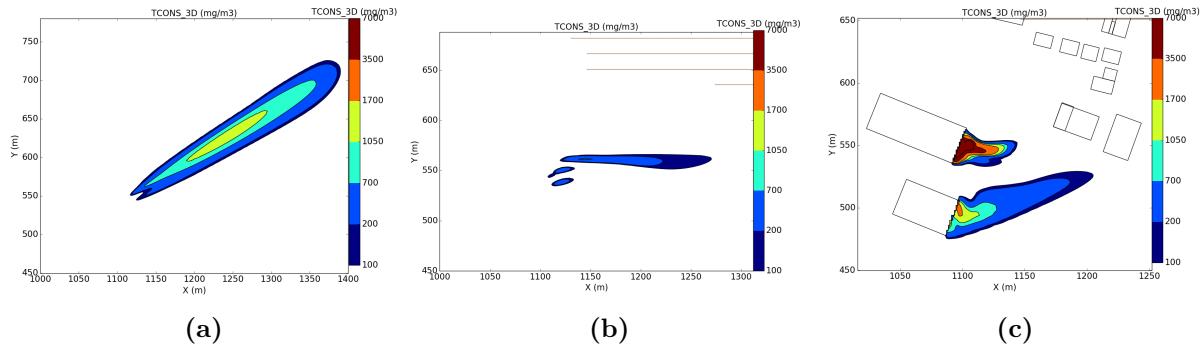
ved både terrenget og bygninga. I figur c) er spreiinga breiare, samstundes som den forgreinar seg til tre delar. Dette skuldast truleg turbulensen forårsaka av nærveret av bygningane. På grunn av terrenget vert gasskyen i figur b) og c) påverka. Det kan ein sjå ved dei rugglete innhakka i gasskya. Då ammoniakken ikkje kan passere gjennom terrenget, kan det sjå ut til at skyen i staden breiar seg litt mot venstre og dannar ein liten bøge der terrenget er til hinder.

Konsentrasjonen er høgare lenger vekke for spreiing utan terrenget og bygninga. Dette er truleg på grunn av at turbulensen og innblanding av luft fortynnar gasskya og gjev ein lægre konsentrasjon for dei andre simuleringane. På den andre sida kan ein sjå at det er høgare maksimal konsentrasjon for simuleringa som inkluderar både bygg og terrenget. Dette kan også skuldast turbulens, då turbulens har ein større innverknad på vertikal spreiing enn horizontal spreiing. Desse funna stemmer godt overeins med teori presentert i boka *Air dispersion modeling foundations and applications* [31].

Det har også vorte undersøkt påverknad av topografi ved same vindretning og hastigkeit nytta for sensitivitet ved nærværet av fjellet Hessa, frå VSV på 240 ° og 7 m/s. Dei same tendensane som er synleggjort for tilfellet over er òg tilstades her. Det vart i tillegg undersøkt skilnaden i konsentrasjon ved ulike høgder. Bilete 4.8 og 4.9 syner dette. I det første biletet er høgda satt til lekkasjehøgda på 9.38 m.o.h., medan det andre biletet viser høgda 13.13 m.o.h. Desse bileta syner at konsentrasjonen er mykje lågare ved eit høgare nivå enn utsleppspunkta når bygning og terrenget ikkje er inkludert. Dette er truleg på grunn av manglande turbulens, slik at konsentrasjonen av ammoniakk-gassen ikkje vil spreie seg i like stor grad som den gjør når ein tek omsyn til både bygningar og terrenget. Det same fenomenet er òg å finne ved lægre høgder. Greulich og Hansen [6] skriv at nærvær av bygningar bidreg til vertikal blanding. Dette gjør at



**Figur 4.8:** Sensitivitet knytt til bygning og terreng. Her syner a) verken terreng eller bygg, b) inneholder terrenget, medan c) har både bygg og terrenget. Spreiinga syner vind fra VSV på  $240^\circ$  og hastigheita  $7\text{ m/s}$ . Bileta er tatt på høgda for utsleppspunkta.

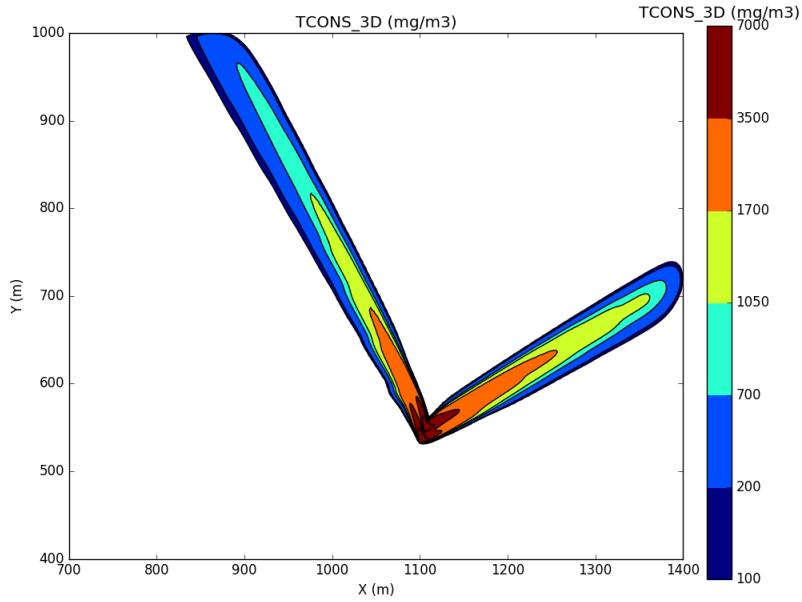


**Figur 4.9:** Sensitivitet knytt til bygning og terreng. Her syner a) verken terreng eller bygg, b) inneholder terrenget, medan c) har både bygg og terrenget. Spreiinga syner vind fra VSV på  $240^\circ$  og hastigheita  $7\text{ m/s}$ . Bileta er tatt på høgda  $13.13\text{ m.o.h.}$

det er høgare konsentrasjon i dei ulike høgdene for simuleringane som inkluderer bygningane. Frå figur 4.8 kjem det tydeleg fram at spreieninga utan bygg og terrenget strekker seg lengre enn tilfella med. Her er utstrekket tilnærma 200 meter lenger i a) enn i c). Truleg skuldast dette at turbulens er med på å redusere utstrekken medvinds. Dette kjem ikkje like klart fram for tilfellet ved vind frå SSØ på  $150^\circ$  då desse simuleringane ikkje vart strekt lenger enn 100 meter utover sjøen. Det kan likevel sjå ut som at utstrekket av gasskya nærmar seg sitt maksimum for bygningane i figur 4.7, medan skyen ser ut til å halde fram lenger i figur a).

Terrenget ser òg ut til å påverke spreieninga. I figur 4.8 er spreieninga nærmare 150 m lenger utan terrenget enn med terrenget, vist i høvesvis a) og b). Ein årsak til dette kan vere at for simuleringa som inkluderer terrenget, vil gasskya bevege seg over vatn, som har ei anna overflateruleik enn simuleringa utan terrenget.

I følgje Gavelli [7] er fareavstanden for ein gitt gasskonsentrasjon i ein modell utan landskap berre avhengig av karakteristikken til utsleppet og omgjevande forhold som temperatur, vindhastigkeit og atmosfærisk stabilitet. Vindretninga vil ikkje spele inn på fareavstanden, då avstanden vil vere lik i alle retningar. Dette har vorte undersøkt ved å køyre ei ny simulering for vindretning frå SSØ på  $150^\circ$  og  $7\text{ m/s}$  vindhastigkeit for å vurdere denne opp mot kor langt spreieninga frå VSV på  $240^\circ$  har strekkt seg. Det viser seg at det resultatet eg får her ikkje stemmer overeiins med Gavelli. I figur 4.10 ser det ut til at gasskya spreiar seg mykje lenger i retning vest, enn øst. Ved å nytte Pythagoras læresetning, har lengda på dei to gasskyane vorte rekna ut, og det viser seg at utstrekkinga for vindretning  $150^\circ$  er tilnærma 200 meter lenger enn for vindretning på  $240^\circ$ , og dette på same tid som den simuleringa går utanfor simuleringsområde.



**Figur 4.10:** Ammoniakkonsentrasjon for uforstyrra spreiling i to ulike vindretningars. Vindretningane nytta er SSØ på  $150^\circ$  og VSV på  $240^\circ$ , med hastigheita  $7 \text{ m/s}$ .

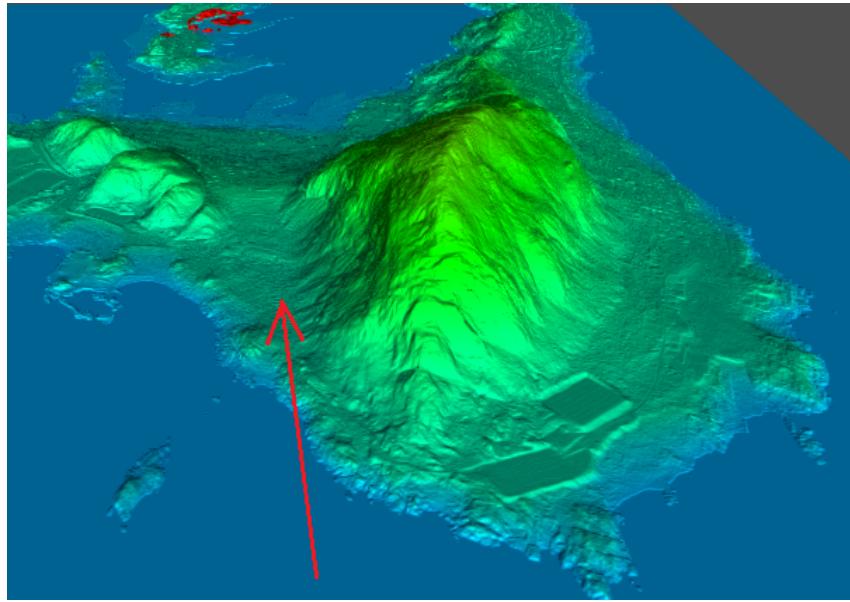
#### 4.2.6 Fjellformasjonsensitivitet

Då mass residual error var ein gjengangar for simuleringane som inkluderer fjellet Hessa, måtte simuleringsfila endrast for å unngå dette. Ved å gå igjennom alle punkta i brukarmanualen for å nøste opp i kva som forårsaka feilmeldinga, vart FLUX\_CONTROL satt til 2. Denne kan vere naudsynt å endre når ein har stretched grid, då oscillerande strøymning kan oppstå dersom det er stor skilnad på storleiken til største og minste kontrollvolumet. Her var skilnaden  $1.25 \text{ m}$  for minste, medan dei største cellene var  $20 \text{ m}$ . Standardverdiane for CFLC og CFLV vart redusert frå 20 og 2, til 5 og 0.5. Dette var for å redusere tidsstegna og forhindre at simuleringane brått stogga opp. Etter at desse endringane vart utført, fungerte simuleringane.

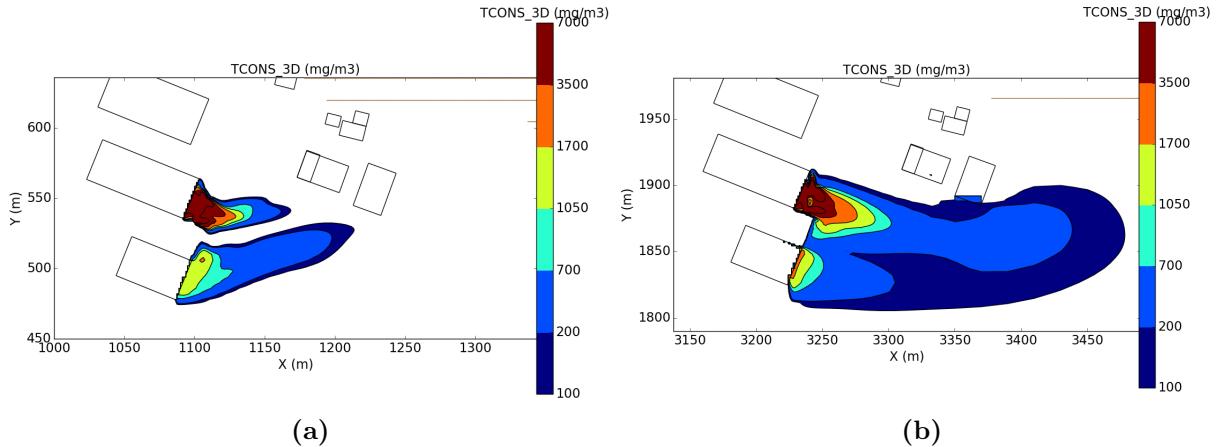
Vidare vart simuleringane som inkluderer fjellet samanlikna med tilsvarande simuleringar utan fjell. Desse sensitivitetane vart utført for begge lekkasjeratene nytta i oppgåva. Bileta presentert her er frå den høgaste utsleppsratea på  $0.7104 \text{ kg/s}$ , medan biletet frå den lågare utsleppsratea er å finne i vedlegg D.

I perioden 200-300 sekund etter lekkasjestart er spreilinga dominerande for simuleringane som inkluderer Hessa. Dette er framstilt i figur 4.12 der biletet til venstre er utan fjellet, medan biletet til høgre inkluderer fjellet. Biletet er tatt ved 300 sekund då ammoniakkassen har størst utstrekking. Her er det synleg at spreilinga strekker seg rundt 100 meter lenger i x-retninga for simuleringa som inkluderar Hessa. Dette kan skuldast auka turbulens på grunn av fjellet, samstundes som det kan bli ein vindkanaliseringseffekt ved vinden som kjem inn i kløfta mellom Hessa og ein nærliggjande fjellknau, som vist i figur 4.11. Ein anna mogleg grunn til at spreilinga er lenger for fjellet er at maksimal cellestorleik som gridet strekkast mot er 20 meter her, medan dei vanlege simuleringane har maksimal cellestorleik på 4 meter.

Både før og etter den ovannemnte tidsperioden er det simuleringa utan fjellet som spreiar ammoniakkassen lengst i x-retning. Dette er synt ved 370 sekund i figur 4.13. Her kan ein også sjå at spreilinga i y-retning er større og samanhengande for simuleringa med fjellet. Ei truleg årsak er at det vert donna meir turbulens på grunn av fjellet, og dette fører til ei større spreiling innad i gridcellene. På same tid kan også maksimal cellestorleik spele inn og påverke utstrekking av spreiling. Dette burde derimot berre spele ei rolle ytterst på gasskyen då cellestorleiken for core



**Figur 4.11:** Kløfta mellom Hessa og ein nærliggjande fjellknaus, der pila syner vald vindretning.



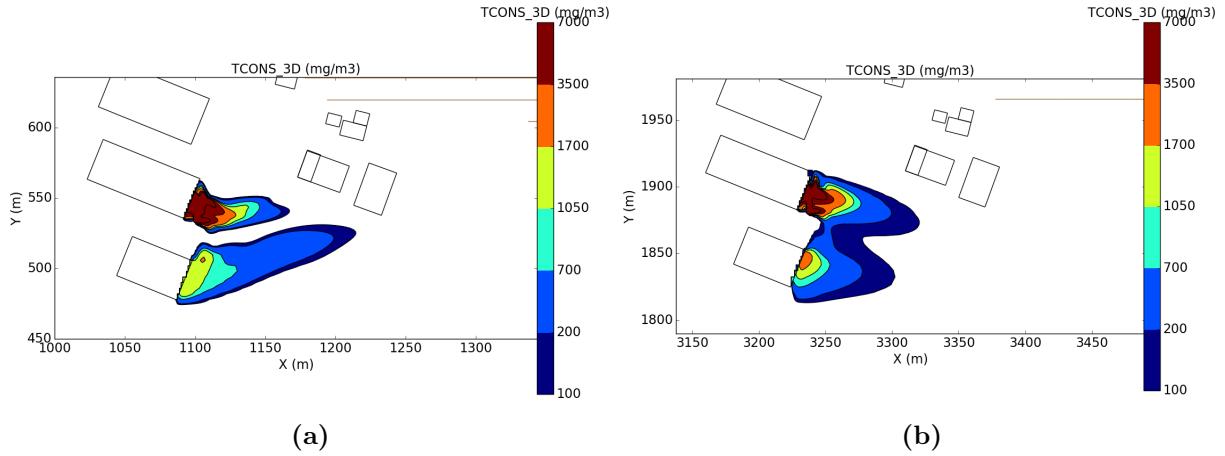
**Figur 4.12:** Fjellformasjonssensitivitet ved høg masserate, der figur a) er utan fjell, medan b) er med fjell. Biletet er tatt ved 300 sekund for høgda til utsleppspunkta. Vindretninga nytta er VSV på  $240^\circ$ , med hastigheita 7 m/s.

domain rundt lekkasjepunktene er lik for begge simuleringane.

Dei same tendensane som nemt finn ein òg for simuleringane med lågare lekkasjerate. Då lekkasjeratene er ulike, er det noko redusert utstrekking av gasskya. Framstilling av figurane for lågare utsleppsrate er lagt i vedlegg G.

### 4.3 Spreiingssimulering

Postprosessering av resultata til dei ulike spreiingssimuleringane vart utført ved å nytte Flowvis i FLACS. Konsentrasjonen og utstrekkinga av ammoniakk-gasskya vart undersøkt for dei ulike vindretningane og vindhastigheitane, og resultata vart framstilt i både 2D-cut plane og 3D plott. Konsentrasjonsintervalla i framstilling av resultata er lagt opp etter etablerte terskelverdiar som er nemnt under kapittel 2.1.2 der helsefare og skadepotensial knytt til ammoniakk er lagt fram. Ettersom konsentrasjonen er målt med eininga  $\text{mg}/\text{m}^3$  medan det er vanleg å nytte ppm som



**Figur 4.13:** Fjellformasjonssensitivitet ved høg masserate, der figur a) er utan fjell, medan b) er med fjell. Biletet er tatt ved 370 sekund for høgda til utsleppspunkta. Vindretninga nytta er VSV på  $240^\circ$ , med hastigheita 7 m/s.

ein mål, er tabell 4.1 laga for å vise eit overslag frå ppm til  $\text{mg}/\text{m}^3$ . Det nederste nivået nytta her er for ERPG-2. Øvste nivået er sett til 10 000 ppm, eller  $7000 \text{ mg}/\text{m}^3$ , som gjer at det øvste intervallet syner områder som gjev høg sannsyn for dødsfall ved kort eksponering.

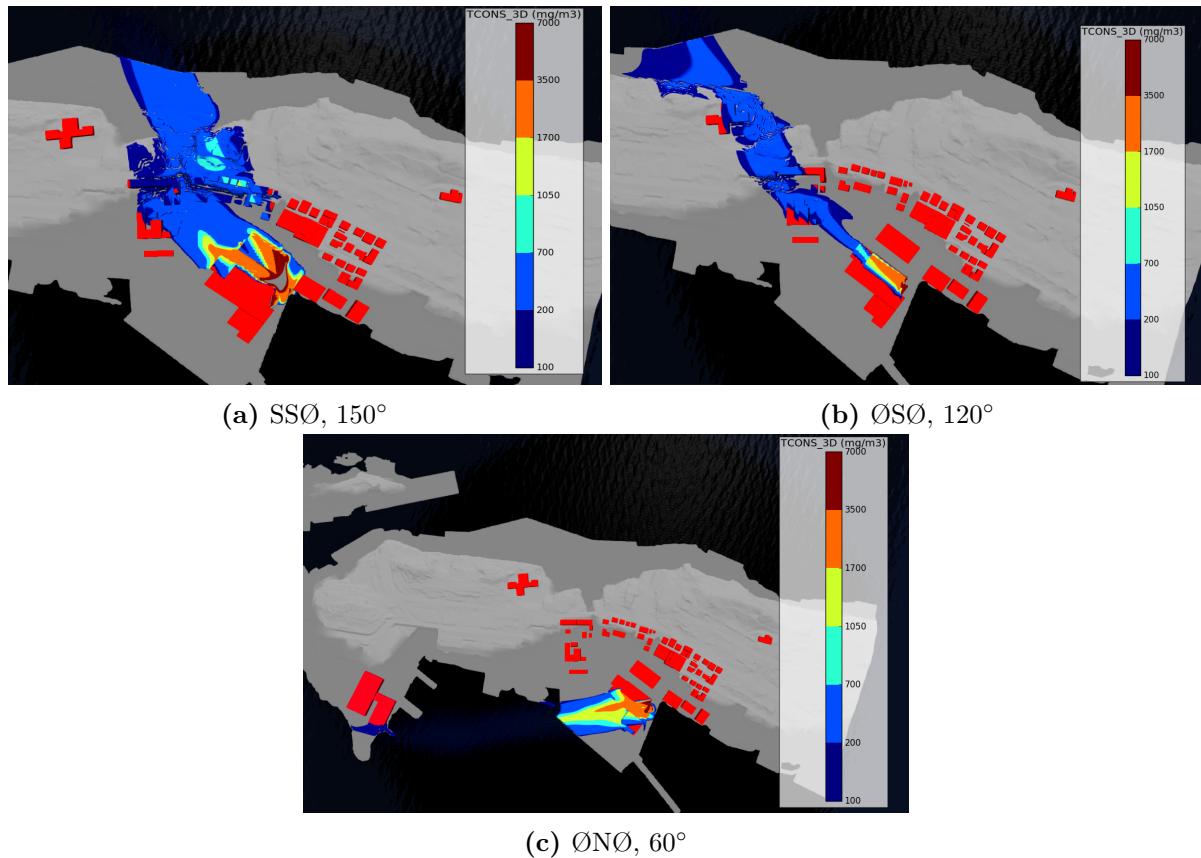
**Tabell 4.1:** Tabell med valde konsentrasjonsverdiar nytta i flowvis. Verdiane er omgjort frå ppm til  $\text{mg}/\text{m}^3$  som er nytta i framstillinga av ammoniakkonsentrasjonen.

ppm	$\text{mg}/\text{m}^3$
150	100
300	200
1000	700
1500	1050
2400	1700
5000	3500
10000	7000

Av dei undersøkte vindretningane er det tre retningar som skil seg ut. Ammoniakk-gassen vert spreidd lengst for vindretninga NNØ  $150^\circ$ , som forøvrig er den hyppigaste vindretninga, ØSØ på  $120^\circ$  og ØNØ på  $60^\circ$ . Desse retningane er vist i figur 4.14. Som eit resultat av at gasskya spreidde seg lenger enn den opprinnelige geometrien for vindretninga på  $60^\circ$ , vart det lagt til eit ekstra bygg lengre vest for å undersøke om ammoniakken spreiar seg heilt bort hit. Figur c) viser at noko ammoniakk vil nå heilt over her, men då største delen av spreieninga føregår over vatn, og oppgåva er avgrensa til å ikkje fokusere på spreiening over sjø, vil ikkje risikoen for tredjeperson bli vurdert her. Både vindretning ved  $150^\circ$ , og  $120^\circ$ , vil spreie seg på tvers av Aspøya og potensielt isolere deler av øya, samt øya Hessa. Ålesund har tidlegare vorte sperra av som følgje av eit ammoniakkutslepp hjå Tine Meieri i Ålesund [40]. Dersom eit ammoniakkutslepp vil spreie seg med vindretninga  $120^\circ$ , vil gamleheimen verte råka, som vist i figur b). Dette utgjer ein betydelig risiko for tredjeperson då ein eventuell evakuering vil vere krevjande. På den andre sida vert ammoniakken raskt fortynna og vil ikkje vere eit vedvarande problem då den ikkje vert liggjande over ein lengre periode. Det kjem fram frå biletet 4.14 at spreieninga i a) dekkar eit breiare området, og fleire boligar vert påverka av gassen. I tillegg kan det sjå ut til at det

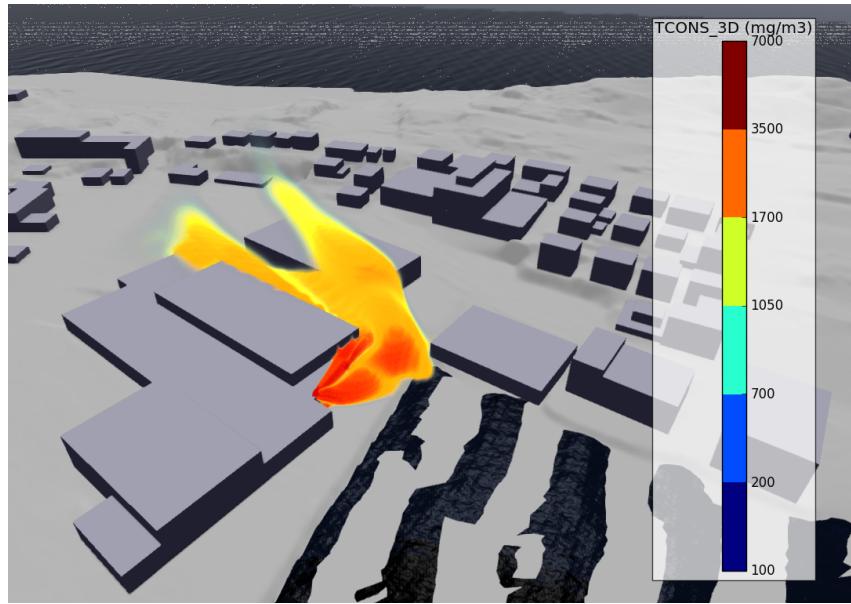
fenomenet Gavelli omtalar som 'vindkanaliseringseffekt' førekjem mellom Tyrholm & Farstad og Rema 1000. Figur 4.15 illustrerer korleis gasskya spreiar seg ved ein vindretning på  $150^\circ$ . Resultata frå dei andre vindretningane og hastigheitane er å finne i vedlegg F.

Store delar av området som vert utsett for ammoniakkutslepp vil oppleve konsentrasjonar mellom 200 og  $700 \text{ mg/m}^3$ , som vist i figur 4.14. Desse verdiane er over IDLH og strekkjer seg mot akutt giftig konsentrasjon. Gamleheimen vert råka av denne mengda ved vind frå  $\text{ØSØ}$  på  $120^\circ$ . Det ser òg ut til at det vert danna gasslommer med konsentrasjonar opp mot  $1700 \text{ mg/m}^3$  ved bustadområde i relativt stor avstand frå utsleppsområde. Dette konsentrasjonsnivået er livstrugande om ein oppheld seg i området med denne konsentrasjonen i meir enn 30 minutt. Gasslommene er truleg danna på grunn av topografien i området. For området utanfor Tyrholm & Farstad, samt ved Rema 1000 vil konsentrasjonen vere på verdiar som kan føre til dødsfall etter kort eksponering. Dette kan ein sjå frå figur 4.14 a) og frå figur 4.16.

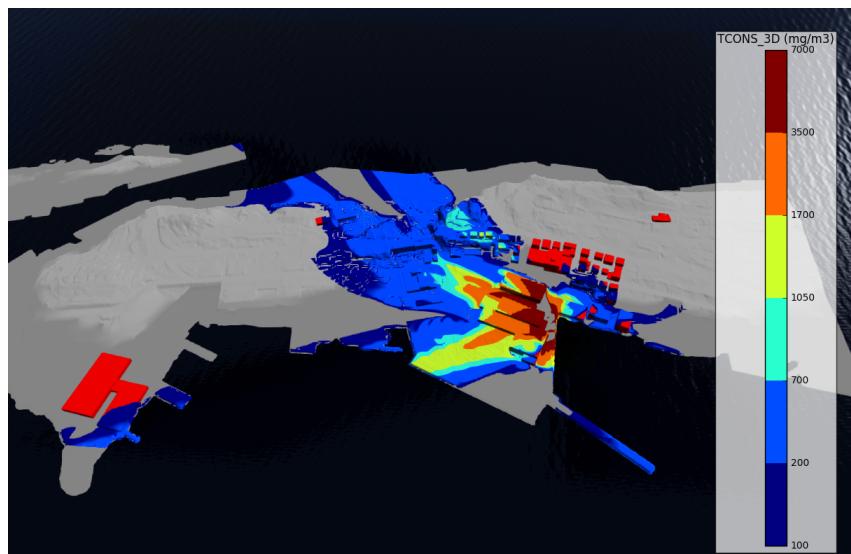


**Figur 4.14:** Dei tre vindretningane som spreiar ammoniakk-gassen lengst.

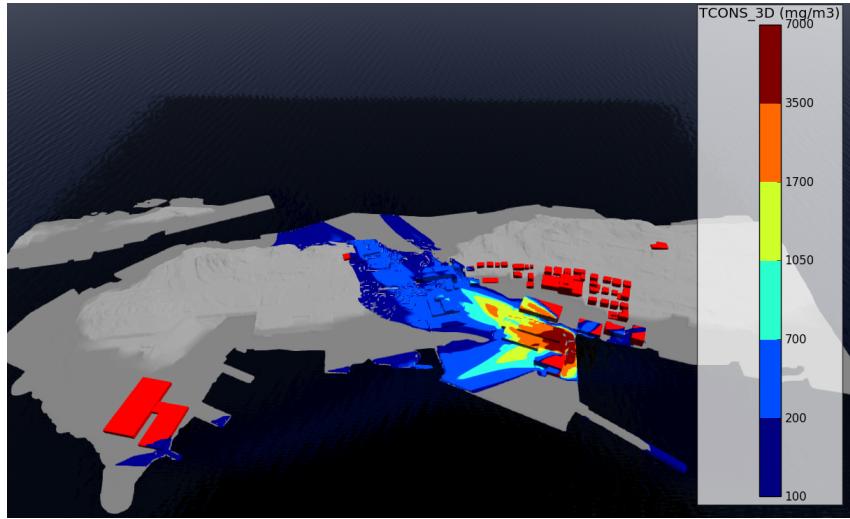
Ved å nytte funksjonen *"Create an aggregated result based on several runs"* i Flowvis, har dei ulike simuleringane for same lekkasjerate blitt lagt over kvarandre for å få ei oversikt over korleis ammoniakken vil spreie seg for alle dei undersøkte vindretningane og hastigheitane. For å presentere alle resultata i eit og samme plott, var det naudsynt å lage eit *basegrid* som hadde maks utstrekking på griddet i alle retningane. Figurane 4.16 og 4.17 syner maksimal ammoniakkspesiferte for alle vindretningane og vindhastigheitane for høvesvis høg og låg lekkasjerate. Det kjem òg her fram at den høgare lekkasjeraten både spreiar seg lengre, samstundes som den har ein høgare konsentrasjon. På desse oversiktsbileta kjem det òg fram at det berre er ein liten del av ammoniakk-gassen som vil nå operasjonssentralen til politiet og brannvesenet ved dei undersøkte vindretningane og hastigheitane. Ingen av dei undersøkte vindretningane førte til at barnehagen var eksponert for ammoniakk ved ein lekkasje. Det er dessutan lite ammoniakk som vert spreidd innover mot bykjerna av Ålesund for dei utførte simuleringane.



**Figur 4.15:** Illustrasjon av gasskya som spreiar seg mellom Tyrholm & Farstad og Rema 1000 ved vindretning fra SSØ på 150°.



**Figur 4.16:** Maksimal ammoniakkeksponering for alle vindretninger og vindhastigheitar for høgaste lekkasjeraten.



**Figur 4.17:** Maksimal ammoniakkekspionering for alle vindretningar og vindhastigheitar for lågaste lekkasjeren.

I tillegg til 3D plott, er 2D-cut plane nytta for 3 ulike høgder for å undersøkje korleis spreieninga varierer med høgd, synt i figur 4.18. Denne figuren viser maksimal utstrekking av ammoniakk-gassen ved bakkenivå i a), ved lekkasjepunktet i b) og ved høgd rundt 17 m for å inkludere den vesle forhøginga som gamleheimen ligg på. Ut i frå bileta er konsentrasjonen til ammoniakk høgare ved bakkenivå. Dette er eit teikn på at ammoniakk oppfører seg som ein tung gass, og synk difor ned mot bakken. Det kan også skuldast ein effekt av at bygningar og terrenget er med på å hindre delar av ammoniakken i å stige. På den andre sida kan bygningar og terrenget vere med på å auke turbulens, slik at meir luft vert blanda inn i gassen og den fortynnast. Turbulensen kan også vere med på å auke den vertikale spreieninga av gassen.

Spreiensutstrekket er også redusert av aukande vindhastigkeit. Dette kan ein sjå frå dei ulike figurane som er å finne i vedlegg F og G. Ein grunn til at spreieninga er kortare ved høgare hastigheitar, er at det blir danna meir turbulens. Denne turbulensen er med på å blande inn meir luft i gasskya, slik at gassen raskare vert fortynna ved høgare hastigheitar.

I vedlegg E er dei ulike overlappande bileta for dei ulike hastigheitane lagt ved.

Resultata framskaffa i denne oppgåva er rettleiande og ikkje absolutte. Det krevjast fleire undersøkingar og sensitivitetsanalyser for å kunne sei om resultata er endelege.

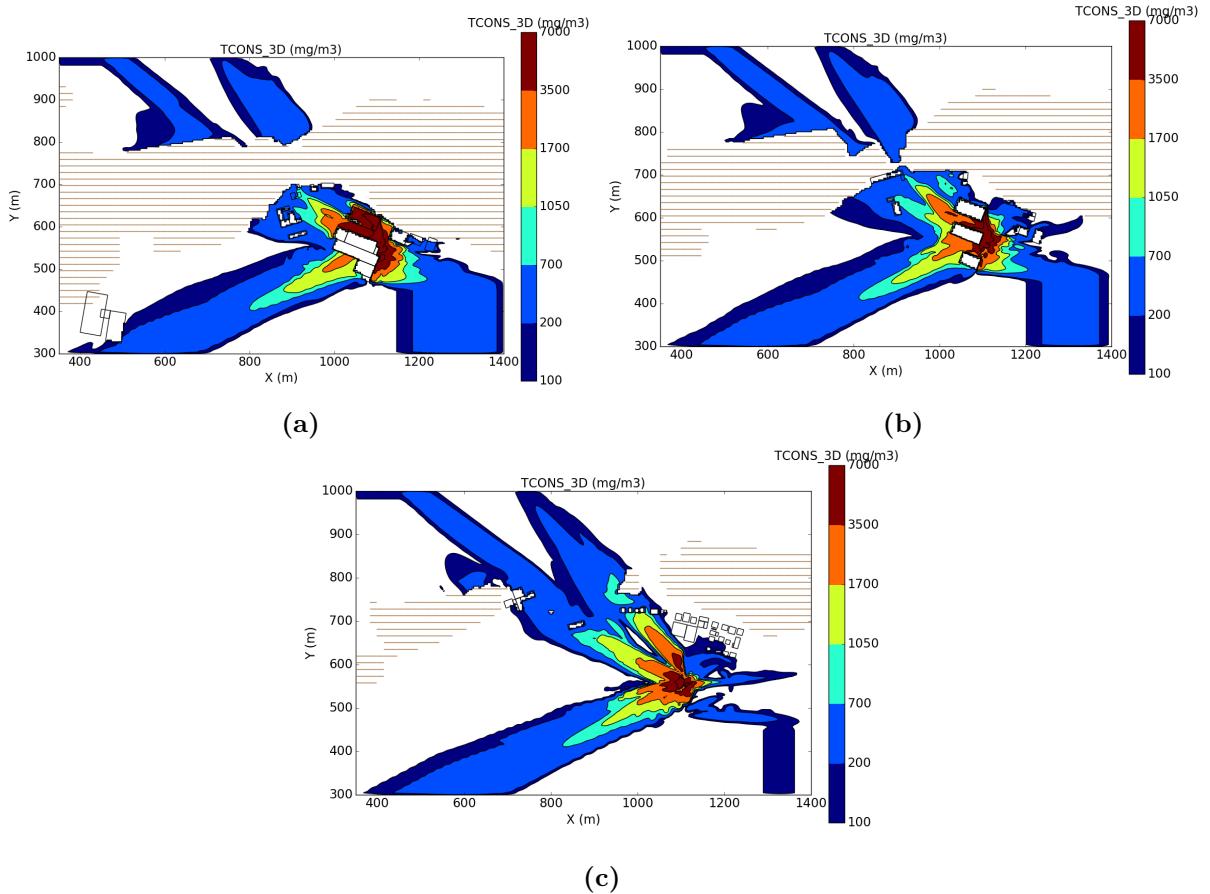
## 4.4 Uvisse

I denne oppgåva har det vist seg å vere ei rekke med uvisser som kan ha påverka dei resultata som er funne. Nokre av desse vil bli omtalt her.

### POOL-simulering

Det er fleire uvisser knytt til POOL-simuleringa utført i denne oppgåva. Den truleg største uvissa av dei alle er at ammoniakk ikkje er validert for POOL. Dette gjer at dei anbefalte verdiane gjerne ikkje fungerer optimalt i simuleringsprosessen.

FLACS tar utgangspunkt i eit andregrads polynom for utrekning av varmekapasitet og entalpi, medan formelen som NIST [39] oppgjev innehold fleire ledd. Dette kan bidra til eit avvik i



**Figur 4.18:** Overlappa bilete for alle vindretningane og hastigheitane av maksimal utstrekking av ammoniakk-gassen for tre ulike høgder med høg lekkasjerate. a) syner 3.13 m.o.h., b) syner utsleppshøgda, og c) syner 19.19 m.o.h.

utrekninga for begge desse verdiane, som kan spele inn på utrekninga av entalpikonstantane utført og vist i vedlegg B. Desse konstantane varierer dessutan ved val av temperatur. Mest truleg er dette årsaka til ulikskapen mellom dei innhenta verdiane og dei som er rekna ut, synt i tabell B.3. Temperaturintervallet oppgjeven for verdiane henta frå brukarstøtta til FLACS er mellom 197.495 K - 700 K. Dette er eit mykje større temperaturintervall enn det intervallet nytta i denne oppgåva, 173.15 - 273.15 K. Skilnaden på temperaturintervalla kan vere med på at entalpikonstantane avvik frå kvarandre. Då det ikkje føreligg kjennskap til kva temperaturar verdiane innhenta frå rettleiar er utrekna for, gjev dette ei ekstra uvisse knytt til verdiane. Det kjem i tillegg ei uvisse til bruk av konstantane oppgjeven i JANAF-tabellane. Her var dei ulike konstantane nytta for å rekne ut entalpikonstantane oppgjeven for eit høgare temperaturintervall, 298 - 1400 K. Desse vart brukt då dei var det lågaste settet med konstantar. Dette kan truleg vere med på å gi ei uvisse til utrekninga av varmekapasiteten og entalpien for tilfellet i oppgåva. Ettersom dei ulike entalpikonstantane varierer ved endring av temperatur, vil det vere naudsynt å kjenne til temperaturen på ammoniakken samt gangen i eit utslepp for å få mest nøyaktige verdiar for utviklinga av basseng og danning av gass i POOL-simuleringa. Dette gjer det vanskeleg å fastslå kva verdiar som bør nyttast for ammoniakk i POOL. Det føreligg i tillegg ei uvisse kring utrekninga av entalpikonstantane for væskefase. Då det ikkje var mogleg å innhente informasjon for like låge temperaturar som nytta for utrekninga av gass, måtte eit anna temperaturintervall nyttast til utrekninga av entalpikonstantane for væske.

Lekkasjeraten frå væskeutskiljaren som vart nytta i POOL-simuleringa kom frå programmet FLASH. Denne verdien gav informasjon om kor raskt ammoniakkvæska lak ut av behaldaren.

Sjølv om væska etterkvart lek ut på grunn av trykkskilnadar vart det likevel nytta ein konstant lekkasjerate ut av væskeutskiljaren. Dette er truleg med på å gje ein raskare tömming av tanken, som vidare kan føre til at ammoniakken fordampar og vert frakta vekk raskare enn ved ein reell situasjon. Denne uvissa kan påverke dei resultata som POOL-simuleringa skulle gje svar på. Dessutan er det uvisst om heile tanken vil leke ut i maskinrommet eller om noko vil verte liggjande igjen. Ei feilkjelde som førekjem er at FLASH ikkje handterte temperatur lågare enn kokepunktet for ammoniakk. Då væska held ein temperatur mellom -38 / - 40 °C i væskeutskiljaren, måtte - 33 °C nyttast i FLASH. Mengd ammoniakk vart vidare rekna ut for denne temperaturen, noko som har ført til at feil mengd vart nytta vidare i oppgåva. Dess lågare temperatur, dess høgare vert tettleiken, då eigenskapane føl den ideelle gasslova. Dette gjer at ved - 40 °C er tettleiken  $690.15 \text{ kg/m}^3$ , medan for - 33 °C er tettleiken  $681.57 \text{ kg/m}^3$  [12]. Skilnaden utgjer  $8.58 \text{ kg/m}^3$ . I oppgåva har det derfor vorte nytta ein totalmengd med ammoniakk på 9 kg mindre enn det dei vil ha ved temperatur - 40 °C. Lekkasjen burde dermed ha gått i 6.5 sekund lenger for å få ut all ammoniakken.

Det vert òg sett vekk i frå 'delay' om kor lang tid det tar å oppdage ammoniakklekkasjen. Konsentrasjonen må nå 1000 ppm før gassdetektorane slår alarm. Tyrholm & Farstad melder om at gassdetektor normalt vil stoppe pumpene når den aktiverast, slik at det etterkvart berre er trykkdirferansen som pressar væska ut av systemet. Dette har det blitt sett vekk i frå i denne oppgåva. Denne forenklinga er nytta ettersom at lekkasjerata oppgjeven av FLASH har vorte brukt igjennom heile simuleringa då det basert på tilgjengeleg informasjon er vanskeleg å føresjå korleis lekkasjen vil variere etter kvart som tanken vert tömd. Dette gjev truleg eit overestimat på kor raskt væska lek ut av tanken.

Då det ikkje var mogleg å få informasjon frå POOL-simuleringane før det vart fastslått at det var for seint å nytte desse i vidare simuleringar, vart det uansett ikkje mogleg å få eit anslag på kor raskt væska inni maskinrommet fordampa til gass. Dette førte til at det ikkje låg føre data på kor mykje av gassen som vart frakta ut av nødventilasjonssystemet. Av den grunn vart det anslått eit konstant utslepp, noko som truleg ikkje vil vere relevant då fordampingsrata vil variere med ulike føresetnadar som nemnt tidlegare.

I modellen som utgjer maskinrommet til Tyrholm & Farstad er det berre objekt av ein viss storleik som er lagt inn. Rør og mindre gjenstandar vart sett vekk i frå. Dette kan ha ei innverknad på korleis bassenget spreiar seg, og ammoniakken fordampar ettersom mengd fri overflate for fordamping kan verte redusert ved fleire objekt. Det vil i tillegg vere færre hindringar for gasskya då rør ikkje er inkludert i modellen.

All uvisse som er sameina med POOL-simulering for ammoniakk attspeglar at programvara ikkje er moden nok til å nytte ammoniakk som ein substans for slike simuleringar.

## Sensitivitetsanalysane

Sensitivitetsanalysane fører med seg ei uvisse då alle analysane bortsett frå sensitivitet til bygning er utført for ei vindretning og vindhastigheit. Dette kan føre til at enkelte fenomen ikkje vert oppdaga for den undersøkte retninga og hastigheita. Dei ulike sensitivitetsanalysane burde derfor utførast for alle vindretningane og hastigkeitene nytta i oppgåva. Dette blei midlertidig ikkje utført på grunn av den omfattande berekningstida det ville medføre, og tida strakk dermed ikkje til.

Under utføringa av sensitivitetsanalysane kunne arbeidet vore utført med ein konsekvent bruk av vindretning og hastigheit. For gridsensitivitet og lekkasjesensitivitet var simuleringane utført for vindretning frå SSV på  $210^\circ$  og  $3 \text{ m/s}$  som gav spreiing i retning politihuset, medan dei resterande nytta vind frå VSV på  $240^\circ$  og  $7 \text{ m/s}$  då det var antatt at denne kunne spele størst

rolle for simulering for fjellet.

Ved bruk av pasquillklasse D og E resulterte simuleringane i feilmeldinga '*mass residual error*'. Då desse simuleringane òg var utført ved ein bestemt vindretning og hastigkeit, kan det hende at resultatet ville vorte annleis for ei anna retning eller hastigkeit. Det vart ikkje prioritert å undersøke dette ettersom den nytta retninga er ein av dei som skulle vurderast i spreiingssimuleringane, og det ville ikkje vere representativt å nytte desse pasquill klassene då dei ikkje fungerer for alle tilfelle. Simuleringane vart i staden vald å utførast utan pasquill klasse. Dette kan igjen vere ei uvisse, då det ikkje er sikkert at dette representerer den atmosfæriske stabiliteten i Ålesund.

Då dei ulike gridanalysane vart utført med ulike cellestorleikar, var det ikkje mogleg å vurdere spreiingsresultata i same høgd for dei ulike grida. Dette kan føre til noko variasjon i konsentrasjonen samt utstrekkinga av spreiinga. Valet av grid er òg ei uvisse knytt til resultata frå spreiingssimuleringane. Eit av dei grovere grida undersøkt var vald som grid då det såg ut som det samsvarer med dei finare grida, samstundes som berekningstida vil vere lægre. Ettersom gridsensitiviteten var den første utført, er det ei uvisse med tanke på at lekkasjeraten nytta her ikkje er den same som den nytta vidare i oppgåva. Gridsensitiviteten er utført med ein lekkasjerate lik kapasiteten til nødventilasjonen hjå Tyrholm & Farstad. Den vart også utført for ein lekkasje som heldt fram i 100 sekund, og ikkje like lenge som dei vidare spreiingssimuleringane. Optimalt sett kunne nok gridsensitiviteten verta utført på nyt etter val av lekkasjerate for å samstemme betre med scenario nytta i oppgåva. Enkelte av simuleringane for gridsensitivitetene kørde over fleire dagar for 200 sekund. Berekningstida for ei simulering over 1000 sekund ville tatt for lang tid i forhold til kva utbytte nytteverdien ville gitt innanfor tilgjengleg tidsramme. På grunn av tidsbruken vart det difor ikkje utført ny gridsensitivitetanalyse.

Ei uvisse i samanheng med oppgåva er at blandingstilhøvet mellom luft og ammoniakk som vert frakta ut av maskinrommet gjennom nødventilasjonen legget ikkje er kjent. Her er det difor simulert for ein lågare utsleppsrate av ammoniakk enn viftene har kapasitet for. Det vert vidare tenkt at resten av viftekapasiteten vil fjerne luft frå maskinrommet. Ettersom det dessutan ikkje låg føre informasjon om kor mykje ammoniakk som forlét maskinrommet via nødventilasjonen, har det blitt antatt to ulike lekkasjerater. Desse strøymer forøvrig med konstant hastigkeit, slik at det truleg vil vere med å påverke resultatet i noko grad.

I utføringa av lekkasjesensitiviteten vert det òg antatt konstant utstrøyming, og det er ikkje tatt omsyn til at lekkasjeraten kan variere ut i frå fordampingsraten av ammoniakk inni maskinrommet. Det fører dermed til ei uvisse når det kjem til lekkasjane nytta i oppgåva.

Utrekninga av ammoniakkspreiing ved bruk av Pythagoras læresetning for simulering utan terren og bygg og simulering med terren fører med ei uvisse då punkta for maksimal utstrekking ikkje er målt til koordinatverdiar. Det er på den andre sida ikkje gjort så stor utrekningsfeil at resultatet på ca. 200 meter vil verte endra i stor grad. Spreiinga utan terren i retning  $150^\circ$  vil framleis strekke seg lengre enn simuleringa ved  $240^\circ$ .

Det førekjem òg ei uvisse i spreiingssimuleringane ettersom fjellet Hessa ikkje er tatt med vidare. Då det vart utført ei sensitivitetsanalyse for å undersøke i kva grad dette fjellet vil påverke spreiinga, tok kvar simulering ei veke. På grunn av tida til rådigheit vart det derfor vurdert at simuleringane burde halde fram utan påverknad av fjellet. Dette kan ha ført til at maksimal utstrekking av ammoniakk-gassen har vorte underestimert.

## Modell

Rausand [41] omtalar ein modell som ei forenkling av eit analyseobjekt utført slik at ein kan nytte matematiske og andre analytiske metodar til å avleie interessante eigenskapar. Ein modell

er dermed aldri heilt korrekt, og bruken av modellar vil derfor alltid medføre uvisse.

Ei av uvissene knytt til modellen nytta i denne oppgåva er utforminga av geometrien. Ettersom det ikkje fungerte å importere Ålesund by i FLACS ved å bruke geo2flacs utility, måtte dei ulike bygningane som skulle representere byen leggjast inn manuelt. Til dette vart målereiskapen i google maps nytta for å gje eit tilnærma mål av bygga. Då dette er ein upresis måling, fører det med stor uvisse til bygningane sine storleik, særleg sidan måling av høgd i z-retning var krevjande, då både augemål og referansepunkt måtte nyttast. Dette har truleg ført til at bygningane er både overrepresentert og underrepresentert med tanke på storleik. Dessutan var arbeidsprosessen med å lage alle bygningane og plassere dei inn i geometrien tidkrevjande, slik at berre eit utval bygg blei tatt med. Dette har ført til at modellen ikkje er så detaljert og representativ som den ville vore om importeringa av bygningane hadde fungert.

Ei anna uvisse er at bygningane er rotert for å stemme overeins med terrenget som svarar til Ålesund. Dette vart utført for å få best mogleg samsvar med korleis eit eventuelt utslepp vil gå føre seg. Eit problem som då kan oppstå er at FLACS ikkje er validert for roterte veggar, slik at det førekjem ei uvisse til resultata i samband med dette.

Då simuleringane støtte på feilmeldinga '*mass residual error*', måtte ein del av oppsettet endrast for å eliminere dette problemet. Det kan ha ført til at dei ulike situasjonane har blitt meir idealiserte enn kva som eigentleg vil gå føre seg ved eit reelt tilfelle.

Det er òg uvisse forbunde med val av grid. Då uniformt grid er nytta under simuleringane sjølv om det er anbefalt med lågare gridceller i z-retning for skråande terreng, kan dette føre med ei uvisse knytt til både utstrekking og konsentrasjon til ammoniakk-gassen. Ut i frå gridsensitiviteten såg det likevel ut som at dette ikkje kom til å ha stor effekt, og på grunn av tid vart det vald å nytte uniform grid. Det same gjaldt refine leak funksjonen. Denne førte dessutan til '*mass residual error*' ved fleire anledningar, og vart vald å sjå vekk frå då det såg ut til å ikkje ha stor innverknad. Det kan i tillegg vere ei uvisse knytt til grad av strekking for dei ulike simuleringane.

Frå dei overlappa biletene kan det sjå ut som at gasskya for vindretninga frå V på 270 ° vert ekstrapolert, og spreiar seg lengre sørover. Dette skuldast truleg at gridet ikkje vart strekt langt nok til å dekke heile gasskya då den berre spreidde seg over vatn. Ettersom '*basegridet*' har lengre utstrekking, ser det dermed ut som at gasskya fylgjer dette gridet. Dette kan føre til ein større utstrekking enn kva som eigentleg er gjeldande. Det same kan ein observere øvst i venstre hjørnet for dei overlappa biletene i figur 4.18, då strekkinga av gridet også her vart stogga over vatnet.

## Spreiingssimulering

I høve spreiingssimuleringane er det uvisse knytt til val av lekkasjerate. Ettersom POOL-simuleringane ikkje gav informasjon i tide, måtte lekkasjeratane bli vald på bakgrunn av antagelser. Det vart vald to ulike lekkasjeratar. Den eine lekkasjerata svarar til halvparten av nødventilasjonen sin kapasitet, medan den andre svarar til ein fjerdedel av kapasiteten. Desse vala blei tatt då det truleg ikkje er rein ammoniakk som kjem ut av nødviftene. Det er også her gjort ei forenkling med at lekkasjeraten er konstant, noko som truleg ikkje vil vere tilfellet då ammoniakk fordampar med ulik hastigheit etter kor mykje væske som ligg på bakken. Då det ikkje føreligg informasjon om denne lekkasjeraten, kan det føre til at ammoniakk-gassen som spreier seg er overestimert, eller i verre tilfelle for låg. Dersom den er underestimert vil gassen kunne spreie seg lengre, og påverke større område enn kva som er føreslått i denne oppgåva. Dette fører til ei auka risiko for tredjeperson.

Det er òg knytt ei uvisse til val av ruleikslengd. Frå Hanna og Britter [42] kjem det fram

at den maksimale konsentrasjonen ved bakkenivå for utslepp i nærleiken av bakkenivå har ein tendens til å minke med auka overflateruleik. Dette gjer at konsentrasjonen kan vere høgare ved bakkenivå dersom ruleikslengda er sett til ein høgare verdi enn den eigentlege verdien. Det er samstundes vanskeleg å fastsette ein nøyaktig verdi, og ofte vert fastsette verdiar som kan stemme overeins med terrenget vald.

# Kapittel 5

## Konklusjon

Ved å bruke CFD verktøyet FLACS har spreeing av ammoniakk-gass etter ein lekkasje frå maskinrommet til eit analyseobjekt i Ålesund vorte undersøkt for ulike vindretningar og vindhastigheitar. Basert på gjennomførte simuleringar er det rimeleg å sei at firmaet Tyrholm & Farstad er ugunstig plassert i Ålesund sitt bybilete med tanke på ein eventuell ammoniakk-lekkasje frå deira anlegg. Ettersom vinden stort sett bles mot nord, vil fleire bygningar i området verte påverka av eit ammoniakkutslepp, og det kan utgjere ein risiko for tredjeperson. For den dominerande vindretninga som førekjem i Ålesund vil ammoniakken spreie seg på tvers av heile Aspøya, og store bustadområde vert råka av eit eventuelt ammoniakkutslepp. Dette kan føre til at dei som bur og oppheld seg på vestsida av utsleppspunkta kan verta isolerte på øyene Hessa og Aspøya når innsatspersonell etablerer eit tryggleiksområdet rundt utsleppsstaden for å hindre at personell uforvarande kjem inn i faresona.

Store delar av området som vert utsett for ammoniakkutslepp vil oppleve konsentrasjonar mellom 200 og 700 mg/m<sup>3</sup>. Dette svarar til konsentrasjonar i nedre område av akutt giftig konsentrasjon. På grunn av topografien vil enkelte bustadområde i relativt stor avstand frå utsleppsområdet òg kunne oppleve gasslommer med konsentrasjonar opp mot 1700 mg/m<sup>3</sup> som er livstrugande dersom ein oppheld seg i område med denne konsentrasjonen i meir enn 30 minutt. For området utanfor Tyrholm & Farstad, samt ved Rema 1000 vil konsentrasjonen vere på verdiar som kan føre til dødsfall etter kort eksponering.

Fra resultata i denne oppgåva kan det òg konkluderast med at input data i FLACS koden ikkje er tilstrekkeleg utvikla til å handtere ammoniakk i POOL-simulering då den treng å verifisere nokre av konstantane til dei brukarspesifiserte verdiane.

### 5.1 Vidare arbeid

Fleire utbetringar kan utførast på geometrimodellen av Ålesund for å utvikle denne i arbeidet med å skaffe meir nøyaktige resultat på korleis spreininga av ammoniakk ved eit utilsikta utslepp vil gå føre seg.

POOL-simuleringane som ikkje vart analysert i denne oppgåva burde undersøkjast for å få ein grundigare kunnskap om korleis ammoniakken vil oppføre seg frå lekkasjen oppstår og til den vert spreidd til omgjevnadane via nødventilasjonssystemet. Dette kan vere naudsynt for å finne ut ved kva lekkasjeramme ammoniakk vil forlate maskinrommet- og bli spreidd med. Denne informasjonen vil vere med på å gje ein indikasjon på om dei spreingslengdene som førekjem i denne oppgåva stemmer eller om lengdene avvik frå lengder ved ein reell situasjon.

Geometrimodellen burde dessutan utvidast til å gjelde heile Ålesund by. Då kunne alle bygningane bli lagt inn med nøyaktige storleikar og plasseringar. Fjellet Hessa må også leggjast inn i ein slik utvida modell for å få meir presise resultat over spreininga.

Fleire sensitivitetsanalysar kan òg vere av interesse å undersøkje. Dei allereie nytta sensitivitetane kan undersøkjast for fleire tilfelle samstundes som eventuelle andre sensitivitetar som kan tenkjast å påverke resultatet, men som ikkje er inkludert i denne oppgåva, kan vurderast nærmare.

Utarbeidning av eit sett med standardverdiar for ammoniakk i POOL-modellen i FLACS, samt å validere ammoniakk for POOL-simuleringar bør vurderast av FLACS eigaren Gexcon.

# Bibliografi

- [1] U.S Department of Transportation, Transport Canada, and Secretaría de comunicaciones y transportes. *Emergency response guidebook :a guidebook for first responders during the initial phase of a dangerous goods/hazardous materials incident.* U.S Department of Transportation, 2016.
- [2] French Ministry of the Environment. *Explosion of an ammonia tank, March 24, 1992, Dakar, Senegal.* [Internett]. Tilgjengeleg frå: [https://www.aria.developpement-durable.gouv.fr/wp-content/files\\_mf/FD\\_3485\\_dakar\\_1992\\_ang.pdf](https://www.aria.developpement-durable.gouv.fr/wp-content/files_mf/FD_3485_dakar_1992_ang.pdf). Nedlasta: 10.05.2018, 2006.
- [3] NRK. *Sju døde etter ammoniakk-lekkasje.* [Internett]. Tilgjengeleg frå: <https://www.nrk.no/nyheter/sju-dode-etter-ammoniakk-lekkasje-1.11195098>. Nedlasta: 10.05.2018, August 2013.
- [4] NRK. *En død etter ammoniakkeksplosjon.* [Internett]. Tilgjengeleg frå: <https://www.nrk.no/vestfold/en-dod-etter-ammoniakkeksplosjon-1.272219>. Nedlasta: 10.05.2018, July 2002.
- [5] NRK Møre og Romsdal. *Ammoniakkutrykninger i Ålesund.* [Internett]. Tilgjengeleg frå: <https://www.nrk.no/mr/ammoniakkutrykninger-i-alesund-1.11960582>. Nedlasta: 08.05.2018.
- [6] William Greulich and Olav Roald Hansen. Quantitative Risk Analyses of Untreated, Vertical Pressure Relief Venting Using a Computational Fluid Dynamics Simulation. 2016.
- [7] Filippo Gavelli, Scott G Davis, Olav R Hansen, and Gexcon US. CFD Simulation of Gas Dispersion from Large-Scale Toxic Chemical Releases in Complex Environments. 2011.
- [8] Filippo Gavelli, Gexcon US, MD Bethesda, M Ichard, S Davis, and O.R Hansen. *CFD simulations of the Jack Rabbit ammonia and chlorine release experiments using FLACS.* [Internett]. Tilgjengeleg frå: <https://ams.confex.com/ams/91Annual/webprogram/Paper186588.html>. Nedlasta: 18.04.2018.
- [9] H.C Goldwire, Jr., T.G McRae, G.W Johnson, D.L Hipple, R.P Koopman, J.W McClure, L.K Morris, and R.T Cederwall. Desert Tortoise series data report 1983 pressurized ammonia spills. 1985.
- [10] Mathieu Ichard, Olav Roald Hansen, and Jens Melheim. Releases of pressurized liquefied gases: simulations of the Desert Tortoise test series with the CFD model FLACS. *Sixteenth Conference on Air Pollution Meterology*, January 2010.
- [11] Rémy Bouet, Stéphane Duplantier, and Olivier Salvi. Ammonia large scale atmospheric dispersion experiments in industrial configurations. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 18(4):512–519, July 2005.
- [12] International Institute of Ammonia Refrigeration. *Ammonia Data Book 2nd Edition.* International Institute of Ammonia Refrigeration, 2008.
- [13] Roald Nydal. *Praktisk kuldeteknikk : grunnleggende varmepumpeteknologi.* Roald Nydal, Søfteland, 6. utg. edition, 2013.

- [14] NIOSH. *Pocket guide to chemical hazards*. National Institute for Occupational Safety and Health, 2007.
- [15] Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR). *Toxicological Profile for Ammonia*. [Internett]. Public Health Service, U.S. Department of Health and Human Services. Tilgjengeleg fra: <https://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp126.pdf>. Nedlasta: 06.04.2018, Atlanta, GA, 2004.
- [16] Office of Industrial Relations. Emergency planning for ammonia-based refrigeration systems guide. 2018.
- [17] Store norske leksikon. *Ammoniakk*. [Internett]. Tilgjengeleg fra: <http://snl.no/ammoniakk>. Nedlasta 05.04.2018, October 2017.
- [18] Science History Institute. *Fritz Haber*. [Internett]. Tilgjengeleg fra: <https://www.sciencehistory.org/historical-profile/fritz-haber/>. Nedlasta: 03.04.18, June 2016.
- [19] Jürgen Schmidhuber. *HABER & BOSCH*. [Internett]. Tilgjengeleg fra: <http://people.idsia.ch/~juergen/haberbosch.html>. Nedlasta 03.04.2018.
- [20] Geological Survey. *Mineral commodity summaries 2016*. [Internett]. U S Govt. Printing Office, Tilgjengeleg fra: <https://minerals.usgs.gov/minerals/pubs/mcs/2016/mcs2016.pdf>. Nedlasta 01.05.2018, 2016.
- [21] Nicholas C. Kailos. UTILIZATION OF AMMONIA AS AN ALTERNATE FUEL IN ARMY AIRCRAFT ENGINES:. Technical report, Defense Technical Information Center, Fort Belvoir, VA, June 1966.
- [22] F.J. Verkamp, M.C. Hardin, and J.R. Williams. Ammonia combustion properties and performance in gas-turbine burners. *Symposium (International) on Combustion*, 11(1):985–992, January 1967.
- [23] Ahmed Afif, Nikdalila Radenahmad, Quentin Cheok, Shahriar Shams, Jung H. Kim, and Abul K. Azad. Ammonia-fed fuel cells: a comprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 60:822–835, July 2016.
- [24] Denver Cheddie. Ammonia as a Hydrogen Source for Fuel Cells: A Review | IntechOpen, October 2012.
- [25] Wentao Wang, José M. Herreros, Athanasios Tsolakis, and Andrew P. E. York. Ammonia as hydrogen carrier for transportation; investigation of the ammonia exhaust gas fuel reforming. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(23):9907–9917, August 2013.
- [26] Geir Eggen. *Ammoniakk som kuldemedium - i dag og i fremtiden*, volume STF11 A95092 of *SINTEF rapport (SINTEF. Klima- og kuldeteknikk : trykt utg.)*. SINTEF, Klima- og kuldeteknikk, Trondheim, 1995.
- [27] Geir Eggen. *Kuldemedier : dagens situasjon, problemer og løsninger*, volume STF11 A95109 of *SINTEF rapport (SINTEF. Klima- og kuldeteknikk : trykt utg.)*. SINTEF, Klima- og kuldeteknikk, Trondheim, 1995.
- [28] Ann Marie Flynn and Louis Theodore. *Health, Safety, and Accident Management in the Chemical Process Industries*. Marcel Dekker, Inc, New York, 2002.
- [29] Sam Mannan. *Lee's loss prevention in the process industries : hazard identification, assessment, and control*. Butterworth-Heinemann ; Elsevier, Boston :, 4th ed. edition, 2012.
- [30] Gexcon AS. *FLACS v10.7 User's Manual*. Gexcon AS, 2017.

- [31] Alex De Visscher. *Air dispersion modeling foundations and applications*. S.l.], 2013.
- [32] John D Anderson. *Computational fluid dynamics : the basics with applications*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, New York, 1995.
- [33] Warren L. McCabe. *Unit operations of chemical engineering*. McGraw-Hill chemical engineering series. McGraw-Hill, Boston, 7th ed. edition, 2005.
- [34] J Warnatz. *Combustion : physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*. Springer, Berlin, 4th ed. edition, 2006.
- [35] Steven R Hanna, Olav R Hansen, and Seshu Dharmavaram. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. *Atmospheric Environment*, 38(28):4675–4687, September 2004.
- [36] Olav R. Hansen, Filippo Gavelli, Mathieu Ichard, and Scott G. Davis. Validation of FLACS against experimental data sets from the model evaluation database for LNG vapor dispersion. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23(6):857–877, November 2010.
- [37] Meteorologisk Institutt. *eKlima*. [Internett]. Tilgjengeleg fra: [http://sharki.oslo.dnmi.no/portal/page?\\_pageid=73,39035,73\\_39113:73\\_39137&\\_dad=portal&\\_schema=PORTAL](http://sharki.oslo.dnmi.no/portal/page?_pageid=73,39035,73_39113:73_39137&_dad=portal&_schema=PORTAL). Nedlasta 21.03.2018.
- [38] Climate-data.org. *Klima av Ålesund: Temperaturer, klima grafer, klima tabeller for Ålesund*. [Internett]. Tilgjengeleg fra: <https://no.climate-data.org/location/9937/>. Nedlasta 01.03.2018.
- [39] M. W. Chase. NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth Edition. pages 1–1951, 1998.
- [40] NRK. *Ammoniakklekkasje i Ålesund*. [Internett]. Tilgjengeleg fra: <https://www.nrk.no/mr/ammoniakklekkasje-i-alesund-1.11959187>. Nedlasta 27.05.2018, September 2014.
- [41] Marvin Rausand. *Risikoanalyse : teori og metoder*. Tapir akademisk forl, Trondheim, 2009.
- [42] Steven R Hanna. *Wind flow and vapor cloud dispersion at industrial and urban sites*. A CCPS concept book. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, New York, 2002.
- [43] Wikipedia. *Ammonia (data page)*. [Internett]. Tilgjengeleg fra: [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Ammonia\\_\(data\\_page\)&oldid=830507559](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Ammonia_(data_page)&oldid=830507559). Nedlasta 21.05.2018, March 2018.

# Vedlegg A

## Definisjon av ammoniakk i FLACS

Her vert dei ulike verdiane nytta for å definere ammoniakk som ein eigendefinert art i POOL-simuleringane lagt fram. Det er verdiane anbefalt frå brukarstøtta hjå Gexcon som er lagt ved. Det er dermed ikkje tatt høgde for at entalpikonstantane er endra i simuleringane. Dei nye konstantane er å finne i vedlegg B. For dei fleste andre stoffa føreligg det standardverdiar i FLACS, medan for ammoniakk er det per no berre førebels verdiar tilgjengeleg.

**Tabell A.1:** Verdiane nytta for å definere ammoniakk som ein eigendefinert art i POOL-modellen i FLACS.

Eigenskap	Forklaring	Verdi	Eining
WFUEL	Molar masse	17.03	kg/kmol
LDENS	Tettleiken til væska	681.97	kg/m <sup>3</sup>
AENT	Første entalpikonstant for gassfase	1698	J/kg·K
BENT	Andre entalpikonstant for gassfase	1.6462	J/(kg·K <sup>2</sup> )
DENT	Tredje entalpikonstant for gassfase	-1103300	J/kg
ALENT	Første entalpikonstant for væskefase	3102.8	J/(kg·K)
BLENT	Andre entalpikonstant for væskefase	5.6278	J(kg·K <sup>2</sup> )
DLENT	Tredje entalpikonstat for væskefase	714040	J/kg
ASIGMA	Første overflatespenningkonstant	0.0876	N/m
BSIGMA	Andre overflatespenningkonstant	-0.00022265	N/(m·K)
AVAPR	Første damptrykkonstant	22.641	N/m <sup>2</sup>
BVAPR	Andre damptrykkonstant	2501.1	(N/m <sup>2</sup> )·K
DVARP	Tredje damptrykkonstant	-15	K
VISCB	Første viskositetskonstant for væske	359.22	(N/m <sup>2</sup> )·s
VISCT0	Andre viskositetskonstant for væske	70.546	K
VISCGA	Første viskositetskonstant for gass	-1.0832e <sup>-6</sup>	(N/m <sup>2</sup> )·s
VISCGB	Andre viskositetskonstant for gass	3.7855e <sup>-8</sup>	N·s/(m <sup>2</sup> ·K)
CONDGA	Føste konduktivitetskonstant for gass	-0.013789	(J/s)/(m·K)
CONDGB	Andre konduktivitetskonstant for gass	0.0001347	(J/s)/(m·K <sup>2</sup> )
CONDLA	Første konduktivitetskonstant for væske	1.4956	(J/s)/m·K
CONDLB	Andre konduktivitetskonstant for væske	-0.0034636	(J/s)/(m·K <sup>2</sup> )
TCRIT	Kritisk temperatur	405.4	K
PCRIT	Kritisk trykk	11333	N/m <sup>2</sup>

## Vedlegg B

# Utrekning av entalpikonstant

Ved utrekninga av entalpikonstantane til ammoniakk, har JANAF-tabellane [39] utvikla av National Institute of Standards and Technology (NIST) vorte nytta. I prosessindustrien vert desse tabellane sett på som 'fasiten' over termokjemiske data. JANAF-tabellane gjev termokjemiske data for ammoniakk i gassfase, og er her nytta for å finne entalpikonstantane for gassfasen.

Formelen for å rekne ut entalpien oppgjeven av NIST er:

$$h = A \cdot T + B \cdot \frac{T^2}{2} + C \cdot \frac{T^3}{3} + D \cdot \frac{T^4}{4} - \frac{E}{T} + F \quad (\text{B.1})$$

Denne likninga inneholder fleire ledd enn andregradslikninga (4.1) som er nytta i FLACS. Ved å derivere likninga med hensyn på temperatur, kjem ein fram til likninga for varmekapasiteten:

$$c_p^\circ = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 + \frac{E}{T^2} \quad (\text{B.2})$$

I dei ovannemnte likningane er  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$  og  $F$  konstantar oppgjeven i tabell B.1, temperaturen  $T$  er i kelvin/1000, og einingane er høvesvis kJ/mol for entalpi og J/mol · K for varmekapasiteten.

**Tabell B.1:** Verdiar nytta for å verifisere ammoniakk som art i FLACS frå JANAF-tabellane [39].

Variabel	Verdi
A	19.99563
B	49.77119
C	-15.37599
D	1.921168
E	0.189174
F	-53.30667

Varmekapasiteten og entalpien for gassfase vart rekna ut ved å nytte konstantane frå tabell B.1, for temperaturane 173,15 K og 273,15 K. Dette temperaturintervallet vart vald då ammoniakken i POOL-simuleringane held ein lågare temperatur enn 0 °C. Konstantane nytta er oppgjeven for temperaturintervallet 298-1400K. Ettersom JANAF ikkje har teke høgde for ammoniakk med lågare temperaturar, har dette intervallet vorte nytta i utrekningane. Resultatet frå utrekninga av varmekapasiteten og entalpien er lagt fram i tabell B.2.

Etter at entalpien og varmekapasiteten er rekna ut frå NIST sine formlar, vart desse verdiane nytta saman med likningane bruk i FLACS for å finne entalpikonstantane. Frå FLACS har ein formel for varmekapasitet som fylgjer:

**Tabell B.2:** Utrekna verdiar for varmekapasiteten og entalpien for gassfase ved bruk av JANAF-tabellane.

Temperatur[K]	Varmekapasitet [J/mol·K]	Entalpi [kJ/mol]	Entalpi [J/kg]
173.15	34.4723109	-50.217052	$-2.95 \cdot 10^6$
273.15	35.0180404	-46.782471	$-2.75 \cdot 10^6$

$$c_p = A_{ent} + B_{ent} \cdot T \quad (\text{B.3})$$

Denne formelen kan nyttast til å finne den andre entalpikonstanten,  $B_{ent}$ , ved å sjå på uttrykket som ein lineærtlinjering der  $B_{ent}$  er stigningstalet til likninga. Entalpikonstanten finn ein då ved å dividere skilnaden mellom varmekapasitet på skilnaden mellom temperaturen, slik:

$$B_{ent} = \frac{c_p \text{ } 273.15 - c_p \text{ } 173.15}{T_{273.15} - T_{173.15}} \quad (\text{B.4})$$

Etter at verdien til  $B_{ent}$  er funne, kan ein nytte likning (B.3) til å finne den første entalpikonstanten,  $A_{ent}$ . Då einingane på desse konstantane no er i J/mol · K og J/mol · K<sup>2</sup>, må ein multiplisere med molmassen for å få einingane over til J/kg · K og J/kg · K<sup>2</sup>. Den tredje entalpikonstanten kan vidare reknast ut ved hjelp av formelen (4.1), då denne kan omgjerast til:

$$D_{ent} = \left( A_{ent} + B_{ent} \cdot \frac{T}{2} \right) \cdot T - h \quad (\text{B.5})$$

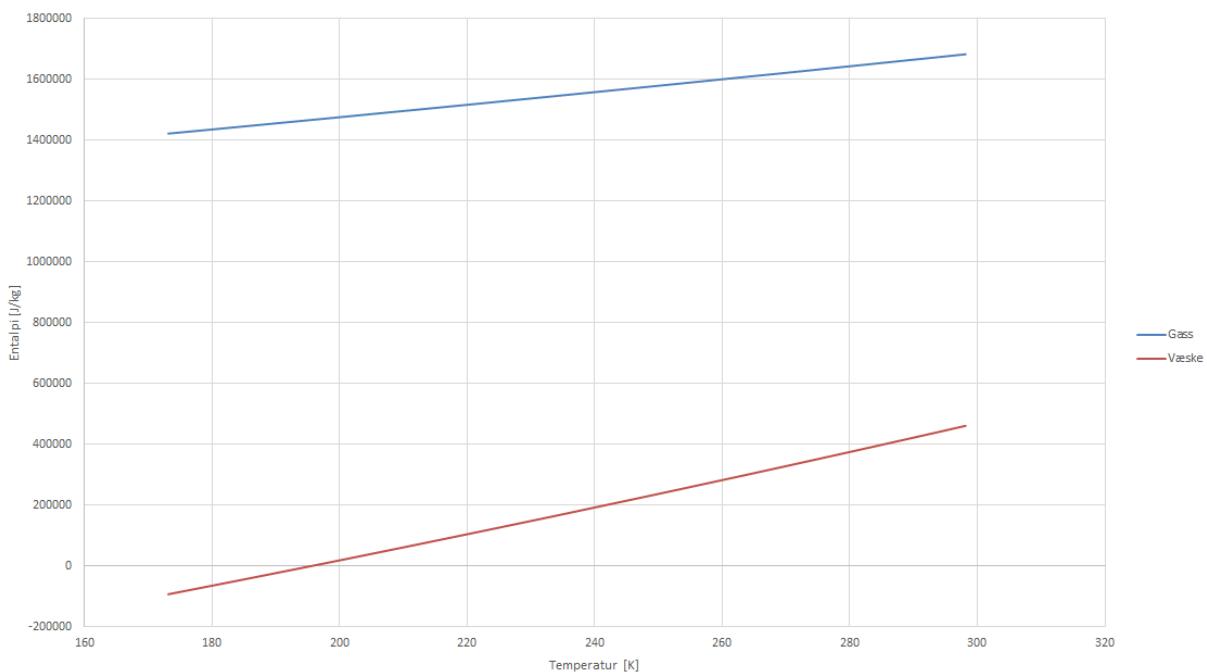
Eininga til den tredje entalpikonstanten er i J/kg. Dei utrekna verdiane for entalpikonstantane i gassfase er lagt fram i tabell B.3.

Då JANAF [39] berre tek føre seg ammoniakk i gassfase, har andre kjelder vorte nytta for å rekne på verdiane for væskefase [43]. Ved å nytte denne datasida har to ulike verdiar for varmekapasiteten til ammoniakk blitt lest ut av ein figur for varmekapasiteten til ammoniakk i væskefase. Då figuren ikkje går så lågt som til 173.13 K, vart varmekapasiteten for 233 K, tilsvarande - 40 °C nytta saman med ein litt høgare øvre verdi på 293.15 K. Verdiane for dei to første entalpikonstantane kan då reknast ut på same måte som for gass. Den tredje entalpikonstanten vart rekna ut for temperatur ved kokepunktet til ammoniakk, -33.4 °C. Dette vart utført då det føreligg kjennskap til verdien for standard endringsentalpi for fordamping, som er på 23,35 kJ/mol, eller 1371070 J/kg. Det er naudsynt å kjenne til denne verdien då ein skal finne entalpien til ammoniakk i væskefase. Ved å trekke verdien for standard endringsentalpi for fordamping frå entalpien til gassfase ved -33.4 °C, får ein entalpien til ammoniakk i væskefase. Når entalpien til væskefasa er kjent, kan ein rekle ut  $D_{ent}$  på same måte som  $D_{ent}$  blei reknna ut som for gassfase synt ovanfor.

Dei ulike verdiane som har vore anbefalt å nytte som entalpikonstantar i POOL-simuleringa er lagt fram i tabell B.3. På bakgrunn av desse verdiane vart entalpien for gass- og væskefase plotta mot temperatur. For verdiane innhenta av rettleiar, og dei verdiane som no er utrekna, er plotta vist i figur 4.1 og 4.2 i resultat. Figur B.1 syner entalpien for gass- og væskefase oppgjeven av brukarstøtta til FLACS hjå Gexcon.

**Tabell B.3:** Verdiar for dei ulike entalpikonstantane i gass- og væskefase frå brukarstøtta til FLACS hjå Gexcon, innhenta frå rettleiar, og utrekna.

	<b>Brukarstøtta til FLACS</b>	<b>Innhenta av rettleiar</b>	<b>Utrekna</b>
<b>A<sub>ent</sub></b>	1698	1755	1968.6
<b>B<sub>ent</sub></b>	1.6462	1.15	0.3204
<b>D<sub>ent</sub></b>	-1103300	575000	3300000
<b>A<sub>lent</sub></b>	3102.8	3102.8	2948.1
<b>B<sub>lent</sub></b>	5.6278	5.6278	6.0675
<b>D<sub>lent</sub></b>	714040	714040	5071329



**Figur B.1:** Entalpi er plotta mot temperatur for entalpikonstantar frå brukarstøtta til FLACS hjå Gexcon.

# Vedlegg C

## Vêrdata

Vêrdata frå Ålesund i perioden 01.07.1958-31.12.2017 er henta frå Meteorologisk institutt [37] og lagt fram her. Desse vêrdataene la grunnlaget for kva vindhastigheitar og vindretningar det vart undersøkt i denne oppgåva. All data over relativ frekvenens på 2 % vart tatt i betraktning.

### Frekvensfordeling med vindrose



#### Stasjoner

Stnr	Navn	I drift fra	I drift til	Hoh	Breddegrad	Lengdegrad	Kommune	Fylke	Region
60990	VIGRA	jul 1958		22	62,5617	6,1150	Giske	Møre Og Romsdal	WESTLANDET

#### Elementer

Kode	Navn	Enhett
DD	Vindretning (FF)	grader
FF	Vindhastighet (10 meter over bakken)	m/s

I perioden 01.07.1958 - 31.05.2005 er data ved hovedtermin benyttet, i perioden 01.06.2005 - 31.12.2017 er timevise data benyttet

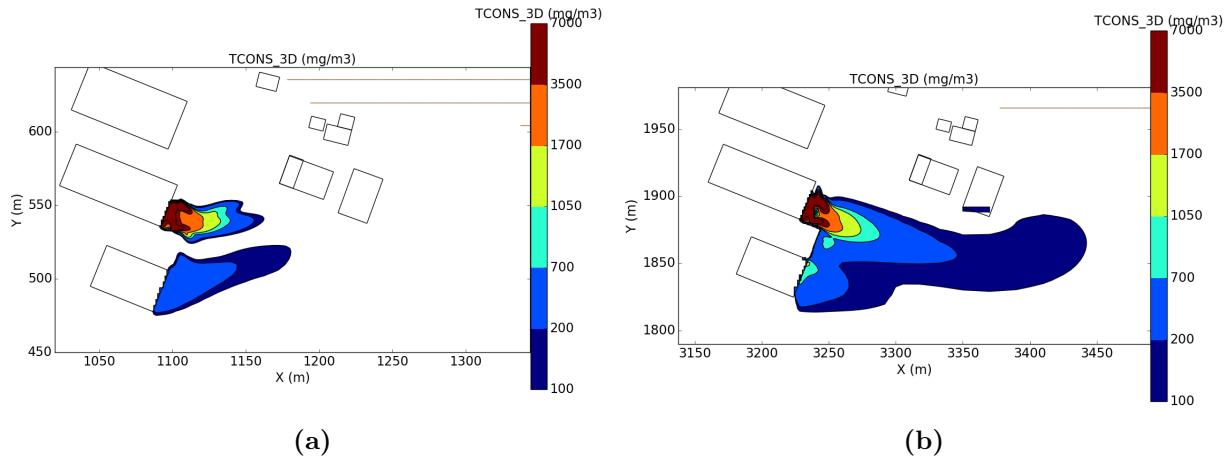
#### 60990 Relativ frekvens (%) av observasjoner for DD horisontalt og FF vertikalt. 01.07.1958 - 31.12.2017 des. Alle tilgjengelige timer

	DD	345	15	45	75	105	135	165	195	225	255	285	315	Variabel	Stille	Sum	Rel.fr.	Kum.fr.	Middel	St.av.
FF		14	44	74	104	134	164	194	224	254	284	314	344						DD	DD
<=	0,0														0,5	69	0,5	0,5		
0,1	5,2	0,6	0,7	2,2	1,4	4,3	13,0	7,7	4,3	2,0	1,7	1,1	1,2		0,0	5841	40,3	40,8		
5,4	10,5	0,9	0,9	2,2	0,9	8,8	5,5	7,4	10,3	5,5	3,0	1,4	1,7			7047	48,6	89,4		
10,6	15,8	0,2	0,2	0,3	0,0	0,3	0,1	0,6	2,8	3,0	0,9	0,5	0,6			1367	9,4	98,8		
15,8	21,0	0,0	0,0	0,0				0,0	0,2	0,7	0,1	0,0	0,0			148	1,0	99,9		
>	21,0								0,0	0,1	0,0	0,0				20	0,1	100,0		
Sum		243	258	677	341	1949	2704	2275	2549	1647	820	452	507		70	14492				
Rel.fr.		1,7	1,8	4,7	2,4	13,4	18,7	15,7	17,6	11,4	5,7	3,1	3,5		0,5		100,0			
Kum.fr.		1,7	3,5	8,1	10,5	23,9	42,6	58,3	75,9	87,2	92,9	96,0	99,5		100,0					
Middel	FF	6,5	6,4	5,9	4,8	6,2	4,6	5,6	7,6	9,2	7,3	7,1	7,0		0,0					
St.av.	FF	3,2	3,2	2,9	2,6	2,2	1,7	2,6	3,2	4,2	3,4	3,6	3,5		0,0					

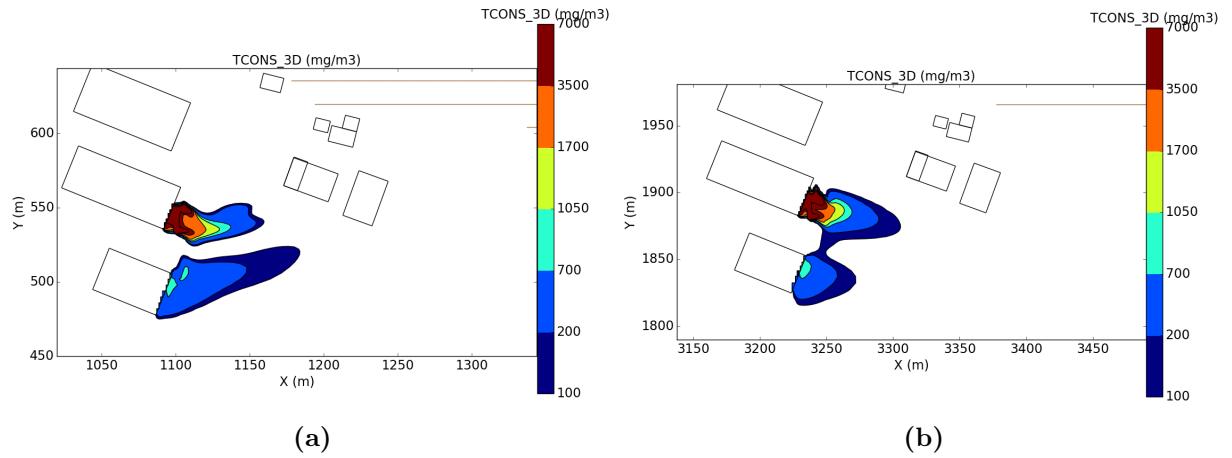
Figur C.1: Vêrdata frå Ålesund frå perioden 01.07.1958-31.12.2017.

## Vedlegg D

# Fjellformasjonsensitivitet for låg masserate



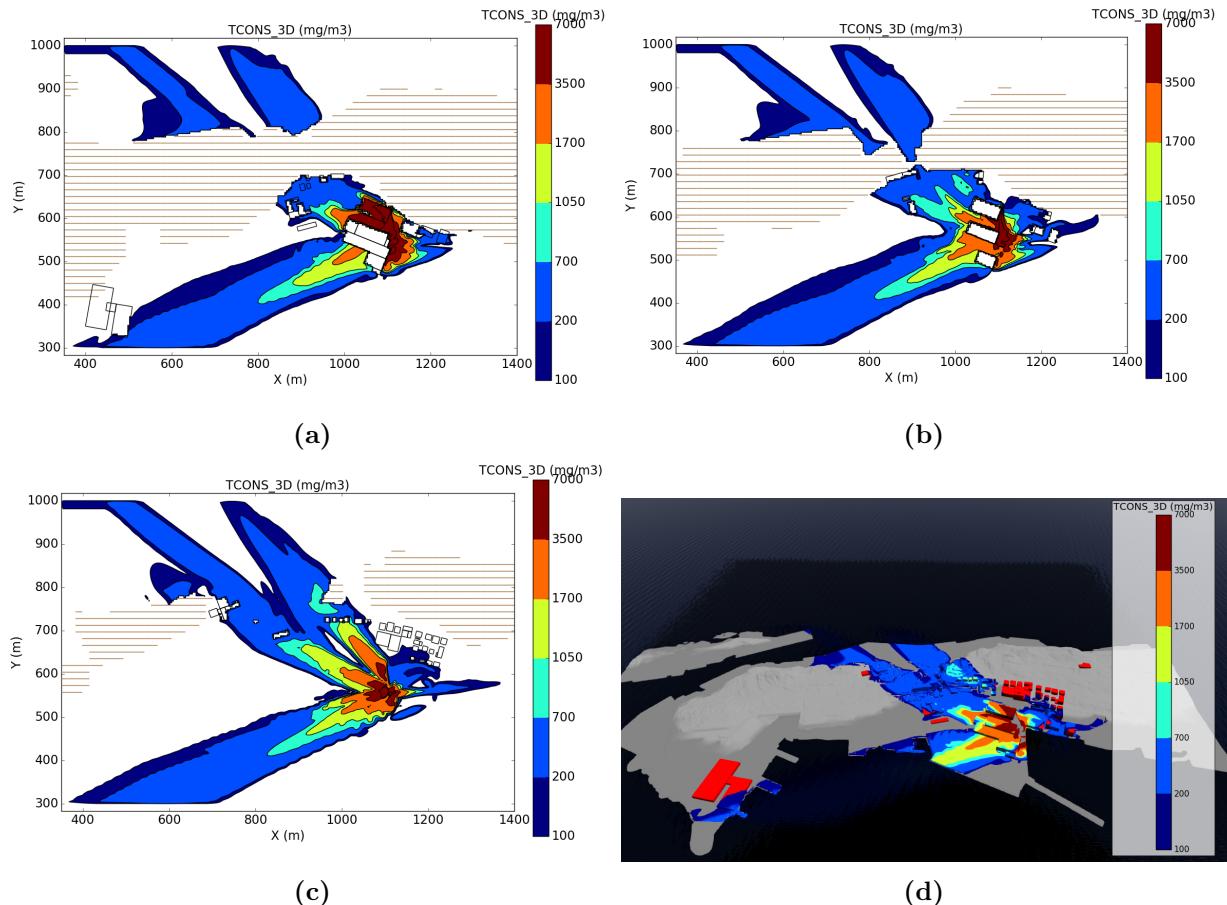
**Figur D.1:** Fjellformasjonssensitivitet ved låg masserate, der figur a) er uten fjell, medan b) er med fjell. Biletet er tatt ved 300 sekund for høgda til utsleppspunkta. Vindretninga nytta er VSV på  $240^\circ$ , med hastigheita 7 m/s.



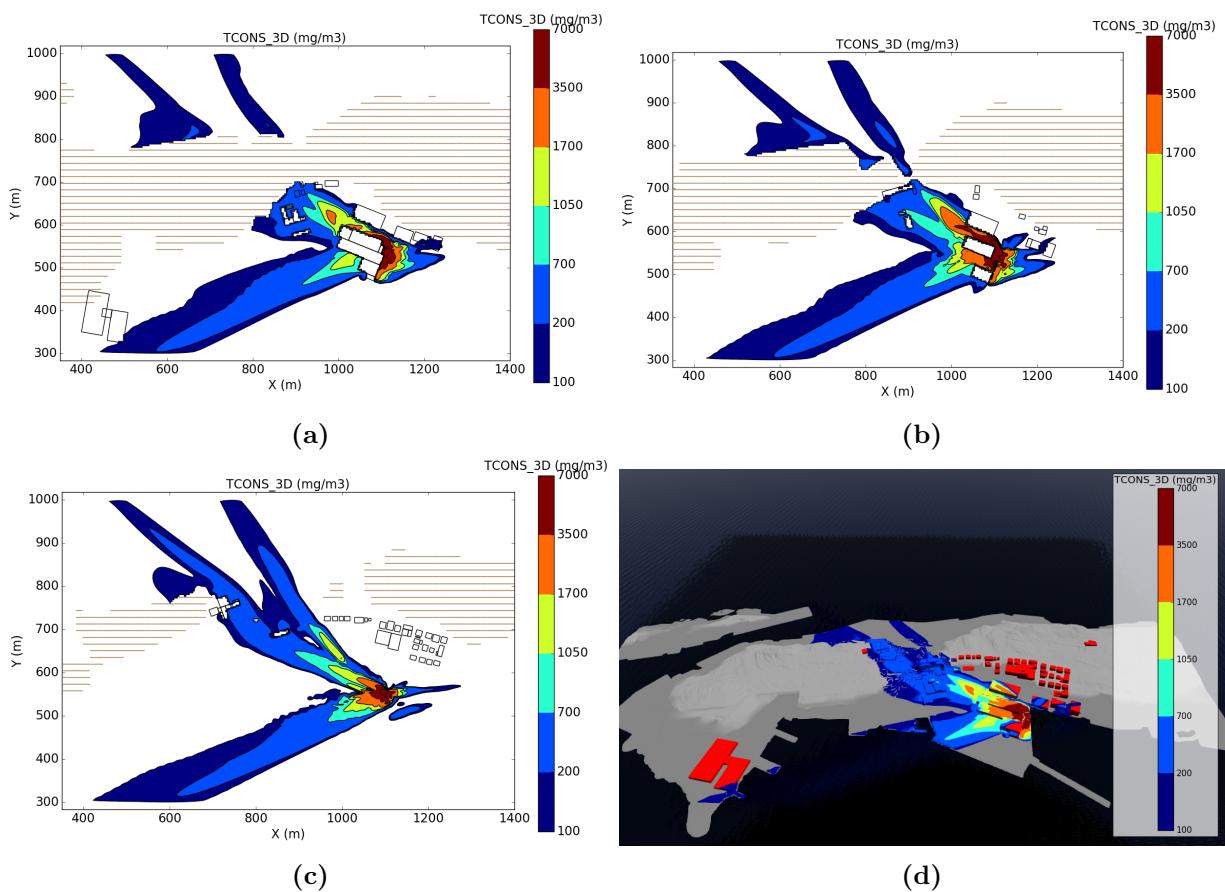
**Figur D.2:** Fjellformasjonssensitivitet ved låg masserate, der figur a) er uten fjell, medan b) er med fjell. Biletet er tatt ved 300 sekund for høgda til utsleppspunkta. Vindretninga nytta er VSV på  $240^\circ$ , med hastigheita 7 m/s.

## Vedlegg E

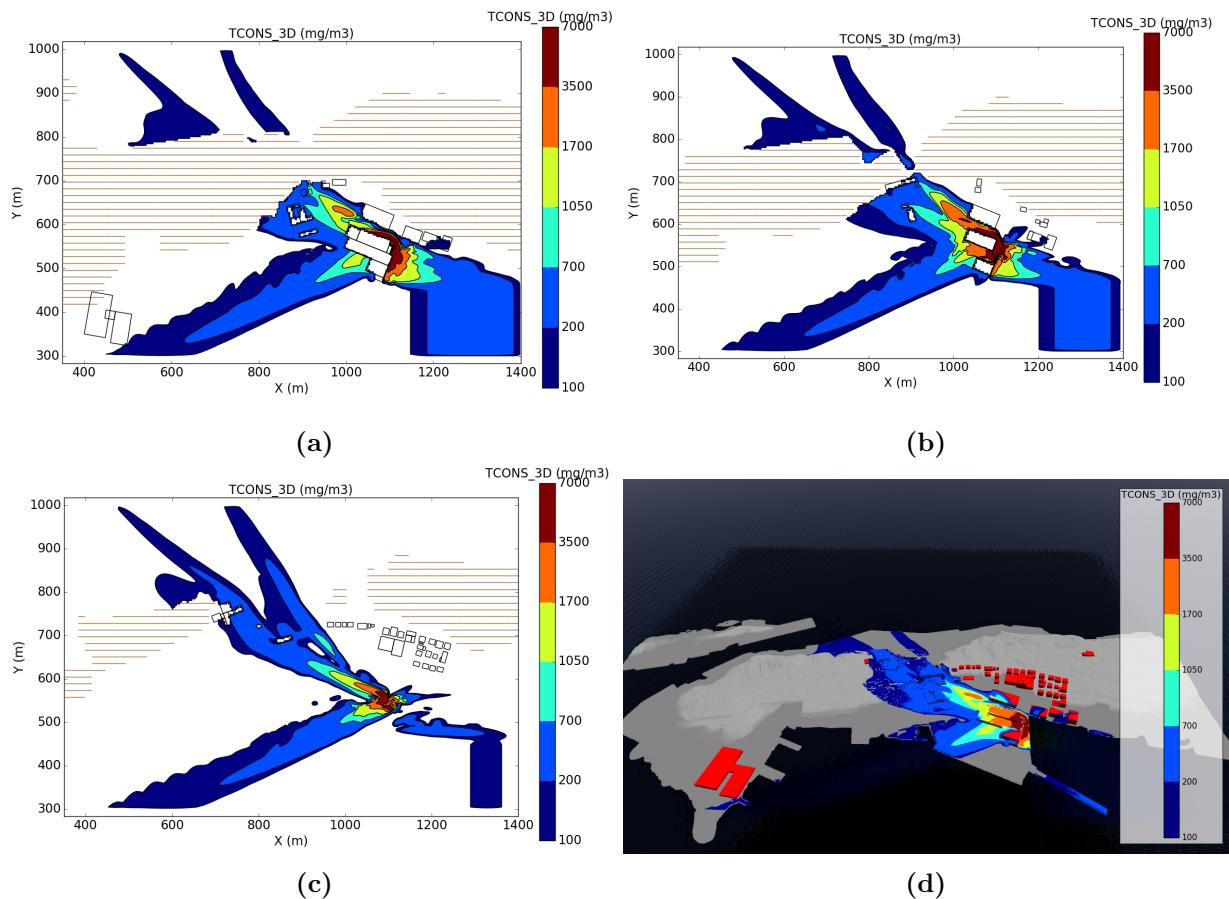
# Figurar frå overlappande vindretningar og vindhastigheit



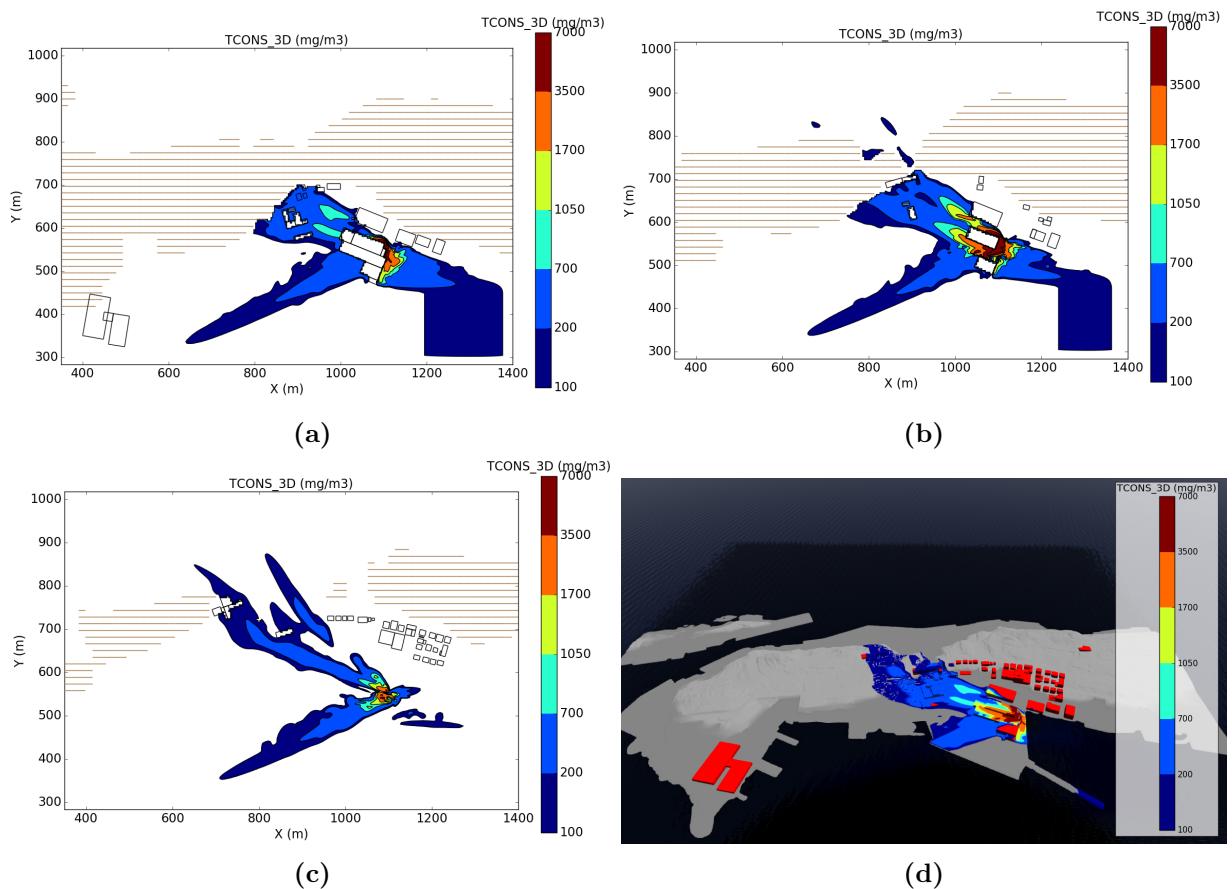
**Figur E.1:** Overlappende bilete for alle vindretningane med hastigheit på 3 m/s. Biletet syner maksimal utstrekking av ammoniakkgassen for tre ulike høgder med høg lekkasjerate. a) syner 3.13 m.o.h., b) syner utsleppshøgda, c) syner 19.19 m.o.h., samstundes som d) syner 3D plott.



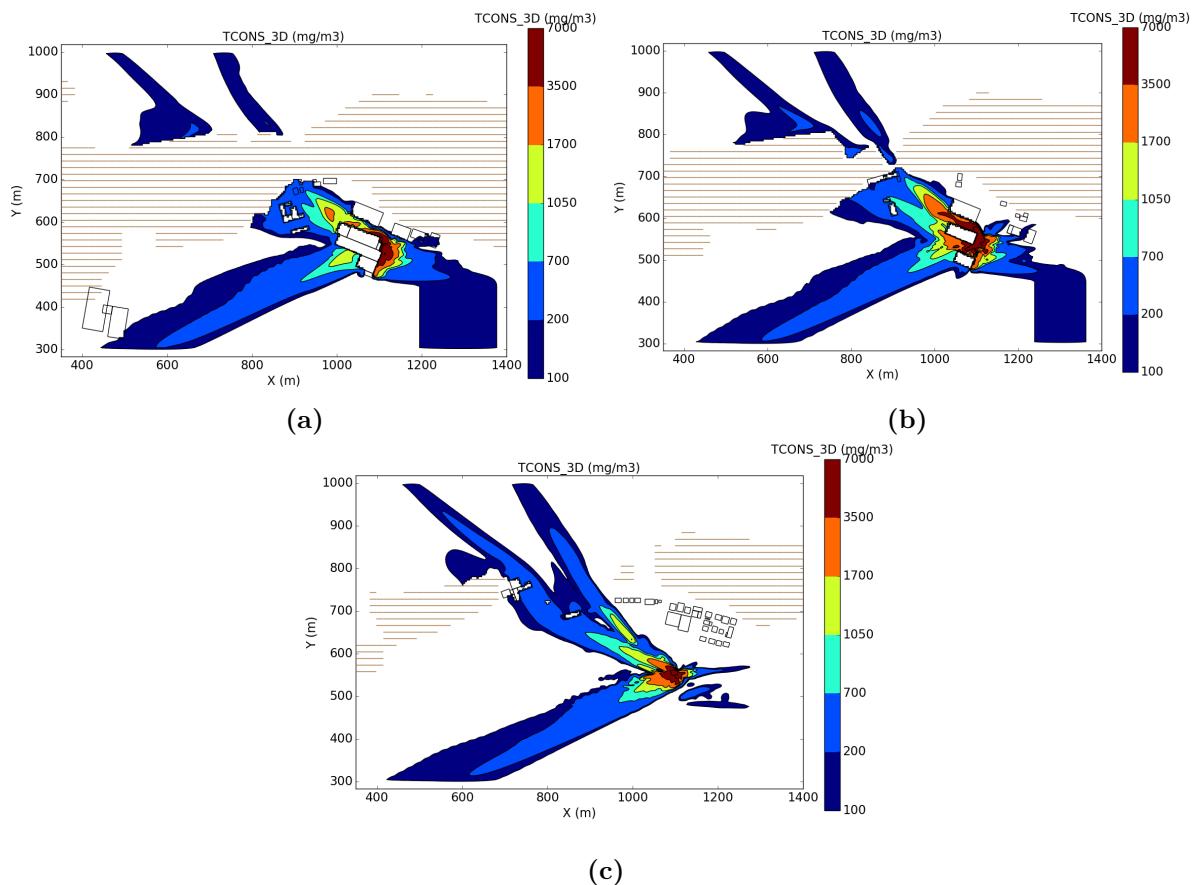
**Figur E.2:** Overlappende biletet for alle vindretningane med hastighet på 3 m/s. Biletet syner maksimal utstrekks for tre ulike høgder med låg lekkasjerate. a) syner 3.13 m.o.h., b) syner utsleppshøgda, c) syner 19.19 m.o.h., samstundes som d) syner 3D plott.



**Figur E.3:** Overlappende biletet for alle vindretningane med hastigheit på 7 m/s. Biletet syner maksimal utstrekking av ammoniakkgassen for tre ulike høgder med høg lekkasjerate. a) syner 3.13 m.o.h., b) syner utsleppshøgda, c) syner 19.19 m.o.h., samstundes som d) syner 3D plott.



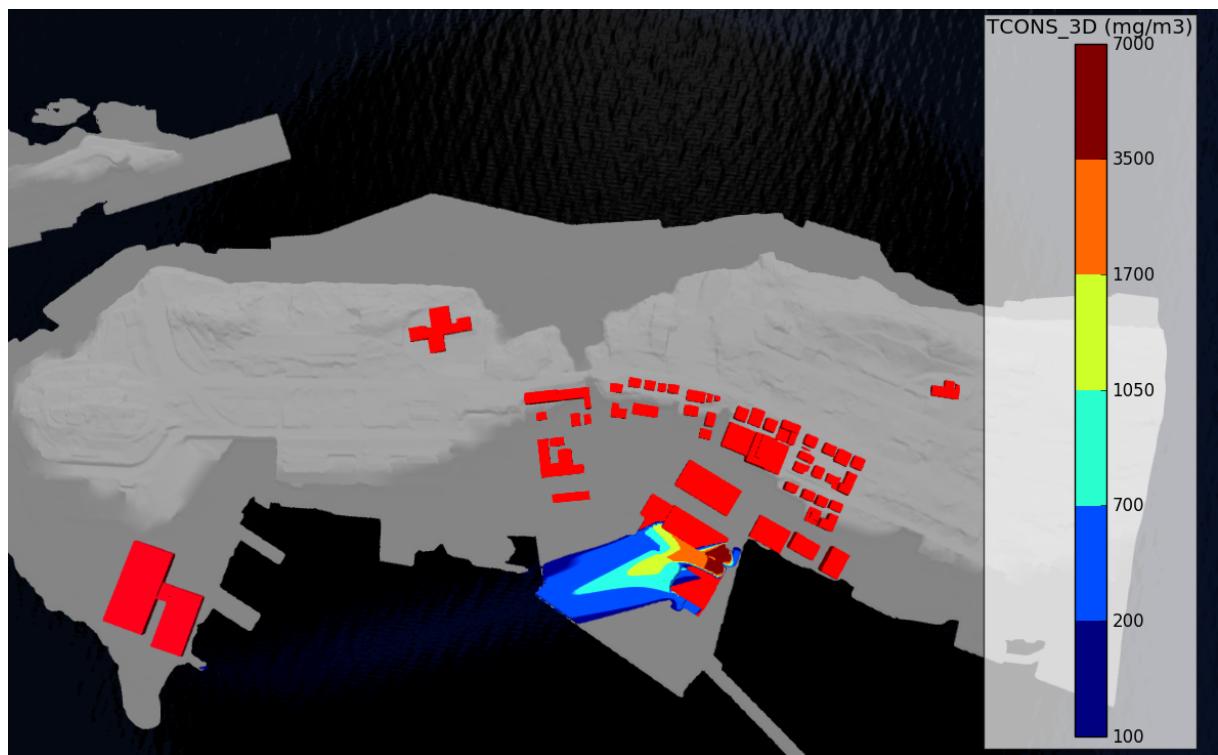
**Figur E.4:** Overlappende biletet for alle vindretningane med hastighet på 3 m/s. Biletet syner maksimal utstrekking av ammoniakkgassen for tre ulike høgder med låg lekkasjerate. a) syner 3.13 m.o.h., b) syner utsleppshøgda, c) syner 19.19 m.o.h., samstundes som d) syner 3D plott.



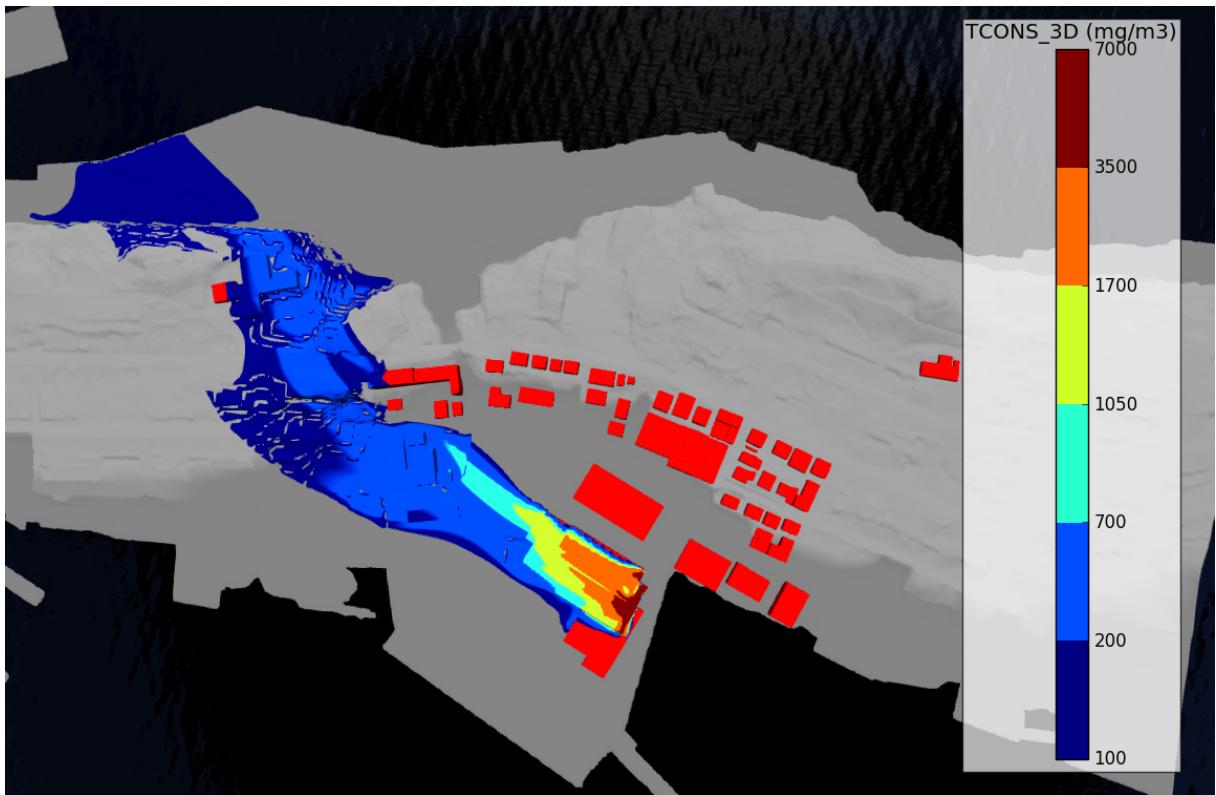
**Figur E.5:** Overlappende biletet for alle vindretningane og hastighetane. Biletet syner maksimal utstrekks av ammoniakkgassen for tre ulike høgder med låg lekkasjerate. a) syner 3.13 m.o.h., b) syner utsleppshøgda, c) syner 19.19 m.o.h.

## Vedlegg F

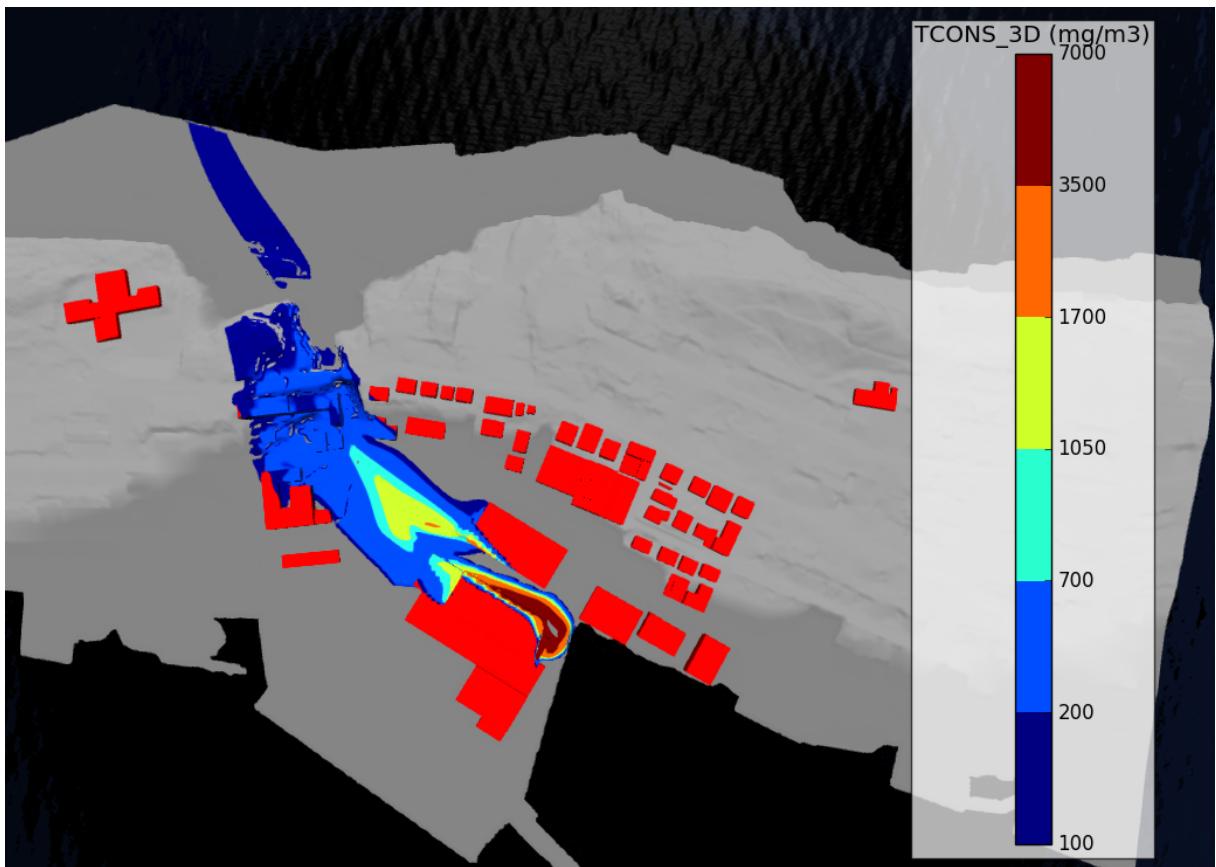
### Figurar frå simuleringane med høgare lekkasjerate



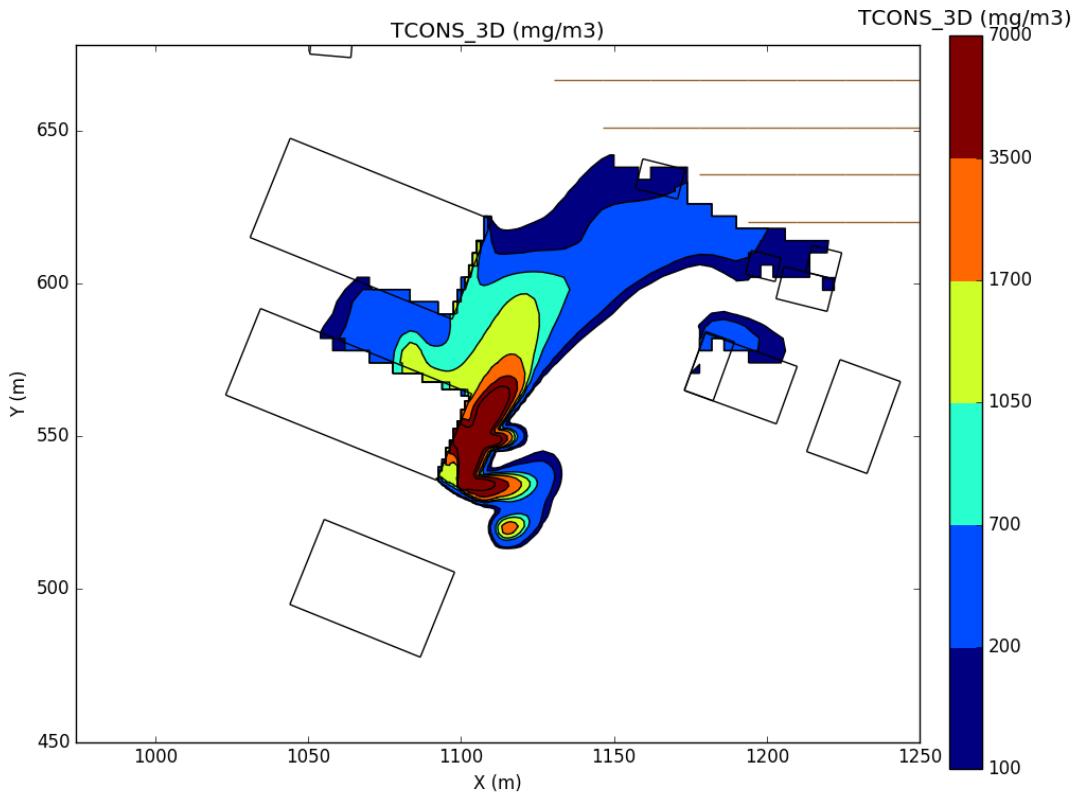
Figur F.1: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra ØNØ på 60° med hastighet 7 m/s.



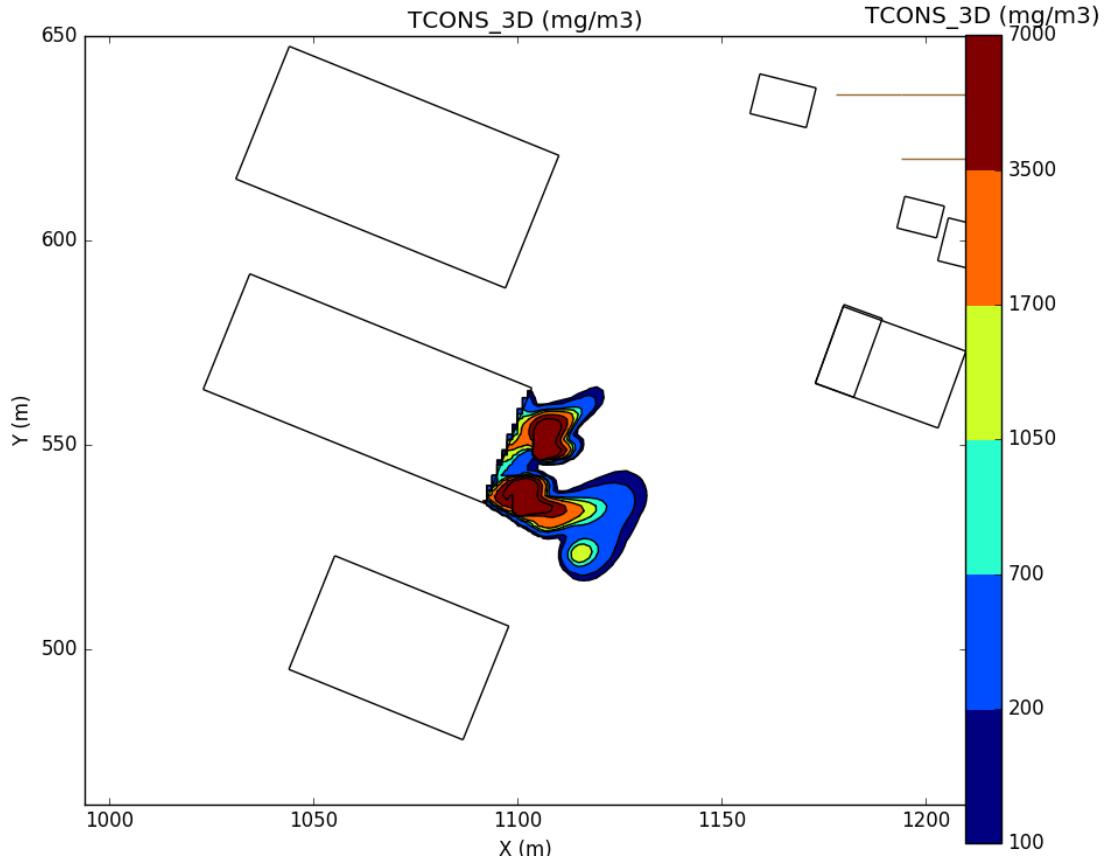
Figur F.2: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning frå ØSØ på  $120^\circ$  med hastigkeit 7 m/s.



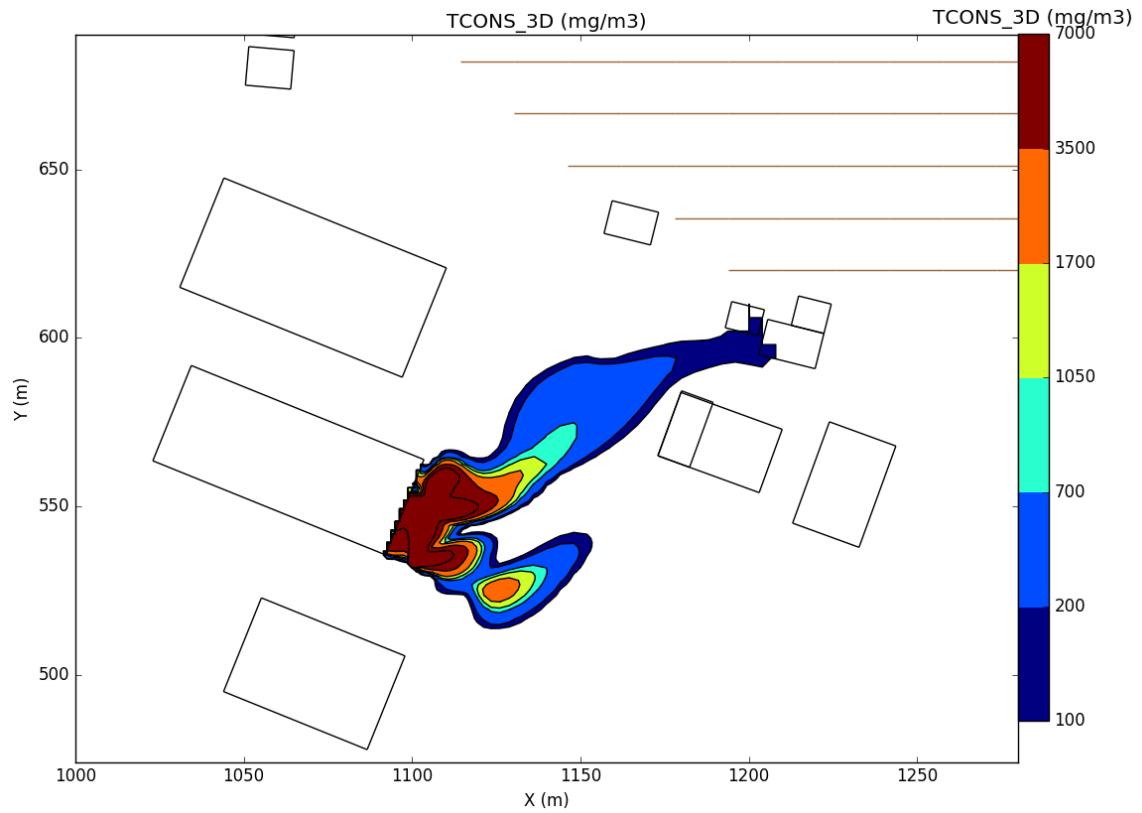
Figur F.3: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning frå SSØ på  $150^\circ$  med hastigkeit 7 m/s.



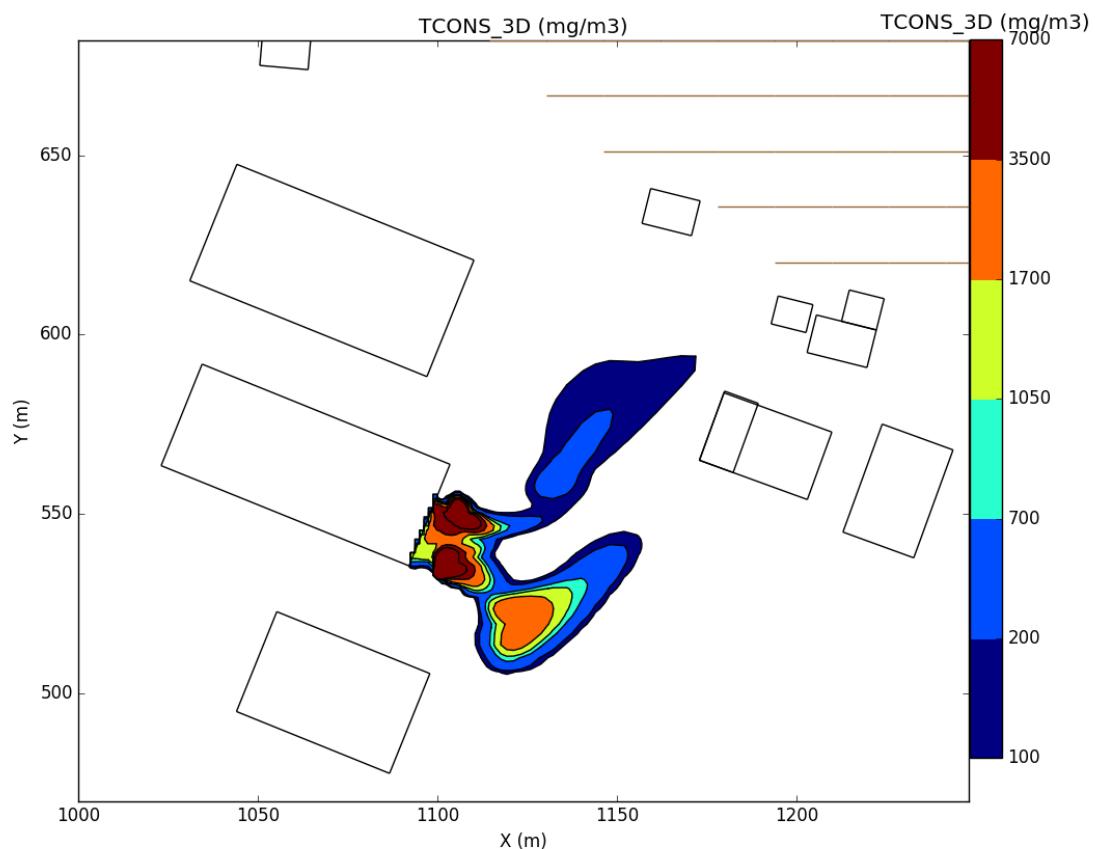
**Figur F.4:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning frå S på  $180^\circ$  med hastigkeit 3 m/s.



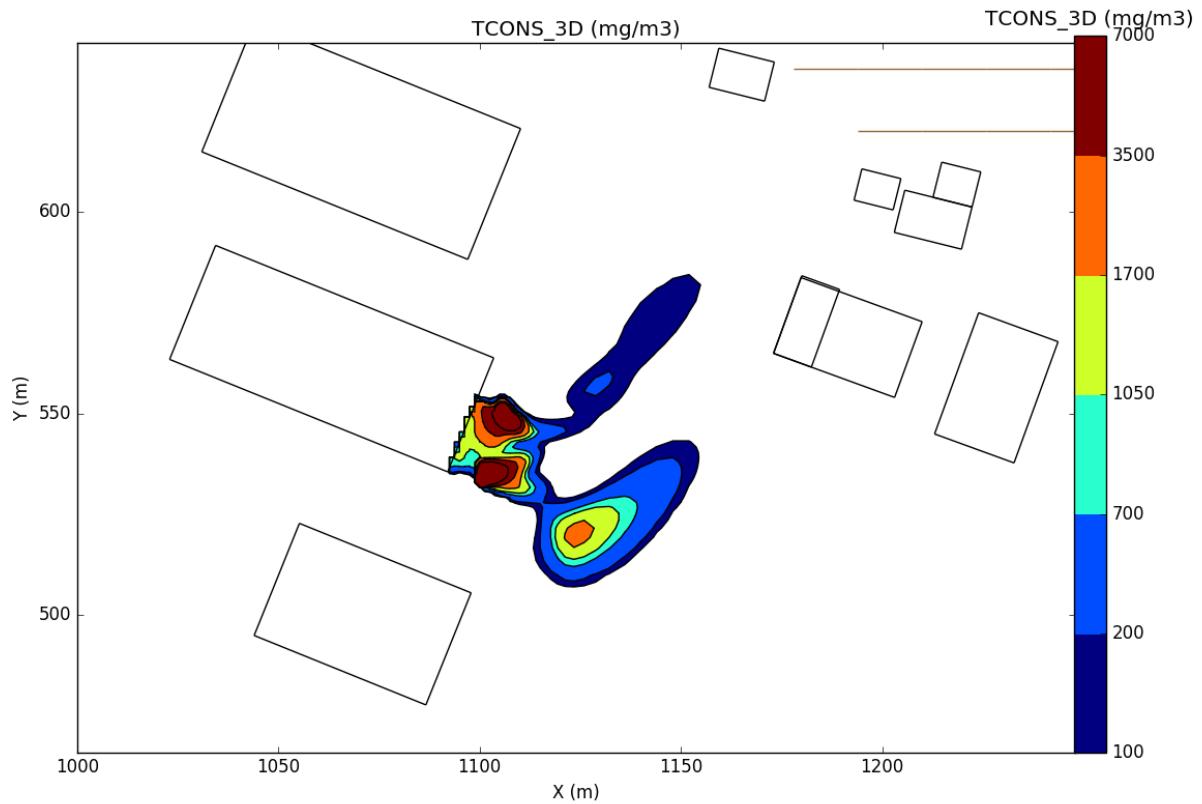
**Figur F.5:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning frå S på  $180^\circ$  med hastigkeit 7 m/s.



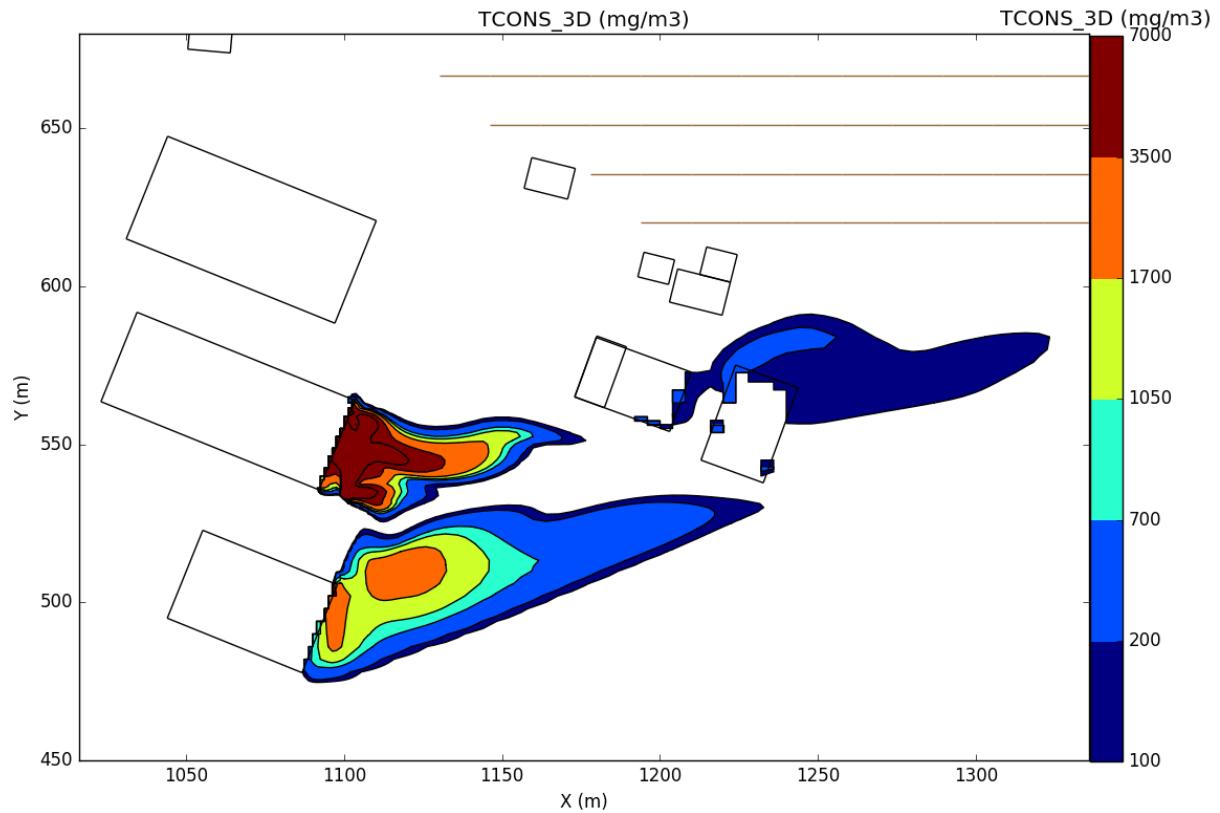
**Figur F.6:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra SSV på  $210^\circ$  med hastighet 3 m/s.



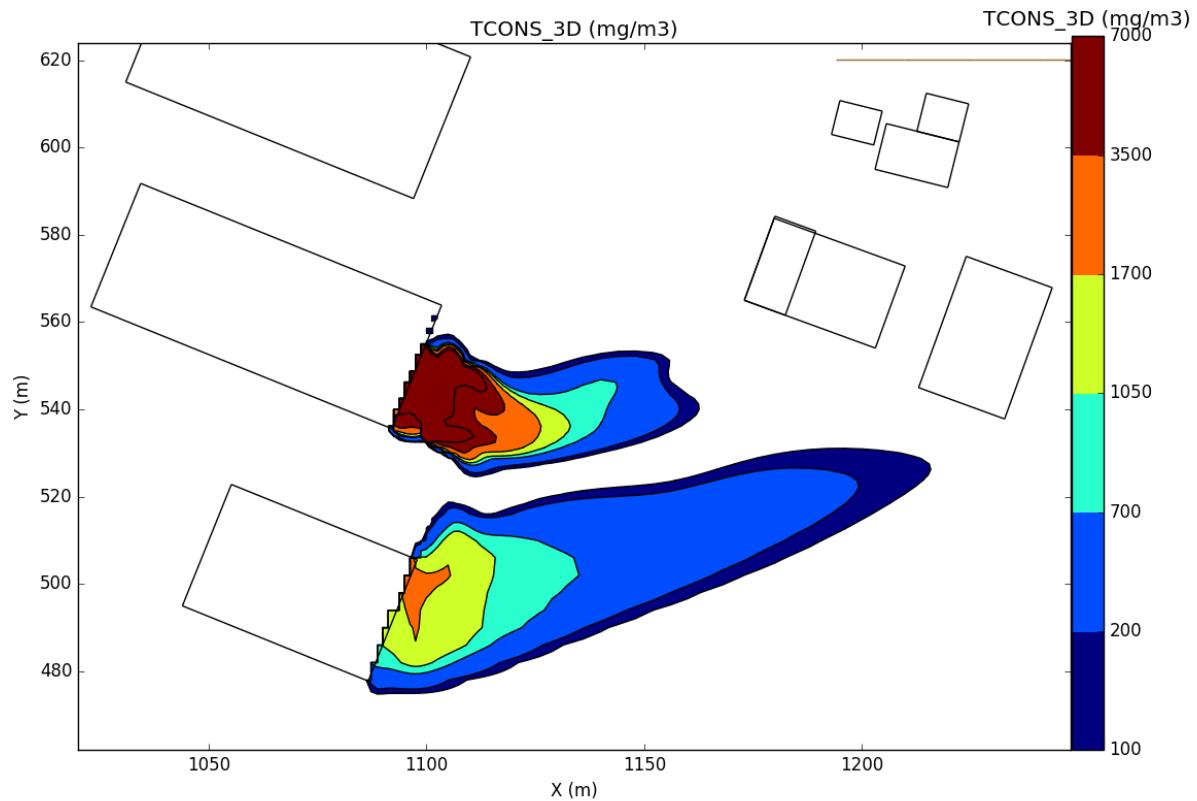
**Figur F.7:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra SSV på  $210^\circ$  med hastighet 7 m/s.



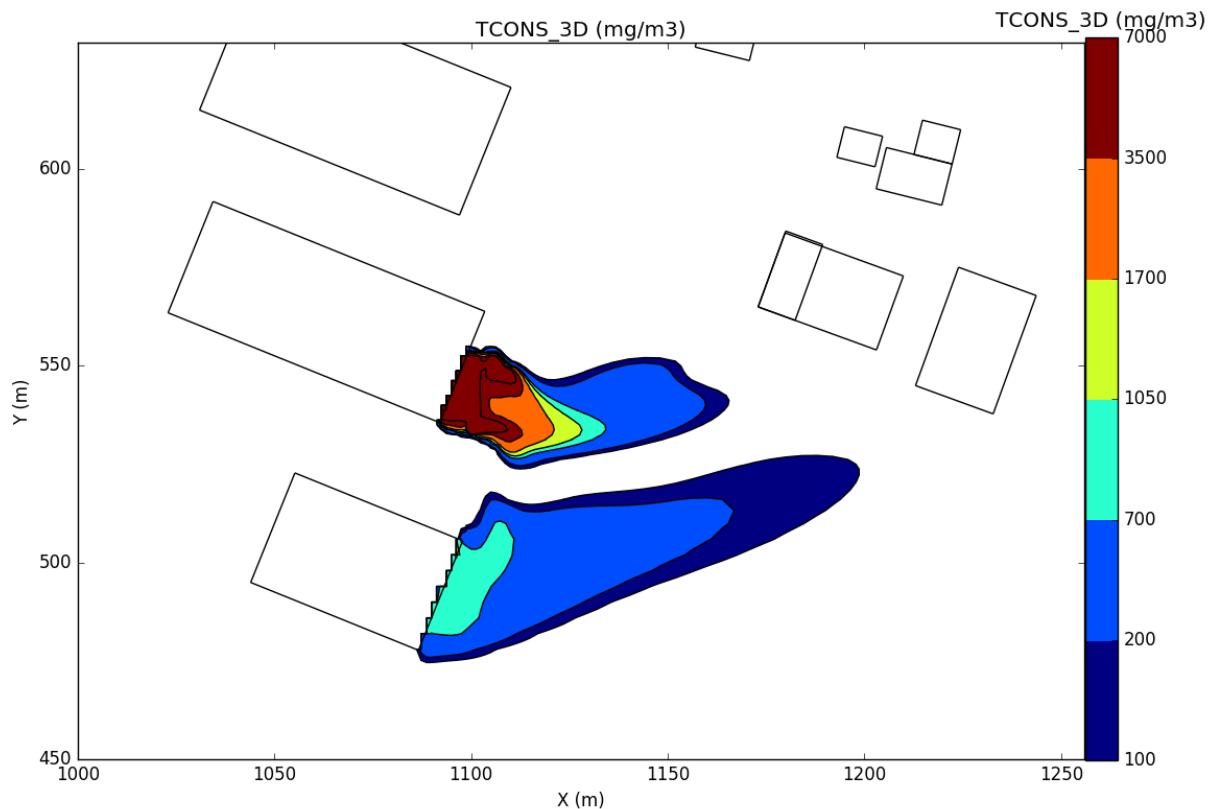
**Figur F.8:** Utstrekking av ammoniakk-gass for vindretning fra SSV på  $210^\circ$  med hastighet 12 m/s.



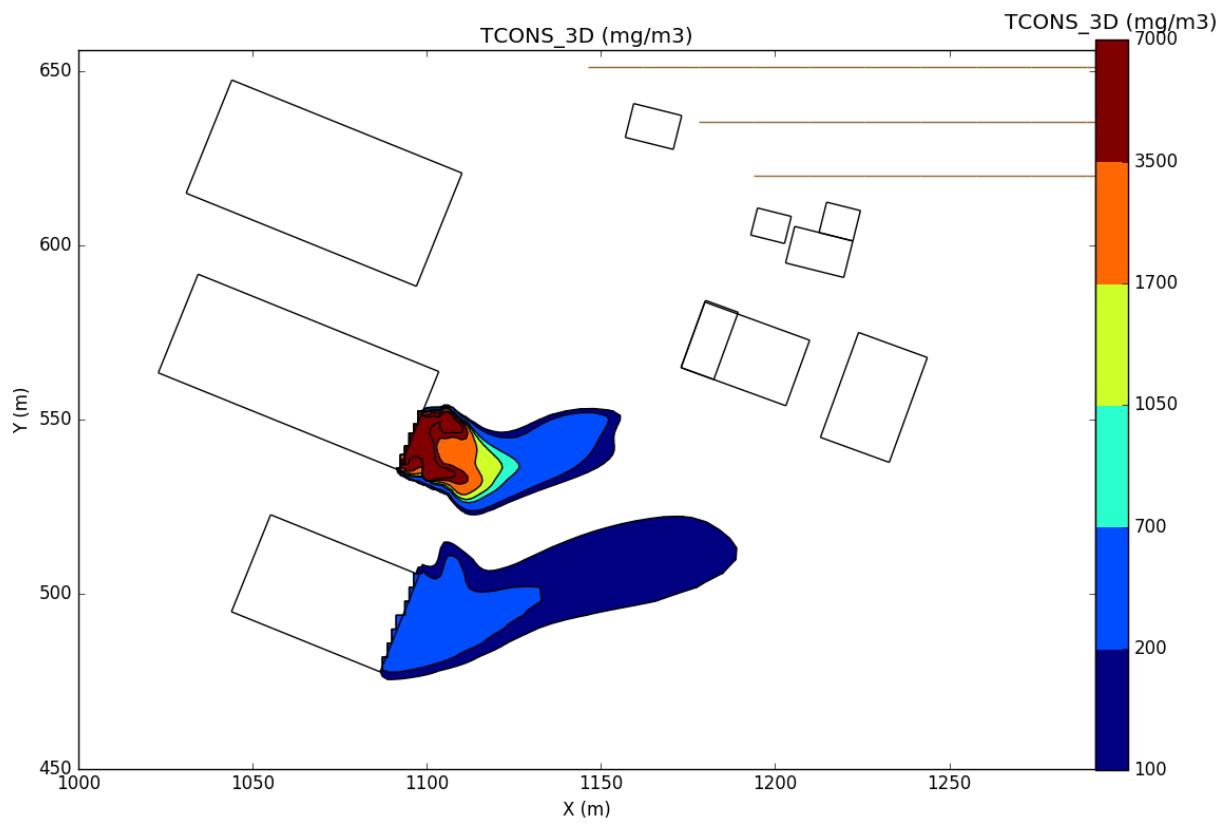
**Figur F.9:** Utstrekking av ammoniakk-gass for vindretning fra VSV på  $240^\circ$  med hastighet 3 m/s.



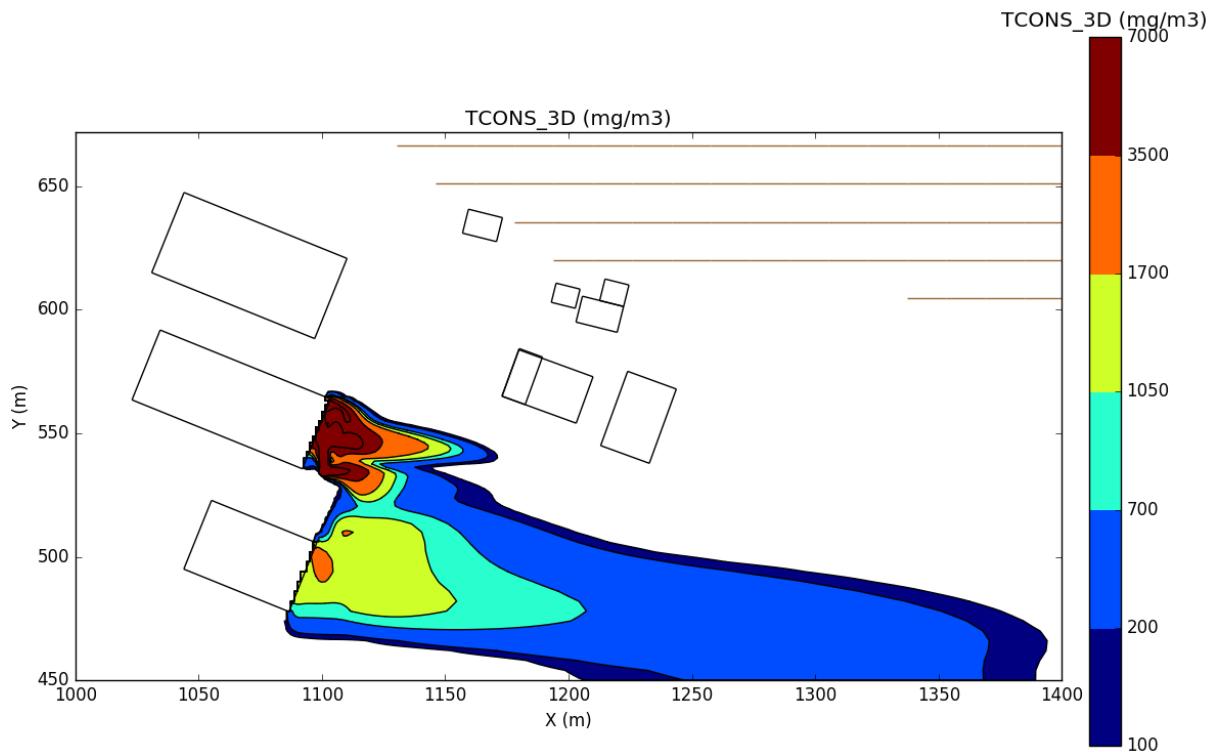
**Figur F.10:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra VSV på  $240^\circ$  med hastighet 7 m/s.



**Figur F.11:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra VSV på  $240^\circ$  med hastighet 12 m/s.



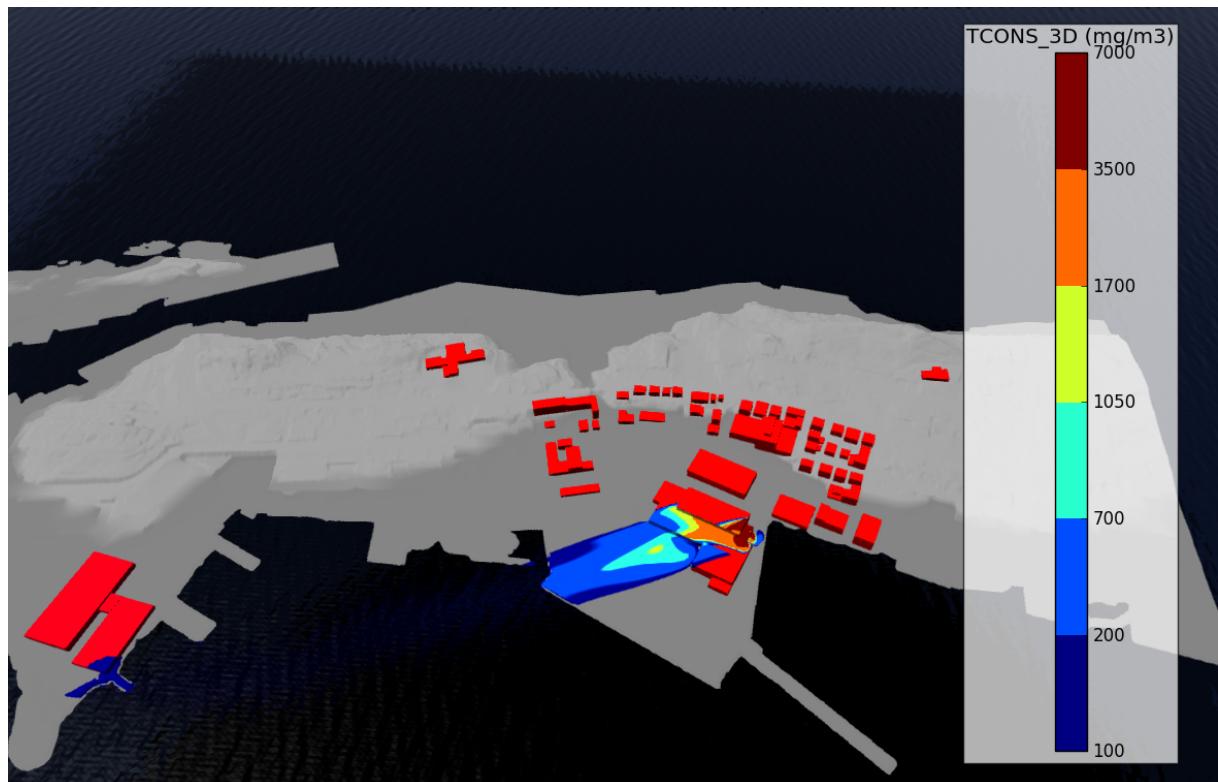
**Figur F.12:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra VSV på  $240^\circ$  med hastighet 17 m/s.



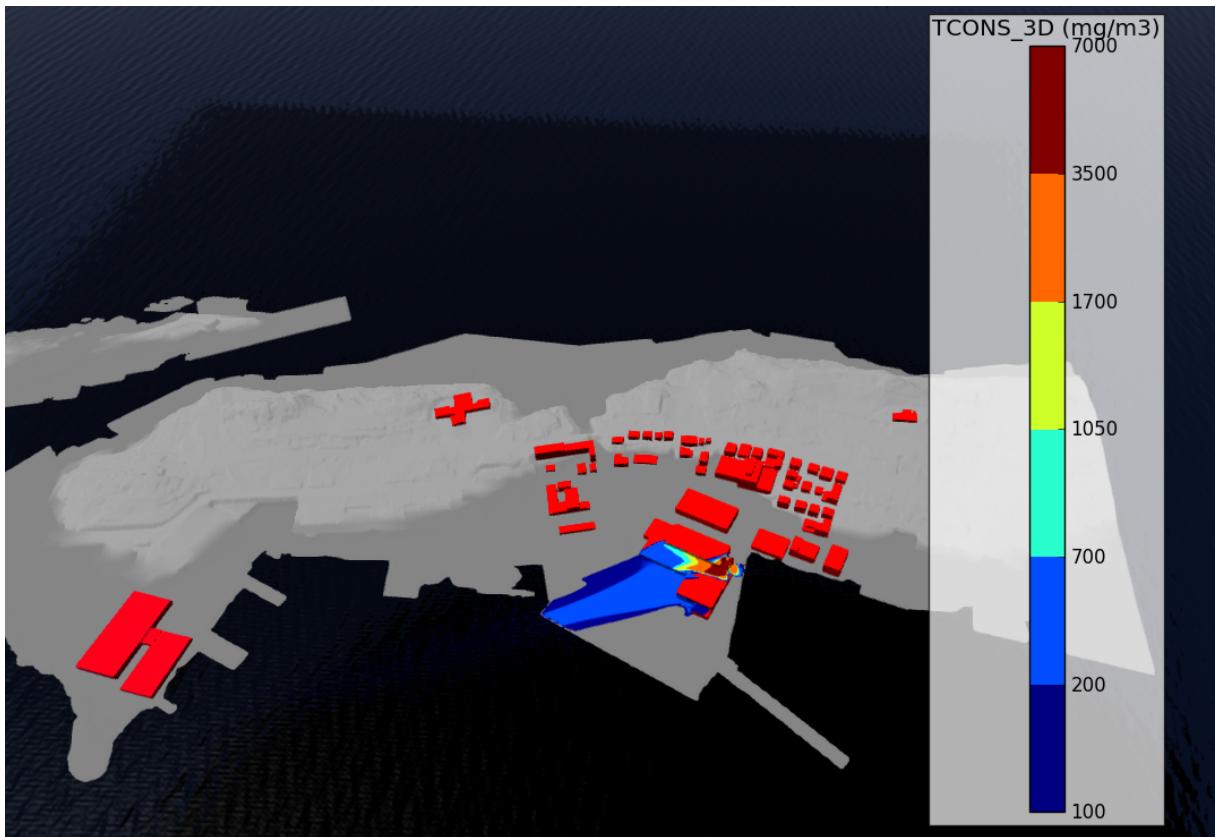
**Figur F.13:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra V på  $270^\circ$  med hastighet 7 m/s.

## Vedlegg G

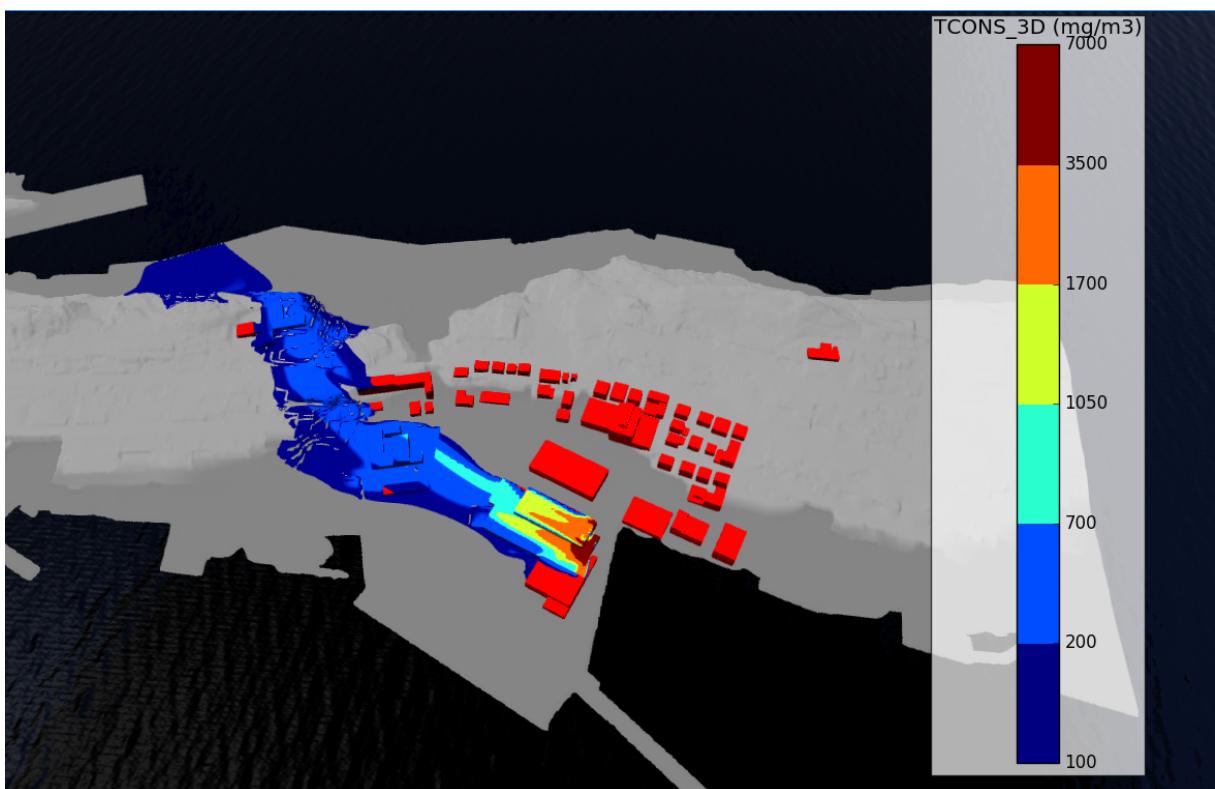
### Figurar frå simuleringane med lågare lekkasjerate



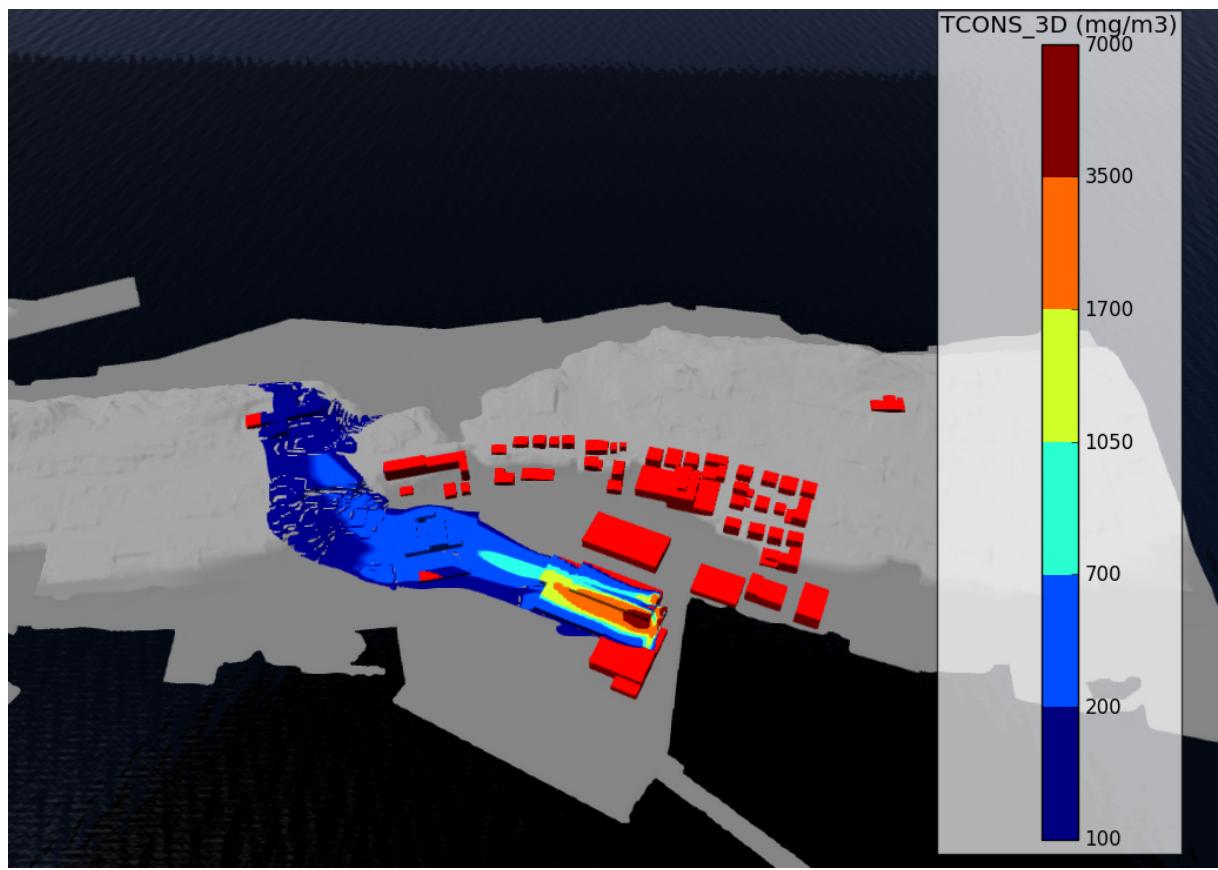
Figur G.1: Utstrekking av ammoniakk-gass for vindretning frå ØNØ på  $60^\circ$  med hastighet 3 m/s.



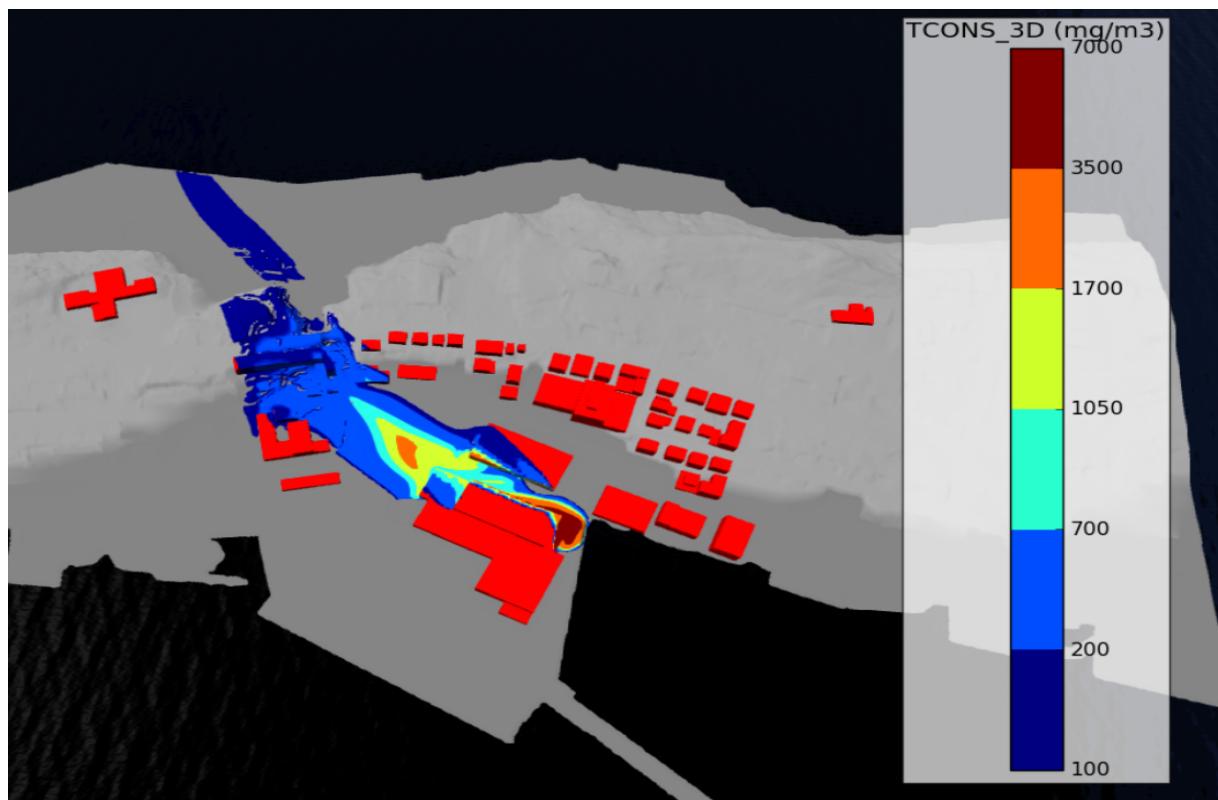
Figur G.2: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra ØNØ på  $60^\circ$  med hastighet 7 m/s.



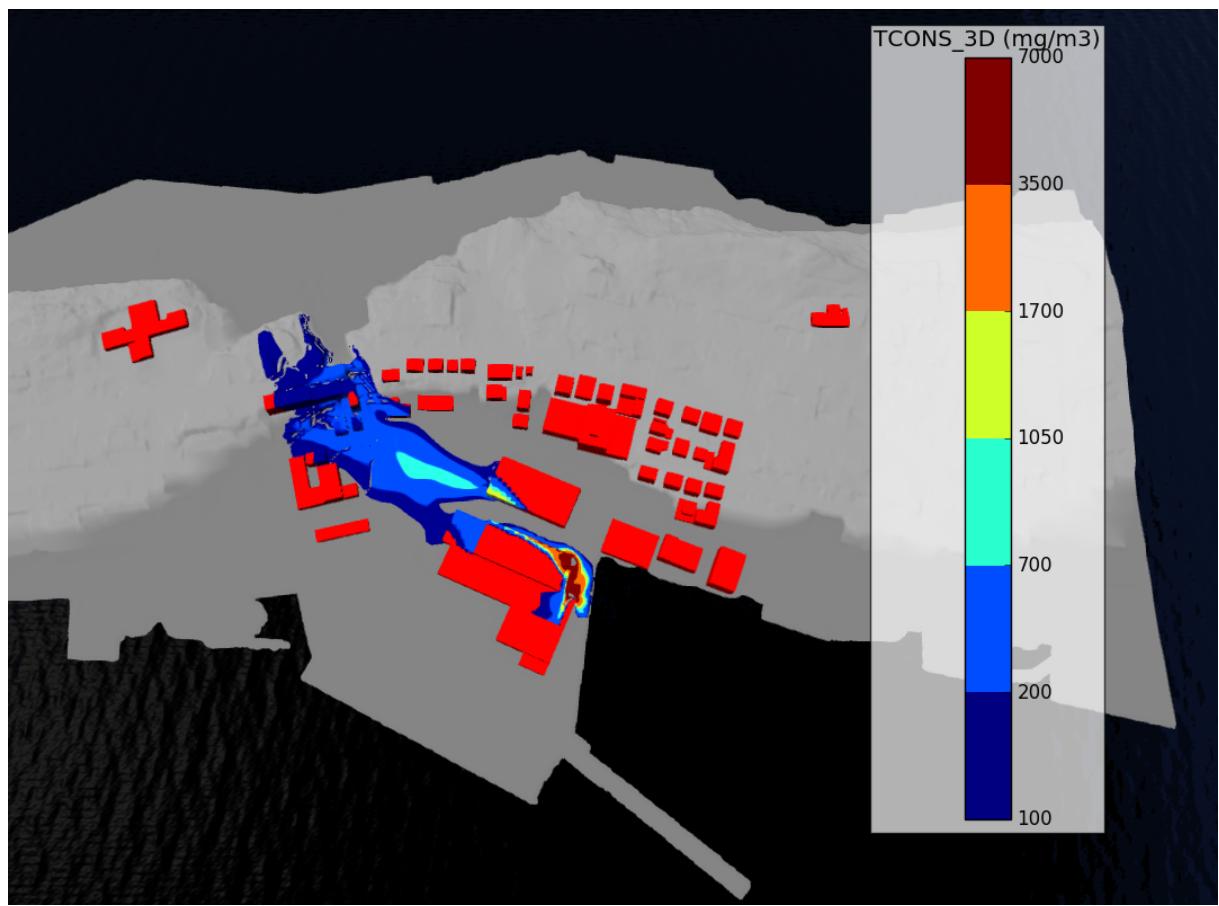
Figur G.3: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra ØSØ på  $120^\circ$  med hastighet 3 m/s.



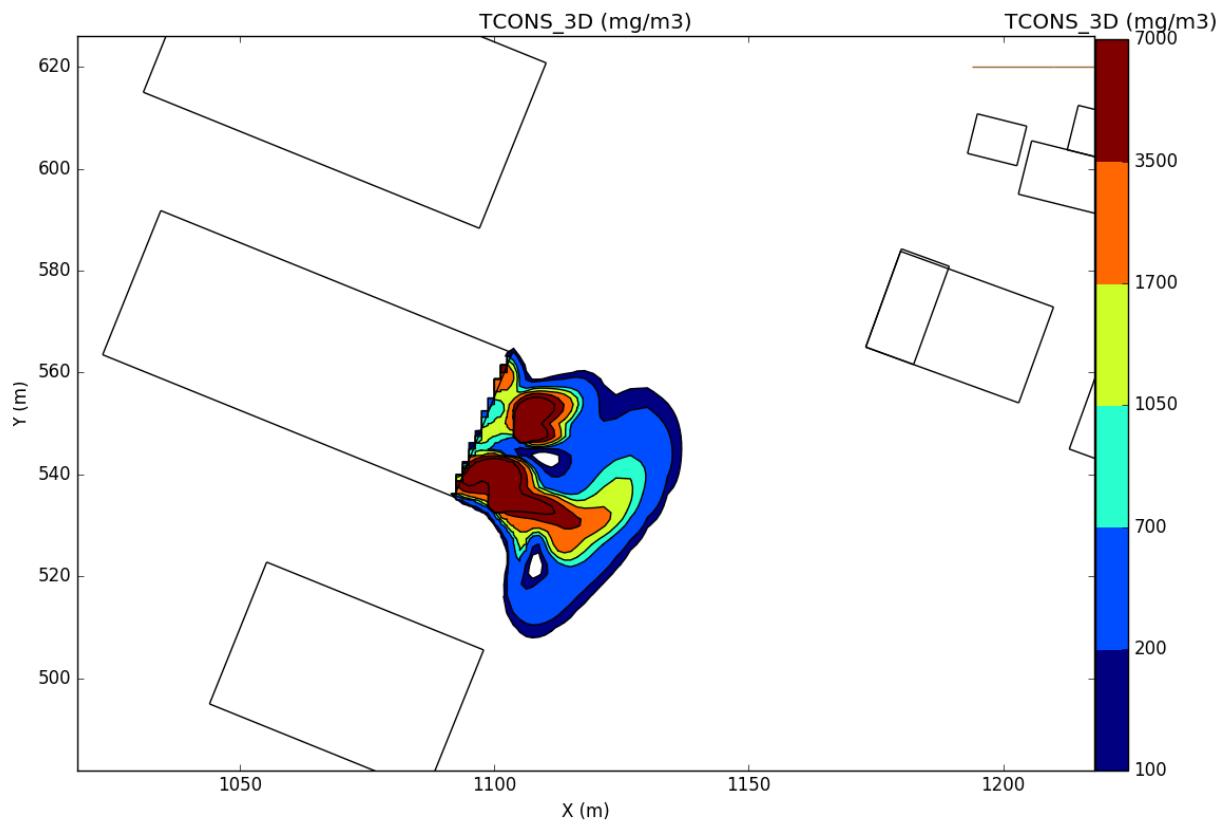
Figur G.4: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning ØSØ på  $120^\circ$  med hastighet 7 m/s.



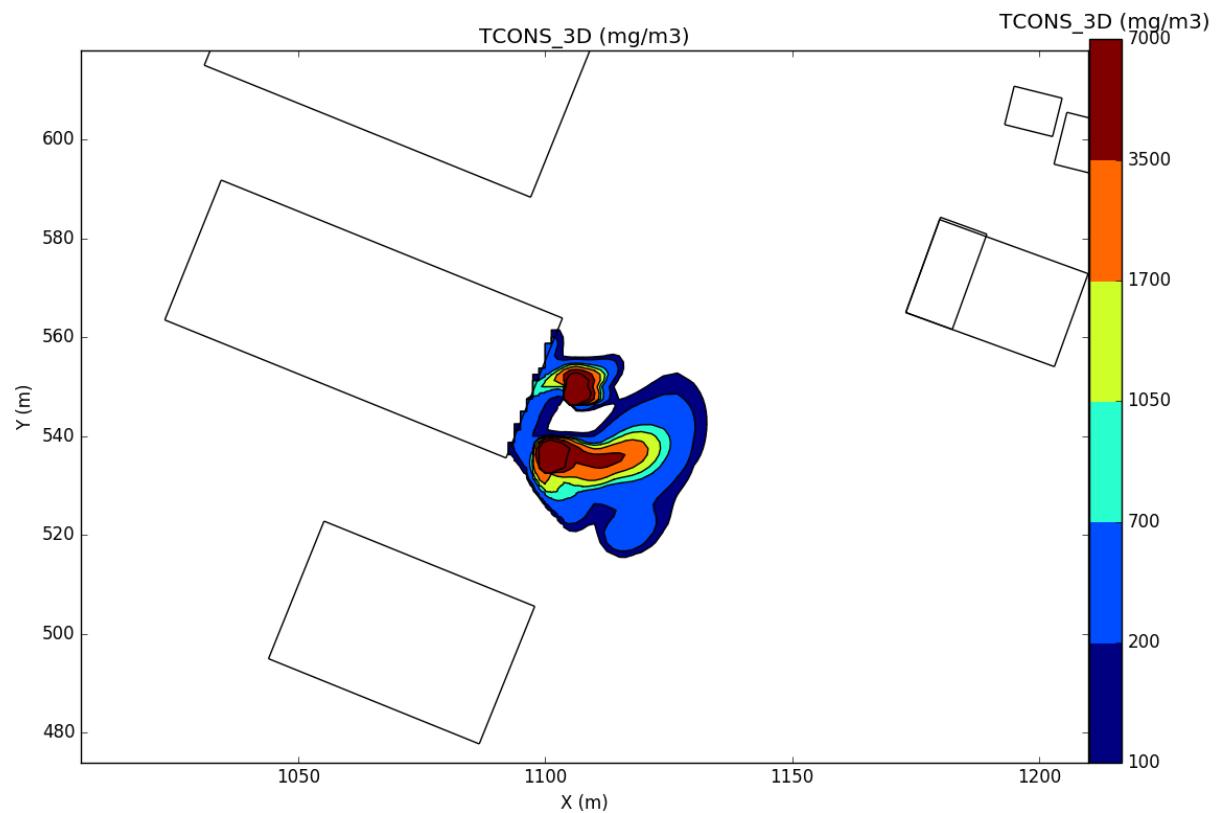
Figur G.5: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning frå SSØ på  $150^\circ$  med hastigkeit 3 m/s.



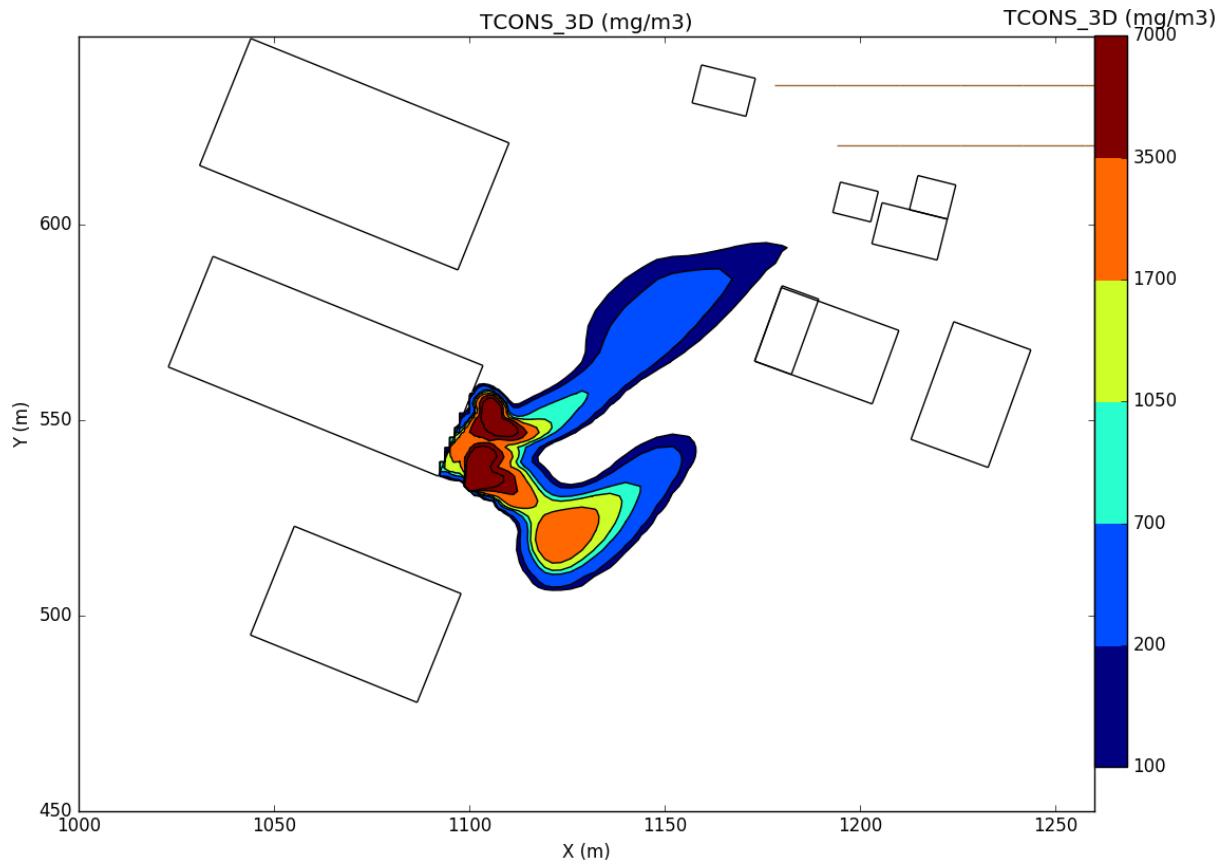
Figur G.6: Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra SSØ på 150° med hastighet 7 m/s.



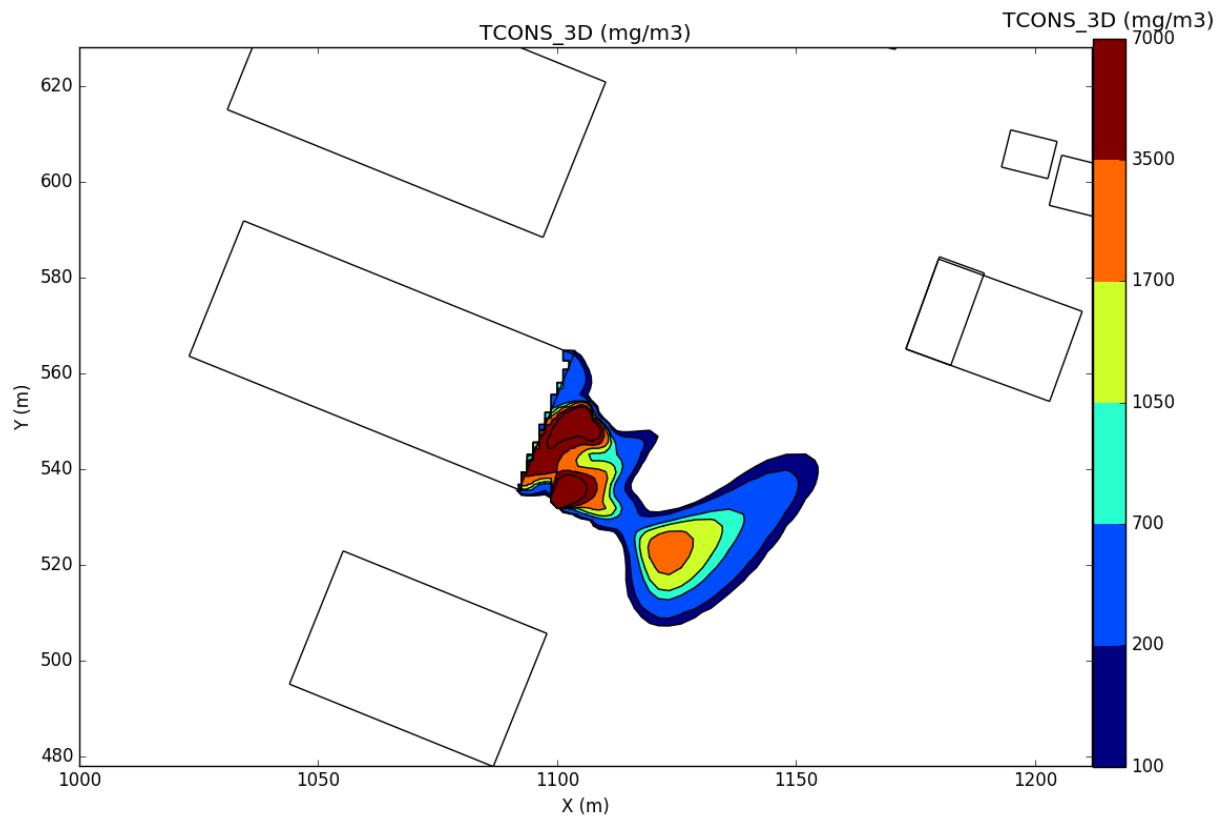
**Figur G.7:** Utstrekking av ammoniakk-gass for vindretning fra S på 180° med hastighet 3 m/s.



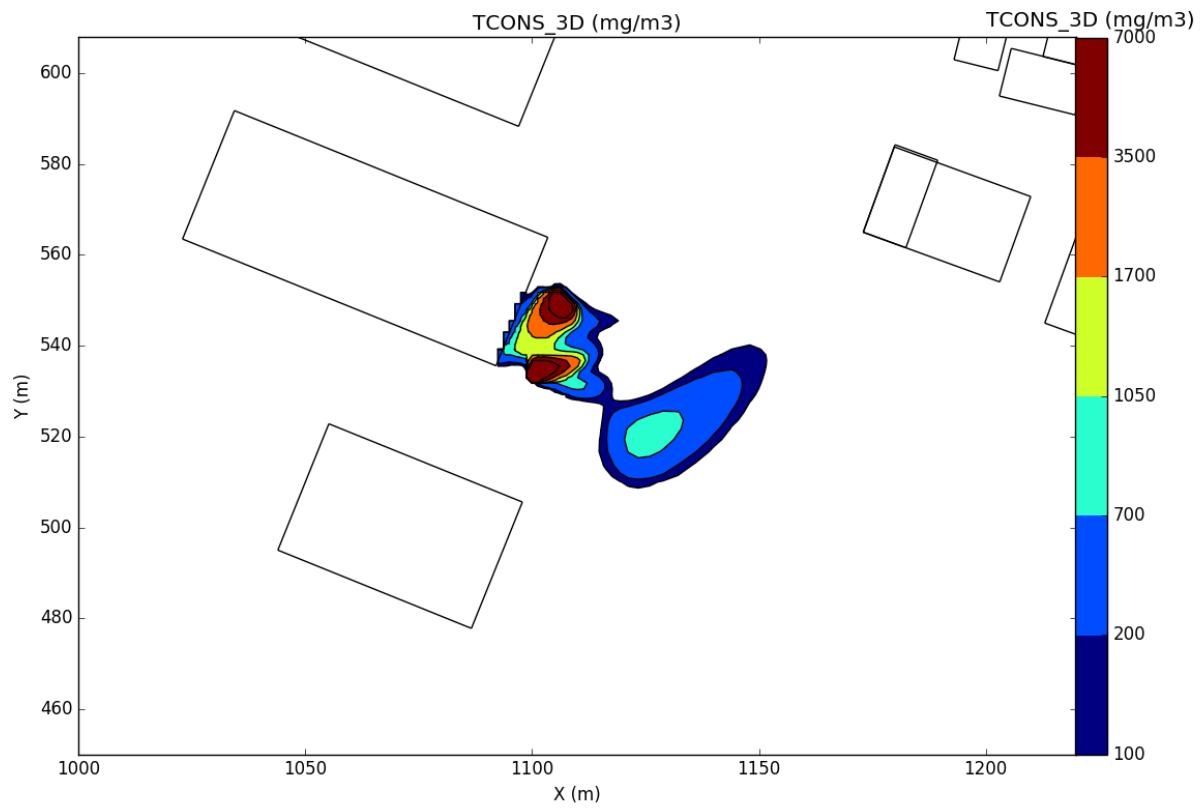
**Figur G.8:** Utstrekking av ammoniakk-gass for vindretning fra S på 180° med hastighet 7 m/s.



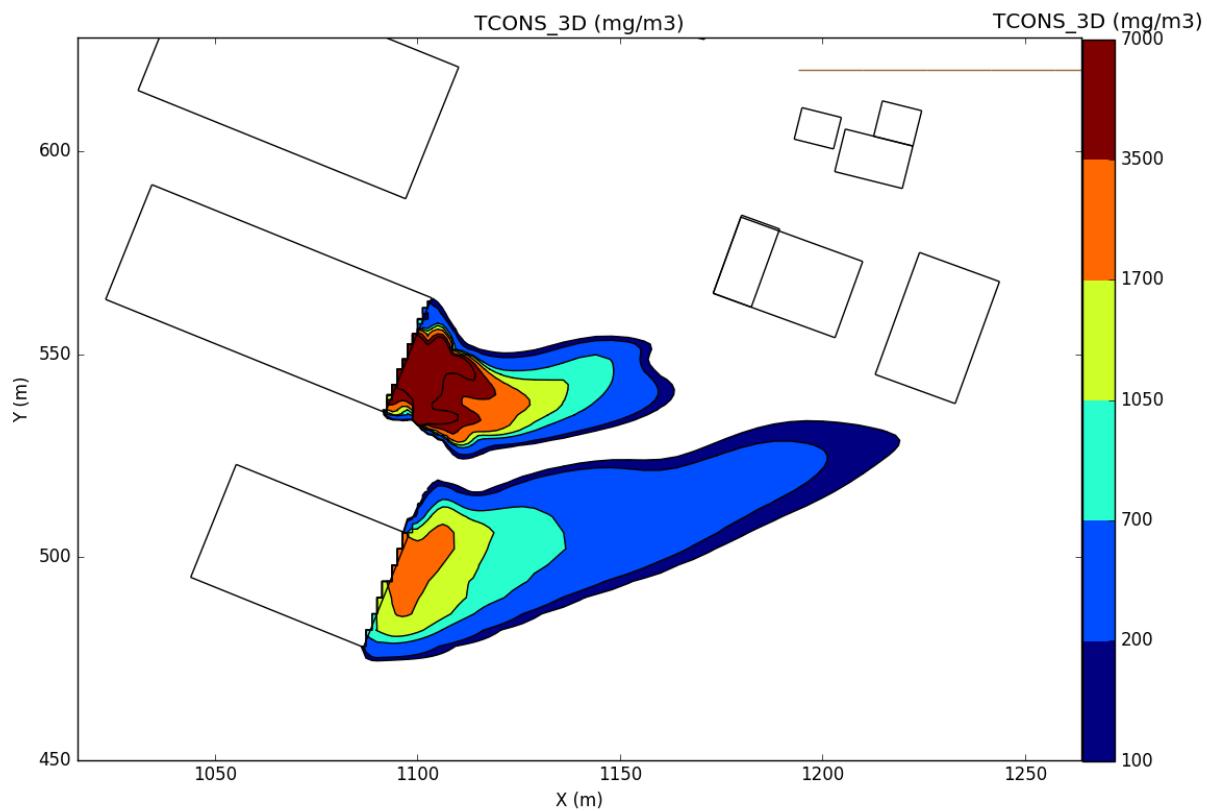
**Figur G.9:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra SSV på  $210^\circ$  med hastighet 3 m/s.



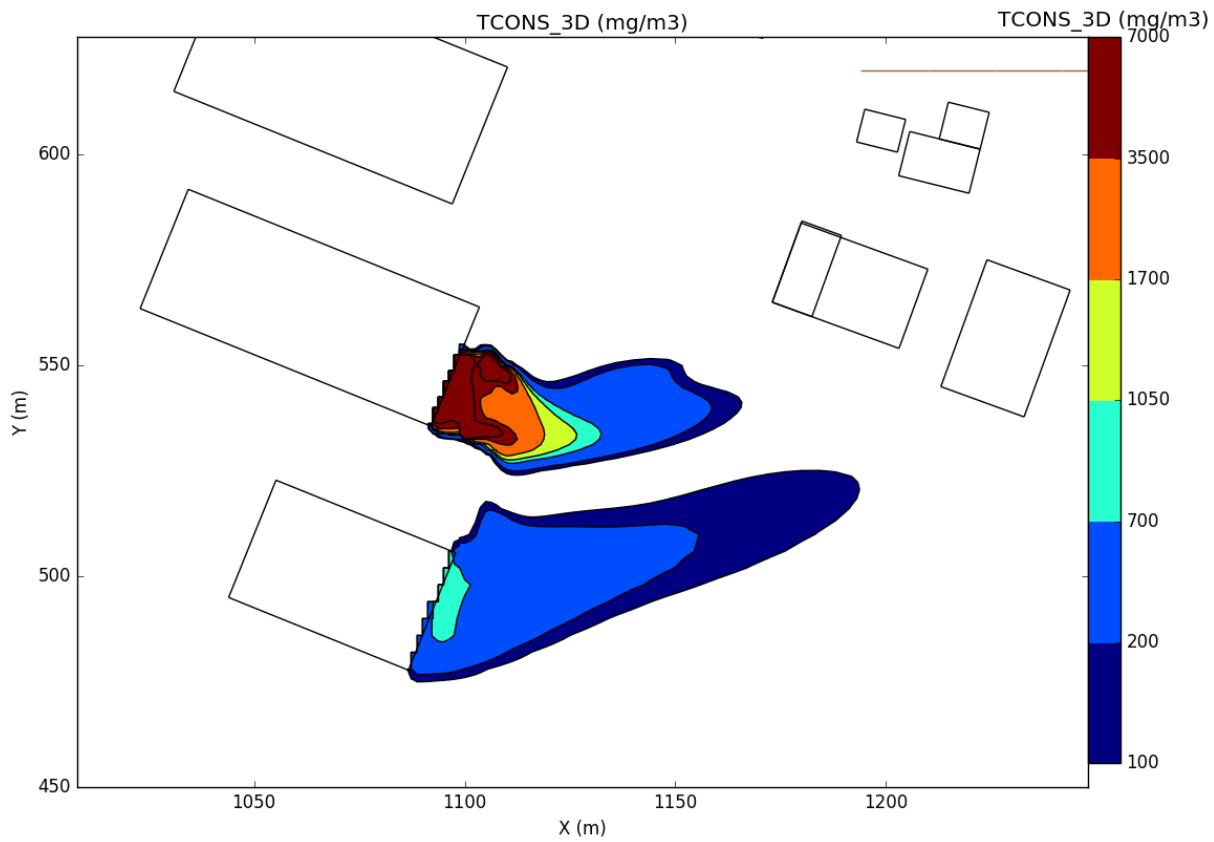
**Figur G.10:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra SSV på  $210^\circ$  med hastighet 7 m/s.



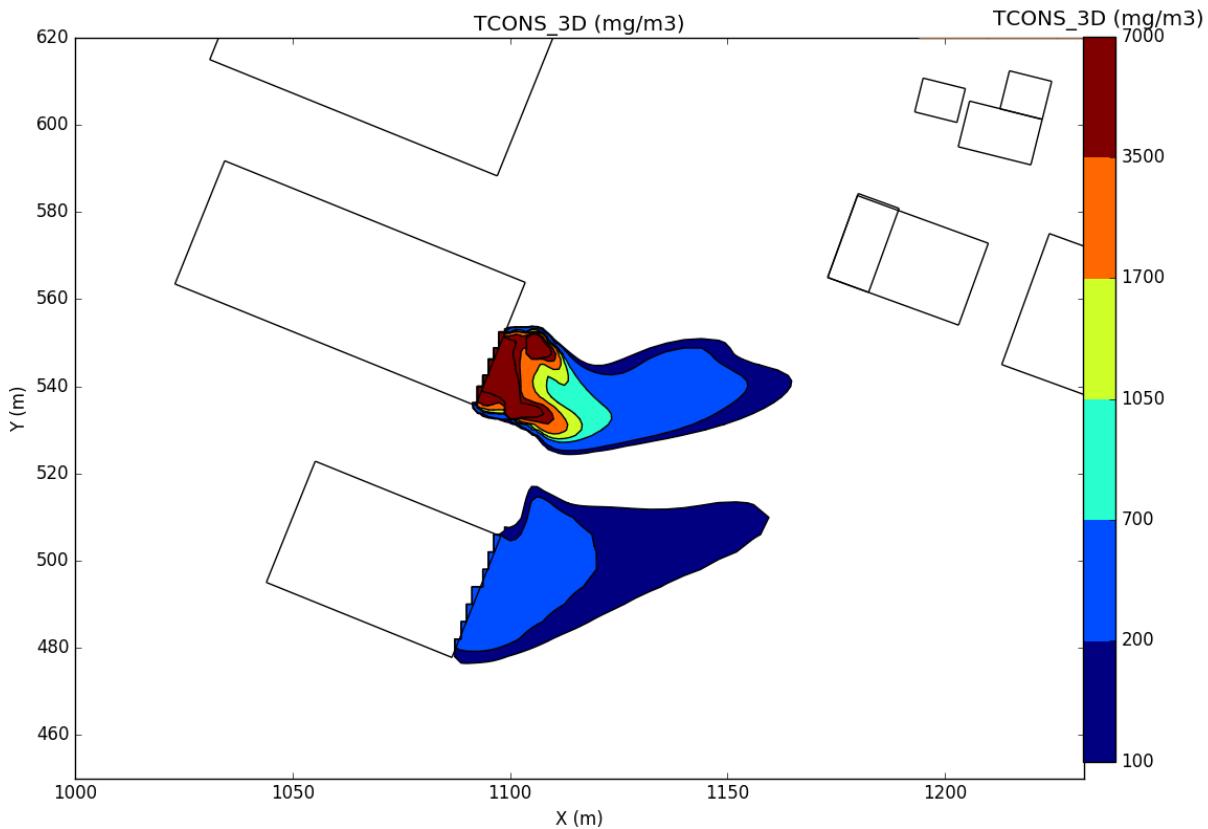
**Figur G.11:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra SSV på  $210^\circ$  med hastighet 12 m/s.



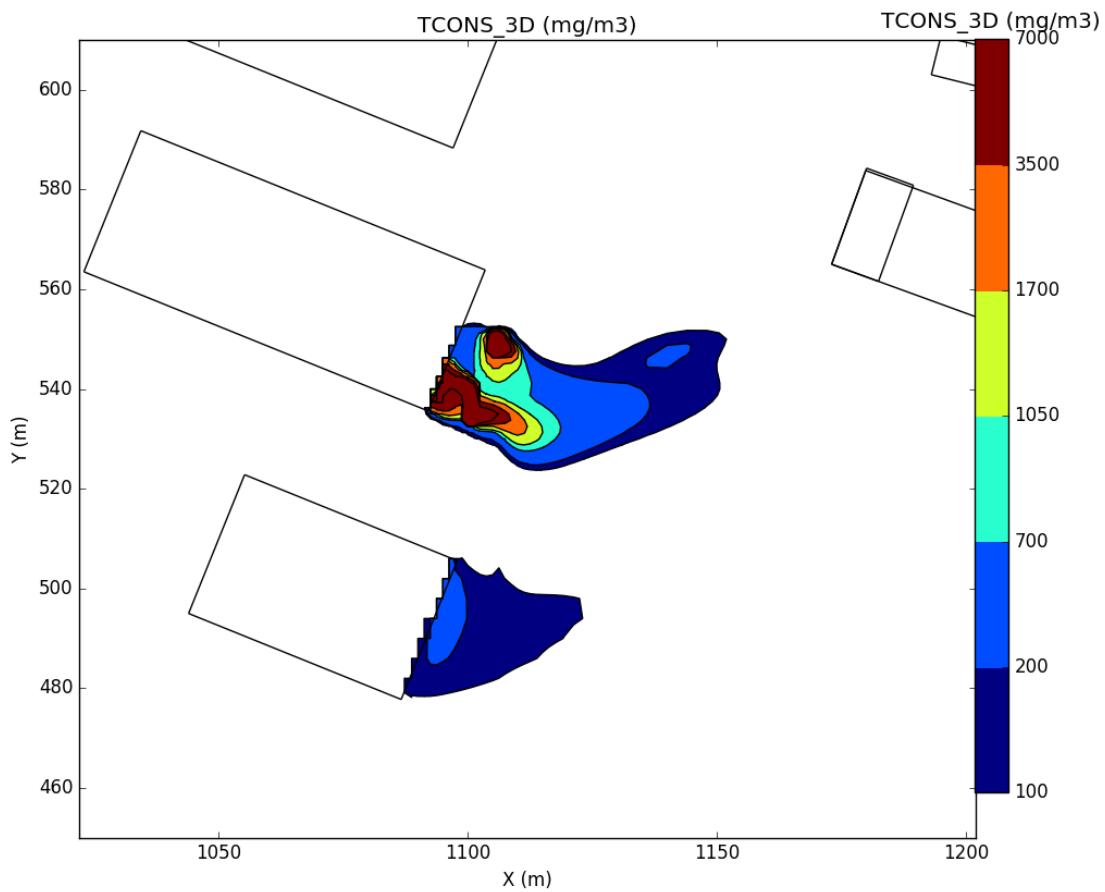
**Figur G.12:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra VSV på  $240^\circ$  med hastighet 3 m/s.



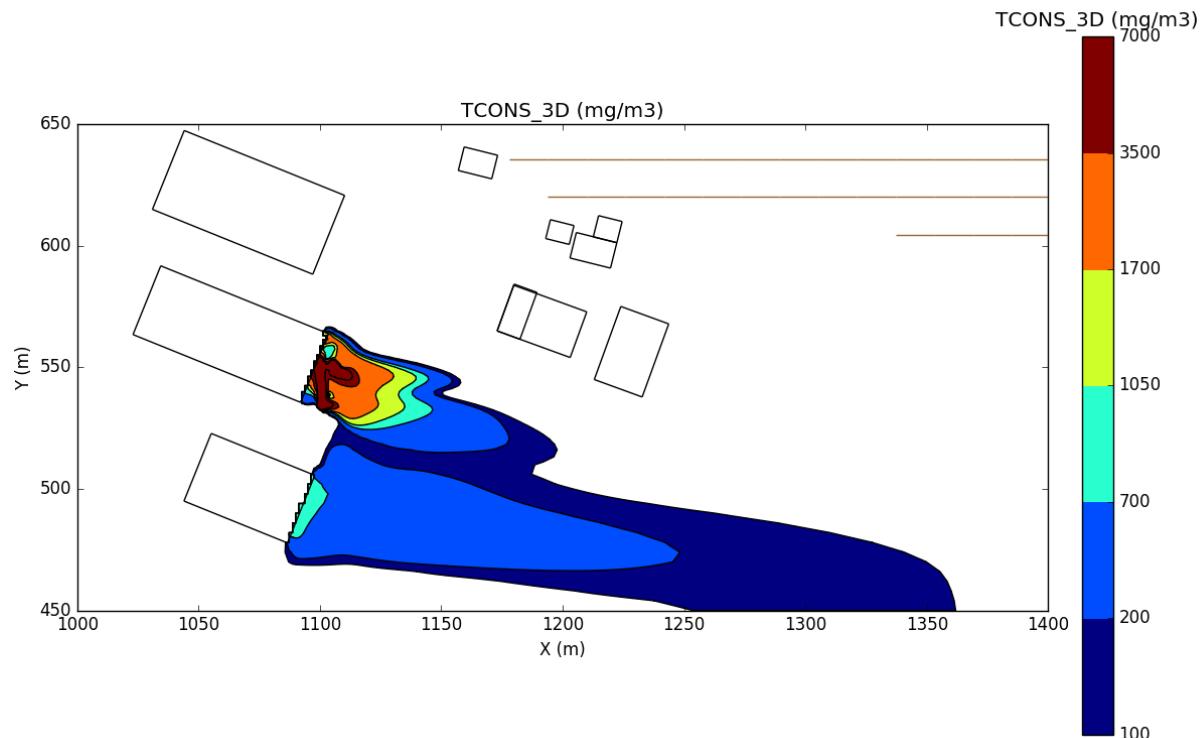
**Figur G.13:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra VSV på  $240^\circ$  med hastighet 7 m/s.



**Figur G.14:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra VSV på  $240^\circ$  med hastigkeit 12 m/s.



**Figur G.15:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra VSV på 240° med hastighet 17 m/s.



**Figur G.16:** Utstrekking av ammoniakksgass for vindretning fra V på 270° med hastighet 7 m/s.