

SVERIGES METEOROLOGISKA
OCH HYDROLOGISKA INSTITUT
08. 08. 22
BIBLIOTEKET

SMHI OCEANOGRAPHI

Oceanografiska sektionen

Nr 21, 1987

Förstudie av ett nordiskt modellsystem

för

kemikaliespridning i vatten

av

**Cecilia Ambjörn, SMHI
Förste statsoceanograf**

RECEIVED

OF THE

1871

THE

1871

THE

THE

Utskrift: Caroline Wahlström och Gunilla Öhnell.

Innehållsförteckning

1	Sammanfattning
2	Bakgrund
3	Spridningsmodeller
3.1	Allmänt
3.2	HACS, Hazard Assessment Computer System
3.2.1	Allmänt om HACS-systemet i vatten
3.2.2	Beskrivning av alla beräkningsmodeller i vatten i det automatiska HACS-systemet
3.2.3	Nyutvecklade HACS-modeller, som ej finns i drift för prognoser
3.3	EnviroTIPS, Kanadas kemikalie informationssystem
3.4	EG-ländernas spridningsmodeller
3.5	Cirkulationsmodeller för Östersjön, Öresund och Kattegatt/Skagerrack
3.6	Spridningsberäkningar
4	Förslag till svenska modellsystem för kemikaliespridning
5	Referenser

Appendix A

- A:1 Datorprogram som erhållits från U.S. Coast Guard.
- A:2 Beskrivning av alla beräkningsmodeller i vatten i det operationella HACS-systemet.
- A:3 Bildexempel på spridningsberäkning.

1 SAMMANFATTNING

SMHI har fått i uppdrag att studera ett befintligt system för spridning av kemikalier i vatten. Studierna utförs med syfte att skapa ett för nordiska behov användbart prognossystem vid olyckstillbud.

Främst studeras U. S. Coast Guards beräkningssystem HACS, Hazard Assessment Computer System. Det är uppbyggt utifrån behov av att veta huruvida vattenintag i floder behöver stängas vid ett giftutsläpp, fiskodlingar skyddas och när koncentrationen nått låga nivåer i hela området.

HACS-modellerna för vatten är ingående analyserade. De som nu finns i ett fungerande prognossystem har studerats, men även nyutvecklade modeller som inte är anpassade för det befintliga prognossystemet har betraktats. Det kanadensiska systemet TIPS har studerats något, liksom en sammanställning över EG-ländernas modeller.

HACS-systemet i sin nuvarande form är inte tillämpligt i öppet vatten eller i kust- och skärgårdsområden. Systemet är främst utvecklat för floder och kan därför inte användas i havet där dynamiken är helt annorlunda. Ett spridningsförlopp i en flod använder sig av konstant ström i tid och rum, konstant vind, begränsande väggar på sidorna, sötvatten och ganska lätt kontrollerbara processer. I havet är dynamiken betydligt mera komplicerad och komplex. Vågor, vadersystem, strömmar som varierar kraftigt mellan olika djup, horisontella strömvariationer som ändras inom några 100-tals meter, tre-dimensionella virvelsystem av olika storlekar, varierande bottendjup, tidsvariationer som sker inom några timmar, olika densiteter på skilda djup är några av de mest grundläggande skillnaderna. Enskilda förlopp inom HACS kan ändå användas, såsom t ex beräkningen av ett flytande ämnes utspridning på vattenytan de första timmarna. Teoretiska delar kan tas ur programmen och manualerna och användas i nya system. Särskilt gäller den här möjligheten de nyare programmen inom HACS-systemet, där teorin är mera långtgående och omfattande.

Citat U. S. Coast Guard. "HACS kan vara ett extremt kraftfullt verktyg, när det handhas av en specialist, som kan formulera ett problem till HACS korrekt och därefter tolka de erhållna resultaten. Samtidigt kan systemet oavsiktligt användas helt felaktigt om det appliceras på situationer som ej var menade för tillämpning. Det finns ingen automatisk metod att hindra felanvändning, utan användaren måste vara rimligt insatt i metodiken bakom modellerna."

Följande föreslås:

Ström- och spridningsberäkningar för prognoser

- * En cirkulationsmodell för Östersjön används för att prognosera strömmarna. Den har tidigare använts för olika typer av spridningsberäkningar, bl a av radioaktivt material. Modellen kopplas till prognoserad väderinformation samt sätts upp i rutinemässig drift. Successivt byggs olika förlopp för kemikalier in i systemet. Dessa kan förbättras kontinuerligt, dels med mer sofistikerat teoretiskt underlag, dels med flera olika typer av förlopp.
- * Ett dialogprogram, som utgår från enkla frågor från datorn, skapas.
- * Grafiska presentationer av resultat tas fram.

För västkusten finns idag ingen lämplig strömmodell, utan här kan realtidsdata kopplade till spridningsberäkningar användas.

Om 3 - 5 år finns ett tre-dimensionellt modellsystem (PHOENICS) i drift för hela den svenska kusten; "DEN SVENSKA HAVSMODELLEN". Då kan de spridningsförlopp som redan är skapade för Östersjön läggas in i denna.

Spridningskatalog

- * Ett antal olika typfall beräknas med spridningsmodellen. Härigenom erhålls en uppfattning om hur stora områden som drabbas vid utsläpp av några vanliga kemikalier, tidsutvecklingen för några förlopp i havet kan simuleras och vädersystem vid olika årstider kan appliceras. Resultaten kan bilda ett uppslagsverk med kartor över typiska situationer och ligga till grund för riskbedömningar och utgöra planeringsunderlag. Ett utsläpp av en viss mängd av ett ämne skulle, i ett känsligt vattenområde, kunna medföra så allvarliga konsekvenser att risken för en olycka måste elimineras, t ex genom att transporten går en annan säkrare rutt.

2

BAKGRUND

SMHI fick i mars 1987 i uppdrag, av "Nordiska Minister-rådets styrgrupp för FoU-samarbete för bekämpning av kemikalieolyckor", att utföra en förstudie rörande spridningsmodeller för kemikalier i vatten. Arbetet innebär främst en genomgång av HACS, som är U.S. Coast Guards beräkningssystem. Den kanadensiska modellen EnviroTIPS studeras även något och svenska spridningsberäkningar och cirkulationsmodeller för de omgivande haven beskrivs.

Arbetet, som mynnar i olika förslag, ska ligga till grund för ett framtida nordiskt beräkningssystem för kemikaliespridning i vatten.

Förstudien utförs i nära samarbete med Kustbevakningen, Räddningsverket, Institutet för vatten- och luftvård och Statens Naturvårdsverk.

Som underlag för arbetet med HACS används rapporter, manualer samt muntlig kommunikation med, bland andra, Dr. Parnarouski, U.S. Coast Guard, som utvecklat större delen av systemet. Den version av HACS som blev klar 1975 och som motsvarar dagens version har testats operationellt på SMHIs VAX-dator. Eftersom U.S. Coast Guard använder samma dator-typ krävdes endast en smärre insats för detta.

Behovet av att kunna göra prognoser över vart kemikalier tar vägen i havet har successivt ökat. Att kemikalierna har olika egenskaper och att dessa sällan är renodlade utan en kombination av olika beteenden, är ett faktum som gör problemet mycket mångfasetterat och komplext. Vid ett oavsiktligt kemikalie-utsläpp är det viktigt att beräkningar snabbt ger information om spridningsförloppet, vilket innebär att det krävs få och lättillgängliga in-data. Långt gången automatisering och snabba datorprogram är några av förutsättningarna. Systemet bör vara enkelt att köra och självinstruerande.

Av intresse kan vara såväl spridning i öppna havet, som i hamnar, skärgård, vikar och sund. Valet av områdestyper har stor betydelse för vilka beräkningsmetoder som används.

3 SPRIDNINGSMODELLER

3.1 Allmänt

Matematiska modeller för kemikaliespridning kan delas upp i två olika typer av beräkningssystem. I det ena behandlas varje fysikalisk process för sig och de läggs sedan samman för att ge det kompletta förloppet. I det andra systemet sker en integrerad beräkning av det totala förloppet med alla processer aktiva samtidigt.

Ett utsläppt ämne kan vara passivt eller aktivt. Ett passivt ämne beter sig precis likadant som vattnet, där det befinner sig. Det innebär att hänsyn endast tas till vattnets rörelser och inga extra förlopp läggs in. Ämnet är passivt när det t ex löser sig helt utan att vattnets densitet påverkas nämnvärt eller när det ligger på vattenytan och har samma egenskaper som vattnet. Ett aktivt ämne däremot följer med vattnet, men har dessutom egna beteenden. Det kan t ex koka, sjunka, flyta upp till ytan, delas upp i droppar, avdunsta eller lösas upp successivt. Dessa egenskaper måste kontinuerligt adderas till beräkningarna av förloppet. Ämnets utveckling kan även påverka vattnet genom t ex isbildning, vilket också är väsentligt.

Antalet kemikalier som transporteras med fartyg är mycket stort. I U.S. Coast Guards informationssystem finns 14 000 olika kemikalier upptagna. Varje ämne måste klassificeras utefter ett generellt förlopp hos dess beteende, såsom farlighet, giftighet och dess egenskaper i havet. Beträffande beteendet i vattnet kan följande indelning göras:

- * avdunstar - ämnen som snabbt avdunstar,
- * flyter - ämnen som flyter på vattenytan,
- * lösliga - ämnen som snabbt upplöses i vatten,
- * sjunker - ämnen som sjunker till botten.

Många kemikalier faller inom mer än en av ovanstående grupper.

Avdunstning, mängden av ämnet på vattenytan minskar. Oftast sker detta snabbast i början och upphör efter några sekunder - dygn. Förloppet styrs förutom av ämnet självt även av främst vind, vågor och temperaturer.

Flytkraft, ämnet söker sig till en densitetsyta i vattnet som är densamma som dess egen densitet.

Löslighet är ett förlopp som i stor grad styrs av ämnet självt, men temperatur hos vattnet, vågor, turbulens och strömmarnas friktionseffekt har också betydelse. Man kan inte ange någon generell tidslängd innan ämnet är helt upplöst.

Gravitation, ett ämne kan ha varierande sjunkhastigheter. De kan vara olika inom ämnet självt och kan också variera med tiden.

Ett annat förlopp som är väsentligt för utspridningen på vattenytan av ett ämne som flyter kallas för egenspridning. Egenspridningen består av tre olika faser, där varje fas styrs av spridning - återhållande krafter. I första fasen verkar gravitation - tröghet, gravitationen gör att ämnet breder ut sig horisontellt. Andra fasen i förloppet är gravitation - viskositet, gravitationen fortsätter tunna ut och utvidga fläcken medan dess specifika viskositet dämpar. För ett segt ämne med hög viskositet tar det därför längre tid att bilda ett tunt skikt. Den tredje fasen är ytspänning - viskositet. Ytspänningskrafterna står nu för utspridning av ämnet och viskositeten håller emot. Detta är ett skeende som äger rum på tidsskalan timmar - något dygn. Förutom egenspridning verkar också turbulensen i havet som en utspridande faktor med tidsskalan timmar - veckor.

3.2 HACS, Hazard Assessment Computer System

3.2.1 Allmänt om HACS-systemet i vatten

HACS är ett datorbaserat beräkningssystem och ingår som en av sex olika huvudkomponenter i Chemical Hazard Response Information System, CHRIS. Resultaten från HACS ska snabbt och med tillräcklig information ge svar på följande frågor.

- * När når vatten/luft koncentrationen en speciellt angiven nivå av giftighet vid ett godtyckligt angivet läge?
- * När återgår koncentrationen till en icke-giftig nivå?
- * Vilken koncentration råder vid en viss plats och tidpunkt?

Resultaten ska utgöra en del av beslutsunderlaget för val av lämpliga insatser.

Alla HACS-modeller behandlar förlopp i floder, flodmynningar eller sjöar. Därför kan endast vind och ström som inte varierar i tiden eller i området användas. Det innebär att endast förlopp över kort tid kan beräknas och inga beräkningar gäller för öppet hav eller kustområden. Modellen utgår ifrån sötvatten, men detta är troligen inget avgör-

ande problem utan är lätt att korrigera för. Det måste främst beaktas i databanken, där varje ämnes egenskaper måste anges för olika salthalter.

HACS-modellerna kan således inte tillämpas i öppet vatten eller i skärgårdsområden.

HACS kräver följande information för att kunna användas:

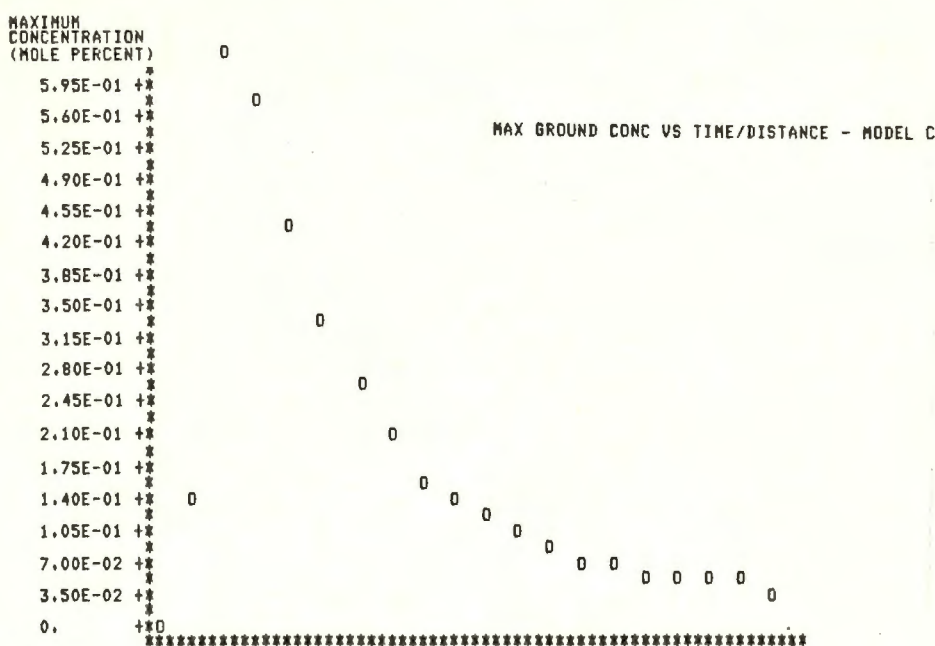
karaktäristika hos det utsläppta ämnet såsom bl a namn, lagringstryck, temperatur, mängd, viskositet, kokpunkt, densitet och lösbarhet

utsläppsförhållanden såsom tankstorlek, hålets läge i förhållande till vattenytan och nivån i tanken,

omgivande förhållanden såsom vind, luft- och vattentemperaturer, ström, totala vattendjupet och utsläppets geografiska läge i ett tänkt koordinatsystem.

HACS har en databas med över 900 olika kemikalier som ofta transporteras i fartyg. Här är fysikaliska och kemiska egenskaper angivna.

Resultaten av en beräkning presenteras i tabell och i form av grafiska bilder där sambandet mellan koncentration, ytstorlek, avdunstningshastighet, återstående volym, plats och tidpunkt framgår. Exempel i figur nedan.



Figur 1. Koncentrationens tidsutveckling vid en bestämd punkt.

Beräkningarna styrs med ett dialogprogram, där frågor successivt kommer fram på dataskärmen. Detta styrs av UIM = User Interface Module.

Citat U.S.Coast Guard: "HACS kan vara ett extremt kraftfullt verktyg, när det handhas av en specialist med erfarenhet av behandling av riskfyllda förlopp. Specialist-en ska kunna formulera ett problem till HACS korrekt och därefter tolka de erhållna resultaten på rätt sätt. Samtidigt kan systemet oavsiktligt användas helt felaktigt om det appliceras på situationer som ej var menade för tillämpning eller ej var inkluderade i modellens användningsområde. Det finns ingen automatisk metod att hindra felanvändning, utan användaren måste vara rimligt insatt i metodiken bakom modellerna."

Synpunkter som framkommit inom U.S. Coast Guard vid en intern genomgång av HACS, 1986.

- * Trots träning av personal tar det timmar istället för minuter att få fram beräkningsresultat.
- * Många HACS modeller är begränsade av antaganden och approximationer.
- * Många av de sekundära möjligheterna används ej och betungar systemet.
- * Prognoser var ofta osäkra.
- * Både systemet och dess användarmanual kräver en intensiv och dyr modernisering.
- * Systemet är ej användarvänligt och ger dålig grafisk presentation.
- * Årligt underhåll jämfört med utnyttjande är högt, 10 000 - 30 000 dollar per användartimme.

U.S. Coast Guard lägger inte längre ner resurser på modell-utveckling i vattnet.

Av U.S. Coast Guard föreslagna lösningar

- * Utveckla förminskad HACS för stordator (VAX) eller mikrodator.
- * Skapa meny-styrd data-input.
- * Nya grafiska presentationer.
- * Underhållskontraktet uppsagt.

Kontakter våren 1987 med olika representanter för U.S. Coast Guard gav följande indikationer. Man satsar på luftspridningsberäkningar med relativt enkla modeller, där alla hus, sjukhus och skolor finns inlagda. Vinden mäts på platsen för olyckan med ett mobilt system. Denna styr beräkningar på en liten dator av plymens utbredning. Spridning i vatten satsar man inga resurser på.

3.2.2 Beskrivning av alla beräkningsmodeller i vatten i det automatiska HACS-systemet

Varje modellbeskrivning finns nedan i form av en kort sammanfattning. Utförliga beskrivningar finns i appendix A:2 och rekommenderas till den läsare som vill ha mer information.

På nästa sida visas en skiss över HACS-modellerna, figur 2.

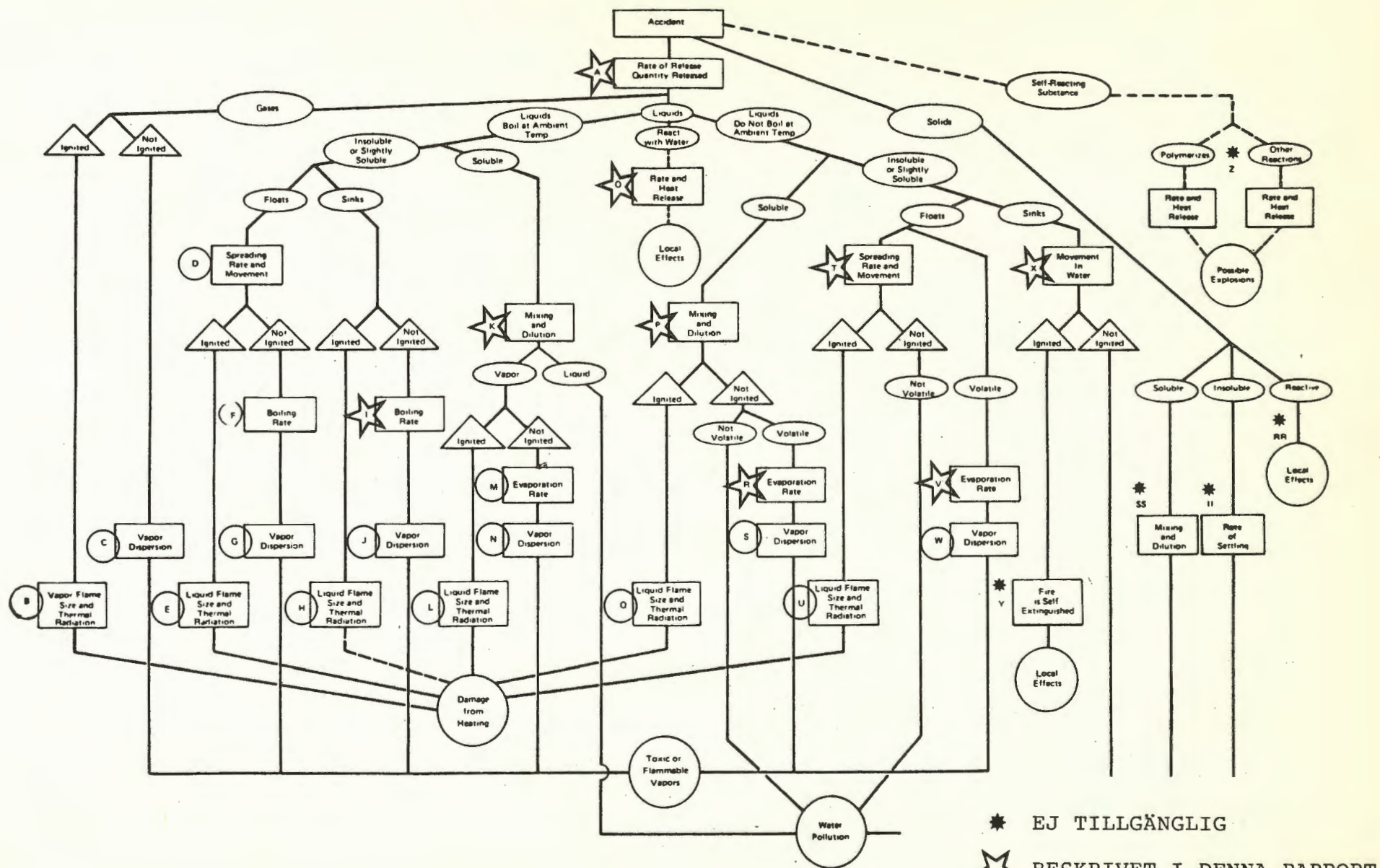
Det operationella HACS-systemet består av olika modeller som var och en beräknar vissa förlopp. Ett olyckstillfälle nyttjar oftast flera förlopp och de väljs fritt vid prognosen. Datafilen med den angivna kemikaliens data läses automatiskt. Man kan själv ändra värdena om man vill, men anges inget nytt värde tas de alltid från datafilen. Beräkningarna utgår från sötvatten och olika koefficienter gäller oftast vid temperaturen 18°C.

Sammanfattningar över alla analyserade modeller

Utflöde ur ett hål i en tank, modell A.

Utflödet av gas och valfri vätska från ett hål i en tank beräknas. Hålet får ej vara beläget under vattenytan. Normalt utgör den här modellen första steget i en beräkningsprocess.

Figur 2. HACS-modeller med kommentarer om tillgänglighet.



HAZARD ASSESSMENT TREE: (EVENTS CHART)

Utspridning av en vätska på vattenytan, modell_T

Egenspridning hos en lätt vätska på vattenytan beräknas. Vätskan blandas ej med vattnet. Utsläppet betraktas som momentant och dess egenskaper förändras ej, vilket främst innebär att avdunstning inte är med. Radiell spridning och spridning i en riktning på en lugn vattenyta beräknas.

Avdunstning, modell_K

Modellen behandlar en löslig kemikalie som kokar i vattnet och beräknar hur stor del som försvinner till atmosfären och hur stor del som stannar i vattnet. Den räknar också ut det djup under vilket kemikalien inte kan koka pga att trycket från vattenmassan ovanför blir för stort.

Blandning och spädning, modell_P

Modellen beräknar spridning och blandning av ett passivt ämne som löses helt. Ett passivt ämne uppför sig likadant som vattnet. Ämnet ändrar inte mängd eller egenskaper under processen.

Avdunstningshastighet, modell_I

Tiden för total avdunstning av ett ämne som kokar i vattnet beräknas. Normalt erhålls tidslängder som är mindre än 1 minut.

Kemikalier som reagerar med vattnet och ger andra ämnen, modell_O

För kemikalier som reagerar snabbt med vattnet hänvisas till manualen, där förloppet beskrivs i termer av nya ämnen som bildas och hur pass snabbt förloppet är. Vid långsamma reaktioner kan en beräkning eventuellt göras med någon annan av de beskrivna modellerna.

Blandning och spädning av en i vatten löslig kemikalie med högt ångtryck, modell_R

Ett lösligt ämne blandas omedelbart ned i vattnet. Härefter beräknas hur mycket ånga som går upp i luften, vilket normalt är en liten mängd eftersom nedblandningen snabbt späder ut ämnet. Mängden som bildar ånga är cirka 1 promille. Tiden för ämnet att nå låg giftighet beräknas och eftersom en mycket löslig kemikalie betraktas sker utspädningen ofta på kortare tid än 1 timme.

Spridning av ett olösligt ämne, som är lättare än vatten, inte kokar och är flykigt, modell V

Egenspridning hos en lätt vätska på vattenytan beräknas. Vätskan blandas inte med vattnet. Utsläppet betraktas som momentant. Radiell spridning och spridning i en viss riktning på en lugn vattenyta beräknas. Storleken hos ämnets utbredning på vattnet beräknas utifrån egenspridning och avdunstning. Även den totala tidslängd som krävs för att hela mängden ska avdunsta beräknas.

Ett olösligt ämne sjunker til botten och sprids därefter uteder botten, modell X

Modell X anges i HACS-manualen gälla för kemikalier som är olösliga eller svagt lösliga i vatten, är tyngre än vatten och som inte kokar. Modellen beräknar hur ämnet sjunker, sprids och sedan löses på botten (om svagt lösligt), samt hur den lösta kemikalien därefter sprids. Utsläppet förutsätts ske under kort tid i centrum av en flod utan tidvatten.

Den nyutvecklade modellen som beskrivs i ref (1) men inte finns i drift, tycks vara relativt identisk med modell X. Modellen i rapporten räknar först ut nedsjunkningen genom vattnet med samtidig horisontell förflyttning. Därefter räknas egenspridning, pga gravitation, av fläcken på botten ut. Totala mängden på botten är oförändrad. Sedan får ämnet förflyttas uteder botten under strömmens inflytande. När alla ojämnheter (trolig storleksordning är centimeter-decimeter) på botten är utfyllda kommer strömmens friktionseffekt inte åt ämnet längre.

Modellen i rapporten klarar ej av att beräkna utlösningen och spridningen av det lösta materialet, vilket modell X tycks kunna. Sannolikt klarar inte modell X mer än den i rapporten beskrivna modellen gör.

3.2.3 Nyutvecklade HACS-modeller, som ej finns i drift för prognoser.

SMHI har erhållit nyutvecklade datormodeller på band innehållande programtexter. Dessa finns ej inom HACS-systemet. Modellerna på bandet har följande benämningar.

Modell_1 Mixing and dilution model.

Modell_2 Sinking model.

Modell_3 Spreading model.

Modell_4 Venting rate model.

Modell_5 Dense Gas Vapor Dispersion Model.

Samtidigt som bandet erhöles hänvisades till ett antal artiklar för att erhålla detaljerad information om vad modellerna gör. Artiklarna finns tillgängliga hos Kustbevakningen i Sverige. Titlarna anges i ref(2), ref(3) och ref(4). Här redogörs kortfattat för modellerna på bandet, i den mån de går att koppla till de rekommenderade rapporterna.

Modell_1. Blandning och utspädning av ett lösligt ämne. Ref(2) är kopplad direkt till modellen. Ämnet kan vara tyngre eller lättare än vatten och hänsyn tas till dess densitet. Avdunstning är med i beräkningarna. Först beräknas egenspridning, därefter blandas ämnet genom vanlig turbulent diffusion med angivna utbyteskoefficienter.

Modell_2. Utsläpp av en löslig, tung, ej blandbar kemikalie i vatten. Ref(4) beskriver ingående teorin, som är avancerad. Ämnet sjunker och hamnar där strömmarna för det. Ämnet löses ut successivt på botten och man kan när som helst erhålla information om mängden som är kvar på botten. Hänsyn tas till vågbildningen hos sanden på botten samt storleken hos klot och droppar.

Modell_3. Spridning beräknas i den här modellen. Någon hänvisning till förklarande artikel finns inte, men troligen beräknas egenspridning på vattenytan av ett ämne som är lättare än vatten, typ olja.

Modell_4. Modellen behandlar utsläpp från en tank och den kan bland annat beräkna utsläpp över och under vattenytan samt samtida utsläpp av gas och vätska.

Modell_5. Den gäller spridning på land och behandlas därför ej här.

3.3 EnviroTIPS, Kanadas kemikalieinformationssystem

EnviroTIPS betyder Environmental Technical Information for Problem Spills. Vid en diskussion med Mervin Fingas i Baltimore våren 1987 i samband med "1987 Oil Spill Conference" berättade han en del om det kanadensiska systemet. Därefter skickade han olika rapporter om beräkningsmetoder, samt manualer över utförliga analyser av en del kemikaliers effekter.

Många resultat erhålls ur nomogram. Ett nomogram ger ett grafiskt samband mellan olika variabler, vilket därmed ger möjlighet utläsa resultat vid varierande omständigheter. Man kan välja en punkt i ett koordinatsystem utifrån bl a molelkylvikt, tidsåtgång, utsläppshastighet, skiktning i luften, spridningskoefficient, smal eller bred flod, ämnets mängd.

Information har erhållits om följande beräkningsmodeller.

- A En datormodell för att beräkna utflödes hastigheter från en skadad tank vid transporter på land. Rapporten innehåller teorin, nomogram och dataprogrammet.
- B Modeller för spridning, infiltration och avdunstning vid kemiskt utsläpp på gräs och ogenomträngliga ytor. Dessutom finns modeller för spridning på is och snö.
- C En datormodell för långsiktiga effekter, månader och år, för spridning och avdunstning hos kemiska utsläpp finns också beskriven. Den behandlar fem differential ekvationer med numerisk integrering och kan köras på en bärbar mikrodator. Modellen är testad på fem olika ämnen och ger goda resultat. De miljöavsnitt som behandlas är luft, jord, vatten, grundvatten, botten-sediment, fisk och suspenderat material.
- D Modell för avdunstningsberäkningar för lättflyktiga kemikalier finns även.

Modellerna betraktar främst floder och sjöar.

Det finns en "Introduktionsmanual" som ger information om egenspridningsteorier på vattenytan, nedsjunkning av en olöslig kemikalie med teorin tagen ur ref (5). Beräkningsresultaten utläses i olika nomogram. Blandning och spädning är behandlade i en annan modell och resultaten erhålls i nomogram.

Manualer, som var och en beskriver en viss kemikalie, har erhållits för 12 olika ämnen. Manualerna är mycket omfattande (cirka 100 sidor vardera) och behandlar

- * fysiska och kemiska data
- * transportvägar
- * spridningsnomogram
- * allmänna förhållanden, nedbrytning, giftighet i vatten, effektstudier
- * giftighet för människan
- * åtgärder
- * tidigare erfarenheter
- * analysmetoder
- * föreningar med andra kemikalier

3.4 EG-ländernas spridningsmodeller

EG-kommissionen har givit en engelsk konsultfirma i uppdrag att analysera modellering av spridning av farliga substanser i havet. En sammanfattande rapport kom 1986, och den beskrivs kort nedan, ref (6).

Rapporten ger teoretiska beräkningsmetoder för olika förlopp. Den ger formlerna för egenspridning på vattenytan, avdunstning, brytande vågors nedblandning av ämnet i vatten, upplösning, vindens strömbildning på vattenytan, droppbildning, sjunkhastighet, upplösning av dropparna medan de sjunker (oftast är lösningstiden mycket längre än sjunktiden). Diffusionekvationer samt avklingning beskrivs. Förenklingar till två-dimensionella förlopp anses nödvändiga, vilket innebär djupintegrerade strömmar, endast horisontell diffusion behandlas och ämnet anses även homogent fördelat i vertikalplanet.

Man kartlägger vilka beräkningssystem som finns i Belgien, Danmark, Holland, England och Frankrike. Systemens möjligheter, begränsningar, databehov, typ av dator, dokumentation, resultatets utseende, typ av strömberäkningar och jämförelse med verkliga förlopp beskrivs.

Rapportens slutsats är att befintliga modeller inom EG inte är helt tillämpliga för att modellera kemikalieutsläpp. Orsakerna är dels att de primärt hade andra syften, såsom oljeutsläpp, dels att det saknas tillräckligt mycket data för verifiering. Modellerna är inte heller anpassade för snabba katastrofinsatser. Man säger att en tillförlitlig kemikaliemodell, att tillämpas både för katastrofinsatser och beredskapsplanering, ännu inte är utvecklad.

3.5 Cirkulationsmodeller för Östersjön, Öresund och Kattegatt/Skagerrak.

De processer som styr strömmarna i havet är främst

- * vind
- * tidvatten
- * horisontella densitetsskillnader
- * horisontella lufttrycksskillnader
- * friktion mot havsbotten
- * styrning orsakad av kustlinjen och bottenkonturer
- * corioliseffektens avlänkande kraft

Med hjälp av numeriska modeller kan man simulera strömmarna i havet genom att utgå från de fysikaliska samband som gäller.

Två-dimensionell, vertikalt homogen modell

Den enklaste modellen är två-dimensionell och betraktar därför endast de horisontella strömmarna. Någon variation med djupet finns inte utan man skapar ett medelvärde av strömmen över alla djup. Det innebär att strömmen i yt-skiktet blir svagare än i verkligheten och strömmen nära botten blir starkare. På större djup är strömmen ofta motriktad strömmen i ytlagret. Något utrymme för skilda riktningar på olika djup finns således inte.

I havet finns kraftiga densitetsökningar inom vissa djupintervall. I t ex Östersjön sker en stor ökning av salthalten på cirka 60 meters djup och på sommaren sker en stor sänkning av temperaturen på cirka 20 meters djup. En uppvärmning av ytskiktet, 0 - 20 meter, äger rum genom den ökade solinstrålningen. Den här typen av gränsytor har ofta helt olika strömförhållanden på ömse sidor. De bildar en typ av övergångs-zoner mellan olika vattenmassor.

Modellberäkningen ger dock olika strömmar i hela havsområdet (horisontella variationer) och finstrukturen hos den beräkningen styr man genom att välja ett grövre eller finare rutnät som läggs över havsområdet. I varje ruta beräknar modellen strömmen för valfria tidsperioder.

Två-dimensionell modell med flera horisontella skikt

Horisontellt fungerar modellen som den ovanstående. På djupet kan beräkningarna delas upp i t ex tio olika vatten-skikt, där modellen ger strömmen i varje lager. Man kan härigenom lägga lagren så att de representerar olika skikt i verkligheten och ansätta vissa temperaturer och salthalter för varje skikt. Skikten kan vara specificerade till bestämda nivåer eller i mera avancerade modeller variera i tjocklek och djup. En ganska god beskrivning av dynamiken kan erhållas på det här sättet.

I båda de beskrivna två-dimensionella modellerna kan man lägga in det aktuella kemikalieutsläppet och låta det förflyttas av de olika horisontella strömmarna. Samtidigt kan man separat ge utsläppet självt en tredje, vertikal djupdimension och även, om man vill, olika tillskott i det horisontella skeendet. Utsläppet betraktas härvid som ett antal delmängder, som lever sitt eget liv beroende på var i vattenmassan de befinner sig. Varje delmängd representerar motsvarande relativa del av utsläppet och kan ha sin speciella sjunkhastighet, storlek, densitet, flytkraft, avdunstning, löslighet, djupläge, antädningsrisk och kan omvandlas till gas/vätska/fast form. De olika egenskaperna kan ändras hela tiden beroende på kända förlopp som kan läggas in i beräkningen.

De ovan nämnda två-dimensionella modellerna finns på SMHI i olika utföranden. I dagsläget finns en operationell modell för beräkning av spridning och transport av olja på vattenytan, som beräknar de horisontella hastigheterna i Östersjöns ytlager (0 - 60 m). Den har ett horisontellt rutnät där varje kvadratisk ruta har sidan 18 km. Modellen täcker hela Östersjön ner till Bornholm. En spridningsberäkning kan läggas in explicit och denna kan matas med valfria förlopp.

Ytterligare en två-dimensionell modell finns som är i det närmaste operationell. Den kan beräkna strömmar i upp till 10 olika djupskikt. Modellen täcker hela Östersjön fram till Danmark. Storleken på rutorna är 10 km. Även här kan ett ämne läggas in med valfria förlopp.

Det finns även modeller (Phoenix) applicerade på begränsade delar av Östersjön där spridningsförloppet läggs in i systemet, så att beräkningarna integreras.

Tre-dimensionell modell

Hela beräkningssystemet är tre-dimensionellt, vilket innebär att alla processer kan simuleras mer realistiskt. Man får ändå ange hur beräkningsnätet i vertikal led skall se ut. Vertikala hastigheter finns med och tillåts variera i tid och rum. Gränsyterna mellan skikten kan endast höjas och sänkas stegvis med steget en beräkningsruta. Om beräkningsnätet har många rutor i vertikal led blir modellen i det närmaste kontinuerlig. Ett nät med mindre rutor

nära kusten kan också användas. I den här modellen kan man antingen lägga koncentrationsutvecklingen utanför eller inne i beräkningarna. Valet av detta får man ta ställning till utifrån de specifika tillämpningarna.

Den tre-dimensionella modellen finns för närvarande applicerad på Öresund och delar av Östersjön. Östersjön och västkusten är påbörjade, men det dröjer 3 - 5 år innan de finns i produktion.

Korrekt simulering av strömmarna på västkusten kräver en tredimensionell modell. I dagsläget finns inga tre-dimensionella modeller, men det finns vissa andra möjligheter. Vi har en modell som ger Baltiska strömmens (bräckvattenflödet ur Östersjön, som bildar kustström eller ytvatten i Kattegatt och Skagerrak) styrka och utbredning. För övrigt finns endast tumregler. Ett samarbete med Norge och Danmark skulle eventuellt kunna ge tillgång till ett modellsystem för västkusten med ström och spridning.

3.6 Spridningsberäkningar

Spridning och fördelning av ett utsläppt ämne sker genom blandning av ämnet genom främst horisontell och vertikal turbulens, d v s ständigt förekommande virvlar av olika storlek och intensitet, samt genom molekyllär blandning för att utjämna koncentrationsskillnader.

Två huvudprinciper för beräkning av spridningsförloppet finns tillgängliga.

I den ena tekniken räknar den matematiska modellen ut strömmen och lägger därefter till en annan modell som kontinuerligt tar in de färdiga strömresultaten och räknar ut spridningsförloppet. Härvid behandlas alla egenskaper hos ämnet separat, såsom t ex avdunstning, volymförändring, densitetsförändring, varierande sedimentationshastigheter och löslighet. Det hela utförs så att man låter ämnet simuleras av ett stort antal partiklar. Varje partikel representerar en bestämd delmängd. Varierande andel av partiklarna kan ges olika beteenden. En viss mängd kan finnas i vattenmassan fritt flytande, en annan del kan ha sedimenterat ner på botten och därifrån lösas ut successivt med varierande intensitet beroende på gränshastigheter för olika ämnen, hastighetsprofiler och dylikt. Förloppen kan göras ganska schablonmässiga men även mycket komplexa. Det finns teoretiskt underlag att hämta i olika vetenskapliga publikationer. Partiklarna sprids med horisontell och vertikal turbulens vilka simuleras med lämplig slumpstatistik. Koncentrationsberäkningen kan frikopplas från cirkulationsmodellens beräkningsnät.

I den andra tekniken finns koncentrationsekvationen med all spridning och blandning inne i det totala beräkningssystemet från början. Alla beräkningar utförs således i ett helt integrerat system.

Koncentrationsekvationen:

$$\delta c / \delta t + v \delta c / \delta x + v \delta c / \delta y + w \delta c / \delta z = \delta / \delta z (K_v \delta c / \delta z) + \delta / \delta y (K_h \delta c / \delta y) + \delta / \delta x (K_h \delta c / \delta x)$$

Vänstra ledet beskriver koncentrationsförändringen och de horisontella och vertikala förflyttningarna. Högra ledet beskriver turbulenta och molekylära blandningsmekanismer baserade på koncentrationsgradienterna.

Exaktheten i resultatet beror på modellens beräkningsnät.

Önskas den här tekniken bör sådana numeriska modeller användas, där spridningsmekanismen redan finns inbyggd i beräkningssystemet. Specifika egenskaper hos ämnet självt, såsom nedsjunkning o dyl läggs på särskilt inne i systemet.

SMHI har utfört många olika typer av spridningsberäkningar enligt båda de ovanstående metoderna. Spridning av radioaktivt material häftat vid partiklar beräknas utanför Forsmark. Långvariga transporter och ackumulationer i hela Östersjön av radioaktivt material från Oskarshamn har beräknats med en cirkulationsmodell och en efteråt pålagd spridningsteknik, ref (7). Exempel på beräkningar av spridning av avloppsvatten i Öresund vid olika strömförhållanden finns i ett arbete SMHI utfört utanför Malmö, ref (8). Beräkningen visar en koncentrationskälla inne i modellen. Även spridning av suspenderat material och tungmetaller har beräknats i Öresund, ref (9), och här lades spridningsförloppet på efteråt och kopplades till rådande strömmar.

Operationell oljeproggnosmodell

Ett helt automatiskt system för prognoser av spridning och transport av olja på vattenytan finns i drift. Systemet gäller för Östersjön och utgår från beräknade strömmar de närmaste dygnet och spridning av olja orsakad av lokal vind och horisontell turbulens. Plottade kartor av läget och utbredningen av oljan finns färdiga efter 5 - 10 minuters datortid, ref (10). Exempel, se nedan.

SKALA 1:10

0.00 10.00 20.00 30.00 SJÖMIL

UTSLAPP: KONTINUERLIGT

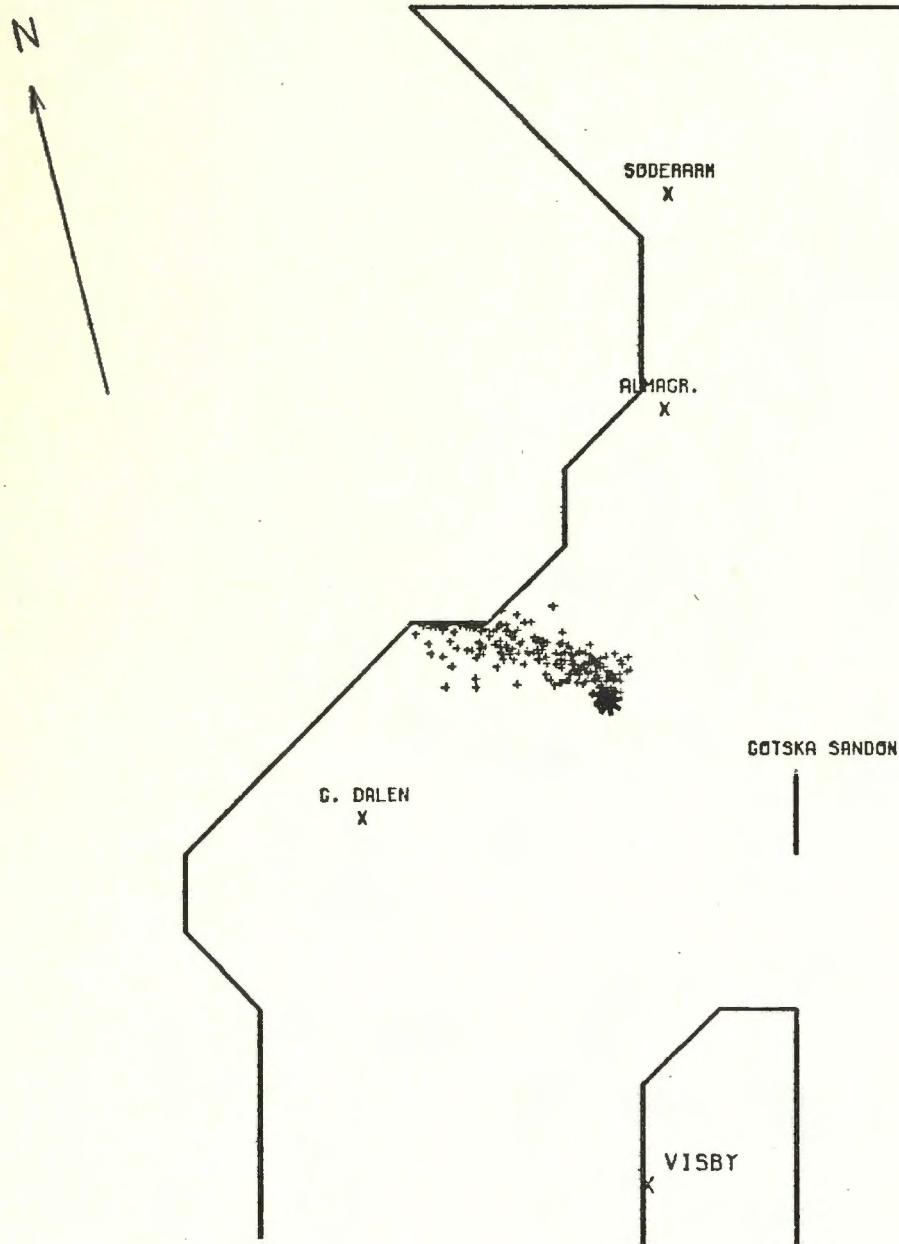
STARTDATUM: 810220 KL: 14.00

TID: T₀ + 36 H

OLJETYP: OLJEKLUMPAR DIAMETER: 1 CM

VINDSTYRKA: 15.0 M/S VINDRIKTNING: 210°

BAKGRUNDSTRÖM: EJ KORRIGERAD



Figur 3. Prognos över oljan från ett kontinuerligt utsläpp.

4 FÖRSLAG TILL SVENSKA MODELLSYSTEM FÖR KEMIKALIE- SPRIDNING

HACS:s grundläggande principer

U.S. Coast Guards syfte med HACS-systemet var primärt att snabbt få information om vilka åtgärder som skulle vidtas vid en olycka. Beträffande utsläpp i vatten handlade problemet därför om att kunna stänga av vattenintag i floder. Således är programmet uppbyggt så att man väljer en bestämd position i floden vid vilken man beräknar koncentrationens variation med tiden.

En utgångspunkt är därför att beräkningen ofta gäller för korta tidsperioder. Därför används inte prognoser för vind och ström utan man använder de värden som gäller just nu och låter dem vara representativa en tid framåt. Man utgår alltså från följande:

- * oförändrad vind, dvs endast en kort prognos, högst 6 - 12 timmar,
- * ström som är konstant i rummet, dvs horisontellt och vertikalt. Detta gäller aldrig i havet, varken i skärgård eller i öppet vatten. Det är endast tillämbart i en flod eller i en sjö (där sätts strömmen till noll),
- * ström som är konstant i tiden, dvs beräkningen kan gälla flera dygn för en flod, men är inte tillämbart i havet.

En annan utgångspunkt i HACS är att många förlopp äger rum under hårt idealiserade förhållanden; lugn vattenyta, konstant djup och allt utsläppt material löses samtidigt. Beräkningen gäller ofta för initialsleden där endast ämnet självt bestämmer förloppet, i det sekundära skeendet sätts inblandningen konstant i vertikalled och tvärs floden.

Några av de grundläggande behoven i Norden

Problemen gäller främst kemikalieutsläpp i havet vid fartygstransporter.

Intressanta havsområden för prognoser är därför öppet hav och olika kustavsnitt/skärgårdsområden. Olika beräkningsmetoder kan tillämpas på de här två huvudtyperna av områden.

Sammankopplingar HACs resurser och nordiska behov

Prognosbehoven kräver olika typer av matematiska strömmodeller, som mer eller mindre sofistikerat, kan simulera ström och spridningsförlopp under ett eller flera dygn framåt i tiden.

Kan de förlopp HACs beskriver överföras till cirkulationsmodeller som simulerar strömningsmönster, turbulens, vertikala hastigheter, inblandningseffektivitet och som varierar i djup- och horisontalled? Det går inte att sätta ihop HACs:s system med cirkulationsmodeller. Vad man däremot kan göra är att använda formler och teoretiska resonemang och tillämpa som delar i ett beräkningssystem. En del av dem kan hävda sig idag, men mycket ny kunskap har också erhållits sedan 1975. De nya HACs-modellerna däremot, från 1977, bör vara till stor nytta i olika prognosberäkningar och bör kunna läggas in i cirkulationsberäkningarna.

Förslag:

- Vissa renodlade beteenden hos kemikalier som ofta fraktas bryts ner i förlopp som kan simuleras. Därefter väljer man ut några ämnen som är av störst prioritet att prognosera vid en eventuell olycka. HACs:s teoretiska tillämpning kan användas.
- En, för prognosändamål i det närmaste operationell, strömmodell för Östersjön används. Den är väldokumenterad och har tillämpats för tidigare spridningsberäkningar. Strömmen beräknas i två-tre olika lager (antal lager är hårt kopplade till datortid).
- Ett dialogprogram skapas där spridningskällor kan läggas in i valfria positioner och djupnivåer. Ämnets beteende beräknas stegvis med framtagna prognoserade strömmar och egna beteenden. Teorin för kemikaliens förlopp i programmet kan förbättras successivt och nya delar läggas till efter hand. Man ska naturligtvis också kunna välja beteendevägar fritt beroende på kemikalietyper.

- Ett antal olika typfall beräknas med spridningsmodellen. Då erhålls en uppfattning om hur stora områden som drabbas vid utsläpp av några vanliga kemikalier, tidsutvecklingen för några förlopp i havet kan simuleras och vädersystem vid olika årstider kan appliceras. Resultaten kan bilda ett uppslagsverk med kartor över typiska situationer och ligga till grund för riskbedömningar och utgöra planeringsunderlag. Innebär t.ex. ett utsläpp av en viss mängd av ett ämne så långtgående konsekvenser att risken för en olycka måste elimineras genom att en annan transportväg får väljas.

- Grafiska presentationer som är lättillgängliga för användaren skapas.

Ju enklare ett system görs, desto mindre risk blir det för problem vid en beräkning. Det som beskrivits ovan innehåller inga möjligheter till felaktiga resultat såsom HACS ibland ger. Lösningssmetoderna är helt olika. Många av HACS:s beräkningar är analytiska och stupar på att man väljer olämplig koncentrationsnivå, olämpliga dimensioner för en flod och dylikt. Programmet har bristande skydd för olämpliga tal (för små, för stora eller negativa). Förslaget ovan bygger på en numerisk strömmmodell som sköter sig helt själv. Spridningsförloppen i steg två ges så att endast bestämda och väldefinierade vägar kan tillåtas följas.

Om 3 - 5 år har SMHI det vi kallar "Den Svenska Havsmodellen" i drift. Denna täcker Östersjön, Öresund, Kattegatt och Skagerrak. Modellen är tre-dimensionell och har koncentrationsberäkningar inne i systemet. Den är relativt datorkrävande, men ligger mycket långt framme vad gäller att utnyttja dagens kunnande inom numeriska modeller.

För västkusten kan i dagsläget främst föreslås att realtidsdata för strömmen från direktvisande strömmätare i Öresund och på Fladen användes vid ett kemikalieutsläpp. Spridningsförlopp kan räknas ut på samma sätt som för Östersjön.

Isläggingsprognoser kan naturligtvis också adderas till ett system för kemikaliespridning.

5 REFERENSER

- (1) Ray Phani P.K. and O'Farrel Peter M., 1977.
Development of additional hazard assessment models. Final report. U.S. Department of transportation, United States Coast Guard.
- (2) Dodge F., Buckingham C., Morrow T., 1982.
Analytical and Experimental Study to Improve Computer Models for Mixing and Dilution of Soluble Hazardous Chemicals.
- (3) Dodge F., Bowles E.B., Mann J. E. and White R. E., 1980.
Experimental Verification and Revision of the Venting Rate Model of the Hazard Assessment Computer System and the Vulnerability Model.
- (4) Thibodeaux L., 1980.
Spill of Soluble, High Density, Immiscible Chemicals on Water.
- (5) Thibodeaux L.J., 1979.
Chemodynamics, Environmental Movement of Chemicals in Air, Water and Soil, John Wiley and Sons, New York.
- (6) Rae I.C. and Unsworth M.D.
Modelling the dispersion of dangerous substances spilt at sea, E.M. Stamps, Scicon Limited, London, G.B.
- (7) Funkquist L. and Gidhagen L., 1984.
A model for pollution studies in the Baltic Sea. RHO 39, SMHI, Norrköping.
- (8) Ambjörn C., 1986.
Utbyggnad vid Malmö Hamn, effekter för Lommabuktens vattenutbyte. Nr 3, Oceanografi, SMHI, Norrköping.
- (9) Ambjörn C. and Wickström K., 1987.
Undersökning av vattenmiljön vid utfyllnaden av Kockums Varvsbassäng. Nr 16, Oceanografi, SMHI, Norrköping.
- (10) Ambjörn C., Luide T., Omstedt A. and Svensson J., 1981.
En operationell oljedriftsmodell för norra Östersjön. RHO 29, SMHI, Norrköping.

**DATORPROGRAM SOM ERHÅLLITS FRÅN U.S. COAST
GUARD**

- * HACS, Hazard Assessment Computer System, 1975, anpassat till VAX-dator.
- * Fem nyare modeller, dock ej anpassade till det operationella systemet.
- * Luftspridningsmodell inom HACS, anpassad till Macintosh persondator.
- * Demonstrationsprogram för luftspridningsberäkning, Macintosh, ej komplett.

Utflöde ur ett hål i en tank, modell A

Modell A i systemet behandlar förloppet vid hål i en tank. Modellen beräknar utflödes hastigheten och utgår från grundläggande termodynamik och analytiska lösningar av ekvationerna. Modellen utgår från att hålets läge är oförändrat i förhållande till vattenytan. Den beräknar både utflödet vid adiabatiska förhållanden (välisolerad tank) och för isothermiska förhållanden (ej välisolerad), mellan dessa båda ytterligheter befinner man sig alltid. Det antas att tanken innehåller ren gas och ren vätska. Om hålet är under vätskenivån i tanken beräknas utflödes hastigheten hos vätskor, annars gasens utflöde. Successivt beräknas även den ändrade termodynamiken i tanken och totala massan som kommit ut. Resultatet vid valfri tidpunkt ges av total mängd vätska som kommit ut, tid för tömning, medelflödes hastighet.

Följande indata krävs: temperatur och tryck i tanken, volym, initial massa, egenskaper hos kemikalien, hålets storlek och läge. Exempel: Tankvolymen är 1 250 m³ och hålet 65 cm, innehållet är flytande naturgas. Efter cirka 2 dygn finns endast gas i tanken.

Modell A ska ej användas om hålet ligger under vattennivån eller om det finns mer än ett hål. Begränsningar finns även för tankens form. Modellen gäller för olika typer av vätskor.

Utspridning av en vätska på vattenytan, modell T

Modell T beräknar utspridningens storlek och medeltjockleken hos ytfilmen vid valfri tidpunkt efter ett utsläpp med en bestämd mängd. Modellen gäller endast ämnen som har högre viskositet än vatten (tjockare) och lägre densitet. Beräkningarna gäller i ett initialskede och innehåller endast olika utspridande - bromsande krafter, egenspridning. Tre olika faser betraktas därvid; gravitation - tröghet, gravitation - viskösa krafter och viskösa krafter - ytspänning. Några yttre krafter är ej av intresse eftersom endast ämnets eget spridningsförlopp beräknas. Hänsyn tas ej till värmetransporter eller blandning med vatten. Beräkningen utgår från momentant utsläpp, allt kommer alltså ut under mycket kort tid och utsläppet kan ske på eller under vattenytan. Egenskaperna och mängden hos ämnet är oförändrade under hela beräkningen. Såväl en-dimensionell som radiell spridning kan beräknas.

Följande indata krävs; mängd och egenskaper hos ämnet.

I ett exempel beräknas spridningen för 5 000 ton tung tjockolja i en 500 m bred kanal. Första fasen där gravitation - tröghet råder, varar i 20 minuter, andra fasen med gravitation - viskositet är slut efter 17 timmar. Efter cirka 3 timmar täcker oljan cirka 2 km av kanalen.

Slutsatser: Resultaten från beräkningarna är goda vid jämförelse med laboratoriemätningar. Den första spridningsfasens hastighet är ganska okänslig för mängden av ämnet. Modellens största begränsning är att den förutsätter en lugn vattenyta, vilket är orealistiskt vid oljeutsläpp till havs, där vind, tidvatten och vågor är viktiga. Man har därför diskuterat att endast betrakta spridningsförloppet i utsläppets centrum och addera strömmen hit. Detta rekommenderades dock inte eftersom vind och tidvatten har en spridningseffekt som även deformerar fläckens form. Efter en viss maximitid har fläcken slutat spridas ut.

Avdunstning, blandning och spädning, modell K och P

Vid utsläpp under 3 m djup av en kemikalie som kokar, dvs har kokpunkt lägre än omgivande temperaturer beräknar modell K hur stor del som går till atmosfären och hur stor del som stannar i vattnet. Den beräknar även det kritiska djup under vilket kemikalien inte kan koka som en följd av det hydrostatiska trycket. Efter den här beräkningen, eller omedelbart om utsläppsdjupet är mindre än 3 m, går beräkningarna till modell P. Modell P är den modell som räknar ut blandning i vattnet för kemikalier som inte kokar eller för den del som blir över från modell K. Ämnet behandlas som en passiv vätska och går i lösning till 100 procent. Utsläppet får vara kontinuerligt eller momentant. Blandning sker genom molekyllär och turbulent diffusion. Om utsläppet ej sker nära ytan eller på ytan utan ganska djupt kan modell P ge felaktiga resultat nära utsläppspunkten. Modellen är inte användbar i öppet vatten. Om utsläppet av kemikalien sker under det kritiska djupet, ämnet är tyngre än vattnet och inte är speciellt lösligt, 5 - 10 % löslighet, så är det bäst att använda modell X istället för modell P. För beskrivningen av modell X, se längre fram i texten.

Modell P tar inte hänsyn till sedimentation, värmeöverföring eller kemiska förändringar. Ämnets massa är oförändrad. Geometrin av området måste anges, ström- och tidvattenhastigheter samt mängd och utsläppsplats.

Tre olika beräkningssystem finns beroende på typen av område; blandning i floder utan tidvatten, floder med tidvatten och flodmynningar.

Flod utan tidvatten, initialt skede.

Det är en tredimensionell beräkning, koncentrationen varierar på bredden, längden och med djupet. Avklingning hos ämnet finns med. Beräkningarna tar hänsyn till om floden är bred eller smal.

- a Momentant utsläpp på ytan med transport och utspädning i flodens längdriktning.
- b Kontinuerligt utsläpp på ytan med transport men ingen blandning i flodens längdriktning.

Flod utan tidvatten, efter initialskeket

Endast medelkoncentration på bredden och djupet beräknas vilket betyder en-dimensionell beräkning i flodens längdriktning. Avklingningen finns även med i beräkningarna.

- a Momentant utsläpp.
- b Kontinuerligt utsläpp. Slutligen erhålls "steady state", dvs en i tiden konstant koncentration fördelning i floden.

Flod med tidvatten och flodmynningar med litet saltvattenintrång efter initialskeket

Eftersom en viss tid redan passerat betraktas blandningen som fullständig tvärs floden och på djupet (en-dimensionell beräkning i flodens längdriktning). Initialskeket är över.

- a Momentant utsläpp med konstant tvärsnittsyta, konstant blandning och utspädning samt sötvattentillflöde.
- b Kontinuerligt utsläpp med konstant sötvattentillflöde.
- c Kontinuerligt utsläpp med konstant tvärsnittsyta och sötvattentillflöde.

Beräkningarna gäller främst i en flodmynning som är ganska rak, fri från öar och ej består av flera flödeskanaler. Beroende på förhållandet mellan tidvattnets hastighet och den pålagda strömmen väljer programmet olika blandningskoefficienter och avklingningshastigheter.

Flodmynningar med saltvattenintrång

I den här beräkningen finns både tidvatten och densitetsdrivet sötvattenflöde med. Varje flodmynning har ett unikt utseende och därför måste en del variabler knytas till den, såsom skiktning, längden och volymen av saltvattenintrånget och strömhastighet vid mynningen. En övergripande beräkning kan göras med kännedom om tidvattnet och medelvärde av tvärsnittsytan under en tidvattencykel.

Avdunstningshastighet, modell_I

Modell I beräknar avdunstningshastighet för ämnen som inte är lösbara i vattnet. De är också tyngre än vatten och kokar, deras kokpunkt ligger lägre än aktuell vattentemperatur. Den tid det tar för totala mängden att avdunsta beräknas. Utsläppet betraktas som momentant. Det kritiska djupet under vilket kokning ej kan ske, pga det hydrostatiska trycket, beräknas. Ämnet når normalt aldrig så långt ner. Modellen antar att vätskan bryts ned i små droppar som oberoende av varandra kokar medan de sjunker, därför är inte tiden för total avdunstning kopplad till vätskans mängd. Medan dropparna sjunker tar de värme från det omgivande vattnet, ämnet dunstar och droppstorleken minskar. Sjunkhastigheten ändras. Detta tar modellen hänsyn till. Beräkningarna utgår från att utsläppet sker vid eller över vattenytan, alternativt på ett djup som är avsevärt mindre än det kritiska djupet.

Följande indata krävs; vätskans densitet, ytspänning, kokpunkt, latent värme vid avdunstning, vattnets densitet, specifikt värme, viskositet och temperatur.

Ett kontinuerligt utsläpp bedöms ge samma avdunstningshastighet som utsläppets hastighet, ämnet försvinner omedelbart till atmosfären. Storleken av hela avdunstningsprocessen är troligen mindre än 1 minut.

Kemikalier som reagerar med vattnet och ger andra ämnen, modell_O

Modell O indikerar att kemikalien reagerar med vattnet. Modellen utför inga beräkningar. Om reaktionen är snabb hänvisas till manualen där reaktionen är beskriven för alla de 900 ämnena. Exempel se nedan.

Ämne	Produkt	Spilletts viktsfraktion	Kommentar
Acetyl bromid	Ättiksyra Bromväte Bromvätesyra	,49 något <,66	reagerar våldsamt (violently)
Acetyl klorid	Ättiksyra Saltsyra Klorväte	,76 <,46 något	reagerar kraftigt (vigorously)
Allyl klorformat o s v	Allylalkohol Saltsyra Koldioxid	,48 ,30 ,37	långsam reaktion

Om reaktionen är långsam kan någon av övriga modeller eventuellt användas.

Blandning och spädning av en i vatten löslig kemikalie med högt ångtryck, modell R

Modell R beräknar ångbildningshastigheten, samt ytan som ångan bildas över och varaktigheten. Modellen är gemensam med tidigare modeller P och K så tillvida att först får hela mängden av det utsläppta ämnet blandas ned vilket sker omedelbart. Utsläppet är momentant. Nu kan koncentrationen bestämmas och därigenom även ångbildningshastigheten vid vattenytan. Kemikalien antar omedelbart samma temperatur som vattnet. Modellen kan endast användas för sjöar och floder utan tidvatten.

Följande indata krävs; mängden utsläppt ämne, mättnadsångtrycket vid vattnets temperatur, flodens karakteristika och medelströmmens hastighet.

Beräkningarna låter ämnet spridas med varierande effektivitet i olika riktningar eftersom blandningsintensiteten styrs av flodens dimensioner. De turbulenta diffusionskoefficienterna beräknas för varje tillfälle. Fläcken förflyttas nedströms med angiven flödeshastighet i floden. En gräns, t ex 5 - 10 procent för ämnets giftighet anges och denna beskriver ytterkanten för fläckens utbredning. Spridningen gör att fläckens storlek ökar i början för att sedan minska pga utspädning och avdunstning. Den totala ångmängden och tidslängden när ämnets ånga inte längre betraktas som giftig beräknas.

Exempel: En flod med strömhastigheten 1.5 m/s drabbas av 10^6 kg dietylamín (CH_3CH_2)₂ NH. Floden är 31 meter bred och 10 meter djup. Ämnet sprids snabbt ut tvärs floden och även i djup- och längdled. Efter 20 minuter har koncentrationsnivån blivit lägre än gränsvärdet överallt och cirka 0.07 procent av massan har övergått i ånga. Resten finns i vattenmassan. Trots att avdunstningshastigheten är hög begränsas ångbildningen eftersom ämnet så snabbt blandas ner i vattnet. Möjligheten till "vapor flash" är inte beaktad. Avdunstningen ägde rum över 1.8 km av flodens längd.

Spridning av ett olösligt ämne, som är lättare än vatten, inte kokar och är flyktigt, modell V

Modell V följer efter modell T och innehåller dessutom avdunstning. Modell T är beskriven ovan. Beräkningen kan således beskriva ett oljeutsläpp där oljan breder ut sig på ytan samtidigt som avdunstning äger rum.

Modellen räknar fram egenspridningen av ett ämne på vattenytan och ämnet blandas inte med vattnet. Spridning kan ske både radiellt och i en enda riktning. Modellen utgår från momentant utsläpp och en lugn vattenyta. Storleken av den flytande poolen som bestäms av egenspridning och avdunstning beräknas som en funktion av tiden, dessutom räknas den tidslängd ut som behövs för att hela mängden av ämnet ska avdunsta.

Ett olösligt ämne sjunker till botten och sprids därefter utefter botten, modell X

Modell X är mycket kortfattat beskriven i manualen. I litteraturen med nyutvecklade modeller som inte är i prognosdrift, finns en modell beskriven som tycks vara identisk med modell X, ref (1). Nedan följer därför först beskrivningen ur manualen, därefter den utförliga utvecklingen i artikeln.

HACS-Manualen: Kemikalier som är olösliga eller svagt lösliga i vatten, är tyngre än vatten och har kokpunkt som ligger över det omgivande vattnets temperatur behandlas. Modellen tar även hand om de ämnen från modell K som kokade, men som under en kritisk nivå med högt hydrostatiskt tryck hindrades från att koka. Modellen beskriver hur ämnet sjunker, sprids och sedan löses upp på botten (om det är svagt lösligt) och därefter hur den lösta delen sprids. Beräkningarna förutsätter att utsläppet sker momentant i mitten av en flod utan tidvatten.

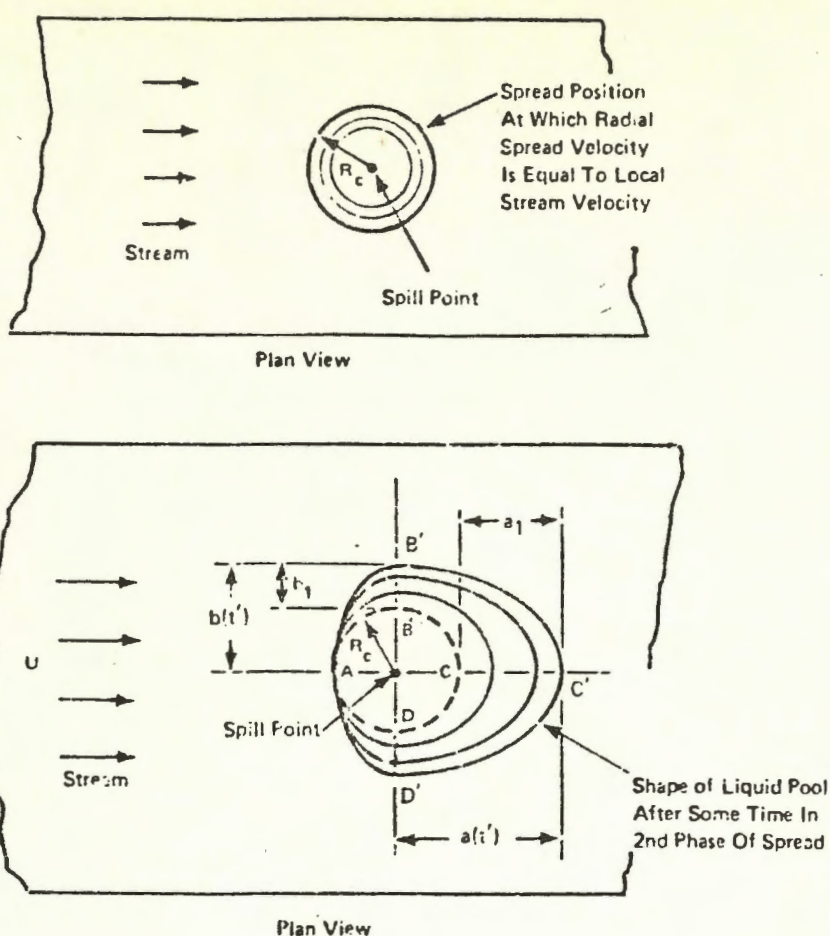
Nyutvecklad modell: Kapitel 1 i ref (1) heter "En kemikalie som är olöslig och tyngre än vattnet sjunker och sprids på botten". Modellen räknar ut avståndet mellan utsläppsläget och punkten där ämnet når botten. Spridningstiden medan ämnet sjunker, formen och ytan av poolen på havsbotten beräknas. Problemet är behandlat därför att många städer ligger invid floder och de använder vattnet till dricksvatten. Sämsta läget erhålls när ämnet är svårlösligt och läcker ut i vattnet under lång tid.

När ämnet kommer i vattnet bryts det upp i olika stora droppar. Dessa sjunker med olika hastigheter och förflyttas samtidigt nedströms. De minsta dropparna kanske inte sedimenterar utan finns kvar i suspension i vattnet pga turbulensen och partikelns form och densitet. Partiklar med diameter under 1 mm stannar ofta i suspension. Läget för sedimentationen beror på storleken hos dropparna, strömhastighet och turbulens. Ämnet tillåts inte gå i lösning under sedimentationsförloppet. När vätskan når botten kan dropparna åter förena sig och bilda en flytande pool på flodbotten.

Spridningen på botten sker i två steg, först verkar endast gravitationen radiellt, som bromsas av tröghetskrafter tills ämnet självt når jämvikt. När den radiella gravitationsspridningen är lika stor som strömhastigheten vid fläckens medeltjocklek nås ett kritiskt skede och strömmen övertar spridningen av fläcken.

Därefter, i steg två, verkar den tangentiella friktionshastigheten från vattenflödet, vilken gör att nederdelen av fläcken dras nedströms medan den övre delen är stationär pga friktion mot botten. Strömmens hastighetsprofil vid botten räknas ut.

Medan ämnet sprids ut är massan oförändrad. Spridningen upphör slutligen när tjockleken är lika stor som ojämnheter hos botten (cm - dm) och alla håligheter är utfyllda. Kännedom om bottenbeskaffenheten är alltså nödvändig. Beräkningarna tar inte hänsyn till att ämnet kan nå flodens sidor.

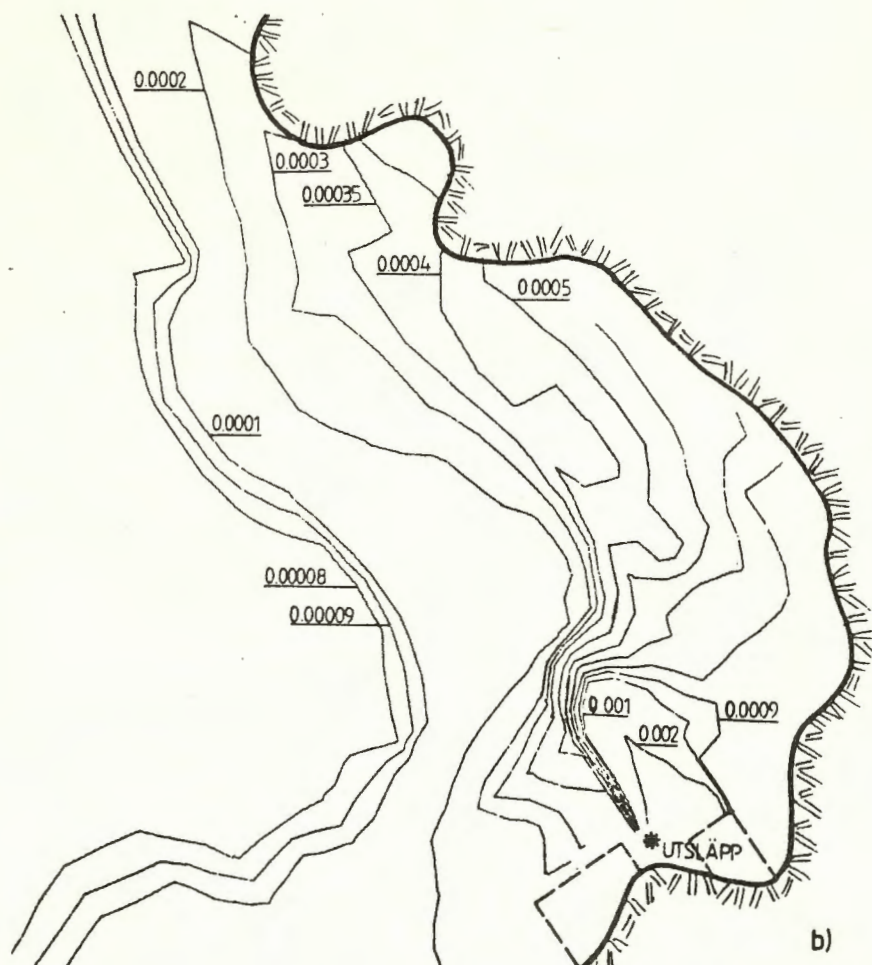
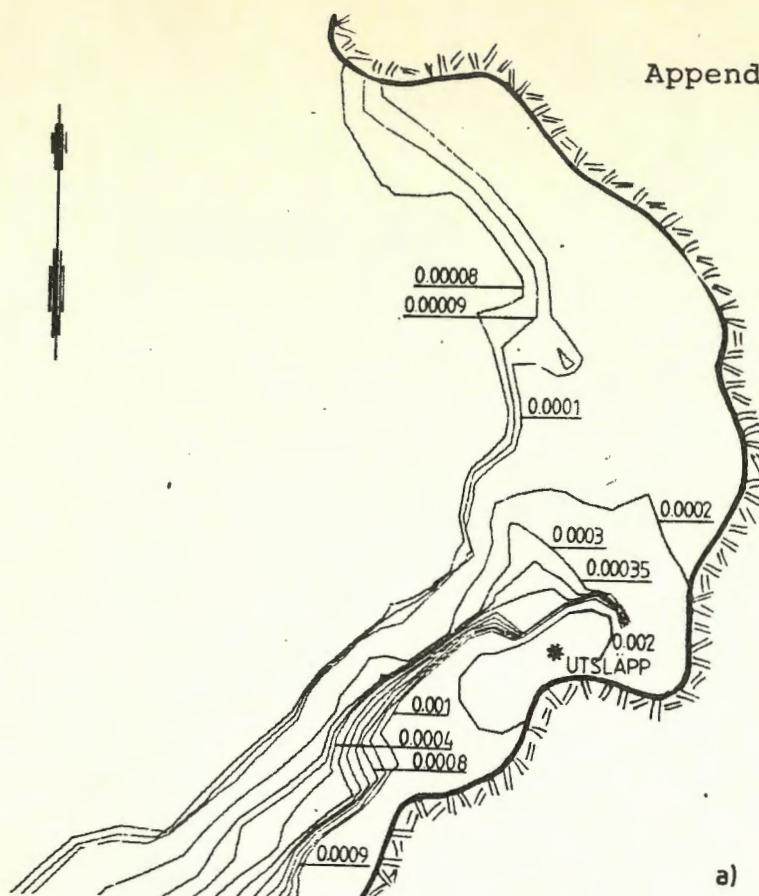


Figur 4 a) Spridning med gravitation - tröghet.
b) Spridning med strömtransport.

Exempel: 30 m^3 kloroform kommer ut. Flodbredd = 150 m, djup = 8 meter, strömhastighet = 1 m/s. Flödet är mycket turbulent. Tjockleken vid det kritiska skedet är 8 cm, bottenojämnheten sätts till 6 cm, kritisk tid blir då 9 sekunder och kritisk yta 400 m^2 . Strömhastighet vid fläckens översida beräknas till 0.6 m/s. Slutlig spridning uppnås efter 13 sekunder med longitudinell utbredning 24 meter och tvärs floden 26 meter.

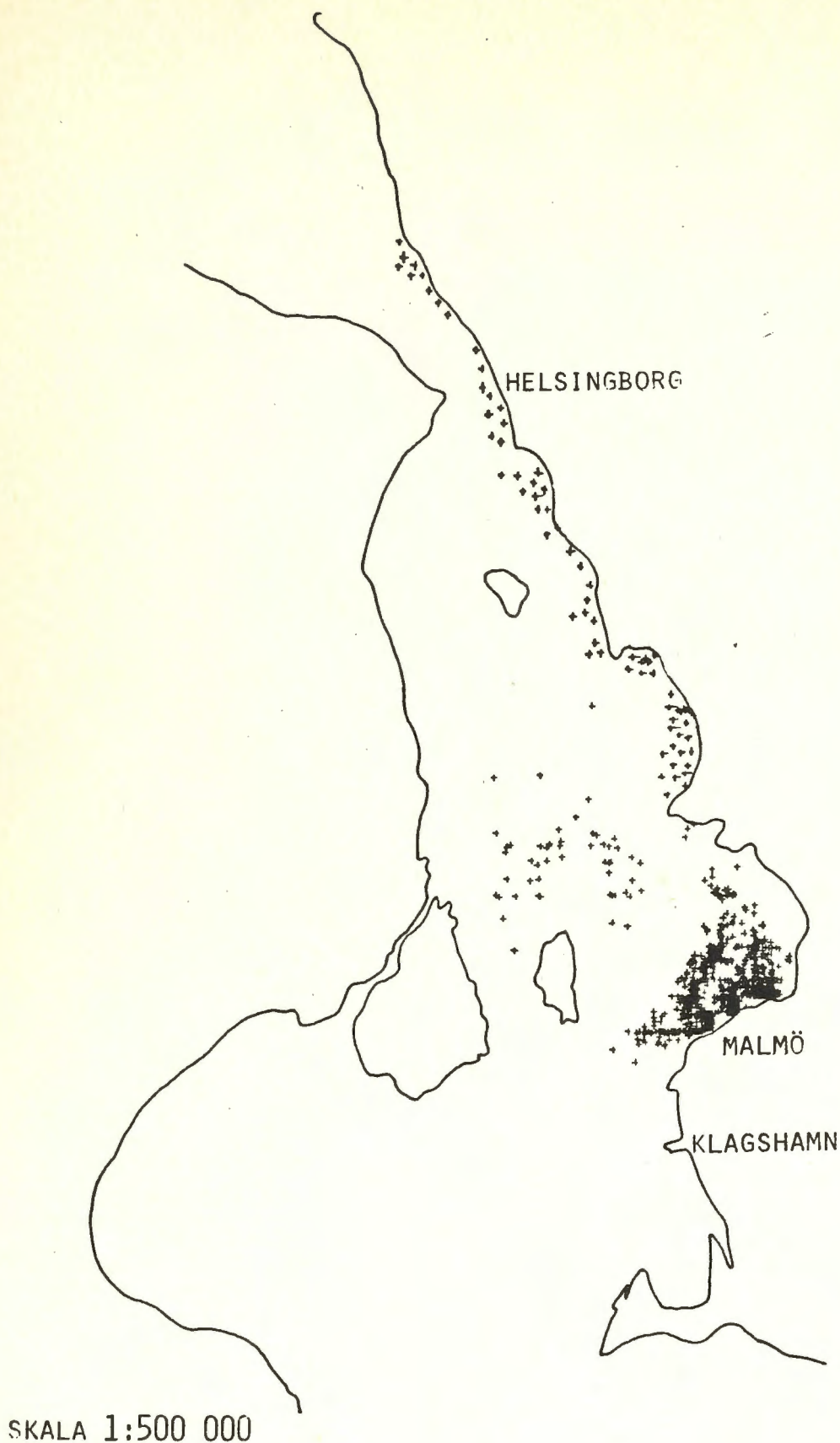
Modellen kan utgöra startläget för beräkning av utlösningshastighet för kemikalier som långsamt löses på botten.

Osäkerheter i modellen gäller huruvida all vätska bildar droppar omedelbart samt svårigheter att ange bottenbeskaffenheten.



Figur 30

Relativ koncentrationsfördelning av avlopps-
utsläppet vid svag sydgående ström, ytskiktet
a) nuvarande djupförhållanden, b) utfyllt
vid Malmö hamn och Spillepeng, ur ref (8).



Bottnar som främst berörts av sedimentation av lättare material under perioden 7 mars - 24 mars 1984, ur Kontrollundersökningar för muddring och tippning i Öresund.

